

**AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE
ESTIMAÇÃO DE COMPONENTES DE
VARIÂNCIA COM APLICAÇÃO EM
BOVINOS NELORE**

EVERTON SILVA DE SANTANA

2001

EVERTON SILVA DE SANTANA

**AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO DE COMPONENTES
DE VARIÂNCIA COM APLICAÇÃO EM BOVINOS NELORE**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do curso de Mestrado em Agronomia, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para obtenção do título de “Mestre”.

Orientador

Prof. Luiz Henrique de Aquino

**LAVRAS
MINAS GERAIS – BRASIL
2001**

**Ficha Catalográfica Preparada pela Divisão de Processos Técnicos da
Biblioteca Central da UFLA**

Santana, Everton Silva de

Avaliação de métodos de estimação de componentes de variância com aplicação em bovinos nelore / Everton Silva de Santana. -- Lavras : UFLA, 2001. 136 p. : il.

Orientador: Luiz Henrique de Aquino.

Dissertação (Mestrado) – UFLA.

Bibliografia.

1. Método de estimação. 2. Não balanceamento. 3. Peso à desmama. 4. Priori não informativa. 5. Cadeia independente. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD-636.291

-636.513

EVERTON SILVA DE SANTANA

**AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO DE COMPONENTES
DE VARIÂNCIA COM APLICAÇÃO EM BOVINOS NELORE**

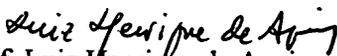
Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do curso de Mestrado em Agronomia, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para obtenção do título de “Mestre”.

APROVADA em 15 de fevereiro de 2001

Prof. Antonio Carlos de Oliveira CNPMS/EMBRAPA

Prof. Antonio Ilson Gomes de Oliveira UFLA

Prof. Eduardo Bearzoti UFLA


Prof. Luiz Henrique de Aquino
UFLA
(Orientador)

LAVRAS
MINAS GERAIS - BRASIL

Aos meus familiares,

Ao ensino público,

DEDICO.

AGRADECIMENTOS

A Deus, pela oportunidade concedida.

Aos meus pais, pelos conselhos e respeito.

Aos professores Luiz Henrique de Aquino e Eduardo Bearzoti, pelas orientações e incentivo.

Aos professores do DEX/UFLA, em especial ao Prof. Coordenador Joel Augusto Muniz, pelo incentivo e prestabilidade.

Aos funcionários do DEX/UFLA, pela convivência e disponibilidade.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela bolsa de estudo concedida.

A todos os colegas do curso, pela convivência e amizade.

Ao Fabyano, Bolsista de Iniciação Científica do Curso de Zootecnia/UFLA, pelas contribuições neste trabalho.

Ao Programa Especial de Treinamento-PET/UFRN, sob Tutoria do Prof. Paulo César Formiga Ramos, pelo incentivo e conhecimentos adquiridos.

SUMÁRIO

	Página
RESUMO.....	i
ABSTRACT.....	ii
1 INTRODUÇÃO.....	1
2 REFERENCIAL TEÓRICO.....	3
2.1 Simbologia Matricial.....	10
2.2 Descrição Teórica dos Modelos	13
2.3 Métodos.....	18
2.3.1 Método da Análise de Variância (<i>ANOVA</i>).....	18
2.3.2 Método III de Henderson.....	26
2.3.3 Método da Máxima Verossimilhança (<i>ML</i>).....	33
2.3.4 Método da Máxima Verossimilhança Restrita (<i>REML</i>).....	39
2.3.5 Métodos Baseados em Critérios Prestabelecidos.....	43
2.3.6 Método Bayesiano.....	51
2.4 Estatísticas de Avaliação dos Estimadores.....	64
3 MATERIAL E MÉTODOS.....	66
3.1 Origem dos dados.....	66
3.2 Simulação de dados.....	66
3.3 Uma Aplicação em Dados Reais em Bovinos Nelore.....	72
3.4 Uma Ilustração do Método Bayesiano.....	74
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	75
5 CONCLUSÕES.....	131
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	132

RESUMO

SANTANA, Everton Silva de. **Avaliação de métodos de estimação de componentes de variância com aplicação em bovinos Nelore**. LAVRAS: UFLA, 2001. 136p. (Dissertação - Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária)*

Foram avaliados quatro métodos clássicos de estimação de componentes de variância: em modelos aleatórios, em classificação simples e aninhada, em dois estágios e misto em classificação cruzada com interação de dois fatores, através de simulação, na qual foi empregada uma variedade de situações envolvendo cinco razões de variâncias, σ_s^2/σ_e^2 , sendo σ_p^2 a variância dos efeitos aleatórios (exceto o erro) e σ_e^2 a variância do erro, três níveis crescentes de não balanceamento e três tamanhos de amostra. Foram expostos alguns aspectos teóricos do método Bayesiano, seguidos de um exemplo ilustrativo. Estimativas dos componentes de variância de cada modelo foram obtidas pelo método da análise de variância, *ANOVA*; por máxima verossimilhança, *ML*; por máxima verossimilhança restrita, *REML*; e por estimação quadrática não tendenciosa de variância mínima, *MIVQUE(0)*. Também é apresentada uma aplicação em bovinos Nelore. Os estimadores foram avaliados pelas estatísticas viés e erro quadrático médio. O estimador *ML* foi o mais indicado para o modelo aleatório em classificação simples e razão de variância igual a 0,05, por ser menos tendencioso e mais eficiente que os outros estimadores. Ele também foi recomendado para os outros dois modelos pelo seu melhor desempenho em todas as razões de variância, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostra, embora seja mais tendencioso, revele alguma dificuldade de convergência e exija maior tempo de processamento computacional. Os estimadores *REML* e *ANOVA* são aconselhados como outras opções por serem menos tendenciosos e apresentarem pequenos erros quadráticos médios. O *MIVQUE(0)* constituiu o método menos eficaz. O método Bayesiano, disponível no programa SAS®, mostrou ser uma alternativa viável, flexível e promissora para usuários menos familiarizados com a metodologia Bayesiana.

* Comitê Orientador: Luiz Henrique de Aquino - UFLA (Orientador), Eduardo Bearzoti - UFLA.

