

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALFENAS

MARIANA DE PAULA GOMES

**ABORDAGEM BAYESIANA NA MODELAGEM DA CURVA DE CRESCIMENTO DO
FUNGO *Botrytis cinerea***

ALFENAS/MG

2024

MARIANA DE PAULA GOMES

**ABORDAGEM BAYESIANA NA MODELAGEM DA CURVA DE CRESCIMENTO DO
FUNGO *Botrytis cinerea***

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Estatística Aplicada e Biometria da Universidade Federal de Alfenas - MG, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre. Área de concentração: Estatística Aplicada e Biometria.
Orientador: Prof. Dr. Luiz Alberto Beijo.

ALFENAS/MG

2024

Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal de Alfenas
Biblioteca Central

Gomes, Mariana de Paula.

Abordagem Bayesiana na Modelagem da Curva de Crescimento do Fungo Botrytis cinerea. / Mariana de Paula Gomes. - Alfenas, MG, 2024.
96 f. : il. -

Orientador(a): Luiz Alberto Beijo.

Dissertação (Mestrado em Estatística Aplicada e Biometria) -
Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, MG, 2024.
Bibliografia.

1. Regressão Não Linear. 2. Resíduos Autocorrelacionados. 3. Óleos Essenciais. 4. Modelo Logístico. I. Beijo, Luiz Alberto, orient. II. Título.

Mariana de Paula Gomes

ABORDAGEM BAYESIANA NA MODELAGEM DA CURVA DE CRESCIMENTO DO FUNGO *Botrytis cinerea*

A Banca examinadora abaixo-assinada aprova a Dissertação apresentada como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Estatística Aplicada e Biometria pela Universidade Federal de Alfenas. Área de concentração: Estatística Aplicada e Biometria.

Aprovada em: 24 de maio de 2024.

Prof. Dr. Luiz Alberto Beijo

Instituição: Universidade Federal de Alfenas - UNIFAL-MG

Profa. Dra. Taciana Villela Savian

Instituição: Universidade de São Paulo - Esalq

Prof. Dr. Denismar Alves Nogueira

Instituição: Universidade Federal de Alfenas - UNIFAL-MG



Documento assinado eletronicamente por **Luiz Alberto Beijo, Professor do Magistério Superior**, em 24/05/2024, às 11:08, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.unifal-mg.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1256206** e o código CRC **F769E1B6**.

AGRADECIMENTOS

A conclusão desta dissertação só foi possível graças ao apoio e à colaboração de diversas pessoas e instituições, a quem expresso minha sincera gratidão.

Agradeço em primeiro lugar a mim mesma, por ter encarado esse grande desafio de realizar um mestrado em uma área diferente de minha formação, em uma cidade desconhecida e sozinha. Dedico este trabalho aos meus longos anos de dedicação escolar e acadêmica, é bom ver florescer os campos que tanto plantei.

Agradeço ao meu orientador, Luiz Alberto Beijo, pelo suporte, paciência e orientação ao longo de toda a pesquisa. Agradeço também aos professores e professoras do Programa de Pós-Graduação em Estatística Aplicada e Biometria por todo o conhecimento transmitido ao longo da minha trajetória acadêmica, aos colegas de curso, pela troca de ideias e pelo apoio mútuo, à secretaria pelo suporte cotidiano e simpatia.

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

À agência de fomento à pesquisa FAPEMIG, agradeço pelo apoio financeiro e pelas oportunidades de desenvolvimento científico proporcionadas, que foram essenciais para a realização desta pesquisa.

Aos meus pais e meus irmãos, por seu amor, paciência e incentivo incondicional, que me sustentaram e inspiraram desde o início deste percurso. Sem seu apoio, este sonho não teria se tornado realidade.

À ciência brasileira, ao seu reconhecimento e evolução ética e consciente. Que sua luz nos guie na escuridão do negacionismo.

Por fim, agradeço a todas e todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a concretização desta dissertação, oferecendo apoio, orientação e amizade. A todos, minha mais sincera gratidão.

RESUMO

O estudo da curva de crescimento de fungos fitopatogênicos permite compreender as etapas de seu crescimento e os fatores que o influenciam. Geralmente, em pesquisas com tal finalidade, os dados são analisados ao longo do tempo, o que pode gerar dependência nos resíduos e comprometer o processo de inferência quando ignorada. Como forma de considerar a autocorrelação residual na modelagem foi incorporada estrutura AR(p) para os erros do modelo. A abordagem bayesiana tem sido eficiente no estudo de curvas de crescimento e permite algumas vantagens como a facilidade de modelagens mais complexas e a capacidade de análise de amostras relativamente pequenas. Além disso, o fato de considerar os parâmetros como aleatórios permite realizar interpretações diretas sobre os mesmos e obter maior clareza das informações extraídas. Assim, o presente estudo teve como objetivo avaliar a performance da abordagem bayesiana quanto à: modelagem da curva de crescimento do fungo *Botrytis cinerea* sob efeito de óleos essenciais, por meio do ajuste do modelo logístico, considerando autocorrelação dos erros; e aos impactos de tamanhos amostrais reduzidos na precisão da análise e no processo de inferência. Os dados de crescimento micelial radial sob efeito de óleos essenciais foram obtidos em Vismara *et al.* (2019) *, em que as medidas das nove repetições foram coletadas ao longo de dez dias. Para o estudo do crescimento micelial radial foi ajustado o modelo de regressão não linear logístico. Diante dos resultados obtidos, pode-se concluir que a abordagem bayesiana mostrou-se eficiente na modelagem da curva de crescimento do fungo *Botrytis cinerea*, considerando estrutura AR(p) para os erros, além de produzir estimativas levemente mais precisas tanto com priori informativa quanto não informativa. A abordagem também possibilitou a análise com tamanhos amostrais reduzidos sem alterar as estimativas dos parâmetros de forma significativa, considerando sobreposição dos intervalos HPD de 95% de credibilidade apesar da diminuição da precisão das estimativas. A adoção da abordagem bayesiana foi essencial para identificar o efeito do tratamento Patchouli em relação ao crescimento máximo, representado pelo parâmetro β_1 do modelo ajustado, além do efeito do tratamento Guaçatonga na redução da taxa de crescimento, representado pelo parâmetro β_3 , o que não foi possível identificar no estudo de origem dos dados. Por fim, pode-se concluir que todos os óleos essenciais avaliados apresentaram efeito no controle do fungo *Botrytis cinerea*, sendo Patchouli e Melaleuca os mais efetivos.

Palavras-chave: Regressão Não Linear; Resíduos Autocorrelacionados; Óleos Essenciais.

*VISMARA, d. S. L. et al. Óleos essenciais na indução de resistência em morangos ao mofo cinzento, à *Botrytis cinerea* in vitro e ação toxicológica. 2019.

ABSTRACT

The study of the growth curve of phytopathogenic fungi allows us to understand the stages of their growth and the factors that influence it. Generally, in such specific research, the data are analyzed over time, which can generate autocorrelated residues and compromise the inference process. As a way to consider residual autocorrelation in modeling, it was incorporated AR(p) structure for the model errors. The bayesian approach has been efficient in the study of growth curves and allows some advantages such as the ease at modeling of more complexity structures and the ability to analyze relatively small samples. Furthermore, the fact to consider the parameters as random variables allows direct interpretations to be made on them and obtain greater clarity in extracting information. Therefore, the present study aimed to evaluate the performance of the bayesian approach regarding: modeling the growth curve of the fungus *Botrytis cinerea* under effect of essential oils, through adjustment of the logistic model, considering autocorrelation of errors; and the impacts of reduced sample sizes on the analysis accuracy and inference process as well. Data on radial mycelial growth under the influence of essential oils were found in Vismara *et al.* (2019)[†], in which measurements from the nine replications were collected over ten days. To study radial mycelial growth, the nonlinear logistic regression model was adjusted. Given the results obtained, it can be concluded that the bayesian approach proved to be efficient in modeling the growth curve of the fungus *Botrytis cinerea*, considering AR(p) structure for errors, in addition to producing more accurate estimates with both informative and uninformative priors. The approach also enabled analysis with reduced sample sizes without changing interval estimates significantly, considering overlapping HPD intervals of 95% credibility increase despite the decrease in the precision of the estimates. Adopting the bayesian approach was essential to identify the effect of Patchouli treatment in relation to maximum growth, represented by β_1 parameter of the adjusted model, in addition to the effect of the Guaçatonga in reducing the growth rate, represented by the β_3 parameter, which was not possible to identify on the study that originated the sample. Ultimately, the study concluded that all essential oils evaluated were effective on the control of the fungus *Botrytis cinerea*, with Patchouli and Melaleuca being the greatest ones.

Keywords: Nonlinear Regression; Autocorrelated Residues, Essential Oils.

[†]VISMARA, d. S. L. et al. Óleos essenciais na indução de resistência em morangos ao mofo cinzento, à *Botrytis cinerea* in vitro e ação toxicológica. 2019.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Escala do Fator de Bayes segundo Jeffreys (1961)	26
Tabela 2	– Informações das condições experimentais de cada fonte de informação encontrada.	30
Tabela 3	– Influência de meios de cultura sobre o crescimento micelial (mm) e taxa de crescimento (mm/h) de <i>B. cinerea</i>	31
Tabela 4	– Estruturas autorregressivas (AR) para os erros e_{ij}	34
Tabela 5	– Hipóteses do Fator de Bayes para avaliar a significância do parâmetro ϕ_p	34
Tabela 6	– Estimativas dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 obtidas das fontes de informação correspondentes.	38
Tabela 7	– Hiperparâmetros da distribuição Lognormal correspondente a cada fonte de informação a priori dos tratamentos Testemunha e Patchouli.	39
Tabela 8	– Representação dos quantis 2,5 e 97,5% das distribuições a priori informativas comparados aos intervalos HPD 95% e quantis a posteriori gerados pelo ajuste das fontes de informação.	40
Tabela 9	– <i>Valor-p</i> resultante do teste de Box-Pierce dos resíduos dos ajustes do modelo logístico sem estrutura AR ($e_{ij} = u_{ij}$) para cada tratamento.	44
Tabela 10	– Resultados dos critérios de convergência dos parâmetros autorregressivos das correspondentes estruturas de erros dos ajustes do modelo logístico de cada tratamento.	46
Tabela 11	– Resultados dos testes de significância dos parâmetros ϕ_p por Fator de Bayes em relação à hipótese H_1	47
Tabela 12	– Métricas de comparação de modelos com diferentes estruturas AR(p).	48
Tabela 13	– <i>Valor-p</i> resultante do teste de Box-Pierce dos resíduos dos ajustes do modelo logístico com estrutura AR(p) para cada tratamento.	49
Tabela 14	– Estrutura AR(p) dos erros selecionada para o ajuste do modelo logístico de cada tratamento.	50
Tabela 15	– Estimativa (média a posteriori), intervalo HPD de 95% e resultados dos critérios de convergência dos parâmetros β_1 (mm), β_2 (dia), β_3 (mm/dia), τ e ϕ_p do modelo logístico ajustado de cada tratamento e métricas R_B^2 e EQM, considerando priori não informativa.	54

Tabela 16 – Valores dos hiperparâmetros para a distribuição a priori informativa selecionada para os tratamentos Testemunha e Patchouli.	55
Tabela 17 – Estimativa (média a posteriori), intervalo HPD de 95% e critérios de convergência dos parâmetros β_1 (mm), β_2 (dia) e β_3 (mm/dia) do modelo logístico com estrutura AR ajustado e das métricas R_B^2 e EQM dos tratamentos Testemunha e Patchouli, considerando priori informativa.	56
Tabela 18 – Estimativa (média a posteriori), coeficiente de variação (CV%) e amplitude HPD de 95% dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 em relação aos tamanhos n_r das reamostras dos tratamentos Guaçatonga e Melaleuca com priori não informativa.	61
Tabela 19 – Média a posteriori como estimativa, coeficiente de variação percentual (CV), amplitude HPD de 95% dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 e diferença de amplitudes (DA) em relação aos tamanhos n_r das reamostras do tratamento Patchouli comparando priori informativa e não informativa.	67
Tabela 20 – Média a posteriori, coeficiente de variação (CV%) e amplitude HPD de 95% dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 em relação aos tamanhos n_r das reamostras do tratamento Testemunha comparando priori informativa e não informativa.	68
Tabela 21 – Comparação entre resultados de estimação obtidos no atual estudo e os obtidos por Vismara (2019). As estimativas bayesiana e frequentista são dadas pela média a posteriori e média e os intervalos HPD de 95% de credibilidade e intervalo de confiança de 95%, respectivamente.	71
Tabela 22 – Limites inferior (LI), superior (LS) e amplitude HPD de 95% de credibilidade dos parâmetros β . DIC, Erro quadrático médio, viés médio relativo e coeficiente de determinação bayesiano.	79
Tabela 23 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori não informativa geradas pelas reamostragens do tratamento Melaleuca.	81
Tabela 25 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori não informativa geradas pelas reamostragens do tratamento Guaçatonga.	82
Tabela 26 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori não informativa geradas pelas reamostragens do tratamento Patchouli.	83

Tabela 27 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori não informativa geradas pelas reamostrages do tratamento Testemunha.	84
Tabela 28 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori informativa geradas pelas reamostrages do tratamento Patchouli.	85
Tabela 29 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori informativa geradas pelas reamostrages do tratamento Testemunha.	86
Tabela 30 – Resultados a posteriori com amostra total, Limite inferior (LI), superior (LS) e amplitude do intervalo HPD de 95% de credibilidade de cada parâmetro β dos ajustes com diferentes prioris informativas do tratamento Testemunha. .	98
Tabela 31 – Resultados a posteriori, Limite inferior (LI), superior (LS) e amplitude HPD de 95% de credibilidade de cada parâmetro β dos ajustes com diferentes prioris informativas do tratamento Patchouli.	99

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Representação da curva logística de crescimento.	20
Figura 2 –	Fluxograma da análise da autocorrelação até a seleção da estrutura AR(p). . .	36
Figura 3 –	Gráficos FACP das lags médias referente aos ajustes do modelo logístico sem estrutura AR ($e_{ij} = u_{ij}$) para cada tratamento.	45
Figura 4 –	Gráficos FAC da lags médias referente aos ajustes do modelo logístico com incorporação de estrutura AR de cada tratamento.	49
Figura 5 –	Gráficos de ajuste do modelo logístico com estrutura AR(p) de cada tratamento.	50
Figura 6 –	Curvas resultantes dos ajustes do modelo logístico com estrutura AR para os erros e priori não informativa de todos os tratamentos.	53
Figura 7 –	Estimativas das métricas EQM (a), R_B^2 (c) e VMRA (e) e dos parâmetros β_1 (b), β_2 (d) e β_3 (f) do tratamento Guaçatonga em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa.	58
Figura 8 –	Estimativas das métricas EQM (a), R_B^2 (c) e VMA (e) e dos parâmetros β_1 (b), β_2 (d) e β_3 (f) do tratamento Melaleuca em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa.	60
Figura 9 –	Estimativas das métricas EQM, R_B^2 e VMRA do tratamento Patchouli em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa (à esquerda) e informativa (à direita).	63
Figura 10 –	Estimativas dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 do modelo logístico ajustado do tratamento Patchouli em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa (à esquerda) e informativa (à direita).	64
Figura 11 –	Estimativas das métricas EQM, R_B^2 e VMRA do tratamento Testemunha em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa (à esquerda) e informativa (à direita).	65
Figura 12 –	Estimativas dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 do modelo logístico ajustado do tratamento Testemunha em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa (à esquerda) e informativa (à direita).	66

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	OBJETIVOS	14
3	REVISÃO DE LITERATURA	15
3.1	CONTROLE DO FUNGO <i>Botrytis cinerea</i>	15
3.2	MODELO DE CRESCIMENTO	16
3.2.1	Análise de regressão	17
3.2.2	Modelo de Verhulst	18
3.2.3	Dados longitudinais	21
3.3	ABORDAGEM BAYESIANA	22
3.3.1	Distribuição a priori	24
3.3.2	Distribuição a posteriori	24
3.3.3	Métodos MCMC	27
4	MATERIAL E MÉTODOS	29
4.1	DADOS	29
4.2	INFORMAÇÃO A PRIORI	30
4.3	MODELAGEM	32
4.4	DISTRIBUIÇÃO A PRIORI	36
4.4.1	Priori Não Informativa	36
4.4.2	Priori Informativa	38
4.4.3	Distribuição a Posteriori	41
4.5	AVALIAÇÃO DO TAMANHO AMOSTRAL	41
4.6	Avaliação das estimativas	42
4.7	RECURSOS COMPUTACIONAIS	43
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	44
5.1	MODELAGEM	44
5.1.1	Definição da estrutura de erro	44
5.1.2	Definição da priori informativa	54
5.2	ANÁLISE DO TAMANHO AMOSTRAL	56
5.2.1	Priori Não Informativa	56
5.2.2	Priori Informativa	61
5.3	COMPARAÇÕES DE RESULTADOS COM AMOSTRA COMPLETA	70
6	CONCLUSÕES	73
	REFERÊNCIAS	74
	APÊNDICE	79

1 INTRODUÇÃO

O fungo *Botrytis cinerea* é responsável por perdas de diversas culturas e um consequente impacto econômico no setor agrícola. A forma convencional de controle ocorre por meio do uso de agrotóxicos, os quais estão associados a riscos à saúde e ao meio ambiente, além do desenvolvimento de organismos resistentes. Por isso, existem esforços para buscar formas alternativas de controle do seu crescimento (Elad Y.; Fillinger, 2016). Vários estudos mostram o potencial de óleos essenciais de várias fontes vegetais no controle do fungo *B. cinerea* que geram menores danos que os defensivos convencionais (Abd-Elkader *et al.*, 2021; Almasaudi *et al.*, 2022; Aouadi *et al.*, 2022; Banani *et al.*, 2018; Falleh *et al.*, 2020; Oliveira-Filho *et al.*, 2021).

O estudo do crescimento microbiano ajuda a compreender melhor as fases do crescimento, bem como os fatores que o influenciam. Uma forma de aprofundar essa análise é por meio da modelagem da curva de crescimento desses organismos. No entanto, o estudo dessa forma analisa dados ao longo do tempo e pode se deparar com resíduos autocorrelacionados no cenário em que as medidas são coletadas na mesma unidade experimental ao longo do tempo. Nesse caso, quando a dependência não é considerada adequadamente na modelagem isso pode comprometer a estimação, bem como o processo de inferência (Hoffmann, 2016; Pereira *et al.*, 2022).

O ajuste de um modelo de regressão não linear adequado permite obter informações sobre o fenômeno estudado por meio da estimação dos seus parâmetros (Esser; Leveau; Meyer, 2015). O modelo logístico, proposto por Verhulst (1838), é amplamente utilizado em modelagens de crescimento de organismos e permite compreender seu desenvolvimento e diversas aplicações. A abordagem bayesiana é utilizada para a estimação e inferência no estudo de curvas de crescimento (Macedo *et al.*, 2017; Mendes *et al.*, 2021; Ribeiro *et al.*, 2018; Salles *et al.*, 2020) e promove algumas vantagens, dentre elas, a facilidade de modelagens mais complexas e a capacidade de análise de amostras relativamente pequenas.

A abordagem frequentista, mais frequentemente utilizada na análise de curvas de crescimento, está associada a várias pressuposições que muitas vezes não são atendidas, principalmente com o aumento da complexidade do modelo de regressão, como presença de não linearidade e dependência. Nesses casos, geralmente são necessários métodos iterativos para estimação dos parâmetros do modelo (Mazucheli; Souza; Philippsen, 2011). Tal complexidade somada à quantidade limitada de observações longitudinais complicam a performance de métodos iterativos, podendo gerar estimativas irrealistas para os parâmetros e comprometer o processo de inferência sobre os mesmos (Martins-Filho

et al., 2008). Por não ser fundamentada em teoria assintótica, a abordagem bayesiana apresenta boa performance com amostras reduzidas (McNeish, 2016). Além disso, a abordagem considera os parâmetros como variáveis aleatórias, o que facilita a interpretação prática dos mesmos.

Diante do contexto apresentado, o atual estudo apresenta os seguintes objetivos.

2 OBJETIVOS

O presente trabalho tem como objetivo principal avaliar a performance da abordagem bayesiana na modelagem da curva de crescimento do fungo *Botrytis cinerea* por meio do ajuste do modelo logístico considerando autocorrelação residual. Assim, apresentar as vantagens e limitações da abordagem bayesiana frente a aplicação, descrita pelo controle de crescimento do patógeno fúngico proporcionado por óleos essenciais. Para atingir os objetivos gerais do estudo, foram detalhados nos seguintes objetivos específicos:

- a) Avaliar diferentes estruturas de priori, informativa e não informativa, na estimação dos parâmetros do modelo logístico;
- b) Avaliar a influência do tamanho da amostra na precisão e acurácia da predição de valores da curva de crescimento por meio do modelo logístico;
- c) Obter informações das etapas e do comportamento do crescimento do fungo a partir da interpretação biológica dos parâmetros estimados que permitam avaliação dos óleos essenciais no controle do fungo *Botrytis cinerea*;
- d) Disponibilizar as rotinas de análise de forma pública como forma de propor a análise utilizada e contribuir com futuros estudos similares.

3 REVISÃO DE LITERATURA

3.1 CONTROLE DO FUNGO *Botrytis cinerea*

O fungo ascomiceto *Botrytis cinerea* é responsável por perdas de uma grande variedade de culturas e, conseqüentemente, gera grande impacto econômico no setor agrícola (Elad Y.; Fillinger, 2016). É conhecido por causar a doença mofo cinzento que, como o próprio nome da doença descreve, produz um grande micélio acinzentado na área afetada. Por ser um fungo necrotrófico, atinge preferencialmente tecidos já lesionados ou em senescência. Na pós-colheita é considerado um dos maiores causadores de perdas de uma vasta variedade de frutas e vegetais. A infecção pode ocorrer ainda no campo, de forma quiescente, e se manifestar no fruto já em armazenamento ou nas prateleiras (Romanazzi; Feliziani, 2014).

Fungicidas sintéticos ainda são a principal forma de controle da doença, e o manejo integrado, como controle biológico e cultivares resistentes, apesar de serem eficientes, não costumam ser suficientes. No entanto, a aplicação destes agrotóxicos está associada a danos ao meio ambiente, à saúde, à qualidade do solo, além de promover resistência dos patógenos. Por isso, existe uma crescente demanda por investimentos em tecnologias alternativas eficientes e seguras para minimizar as perdas geradas por este fungo.

Diante deste cenário, os óleos essenciais surgem como potenciais alternativas de controle de patógenos, proporcionando vantagens de uso sobre os métodos convencionais. Além de seguros e biodegradáveis, apresentam forte atividade contra patógenos fúngicos de frutas (Oliveira-Filho *et al.*, 2021). Os óleos essenciais são extratos voláteis obtidos de diversas partes da plantas e de diversas espécies vegetais. Atraem grande atenção da comunidade científica por suas propriedades antibacteriana, antifúngica, antiviral e antioxidante, permitindo amplo espectro de aplicação. Diversos artigos recentes evidenciam seu potencial de aplicação no controle do crescimento fungo (Almasaudi *et al.*, 2022; Aouadi *et al.*, 2022; Zhao *et al.*, 2021). Oliveira-Filho *et al.* (2021) avaliaram a ação de diversos óleos essenciais contra o principal patógeno do morango, o *B. cinerea*. Os autores revelaram que a aplicação de óleos em diferentes formas reduziu consideravelmente a incidência e severidade da doença mofo cinzento, causada pelo fungo. Banani *et al.* (2018) observaram que o tratamento de maçãs com óleos essenciais promoveu uma redução significativa da doença. O mesmo foi observado em morangos em Faozia *et al.* (2022), em que a aplicação de óleos essenciais na forma de sprays

nos frutos reduziu significativamente a doença mofo cinzento. Tais estudos reiteram a eficácia do uso de óleos essenciais como agentes de controle do patógeno *Botrytis cinerea* e estimula cada vez mais a pesquisa de seu potencial. O estudo por meio de modelos de crescimento é uma forma eficiente de investigar características específicas do crescimento e fatores que o influenciam e, por isso, pode contribuir com estudos da ação de agentes de controle.

3.2 MODELO DE CRESCIMENTO

O estudo de modelos de crescimento desempenha um papel importante na Ciência para descrição de fenômenos da natureza e possibilita aplicações em diferentes áreas do conhecimento. As curvas de crescimento microbiano desempenham um importante papel no estudo destes organismos. A partir delas é possível compreender e monitorar características do crescimento e fatores que podem influenciá-lo. Ao ajustar o modelo de crescimento adequado, estas informações podem ser acessadas por meio da interpretação prática dos parâmetros do modelo ajustado (Esser; Leveau; Meyer, 2015). Em geral, o comportamento do crescimento microbiano tende a seguir uma curva sigmóide, representando a população em função de um determinado tempo. Portanto, os modelos não-lineares têm maior poder de descrição do comportamento do crescimento a partir de seus parâmetros (Chatterjee *et al.*, 2015); (Muianga *et al.*, 2016). A curva também pode fornecer os estágios de cultivo, correspondentes às fases de latência, exponencial, logarítmica, desaceleração e estacionária, relacionadas com os devidos parâmetros (Vismara, 2019).

Vários modelos estatísticos podem ser empregados para o ajuste da curva sigmoidal do crescimento microbiano. Os mais famosos são os modelos logístico e de Gompertz (Peleg, 2021). Conhecer os parâmetros ligados ao crescimento ajuda a caracterizar condições ótimas de crescimento de um organismo, bem como seu comportamento sob diferentes condições bióticas e abióticas (Garel *et al.*, 2022). A modelagem do crescimento microbiano é muito aplicada na indústria alimentícia, em que é fundamental o controle e monitoração da proliferação de microrganismos (Skinner; Larkin; Rhodamel, 1994). Assim, existe um grande interesse na compreensão do papel desempenhado por microrganismos em diversas áreas tecnológicas. Na pós-colheita, os microrganismos de interesse, incluindo *B. cinerea*, são principalmente os causadores de doenças em frutas e vegetais, o que afeta a vida útil destes produtos e muitas vezes geram grandes desperdícios. Compreender a relação de fatores que interferem em seu crescimento é fundamental para desenvolver técnicas que reduzam a

contaminação e conseqüentemente, as perdas. Assim, o estudo atual pauta a investigação da ação de óleos essenciais no crescimento do fungo por meio da análise de sua curva de crescimento. Para tal, realiza-se ajuste de um modelo de regressão adequado que permita obter informações do comportamento do crescimento por meio da interpretação de seus parâmetros.

3.2.1 Análise de regressão

Curvas de crescimento podem ser representadas por diferentes modelos de regressão (Gasser *et al.*, 1984). Os modelos de regressão são amplamente utilizados para descrever a relação entre uma variável resposta e uma ou mais variáveis explicativas. Contudo, a análise de regressão investiga a variabilidade gerada na variável resposta por variáveis de interesse. Além disso, ao selecionar o modelo de ajuste adequado aos dados, a relação quantitativa entre as variáveis permite prever valores de uma variável dependente para todo o intervalo de valores experimentados de uma variável independente. De modo geral, um modelo de regressão é composto por um componente sistemático e um aleatório e pode descrever um comportamento linear ou não linear. O modelo linear clássico é representado na seguinte forma geral:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \mathbf{e} \quad (3.1)$$

em que \mathbf{Y} é o vetor de dimensão $(n \times 1)$ de observações da variável resposta, β é o vetor de parâmetros do modelo $(m \times 1)$, \mathbf{X} é a matriz $(m \times n)$ de observações de m covariáveis e \mathbf{e} é o vetor $(n \times 1)$ de erros. Um modelo de regressão é dito linear se as derivadas parciais em relação a cada parâmetro da expressão não dependem do parâmetro. Caso contrário, o modelo é considerado não linear (Bates; Watts, 1988).

Geralmente as análises de regressão estão associadas à pressuposições ligadas ao erro para o processo de inferência. Assim, frequentemente é atribuída ao vetor de erros uma distribuição Normal com média zero e variância constante, denotado por $N(\mathbf{0}, \sigma^2 I_n)$. No caso não linear, a função $f(\mathbf{X}|\beta)$ que relaciona a variável dependente à variável explicativa (3.2) é dada por um modelo não linear.

$$\mathbf{Y} = f(\mathbf{X}|\beta) + \mathbf{e} \quad (3.2)$$

em que o vetor $(n \times 1)$ de observações \mathbf{Y} é dado em função da matriz de covariáveis \mathbf{X} e do vetor de parâmetros β quaisquer por meio do vetor de funções $(n \times 1)$ não lineares em β . Os parâmetros dos

modelos não lineares especificam a forma e comportamento da curva que os representa e permitem, desta forma, interpretações práticas acerca do fenômeno (Fernandess *et al.*, 2014; Silveira *et al.*, 2011). Existem vários modelos não lineares que são adotados de acordo o fenômeno que se deseja modelar.

3.2.2 Modelo de Verhulst

O modelo logístico, desenvolvido por Pierre-François Verhulst, surgiu como uma adaptação da teoria de crescimento em progressão geométrica de Malthus, com a suposição de que o crescimento de uma população tende a se estabilizar após atingir sua capacidade máxima em um determinado tempo (Smith; Keyfitz, 2013), conforme a seguinte expressão:

$$\frac{dN}{dt} = rN\left(1 - \frac{N}{K}\right) \quad (3.3)$$

em que N denota o tamanho da população, t é o tempo decorrido do crescimento, r denota a taxa de crescimento e K é a chamada capacidade de carga, podendo ser interpretada como a quantidade máxima de indivíduos que a população pode atingir. Observa-se que a taxa de crescimento possui uma restrição N/K , assim, quanto maior a população, mais o parâmetro N se aproxima do limite de indivíduos K . O comportamento do crescimento de uma população tem relação, portanto, com a quantidade de indivíduos envolvidos. Tal restrição pode ser explicada por diversos fenômenos, como limitação de recursos e/ou da reprodução dos indivíduos, predação, competição, eventos que ocasionam mortalidade, como epidemias, etc (Campos, 2011). Desta forma, o modelo estocástico de Verhulst possibilita o estudo de fatores inibitórios envolvidos na redução do crescimento de uma dada população de organismos, como a atividade antimicrobiana de compostos no controle de patógenos. Os modelos de predição de crescimento, em maioria, são variações derivadas da equação de crescimento de Verhulst (3.3) (Tsoularis; Wallace, 2002).