ABSTRACT

SANTANA, Everton Silva de. **Evaluation of variance components estimation methods with application to Nelore cattle.** LAVRAS: UFLA, 2001. 136p. (Dissertation – Master in Agronomy/Major in Statistics and Agricultural Experimentation)*

Four classical methods to estimate variance components were evaluated for the one-way classification random model, two-way nested random model and two-way crossed mixed model with interaction. A simulation study was carried out in a variety of situations involving five values of variance ratio σ_a^2/σ_e^2 , being σ_a^2 the random effect variance (except error) and σ_e^2 the error variance, three ascending levels of unbalancedness and three sample sizes. Theoretical aspects were shown about Bayesian method, followed by an illustrative example. Variance components estimates for each model were obtained by analysis of variance, *ANOVA*; maximum likelihood, *ML*; restricted maximum likelihood, *REML*; and minimum variance quadratic unbiased estimation, *MIVQUE(0)*. The estimation methods were also illustrated with an application to Nelore cattle. The estimators were compared through their bias and mean squared error, MSE. *ML* estimator was indicated for the one-way classification random model with variance components ratio equal to 0.05, for it shown smaller bias and was more efficient than other estimators. It was also recommended for the other two models since it performed well in all variance ratios, degrees of unbalancedness and sample sizes, although it has been revealed more biased, with some convergence problems and the required time computing was high and expensive. *REML* and *ANOVA* estimators may be other choices, since they shown good properties such as small bias and adequate mean squared errors. *MIVQUE(0)* was the worst estimator. Bayesian method, available in SAS® software, seems to be a viable, flexible and promising alternative for not familiarized Bayesian methodology users.

* Guidance Committee: Luiz Henrique de Aquino - UFLA (Major Professor), Eduardo Bearzoti - UFLA.

1 INTRODUÇÃO

Componentes de variância são parâmetros correspondentes às variâncias dos efeitos aleatórios de um modelo matemático.

Pode-se dizer que os componentes de variância têm um amplo uso na Estatística, uma vez que a estimação de efeitos fixos e predição dos efeitos aleatórios, em um modelo linear misto, dependem de suas estimativas. Além disso, a estruturação do teste F em qualquer modelo também requer o conhecimento das esperanças de quadrados médios que, por sua vez, são funções dos componentes de variância. Tais componentes definem estratégias para tomada de decisões em Controle de Qualidade. Em Experimentação, determinam o dimensionamento da amostra ou número de repetições de um experimento. Em Ciências Agrárias, são largamente empregados no Melhoramento Genético Animal e Vegetal, uma vez que compõem estatísticas de grande importância como, por exemplo, o melhor preditor linear não tendencioso-*BLUP*, a herdabilidade- h^2 , a correlação intra-classe- r , entre outros.

Os métodos de estimação de componentes de variância mais citados na literatura são os de análise de variância, *ANOVA*; de máxima verossimilhança, *ML*; de máxima verossimilhança restrita, *REML*; de estimação quadrática não tendenciosa de variância mínima, *MIVQUE(0)*; e Bayesiano. Em dados balanceados, os estimadores *ANOVA* são amplamente usados por atenderem às propriedades ótimas de um estimador, como a não tendenciosidade e a variância mínima, dentre outras. Por outro lado, com dados não balanceados, somente a não tendenciosidade dos estimadores é reconhecida; além disso, há a possibilidade de surgimento de estimativas negativas (Swallow e Monahan, 1984; Searle et al., 1992). Já o estimador *ML* possui a vantagem de produzir valores não negativos, apesar de suas estimativas serem tendenciosas. Os

estimadores *REML*, ao contrário do *ML*, maximizam somente a parte invariante aos efeitos fixos e têm a vantagem de produzir estimativas idênticas às produzidas pelo *ANOVA* quando os dados são balanceados.

Assim como o *ML*, o *REML* possui o inconveniente de ser estimado por métodos iterativos. O método *MIVQUE(0)* está atrelado a valores iniciais de componentes de variância tanto para produzir como também para garantir a qualidade de suas estimativas.

Percebe-se que diversos métodos têm sido propostos para estimação dos componentes de variância, cada qual com suas especificidades. Decorre que estes métodos podem produzir resultados distintos, principalmente quando os dados analisados são não balanceados. Daí, então, existe a necessidade da escolha da metodologia mais adequada para determinada característica de dados.

Deste modo, pretendeu-se avaliar a eficiência dos métodos de estimação dos componentes de variância pela análise de variância, *ANOVA* (Método III de Henderson); pela máxima verossimilhança, *ML*; pela máxima verossimilhança restrita, *REML*; e pela estimação quadrática não tendenciosa de variância mínima, *MIVQUE(0)*; com base em viés e erro quadrático médio (EQM), obtidos por meio de dados simulados, considerando modelos aleatórios em classificação simples e em classificação aninhada (hierárquica) em dois estágios, e um modelo misto em classificação cruzada (fatorial) com interação de dois fatores em diferentes situações no tocante à razão de variâncias, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostras. Os métodos foram aplicados em dados de peso à desmama de bovinos Nelore. Dados da literatura foram incluídos para ilustração do método Bayesiano disponível no SAS®.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Dentre os principais métodos desenvolvidos para estimar os componentes de variância estão os métodos da análise de variância, *Analysis of Variance-ANOVA* e suas variações, que constituem os métodos I, II e III de Henderson (também chamado método de ajuste de constantes) (Henderson, 1953); o método da máxima verossimilhança, *Maximum Likelihood-ML*, por Hartley e Rao (1967); da máxima verossimilhança restrita, *Restricted Maximum Likelihood-REML*, descrito por Patterson e Thompson (1971); da estimação quadrática não tendenciosa de variância mínima, *Minimum Variance Quadratic Unbiased Estimation-MIVQUE*, por Rao (1967), citado por Swallow e Searle (1978) e LaMotte (1973); e o método Bayesiano, estudado por Hill (1965) e Tiao e Tan (1965).

Baseado no princípio da análise de variância descrito por Fisher, o método da análise de variância, *ANOVA*, consiste em igualar os quadrados médios da análise de variância aos seus valores esperados. Esta metodologia foi a pioneira em aplicações e pesquisas acerca da estimação dos componentes de variância. Os métodos I, II e III de Henderson são três variantes deste método, uma vez que, quando os dados são não balanceados, há vários conjuntos de somas de quadrados que podem compor tal método.

Os primeiros estudos relacionados aos componentes de variância tiveram ênfase teórica no sentido de verificar as propriedades do estimador *ANOVA*, como a suficiência, não tendenciosidade, variância mínima, etc. Com o passar do tempo, foram surgindo outros estimadores devido a limitações deste estimador ou porque eram baseados em outros critérios de otimização. Graybill (1954) investigou variâncias amostrais do método *ANOVA* em dados balanceados e mostrou que estas eram os melhores estimadores quadráticos não

tendenciosos (*BQUE*), equivalentes aos *BLUE* de parâmetros de efeitos fixos, pois suas funções quadráticas são não tendenciosas e possuem variância mínima. Graybill e Worthan (1956) mostraram, para um modelo aleatório balanceado, que os estimadores deste método são uniformemente não tendenciosos (*BUE*), pois são funções lineares das somas de quadrados e da média amostral dos dados, \bar{y} , que são estatísticas suficientes minimais e completas.

Herbach (1959), visando a obtenção de estimativas não negativas, aplicou o princípio da máxima verossimilhança em modelos de dados balanceados, o qual consiste na maximização, no espaço paramétrico dos componentes de variância, da função de verossimilhança.

Thompson (1962) considerou a idéia de restringir a maximização da verossimilhança somente aos efeitos aleatórios do modelo, descrevendo, assim, o método da máxima verossimilhança restrita.

Princípios bayesianos para a estimação dos componentes de variância foram encontrados em Hill (1965), que analisou dados balanceados utilizando um modelo em classificação simples. Verifica-se, em Tiao e Tan (1965), aspectos relacionados a aproximações assintóticas ou por série de Taylor da distribuição *a posteriori* dos componentes de variância através de um modelo em classificação simples.

Hartley e Rao (1967) aplicaram o princípio da máxima verossimilhança a todos os modelos mistos e aleatórios, com e sem covariáveis, em dados balanceados e não balanceados.

Os primeiros estudos voltados à estimação de componentes de variância quadráticos não tendenciosos de variância mínima foram realizados por Harville (1969), que concluiu, em linhas gerais, que os estimadores resultantes tinham variância generalizada mínima, acarretada pela minimização da norma euclidiana que, sob normalidade, equivale à minimização da variância.

Searle (1971) afirmou que o método *ANOVA* produz estimadores com propriedades ótimas quando aplicado em dados balanceados; caso contrário, tais propriedades eram perdidas e há possibilidades do aparecimento de estimativas negativas.

Townsend e Searle (1971) consideraram o desenvolvimento de estimadores de componentes de variância quadráticos não tendenciosos, *BQUE*, para dados não balanceados em um modelo em classificação simples, que são funções da razão de variâncias populacionais σ_a^2/σ_e^2 . Estas propriedades somente eram inerentes aos estimadores *ANOVA* com dados balanceados. Os autores conduziram um estudo numérico que indicou que estes novos estimadores produziram variâncias menores que o *ANOVA*.

Albert (1976) estudou algumas propriedades do estimador *ANOVA*, como a variância mínima e a não tendenciosidade, diante do uso de um modelo linear misto sem suposição de distribuição dos dados e indicou, nestas condições, que o *ANOVA* é *BQUE*.

LaMotte (1976) apresenta um estudo das propriedades de duas classes distintas de estimadores: os não tendenciosos de variância mínima (*MIVQUE*) e os de máxima verossimilhança (*ML*), que são tendenciosos de mínimo erro quadrático médio.

Corbeil e Searle (1976b) descreveram vieses e variâncias amostrais dos estimadores de máxima verossimilhança de diversos casos envolvendo modelos balanceados.

Desde então, diversos trabalhos têm surgido com aplicações em modelos mistos em classificação cruzada ou aninhada e, mais recentemente, no modelo animal.

Devido ao avanço dos recursos computacionais, alguns trabalhos têm dado ênfase à comparação entre diferentes métodos de estimação utilizando dados simulados através de modelos balanceados ou não. Corbeil e Searle

(1976b) derivaram soluções explícitas das equações *ML* e *REML*, com dados balanceados, obtendo soluções *REML* idênticas às do *ANOVA*. Também foram realizadas comparações entre estimadores através de modelos mistos em classificação cruzada sem interação, com nenhuma ou uma observação por célula, que mostraram a eficiência dos estimadores *ML* na maioria dos casos.

Swallow e Searle (1978) constataram, para dados não balanceados, que as variâncias das estimativas do *MIVQUE* foram de mínimo local, isto é, a variância foi mínima somente quando os valores utilizados *a priori* estiveram próximos dos verdadeiros valores dos componentes de variância. Apesar disso, resultados numéricos indicaram que a variância da estimativa *MIVQUE* para o efeito aleatório foi bem menor que a variância da estimativa *ANOVA*. Trabalhos como este, que comparou os métodos de estimação *ANOVA* e *MIVQUE(0)*, têm adotado padrões de não balanceamento denominados de *n-patterns*. Essas “tentativas” de categorização do não balanceamento foram constituídas por vetores em que cada elemento corresponde ao número de observações de cada tratamento. O grau de não balanceamento é escolhido intuitivamente do leve ao mais severo.

Swallow (1981) estimou os componentes de variância pelo método *MIVQUE* num modelo aleatório em classificação simples, sendo σ_a^2 e σ_c^2 substituídos pelas estimativas *a priori* σ_{a0}^2 e σ_{c0}^2 , respectivamente. Comparações numéricas indicaram que o *MIVQUE* de σ_a^2 foi mais eficiente que o estimador *ANOVA* para $\sigma_a^2/\sigma_c^2 > 1$ e para qualquer escolha de $\sigma_{a0}^2/\sigma_{c0}^2$, exceto para alguma que recaísse numa subestimativa bem drástica de σ_a^2/σ_c^2 . Além disso, relata ainda que quanto maior for o grau de não balanceamento nos dados, maior a diferença entre a eficiência dos estimadores *MIVQUE* e *ANOVA*.