No estudo desenvolvido por Vismara (2019) objetivou-se avaliar a sensibilidade do fitopatógeno *Botrytis cinerea* aos óleos essenciais Citronela (*Cymbopogon* sp. Spreng.), Guaçatonga (*Casearia sylvestris* Sw.), Melaleuca (*Melaleuca* sp. L.), Patchouli (*Pogostemon* sp. Benth.) e Pitangueira (*Eugenia uniflora* L.). Similarmente à proposta do presente estudo, para investigar a ação dos óleos no crescimento do fungo, Vismara (2019) realizou ajuste da curva de crescimento do fitopatógeno por meio do modelo logístico, com diferença da adoção da abordagem frequentista para o processo de

estimação. O modelo escolhido, segundo a autora, além de permitir analisar três parâmetros em um só modelo, interpretações biológicas dos parâmetros fornecem informações sobre o comportamento do crescimento fúngico em sistema fechado.

Em um estudo da capacidade antagonista do potencial agente de biocontrole *Trichoderma* spp., Vélez *et al.* (2017) utilizaram o modelo logístico para avaliar a interação entre o fungo antagonista e o patógeno causador da doença vassoura-de-bruxa, *Moniliophthora perniciosa*. O modelo foi eficientemente ajustado para os dados de interação entre os dois fungos, em que todos os parâmetros foram altamente significativos ($p < 0,01$). Assim, a partir dos menores valores de crescimento, foi possível indicar os isolados que sofreram maior inibição pelo *Trichoderma* spp.

Estudos dos fatores envolvidos no crescimento microbiano são fundamentais na área de segurança de alimentos, por exemplo. O estudo desenvolvido por Peleg (2021) teve como principal objetivo avaliar a taxa de crescimento de microrganismos e os fatores ambientais que afetam tal crescimento. A partir de uma versão expandida da equação do modelo de Verhulst foram avaliados diferentes ambientes de crescimento microbiano, possibilitando também a predição do crescimento em função de diferentes fatores. O modelo também permitiu a avaliação de tecnologias que combatem a contaminação de alimentos por microrganismos, comparando diferentes cenários de crescimento.

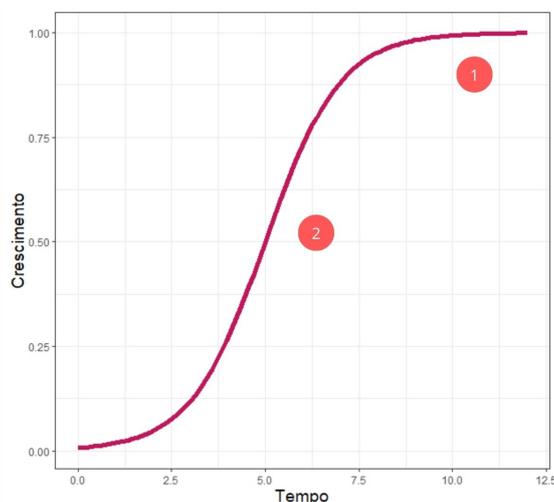
O modelo logístico deu origem a vários outros modelos que também são muito utilizados para descrição de curvas de crescimento (Tsoularis; Wallace, 2002). Por meio de modificações, o modelo logístico pode ser otimizado de forma a atender diferentes especificações da curva de crescimento analisada. Peleg, Corradini e Normand (2007) consideram fatores da dinâmica do crescimento de microrganismos em sistemas fechados, o que contribui com a geração de quase todos os padrões de crescimento microbiano associado a alimentos. Fujikawa (2010) apresenta um novo modelo logístico proposto em seus trabalhos (Fujikawa; Kai; Morozumi, 2003) para predição da curva de crescimento de bactérias em relação a temperaturas e acúmulo de metabólitos tóxicos que decresce a população. Para aplicação do modelo logístico, a equação 3.3 pode ser obtida a partir de sua solução analítica (Heydari *et al.*, 2014). Várias reparametrizações são utilizadas, dependendo dos fins de cada estudo (Fernandes *et al.*, 2015; Rossi; Santos, 2014; Seber; Wild, 2003). Assim, o modelo de três parâmetros utilizado no atual estudo para descrever os dados de crescimento do patógeno *Botrytis cinerea* em sistema fechado é dado pela expressão:

$$f(x) = \frac{\beta_1}{1 + \exp[-\beta_3(x - \beta_2)]}, \quad (3.4)$$

em que a variável que descreve o crescimento estudado é em função do tempo x . Embora os parâme-

tros do modelo 3.4 possam assumir valores negativos, dentro do contexto do crescimento microbiano tem-se $\beta_1, \beta_2, \beta_3 > 0$.

Figura 1 – Representação da curva logística de crescimento.



Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: Indicação 1 está associada ao parâmetro β_1 e a indicação 2, ao parâmetro β_2 .

No estudo do crescimento fúngico, segundo Vismara (2019), o parâmetro β_1 corresponde ao valor assintótico da variável resposta, portanto, indica o valor máximo em que o crescimento do fungo se estabiliza. A Figura 1 representa a curva da expressão do modelo logístico de crescimento apresentado (3.4). Na curva representada, o parâmetro β_1 está associado à parte da curva indicada em 1, em que o comportamento do crescimento passa ser constante ao atingir seu máximo. O parâmetro β_2 está associado ao formato sigmoide do modelo e, por estar ligado ao valor inicial, indica a proporção do valor assintótico acrescido. Na Figura 1, o parâmetro β_2 pode ser ilustrado pela indicação 2, em que a curva muda de comportamento. Já β_3 fornece a taxa com que o crescimento atinge seu valor máximo e, neste caso, corresponde ao efeito de interesse, pois indica a velocidade e eficiência do crescimento. O modelo é adequado a crescimentos de comportamento sigmoide, é simétrico em relação ao ponto de inflexão, atingindo metade de seu crescimento máximo quando o valor da covariável X do ponto de inflexão é β_2 .

O modelo apresentado pela expressão 3.4, portanto, fornece as informações necessárias, a partir da interpretação biológica de seus parâmetros, para monitorar e avaliar o crescimento do fungo *Botrytis cinerea*. Isso permite, da mesma forma, a avaliação de potenciais agentes no controle do fitopatógeno, incluindo óleos essenciais.

3.2.3 Dados longitudinais

O estudo de curvas de crescimento, por ser um estudo em função do tempo, pode envolver dados longitudinais, ou seja, medidas repetidas ao longo do tempo (Diggle, 2002). Segundo Pereira *et al.* (2022), essa forma de condução do estudo pode gerar autocorrelação nos resíduos, e, se não considerada na modelagem, pode comprometer a validade dos resultados, bem como o processo de inferência.

A autocorrelação, ou correlação serial, é caracterizada quando parte da medida observada da unidade i é devido ao efeito de um processo estocástico da variação, no caso, temporal. Tal fonte de variação é responsável por gerar correlação entre as medidas j de uma mesma unidade i que está associada à separação temporal entre elas, a chamada *lag*. É característico desse cenário que a correlação tende a se enfraquecer conforme as medidas se afastam no tempo (Diggle, 2002). Segundo Draper e Smith (1998), em uma correlação serial positiva, resíduos próximos tendem a se assemelhar em uma sequência temporal, indicando uma influência gerada internamente. Segundo os autores, quando a dependência do resíduo j é em relação ao resíduo no tempo $j - 1$, define-se que os resíduos estão em *lag-1*. Da mesma forma, *lag-2* corresponde à disposição do resíduo j associado ao tempo $j - 2$. Para que essa fonte aleatória de variação não gere viés e comprometa a validade dos resultados, Pereira *et al.* (2022) afirmam que esta deve ser considerada na modelagem. Dentre as formas possíveis, pode-se assumir uma decomposição aditiva do erro aleatório para cada tempo j , correspondente à autocorrelação. Os autores incorporaram ao modelo uma estrutura para os erros autorregressiva de ordem p , conforme descrito na equação 3.5. Esse tipo de modelo autorregressivo é descrito por Moretin e Toloí (1986), que utiliza a notação AR(p). De forma geral, o termo referente ao erro e_j é decomposto na seguinte expressão:

$$e_j = \phi_1 e_{j-1} + \phi_2 e_{j-2} + \dots + \phi_p e_{j-p} + u_j \quad (3.5)$$

em que cada unidade observada é medida j vezes, ou seja, em j tempos diferentes, e ϕ_p é o parâmetro autorregressivo de p -ésima ordem. O termo u_j corresponde ao ruído branco, para o qual assume-se distribuição $N(0, \sigma_u^2)$. Para definir a estrutura, juntamente com a ordem p , Pereira *et al.* (2022) utilizaram os gráficos da função de autocorrelação (FAC) e da função de autocorrelação parcial (FACP), em que são verificadas as lags significativas à autocorrelação. Em Moretin e Toloí (1986), uma das formas de verificação de autocorrelação é o teste de independência de Box-Pierce. Os autores ainda

pontuam a importância de considerar a parcimônia neste processo.

3.3 ABORDAGEM BAYESIANA

Uma das etapas mais importantes de um estudo estatístico sobre um fenômeno está no processo de inferência sobre os parâmetros do modelo. Tal processo depende da qualidade das estimativas. Na abordagem frequentista esta qualidade está associada a várias pressuposições que muitas vezes não são atendidas, principalmente com o aumento da complexidade do modelo de regressão (Mazucheli; Souza; Philippsen, 2011).

Os métodos de estimação da abordagem frequentista geralmente são fundamentados em teoria assintótica. Um dos mais utilizados para estimação dos parâmetros de modelos não lineares é o método de mínimos quadrados, o qual exige métodos iterativos devido ao sistema de equações normais não lineares sem soluções explícitas (Muianga *et al.*, 2016). No entanto, segundo Martins-Filho *et al.* (2008) a complexidade do modelo e a quantidade limitada de observações longitudinais complicam a performance dos métodos iterativos, podendo gerar estimativas irreais para os parâmetros e comprometer o processo de inferência sobre os mesmos. Além disso, ainda segundo os autores, a comparação entre os parâmetros de tratamentos diferentes torna-se complexa, uma vez que na abordagem frequentista o processo de inferência sobre os estimadores está condicionada à pressuposições de normalidade.

A abordagem bayesiana tem sido bastante utilizada em ajustes de curvas de crescimento. Em um estudo realizado por Ribeiro *et al.* (2018), os autores avaliaram a abordagem bayesiana no estudo da produção de matéria seca das folhas e do colmo, razão foliar e teor de proteína bruta da espécie vegetal *Brachiaria decumbens* Stapf em função de diferentes doses de nitrogênio, e obtiveram sucesso. Segundo os autores, a abordagem foi eficiente na modelagem, permitindo utilizar informações a priori disponíveis na literatura e obter intervalos de evidência de otimização do problema estudado. A abordagem bayesiana pode ser tão eficiente quanto a frequentista e ainda conferir vantagens ao estudo proposto. No estudo apresentado em Salles *et al.* (2020), os autores tiveram como objetivo a comparação dos métodos frequentista e bayesiano no ajuste da curva de crescimento da raça de ovinos Santa Inês. Embora, os ajustes da curva de crescimento por ambos os métodos frequentista e bayesiano terem chegado em resultados similares, os autores reiteram a vantagem conferida pelo método bayesiano na inferência sobre os parâmetros, pois ocorre de forma direta, ao contrário do método

frequentista. O estudo, portanto, conclui que o melhor modelo de descrição da curva de crescimento da ovelha Santa Inês foi o modelo Gompertz ajustado por meio da abordagem bayesiana.

A filosofia bayesiana entende que por ser desconhecido, um parâmetro θ de interesse está associado a uma incerteza a qual deseja-se reduzir e, portanto, é considerado aleatório. Desta forma, a abordagem quantifica a incerteza por meio de modelos probabilísticos para θ .

A abordagem bayesiana teve origem nas ideias do reverendo Thomas Bayes (1701-1761) que mais tarde dariam forma ao Teorema de Bayes (3.6). O raciocínio, de forma geral, calcula a probabilidade de um evento de interesse (A) dado que outro já ocorreu (B). Assim, uma informação prévia sobre o evento pode ser incorporada e contribui com a redução da incerteza que se tem sobre o evento que se deseja conhecer (A).

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}, P(B) \neq 0. \quad (3.6)$$

De forma análoga, a informação prévia corresponde a informação a priori que se tem sobre o parâmetro antes da observação da amostra, definida como uma distribuição $p(\theta)$. Ao desejar a estimação do parâmetro, isto implica em reduzir a incerteza que se tem sobre seu real valor. Assim, ao assumir o parâmetro como variável aleatória, a abordagem bayesiana propõe uma distribuição de probabilidade associada ao mesmo. Dada uma amostra fixa y , a distribuição de interesse do parâmetro é a chamada distribuição a posteriori $p(\theta|y)$. Considerando o caso de θ contínuo, a partir do Teorema de Bayes, a relação entre os termos citados pode ser escrita como:

$$p(\theta|y) = \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{\int p(y|\theta)p(\theta)d\theta}. \quad (3.7)$$

Após a obtenção da amostra, como o denominador da expressão (3.7) é uma integral em relação à θ , a expressão independe do parâmetro, portanto é constante. Dessa forma, a posteriori é obtida por meio da atualização da distribuição a priori pela incrementação da informação da amostra que ocorre pela observação de uma quantidade aleatória de Y . Assim, a distribuição a posteriori é expressa por:

$$p(\theta|y) \propto L(\theta|y)p(\theta), \quad (3.8)$$

em que a distribuição *a posteriori* $p(\theta|y)$ é proporcional ao produto da distribuição *a priori* $p(\theta)$ e da função de *verossimilhança* $L(\theta|y)$. Fixando uma amostra $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ independente e identicamente distribuída, a função de verossimilhança fornece a plausibilidade associada aos valores

possíveis de θ dado que a amostra já foi observada (Murteira; Paulino; Turkman, 2003). A expressão da função de verossimilhança é dada por:

$$L(\theta|y) = \prod_i^n f(y_i|\theta). \quad (3.9)$$

3.3.1 Distribuição a priori

A distribuição a priori é uma peça fundamental à abordagem bayesiana, pois permite a incorporação de informação sobre o evento estudado antes da observação da amostra. Existem dois tipos básicos de distribuição a priori quanto ao grau de informação: informativa e não informativa. No caso em que não há informação a priori disponível, convém assumir priori não informativa para os parâmetros. Neste caso, é comum atribuir uma priori vaga ao parâmetro, descrita como a adoção de uma distribuição em que nenhum subconjunto do espaço paramétrico é favorecido (Berger, 2013). Por conter baixo nível de informação acerca do parâmetro, esse tipo de priori pouco influencia a distribuição a posteriori, e esta tende a se assemelhar à função de verossimilhança (Ehlers, 2003). A priori informativa, por outro lado, agrega mais informação à posteriori. Tal informação pode ser obtida de experimentos prévios, informações disponíveis na literatura ou de conhecimento especialista e deve ser expressa como uma função probabilística específica dos parâmetros de interesse. Segundo Murteira, Paulino e Turkman (2003), o processo de incorporação de informação a priori à análise de estudo inclui alguns elementos subjetivos.

3.3.2 Distribuição a posteriori

A inferência sobre os parâmetros ocorre por meio da distribuição a posteriori, pois, segundo fundamentos da abordagem bayesiana, toda a informação probabilística do parâmetro se encontra nela (Murteira; Paulino; Turkman, 2003).

A partir da distribuição conjunta a posteriori, são obtidas as distribuições marginais dos parâmetros que permitem realizar as inferências, conforme a expressão (3.10). No entanto, geralmente esse processo não é analítico e exige métodos iterativos. Um desses métodos utiliza o algoritmo do Amostrador Gibbs ou Metropolis-Hastings, dependendo do caso, por meio do método de Monte Carlo

via Cadeias de Markov (MCMC). Os métodos MCMC utilizam como base valores da cadeia gerados por sucessivas simulações para definir características da distribuição de interesse. Para tal processo são necessários algoritmos que gerem as cadeias das distribuições de equilíbrio, como o Amostrador de Gibbs (mais detalhes no item 3.3.3).

$$p(\theta_i|y) = \int_{\theta \neq \theta_i} p(\theta|y) d\theta_{\theta \neq \theta_i} \quad (3.10)$$

Uma vez amostradas as distribuições marginais dos parâmetros é possível obter as estimativas. A estimação pontual dos parâmetros pode ser dada pela média, moda ou mediana a posteriori. Para a abordagem bayesiana, mesmo estimativas pontuais são associadas a um intervalo que denota a incerteza da estimação, chamados de intervalos de credibilidade. Assim, dado um intervalo $a < \theta < b$, o intervalo de credibilidade $100(1 - \alpha)\%$ para θ é delimitado pelos limites $\theta_{\alpha/2}$ e $\theta_{1-\alpha/2}$ na distribuição a posteriori $p(\theta|y)$ (3.11).

$$\int_{-\infty}^a p(\theta|y) d\theta = \int_b^{\infty} p(\theta|y) d\theta = \frac{\alpha}{2} \quad (3.11)$$

É a partir destes intervalos que ocorre a interpretação direta e inequívoca sobre o valor do parâmetro que contrasta com a interpretação do intervalo de confiança da abordagem frequentista. Por meio deles são buscados os menores intervalos em que há maior probabilidade de conter o valor do parâmetro. Assim, o intervalo de maior interesse é chamado região de alta credibilidade, abreviado por intervalo HPD (*Highest Posterior Density*), em que todos os pontos dentro do intervalo tem densidade maior do que qualquer ponto fora dele (Bernardo, 1998; Wakefield *et al.*, 2013). O processo de inferência é uma parte de grande importância na estatística pois permite obter informações de uma população de interesse. Teste de hipóteses são amplamente utilizados para tomada de decisão acerca de um parâmetro θ . Dentre as formas de se realizar teste de hipóteses por tal abordagem, Murteira, Paulino e Turkman (2003) apontam os métodos por intervalo de credibilidade e o Fator de Bayes. Segundo os autores, no caso de testes bilaterais, a construção de um intervalo de credibilidade, geralmente HPD, é uma forma de determinar a significância de parâmetros. Neste caso, tem-se o seguinte par de hipóteses:

$$\begin{cases} H_0 : \theta = \theta_0 \\ H_1 : \theta \neq \theta_0 \end{cases} \quad (3.12)$$

em que θ_0 é o valor de θ da hipótese testada. Dado um intervalo de credibilidade ($ICr_{\gamma\%}$) para um

parâmetro θ , rejeita-se a hipótese inicial H_0 quando:

$$\theta_0 \notin ICr_{\theta}(\gamma)\%. \quad (3.13)$$

Outro método para teste de hipótese, segundo a abordagem bayesiana, é realizado pelo cálculo do Fator de Bayes, o qual fornece a probabilidade de uma hipótese H_0 dada uma amostra y , $P(H_0|y)$. Hall (2012) define o fator como a razão entre a chance a posteriori (3.15) pela chance a priori (3.14). Diferentes estruturas de priori alteram a influência da amostra na credibilidade relativa de H_0 e H_1 , assim, a razão de chances é uma forma de contrapor tal peso (Murteira; Paulino; Turkman, 2003).

$$O(H_0, H_1) = \frac{P(H_0)}{P(H_1)} \quad (3.14)$$

$$O(H_0, H_1|y) = \frac{P(H_0|y)}{P(H_1|y)} \quad (3.15)$$

$$FB_{0,1} = \frac{O(H_0, H_1|y)}{O(H_0, H_1)} \quad (3.16)$$

Segundo Kass e Raftery (1995), o Fator de Bayes sintetiza a evidência proporcionada pela amostra em favor da hipótese testada. O teste de hipótese por este método permite analisar a condição da hipótese testada em uma escala gradual apresentada por Jeffreys (1961):

Tabela 1 – Escala do Fator de Bayes segundo Jeffreys (1961)

Fator de Bayes	Evidência em relação à H_0
$FB_{0,1} < 1$	Contra
$FB_{0,1} \in [1; 3,2)$	Fraca
$FB_{0,1} \in [3,2; 10)$	Substancial
$FB_{0,1} \in [10; 100)$	Forte
$FB_{0,1} > 100$	Decisiva

Fonte: Kass; Raftery, 1995.

Além de testes de hipóteses, a seleção de modelos é uma parte importante da modelagem. Análogo ao critério AIC (*Akaike Information Criterion*), o DIC (*Deviance Information Criterion*) foi proposto por Spiegelhalter et al. (1998) e é comumente utilizado no cenário bayesiano para seleção de modelos. O critério é formado pelo desvio médio a posteriori D (3.18), que pode ser definido como uma medida bayesiana de adequação ao modelo, e pela dimensão do modelo, p_D (3.19), ou seja, a

quantidade efetiva de parâmetros do modelo,

$$DIC = D(\bar{\theta}) + 2p_D, \quad (3.17)$$

$$D(\theta) = -2\log\{p(y|\theta)\} + 2\log\{f(y)\}, \quad (3.18)$$

$$p_D = D(\bar{\theta}) - D(\bar{\theta}), \quad (3.19)$$

em que $\bar{\theta} = E(\theta|y) = \tilde{\theta}(y)$ e $D(\bar{\theta}) = E[D|\theta]$. Por estar associado ao desvio dos modelos quanto aos dados observados, a aplicação consiste em classificar os melhores modelos que apresentem menor DIC. Spiegelhalter et al. (2002) propõem a comparação entre dois modelos A e B pelo módulo da diferença entre seus valores de DIC:

$$\Delta DIC = |DIC_A - DIC_B| \quad (3.20)$$

em que a magnitude das diferenças D podem ser classificadas como:

- i) $\Delta DIC < 5$: diferença entre os modelos não é substancial;
- ii) $5 \leq \Delta DIC \leq 10$: diferença entre os modelos é substancial;
- iii) $\Delta DIC > 10$: despreza-se o modelo de maior DIC.

3.3.3 Métodos MCMC

Os métodos MCMC desempenham um papel fundamental na inferência bayesiana por resolver problemas integrativos complexos envolvidos no processo de obtenção das distribuições marginais a posteriori. A cadeia de Markov é um processo estocástico em que, dado o estado presente, os estados futuros não dependem dos estados passados, apenas de seu antecessor imediato (Gelman; Lopes, 2006). O objetivo é encontrar a distribuição marginal, correspondente à distribuição do parâmetro θ de interesse, e calcular estimativas amostrais de característica desta distribuição. Para isso é gerada uma amostra desta distribuição que sintetiza as características da mesma, facilitando a identificação. A obtenção da amostra ocorre por meio de um passeio aleatório no espaço paramétrico de θ , em que

a distribuição de equilíbrio é a distribuição marginal de θ (Achar *et al.*, 2019).

Junto aos métodos MCMC estão os algoritmos Amostrador de Gibbs e Metropolis-Hastings. O amostrador de Gibbs é utilizado para gerar valores sucessivos de uma distribuição de densidade desconhecida, a distribuição marginal, a partir das distribuições condicionais completas. Por outro lado, quando as distribuições condicionais não são identificadas facilmente, opta-se pelo algoritmo de Metropolis-Hastings. Nesse caso, o algoritmo utiliza valores de uma distribuição auxiliar que são aceitos ou não como parte da distribuição de interesse com uma dada probabilidade. Conceitos mais aprofundados sobre o funcionamento destes algoritmos são descritos por Achar *et al.* (2019), Gamerman e Lopes (2006), Murteira, Paulino e Turkman (2003).

A avaliação de convergência é uma questão importante dos métodos MCMC, pois avalia o comportamento assintótico da cadeia conforme o número de iterações tende ao infinito. O estado de estacionariedade está associado ao estado invariável da cadeia em que se chega ao equilíbrio. Segundo Gelman e Rubin (1992) um forte indício de convergência é o comportamento similar da trajetória das cadeias geradas ao longo de várias iterações, uma vez que após a convergência, as trajetórias permanecem as mesmas. Outros três critérios muito utilizados para análise de convergências são os critérios de Geweke, Raftery & Lewis e Heidelberguer & Welch, que podem ser acrescentados na análise por meio do pacote “coda” do R. O critério apresentado em Geweke (1992) é baseado no teste de igualdade de médias do início e do final da cadeia, portanto, o valor resultante da análise pelo critério deve ser menor que 1,96 em módulo. O fator de Dependência segundo Raftery, Lewis *et al.* (1992) determina a quantidade adequada de iterações que garante a convergência. No caso, o valor resultante da análise deve ser próximo de 1, indicando independência entre as iterações. Por fim, o critério de Heidelberguer e Welch (1983), testa a hipótese nula de estacionariedade da amostra gerada, portanto, o *valor-p* deve ser maior que 0,05 para constatar a estacionariedade.

4 MATERIAL E MÉTODOS

4.1 DADOS

O banco de dados utilizado no trabalho foi obtido de experimentos realizados na UTFPR, apresentados na tese de doutorado de Vismara (2019). Os experimentos foram realizados com o objetivo de avaliar a ação dos óleos essenciais, dentre eles os óleos Guaçatonga, Melaleuca e Patchouli, em comparação com o tratamento Testemunha (sem óleo), no crescimento do fungo *Botrytis cinerea* por meio de exposição aos voláteis na dose $20\mu/L$. Os fungos foram cultivados em Placas de Petri de 85mm de diâmetro, a partir de discos miceliais colonizados de 8mm, em meio de cultura BDA. Para obter dados do crescimento estudado foram coletadas duas medidas de diâmetro do fungo (mm) perpendiculares entre si a cada 24h, durante 10 dias. Assim, a variável estudada, crescimento micelial radial, é representada pela seguinte expressão do diâmetro $d(\phi, mm)$:

$$d = \frac{x + y}{2} - 8, \quad (4.1)$$

em que o diâmetro médio $d(\Phi, mm)$ é dado pela média das medidas de diâmetros ortogonais x e y , subtraída pelo diâmetro de 8mm dos discos colonizados pelo fungo. Detalhes das medidas utilizadas no experimento podem ser encontrados na seção 3.3.4 do *Estudo II* do trabalho (Vismara, 2019, p. 62). O delineamento aplicado ao experimento foi o Delineamento Inteiramente Casualizado com medidas repetidas, com 9 repetições. No caso do tratamento Melaleuca foram utilizados dados referentes a 7 repetições, devido à perda de material. Demais detalhes sobre os métodos do experimento estão disponíveis na seção do *Estudo III* (Vismara, 2019, p. 86).

Com o objetivo de avaliar o crescimento micelial radial do fungo em função dos dias analisados, o estudo (Vismara, 2019) realizou o ajuste do modelo logístico de crescimento. Conforme a autora, os parâmetros foram estimados pelo método da Máxima Verossimilhança, por meio do pacote "*nlme*" da ferramenta computacional R versão 3.6.1.

4.2 INFORMAÇÃO A PRIORI

Na busca de informação a priori foi realizada uma pesquisa de estudos com experimentos similares ao experimento de origem dos dados do atual trabalho. Os principais requisitos incluíram que os estudos apresentassem:

- a) Avaliação do crescimento do fungo *B. cinerea* ao longo do tempo;
- b) Avaliação de pelo menos um óleo essencial, dentre Melaleuca, Patchouli e Guaçatonga, ou na ausência de interferência, caracterizando o tratamento Testemunha;
- c) Variável resposta sendo alguma medida de diâmetro do fungo cultivado em Placa de Petri.

A Tabela 2 a seguir apresenta os artigos encontrados seguindo estes três requisitos:

Tabela 2 – Informações das condições experimentais de cada fonte de informação encontrada.

Fonte da informação	Diâmetro da placa (mm)	Composto avaliado	Meio de cultura	Variável medida	Duração do experimento
Andrade <i>et al.</i> (2001)	BDA, AA, LDA, CDA	diâmetro	5 dias
Zago <i>et al.</i> (2019)	90	patchoulol	MA	diâmetro	6 dias
Vallejo <i>et al.</i> (2001) *	50	OE de patchouli	BDA	diâmetro	6 dias

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: OE: óleo essencial.

Nota: *Não utilizado no atual estudo.

Além dos estudos cumprirem os requisitos e terem os dados disponibilizados, eles devem também apresentar condições de experimento bem próximas ao estudo de origem dos dados deste trabalho, Vismara (2019). O estudo de Vallejo *et al.* (2001) apresenta dados de diâmetro caracterizando o crescimento micelial do fungo *B. cinerea* que poderiam ser utilizados como informação a priori para os tratamentos Testemunha e Patchouli. No entanto, como os autores concluem, há uma alta variação genética entre os indivíduos da espécie *B. cinerea*, o que pode provocar alta variabilidade no comportamento do crescimento do fungo. Além disso, o diâmetro da placa de Petri se diferencia bastante do estudo de Vismara (2019), como mostra a Tabela 2. Quanto ao Patchouli, é válido ressaltar que o estudo de Vallejo *et al.* (2001) avalia propriamente o composto patchoulol, e não o óleo essencial. A concentração aplicada e o meio de cultura são diferenças importantes quando comparadas com o estudo de Vismara (2019). Por tais motivos optou-se por não utilizar as informações do artigo como informação a priori do atual trabalho.

Assim, os estudos selecionados para maior investigação como fonte de informação a priori foram Andrade *et al.* (2001) e Zago *et al.* (2019) para Testemunha e apenas Zago *et al.* (2019) para Patchouli.

Para reproduzir as informações a priori apresentadas nos estudos selecionados foram obtidas as estimativas dos parâmetros de interesse por meio do ajuste do modelo logístico sem estrutura AR (4.4) com priori não informativa (4.13) a partir dos dados disponíveis de cada um. Em Zago *et al.* (2019), em que são avaliadas diferentes doses do óleo essencial Patchouli, foram utilizados apenas os dados de dose $20\mu L$, correspondente à utilizada em Vismara (2019). Em Andrade *et al.* (2001), o crescimento do fungo *B. cinerea* é avaliado em diferentes meios de cultura, dentre eles os meios BDA e AA, que são apresentados como estatisticamente iguais quanto ao crescimento máximo atingido e à taxa de crescimento. Portanto, em vista de incorporar maior quantidade de informação à análise, os dados de ambos os meios foram unidos em um único conjunto de dados para obtenção das estimativas dos parâmetros.