Swallow e Monahan (1984) compararam os métodos *ANOVA*, *ML*, *REML* e *MIVQUE(A)* (*MIVQUE* com valores iniciais dados pelo *ANOVA*) e

MIVQUE(0) (*MIVQUE* com valores iniciais 0 e 1 para os componentes de variância do fator aleatório e do erro), utilizando um modelo aleatório em classificação simples, e concluíram que o estimador *ANOVA* foi o mais adequado, a não ser que os dados estivessem altamente não balanceados e a relação entre variâncias σ_a^2/σ_e^2 fosse maior que 1. Verificaram também a adequação do método *MIVQUE(A)* quando a relação entre variâncias foi menor que 0,5 e que o *MIVQUE(0)* apresentou um fraco desempenho, principalmente para relação entre variâncias maiores ou iguais a 1. O estimador *ML*, ao contrário, obteve uma ótima performance.

Broemeling (1985) descreve de maneira ampla, num enfoque Bayesiano, diversas metodologias relacionadas à análise de modelos lineares, nas quais estão incluídas estimações dos componentes de variâncias por ponto e por intervalo.

Seraphin (1984) e Seraphin et al. (1990) compararam os métodos *MIVQUE*, *ML* e III de Henderson, nos modelos hierárquico aleatório e fatorial misto com interação. Os dados foram simulados considerando-se duas relações de variâncias, σ_i^2/σ_e^2 , em dados balanceados e não balanceados, com 5% das parcelas ou “células” vazias. Os autores concluíram que os métodos III de Henderson e *MIVQUE* foram semelhantes, embora recomendem o *MIVQUE* pela rapidez computacional e eficiência. O *ML* foi mais eficiente que os outros métodos apenas no modelo fatorial misto com interação, desde que não houvesse problemas de tendenciosidade, convergência e tempo.

Miligan (1990) estudou herdabilidades, variâncias genéticas e ganhos genéticos de seleção, em um modelo envolvendo fatores como ano, local, colheita e genótipo, com uma população de clones de cana-de-açúcar na qual foram considerados os seguintes componentes de variância: variâncias dentro e entre colheitas, genótipo x local, genótipo x ano e genótipo x colheita. O estudo

concluiu que repetições de locais foram mais eficientes que repetições de anos, pois proporcionaram maiores ganhos de seleção.

A problemática das estimativas negativas dos componentes de variância foi estudada por Fernandez (1991), que pesquisou alternativas viáveis, como os estimadores *REML*, e apontou que a maioria dos algoritmos relacionados a tal finalidade apresentaram dificuldades de cálculo e aplicação.

Valério Filho (1991) apresentou uma comparação numérica, por meio de simulação de dados e pelo procedimento *VARCOMP* do SAS®, entre os métodos *ANOVA*, *ML*, *REML* e *MIVQUE(0)*, aplicados nos modelos mistos em classificação aninhada e cruzada sem interação. Foi constatada uma equivalência entre *ANOVA*, *REML* e *MIVQUE(0)* quando os dados foram balanceados; caso contrário, o desempenho de cada método dependia do modelo, componente de variância a ser estimado e critérios de comparação a serem adotados. O método *REML*, ao contrário do *MIVQUE(0)*, apresentou melhores resultados.

Recentes trabalhos têm priorizado comparações numéricas entre componentes de variância estimados por métodos Bayesianos e Clássicos. Chaloner (1987) comparou os estimadores de análise de variância, *ANOVA*; de máxima verossimilhança, *ML*; e moda da distribuição *a posteriori*, comprovando que esta última apresentou menor erro quadrático médio nos diversos casos empregados.

Searle et al. (1992) descreveu, de maneira ampla e detalhada, não só os métodos mais utilizados, mas também assuntos pertinentes aos componentes de variância como a estimação de efeitos fixos, predição dos efeitos aleatórios, estimação Bayesiana, etc.

Lima et al. (1994) verificaram alguns aspectos teóricos e computacionais, através do software *NTIA-SOC* e *SAS*, do método *REML* para viabilizar suas aplicações em Melhoramento Animal, através de um modelo linear misto. O método produziu estimativas não-negativas dos componentes de

variância e eliminou o viés resultante da perda de graus de liberdade na estimação dos efeitos fixos.

Wolfinger e Kass (1996) discutiram e ilustraram o princípio de funcionamento do método da rejeição (*Rejection Sampling Algorithm*), o primeiro implementado no SAS. O algoritmo gera “candidatos” a elementos de uma amostra *a posteriori* dos componentes de variância equivalente ao produto de distribuições Gama Invertida. Tal procedimento foi proposto como uma alternativa aos métodos como o *Monte Carlo Markov Chain-MCMC*, *Gibbs Sampling*, etc. que, apesar de consagrados, requerem um profundo conhecimento de alguns artifícios computacionais além da própria inferência Bayesiana.

Fernandez (1998) analisou a eficiência dos estimadores de componentes de variância produzidos por métodos *ANOVA*, *ML*, *REML* e *MIVQUE(0)*, através de simulação conduzida a partir de um conjunto de dados referentes ao rendimento de matéria seca de cultivares de trevo-branco. Foi utilizado um modelo misto cruzado e definidos três níveis crescentes de não balanceamento e razões de variâncias do fator aleatório devido ao ambiente ($\sigma_{\tau}^2 / \sigma_{\epsilon}^2 = 1, 2, 3, 4$) e cultivar x ambiente ($\sigma_{\alpha\tau}^2 / \sigma_{\epsilon}^2 = 0,5; 1, 2, 3$). O estudo mostrou que a escolha do método mais adequado esteve relacionada ao componente de variância estimado, ao nível de desbalanceamento, ao número de níveis do fator aleatório, aos valores da variância ambiental e ao critério de comparação adotado. Constatou-se que o método *MIVQUE(0)* foi o pior em relação ao erro quadrático médio. O *ML* revelou melhor desempenho na estimativa de variância ambiental e o *REML* foi bom para a interação e o residuo.

Wolfinger e Kass (2000) consideraram o modelo linear misto tradicional para determinação dos componentes de variância sob um enfoque Bayesiano. Eles desenvolveram uma metodologia para simulação da *posteriori* baseada no algoritmo *Independence Chain (IC)* implementado no SAS, versão 8, como *default* ao lado do *Importance Sampling (IS)*, *Random Walk Chain (RC)* e do

pioneiro *Rejection Sampling (RS)*. O método foi exemplificado por meio de um modelo *Split-plot*, com o uso de uma *priori* não-informativa de Jeffreys. Constatou-se uma relativa facilidade e flexibilidade do método com dados balanceados e não balanceados.

Wright et al. (2000) realizaram comparações entre análises de experimentos de seleção em *Tribolium castaneum* conduzidas pelos métodos *REML* e Bayesiano. Foi demonstrado que os resultados da seleção, cujos componentes de variância foram provenientes do método Bayesiano, diferenciaram-se da análise tradicional efetuada pelo *REML*, levando, conseqüentemente, a outras decisões importantes na seleção de indivíduos para melhoria das próximas gerações.

2.1 Simbologia Matricial

Será feita, a seguir, uma breve explanação acerca dos vetores soma e matrizes **J**, dentre outras notações a serem utilizadas em alguns tópicos do Referencial Teórico.

2.1.1 Vetores Soma e Matrizes **J**

Vetores soma são vetores em que cada elemento é igual a 1. São denotados por **1**, como, por exemplo,

$$\mathbf{1}'_3 = [1 \ 1 \ 1]$$

de modo que, dado $\mathbf{x}' = [x_1 \ x_2 \ x_3]$, tem-se

$$\mathbf{1}'_3 \mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 x_i .$$

O produto entre 2 vetores soma define uma matriz \mathbf{J} , ou seja,

$$\mathbf{1}_n \mathbf{1}'_n = \mathbf{J}_n$$

que corresponde a uma matriz quadrada de ordem n , cujos elementos são iguais a 1. Uma de suas variantes é

$$\bar{\mathbf{J}}_n = \frac{1}{n} \mathbf{J}_n$$

2.1.2 Notação Matricial

Seja \mathbf{A} uma matriz de ordem $p \times q$, em que

$$\mathbf{A} = \{A_{ij}\}, i = 1, \dots, p \text{ e } j = 1, \dots, q.$$

Então, \mathbf{A} pode ser abreviada na forma:

$$\mathbf{A} = \{m a_{ij}\}_{i=1}^p \{j=1}^q = \{m a_{ij}\}_{ij} \text{ ou simplesmente } \{m a_{ij}\}.$$

Esta notação se estende a vetores linha, coluna e matriz diagonal utilizando ℓ , c e d , respectivamente, em lugar de m . Ou seja,

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = \{c\mathbf{u}_i\}_{i=1}^n = \{c\mathbf{u}_i\} \Rightarrow \mathbf{u}' = \{\ell \mathbf{u}_i\}_{i=1}^n = \{\ell \mathbf{u}_i\}$$

e

$$\begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_k \end{bmatrix} = \{d \mathbf{a}_i\}_{i=1}^k = \{d\mathbf{a}_i\}$$

Pode-se utilizar encadeamentos, como, por exemplo

$$\mathbf{A}_1 = \{c\{d\mathbf{1}_k\}_{j=1}^3\}_{i=1}^2 = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_k & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1}_k \\ \mathbf{1}_k & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1}_k \end{bmatrix}$$

sendo $\mathbf{0}$ um vetor de zeros de dimensão k .

Maiores detalhes podem ser encontrados em Searle et al. (1992). Verifica-se que as matrizes ou vetores descritos estão em negrito. Tal procedimento será adotado em todos os itens.

2.2 Descrição Teórica dos Modelos

A seguir, será apresentada uma descrição teórica acerca dos métodos de estimação dos componentes de variância através de um modelo linear misto e, em seguida, alguns resultados mais importantes serão delimitados aos modelos aleatórios em classificação simples, em classificação aninhada (hierárquico) em dois estágios e misto em classificação cruzada (fatorial) com interação de dois fatores.

Apesar de haver procedimentos para estimação dos componentes de variância que não requerem normalidade, propriedades distribucionais dos estimadores serão investigadas sob suposição de normalidade dos efeitos aleatórios.

Segue a caracterização dos modelos acima citados:

Seja o modelo linear misto geral:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e} \quad (1)$$

em que:

$\mathbf{y}_{N \times 1}$ corresponde ao vetor de observações;

$\boldsymbol{\beta}_{b \times 1}$ representa o vetor de efeitos fixos;

$\mathbf{u}_{r \times 1}$ é o vetor de efeitos aleatórios, $\mathbf{u} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{G})$;

$\mathbf{X}_{N \times b}$ e $\mathbf{Z}_{N \times r}$ são as matrizes de incidência de $\boldsymbol{\beta}$ e \mathbf{u} , respectivamente;

$\mathbf{e}_{N \times 1}$ é o vetor de resíduos, $\mathbf{e} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{R})$;

Pode-se particionar \mathbf{u} em:

$$\mathbf{u} = [\mathbf{u}'_1 \quad \mathbf{u}'_2 \quad \dots \quad \mathbf{u}'_r] \quad (2)$$

em que cada subvetor \mathbf{u}_i representa um fator aleatório (fator principal, interação ou fator aninhado) contido no modelo. Os elementos de cada \mathbf{u}_i correspondem aos efeitos dos níveis do i -ésimo fator.

Aplicando-se o mesmo raciocínio em \mathbf{Z} , tem-se:

$$\mathbf{Z} = [\mathbf{Z}_1 \ \mathbf{Z}_2 \ \dots \ \mathbf{Z}_r] \quad (3)$$

As matrizes \mathbf{G} e \mathbf{R} dos efeitos aleatórios e resíduos (erros) são expressas por:

$$\mathbf{G} = \text{var}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 \mathbf{I}_{q_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r^2 \mathbf{I}_{q_r} \end{bmatrix} = \{d\sigma_i^2 \mathbf{I}_{q_i}\} \quad (4)$$

uma vez que há r efeitos aleatórios com q_i níveis cada, $i = 1, \dots, r$. Isso mostra que cada fator aleatório tem um específico número de níveis.

$$\mathbf{R} = \text{var}(\mathbf{e}) = \begin{bmatrix} \sigma_e^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_e^2 \end{bmatrix} = \sigma_e^2 \mathbf{I}_N \quad (5)$$