Dentre as principais diferenças entre as condições de experimento em Andrade *et al.* (2001) em relação à Vismara (2019) se encontram o tamanho dos discos do micélio do fungo cultivado, sendo de 4mm de diâmetro, e a quantidade de repetições, 3 para cada tratamento. A variável utilizada para medição do crescimento é similar à utilizada em Vismara (2019) (expressão 4.1), com a diferença do tamanho do disco utilizado em cada estudo. A avaliação da influência dos meios no crescimento foi realizada por meio do crescimento micelial (mm) e taxa de crescimento (mm/h) médios (Tabela 3). O artigo não apresenta o tamanho da placa, embora haja suspeitas de que seja de 85 ou 90 mm a julgar pelos valores de crescimento micelial máximo (Tabela 3).

Tabela 3 – Influência de meios de cultura sobre o crescimento micelial (mm) e taxa de crescimento (mm/h) de *B. cinerea*.

Meios de cultura	Crescimento micelial	Taxa de crescimento
BDA	83,16 a	1,23 a
CDA	81,33 a	0,91 b
AA	80,17 a	1,03 ab
LDA	78,00 a	0,91 b
CV(%)	2,96	11,42

Fonte: Andrade *et al.* (2001).

Legenda: Médias seguidas pela mesma letra na vertical não diferem entre si pelo teste de Tukey ($p > 0,05$).

No outro estudo selecionado, Zago *et al.* (2019), o óleo essencial de Patchouli é avaliado *in vitro* em relação ao controle do fungo *B. cinerea* em diferentes doses. A coautoria de Vismara (2019) também é um fator que favorece a proximidade das condições de experimento, com a diferença da duração do experimento, de 6 dias, e o número de repetições, 5 para cada tratamento (Tabela 2). A variável resposta corresponde a mesma expressão de diâmetro d (expressão 4.1). Ainda que o foco do estudo seja na ação do óleo essencial Patchouli, existem os dados referentes ao tratamento Testemunha como grupo controle. O mesmo estudo utilizado como informação a priori para o tratamento Testemunha, Zago *et al.* (2019), também foi utilizado para o tratamento Patchouli. Semelhante ao experimento de Vismara (2019), o óleo essencial foi aplicado na concentração 100%. Como são testadas diferentes doses, foram selecionado apenas os dados referentes à dose correspondente aos dados utilizados no atual estudo, $20\mu L$.

Com posse dos dados dos dois estudos, foram avaliadas prioris para o tratamento Testemunha com base no dados de Andrade *et al.* (2001), mais facilmente nomeada como Andrade ou pA, de Zago *et al.* (2019), nomeada como Zago ou pZ, e prioris baseadas em ambos os estudos, nomeada Andrade+Zago ou pZA. Para Patchouli foi utilizado apenas o estudo de Zago *et al.* (2019) como fonte de informação a priori.

4.3 MODELAGEM

Assume-se que o fenômeno estudado é acerca do crescimento micelial radial do fungo *B. cinerea* sob efeito dos óleos essenciais avaliados, descrito pela variável diâmetro d (Φ , mm) (expressão 4.1), denotada por Y , em que é descrita em função do tempo, denotado pela covariável x , pelo modelo logístico de crescimento adotado:

$$y_{ij} = \frac{\beta_1}{1 + \exp[-\beta_3(x_{ij} - \beta_2)]} + e_{ij}. \quad (4.2)$$

Considerando que o erro aleatório é independente e identicamente distribuído, com distribuição Normal, denotada como $e_{ij} \sim N(0, \sigma_e^2)$, a função de verossimilhança para cada tratamento é expressa por:

$$L(\theta|y) = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^J \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{\frac{n}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J (y_{ij} - \mu_j)^2 \right], \quad (4.3)$$

em que n é o número de repetições de cada tratamento, com $n = 9$ ou $n = 7$, no caso do tratamento Melaleuca. J é o número total de dias, com $J = 11$. O espaço paramétrico é dado por $\sigma > 0$ e $\mu_j \in [-\infty; +\infty]$. Assim, considerando $y \sim N(\mu, \tau)$ pela pressuposição do erro, o parâmetro μ é dado pela esperança de Y em função de x , tal que $E[Y|x_j] = \mu_j$, de forma a obter uma média por tempo j (4.4):

$$\mu_j = \frac{\beta_1}{1 + \exp[-\beta_3(x_j - \beta_2)]} + \tilde{e}_j, \quad (4.4)$$

em que $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ são os parâmetros do modelo que assumem diferentes valores de acordo com cada tratamento. O termo \tilde{e}_j denota a esperança do erro, $E[e_j]$. A análise dos tratamentos de forma independente implica no ajuste do modelo 4.4 para cada um dos quatro tratamentos, em que cada um possui uma função de verossimilhança correspondente.

O parâmetro β_1 é interpretado como o diâmetro d máximo do fungo, em mm, β_2 está associado à inflexão da curva, sendo medido em dias. Segundo Vismara (2019), a estimativa deste parâmetro pode ser útil na definição do tempo de prateleira do produto pós-colheita em sistema fechado. O parâmetro β_3 corresponde à taxa de crescimento (mm/dia) e determina a eficiência do tratamento, pois quanto menor os valores estimados, menor a velocidade de crescimento do fungo.

Em estudos com dados longitudinais os resíduos podem carregar dependência devido às medidas repetidas ao longo do tempo. A ausência de independência nos resíduos foi avaliada pelo teste de Box-Pierce, conforme Moretin e Tolo (1986). Pereira *et al.* (2022) apontam a importância de considerar a autocorrelação na modelagem para validar os resultados e o processo de inferência. Para analisar a autocorrelação residual e a ordem correspondente para cada tratamento, foram utilizados gráficos FAC/FACP (função de autocorrelação/ função de autocorrelação parcial).

Como forma de considerar a autocorrelação na modelagem, foi incorporada uma estrutura autorregressiva para os erros da ordem correspondente a de cada tratamento, em que é atribuído ao termo e_{ij} do modelo de ajuste de cada tratamento (4.2) a estrutura autorregressiva selecionada. Para definir a estrutura adequada foram comparados os ajustes dos modelos com diferentes estruturas AR (Tabela 4), em que AR(1) corresponde à estrutura de primeira ordem (4.6), AR(2) de segunda ordem com ambos parâmetros (4.7) e AR(2*) de segunda ordem apenas com parâmetro ϕ_2 (4.8), com notação em asterisco para diferenciar. Este último caso do processo de segunda ordem é possível com a justificativa de que apenas o parâmetro ϕ_2 é significativo, como exemplifica Moretin (2006).

Assim, ϕ_1 e ϕ_2 são os parâmetros autorregressivos, $e_{i,j}$, $e_{i,j-1}$ e $e_{i,j-2}$ correspondem aos resíduos da observação i , nos tempos j , $j - 1$ e $j - 2$, respectivamente. O termo u_{ij} é chamado ruído

Tabela 4 – Estruturas autorregressivas (AR) para os erros e_{ij} .

Ordem AR	Estrutura e_{ij}	
sem AR	$e_{ij} = u_{ij}$	(4.5)
AR(1)	$e_{ij} = \phi_1 e_{i,j-1} + u_{ij}$	(4.6)
AR(2)	$e_{ij} = \phi_1 e_{i,j-1} + \phi_2 e_{i,j-2} + u_{ij}$	(4.7)
AR(2*)	$e_{ij} = \phi_2 e_{i,j-2} + u_{ij}$	(4.8)

Fonte: Elaborado pelos autores.

branco, com distribuição Normal $N(0, \sigma_u^2)$. A expressão 4.5 corresponde à estrutura com erros independentes, sem estrutura AR. Nas expressões 4.6, 4.7 e 4.8 são consideradas as estruturas AR, e assumindo a estacionariedade do processo AR segundo Pereira *et al.* (2022), o espaço paramétrico de ϕ_p é dado por $[-1; 1]$.

A seleção da estrutura dos erros do modelo para cada tratamento considerou como critério decisivo a significância dos parâmetros autorregressivos verificada pelo teste de hipótese fundamentado no Fator de Bayes. Nos casos em que todos os parâmetros avaliados são significativos, os valores de DIC foram utilizados para fins comparativos. Assim, ao ajustar o modelo com estrutura AR(p) da ordem suspeita, foi verificada primeiramente a significância do parâmetro ϕ_p . Para isso foi utilizado Fator de Bayes para verificar se o parâmetro autorregressivo é positivo ou negativo a partir da suspeita obtida da distribuição do mesmo. Em cada caso foi selecionado o par de hipóteses que sustenta a suspeita, como mostra a Tabela 5:

Tabela 5 – Hipóteses do Fator de Bayes para avaliar a significância do parâmetro ϕ_p .

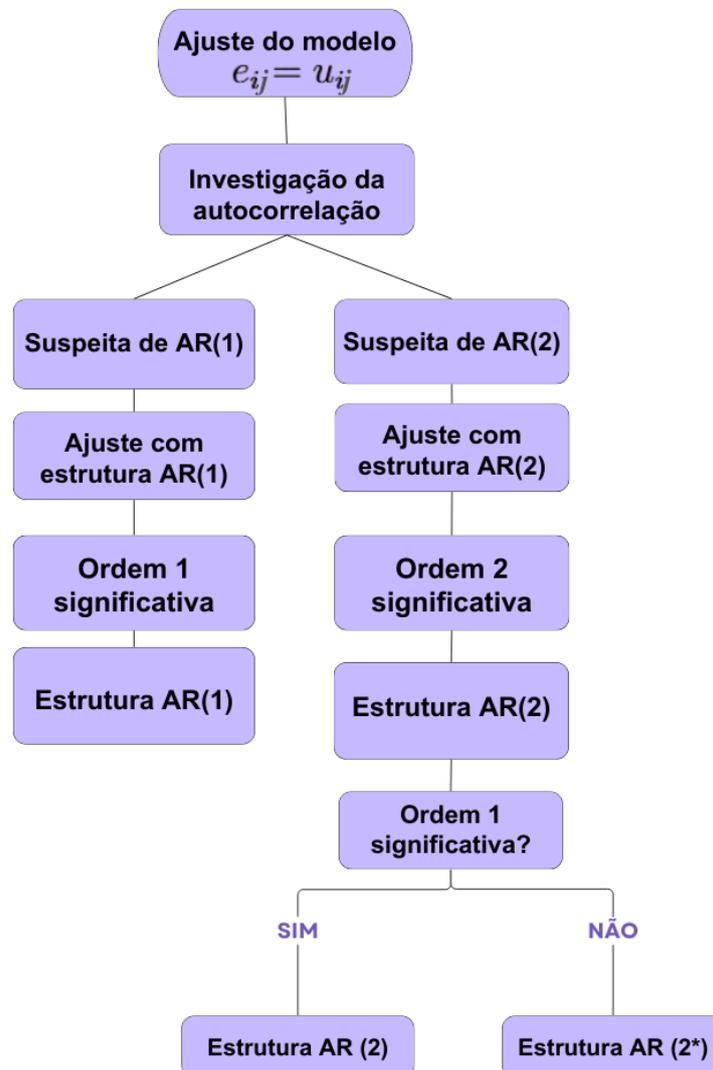
Suspeita de $\phi_p > 0$	Suspeita de $\phi_p < 0$
$H_0 : \phi_p \leq 0$	$H_0 : \phi_p \geq 0$
$H_1 : \phi_p > 0$	$H_1 : \phi_p < 0$

Fonte: elaborado pelos autores.

Ao obter evidência decisiva ou forte em favor de H_1 , conclui-se que ϕ_p é significativo. Quando necessário, foi utilizada a comparação de DIC, em que foi selecionada a estrutura que apresenta o menor valor quando a diferença do DIC entre os modelos é maior que 5 (Spiegelhalter *et al.*, 2002). A Figura 2 indica o processo desde o primeiro ajuste dos dados originais com estrutura de erros independentes ($e_{ij} = u_{ij}$), passando pela investigação da autocorrelação residual até às evidências da estrutura adequada. Por fim, após a seleção das estruturas de acordo com os critérios decisivos,

foi utilizado teste de independência de Box-Pierce para verificar a dependência dos resíduos após a incorporação da estrutura AR.

Figura 2 – Fluxograma da análise da autocorrelação até a seleção da estrutura AR(p).



Fonte: Elaborado pelos autores.

4.4 DISTRIBUIÇÃO A PRIORI

4.4.1 Priori Não Informativa

No atual estudo, assume-se que $y_i \sim N(\mu, \sigma^2)$ pela suposição de normalidade dos erros (Seção 4.3). É válido ressaltar que, por convenção bayesiana, o parâmetro variância σ^2 é substituído pela

precisão τ , em que $\tau = 1/\sigma^2$. Para os parâmetros do modelo logístico ajustado (4.4), β_k , com $k = 1,2,3$ foi assumida distribuição Normal como priori não informativa, com densidade dada pela expressão 4.9. Para os hiperparâmetros da priori não informativa foram assumidos os valores $\mu_{\beta_k} = 0$ e $\tau_{\beta_k} = 0,0001$ (4.10). Para precisão τ foi utilizada a mesma priori não informativa em todos os casos, dada pela distribuição Gama (4.12).

$$p(\beta_k) = \left(\frac{\tau_{\beta_k}}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\tau_{\beta_k}(\beta_k - \mu_{\beta_k})^2}{2}\right] \quad (4.9)$$

$$\beta_k \sim N(0, 0.0001) \quad (4.10)$$

Os três parâmetros β possuem mesmo espaço paramétrico que a distribuição Lognormal, sendo os reais positivos com possível assimetria. Dessa forma, foi adotada distribuição Lognormal para todos os parâmetros β , com hiperparâmetros $\mu_{L\beta_k}$ referente à posição e $\tau_{L\beta_k}$ como parâmetro de forma (4.11). No Apêndice B são apresentados mais detalhes sobre a distribuição Lognormal.

Geralmente é atribuída distribuição Gama Inversa para a variância (Mazucheli; Souza; Philippen, 2011; Silva *et al.*, 2008), portanto, é válido atribuir uma priori Gama, com hiperparâmetros a_0 e b_0 , para a precisão (4.12), já que esta é dada pelo inverso da variância.

Portanto, as estruturas das prioris citadas podem ser escritas como:

$$p(\beta_k) = \frac{1}{\beta_k} \left(\frac{\tau_{L\beta_k}}{\sqrt{2\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\tau_{L\beta_k}(\ln(\beta_k) - \mu_{L\beta_k})^2}{2}\right] \quad (4.11)$$

$$p(\tau) = \frac{b_0^{a_0} \tau^{a_0-1} e^{-b_0\tau}}{\Gamma(a_0)} \quad (4.12)$$

Assim, considerando priori não informativa, foram atribuídas priori vagas para todos os parâmetros. Para β_k com distribuição Lognormal foram assumidos para os hiperparâmetros $\mu_{L\beta_k} = 0$ e $\tau_{L\beta_k} = 0,04$ (4.13).

$$\beta_k \sim LN(0; 0,04) \quad (4.13)$$

Para precisão, foi assumida distribuição Gama, com hiperparâmetros $a_0 = 0,1$ e $b_0 = 0,001$. (4.14).

$$\tau \sim G(0,1; 0,001) \quad (4.14)$$

Para os parâmetros da estrutura AR dos resíduos do ajuste, ϕ_p , com $p = 1,2$, de acordo

com a definição das estruturas 4.6,4.8 e 4.7, foi assumida distribuição Uniforme, $U(-1,1)$ (4.15), considerando a condição de estacionariedade e priori não informativa, como apresentado em Pereira *et al.* (2022).

$$\phi_p \sim U(-1, 1) \quad (4.15)$$

4.4.2 Priori Informativa

Para definir a distribuição das prioris informativas, foram testadas, além da distribuição Normal, as distribuições Uniforme e Lognormal. A distribuição Uniforme foi utilizada na tentativa de reproduzir o conhecimento sobre os fenômenos representados pelos parâmetros β . No entanto, problemas de indeterminação no programa *OpenBUGS* impediram a geração das cadeias a posteriori, deixando que a distribuição fosse uma opção. A distribuição Normal foi desprezada quando os resultados com uso da Lognormal foram mais promissores. Resultados obtidos por priori Normal podem ser consultados na Tabela 22 no Apêndice A.

Os hiperparâmetros para os parâmetros β para ambos tratamentos Testemunha e Patchouli foram definidos com base nas estimativas obtidas das fontes de informação (Tabela 6). Para isso foram realizados ajustes do modelo logístico sem estrutura AR (4.4) utilizando abordagem bayesiana com priori não informativa com os dados providos de cada informação. As estimativas μ_0 e σ_0 obtidas destes ajustes são apresentadas na Tabela 6.

Tabela 6 – Estimativas dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 obtidas das fontes de informação correspondentes.

Tratamento	Fonte da informação	β_1		β_2		β_3	
		μ_0	σ_0	μ_0	σ_0	μ_0	σ_0
Testemunha	pA	85,576	5,638	2,454	0,180	1,363	0,220
	pZ	74,517	2,647	2,083	0,134	1,192	0,146
	pZA	79,891	3,887	2,268	0,150	1,338	1,442
Patchouli	pZ	84,3601	42,349	5,4276	1,6301	0,6304	0,2149

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: Médias e desvio padrão correspondem a resultados a posteriori obtidos dos ajustes utilizando dados das informações a priori.

A partir das estimativas μ_0 , para média e σ_0 , para desvio padrão, foram obtidos os hiperparâmetros das prioris com distribuição Lognormal (μ_L, τ_L) , por meio da solução do seguinte sistema não linear (Pinsky; Karlin, 2010):

$$\begin{cases} \exp\left(\mu_L + \frac{\sigma_L^2}{2}\right) - \mu_0 & = 0 \\ \exp(2\mu_L + \sigma_L^2) \cdot \exp[(\sigma_L^2) - 1] - \sigma_0 & = 0 \end{cases} \quad (4.16)$$

A transformação utiliza o desvio padrão σ_0 para obter o desvio padrão σ_L da distribuição Lognormal, mas adiante permanece a utilização da precisão τ_L como hiperparâmetro da distribuição. Os hiperparâmetros obtidos são apresentados na Tabela 7.

Tabela 7 – Hiperparâmetros da distribuição Lognormal correspondente a cada fonte de informação a priori dos tratamentos Testemunha e Patchouli.

Tratamento	Fonte da informação	μ_L			τ_L		
		β_1	β_2	β_3	β_1	β_2	β_3
Testemunha	pA	4,309	0,733	-0,094	819,538	246,841	67,092
	pZ	4,445	0,894	-0,362	272,699	215,904	0,669
	pZA	4,379	0,817	-0,094	422,995	229,357	1,298
Patchouli	pZ	4,322	1,648	-0,516	4,449	11,579	9,096

Fonte: Elaborado pelos autores.

As prioris foram verificadas de forma a garantir que as distribuições criadas reproduzam a informação a priori das quais foram originadas. A Tabela 8 compara os quantis das distribuições à priori informativas com os quantis e limites do intervalo HPD de 95% de credibilidade a posteriori obtidos do ajuste com priori NI (4.13) referente aos dados da informação a priori correspondente. No caso de Andrade+Zago, a informação a priori é representada pela média dos limites HPD 95% a posteriori gerado pelo ajuste referentes aos dados de cada estudo. O mesmo foi feito em relação aos quantis. Isso por esse caso ser a junção da informação de dois estudos diferentes, sendo necessário um ajuste para cada estudo para gerar as estimativas independentes.

Tabela 8 – Representação dos quantis 2,5 e 97,5% das distribuições a priori informativas comparados aos intervalos HPD 95% e quantis a posteriori gerados pelo ajuste das fontes de informação.

Informação	Parâmetros	Priori		Posteriori			
		Q 2,5%	Q 97,5%	LI	LS	Q 2,5%	Q 97,5%
Andrade	β_1	81,765	95,907	76,100	95,850	76,320	96,550
	β_2	2,336	2,794	2,124	2,775	2,143	2,810
	β_3	0,305	7,651	0,954	1,836	0,998	1,902
Zago	β_1	72,674	79,679	69,540	79,850	69,660	80,030
	β_2	1,994	2,358	1,820	2,345	1,830	2,356
	β_3	1,102	1,520	0,923	1,488	0,935	1,506
Andrade+Zago	β_1	77,222	87,775	72,830	87,835	73,140	88,545
	β_2	2,165	2,576	1,979	2,567	1,988	2,588
	β_3	0,503	5,086	93,755	1,665	0,959	1,673

Fonte: Elaborado pelos autores.

De forma a refinar as prioris informativas, foram feitas algumas transformações dos hiperparâmetros, em que as prioris baseadas em diferentes fontes de informação tiveram seu parâmetro escala τ_L multiplicado pela constante 0,5, como forma de flexibilizar a precisão. Assim, as prioris informativas para os parâmetros β_k dos tratamentos Testemunha e Patchouli podem ser genericamente escritas como:

$$\beta_k \sim LN(\mu_{L\beta_k}, \tau_{L\beta_k}), \quad (4.17)$$

em que $\mu_{L\beta_k}$ e $\tau_{L\beta_k}$ são os hiperparâmetros da priori selecionada dentre as apresentadas na Tabela 7 e seguem distribuição Lognormal com densidade expressa por 4.11.

Para avaliar as prioris informativas, o DIC foi o critério de maior prioridade, seguindo a esfera bayesiana. Nos casos em que $\Delta_{DIC} < 5$ (expressão 3.20), e portanto não se pode diferenciar as prioris, foi utilizada a amplitude do intervalo HPD de 95% de credibilidade do parâmetro β_3 , considerado sua maior relevância na avaliação do efeito do óleo essencial. Menores amplitudes implicam em maior precisão da estimação. Caso ainda não seja possível a seleção, foi selecionada a priori de menor viés médio relativo absoluto (VMRA) (expressão 4.22). A razão pela qual a amplitude HPD foi priorizada em relação ao viés foi a coerência com os objetivos do trabalho voltados ao conhecimento sobre o fenômeno, ou seja, inferência sobre os parâmetros, e não predição.

Como forma de comparar o impacto do uso de priori informativa e não informativa na precisão das estimativas dos parâmetros β foi utilizada a diferença de amplitudes (DA %) calculada da seguinte

forma:

$$DA (\%) = \frac{amp_{NI} - amp_{INF}}{amp_{NI}} \times 100, \quad (4.18)$$

em que amp_{NI} é a amplitude HPD de 95% de credibilidade gerada por priori não informativa e amp_{INF} é a amplitude gerada por priori informativa.

4.4.3 Distribuição a Posteriori

Tendo definidas as prioris não informativas e informativas para os parâmetros do modelo ajustados, a distribuição conjunta a posteriori é definida como:

$$p(\beta_k, \phi_p, \tau|y) \propto p(\beta_k) \times p(\phi_p) \times p(\tau) \times L(\beta_k, \phi_p, \tau|y), \quad (4.19)$$

em que $k = 1, 2, 3$, $p = 1, 2$ e $L(\beta_k, \phi_p, \tau|y)$ é a função de verossimilhança (4.3).

Para obtenção das distribuições marginais a posteriori, em que são obtidas as estimações dos parâmetros, foi adotado método MCMC para geração das cadeias a posteriori utilizando o programa OpenBUGS. As cadeias geradas por MCMC foram obtidas por 100 000 iterações, burn in de 20 000 e salto 100, com cadeias finais de 20 000 amostras. Para avaliar a convergência das cadeias geradas foram utilizados os critérios de Geweke, de Raftery & Lewis e de Heidelberguer & Welch. De forma que o quantil Z_g do critério de Geweke deve ser menor que 1,96, o fator de dependência de Raftery & Lewis deve ser próximo de 1 e o *valor-p* do teste de Heidelberguer & Welch deve ser não significativo ao nível de significância de 5%. Nos casos em que pelo menos um dos critérios reprovou a convergência, o processo MCMC foi refeito até que todos estivessem de acordo com as exigências. A estimação dos parâmetros foi dada pela média a posteriori, juntamente com intervalo HPD de 95% de credibilidade.

4.5 AVALIAÇÃO DO TAMANHO AMOSTRAL

Para avaliar o impacto da redução do número de amostras na precisão do modelo pela abordagem bayesiana foi realizado processo de reamostragem, em que 1000 reamostras de tamanhos $n_r = 3, 4, 5, 6, 7, 8$ foram sorteadas aleatoriamente da amostra original de todos os tratamentos ava-

liados. No caso do tratamento Melaleuca foram sorteadas reamostras dos tamanhos amostrais de 3 a 6, uma vez que o tratamento dispõe de apenas 7 repetições na amostra original. O processo de reamostragem foi realizado apenas sobre as repetições, ou seja, mantendo o número de tempos para todas as repetições sorteadas. O sorteio foi realizado pela função *sample* do R, sem reposição. Gerada a reamostra, seguiu-se o ajuste do modelo logístico (4.4) utilizando priori não informativa em todos os tratamentos. Já a priori informativa foi utilizada apenas nos ajustes dos tratamentos Testemunha e Patchouli.

Para o processo de reamostragem utilizando priori não informativa, as cadeias geradas por MCMC foram obtidas por 150 000 iterações, *burn in* de 100 000 e salto 500, com cadeias finais de 50 000 amostras. Com uso de priori informativa as cadeias foram obtidas por 100 000 iterações, *burn in* de 90 000 e salto 350. As reamostragens em que pelo menos um dos critérios reprovou a convergência foram descartadas. Os Apêndices C e D apresentam os valores máximos, mínimos e quantis dos critérios de convergência associados às reamostragens seguidas de ajuste com priori não informativa e informativa, respectivamente, que passaram nas exigências e foram incluídas nas 1000 selecionadas válidas.

4.6 Avaliação das estimativas

Para avaliar a qualidade de ajuste do modelo foram utilizadas como métricas o coeficiente R_B^2 4.20, baseado no coeficiente de determinação, o erro quadrático médio (4.21) e viés médio relativo absoluto (4.22):

$$R_B^2 = \frac{var(\tilde{y})}{var(\tilde{y}) + var(e)}, \quad (4.20)$$

$$EQM = \frac{1}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p} (\tilde{y} - y_i)^2, \quad (4.21)$$

$$VMRA = \left| \frac{1}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p} \frac{(\tilde{y} - y_i)}{y_i} \times 100 \right|, \quad (4.22)$$

em que $var(\tilde{y})$ é a variância dos valores preditos \tilde{y} , y_i são os valores observados e e são os resíduos. n_p equivale ao número de predições obtidas da reamostragem, ou seja, o produto entre a quantidade total fixa de tempos, J , e o número de observações utilizadas na reamostragem, correspondente às repetições sorteadas. O número de predições depende, portanto, do tamanho amostral n_r da reamos-

tagem.

No caso do tratamento Melaleuca, foi utilizado o viés absoluto (4.23) ao invés do relativo. Isso porque é o único tratamento que possui observações nulas e portanto gera problemas de indeterminação ao utilizar a expressão do viés relativo (4.22).

$$VMA = \left| \frac{1}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p} (\tilde{y} - y_i) \times 100 \right| \quad (4.23)$$

Para avaliar a precisão das estimativas no processo de reamostragem, foram adotados os quantis de 2,5 e 97,5% dos 1000 valores gerados na reamostragem e o intervalo HPD médio de 95% de credibilidade, dado pelas médias dos limites inferior e superior dos 1000 valores reamostrados do intervalo.

4.7 RECURSOS COMPUTACIONAIS

Para o desenvolvimento dos métodos apresentados foram utilizados os softwares R (CORE TEAM 2021) versão 4.1.1 e OpenBUGS. Os principais pacotes utilizados foram *R2OpenBUGS* para conexão do R ao OpenBUGS e *coda* para análise dos critérios de convergência das cadeias a posteriori.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 MODELAGEM

5.1.1 Definição da estrutura de erro

Com exceção do tratamento Guaçatonga, em todos os casos o teste de Box-Pierce rejeita a independência dos resíduos ao nível de significância de 5% (Tabela 9). Apesar do teste não acusar problemas na independência residual em um dos tratamentos, as demais evidências sugerem investigação mais detalhada.

Tabela 9 – *Valor-p* resultante do teste de Box-Pierce dos resíduos dos ajustes do modelo logístico sem estrutura AR ($e_{ij} = u_{ij}$) para cada tratamento.

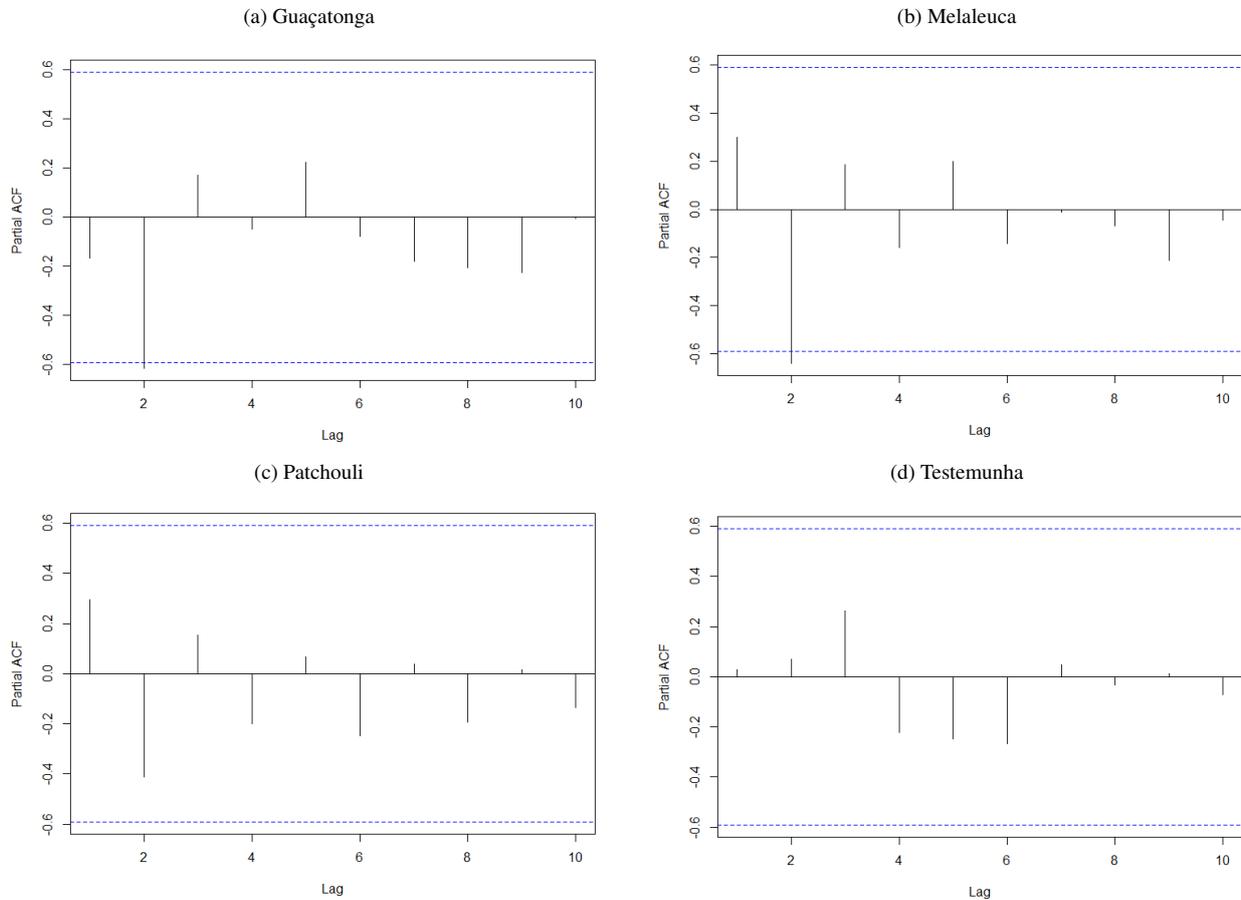
Tratamento	<i>Valor-p</i>
Melaleuca	0,002
Guaçatonga	0,088
Patchouli	0,0015
Testemunha	0,00001

Fonte: elaborado pelos autores.

Para investigar a ordem da possível autocorrelação nos resíduos foram utilizados os gráficos FACP (Figura 3), os quais apresentam as lags referentes às médias das repetições i de cada tempo j .

Em relação ao tratamento Guaçatonga, a Figura 3a indica uma suspeita de autocorrelação de ordem 2, dentre as estruturas AR de primeira e segunda ordem pré-definidas (Tabela 4). O mesmo é observado no gráfico 3b, do tratamento Melaleuca. Apesar da lag 2 não ultrapassar o limite referente à autocorrelação significativa no tratamento Patchouli (Figura 3c), a lag-2 é a que mais se aproxima do limite de significância, levantando a suspeita de autocorrelação de ordem 2. Já o tratamento Testemunha, o gráfico FACP não evidencia a ordem da autocorrelação (Figura 3d), por isso foram testadas várias estruturas, iniciando pela AR(1).

Figura 3 – Gráficos FACP das lags médias referente aos ajustes do modelo logístico sem estrutura AR ($e_{ij} = u_{ij}$) para cada tratamento.



Fonte: Elaborado pelos autores.

O primeiro critério decisivo para seleção da estrutura AR(p) é a significância dos parâmetros ϕ_p , utilizando Fator de Bayes. Antes, é preciso ter a garantia de convergência das cadeias a posteriori. A Tabela 10 apresenta os critérios de convergência dos parâmetros do modelo para cada tratamento. Assim, como todos os valores referentes ao critério de Geweke (quantil Z_g) são abaixo de 1,96, os fatores de dependência de Raftery & Lewis (F_{RL}) são próximo de 1 e os *valores-p* do teste de Heidelberger & Welch não são significativos ao nível de significância de 5% e, portanto, não há evidências de ausência de convergência das cadeias a posteriori.

Tabela 10 – Resultados dos critérios de convergência dos parâmetros autorregressivos das correspondentes estruturas de erros dos ajustes do modelo logístico de cada tratamento.

Parâmetro	Tratamento	$ Z_g $	F_{RL}	valor-p
ϕ_1	Melaleuca	1,136	1,010	0,449
	Patchouli	0,289	0,991	0,897
	Testemunha	0,970	1,000	0,340
ϕ_2	Melaleuca	1,266	0,985	0,548
	Guaçatonga	0,590	0,984	0,718
	Patchouli	0,441	0,999	0,763

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: $|Z_g|$: Módulo do quantil Z_g do critério de Geweke; F_{RL} : Fator de dependência de Raftery & Lewis; *valor-p*: referente ao teste de Heidelberguer & Welch.

Para o tratamento Guaçatonga, em que já havia suspeita de autocorrelação de ordem 2 (Figura 3a), a Tabela 11 mostra que no ajuste do modelo com estrutura AR(2) o parâmetro ϕ_2 apresenta fraca evidência pelo Fator de Bayes, implicando em sua não significância. Por outro lado, no modelo com estrutura AR(2*), o parâmetro foi significativo com evidência decisiva. Por isso, mesmo que o menor DIC seja do modelo de estrutura AR(2) (Tabela 12), o modelo com estrutura AR(2*) foi selecionado como mais adequado.

O tratamento Melaleuca, também com suspeitas de autocorrelação de ordem 2 (Figura 3b), também apresentou ambos parâmetros ϕ_1 e ϕ_2 como significativos, quando ajustado modelo com estrutura AR(2), ambos com evidência decisiva pelo Fator de Bayes (Tabela 11). Além disso, o modelo com estrutura contendo ambos os parâmetros, AR(2), apresentou menor DIC, e como a diferença de DIC entre os modelos de estrutura AR(1) e AR(2) é maior que 10 (Tabela 12), este último foi considerado o mais adequado.

Semelhante ao Melaleuca, o modelo com estrutura AR(2) também foi selecionado como melhor para o tratamento Patchouli. Ainda que neste caso o Fator de Bayes indicou evidência forte em favor da significância do parâmetro ϕ_2 (Tabela 11), o DIC favorece mais o modelo com estrutura AR(2). Ao observar a diferença entre valores de DIC de AR(2) em relação aos modelos com estrutura AR(1) e AR(2*), em ambos os casos a diferença é superior à 10 e portanto a estrutura com dois parâmetros foi selecionada.

Por fim, no tratamento Testemunha, ambos parâmetros autorregressivos apresentaram fraca evidência em relação à significância pelo Fator de Bayes (Tabela 11), quando ajustado modelo com

estrutura AR(2). Ainda que o menor DIC seja do modelo com estrutura AR(2), como o critério decisivo é a significância dos parâmetros, foi selecionada a estrutura AR(1) para este tratamento.

Tabela 11 – Resultados dos testes de significância dos parâmetros ϕ_p por Fator de Bayes em relação à hipótese H_1 .

Tratamento	Estrutura	Par	H1	FB_{H_1}	†Ev. H1	DIC
Guaçatonga	AR(1)	ϕ_1	$\phi_1 > 0$	$> 10^6$	Decisiva	346,3
	AR(2)	ϕ_1	$\phi_1 < 0$	$> 10^6$	Decisiva	308,6
		ϕ_2	$\phi_2 > 0$	2,77	Fraca	
	AR(2*)	ϕ_2	$\phi_2 < 0$	267,4	Decisiva	332,0
sem AR	545,5	
Melaleuca	AR(1)	ϕ_1	$\phi_1 < 0$	$> 10^6$	Decisiva	415,2
	AR(2)	ϕ_1	$\phi_1 < 0$	$> 10^6$	Decisiva	369,9
		ϕ_2	$\phi_2 > 0$	812,9	Decisiva	
sem AR	434,4	
Patchouli	AR(1)	ϕ_1	$\phi_1 < 0$	$> 10^6$	Decisiva	446,5
	AR(2)	ϕ_1	$\phi_1 < 0$	$> 10^6$	Decisiva	397,9
		ϕ_2	$\phi_2 > 0$	25,47	Forte	
	AR(2*)	ϕ_2	$\phi_2 < 0$	$> 10^6$	Decisiva	470,8
sem AR	636,6	
Testemunha	AR(1)	ϕ_1	$\phi_1 < 0$	$> 10^6$	Decisiva	386,7
	AR(2)	ϕ_1	$\phi_1 < 0$	1,31	Fraca	360,7
		ϕ_2	$\phi_2 < 0$	1,79	Fraca	
sem AR	479,9	

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: Linhas destacadas indicam resultados da estruturas selecionadas.

Nota: † Evidência em favor de H_1 .

Tabela 12 – Métricas de comparação de modelos com diferentes estruturas AR(p).

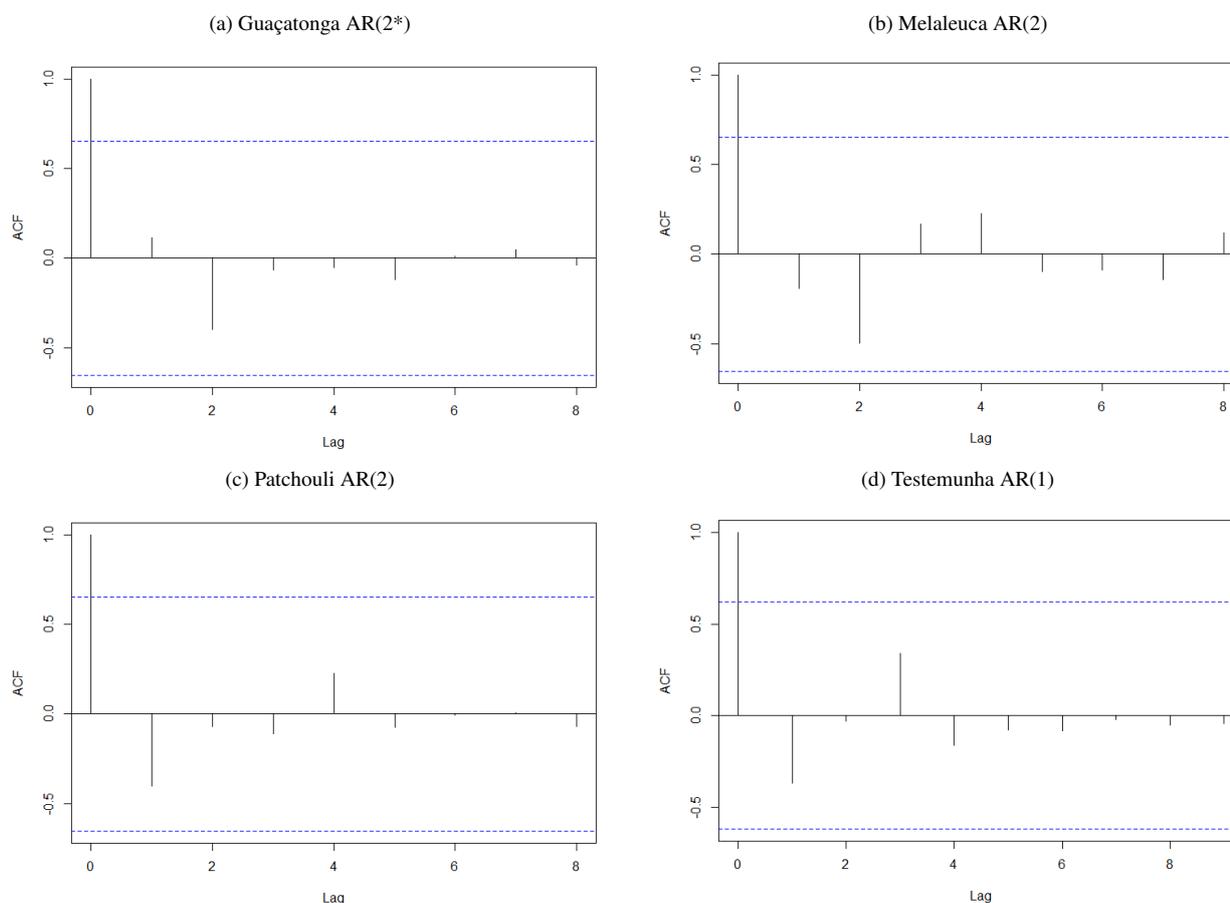
Tratamento	Estrutura	DIC	R_B^2	EQM
Melaleuca	Sem AR	545,5	0,936	62,643
	AR(1)	415,2	0,979	19,118
	AR(2)	369,9	0,978	17,646
Guaçatonga	Sem AR	434,4	0,993	4,343
	AR(1)	346,3	0,993	2,454
	AR(2)	308,6	0,982	2,275
	AR(2*)	332,0	0,975	3,117
Patchouli	Sem AR	636,6	0,953	33,456
	AR(1)	446,5	0,985	7,476
	AR(2)	397,9	0,976	6,992
	AR(2*)	470,8	0,940	17,266
Testemunha	Sem AR	479,9	0,988	6,881
	AR(1)	386,7	0,987	3,848
	AR(2)	360,7	0,949	4,453

Fonte: Elaborado pelos autores.

Após a seleção da estrutura AR mais adequada para cada tratamento, os gráficos FAC da média das repetições não indicaram presença de autocorrelação (Figura 4). Quanto à independência, em todos os tratamentos não há rejeição de independência dos resíduos ao nível de significância de 5% (Tabela 13).

Considerar a presença de autocorrelação e considerá-la na modelagem é um passo importante em estudos com dados longitudinais, em que a mesma unidade experimental é medida várias vezes ao longo do tempo. Em Pereira *et al.* (2022), os dados de crescimento em altura do cafeeiro envolvem dados longitudinais. De modo a considerar a autocorrelação residual na modelagem não linear do crescimento do cafeeiro, similarmente ao atual estudo, foi incorporada estrutura AR de ordem 1 ou 2 na modelagem, evitando o comprometimento do processo de inferência.

Figura 4 – Gráficos FAC da lags médias referente aos ajustes do modelo logístico com incorporação de estrutura AR de cada tratamento.



Fonte: Elaborado pelos autores.

Tabela 13 – *Valor-p* resultante do teste de Box-Pierce dos resíduos dos ajustes do modelo logístico com estrutura AR(p) para cada tratamento.

Tratamento	<i>Valor-p</i>
Melaleuca	0,073
Guaçatonga	0,978
Patchouli	0,798
Testemunha	0,160

Fonte: elaborado pelos autores.

A Tabela 14 apresenta a estrutura AR(p) para os erros selecionada para cada tratamento. Com a modelagem definida, a Figura 5 apresenta os gráficos dos ajustes do modelo logístico com estrutura AR(p) para os erros de cada tratamento.

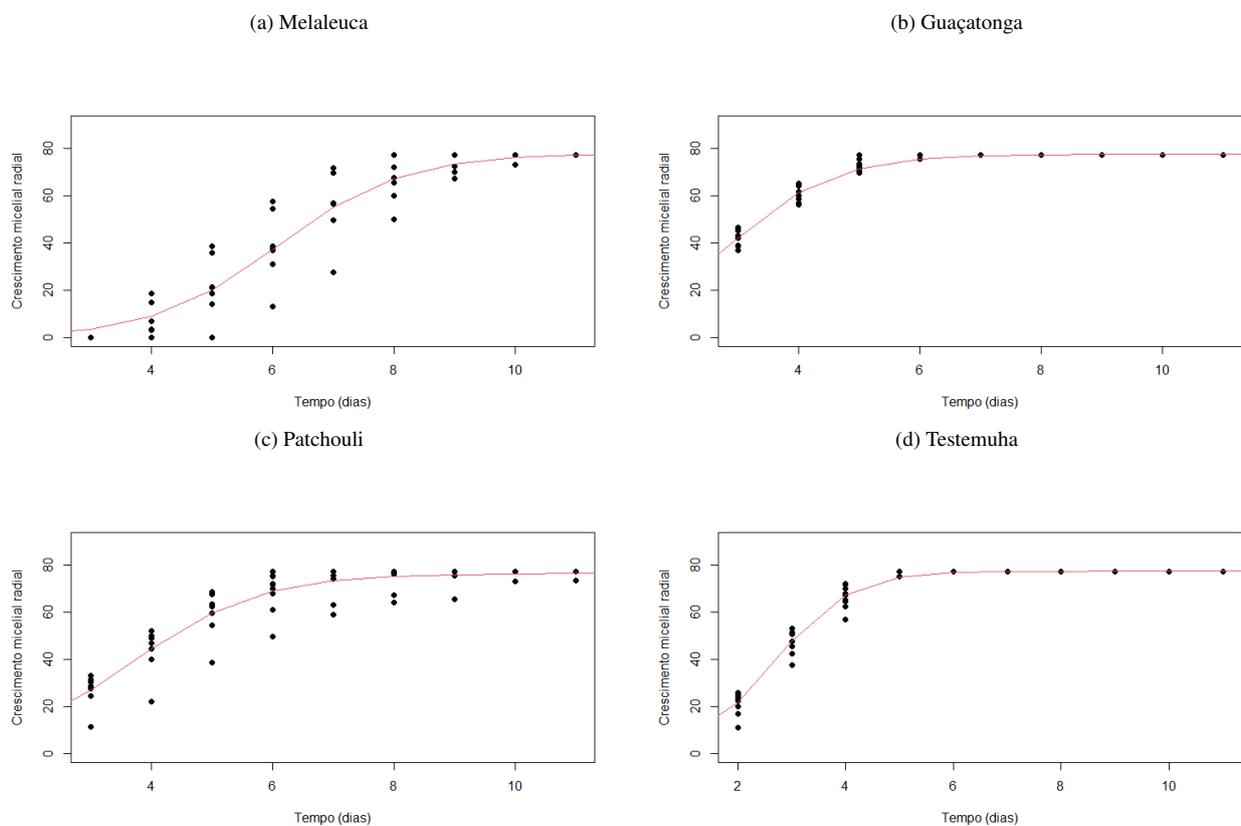
Os resultados a posteriori obtidos dos ajustes considerando as estruturas AR selecionadas são apresentados na Tabela 15. Os critérios de convergência não indicam ausência de convergência, uma

Tabela 14 – Estrutura AR(p) dos erros selecionada para o ajuste do modelo logístico de cada tratamento.

Tratamento	AR(p)	Estrutura e_{ij}
Guaçatonga	AR(2*)	$\phi_2 e_{j-2}$
Melaleuca	AR(2)	$\phi_1 e_{j-1} + \phi_2 e_{j-2}$
Patchouli	AR(2)	$\phi_1 e_{j-1} + \phi_2 e_{j-2}$
Testemunha	AR(1)	$\phi_1 e_{j-1}$

Fonte: elaborado pelos autores.

Figura 5 – Gráficos de ajuste do modelo logístico com estrutura AR(p) de cada tratamento.



Fonte: Elaborado pelos autores.

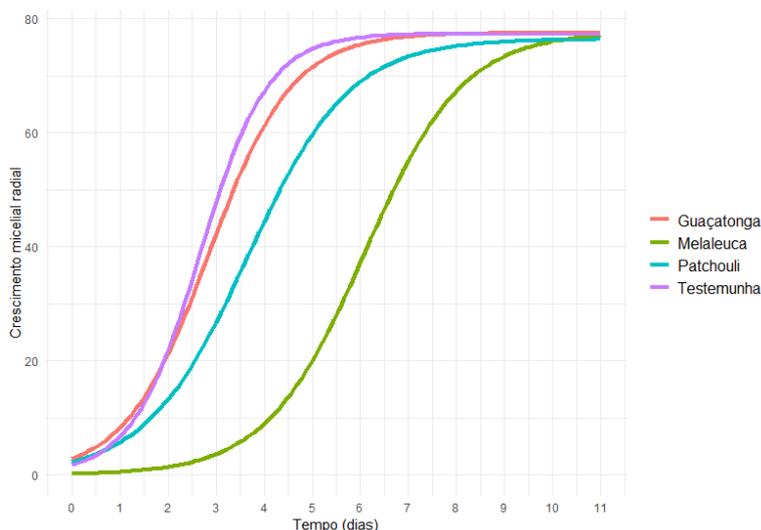
vez que para o critério de Geweke todos os valores são abaixo de 1,96, o Fator de Dependência de Raftery & Lewis são todos próximos de 1 e os *valores-p* de teste de Heidelberguer & Welch foram maiores que o nível de significância de 5%.

A média a posteriori do parâmetro β_1 indica que o crescimento máximo do fungo não varia muito entre os tratamentos. No entanto, pelo Fator de Bayes existe evidência substancial em favor da hipótese de que o parâmetro β_1 do modelo ajustado do tratamento Melaleuca é maior que de Patchouli, com $FB_{1,0} = 5,02$. Em comparação a Guaçatonga e Testemunha, existe evidência forte,

$FB_{1,0} = 32,5$, e decisiva, $FB_{1,0} > 100$, respectivamente, em favor da hipótese de que o parâmetro β_1 de ambos é maior que do tratamento Patchouli. Logo, os resultados indicam que o óleo essencial Patchouli reduziu o crescimento máximo do fungo *B. cinerea*, com $\beta_1 = 76,414$ mm (Tabela 15).

O parâmetro β_2 apresentou a maior estimativa no tratamento Melaleuca. Como o parâmetro indica a mudança de concavidade da curva, o resultado pode ser interpretado de forma que o óleo essencial Melaleuca atrasou mais o início do crescimento do fungo em relação aos demais, em que a mudança de concavidade ocorreu com $\beta_2 = 6,087$ dias (Tabela 15). Nas Figuras 5 e 6 é nítida a diferença do momento de inflexão da curva do Melaleuca entre os demais tratamentos. Testemunha, Patchouli e Guaçatonga também apresentaram aumento do parâmetro β_2 , em que Patchouli apresentou a segunda maior estimativa com $\beta_2 = 3,655$. Vismara (2019) afirma que a interpretação de β_2 pode ser útil para indicar o tempo de vida de prateleira do produto alvo do fungo, como frutas e vegetais no período pós-colheita. Quanto ao β_3 , a interpretação deste parâmetro está associada à taxa de crescimento do fungo e é crucial na avaliação da atividade antifúngica dos óleos essenciais avaliados. Observa-se na Tabela 15 que os menores valores correspondem aos tratamentos Melaleuca e Patchouli, em que os tratamentos geraram crescimento de $\beta_3 = 0,974$ e $\beta_3 = 0,945$ mm/dia, respectivamente. Apesar de menor, o tratamento Guaçatonga também apresentou redução da taxa de crescimento com $\beta_3 = 1,15$ mm/dia.

Figura 6 – Curvas resultantes dos ajustes do modelo logístico com estrutura AR para os erros e priori não informativa de todos os tratamentos.



Fonte: Elaborado pelos autores.

Pode-se dizer pela comparação dos intervalos HPD de 95% de credibilidade, que os óleos essenciais Melaleuca, Patchouli e Guaçatonga reduziram a velocidade de crescimento do fungo em relação ao tratamento sem adição de óleo essencial (Testemunha). Em relação aos valores do erro quadrático médio (Tabela 15), estes são próximos entre si com exceção do Melaleuca, com EQM um pouco acima dos demais, devido ao menor tamanho de amostra.

Embora as estimativas pontuais sejam similares às obtidas por Vismara (2019) utilizando abordagem frequentista, variações importantes com os intervalos das estimativas obtidas neste estudo pela abordagem bayesiana geraram divergências de conclusões. Esta comparação de resultados entre os estudos é mais detalhada à frente na Seção 5.3, por enquanto destacam-se as diferenças observadas, até o momento, em relação às estimativas dos parâmetros apresentadas na Tabela 15. O atual estudo constatou redução significativa (considerando intervalo HPD de 95% de credibilidade) do parâmetro β_1 do tratamento Patchouli e a redução significativa da taxa de crescimento representada pelo parâmetro β_3 pelo tratamento Guaçatonga, indicando que todos os óleos avaliados apresentaram algum efeito relacionado a algum parâmetro β comparado ao Testemunha. Essa diferença entre as conclusões pode ser explicada pela incorporação da estrutura de autocorrelação no modelo logístico de ajuste correspondente a cada tratamento, considerando que os dados foram coletados ao longo do tempo. Pereira *et al.* (2022) ressaltam a importância de considerar a dependência temporal entre mesmas observações medidas em diferentes tempos, caso contrário pode comprometer o processo de estimação e inferên-

Tabela 15 – Estimativa (média a posteriori), intervalo HPD de 95% e resultados dos critérios de convergência dos parâmetros β_1 (mm), β_2 (dia), β_3 (mm/dia), τ e ϕ_p do modelo logístico ajustado de cada tratamento e métricas R_B^2 e EQM, considerando priori não informativa.

Melaleuca							Guaçatonga					
Par	Est	LI	LS	$ Z_g $	F_{RL}	valor-p	Est	LI	LS	$ z_g $	F_{RL}	valor-p
β_1	77,661	75,250	80,030	0,425	1,010	0,483	77,455	76,900	77,950	0,913	1,000	0,402
β_2	6,087	5,946	6,226	0,855	1,020	0,482	2,844	2,781	2,904	0,291	1,010	0,850
β_3	0,974	0,871	1,085	0,444	1,010	0,960	1,150	1,061	1,232	0,383	0,991	0,893
τ	0,012	0,053	0,025	0,186	0,996	0,803	0,306	0,211	0,400	0,001	1,000	0,443
ϕ_1	-0,961	-1,000	-0,889	1,136	1,010	0,449
ϕ_2	0,241	0,105	0,376	1,266	0,985	0,548	-0,250	-0,437	-0,071	0,590	0,984	0,718
R_B^2	0,978	0,970	0,985	0,240	1,010	0,957	0,982	0,967	0,983	0,200	1,020	0,510
EQM	17,646						3,117					

Patchouli							Testemunha					
Par	Est	LI	LS	$ Z_g $	F_{RL}	valor-p	Est	LI	LS	$ Z_g $	F_{RL}	valor-p
β_1	76,414	75,410	77,320	0,425	1,010	0,483	77,333	76,760	77,840	0,466	1,030	0,836
β_2	3,655	3,581	3,731	0,855	1,020	0,482	2,660	2,619	2,699	0,185	1,010	0,904
β_3	0,945	0,872	1,030	1,068	1,010	0,960	1,417	1,336	1,495	0,292	1,020	0,883
τ	0,136	0,095	0,180	0,186	0,996	0,803	0,250	0,177	0,325	0,307	1,000	0,872
ϕ_1	-0,947	-1,000	-0,855	0,289	0,991	0,897	-0,674	-0,817	-0,519	0,970	1,000	0,340
ϕ_2	0,121	0,005	0,247	0,441	0,999	0,763
R_B^2	0,976	0,967	0,983	0,240	1,010	0,957	0,987	0,983	0,991	0,201	1,030	0,889
EQM	0,699						3,848					

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: LI/LS: Limite inferior e superior médios dos intervalos HPD de 95%. Par: parâmetro. Est: média a posteriori. Não foi gerada cadeia a posteriori para EQM. $|Z_g|$: Módulo do quantil Z_g do critério de Geweke; F_{RL} : Fator de dependência de Raftery & Lewis; valor-p: referente ao teste de Heidelberguer & Welch.

cia. Mazucheli, Souza e Philippsen (2011) também pontuam que no cenário em que pressuposições assumidas aos resíduos não são atendidas, as inferências podem produzir resultados imprecisos principalmente quando a amostra é pequena. O papel da abordagem bayesiana neste caso foi essencial por permitir e facilitar a incorporação de estrutura AR aos erros do modelo não linear adotado.

5.1.2 Definição da priori informativa

A priori Zago (pZ) foi selecionada para ambos os tratamentos Testemunha e Patchouli, utilizando a flexibilização do hiperparâmetro precisão τ_L apresentado na Tabela 7, em que foi definido o hiperparâmetro $0,5\tau_L$. Detalhes do processo da definição das prioris informativa são apresentados no Apêndice G. Por fim, os valores dos hiperparâmetros para a distribuição a priori informativa Lognormal são apresentadas a seguir na Tabela 16.

A Tabela 17 apresenta os resultados a posteriori do ajuste do modelo com priori informativa

Tabela 16 – Valores dos hiperparâmetros para a distribuição a priori informativa selecionada para os tratamentos Testemunha e Patchouli.

Tratamento	μ_L			τ_L		
	β_1	β_2	β_3	β_1	β_2	β_3
Testemunha	4,309	0,733	0,179	409,769	123,420	33,546
Patchouli	4,323	1,648	-0,516	2,225	5,789	4,548

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: Hiperparâmetros posição μ_L e escala τ_L da distribuição Lognormal.

dos tratamentos Patchouli e Testemunha, junto aos critérios de convergência. Pelo critério de Geweke, o módulo dos valores da estatística Z_g são todos abaixo de 1,96. O Fator Dependência de Raftery & Lewis são todos próximos de 1 e todos os *valores-p* são maiores que o nível de 5% de significância para o teste de Heidelberguer & Welch. Assim, não há evidências de ausência de convergência das cadeias a posteriori para ambos os tratamentos.

Todos os parâmetros β do modelo ajustado para cada tratamento foram significativos, com $0 \notin HPD_{95\%}$, considerando priori não informativa (Tabela 15) e priori informativa (Tabela 17), bem como os parâmetros autorregressivos ϕ_1 . Mesmo que o intervalo HPD de 95% de credibilidade do parâmetro ϕ_2 do tratamento Patchouli inclua o valor 0, o valor do limite inferior do intervalo é próximo de 0, sugerindo uma maior verificação da hipótese para conclusão de significância. Para isso foi utilizado o Fator de Bayes, em que foi constatada evidência decisiva ($FB_{1,0} > 100$) em favor da hipótese $H_1 : \phi_2 > 0$. Conclui-se então que o uso da priori informativa não alterou a significância do parâmetro ϕ_2 do tratamento Patchouli.

A Tabela 17 também mostra que o tratamento Patchouli apresenta a menor estimativa de β_1 , em que o crescimento máximo do fungo é $\beta_1 = 6,444$ mm. Como os valores da estimativa de Patchouli e o limite inferior do intervalo HPD de 95% de credibilidade de Testemunha são próximos, faz-se necessário a realização do teste de hipótese utilizando Fator de Bayes para verificar a significância da diferença entre os parâmetros. Assim, foi verificada forte evidência ($FB_{1,0} = 16,76$) de que a diferença é significativa e Patchouli tem o menor β_1 .

Quanto ao parâmetro β_2 , Patchouli apresenta a maior estimativa, em que a mudança de concavidade ocorre com $\beta_2 = 3,655$ dias. A diferença do Testemunha indica que o óleo essencial atrasa a transição de fases do crescimento do fungo. Por fim, a taxa de crescimento representada pelo parâmetro β_3 também favorece Patchouli por apresentar a menor estimativa, com $\beta_3 = 0,941$ (mm/dia), o que indica que o óleo essencial desacelerou o crescimento. Tais resultados corroboram com a conclusão

Tabela 17 – Estimativa (média a posteriori), intervalo HPD de 95% e critérios de convergência dos parâmetros β_1 (mm), β_2 (dia) e β_3 (mm/dia) do modelo logístico com estrutura AR ajustado e das métricas R_B^2 e EQM dos tratamentos Testemunha e Patchouli, considerando priori informativa.