A matriz de variâncias e covariâncias de \mathbf{y} é definida pela expressão:

$$\mathbf{V} = \text{var}(\mathbf{y}) = \mathbf{Z}\mathbf{Z}'\mathbf{G} + \mathbf{R} = \sum_{i=1}^r \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i' \sigma_i^2 + \sigma_e^2 \mathbf{I}_N, \quad (6)$$

que é simplificada, considerando-se $\sigma_0^2 \equiv \sigma_e^2$ e $\mathbf{Z}_0 \equiv \mathbf{I}_N$, para

$$V = \sum_{i=0}^r Z_i Z_i' \sigma_i^2. \quad (7)$$

Como é suposto que u seja normalmente distribuído com média 0 e matriz de variâncias e covariâncias G e e seja normalmente distribuído com média zero e matriz de variâncias e covariâncias R , independentemente de u , decorrendo, assim, a condição

$$\text{cov}(u, u') = \text{cov}(e, e') = \text{cov}(u, e') = 0.$$

Todos os modelos descritos a seguir correspondem à particularização deste modelo linear misto geral.

a) Modelo Aleatório em Classificação Simples:

Seja o modelo descrito em sua forma analítica:

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij} \quad (8)$$

em que:

y_{ij} é a j -ésima observação do i -ésimo nível do fator α ;

μ é uma constante;

α_i é o efeito do i -ésimo nível do fator α ;

e_{ij} é o resíduo associado à j -ésima observação do i -ésimo nível do fator α .

Com $i = 1, \dots, a$; $j = 1, \dots, n_i$; $n_i \geq 1$ e $N = \sum_i n_i = n$, o número total de observações, com $n_i = n$, em caso balanceado, tem-se:

$$\alpha_i \sim N(0, \sigma_\alpha^2) \quad \text{e} \quad e_{ij} \sim N(0, \sigma_e^2)$$

Em notação matricial, tem-se

$$\mathbf{y} = \mathbf{1}_N \mu + \mathbf{Z}_1 \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{Z}_0 \mathbf{e} \quad (9)$$

em que:

$$\mathbf{X} = \mathbf{1}_N, \boldsymbol{\beta} = \mu, \mathbf{u}_1 = \boldsymbol{\alpha},$$

quando identificados em relação ao modelo linear geral (1).

b) Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios:

Seja o modelo:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_{ij} + e_{ijk} \quad (10)$$

em que:

y_{ijk} é a k -ésima observação onde foi aplicado o j -ésimo nível do fator β dentro do i -ésimo nível de α ;

μ é uma constante;

α_i é o efeito do i -ésimo nível do fator principal;

β_{ij} é o efeito do j -ésimo nível de β dentro do i -ésimo nível de α ;

e_{ijk} é o residuo associado à k -ésima observação do j -ésimo nível β dentro i -ésimo nível de α .

Com $i = 1, \dots, a; j = 1, \dots, b; k = 1, \dots, n_{ij}; b. = \sum_i b_i$ e $N = \sum_i \sum_j n_{ij} = n..$, o número total de observações, com $n_{ij} = n$, em caso balanceado, pode-se supor que:

$$\alpha_i \sim N(0, \sigma_\alpha^2), \quad \beta_{ij} \sim N(0, \sigma_\beta^2), \quad e \quad e_{ijk} \sim N(0, \sigma_e^2)$$

Em notação matricial, tem-se

$$y = \mathbf{1}_N \mu + \mathbf{Z}_1 \alpha + \mathbf{Z}_2 \beta + \mathbf{Z}_0 e \quad (11)$$

em que:

$$\mathbf{X} = \mathbf{1}_N, \quad \beta = \mu, \quad \mathbf{u}_1 = \alpha, \quad \mathbf{u}_2 = \beta,$$

em relação ao modelo linear geral (1).

c) Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de Dois Fatores:

Seja o modelo caracterizado por:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + e_{ijk} \quad (12)$$

em que:

y_{ijk} é a k -ésima observação que recebeu a combinação do i -ésimo nível do fator

α e do j -ésimo nível de fator β ;

μ é a média geral do experimento;

α_i é o i -ésimo nível do fator α ;

β_j é o j -ésimo nível do fator β ;

γ_{ij} é o efeito da interação entre i -ésimo nível de α e o j -ésimo nível de β ;

e_{ijk} é o resíduo associado à k -ésima observação que recebeu a combinação do i -ésimo nível de α e do j -ésimo nível de β .

Com $i = 1, \dots, a$; $j = 1, \dots, b$; $k = 1, \dots, n_{ij}$; $n_i \geq 0$ em $s(i, j)$ subclasses e $N = \sum_i \sum_j n_{ij} = n_{..}$, o número total de observações, com $n_{ij} = n$ em caso balanceado.

É suposto que os efeitos α_i são fixos e que:

$$\beta_j \sim N(0, \sigma_\beta^2), \quad \gamma_{ij} \sim N(0, \sigma_\gamma^2) \quad \text{e} \quad e_{ijk} \sim N(0, \sigma_e^2)$$

Matricialmente, tem-se

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_1\mathbf{u}_1 + \mathbf{Z}_2\mathbf{u}_2 + \mathbf{e} \quad (13)$$

em que

$$\boldsymbol{\beta}' = [\mu \quad \boldsymbol{\alpha}'], \quad \mathbf{u}_1 = \boldsymbol{\beta}, \quad \mathbf{u}_2 = \boldsymbol{\gamma},$$

em relação ao modelo linear geral (1).

2.3 Métodos

2.3.1 Método da Análise de Variância (ANOVA)

A estimação dos componentes de variância pelo método *ANOVA* ocorre quando as somas de quadrados obtidas pela análise de variância usual são igualadas aos seus valores esperados.

Devido à sua facilidade de cálculo, os estimadores *ANOVA* têm sido amplamente utilizados em dados balanceados por atenderem a uma série de propriedades ótimas de um estimador, constituídas pela não tendenciosidade,

variância mínima dentre todos os estimadores não tendenciosos que são funções quadráticas das observações, além de, sob normalidade, apresentarem normas mínimas entre todos estimadores não tendenciosos. Por outro lado, com dados não balanceados, a maior parte destas propriedades não são válidas, salvo a não tendenciosidade dos estimadores (Swallow e Monahan, 1984; Searle et al., 1992).