Par	Patchouli						Testemunha					
	Est	LI	LS	$ Z_g $	F_{RL}	valor-p	Est	LI	LS	$ Z_g $	F_{RL}	valor-p
β_1	76,444	75,490	77,350	0,005	1,030	0,347	77,324	76,770	77,820	1,120	1,000	0,769
β_2	3,655	3,582	3,731	1,228	1,010	0,961	2,656	2,615	2,693	0,220	1,040	0,841
β_3	0,941	0,862	1,013	0,936	0,990	0,340	1,411	1,334	1,484	1,166	1,020	0,245
τ	0,136	0,093	0,178	1,176	1,040	0,660	0,249	0,176	0,322	0,532	0,997	0,650
ϕ_1	-0,947	-1,000	-0,852	0,617	1,010	0,758	-0,674	-0,833	-0,530	0,240	1,040	0,981
ϕ_2	0,120	-0,006	0,243	0,387	1,030	0,907
R_B^2	0,976	0,967	0,983	0,708	1,030	0,888	0,987	0,983	0,991	0,440	0,962	0,854
EQM	6,992	3,852

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: LI/LS: Limite inferior e superior médios dos intervalos HPD de 95%. Par: parâmetro. Est: estimativa. $|Z_g|$: Módulo do quantil Z_g do critério de Geweke; F_{RL} : Fator de dependência de Raftery & Lewis; *valor-p*: referente ao teste de Heidelberguer & Welch.

dos resultados obtidos por priori não informativa apresentada na seção anterior.

Como forma de expandir a aplicação bayesiana explorada, o atual estudo disponibiliza os códigos em R utilizados na modelagem com incorporação de estrutura AR aos erros do modelo, com priori informativa e não informativa. Além dos apresentados nos Apêndices E e F, os códigos também estão disponíveis na plataforma GitHub.

5.2 ANÁLISE DO TAMANHO AMOSTRAL

5.2.1 Priori Não Informativa

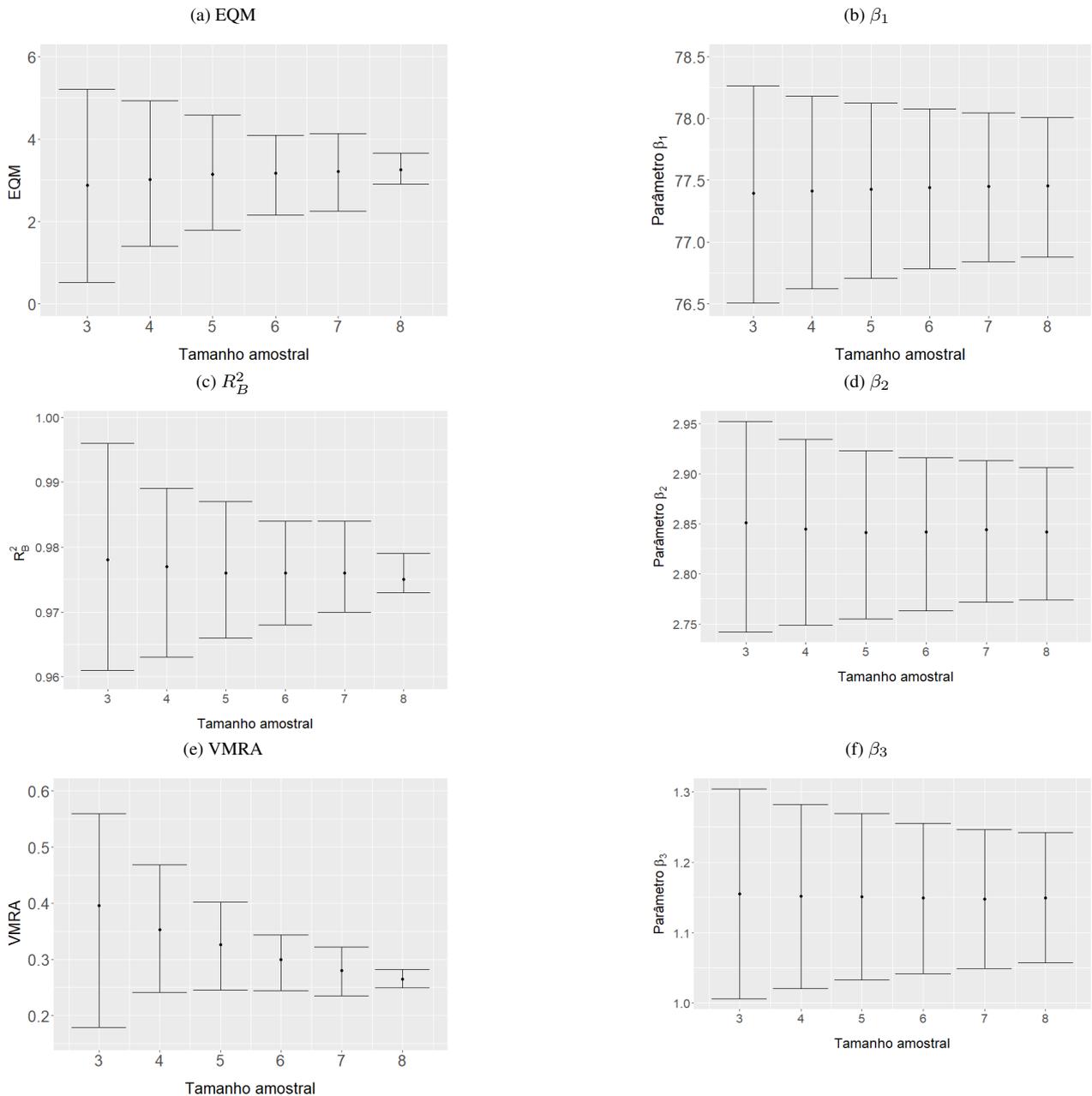
A avaliação do tamanho amostral pelo processo de reamostragem apresenta estimativas e intervalos das métricas erro quadrático médio (EQM), coeficiente R_B^2 e viés médio relativo absoluto (VMRA) ou viés médio absoluto (VMA), bem como dos parâmetros β do modelo logístico ajustado com estrutura AR com priori não informativa para todos os tratamentos e priori informativa apenas para os tratamentos Testemunha e Patchouli (como será visto na próxima seção). Nas Figuras 7 à 12, as estimativas pontuais representadas nos gráficos correspondem às médias das médias a posteriori das 1000 reamostras de cada tamanho amostral avaliado dos tratamentos correspondentes. No caso das métricas (Figuras 7, 8, 9 e 11), as barras de erro representam quantis de 2,5 e 97,5% das 1000 reamostras geradas. No caso dos parâmetros (Figuras 7, 8, 10 e 12), as barras de erro representam

os intervalos HPD de 95% de credibilidade, em que são apresentadas as médias dos limites inferior e superior médios das 1000 reamostras.

Em relação ao EQM e ao coeficiente R_B^2 , não parece haver grande alteração com o aumento do tamanho da amostra, com atenção apenas para Melaleuca que apresenta os maiores valores de EQM (Figura 8a), cujo motivo possivelmente está atrelado ao menor número de repetições.

O comportamento mais evidente é do VMRA, principalmente no tratamento Guaçatonga (Figura 7e), em que tende a diminuir com aumento do tamanho amostral. O mesmo pode ser observado no comportamento do VMA retratado do tratamento Melaleuca. Neste tratamento é apresentado o viés médio absoluto ao invés do viés médio relativo devido à presença de observações nulas que ocorrem apenas nesse tratamento, o que gera indeterminação da expressão do viés relativo (Figura 8e). A redução do viés com o aumento do tamanho amostral também é observado no estudo de Carvalho, Beijo e Muniz (2017), no qual estudos de simulação considerando ajuste da isoterma de Langmuir por abordagem bayesiana, foi evidenciado, pela redução do viés, um aumento de acurácia com o aumento do tamanho amostral. Apesar da diminuição aparente da estimativa do VMRA com a redução do tamanho amostral, os intervalos HPD de 95% de credibilidade são todos sobrepostos indicando que não existe diferença entre as estimativas. Isso evidencia a possibilidade de se utilizar menores amostras possíveis obtendo mesmo grau de acurácia. No tratamento Guaçatonga, o viés sofre quedas mais bruscas nos menores tamanhos amostrais, a partir de $nr = 6$, a variação é mais branda (Tabela 7). Isso pode indicar que a redução de 3 repetições, no caso deste tratamento, não altera o viés de forma expressiva.

Figura 7 – Estimativas das métricas EQM (a), R_B^2 (c) e VMRA (e) e dos parâmetros β_1 (b), β_2 (d) e β_3 (f) do tratamento Guaçatonga em relação ao tamanho da amostra avaliada considerando priori não informativa.



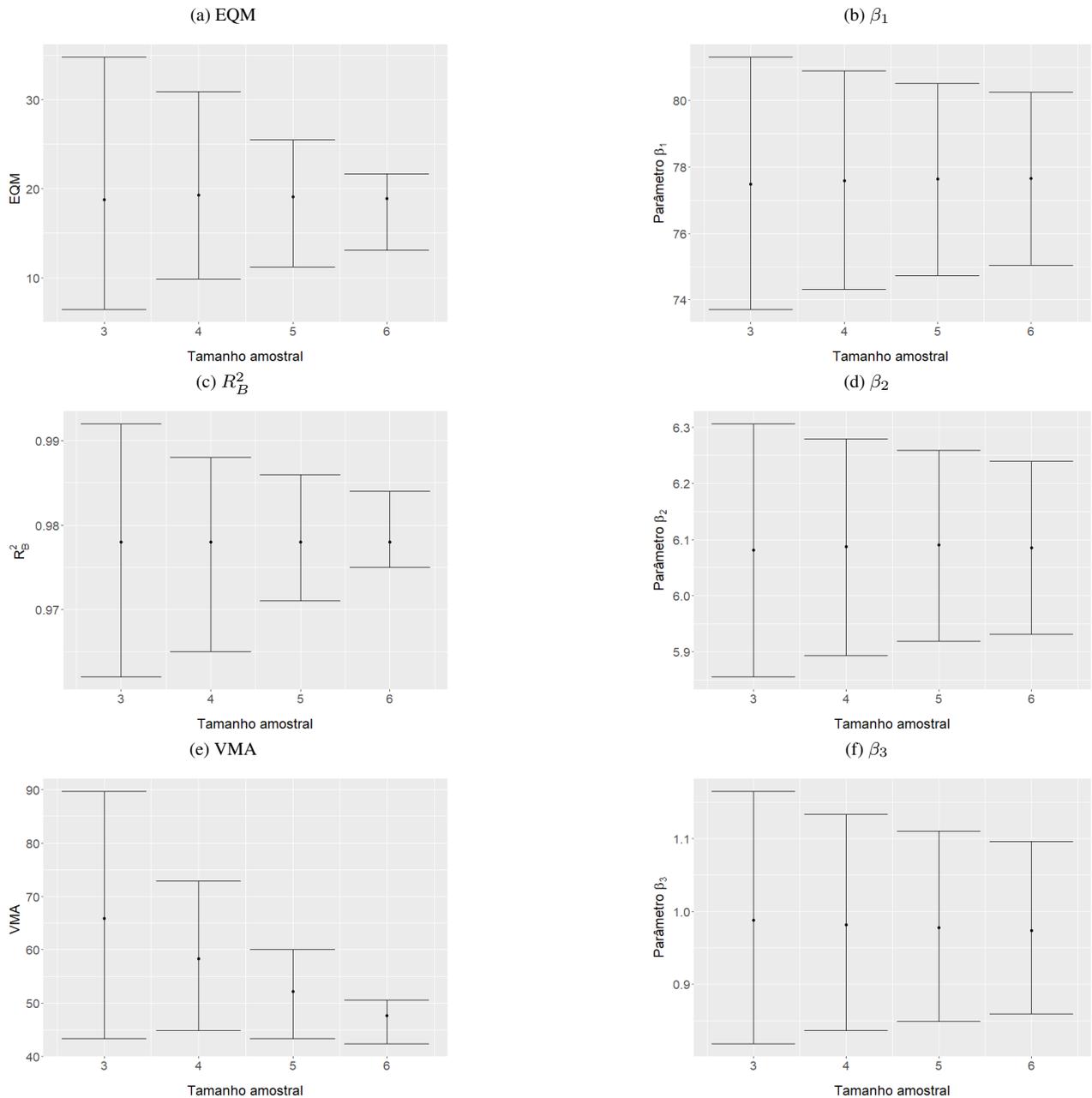
Fonte: Elaborado pelos autores.

Quanto às demais métricas e os parâmetros, os gráficos nas Figuras 7 e 8 mostram que as médias não sofreram grande alteração em relação aos tamanhos amostrais, levando em conta a sobreposição dos intervalos HPD de 95% de credibilidade. Em todos os casos há ganho de precisão com o aumento do tamanho amostral, representado pela redução das amplitudes dos quantis e intervalos HPD de 95%. Tal comportamento é esperado devido ao aumento de informação com a adição de repetições. Os tratamentos Guaçatonga, Testemunha e Patchouli permitem observar melhor uma

tendência relacionada ao aumento do tamanho amostral por contarem com mais repetições que o Me-laleuca. Também foi observado um comportamento de redução do coeficiente de variação (CV) das médias com o aumento do tamanho amostral (Tabela 18). Tais resultados são observados em todos os tratamentos analisados. Carvalho, Beijo e Muniz (2017) também observaram aumento da precisão das estimativas do parâmetro estudado por meio da redução da amplitude do intervalo HPD. Xiao & Li (2020), em seu estudo de avaliação de métodos de estimação em modelos não lineares com dados longitudinais, também observaram redução do desvio padrão, além do viés, com o aumento do tamanho amostral para os três métodos avaliados com ajuste do modelo com estrutura AR(1).

Tais resultados podem ser considerados na determinação do tamanho da amostra em experimentos semelhantes, assumindo custo de precisão e acurácia junto aos custos financeiros, dentre outros envolvidos na experimentação.

Figura 8 – Estimativas das métricas EQM (a), R_B^2 (c) e VMA (e) e dos parâmetros β_1 (b), β_2 (d) e β_3 (f) do tratamento Melaleuca em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa.



Fonte: Elaborado pelos autores.

Além da variação do tamanho amostral, é interessante notar a variação de cada parâmetro β dos modelos ajustados (Tabela 18). O parâmetro β_1 é o de menor variação no tratamento Guaçatonga, enquanto é o de maior variação no tratamento Melaleuca. Apesar desta variação entre os tratamentos, em todos eles o parâmetro β_1 tem a maior amplitude do intervalo HPD de 95% de credibilidade. Quanto ao parâmetro β_3 , este apresenta a maior variação em todos os tratamentos, com exceção do Guaçatonga. A reamostragem com variação do tamanho amostral ajuda a evidenciar tais

comportamentos.

Tabela 18 – Estimativa (média a posteriori), coeficiente de variação (CV%) e amplitude HPD de 95% dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 em relação aos tamanhos n_r das reamostras dos tratamentos Guaçatonga e Melaleuca com priori não informativa.

n_r	Guaçatonga				Melaleuca			
	parâmetro	média	CV	amplitude	parâmetro	média	CV	amplitude
3	β_1	77,395	0,577	1,760	β_1	77,483	1,929	7,600
	β_2	2,851	1,888	0,210	β_2	6,081	0,114	0,451
	β_3	1,155	6,575	0,298	β_3	0,988	0,089	0,347
4	β_1	77,412	0,512	1,557	β_1	77,581	1,669	6,564
	β_2	2,845	1,665	0,185	β_2	6,087	0,098	0,387
	β_3	1,152	5,773	0,261	β_3	0,982	0,076	0,298
5	β_1	77,429	0,467	1,417	β_1	77,638	1,475	5,791
	β_2	2,841	1,512	0,168	β_2	6,090	0,087	0,340
	β_3	1,151	5,225	0,236	β_3	0,978	0,067	0,261
6	β_1	77,442	0,427	1,295	β_1	77,649	1,331	5,210
	β_2	2,842	1,374	0,152	β_2	6,085	0,078	0,307
	β_3	1,149	4,739	0,213	β_3	0,974	0,060	0,236
7	β_1	77,452	0,398	1,204	β_1	77,655	0,346	4,800
	β_2	2,844	1,270	0,141	β_2	6,088	0,752	0,283
	‡	β_3	1,148	4,379	0,197	β_3	0,974	0,752
8	β_1	77,454	0,374	1,130
	β_2	2,842	1,193	0,132
	β_3	1,149	4,113	0,185
9	β_1	77,455	0,346	1,050
	β_2	2,844	1,104	0,123
	§	β_3	1,150	3,829	0,171

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: Média e coeficiente de variação são valores médios das 1000 reamostras; amplitude (amp) HPD de 95% é a diferença das médias dos limites superior e inferior do intervalo.

Nota: ‡Dados referentes a amostra completa $n = 7$ no caso Melaleuca, sem processo de reamostragem.

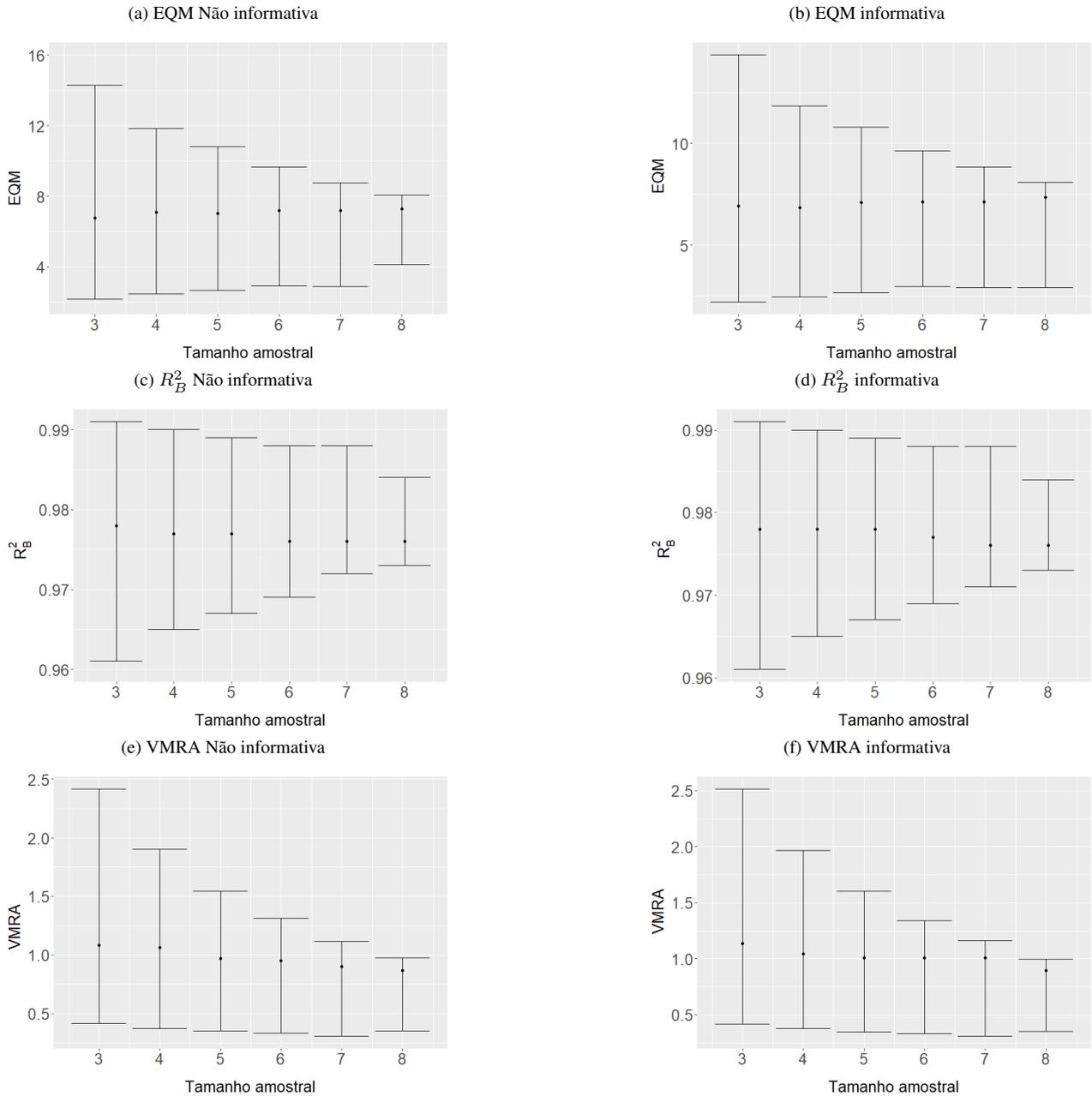
§Dados referentes a amostra completa $n = 9$, sem processo de reamostragem.

5.2.2 Priori Informativa

Os resultados gerados por reamostragem com priori informativa dos tratamentos Testemunha e Patchouli são apresentados em comparação com seus resultados gerados com priori não informativa. As métricas do tratamento Patchouli (Figura 9) não revelam alterações geradas por priori informativa.

O comportamento da precisão das métricas com a redução do tamanho amostral é bem semelhante ao mencionado considerando priori não informativa, em que o ganho de precisão acompanha o aumento da amostra. Em ambos tratamentos Testemunha e Patchouli, apesar dos intervalos evidenciarem o comportamento decrescente do viés com o aumento do tamanho amostral (Figuras 9 e 11), pode ser observado um comportamento mais constante das médias em comparação com Guaçatonga (Figura 7). Isso indica que nestes tratamentos, considerando perda em precisão, o tamanho amostral pode ser reduzido até $n = 3$ sem alterações expressivas de viés. Apenas nos resultados das reamostragens dos tratamentos Patchouli e Testemunha referente às métricas é possível observar assimetria mais acentuada nas distribuições marginais (Figuras 9 e 11). No entanto, como tal comportamento é observado apenas para as métricas, não há motivos para preocupação em relação aos resultados da comparação entre os tratamentos, uma vez que as distribuições marginais dos parâmetros β , sobre os quais é feita inferência, não apresentam variação da assimetria nos diferentes tamanhos amostrais. Os gráficos das Figuras 11e e 11f mostram uma leve redução de precisão da estimativa do VMRA gerada pela priori informativa no tratamento Testemunha, a julgar pelos quantis a posteriori de 2,5 e 97,5%. O comportamento é intensificado pela redução do tamanho amostral. No entanto, as estimativas propriamente não sofrem grandes alterações com a incorporação de informação a priori.

Figura 9 – Estimativas das métricas EQM, R_B^2 e VMRA do tratamento Patchouli em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa (à esquerda) e informativa (à direita).

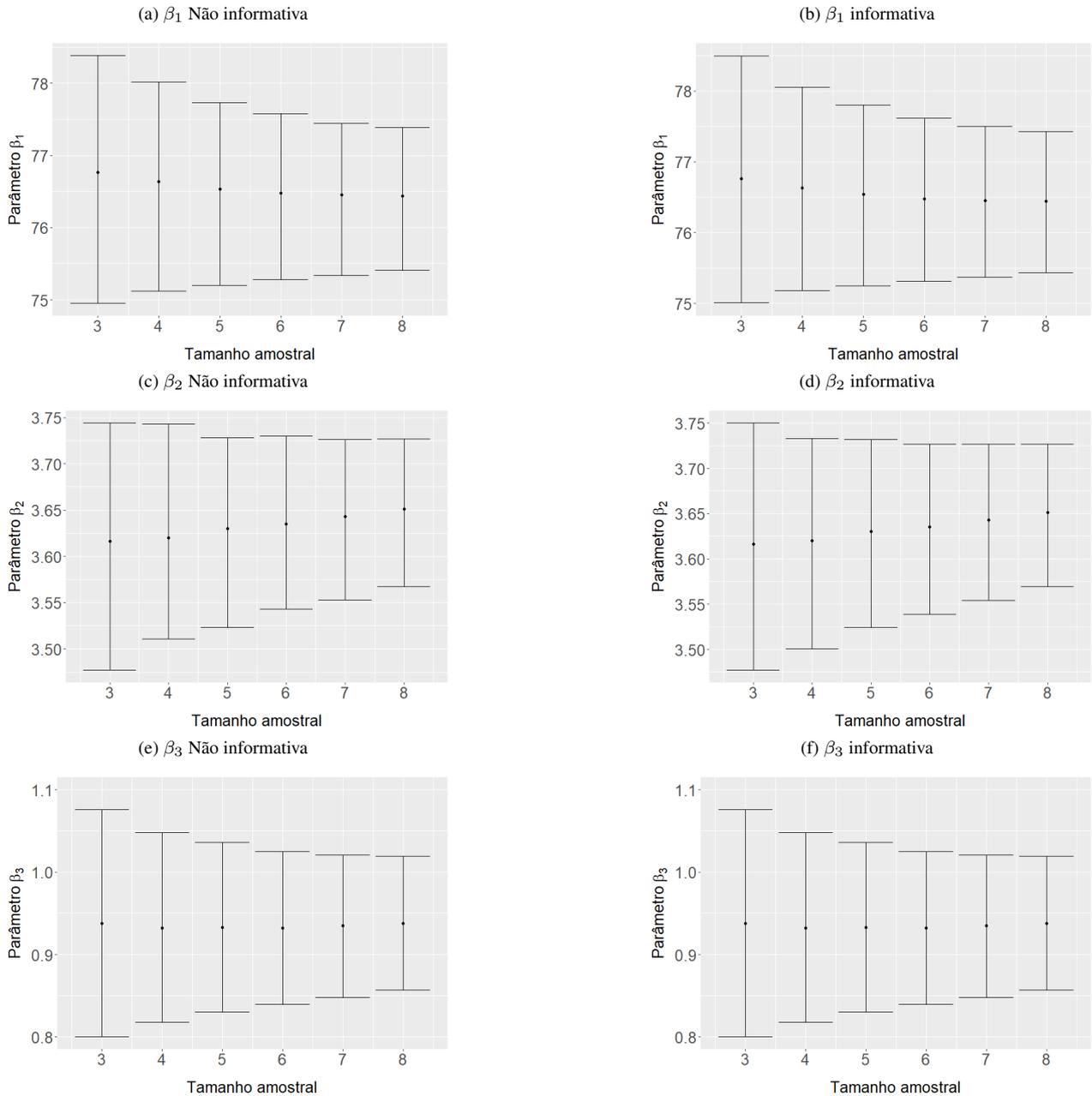


Fonte: Elaborado pelos autores.

Quanto aos parâmetros do modelo logístico ajustado com estrutura AR, a Figura 10 mostra que as estimativas pontuais não sofrem grandes alterações com a introdução de priori informativa. O ganho de precisão conforme aumenta o tamanho amostral é mantido no cenário de priori informativa. Em ambos cenários de priori informativa e não informativa observa-se que os intervalos dos parâmetros não se diferenciam muito na comparação de tamanhos amostrais próximos. A Figura 10 mostra que a partir de $n_r = 6$ as amplitudes dos parâmetros entre os tamanhos amostrais são bem próximas,

sugerindo que a adoção de até 6 repetições não implica grandes perdas de precisão na estimação dos parâmetros do modelo ajustado.

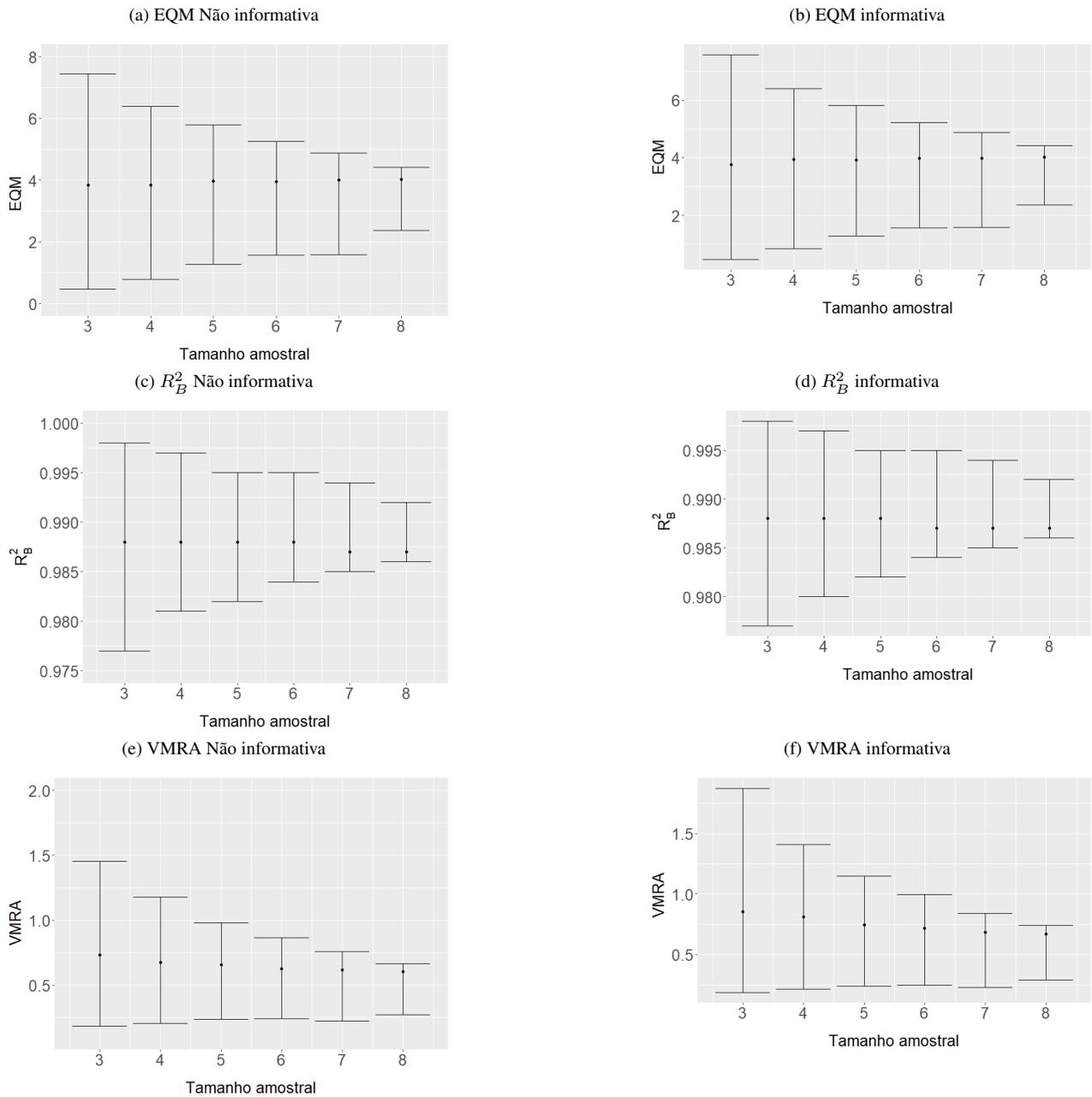
Figura 10 – Estimativas dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 do modelo logístico ajustado do tratamento Patchouli em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa (à esquerda) e informativa (à direita).



Fonte: Elaborado pelos autores.

Ao comparar os dois tratamentos em que houve uso de priori informativa, pode-se observar nos gráficos das Figuras 11 e 12 que o tratamento Testemunha foi mais impactado pela introdução de informação que o tratamento Patchouli. Em relação ao parâmetro β_2 , houve maior ganho em precisão conferido pela priori informativa entre os tamanhos amostrais $n = 3$ e $n = 4$ no tratamento Teste-

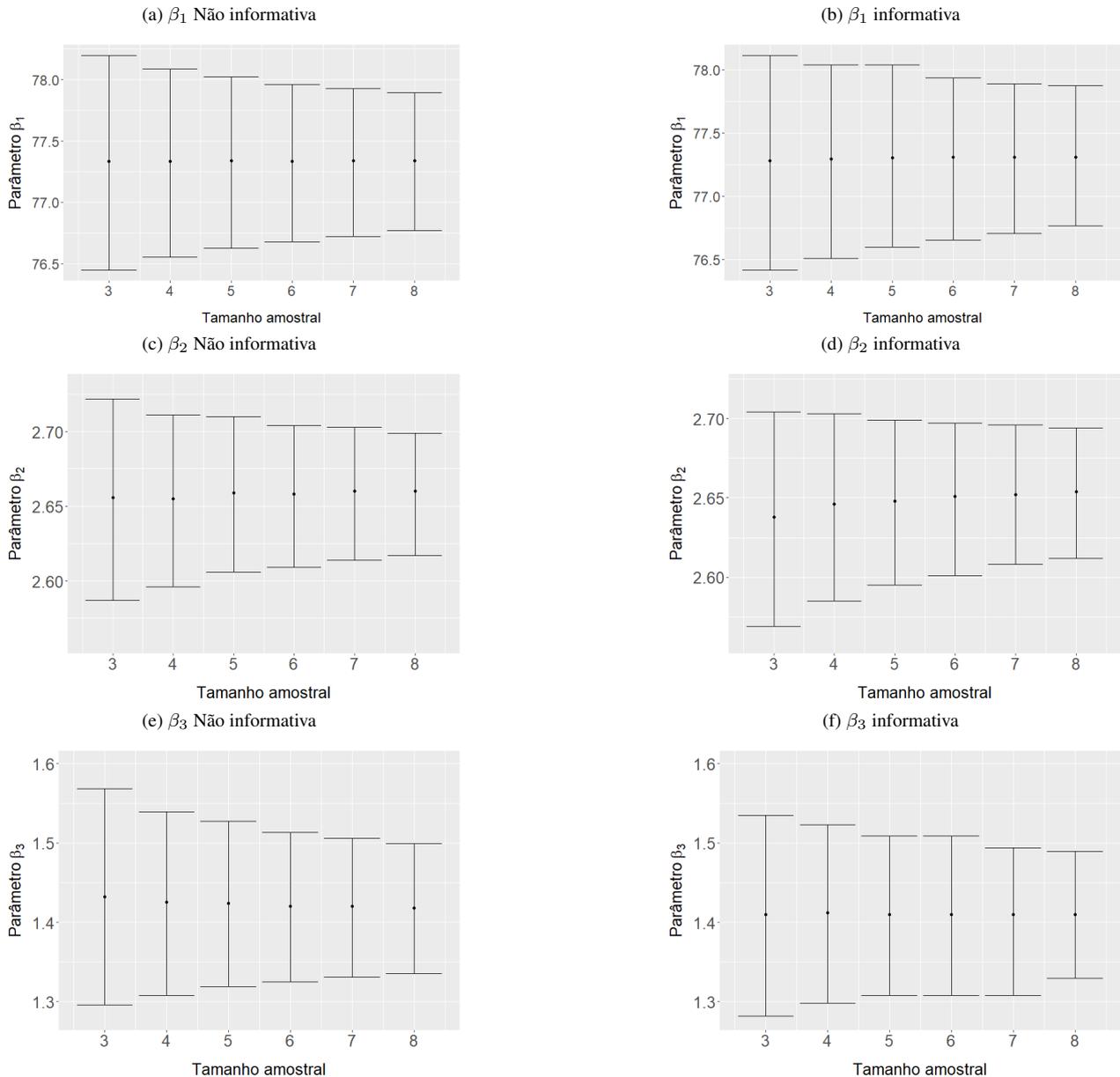
Figura 11 – Estimativas das métricas EQM, R_B^2 e VMRA do tratamento Testemunha em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa (à esquerda) e informativa (à direita).



Fonte: Elaborado pelos autores.

munha (Figura 12c e 12d) que no tratamento Patchouli considerando os mesmos tamanhos amostrais (Figuras 10c e 10d).

Figura 12 – Estimativas dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 do modelo logístico ajustado do tratamento Testemunha em relação ao tamanho da reamostra avaliada considerando priori não informativa (à esquerda) e informativa (à direita).



Fonte: Elaborado pelos autores.

As Tabelas 19 e 20 ajudam a mostrar uma leve redução da amplitude média do intervalo HPD de 95% de credibilidade com o uso de priori informativa pela diferença de amplitudes (DA). As referidas tabelas apresentam para cada parâmetro β a média das 1000 médias a posteriori geradas, a média dos 1000 coeficientes de variação médio e a média das diferenças entre os 1000 valores do limite superior e os 1000 valores do limite inferior médios do intervalo HPD de 95% de credibilidade. A diferença de amplitudes (DA) foi calculada a partir das amplitudes dos intervalos HPD de 95% de credibilidade apresentadas nas referidas tabelas.

Tabela 19 – Média a posteriori como estimativa, coeficiente de variação percentual (CV), amplitude HPD de 95% dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 e diferença de amplitudes (DA) em relação aos tamanhos n_r das reamostras do tratamento Patchouli comparando priori informativa e não informativa.

n_r	parâmetro	Não informativa			Informativa			DA (%)
		est	CV	amp	est	CV	amp	
3	β_1	76,688	1,136	3,434	76,763	1,152	3,488	-1,573
	β_2	3,614	1,869	0,267	3,616	1,900	0,272	-1,873
	β_3	0,952	7,426	0,279	0,938	7,440	0,275	1,434
4	β_1	76,583	0,964	2,901	76,634	0,954	2,877	0,827
	β_2	3,629	1,617	0,232	3,620	1,623	0,232	0,000
	β_3	0,949	6,375	0,238	0,932	6,287	0,231	2,941
5	β_1	76,482	0,843	2,532	76,537	0,848	2,552	-0,790
	β_2	3,628	1,440	0,205	3,630	1,452	0,208	-1,463
	β_3	0,941	5,630	0,208	0,933	5,614	0,206	0,962
6	β_1	76,448	0,768	2,303	76,480	0,766	2,300	0,130
	β_2	3,639	1,312	0,188	3,635	1,319	0,188	0,000
	β_3	0,941	5,126	0,189	0,932	5,089	0,186	1,587
7	β_1	76,408	0,705	2,110	76,455	0,709	2,128	-0,853
	β_2	3,642	1,206	0,172	3,643	1,213	0,173	-0,581
	β_3	0,941	4,720	0,174	0,935	4,708	0,173	0,575
8	β_1	76,400	0,661	1,981	76,442	0,666	1,996	-0,757
	β_2	3,648	1,122	0,161	3,651	1,128	0,161	0,000
	β_3	0,942	4,405	0,163	0,938	4,407	0,162	0,613
9	β_1	76,410	0,628	1,870	76,443	0,633	1,910	-2,139
	β_2	3,655	1,045	0,150	3,656	1,044	0,149	0,667
	β_3	0,945	4,167	0,155	0,940	4,152	0,152	2,065

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: Média e coeficiente de variação são valores médios das 1000 reamostras; amplitude HPD de 95% é a diferença das médias dos limites superior e inferior do intervalo.

Nota: §Dados referentes ao tamanho da amostra original $n = 9$, sem processo de reamostragem.

A redução de amplitude, ainda que pequena, é mais perceptível no tratamento Testemunha (Tabela 20). Neste tratamento, observa-se um maior percentual de redução de amplitude dos intervalos HPD gerado pela priori informativa no tamanho amostral $n = 3$. O estudo desenvolvido por Carvalho, Beijo e Muniz (2017) também ressalta tal vantagem para contornar limitações relacionadas ao tamanho amostral, possibilitando obter estimativas precisas com a menor quantidade de amostras possíveis.

Tabela 20 – Média a posteriori, coeficiente de variação (CV%) e amplitude HPD de 95% dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 em relação aos tamanhos n_r das reamostras do tratamento Testemunha comparando priori informativa e não informativa.

n_r	parâmetro	Não informativa			Informativa			DA (%)
		média	CV	amplitude	média	CV	amplitude	
3	β_1	77,335	0,575	1,747	77,282	0,558	1,698	2,805
	β_2	2,656	1,288	0,135	2,638	1,297	0,135	0,000
	β_3	1,432	4,798	0,272	1,410	4,546	0,253	6,985
4	β_1	77,332	0,504	1,529	77,294	0,504	1,528	0,065
	β_2	2,655	1,107	0,116	2,646	1,128	0,117	-0,862
	β_3	1,425	4,121	0,232	1,412	4,039	0,225	3,017
5	β_1	77,339	0,461	1,397	77,304	0,456	1,380	1,217
	β_2	2,659	1,002	0,104	2,648	1,004	0,104	0,000
	β_3	1,424	3,723	0,208	1,410	3,619	0,200	3,846
6	β_1	77,335	0,423	1,280	77,311	0,421	1,276	0,313
	β_2	2,658	0,913	0,095	2,651	0,920	0,096	-1,053
	β_3	1,420	3,387	0,188	1,411	3,334	0,185	1,596
7	β_1	77,337	0,396	1,200	77,311	0,391	1,183	1,417
	β_2	2,660	0,850	0,088	2,652	0,851	0,088	0,000
	β_3	1,420	3,157	0,176	1,410	3,091	0,171	2,841
8	β_1	77,338	0,372	1,123	77,319	0,369	1,107	1,425
	β_2	2,660	0,798	0,083	2,654	0,797	0,082	1,205
	β_3	1,418	2,959	0,164	1,410	2,910	0,160	2,439
9	β_1	77,336	0,351	1,060	77,304	0,346	1,050	0,943
	β_2	2,660	0,745	0,078	2,655	0,752	0,078	0,000
	β_3	1,417	2,781	0,155	1,411	2,732	0,150	3,226

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: Média e coeficiente de variação são valores médios das 1000 reamostras; amplitude HPD de 95% é a diferença das médias dos limites superior e inferior do intervalo.

Nota: [§]Dados referentes ao tamanho da amostra original n=9, sem processo de reamostragem.

Ainda, as maiores porcentagens de redução correspondem ao parâmetro β_3 , o que é um resultado vantajoso por ser o parâmetro de maior importância interpretativa da avaliação do efeito dos óleos essenciais sobre o controle do crescimento do fungo *B. cinerea*.

Quanto à variação dos parâmetros β do modelo ajustado, para ambos tratamentos Testemunha e Patchouli também quase não houve alteração com a introdução de informação a priori, a julgar pelos coeficientes de variação bem próximos entre si (Tabelas 19 e 20). A ausência de alteração das estimativas e da variação está associada à baixa alteração da amplitude. Já o comportamento de redução com o aumento do tamanho amostral é mantido, como já mencionado na seção 5.2.1 com priori não informativa.

Patchouli apresenta os maiores valores de coeficiente de variação e, mesmo com pouca diferença entre eles quando utilizado priori informativa e não informativa, a maioria apresenta menor valor quando utilizada priori não informativa. Ao contrário, no tratamento Testemunha, os menores valores estão associados a priori informativa, com a maior redução de 0,252, ou cerca de 5%, embora os valores também sejam muito próximos entre si. Neste mesmo tratamento, apenas no parâmetro β_2 ocorre CV maior com priori informativa.

É importante ressaltar que não houve ocorrência de valores inexistentes para estimativas dos parâmetros em nenhum tratamento ou tamanho amostral avaliado. Salles *et al.* (2020) advertem que apesar do ganho de precisão conferido pela introdução de informação pela distribuição a priori informativa, a predominância da priori pode gerar intervalos das estimativas inconsistentes. Além disso, os autores pontuam que diferenças das condições experimentais entre o estudo de origem da amostra e estudos de obtenção de informação a priori podem gerar viés na estimação introduzido pela distribuição a priori informativa.

Um detalhe interessante para comparação do uso de priori informativa e não informativa, é o tempo computacional gasto para gerar as cadeias marginais a posteriori. Em relação ao processo de reamostragem a diferença é expressiva. De forma qualitativa, a análise considerando 300 reamostragens com priori não informativa com 150 000 iterações, 50 000 de queima e salto 500 gastou entre 48 e 60h. Em contrapartida, o uso de priori informativa permitiu reduzir o número de iterações, queima e salto para 80 000, 40 000 e 100, respectivamente. Dessa forma, o tempo gasto para 300 reamostragens foi de 7 a 15h. O motivo provavelmente está associado a uma maior facilidade e rapidez de convergência. No caso do uso do Metropolis Hastings em que o algoritmo caminha no espaço paramétrico na busca da distribuição de equilíbrio, a maior especificação dos parâmetros pela priori informativa estreita o espaço paramétrico, reduzindo o espectro de busca do algoritmo. Já considerando o ajuste do modelo logístico com estrutura AR com amostra completa ($n = 7$ para Melaleuca e $n = 9$ para os demais tratamentos), a diferença do tempo gasto computacionalmente é desprezível.

Os resultados apresentados nesta seção podem ser um indicativo que o uso da priori informativa foi mais vantajosa para o tratamento sem óleo essencial. Quanto à baixa alteração gerada pela introdução de informação a priori, uma explicação possível é a baixa amplitude da variação do tamanho amostral avaliado ($n = 3$ à 9) que prejudica a percepção da alteração.

Em relação a determinação do tamanho amostral ideal, o questionamento central deve estar alinhada à constatação de que a redução de algumas unidades realmente otimiza significativamente os custos do experimento. Por meio do processo de reamostragem, foi apresentado que a abordagem

bayesiana apresenta robustez em análises de modelagem complexas, mesmo com amostras limitadas, consolidando-se como uma alternativa eficiente em contextos que exijam restrição amostral. Tal capacidade pode ser útil em estudos semelhantes, no entanto, é estritamente necessário o discernimento especialista para determinar o balanceamento entre o custo experimental e a quantidade de amostras, considerando a complexidade da análise em questão.

5.3 COMPARAÇÕES DE RESULTADOS COM AMOSTRA COMPLETA

Considerando análise de amostra completa (sem processo de reamostragem), a Tabela 21 apresenta média e intervalos de confiança de 95% como estimativas da abordagem frequentista obtidas pelo estudo de origem dos dados, Vismara (2019), bem como a média a posteriori e intervalos HPD de 95% de credibilidade obtidos por abordagem bayesiana com priori não informativa e informativa pelo atual trabalho. Os resultados gerados por priori informativa e não informativa concordam entre si em todos os casos. A divergência ocorre entre as conclusões dos resultados frequentista e bayesiano. Importante lembrar que as estimativas dos parâmetros do modelo logístico ajustado aos diferentes tratamentos não podem ser comparadas entre as diferentes abordagens, uma vez que os modelos bayesianos consideraram a estrutura AR e os apresentados por Vismara (2019), não. Aqui fica clara a percepção da maior facilidade e conveniência da interpretação probabilística direta dos parâmetros de interesse proporcionadas pela abordagem bayesiana.

As conclusões sobre os parâmetros β_1 , β_2 e β_3 são apresentadas nos resultados de priori não informativa (Seção 5.1.1) e de priori informativa (Seção 5.1.2). Como já citado, estes resultados divergem dos apresentados por Vismara (2019). Neste estudo, além de não ser constatada diferença significativa entre os tratamentos em relação ao crescimento máximo do fungo, representado pelo parâmetro β_1 , a redução da taxa de crescimento no tratamento Guaçatonga é não significativa comparada ao Testemunha ao nível de significância de 5%. Assim, esse estudo conclui que dentre os tratamentos aqui avaliados, Melaleuca foi considerado o melhor por apresentar maior β_2 e menor β_3 . Patchouli foi considerado o segundo melhor, enquanto o efeito de Guaçatonga não é evidenciado pelo parâmetro β_3 , considerado de maior importância para a avaliação dos óleos no crescimento do fungo. Já o estudo atual com uso de abordagem bayesiana concluiu que o tratamento Patchouli é tão efetivo quanto Melaleuca no controle do crescimento do *B. cinerea* ao considerar todos os parâmetros do modelo ajustado. Enquanto Patchouli é o único tratamento que reduziu o crescimento máximo do fungo

cultivado em placa de Petri, Melaleuca retardou mais as transições de fases do crescimento fúngico. E quanto à taxa de crescimento, ambos apresentaram a maior redução, não havendo diferença entre eles.

A mudança na conclusão evidencia efeitos despercebidos do tratamento Guaçatonga quando utilizada a metodologia frequentista. O parâmetro β_3 de maior importância na avaliação do controle do crescimento é menor em todos os tratamentos, incluindo Guaçatonga, quando comparados ao tratamento com ausência de óleo essencial. Neste caso, o uso da abordagem bayesiana, utilizando priori informativa e não informativa, permitiu a modelagem do resíduo do ajuste do modelo logístico, gerando estimativas mais precisas para identificar o efeito de um tratamento.

Tabela 21 – Comparação entre resultados de estimação obtidos no atual estudo e os obtidos por Vismara (2019). As estimativas bayesiana e frequentista são dadas pela média a posteriori e média e os intervalos HPD de 95% de credibilidade e intervalo de confiança de 95%, respectivamente.

		Melaleuca		Guaçatonga		Patchouli			Testemunha		
		Freq	NI	Freq	NI	Freq	NI	INF	Freq	NI	INF
β_1	Est	76,37	77,66	77,18	77,45	75,32	76,41	76,44	77,36	77,33	77,32
	LI	73,16	75,25	75,72	76,9	73,61	75,41	75,49	75,98	76,76	76,77
	LS	79,58	80,03	78,63	77,95	77,02	77,32	77,35	78,74	77,82	77,82
	Amp	6,42	4,78	2,91	1,05	3,41	1,91	1,86	2,76	1,06	1,05
β_2	Est	6,04	6,09	2,92	2,84	3,65	3,65	3,65	2,67	2,66	2,66
	LI	5,87	5,95	2,82	2,78	3,54	3,58	3,58	2,58	2,62	2,61
	LS	6,20	6,23	3,02	2,90	3,77	3,73	3,73	2,76	2,70	2,69
	Amp	0,33	0,28	0,20	0,12	0,23	0,15	0,15	0,18	0,08	0,08
β_3	Est	1,05	0,97	1,30	1,15	1,08	0,94	0,94	1,45	1,42	1,41
	LI	0,91	0,87	1,15	1,06	0,96	0,87	0,86	1,28	1,34	1,33
	LS	1,19	1,08	1,45	1,23	1,20	1,03	1,01	1,62	1,50	1,48
	Amp	0,33	0,21	0,30	0,17	0,24	0,16	0,15	0,34	0,16	0,15

Fonte: Elaborado pelos autores.

Legenda: Freq: frequentista. NI/INF: priori não informativa e informativa. Est: estimativa. LI/LS: limites inferior e superior dos intervalos apresentados. Amplitudes correspondem à diferença entre limites superior e inferior médios dos correspondentes intervalos.

Analisando a Tabela 21, o ganho de precisão das estimativas foi expressivo quando comparadas as amplitudes dos intervalos das estimativas obtidos pela metodologia frequentista com os obtidos pela bayesiana em todos os tratamentos, variando de 15 a 63% de redução. O tratamento Testemunha teve a maior média de redução, considerando todos os parâmetros β , 56,46%, seguido do Guaçatonga, com 49,1%, e Patchouli, com 36%. A menor foi do tratamento Melaleuca, com média de 21,9% de redução. O parâmetro de maior ganho foi β_1 em todos os casos. Ao comparar a amplitude do intervalo obtido por abordagem frequentista e os obtidos por priori informativa na bayesiana, o ganho é

ainda maior. Em Patchouli, a amplitude do intervalo da estimativa de β_3 frequentista foi de 0,24 para 0,16 na estimativa bayesiana com priori não informativa, uma redução de 29,2%. Comparando com a priori informativa a redução é de 37,5% em relação a amplitude do intervalo de confiança de 95% obtido por Vismara (2019). Em Testemunha, o mesmo parâmetro teve redução de 0,34 do intervalo frequentista para 0,16 do intervalos HPD de 95% de credibilidade com priori não informativa, uma redução de 52,94%, que aumenta para 55,9% com o uso de priori informativa. Em tal comparativa, considerando o parâmetro de maior interesse, o maior ganho em precisão foi promovido por priori informativa no tratamento Testemunha.

Assim como qualquer metodologia estatística, a abordagem bayesiana possui vantagens e limitações, cuja aplicabilidade depende do contexto e dos objetivos da análise. É essencial balancear o uso dessa abordagem com outras metodologias, identificando situações em que seu uso é mais vantajoso e avaliando quando métodos alternativos podem oferecer soluções mais eficientes ou complementares. Em alguns casos, a combinação de abordagens pode proporcionar soluções mais práticas e otimizadas. Vale ressaltar que toda escolha metodológica implica custos e limitações, o que demanda um balanceamento criterioso e fundamentado. Com base nos resultados positivos observados neste estudo, espera-se incentivar a exploração da abordagem bayesiana em diversos campos da análise estatística, promovendo um uso flexível que amplia as opções de resolução de problemas, contribui para a otimização das análises e favorece a evolução do campo.

6 CONCLUSÕES

A abordagem bayesiana mostrou-se eficiente na modelagem da curva de crescimento do fungo *Botrytis cinerea* por meio do ajuste do modelo logístico considerando autocorrelação residual. A incorporação de estruturas AR(1) e AR(2) para os erros melhorou a qualidade de ajuste do modelo em todos os tratamentos, de acordo com a análise dos resíduos ao longo do tempo, DIC e teste de independência. Esse fato permitiu a interpretação prática dos parâmetros, o que foi essencial para evidenciar o efeito do tratamento Patchouli em relação ao crescimento máximo β_1 , além do efeito do tratamento Guaçatonga na redução da taxa de crescimento β_3 , o que não foi possível identificar na modelagem sem estrutura AR do resíduo no estudo de origem dos dados.

O estudo do tamanho amostral permite concluir que a redução da amostra até $n = 3$ não gerou diferenças significativas entre as estimativas apesar da perda de precisão revelada pela amplitude dos intervalos HPD de 95% de credibilidade. Mesmo com priori não informativa, não houve produção de intervalos inconsistentes em nenhum tamanho amostral de nenhum tratamento. Esse foi um diferencial conferido pela abordagem, considerando o ajuste de modelo não linear com estrutura autorregressiva para os erros, sem a necessidade de aproximações assintóticas.

A avaliação de prioris informativa e não informativa indicou que a priori informativa proporcionou um leve ganho de precisão considerando a redução de amplitudes dos intervalos HPD de 95% de credibilidade dos parâmetros β_1 , β_2 e β_3 do modelo logístico ajustado nos tratamentos Testemunha e Patchouli. O tratamento sem óleo essencial (Testemunha) foi o mais impactado pela introdução de informação a priori pelo ganho de precisão. Quanto aos demais tratamentos, Guaçatonga e Melaleuca não foram obtidas informações a priori.

As limitações do uso da abordagem bayesiana foram principalmente ligadas a definição das distribuições a priori. A elicitação dos hiperparâmetros demanda conhecimento especialista, o que reduz a trivialidade do método. Além disso, a heterogeneidade das condições de experimento presentes na literatura dificultam o processo de incorporação de informação a priori, como diferentes tamanhos da placa de Petri e diferentes metodologias. A partir disso, o atual estudo incentiva maior padronização de metodologias pela comunidade científica, bem como a disponibilidade dos dados para facilitar a disseminação e colaboração com futuros estudos.

Como contribuição a trabalhos futuros, sugere-se a incorporação de prioris hierárquicas para os parâmetros na modelagem como forma de obter maior ganho de precisão da estimação dos parâmetros no ajuste.

REFERÊNCIAS

- ABD-ELKADER, D. Y. *et al.* Post-harvest enhancing and *Botrytis cinerea* control of strawberry fruits using low cost and eco-friendly natural oils. **Agronomy**, [Egito]: MDPI, v. 11, n. 6, p. 1246, 2021.
- ACHAR, J. *et al.* **Uma introdução aos métodos bayesianos aplicados à análise de dados**. [S.I.]: Editora Cia do Ebook, 2019.
- ALMASAUDI, N. M. *et al.* Essential oils of oregano and cinnamon as an alternative method for control of gray mold disease of table grapes caused by *Botrytis cinerea*. **Journal of Plant Pathology**, [S.I.]: Springer, v. 104, n. 1, p. 317–328, 2022.
- ANDRADE, D. E. G. *et al.* Influência de meios de cultura sobre o crescimento, esporulação e peso seco de *Botrytis cinerea*. **Caderno Ômega: Série Agronomia**, [Pernambuco], n. 12, p. 5–8, 2001.
- AOUADI, G. *et al.* Assessment of the efficiency of *Mentha pulegium* essential oil to suppress contamination of stored fruits by *Botrytis cinerea*. **Journal of Plant Diseases and Protection**, [S.I.]: Springer, v. 129, n. 4, p. 881–893, 2022.
- BANANI, H. *et al.* Thyme and savory essential oil efficacy and induction of resistance against *Botrytis cinerea* through priming of defense responses in apple. **Foods**, [Itália]: MDPI, v. 7, n. 2, p. 11, 2018.
- BATES, D. M.; WATTS, D. G. Nonlinear regression: iterative estimation and linear approximations. In: **Nonlinear regression analysis and its applications**. New York, EUA: Wiley, 1988.
- BERGER, J. O. **Statistical decision theory and Bayesian analysis**. [S.I.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- BERNARDO, J. M. Bayesian reference analysis. **A postgraduate tutorial course, Universitat de Valencia**, Spain, 1998.
- CAMPOS, A. **Uma abordagem bayesiana para alguns modelos de crescimento na presença de assimetria e heterocedasticidade**. 2011. 63 p. Dissertação (Mestrado em Ciências de Computação e Matemática Computacional) — Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, USP, São Carlos, SP.
- CHATTERJEE, T. *et al.* Antibacterial effect of silver nanoparticles and the modeling of bacterial growth kinetics using a modified Gompertz model. **Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-General Subjects**, [S.I.]: Elsevier, v. 1850, n. 2, p. 299–306, 2015.
- DIGGLE, P. **Analysis of longitudinal data**. [S.I.]: Oxford university press, 2002.
- DRAPER, N. R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. [S.I.]: John Wiley & Sons, 1998. v. 326.

EHLERS, R. S. **Introdução à Inferência bayesiana**. [S.I.]: Ricardo S. Ehlers, 2003. Edição própria.

ELAD Y., V. M.; FILLINGER, S. *Botrytis*- the fungus, the pathogen and its management in agricultural systems. In: **Botrytis – the Fungus, the Pathogen and its Management in Agricultural Systems**. Cham, Suíça: Springer, 2016.

ESSER, D. S.; LEVEAU, J. H.; MEYER, K. M. Modeling microbial growth and dynamics. **Applied microbiology and biotechnology**, [S.I.]: Springer, v. 99, n. 21, p. 8831–8846, 2015.

FALLEH, H. *et al.* Essential oils: A promising eco-friendly food preservative. **Food Chemistry**, [S.I.]: Elsevier, v. 330, p. 127–268, 2020.

FAOZIA, A. A. R. I. *et al.* Effect of *Origanum majorana* L. essential oil on extension shelf life of strawberry fruits. **Human Journals**, [S.I.]: ResearchGate, c, 21, n. 3, p. 211–230, 2022.

FERNANDES, T. J. *et al.* Parameterization effects in nonlinear models to describe growth curves. **Acta Scientiarum. Technology**, Maringá, PR: Universidade Estadual de Maringá, v. 37, n. 4, p. 397–402, 2015.

FERNANDESS, T. J. *et al.* Seleção de modelos não lineares para a descrição das curvas de crescimento do fruto do cafeeiro. **Coffee Science**, Lavras: Editora UFLA, v. 9, n. 2, p. 207–215, 2014.

FUJIKAWA, H. Development of a new logistic model for microbial growth in foods. **Biocontrol science**, Japan: The Society for Antibacterial and Antifungal Agents, v. 15, n. 3, p. 75–80, 2010.

FUJIKAWA, H.; KAI, A.; MOROZUMI, S. A new logistic model for bacterial growth. **Journal of the Food Hygienic Society of Japan**, [Japan], v. 44, n. 3, p. 155–160, 2003.

GAMERMAN, D.; LOPES, H. F. **Markov chain Monte Carlo: Stochastic simulation for Bayesian inference**. [S.I.]: CRC press, 2006.

GAREL, M. *et al.* A ready-to-use logistic Verhulst model implemented in R shiny to estimate growth parameters of microorganisms. **bioRxiv**, [S.I.]: Cold Spring Harbor Laboratory, 2022.

GASSER, T. *et al.* Nonparametric regression analysis of growth curves. **The Annals of Statistics**, [S.I.]: JSTOR, p. 210–229, 1984.

GELMAN, A.; RUBIN, D. B. Inference from iterative simulation using multiple sequences. **Statistical science**, [S.I.]: JSTOR, p. 457–472, 1992.