Seja o modelo linear misto

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e} \quad ,$$

em que os componentes do modelo foram especificados em (1).

Considerando a presença de r efeitos aleatórios, define-se :

$$\mathbf{S} = \{ {}_c \mathbf{S}_i \}_{i=0}^r = \{ {}_c \mathbf{y}' \mathbf{A}_i \mathbf{y} \}_{i=0}^r \quad (14)$$

como um vetor com $r+1$ formas quadráticas em \mathbf{y} , tal que \mathbf{A}_i é simétrica, correspondentes aos efeitos aleatórios (inclusive o erro). Sabe-se que

$$\begin{aligned} E(\mathbf{S}_i) &= E(\mathbf{y}' \mathbf{A}_i \mathbf{y}) = \text{tr}(\mathbf{A}_i \mathbf{V}) + E(\mathbf{y}') \mathbf{A}_i E(\mathbf{y}) = \\ &= \text{tr}(\mathbf{A}_i \mathbf{V}) + \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{A}_i \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}. \end{aligned} \quad (15)$$

Sendo $\boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{0}$, a única maneira de (15) conter apenas variâncias e nenhum efeito fixo é considerar $\mathbf{X}' \mathbf{A}_i \mathbf{X} = \mathbf{0}$ de modo a anular o termo que envolve $\boldsymbol{\beta}$. Assim,

$$\begin{aligned}
E(\mathbf{S}_i) &= \text{tr}(\mathbf{A}_i \mathbf{V}) = \text{tr}[\mathbf{A}_i \sum_{j=0}^r \mathbf{Z}_j \mathbf{Z}_j' \sigma_j^2] = \sum_{j=0}^r \text{tr}(\mathbf{A}_i \mathbf{Z}_j \mathbf{Z}_j') \sigma_j^2 \\
&= \sum_{j=0}^r \text{tr}(\mathbf{Z}_j' \mathbf{A}_i \mathbf{Z}_j) \sigma_j^2 = \left\{ \text{tr}(\mathbf{Z}_j' \mathbf{A}_i \mathbf{Z}_j) \right\}_{j=0}^r \left\{ \sigma_j^2 \right\}_{j=0}^r
\end{aligned}$$

Logo,

$$E(\mathbf{S}) = E\left(\left\{ \mathbf{S}_i \right\}_{i=0}^r\right) = \left\{ \text{tr}(\mathbf{Z}_j' \mathbf{A}_i \mathbf{Z}_j) \right\}_{i,j=0}^r \left\{ \sigma_j^2 \right\}_{j=0}^r.$$

E denominando-se

$$\mathbf{C} = \left\{ \text{tr}(\mathbf{Z}_j' \mathbf{A}_i \mathbf{Z}_j) \right\}_{i,j=0}^r \quad \text{e} \quad \sigma^2 = \left\{ \sigma_j^2 \right\}_{j=0}^r$$

tem-se:

$$E(\mathbf{S}) = \mathbf{C} \sigma^2.$$

Portanto,

$$\mathbf{S} = \mathbf{C} \hat{\sigma}^2 \Rightarrow \hat{\sigma}^2 = \mathbf{C}^{-1} \mathbf{S} \quad (16)$$

para \mathbf{C} não singular. A única limitação deste processo é que as esperanças das formas quadráticas devem conter somente componentes de variâncias, ou seja, $\mathbf{X}' \mathbf{A}_i \mathbf{X} = 0$ ou $(\mathbf{A}_i \mathbf{X}) = 0$ (para \mathbf{A}_i não negativa definida). Maiores detalhes e exemplificações sobre o método podem ser encontrados em Searle et al. (1992, p.172 e 173).

Ilustrando tal método em função dos modelos considerados neste estudo, tem-se:

i) Modelo aleatório em classificação simples:

Considerando-se o modelo descrito em (8), procede-se o método ANOVA da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 S &= \{ {}_c S_i \}_{i=0}^1 = \{ {}_c y' A_i y \}_{i=0}^1 = \begin{bmatrix} y' A_0 y \\ y' A_1 y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y' [I_N - \{ {}_d \bar{J}_{n_i} \}] y \\ y' [\{ {}_d \bar{J}_{n_i} \} - \bar{J}_N] y \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \sum_i^a \sum_j^{n_i} y_{ij}^2 - \sum_i^a \frac{y_i^2}{n_i} \\ \sum_i^a \frac{y_i^2}{n_i} - \frac{y_{..}^2}{N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{SQE} \\ \text{SQA} \end{bmatrix},
 \end{aligned}$$

em que SQE e SQA são as somas de quadrados do erro e do fator aleatório α , respectivamente, e

$$C = \{ {}_m \text{tr}(Z_j' A_i Z_j) \}_{i,j=0}^1 = \begin{bmatrix} \text{tr}(Z_0' A_0 Z_0) & \text{tr}(Z_1' A_0 Z_1) \\ \text{tr}(Z_0' A_1 Z_0) & \text{tr}(Z_1' A_1 Z_1) \end{bmatrix}$$

Sabendo-se que $Z_0 = I_N$ e $Z_1 = \{ \mathbf{1}_{n_j} \}_{j=1}^2$ com A_0 e A_1 obtidos anteriormente, chega-se a

$$\begin{aligned}
\mathbf{C} &= \begin{bmatrix} \text{tr}(\mathbf{I}_N - \{\mathbf{d} \bar{\mathbf{J}}_{ni}\}) & \text{tr}[\{\mathbf{d} \mathbf{1}_{ni}\}' (\mathbf{I}_N - \{\mathbf{d} \bar{\mathbf{J}}_{ni}\}) \{\mathbf{d} \mathbf{1}_{ni}\}] \\ \text{tr}(\{\mathbf{d} \bar{\mathbf{J}}_{ni}\} - \bar{\mathbf{J}}_N) & \text{tr}[\{\mathbf{d} \mathbf{1}_{ni}\}' (\{\mathbf{d} \bar{\mathbf{J}}_{ni}\} - \bar{\mathbf{J}}_N) \{\mathbf{d} \mathbf{1}_{ni}\}] \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} \sum_i^a n_i (1 - \frac{1}{n_i}) & 0 \\ \sum_i^a n_i (\frac{1}{n_i} - \frac{1}{N}) & \sum_i^a (n_i - \frac{n_i^2}{N}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N - a & 0 \\ a - 1 & N - \frac{\sum_i^a n_i^2}{N} \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