GEWEKE, J. Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to the calculations of posterior moments. **Bayesian statistics**, [S.I.]: Clarendon Press, v. 4, p. 641–649, 1992.

HALL, B. **Bayesian inference, Cran. R-project, LaplacesDemon Package**. Farmington, Connecticut, EUA: [s.n.], 2012.

HEIDELBERGER, P.; WELCH, P. D. Simulation run length control in the presence of an initial

transient. **Operations Research**, [S.I.]: INFORMS, v. 31, n. 6, p. 1109–1144, 1983.

HEYDARI, J. *et al.* Fast bayesian parameter estimation for stochastic logistic growth models. **Biosystems**, [S.I.]: Elsevier, v. 122, p. 55–72, 2014.

HOFFMANN, R. **Análise de regressão: uma introdução à econometria**. Piracicaba: Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Universidade de São Paulo, 2016.

JEFFREYS, H. **The theory of probability**. [S.I.]: Oxford: Claredon, 1961.

KASS, R. E.; RAFTERY, A. E. Bayes factors. **Journal of the american statistical association**, [S.I.]: Taylor & Francis, v. 90, n. 430, p. 773–795, 1995.

MACEDO, L. R. d. *et al.* Bayesian inference for the fitting of dry matter accumulation curves in garlic plants. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, [S.I.]: SciELO Brasil, v. 52, p. 572–581, 2017.

MARTINS-FILHO, S. *et al.* Abordagem bayesiana das curvas de crescimento de duas cultivares de feijoeiro. **Ciência Rural**, Brasil: SciELO Brasil, v. 38, p. 1516–1521, 2008.

MAZUCHELI, J.; SOUZA, R. d.; PHILIPPSEN, A. S. Modelo de crescimento de Gompertz na presença de erros normais heterocedásticos: um estudo de caso. **Revista Brasileira de Biometria**, São Paulo, v. 29, n. 1, p. 91–101, 2011.

MCNEISH, D. On using bayesian methods to address small sample problems. **Structural Equation Modeling: A Multidisciplinary Journal**, [S.I.]: Taylor & Francis, v. 23, n. 5, p. 750–773, 2016.

MENDES, P. N. *et al.* Modelo logístico bayesiano no estudo do crescimento de tomates. **Research, Society and Development**, [S.I.], v. 10, n. 3, p. e22710313198–e22710313198, 2021.

MORETIN, P. A.; TOLOI, C. M. **Séries temporais**. São Paulo: Atual, 1986.

MORETTIN, P. A. **Econometria Financeira: Um curso em séries temporais financeiras**. São Paulo: Blucher, 2006.

MUIANGA, C. A. *et al.* Descrição da curva de crescimento de frutos do cajueiro por modelos não lineares. **Revista Brasileira de Fruticultura**, [S.I.]: SciELO Brasil, v. 38, p. 22–32, 2016.

MURTEIRA, B.; PAULINO, C.; TURKMAN, M. **Estatística Bayesiana**. Portugal: Galouste Gulbekian, 2003.

OLIVEIRA-FILHO, J. G. d. *et al.* Chemical composition and antifungal activity of essential oils and their combinations against botrytis cinerea in strawberries. **Journal of Food Measurement and Characterization**, [S.I.]: Springer, v. 15, n. 2, p. 1815–1825, 2021.

PELEG, M. A new look at models of the combined effect of temperature, ph, water activity, or other factors on microbial growth rate. **Food Engineering Reviews**, [S.I.]: Springer, p. 1–14, 2021.

PELEG, M.; CORRADINI, M. G.; NORMAND, M. D. The logistic (verhulst) model for sigmoid

microbial growth curves revisited. **Food research international**, [S.I.]: Elsevier, v. 40, n. 7, p. 808–818, 2007.

PEREIRA, A. A. *et al.* Bayesian modeling of the coffee tree growth curve. **Ciência Rural**, Brasil: SciELO Brasil, v. 52, p. e20210275, 2022.

PINSKY, M.; KARLIN, S. **An introduction to stochastic modeling**. [S.I.]: Academic press, 2010.

RAFTERY, A. E.; LEWIS, S. *et al.* How many iterations in the gibbs sampler. **Bayesian statistics**, Washington, EUA: Citeseer, v. 4, n. 2, p. 763–773, 1992.

RIBEIRO, L. H. M. da S. *et al.* Bayesian modelling of the effects of nitrogen doses on the morphological characteristics of braquiaria grass. **Revista Agro@ mbiente On-line**, [S.I.], v. 12, n. 4, p. 245–257, 2018.

ROMANAZZI, G.; FELIZIANI, E. *Botrytis cinerea* (gray mold). In: **Postharvest decay**. [S.I.]: Elsevier, 2014. p. 131–146.

ROSSI, R. M.; SANTOS, L. A. dos. Modelagem bayesiana para curvas de crescimentos de codornas assumindo assimetria nos erros. **Semina: Ciências Agrárias**, Londrina- PR: Universidade Estadual de Londrina, v. 35, n. 3, p. 1637–1647, 2014.

SALLES, T. T. *et al.* Modelling the growth curve of Santa Ines sheep using bayesian approach. **Livestock Science**, [S.I.]: Elsevier, v. 239, p. 104–115, 2020.

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

SILVA, F. F. *et al.* Comparação bayesiana de modelos de previsão de diferenças esperadas nas progênes no melhoramento genético de gado nelore. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasil: SciELO Brasil, v. 43, p. 37–45, 2008.

SILVEIRA, F. G. d. *et al.* Análise de agrupamento na seleção de modelos de regressão não-lineares para curvas de crescimento de ovinos cruzados. **Ciência Rural**, Brasil: SciELO Brasil, v. 41, p. 692–698, 2011.

SKINNER, G. E.; LARKIN, J. W.; RHODEHAMEL, E. J. Mathematical modeling of microbial growth: a review. **Journal of food safety**, [S.I.]: Wiley Online Library, v. 14, n. 3, p. 175–217, 1994.

SMITH, D. P.; KEYFITZ, N. A note on the law of population growth. In: **Mathematical Demography**. [S.I.]: Springer, 2013. p. 279–285.

SPIEGELHALTER, D. J. *et al.* Bayesian measures of model complexity and fit. **Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology**, Oxford, Reino Unido: Oxford University Press, v. 64, n. 4, p. 583–639, 2002.

TSOULARIS, A.; WALLACE, J. Analysis of logistic growth models. **Mathematical biosciences**, [S.I.]: Elsevier, v. 179, n. 1, p. 21–55, 2002.

- VALLEJO, I. *et al.* Differential behaviour of mycelial growth of several *Botrytis cinerea* strains on either patchoulol-or globulol-amended media. **Journal of Phytopathology**, Spain: Wiley Online Library, v. 149, n. 2, p. 113–118, 2001.
- VÉLEZ, J. P. *et al.* Caracterización in vitro de *Trichoderma* spp., y modelo matemático de su antagonismo en presencia de *Moniliophthora perniciosa*. **Revista Ecuatoriana de Medicina y Ciencias Biológicas**, [S.I.], v. 38, n. 1, p. 25–34, 2017.
- VISMARA, L. d. S. **Óleos essenciais na indução de resistência em morangos ao mofo cinzento à *Botrytis cinerea* in vitro e ação toxicológica**. 2019. 212 p. Tese (Doutorado em Agronomia) — Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Pato Branco, PR.
- WAKEFIELD, J. *et al.* **Bayesian and frequentist regression methods**. [S.I.]: Springer, 2013. v. 23.
- ZAGO, D. *et al.* Potencial do óleo essencial das folhas de patchouli como controle de *Botrytis cinerea* in vitro. In: **Congresso de Ciência e Tecnologia**, V. UTFPR- PR: [s.n.], 2019.
- ZHAO, Y. *et al.* Chemical composition and antifungal activity of essential oil from *Origanum vulgare* against *Botrytis cinerea*. **Food chemistry**, [S.I.]: Elsevier, v. 365, p. 130–506, 2021.

APÊNDICE

APÊNDICE A - Resultados a posteriori do uso de priori Normal para os parâmetros β .

Tabela 22 – Limites inferior (LI), superior (LS) e amplitude HPD de 95% de credibilidade dos parâmetros β . DIC, Erro quadrático médio, viés médio relativo e coeficiente de determinação bayesiano.

Parâmetros	HPD 95%		
	LI	LS	Amplitude
β_1	76,67	77,98	1,31
β_2	2,607	2,703	0,096
β_3	1,318	1,508	0,19
DIC	EQM	VMR	R_B^2
394,7	3,852	1,924	0,981

APÊNDICE B - Distribuição Lognormal.

‡ Se uma dada variável $Y_N = \ln Y$ tem distribuição Normal tal que $Y_N \sim N(\mu, \sigma^2)$, então Y tem distribuição Lognormal $LN(\mu_L, \sigma_L)$, com densidade dada por:

$$f_Y(y) = \frac{1}{y\sigma_L\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(\ln(y) - \mu_L)^2}{2\sigma_L^2}\right\}$$

com $y > 0$. Em que $\mu_L \in \mathbb{R}$ e $\sigma_L > 0$ são média e variância, respectivamente, da variável Lognormal, chamados parâmetros posição e escala da distribuição. Assim, a média e variância são dadas por:

$$\mu_L = E[Y] = \exp\left\{\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right\}$$

$$\sigma_L^2 = Var[Y] = \exp 2\mu + \sigma^2 \cdot (\exp \sigma^2 - 1)$$

‡(2008). Lognormal Distribution. In: The Concise Encyclopedia of Statistics. Springer, New York, NY. https://doi.org/10.1007/978-0-387-32833-1_238

**APÊNDICE C - Critérios de convergência dos parâmetros e métricas do modelo
ajustado com priori não informativa associados às reamostras-
gens de cada tratamento.**

Tabela 23 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori não informativa geradas pelas reamostrages do tratamento Melaleuca.

$*n_r$	3		4		5		6	
	Geweke							
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
β_1	1,094	0.005; 1.094	1,858	0.995; 1.857	1,793	1.010; 1.793	0,723	1.010; 0.722
β_2	1,923	0.008; 1.923	1,594	0.984; 1.593	1,720	0.987; 1.72	1,192	0.988; 1.192
β_3	1,856	0.022; 1.857	1,524	0.994; 1.524	1,355	0.991; 1.355	1,227	0.995; 1.227
ϕ_1	1,550	0.088; 1.550	1,903	0.997; 1.903	1,940	0.99; 1.939	0,622	0.986; 0.622
ϕ_2	1,948	0.047; 1.948	1,837	0.995; 1.836	1,848	0.997; 1.848	1,260	0.999; 1.260
τ	1,603	0.008; 1.603	1,741	0.989; 1.740	1,728	0.986; 1.728	1,088	1.010; 1.088
R_B^2	1,914	0.111; 1.914	1,616	0.985; 1.615	1,396	0.987; 1.396	0,533	0.987; 0.533
EQM	1,790	0.062; 1.79	1,842	0.989; 1.841	1,762	0.993; 1.762	0,542	0.994; 0.542
	Raftery & Lewis							
β_1	1,05	0.999; 1.05	1,07	0.995; 1.07	1,06	0.997; 1.06	1,01	0.999; 1.010
β_2	1,04	0.994; 1.04	1,06	0.989; 1.06	1,04	0.986; 1.04	1,04	1.010; 1.040
β_3	1,06	0.992; 1.06	1,06	0.985; 1.06	1,03	0.987; 1.03	1,01	0.987; 1.010
ϕ_1	1,04	0.988; 1.04	1,05	0.995; 1.05	1,07	1.010; 1.07	1,03	1.010; 1.030
ϕ_2	1,16	0.992; 1.16	1,16	0.984; 1.16	1,12	0.987; 1.12	1,01	0.988; 1.01
τ	1,02	0.984; 1.02	1,02	0.989; 1.02	1,02	0.993; 1.02	1,00	0.994; 1.00
R_B^2	1,05	0.985; 1.05	1,04	0.994; 1.04	1,04	0.991; 1.04	1,02	0.995; 1.020
EQM	1,06	0.989; 1.06	1,08	0.993; 1.08	1,10	0.996; 1.10	1,08	1.00; 1.080
	Heidelberger & Welch							
β_1	0,109	0.109; 0.995	0,118	0.118; 0.993	0,070	0.070; 0.986	0,354	0.353; 0.981
β_2	0,095	0.095; 0.966	0,073	0.073; 0.970	0,128	0.128; 0.999	0,351	0.351; 0.807
β_3	0,050	0.050; 0.979	0,241	0.240; 0.979	0,085	0.085; 0.963	0,157	0.157; 0.805
ϕ_1	0,089	0.089; 0.914	0,052	0.051; 0.936	0,122	0.122; 0.989	0,085	0.084; 0.774
ϕ_2	0,062	0.063; 0.991	0,057	0.057; 0.907	0,095	0.095; 0.879	0,173	0.173; 0.843
τ	0,117	0.117; 0.948	0,075	0.075; 0.916	0,207	0.207; 0.722	0,272	0.272; 0.957
R_B^2	0,060	0.061; 0.990	0,053	0.053; 0.962	0,189	0.189; 0.890	0,337	0.337; 0.772
EQM	0,101	0.102; 0.996	0,110	0.110; 0.823	0,057	0.057; 0.861	0,151	0.151; 0.982

$*n_r$: Tamanhos das reamostras.

M: maior valor do critério das 1000 reamostras ou menor valor, no caso do critério de Heidelberger & Welch.

Q: quantil de 2,5 e 97,5%.

Tabela 25 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori não informativa geradas pelas reamostragens do tratamento Guaçatonga.

* n_r	3		4		5		6		7		8	
	Geweke											
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
β_1	1,948	0.02;1.69	1,954	0.03;1.72	1,958	0.02;1.74	1,943	0.02;1.69	1,935	0.03;1.71	1,954	0.04;1.74
β_2	1,950	0.03;1.76	1,933	0.04;1.71	1,959	0.04;1.79	1,941	0.03;1.77	1,959	0.02;1.77	1,960	0.03;1.74
β_3	1,955	0.03;1.79	1,954	0.04;1.75	1,955	0.03;1.75	1,959	0.02;1.78	1,949	0.04;1.78	1,936	0.02;1.73
ϕ_2	1,954	0.03;1.79	1,924	0.04;1.73	1,958	0.02;1.77	1,956	0.02;1.77	1,956	0.03;1.78	1,959	0.03;1.78
τ	1,957	0.03;1.70	1,958	0.03;1.73	1,946	0.02;1.76	1,957	0.02;1.72	1,959	0.03;1.77	1,956	0.04;1.71
R_B^2	1,959	0.03;1.68	1,958	0.03;1.72	1,956	0.03;1.72	1,939	0.02;1.68	1,950	0.04;1.68	1,929	0.03;1.70
EQM	1,947	0.03;1.77	1,956	0.02;1.72	1,955	0.04;1.80	1,940	0.03;1.73	1,955	0.03;1.76	1,948	0.03;1.78
VMR	1,959	0.02;1.77	1,959	0.03;1.72	1,932	0.02;1.79	1,957	0.04;1.79	1,950	0.03;1.78	1,958	0.02;1.79
	Raftery & Lewis											
β_1	1,13	0.99;1.09	1,13	0.99;1.09	1,12	0.99;1.09	1,13	0.99;1.08	1,14	0.99;1.10	1,12	0.98;1.10
β_2	1,08	0.98;1.06	1,14	0.98;1.06	1,13	0.99;1.07	1,09	0.99;1.08	1,10	0.99;1.07	1,10	0.99;1.07
β_3	1,13	0.98;1.06	1,09	0.98;1.06	1,09	0.98;1.06	1,10	0.99;1.07	1,09	0.99;1.06	1,11	0.99;1.07
ϕ_2	1,06	0.97;1.03	1,06	0.97;1.03	1,04	0.98;1.03	1,04	0.98;1.03	1,05	0.97;1.03	1,05	0.97;1.03
τ	1,05	0.98;1.06	1,06	0.98;1.03	1,05	0.97;1.03	1,05	0.98;1.03	1,06	0.98;1.03	1,06	0.98;1.04
R_B^2	1,12	0.98;1.06	1,15	0.98;1.05	1,07	0.98;1.05	1,10	0.98;1.06	1,10	0.99;1.06	1,07	0.98;1.05
EQM	1,09	0.98;1.03	1,18	0.98;1.08	1,15	0.99;1.09	1,14	0.99;1.10	1,12	0.99;1.10	1,14	0.99;1.11
VMR	1,05	0.98;1.03	1,05	0.98;1.03	1,06	0.98;1.03	1,05	0.97;1.03	1,05	0.97;1.03	1,06	0.97;1.03
	Heidelberguer & Welch											
β_1	0,050	0.07;0.98	0,051	0.07;0.98	0,051	0.07;0.97	0,050	0.07;0.97	0,051	0.07;0.98	0,051	0.08;0.97
β_2	0,050	0.07;0.98	0,052	0.07;0.97	0,050	0.07;0.97	0,050	0.06;0.98	0,050	0.08;0.98	0,050	0.07;0.98
β_3	0,050	0.07;0.97	0,052	0.07;0.97	0,050	0.07;0.98	0,051	0.07;0.97	0,051	0.07;0.98	0,051	0.07;0.97
ϕ_2	0,050	0.08;0.98	0,052	0.07;0.98	0,050	0.07;0.98	0,051	0.08;0.98	0,052	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97
τ	0,051	0.08;0.98	0,050	0.07;0.98	0,051	0.07;0.97	0,051	0.06;0.98	0,050	0.07;0.96	0,052	0.08;0.98
R_B^2	0,052	0.08;0.98	0,051	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,051	0.08;0.97	0,051	0.07;0.98	0,051	0.08;0.98
EQM	0,051	0.08;0.98	0,051	0.08;0.97	0,052	0.07;0.98	0,050	0.07;0.98	0,050	0.07;0.98	0,051	0.07;0.97
VMR	0,053	0.07;0.98	0,052	0.08;0.98	0,050	0.07;0.98	0,051	0.07;0.98	0,051	0.08;0.98	0,050	0.07;0.98

* n_r : Tamanhos das reamostras.

M: maior valor do critério das 1000 reamostras ou menor valor, no caso do critério de Heidelberguer & Welch..

Q: quantil de 2,5 e 97,5% das 1000 reamostras.

Tabela 26 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori não informativa geradas pelas reamostragens do tratamento Patchouli.

n_r	3		4		5		6		7		8	
	Geweke											
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
β_1	1,957	0.03;1.75	1,941	0.02;1.73	1,954	0.03;1.77	1,956	0.023;1.75	1,959	0.03;1.77	1,940	0.03;1.76
β_2	1,955	0.03;1.75	1,957	0.03;1.75	1,958	0.03;1.70	1,949	0.04;1.77	1,939	0.03;1.71	1,932	0.03;1.71
β_3	1,933	0.03;1.75	1,956	0.03;1.79	1,914	0.03;1.81	1,958	0.03;1.74	1,915	0.03; 1.80	1,959	0.03; 1.80
ϕ_1	1,942	0.03; 1.76	1,939	0.03;1.76	1,956	0.03; 1.75	1,952	0.03; 1.76	1,923	0.03; 1.73	1,958	0.02; 1.8
ϕ_2	1,952	0.04;1.77	1,945	0.03;1.72	1,959	0.02;1.78	1,940	0.02;1.69	1,956	0.03; 1.77	1,958	0.04; 1.75
τ	1,931	0.03;1.71	1,932	0.03;1.71	1,959	0.03;1.74	1,954	0.04;1.77	1,953	0.04;1.77	1,957	0.03;1.66
R_B^2	1,959	0.03;1.77	1,941	0.03;1.70	1,944	0.02;1.71	1,945	0.04;1.74	1,919	0.02;1.75	1,948	0.03;1.74
EQM	1,948	0.03;1.81	1,950	0.04;1.76	1,959	0.03;1.78	1,944	0.03;1.78	1,953	0.05;1.75	1,940	0.03;1.77
VMR	1,930	0.03;1.7	1,934	0.02;1.73	1,945	0.03;1.72	1,945	0.03;1.81	1,958	0.02;1.76	1,944	0.02;1.75
	Raftery & Lewis											
β_1	1,08	0.98;1.05	1,090	0.98;1.06	1,10	0.98;1.06	1,09	0.98;1.06	1,100	0.99;1.06	1,08	0.98;1.05
β_2	1,09	0.98;1.05	1,08	0.98;1.05	1,08	0.98;1.06	1,10	0.99;1.07	1,10	0.98;1.07	1,09	0.99;1.07
β_3	1,05	0.97;1.03	1,05	0.98;1.03	1,06	0.98;1.03	1,06	0.98;1.03	1,05	0.98;1.03	1,06	0.98;1.03
ϕ_1	1,09	0.97;1.05	1,10	0.98;1.06	1,11	0.98;1.07	1,12	0.98;1.08	1,11	0.98;1.08	1,10	0.99;1.08
ϕ_2	1,04	0.97;1.03	1,05	0.97;1.03	1,05	0.98;1.03	1,06	0.97;1.03	1,06	0.98;1.03	1,05	0.97;1.03
τ	1,05	0.976;1.03	1,05	0.97;1.03	1,05	0.98;1.03	1,10	0.97;1.03	1,06	0.97;1.03	1,05	0.98;1.03
R_B^2	1,08	0.98;1.05	1,08	0.98;1.05	1,09	0.98;1.06	1,1	0.99;1.06	1,09	0.98;1.06	1,08	0.99;1.05
EQM	1,08	0.98;1.05	1,11	0.98;1.06	1,08	0.98;1.05	1,06	0.98;1.04	1,07	0.98;1.05	1,07	0.98;1.06
VMR	1,05	0.97;1.03	1,06	0.98;1.03	1,05	0.97;1.03	1,05	0.97;1.03	1,06	0.97;1.03	1,08	0.97;1.03
	Heidelberguer & Welch											
β_1	0,050	0.07;0.97	0,051	0.07;0.97	0,050	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,053	0.06;0.98	0,050	0.06;0.97
β_2	0,051	0.06;0.97	0,050	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,051	0.07;0.98	0,051	0.08;0.99	0,051	0.06;0.98
β_3	0,050	0.07;0.97	0,051	0.07;0.97	0,051	0.07;0.98	0,050	0.07;0.98	0,051	0.07;0.98	0,053	0.08;0.98
ϕ_1	0,052	0.07;0.97	0,051	0.07;0.99	0,050	0.07;0.98	0,050	0.08;0.98	0,050	0.07;0.98	0,051	0.07;0.98
ϕ_2	0,050	0.07;0.97	0,052	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,05	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,050	0.08;0.97
τ	0,050	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,050	0.07;0.97	0,050	0.08;0.97	0,050	0.07;0.97	0,050	0.08;0.98
R_B^2	0,050	0.07;0.98	0,050	0.06;0.98	0,050	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,051	0.07;0.98	0,050	0.08;0.98
EQM	0,050	0.06;0.97	0,050	0.06;0.97	0,050	0.08;0.97	0,050	0.07;0.98	0,050	0.08;0.97	0,050	0.07;0.98
VMR	0,050	0.07;0.97	0,050	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,050	0.07;0.98	0,050	0.07;0.98	0,050	0.07;0.98

n_r : Tamanhos das reamostras.

M: maior valor do critério das 1000 reamostras ou menor valor, no caso do critério de Heidelberguer & Welch.

Q: quantil de 2,5 e 97,5% das 1000 reamostras.

Tabela 27 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori não informativa geradas pelas reamostragens do tratamento Testemunha.

* n_r	3		4		5		6		7		8	
	Geweke											
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
β_1	1,950	0.02;1.67	1,954	0.03;1.66	1,953	0.03;1.71	1,942	0.03;1.70	1,954	0.03;1.78	1,958	0.04;1.77
β_2	1,955	0.02;1.72	1,93	0.03;1.78	1,925	0.04;1.76	1,957	0.04;1.76	1,945	0.02;1.76	1,955	0.03;1.72
β_3	1,958	0.03;1.74	1,95	0.03;1.81	1,957	0.03; 1.83	1,946	0.03;1.82	1,956	0.04;1.75	1,952	0.03;1.76
ϕ_1	1,958	0.03;1.77	1,924	0.03;1.73	1,939	0.03;1.74	1,948	0.03;1.82	1,960	0.04;1.79	1,957	0.03;1.71
τ	1,944	0.02;1.72	1,96	0.03;1.79	1,957	0.02;1.69	1,945	0.04;1.74	1,948	0.02;1.71	1,953	0.04;1.74
R_B^2	1,939	0.03;1.70	1,958	0.01; 1.76	1,957	0.03;1.66	1,957	0.03; 1.73	1,937	0.04;1.72	1,953	0.03;1.72
EQM	1,945	0.03;1.74	1,956	0.03;1.75	1,948	0.03; 1.76	1,933	0.03;1.76	1,954	0.03;1.81	1,955	0.03;1.72
VMR	1,953	0.02;1.76	1,959	0.02;1.76	1,960	0.03;1.73	1,945	0.03;1.74	1,944	0.03;1.72	1,948	0.04;1.72
	Raftery & Lewis											
β_1	1,75	0.99;1.12	1,13	0.99 1.08	1,20	0.99; 1.11	1,14	0.99; 1.09	1,12	0.99;1.10	1,12	0.99;1.08
β_2	1,14	0.99;1.10	1,14	0.99;1.10	1,18	0.99;1.11	1,15	0.99;1.12	1,15	0.99;1.10	1,12	0.99;1.09
β_3	1,98	0.98;1.05	1,09	0.99;1.07	1,11	0.99;1.07	1,12	0.99;1.08	1,11	0.99;1.08	1,11	0.99;1.07
ϕ_1	1,05	0.97;1.03	1,06	0.98 1.03	1,05	0.98;1.03	1,05	0.98;1.03	1,05	0.98;1.03	1,82	0.97;1.03
τ	1,05	0.98;1.03	1,06	0.98;1.04	1,06	0.98;1.03	1,05	0.98;1.03	1,06	0.98;1.03	1,05	0.97;1.03
R_B^2	1,35	0.98;1.22	1,15	0.99;1.12	1,16	0.99;1.10	1,09	0.99;1.10	1,14	0.99;1.11	1,11	0.99;1.09
EQM	1,08	0.98;1.06	1,18	0.99;1.11	1,15	0.99;1.1	1,21	0.99;1.13	1,14	0.99;1.09	1,14	0.99;1.10
VMR	1,05	0.97;1.03	1,05	0.97;1.03	1,06	0.97;1.03	1,05	0.98;1.03	1,05	0.97;1.03	1,05	0.97;1.03
	Heidelberguer & Welch											
β_1	0,051	0.07;0.97	0,051	0.07;0.98	0,050	0.07;0.98	0,051	0.07;0.98	0,052	0.07;0.98	0,050	0.08;0.97
β_2	0,052	0.07;0.97	0,052	0.07;0.98	0,050	0.07;0.98	0,053	0.07;0.97	0,050	0.07;0.98	0,052	0.07;0.98
β_3	0,051	0.07;0.98	0,052	0.07;0.98	0,051	0.08;0.98	0,050	0.07;0.97	0,051	0.07;0.97	0,051	0.07;0.97
ϕ_1	0,052	0.08;0.98	0,052	0.07;0.96	0,052	0.07;0.98	0,05	0.07;0.97	0,050	0.07;0.98	0,051	0.08;0.97
τ	0,052	0.07;0.98	0,050	0.08;0.98	0,050	0.07;0.97	0,051	0.07;0.97	0,050	0.06;0.98	0,052	0.07;0.97
R_B^2	0,051	0.08;0.98	0,051	0.08;0.98	0,051	0.07;0.97	0,050	0.07;0.98	0,052	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97
EQM	0,052	0.08;0.98	0,051	0.07;0.97	0,05	0.07;0.98	0,050	0.07;0.97	0,050	0.07;0.97	0,051	0.08;0.97
VMR	0,050	0.07;0.98	0,052	0.07;0.97	0,05	0.07;0.97	0,050	0.07;0.97	0,050	0.08;0.98	0,050	0.07;0.97

n_r : Tamanhos das reamostras.

M: maior valor do critério das 1000 reamostras ou menor valor, no caso do critério de Heidelberguer & Welch.

Q: quantil de 2,5 e 97,5% das 1000 reamostras.

**APÊNDICE D - Critérios de convergência dos parâmetros e métricas do modelo
ajustado com priori não informativa associados às reamostras-
gens de cada tratamento.**

Tabela 28 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori informativa geradas pelas reamostrages do tratamento Patchouli.

n_r	3		4		5		6		7		8	
					Geweke							
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
β_1	1,957	0.031;1.759	1,942	0.036;1.703	1,957	0.029;1.821	1,958	0.016;1.792	1,958	0.031;1.764	1,959	0.031;1.769
β_2	1,932	0.032;1.714	1,956	0.028;1.737	1,955	0.032;1.747	1,959	0.026;1.795	1,951	0.027;1.785	1,947	0.038;1.759
β_3	1,955	0.021;1.780	1,951	0.032;1.720	1,959	0.032;1.719	1,937	0.032;1.729	1,960	0.025;1.770	1,955	0.028;1.776
ϕ_1	1,942	0.025;1.751	1,959	0.022;1.763	1,944	0.028;1.768	1,950	0.026;1.784	1,957	0.028;1.745	1,946	0.033;1.762
ϕ_2	1,953	0.027;1.700	1,938	0.029;1.731	1,948	0.027;1.765	1,959	0.031;1.791	1,958	0.023;1.742	1,959	0.030;1.768
τ	1,954	0.042;1.677	1,926	0.034;1.720	1,958	0.036;1.708	1,948	0.021;1.714	1,946	0.025;1.754	1,945	0.038;1.743
R_B^2	1,957	0.040;1.729	1,935	0.037;1.692	1,947	0.030;1.747	1,926	0.023;1.795	1,940	0.024;1.726	1,960	0.029;1.725
EQM	1,958	0.031;1.748	1,956	0.027;1.789	1,957	0.040;1.795	1,956	0.034;1.761	1,934	0.031;1.734	1,937	0.034;1.730
VMR	1,953	0.030;1.752	1,934	0.025;1.752	1,959	0.025;1.723	1,930	0.023;1.743	1,953	0.019;1.764	1,955	0.031;1.776
Raftery & Lewis												
β_1	1,080	0.988;1.040	1,080	0.989;1.050	1,07	0.991;1.050	1,070	0.991;1.050	1,070	0.994;1.060	1,08	0.996;1.060
β_2	1,06	0.990;1.050	1,07	0.991;1.050	1,07	0.991;1.050	1,08	0.991;1.060	1,08	0.993;1.060	1,09	0.997;1.060
β_3	1,05	0.982;1.020	1,04	0.985;1.020	1,05	0.982;1.020	1,04	0.984;1.020	1,04	0.985;1.030	1,05	0.983;1.020
ϕ_1	1,07	0.984;1.050	1,08	0.984;1.060	1,08	0.986;1.060	1,09	0.988;1.070	1,09	0.988;1.070	1,08	0.989;1.060
ϕ_2	1,04	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,03	0.981;1.020
τ	1,04	0.983;1.020	1,03	0.983;1.020	1,03	0.982;1.020	1,0	0.983;1.020	1,04	0.982;1.020	1,04	0.983;1.020
R_B^2	1,07	0.986;1.040	1,08	0.988;1.040	1,07	0.990;1.050	1,07	0.989;1.050	1,08	0.989;1.060	1,06	0.986;1.040
EQM	1,06	0.988;1.050	1,09	0.987;1.050	1,06	0.988;1.040	1,07	0.988;1.050	1,08	0.988;1.050	1,05	0.989;1.040
VMR	1,04	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,03	0.984;1.020	1,03	0.982;1.020
Heidelberguer & Welch												
β_1	0,051	0.073;0.975	0,052	0.077;0.977	0,050	0.075;0.976	0,051	0.077;0.976	0,051	0.071;0.976	0,051	0.078;0.978
β_2	0,051	0.078;0.975	0,052	0.077;0.973	0,050	0.070;0.971	0,051	0.065;0.980	0,052	0.069;0.976	0,050	0.067;0.979
β_3	0,051	0.065;0.976	0,051	0.074;0.981	0,051	0.076;0.982	0,050	0.080;0.976	0,051	0.075;0.975	0,052	0.066;0.976
ϕ_1	0,050	0.065;0.981	0,050	0.068;0.977	0,050	0.072;0.982	0,051	0.082;0.973	0,050	0.075;0.981	0,050	0.076;0.985
ϕ_2	0,052	0.080;0.980	0,050	0.069;0.978	0,050	0.075;0.975	0,050	0.067;0.974	0,050	0.066;0.983	0,052	0.070;0.975
τ	0,051	0.071;0.969	0,051	0.072;0.977	0,054	0.077;0.976	0,052	0.073;0.976	0,050	0.071;0.974	0,050	0.077;0.977
R_B^2	0,050	0.069;0.982	0,052	0.071;0.978	0,053	0.078;0.974	0,051	0.078;0.972	0,050	0.068;0.983	0,051	0.064;0.973
EQM	0,050	0.068;0.976	0,051	0.074;0.973	0,050	0.069;0.978	0,051	0.071;0.981	0,050	0.073;0.975	0,050	0.072;0.983
VMR	0,054	0.076;0.973	0,051	0.075;0.976	0,051	0.066;0.973	0,051	0.072;0.980	0,050	0.086;0.976	0,052	0.075;0.972

n_r : Tamanhos das reamostras.

M: maior valor do critério das 1000 reamostras ou menor valor, no caso do critério de Heidelberguer & Welch.

Q: quantil de 2,5 e 97,5% das 1000 reamostras.

Tabela 29 – Critérios de convergência referente às cadeias a posteriori dos parâmetros e métricas do modelos ajustado com priori informativa geradas pelas reamostrages do tratamento Testemunha.

n_r	3		4		5		6		7		8	
	Geweke											
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
β_1	1,953	0.030;1.828	1,956	0.033;1.792	1,956	0.028;1.815	1,945	0.019;1.716	1,955	0.019;1.716	1,956	0.019;1.716
β_2	1,952	0.020;1.736	1,934	0.022;1.781	1,943	0.034;1.772	1,950	0.026;1.738	1,951	0.026;1.738	1,936	0.026;1.738
β_3	1,951	0.026;1.772	1,954	0.028;1.756	1,957	0.036;1.749	1,932	0.029;1.734	1,946	0.029;1.734	1,957	0.029;1.734
ϕ_1	1,951	0.021;1.771	1,957	0.026;1.739	1,957	0.032;1.774	1,948	0.039;1.838	1,959	0.039;1.838	1,959	0.039;1.838
τ	1,933	0.043;1.773	1,940	0.030;1.717	1,956	0.026;1.767	1,925	0.029;1.700	1,932	0.029;1.700	1,958	0.029;1.701
R_B^2	1,959	0.027;1.714	1,958	0.029;1.722	1,948	0.022;1.723	1,954	0.025;1.735	1,918	0.025;1.735	1,947	0.025;1.735
EQM	1,946	0.027;1.729	1,955	0.0341.745	1,956	0.030;1.770	1,958	0.031;1.748	1,909	0.031;1.748	1,943	0.031;1.748
VMR	1,959	0.029;1.738	1,956	0.031;1.749	1,959	0.029;1.721	1,918	0.028;1.716	1,957	0.028;1.716	1,923	0.028;1.716
	Raftery & Lewis											
β_1	1,160	0.992;1.090	1,090	0.991;1.080	1,10	0.994;1.080	1,130	0.992;1.090	1,110	0.992;1.090	1,09	0.992;1.090
β_2	1,14	0.994;1.080	1,12	0.998;1.090	1,14	0.995;1.100	1,15	0.996;1.110	1,12	0.996;1.110	1,14	0.996;1.110
β_3	1,08	0.992;1.050	1,08	0.990;1.060	1,09	0.992;1.060	1,10	0.993;1.070	1,12	0.993;1.070	1,08	0.993;1.070
ϕ_1	1,04	0.982;1.020	1,05	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,03	0.982;1.020	1,05	0.982;1.020
τ	1,05	0.982;1.020	1,04	0.984;1.020	1,04	0.985;1.030	1,0	0.984;1.030	1,05	0.984;1.030	1,04	0.984;1.030
R_B^2	1,24	0.991;1.110	1,21	0.992;1.110	1,21	0.991;1.100	1,12	0.993;1.090	1,14	0.993;1.090	1,11	0.993;1.090
EQM	1,11	0.990;1.060	1,11	0.991;1.080	1,15	0.993;1.120	1,14	0.993;1.090	1,11	0.993;1.090	1,10	0.993;1.090
VMR	1,03	0.982;1.020	1,04	0.981;1.020	1,04	0.982;1.020	1,03	0.982;1.020	1,04	0.982;1.020	1,05	0.982;1.020
	Heidelberguer & Welch											
β_1	0,050	0.065;0.968	0,051	0.076;0.970	0,050	0.076;0.975	0,050	0.064;0.975	0,050	0.064;0.975	0,051	0.064;0.975
β_2	0,052	0.072;0.982	0,051	0.073;0.979	0,054	0.079;0.975	0,050	0.070;0.977	0,052	0.070;0.977	0,050	0.070;0.977
β_3	0,050	0.080;0.974	0,051	0.069;0.977	0,051	0.073;0.973	0,051	0.068;0.978	0,051	0.068;0.978	0,051	0.068;0.978
ϕ_1	0,051	0.071;0.981	0,050	0.074;0.978	0,050	0.067;0.974	0,050	0.064;0.972	0,051	0.064;0.972	0,052	0.064;0.972
τ	0,051	0.069;0.980	0,051	0.067;0.971	0,050	0.065;0.977	0,050	0.070;0.984	0,050	0.071;0.984	0,050	0.071;0.984
R_B^2	0,050	0.073;0.975	0,051	0.066;0.967	0,051	0.076;0.979	0,050	0.071;0.975	0,052	0.071;0.975	0,050	0.071;0.975
EQM	0,051	0.075;0.981	0,050	0.063;0.971	0,053	0.072;0.969	0,052	0.074;0.981	0,051	0.074;0.981	0,050	0.074;0.981
VMR	0,051	0.070;0.979	0,055	0.072;0.977	0,052	0.078;0.977	0,051	0.076;0.979	0,050	0.076;0.979	0,051	0.076;0.979

n_r : Tamanhos das reamostras.

M: maior valor do critério das 1000 reamostras ou menor valor, no caso do critério de Heidelberguer & Welch.

Q: quantil de 2,5 e 97,5% das 1000 reamostras.

APÊNDICE E - Rotina da modelagem.

```

#-----
# Ajuste de Modelo Logístico AR(2)
#          PATCHOULI
#-----

#Pacotes
library(R2OpenBUGS)
library(coda)

#Leitura do banco de dados em csv
dados<- read.csv(file = "Patchouli AR2.csv",header = T,
dec=".",sep = ",");dados
attach(dados)

#Modelo OpenBUGS
sink("Patchouli_AR2.txt")
cat("
model{
  for( i in 1 : N ) {
    y2[i] ~ dnorm(mu[i], tau2)
    mu[i] <- beta1/(1+exp(-beta3*(x2[i]-beta2)))+P1*e1_b1[i]+P2*e2_b2[i]}
#priors nao informativas
  beta1 ~ dnorm(0.0, 0.0001)
  beta2 ~ dnorm(0.0, 0.0001)
  beta3 ~ dnorm(0.0, 0.0001)
  P1 ~ dunif(-1,1)
  P2 ~ dunif(-1,1)
  tau2 ~ dgamma(0.1, 0.01)
  sigma2<- 1/tau2

  for( i in 1 : N ) {
    yp[i] <- beta1/(1+exp(-beta3*(x2[i]-beta2)))+P1*e1_b1[i]+P2*e2_b2[i]
  }

syp2<-pow(sd(yp[]),2)
R2B <- syp2/(syp2+sigma2)
}
",fill=TRUE)

```

```

sink ()

N = length(x2)
data = list("x2", "y2", "N", "e1_b1", "e2_b2")
inits = function(){ list(beta1=75, beta2=3, beta3=1, P1=0, P2=0, tau2=1)
}

theta<-c("beta1", "beta2", "beta3", "P1", "P2", "tau2")

nonlinear.log = bugs(data, inits,
                    model.file="Patchouli_AR2.txt",
                    parameters=c(theta, "yp", "R2B"),
                    n.chains=1, n.iter=100000, n.burnin=80000, n.thin=100,
                    codaPkg=FALSE, debug=T)
#####
# OBS: O comando codaPkg=FALSE para salvar as medias
do y predito em um objeto
#####
post.log<-as.mcmc(nonlinear.log$sims.matrix[,]) # salva a saida como cadeia mcmc

#Criterios de convergencia
geweke.diag(post.log)
raftery.diag(post.log)
heidel.diag(post.log)

#grafico da cadeia a posteriori
#plot(post.log[,1]) #varias indice da coluna para variar parametro

# Intervalo HPD 95
HPDinterval(post.log)

resumo=print(nonlinear.log, dig=3) # salva resumo da cadeia mcmc com 3 digitos

ypredl<-resumo$mean$yp #salva as medias do y predito objeto "ypredl"

#####
#Residuos
dip=ypredl-y2 #Preditos - observados
dip2=dip/y2 #Relativo aos obervados

```

```

np<-length(ypred1)

EQM=sum(dip^2)/np #calcula o erro quadratico medio

#Vies medio relativo
VMR<- abs(sum(dip2)*100/np);VMR

# CV (%)
cv_b1<- (resumo$sd$beta1/resumo$mean$beta1)*100;cv_b1
cv_b2<- (resumo$sd$beta2/resumo$mean$beta2)*100;cv_b2
cv_b3<- (resumo$sd$beta3/resumo$mean$beta3)*100;cv_b3

#-----
#Teste de Independencia
Box.test(resid_pred1)
#-----
#Verificando se os residuos sao autocorrelacionados
#FAC e FACP
#-----
#FAC
acf(resid_pred1)

# FACP para verificar a ordem do AR(p)
# a ser incorporada na modelagem
pacf(resid_pred1)

#=====
# Calculo do Fator de Bayes para parametros phi
#=====
nc=length(post.log[,1])

par1<- matrix(NA, nrow= nc)
par1<-post.log[,1] #beta1
par2<-post.log[,2] #beta2
par3<-post.log[,3] #beta3
par4<-post.log[,4] #P1
par5<-post.log[,5] #P2

#histogramas da posteriori marginal

```

```

par(mfrow = c(1, 1))
hist(par1, main = "Beta1")
hist(par2, main = "Beta2")
hist(par3, main = "Beta3")
hist(par4, main = "P1")
hist(par5, main = "P2")

sim <- matrix(NA, nrow=nc)
tetha0=0.0
for (j in 1 : nc) {
  if (par1[j] <= tetha0) {
    sim[j]<-1 # contando H0
  }
  else {
    sim[j]<-0
  }
}
#neste caso a hipotese H1 corresponde ao parametro beta1 ser positivo
#-----
Prob_H0=mean(sim); Prob_H0
Prob_H1=1- Prob_H0; Prob_H1
#-----
# Chance a priori (sempre verificar se favorece H0 ou H1)
O_h1h0=Prob_H1/Prob_H0 #prob a posteriori de H1 sobre H0
O_h0h1=Prob_H0/Prob_H1 #prob a posteriori de H0 sobre H1

#-----
# Usando o comando Curve para gerar graficos dos ajustes
#-----
# Salvando os coeficientes estimados#
b1=resumo$mean$beta1
b1 #estimativa de beta1
b2=resumo$mean$beta2
b2 #estimativa de beta2
b3=resumo$mean$beta3
b3 #estimativa de beta3

par(mfrow = c(1, 1))
x<- x2

```

```
y<- y2
plot(x,y,pch=16,ylim=c(0,90),main="", xlab="Tempo (dias)",
ylab="Crescimento micelial radial")
curve(b1/(1+exp(-b3*(x-b2))), from=0, to=100, add=T, col=2)
```

APÊNDICE F - Rotina da reamostragem.

```

#=====
# REAMOSTRAGEM PATCHOULI AR(2) Nr=3
#=====#
#Pacotes
library(R2OpenBUGS)
library(coda)

#Carregando dados em csv
dados<- read.csv("Patchouli AR2.csv",header = T, sep=",",dec="."); dados
attach(dados)

#Funcao que gera a matriz P de resultados dos ajustes das ns reamostras
simulac<- function(ns){

  P<-matrix(0,ns,91) #matriz de resultados

#Sorteio das repeticoes das novas amostras
for (i in 1:ns) {

  n= 3 #tamanho da reamostra
# sorteio das repeticoes da reamostra
#Sao 9 repeticoes do tratamento , com sorteio SEM REPOSICAO
sorteio=sample(dados[1:9,1],n,replace = FALSE) ;sorteio

reps<- matrix(sorteio,1,3);reps #n=3
#Data frame da nova amostra:
reamostra<- data.frame(rbind( dados[dados$rep == reps[,1],],
dados[dados$rep == reps[,2],],dados[dados$rep == reps[,3],])); reamostra

#Modelo OpenBUGS#
sink("Logistico_Patchouli_AR2.txt")
cat("
model{
  for( i in 1 : N ) {
    yr[i] ~ dnorm(mu[i], tau2)
    mu[i] <- beta1/(1+exp(-beta3*(xr[i]-beta2)))+P1*e1_b1[i]+P2*e2_b2[i] }
# prioris nao informativas

```

```

beta1 ~ dnorm(0.0, 0.0001)
beta2 ~ dnorm(0.0, 0.0001)
beta3 ~ dnorm(0.0, 0.0001)
tau2 ~ dgamma(0.1, 0.01)
P1 ~ dunif(-1,1)
P2 ~ dunif(-1,1)
sigma2<-1/tau2

for( i in 1 : N ) {
  yp[i] <- beta1/(1+exp(-beta3*(xr[i]-beta2)))+P1*e1_b1[i]+P2*e2_b2[i]
  d[i]<- yp[i]-yr[i]
  d2[i]<- d[i]*d[i]
  dr[i]<- d[i]/yr[i] }

syp2<-pow(sd(yp[]),2)
R2B <- syp2/(syp2+sigma2)
EQM<- sum(d2[])/N
VMR<- abs(sum(dr[])*100/N)
desvio<- sum(d[])/N }
", fill=TRUE)
sink()

xr<- reamostra$x2
yr<- reamostra$y2
e1_b1<- reamostra$e1_b1
e2_b2<- reamostra$e2_b2
N = length(xr)
data = list("xr","yr","e1_b1","e2_b2","N")
inits = function(){
  list(beta1=1,beta2=1,beta3=1,P1=0,P2=0,tau2=1)
}
theta<- c("beta1","beta2","beta3","P1","P2","tau2")
#funcao bugs
patchouli.log = bugs(data, inits,
                     model.file="Logistico_Patchouli_AR2.txt",
                     parameters=c(theta,"R2B","EQM","VMR","desvio","yp"),
                     n.chains=1,n.iter=150000,n.burnin=100000,n.thin=500,
                     codaPkg=FALSE, debug=F)
#####

```

```

# OBS: O comando codaPkg=FALSE para salvar as medias
# do y predito em um objeto
#####
# salva a saida como cadeia mcmc
post.log<-as.mcmc(patchouli.log$sims.matrix[,])
post<- summary(post.log)

#-----
# Criterios de convergencia
#-----
gk<-geweke.diag(post.log) #Valor do criterio de Geweke
rft<-raftery.diag(post.log) #Valor do fator de dependencia de Raftery-Lewis
hw<-heidel.diag(post.log) #Valor-p do teste de Heideberger-Welch

#-----
#Intervalo HPD 95
#-----
hpd<-HPDinterval(post.log)
#-----
# Resumo DIC
#-----
resumo=(patchouli.log)

#-----
# Construcao da matriz de resultados
#-----
R<-matrix(0,1,91)
R[,1]<-post[[1]][[1]] #Media de beta1
R[,2]<-post[[1]][[2]] #Media de beta2
R[,3]<-post[[1]][[3]] #Media de beta3
R[,4]<-post[[1]][[4]] #Media de P1
R[,5]<-post[[1]][[5]] #Media de P2
R[,6]<-post[[1]][[6]] #Media de tau
R[,7]<-post[[1]][[7]] #Media de R2
R[,8]<-post[[1]][[8]] #Media de EQM
R[,9]<-post[[1]][[9]] #Media de VMR absoluto
R[,10]<-post[[1]][[10]] #Media do desvio medio bruto
R[,11]<- resumo$DIC #DIC

```

```

R[,12]<-post[[1]][[39]] #Desvio padrao de beta1
R[,13]<-post[[1]][[40]] #Desvio padrao de beta2
R[,14]<-post[[1]][[41]] #Desvio padrao de beta3
R[,15]<-post[[1]][[42]] #Desvio padrao de P1
R[,16]<-post[[1]][[43]] #Desvio padrao de P2
R[,17]<-post[[1]][[44]] #Desvio padrao de tau
R[,18]<-post[[1]][[45]] #Desvio padrao de R2
R[,19]<-post[[1]][[46]] #Desvio padrao de EQM
R[,20]<-post[[1]][[47]] #Desvio padrao de VMR absoluto
R[,21]<-post[[1]][[48]] #Desvio padrao do desvio bruto medio

```

```

R[,22]<-(R[,12]/R[,1])*100 #CV de beta1
R[,23]<-(R[,13]/R[,2])*100 #CV de beta2
R[,24]<-(R[,14]/R[,3])*100 #CV de beta3
R[,25]<-(R[,15]/R[,4])*100 #CV de P2
R[,26]<-(R[,16]/R[,5])*100 #CV de P1
R[,27]<-(R[,17]/R[,6])*100 #CV de tau
R[,28]<-(R[,18]/R[,7])*100 #CV de R2
R[,29]<-(R[,19]/R[,8])*100 #CV de EQM
R[,30]<-(R[,20]/R[,9])*100 #CV de VMR absoluto
R[,31]<-(R[,21]/R[,10])*100 #CV de desvio bruto medio

```

```

R[,32]<-post[[2]][[77]] #Mediana de beta1
R[,33]<-post[[2]][[78]] #Mediana de beta2
R[,34]<-post[[2]][[79]] #Mediana de beta3
R[,35]<-post[[2]][[80]] #Mediana de P2
R[,36]<-post[[2]][[81]] #Mediana de P1
R[,37]<-post[[2]][[82]] #Mediana de tau
R[,38]<-post[[2]][[83]] #Mediana de R2
R[,39]<-post[[2]][[84]] #Mediana de EQM
R[,40]<-post[[2]][[85]] #Mediana de VMR absoluto
R[,41]<-post[[2]][[86]] #Mediana do desvio bruto medio

```

```

R[,42]<-hpd[[1]] #Limite inferior do HPD de beta1
R[,43]<-hpd[[39]] #Limite superior do HPD de beta1
R[,44]<-hpd[[2]] #Limite inferior do HPD de beta2
R[,45]<-hpd[[40]] #Limite superior do HPD de beta2
R[,46]<-hpd[[3]] #Limite inferior do HPD de beta3
R[,47]<-hpd[[41]] #Limite superior do HPD de beta3

```

```

R[,48]<-hpd[[4]] #Limite inferior do HPD de P1
R[,49]<-hpd[[42]] #Limite superior do HPD de P1
R[,50]<-hpd[[5]] #Limite inferior do HPD de P2
R[,51]<-hpd[[43]] #Limite superior do HPD de P2
R[,52]<-hpd[[6]] #Limite inferior do HPD de tau
R[,53]<-hpd[[44]] #Limite superior do HPD de tau
R[,54]<-hpd[[7]] #Limite inferior do HPD de R2
R[,55]<-hpd[[45]] #Limite superior do HPD de R2
R[,56]<-hpd[[8]] #Limite inferior do HPD de EQM
R[,57]<-hpd[[46]] #Limite superior do HPD de EQM
R[,58]<-hpd[[9]] #Limite inferior do HPD de VMR
R[,59]<-hpd[[47]] #Limite superior do HPD de VMR
R[,60]<-hpd[[10]] #Limite inferior do HPD de desvio
R[,61]<-hpd[[48]] #Limite superior do HPD de desvio

R[,62]<-abs(gk[[1]][[1]]) #Valor do crit. de Geweke para beta1
R[,63]<-abs(gk[[1]][[2]]) #Valor do crit. de Geweke para beta2
R[,64]<-abs(gk[[1]][[3]]) #Valor do crit. de Geweke para beta3
R[,65]<-abs(gk[[1]][[4]]) #Valor do crit. de Geweke para P1
R[,66]<-abs(gk[[1]][[5]]) #Valor do crit. de Geweke para P2
R[,67]<-abs(gk[[1]][[6]]) #Valor do crit. de Geweke para tau
R[,68]<-abs(gk[[1]][[7]]) #Valor do crit. de Geweke para R2
R[,69]<-abs(gk[[1]][[8]]) #Valor do crit. de Geweke para EQM
R[,70]<-abs(gk[[1]][[9]]) #Valor do crit. de Geweke para VMR
R[,71]<-abs(gk[[1]][[10]]) #Valor do crit. de Geweke para desvio

R[,72]<-rft[[2]][[115]] #Valor do crit. de Raftery para beta1
R[,73]<-rft[[2]][[116]] #Valor do crit. de Raftery para beta2
R[,74]<-rft[[2]][[117]] #Valor do crit. de Raftery para beta3
R[,75]<-rft[[2]][[118]] #Valor do crit. de Raftery para P1
R[,76]<-rft[[2]][[119]] #Valor do crit. de Raftery para P2
R[,77]<-rft[[2]][[120]] #Valor do crit. de Raftery para tau
R[,78]<-rft[[2]][[121]] #Valor do crit. de Raftery para R2
R[,79]<-rft[[2]][[122]] #Valor do crit. de Raftery para EQM
R[,80]<-rft[[2]][[123]] #Valor do crit. de Raftery para VMR
R[,81]<-rft[[2]][[124]] #Valor do crit. de Raftery para desvio

R[,82]<-hw[[77]] #Valor-p do teste de Heideberg. para beta1
R[,83]<-hw[[78]] #Valor-p do teste de Heideberg. para beta2

```

```

R[,84]<-hw[[79]] #Valor-p do teste de Heideberg. para beta3
R[,85]<-hw[[80]] #Valor-p do teste de Heideberg. para P1
R[,86]<-hw[[81]] #Valor-p do teste de Heideberg. para P2
R[,87]<-hw[[82]] #Valor-p do teste de Heideberg. para tau
R[,88]<-hw[[83]] #Valor-p do teste de Heideberg. para R2
R[,89]<-hw[[84]] #Valor-p do teste de Heideberg. para EQM
R[,90]<-hw[[85]] #Valor-p do teste de Heideberg. para VMR
R[,91]<-hw[[86]] #Valor-p do teste de Heideberg. para desvio

#Nomeando as colunas da matriz de resultados
dimnames(P)<-list(c(),c("Media_beta1","Media_beta2","Media_beta3","Media_P1","Media_P2","M
"DP_beta1","DP_beta2","DP_beta3","DP_P1","DP_P2","DP_tau","DP_R2",
"CV_beta1","CV_beta2","CV_beta3","CV_P1","CV_P2","CV_tau","CV_R2",
"Mediana_beta1","Mediana_beta2","Mediana_beta3","Mediana_P1","Medi
"LI_beta1","LS_beta1","LI_beta2","LS_beta2","LI_beta3","LS_beta3",
"LI_EQM","LS_EQM","LI_VMR","LS_VMR","LI_desvio","LS_desvio",
"GWK_beta1","GWK_beta2","GWK_beta3","GWK_P1","GWK_P2","GWK_tau","G
"RFT_beta1","RFT_beta2","RFT_beta3","RFT_P1","RFT_P2","RFT_tau","R
"HDW_beta1","HDW_beta2","HDW_beta3","HDW_P1","HDW_P2","HDW_tau","H

P[i,]<- R #fim do loop

#Salva a cada 50 reamostragens geradas
if(i %% 50 == 0){
  arquivo<- paste0("Diretorio\\Patchouli_n3_",i,".csv")
  #Armazenando saida
  write.csv(P,file=arquivo) #Alterar nome do arquivo
}

} #Fecha o for
#Salvando o arquivo final
write.csv(P,file="Diretorio\\Patchouli_n3_200.csv") #Alterar nome do arquivo
} #Fecha a funcao simulac

#Funcao que mede o tempo de execucao
system.time(simulac(200)) #gera 200 reamostragens

```

APÊNDICE G - Seleção de priori informativa.

Para elicitación dos hiperparâmetros da priori informativa para os tratamentos Patchouli e Testemunha foi utilizada a estratégia de flexibilização do parâmetro precisão τ das prioris pA, pZ e pAZ, apresentadas na Tabela 7. Assim foram definidas as precisões τ_L , $0,5\tau_L$ e $0,75\tau_L$. Os resultados a posteriori dos ajustes do modelo Logístico com estrutura AR com essas prioris informativas são apresentados na Tabela 30 para o tratamento Testemunha e na Tabela 31 para Patchouli.

Tabela 30 – Resultados a posteriori com amostra total, Limite inferior (LI), superior (LS) e amplitude do intervalo HPD de 95% de credibilidade de cada parâmetro β dos ajustes com diferentes prioris informativas do tratamento Testemunha.

	pA			pZ			pAZ			
	τ_L	$0,5\tau_L$	$0,75\tau_L$	τ_L	$0,5\tau_L$	$0,75\tau_L$	τ_L	$0,5\tau_L$	$0,75\tau_L$	
β_1	LI	76,83	76,77	76,8	76,76	76,77	76,76	76,77	76,78	76,76
	LS	77,88	77,85	77,86	77,82	77,82	77,83	77,85	77,85	77,83
	Amp	1,05	1,08	1,06	1,06	1,05	1,07	1,08	1,07	1,07
β_2	LI	2,62	2,62	2,62	2,61	2,61	2,61	2,62	2,62	2,61
	LS	2,70	2,70	2,69	2,69	2,69	2,69	2,69	2,69	2,69
	Amp	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08	0,07	0,08
β_3	LI	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33
	LS	1,49	1,49	1,49	1,49	1,48	1,48	1,49	1,49	1,49
	Amp	0,16	0,16	0,16	0,16	0,15	0,15	0,16	0,16	0,16
DIC	386,80	386,90	386,80	387,00	386,80	386,90	387,00	386,80	386,90	386,90
VMR	0,65	0,62	0,63	0,71	0,64	0,69	0,66	0,63	0,64	0,64

Fonte: elaborado pelos autores.

Para seleção da priori informativa, foram utilizados os critérios previamente estipulados. O primeiro critério é o DIC, em que é selecionada a priori com menor valor. Na comparação entre as diferentes prioris (Tabelas 30 e 31) não é constatado em nenhum dos casos $\Delta DIC > 5$, para ambos tratamentos. Assim, segue-se para a análise do segundo critério estipulado, as amplitudes dos intervalos HPD de 95% de credibilidade do parâmetro β_3 . A Tabela 30 apresenta as amplitudes HPD dos três parâmetros β_1 , β_2 e β_3 para as prioris informativas variando o hiperparâmetro escala da distribuição Lognormal, τ_L . Ainda que próximos, a menor amplitude verificada para o parâmetro β_3 pertencem às prioris pZ com $0,5\tau$ e $0,75\tau$ para Testemunha e pZ com $0,5\tau$ para Patchouli.

Para seleção da priori do tratamento Testemunha foi utilizado o último critério, viés médio relativo (Tabela 30).

Assim as prioris informativas selecionadas foram Zago com $0,5\tau$ para ambos tratamentos Testemunha e Patchouli. Os hiperparâmetros das distribuições a priori informativas Lognormais selecionadas são apresentados na Tabela 16 na seção 5.1.2 de Resultados.

Tabela 31 – Resultados a posteriori, Limite inferior (LI), superior (LS) e amplitude HPD de 95% de credibilidade de cada parâmetro β dos ajustes com diferentes prioris informativas do tratamento Patchouli.

		pZ		
		τ_L	$0,5\tau_L$	$0,75\tau_L$
β_1	LI	75,54	75,49	75,53
	LS	77,41	77,35	77,39
	Amplitude	1,87	1,86	1,86
β_2	LI	3,58	3,58	3,58
	LS	3,73	3,73	3,73
	Amplitude	0,15	0,15	0,15
β_3	LI	0,86	0,86	0,86
	LS	1,02	1,01	1,02
	Amplitude	0,16	0,15	0,16
DIC		397,90	397,90	398,00
VMR		0,81	0,85	0,86

Fonte: elaborado pelos autores.