De posse dos resultados de \mathbf{S} e \mathbf{C} , calculam-se os componentes de variância de σ_c^2 e σ_α^2 conforme (16).

ii) Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios:

Para o modelo descrito em (10), pode-se estimar os componentes de variância por:

$$\{\mathbf{S}_i\}_{i=0}^2 = \{\mathbf{y}' \mathbf{A}_i \mathbf{y}\}_{i=0}^2 = \begin{bmatrix} \mathbf{y}' \mathbf{A}_0 \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \mathbf{A}_1 \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \mathbf{A}_2 \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}' [\mathbf{I}_N - \{\mathbf{d} \{\mathbf{d} \bar{\mathbf{J}}_{nij}\}_j\}_i] \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' [\{\mathbf{d} \bar{\mathbf{J}}_{ni}\} - \bar{\mathbf{J}}_N] \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' [\{\mathbf{d} \{\mathbf{d} \bar{\mathbf{J}}_{nij}\}_j\}_i - \{\mathbf{d} \bar{\mathbf{J}}_{ni}\}] \mathbf{y} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_i \sum_j \sum_k y_{ijk}^2 - \sum_i \sum_j \frac{y_{ij.}^2}{n_{ij}} \\ \sum_i \frac{y_{i..}^2}{n_{i.}} - \frac{y_{...}^2}{N} \\ \sum_i \sum_j \frac{y_{ij.}^2}{n_{ij}} - \sum_i \frac{y_{i..}^2}{n_{i.}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{SQE} \\ \text{SQA} \\ \text{SQB(A)} \end{bmatrix},$$

em que SQE, SQA e SQB(A) são, respectivamente, as somas de quadrados do erro, do efeito aleatório α e do efeito aleatório β aninhado em α .

Enquanto

$$C = \{ {}_m \text{tr}(\mathbf{Z}_j' \mathbf{A}_i \mathbf{Z}_j) \}_{i,j=0}^2$$

$$= \begin{bmatrix} \text{tr}(\mathbf{Z}_0' \mathbf{A}_0 \mathbf{Z}_0) & \text{tr}(\mathbf{Z}_1' \mathbf{A}_0 \mathbf{Z}_1) & \text{tr}(\mathbf{Z}_2' \mathbf{A}_0 \mathbf{Z}_2) \\ \text{tr}(\mathbf{Z}_0' \mathbf{A}_1 \mathbf{Z}_0) & \text{tr}(\mathbf{Z}_1' \mathbf{A}_1 \mathbf{Z}_1) & \text{tr}(\mathbf{Z}_2' \mathbf{A}_1 \mathbf{Z}_2) \\ \text{tr}(\mathbf{Z}_0' \mathbf{A}_2 \mathbf{Z}_0) & \text{tr}(\mathbf{Z}_1' \mathbf{A}_2 \mathbf{Z}_1) & \text{tr}(\mathbf{Z}_2' \mathbf{A}_2 \mathbf{Z}_2) \end{bmatrix}.$$

Sabendo-se que $\mathbf{Z}_0 = \mathbf{I}_N$, $\mathbf{Z}_1 = \{ {}_d \mathbf{1}_m \}_{i=1}^a$ e $\mathbf{Z}_2 = \{ {}_d \mathbf{I}_{n_i} \}_{j=1}^b$ com \mathbf{A}_0 , \mathbf{A}_1 e \mathbf{A}_2 descritos dentro de S , chega-se a:

$$C = \begin{bmatrix} N - b. & 0 & 0 \\ a - 1 & N - \frac{\sum_i n_i^2}{N} & \sum_i \frac{\sum_j n_{ij}^2}{n_i} - \frac{\sum_i \sum_j n_{ij}^2}{N} \\ b. - a & 0 & N - \sum_i \frac{\sum_j n_{ij}^2}{n_i} \end{bmatrix}$$

E, utilizando-se o resultado (16), chegam-se às estimativas dos componentes de variâncias de σ_c^2 , σ_α^2 e σ_β^2 .

iii) Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores

Seja o modelo dado em (12), então,

$$S = \{ {}_c S_i \}_{i=0}^2 = \{ {}_c y' A_i y \}_{i=0}^2 =$$

$$= \begin{bmatrix} y' A_0 y \\ y' A_1 y \\ y' A_2 y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y' [I_N - \{ {}_d \{ {}_d \bar{J}_{nj} \} \}_j \}_i] y \\ y' [\{ {}_d \bar{J}_{n,j} \} - \bar{J}_N] y \\ y' [\{ {}_d \{ {}_d \bar{J}_{nj} \} \}_j \}_i - \{ {}_d \bar{J}_{n.} \} - \{ {}_d \bar{J}_{n,j} \} + \bar{J}_N] y \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_i^a \sum_j^b \sum_k^{n_{ij}} y_{ijk}^2 - \frac{y_{ij.}^2}{n_{ij}} \\ \sum_j^b \frac{y_{.j}^2}{n_{.j}} - \frac{y_{...}^2}{N} \\ \sum_i^a \sum_j^b \frac{y_{ij.}^2}{n_{ij}} - \sum_i^a \frac{y_{i..}^2}{n_{i.}} - \sum_j^b \frac{y_{.j}^2}{n_{.j}} + \frac{y_{...}^2}{N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{SQE} \\ \text{SQB} \\ \text{SQAB} \end{bmatrix},$$

em que SQE, SQB e SQAB são as somas de quadrados do erro, do efeito aleatório β e da interação entre o efeito fixo, α , e aleatório, β , enquanto

$$C = \left\{ \sum_m \text{tr}(\mathbf{Z}_j' \mathbf{A}_j \mathbf{Z}_j) \right\}_{j=0}^2 =$$

$$= \begin{bmatrix} \text{tr}(\mathbf{Z}_0' \mathbf{A}_0 \mathbf{Z}_0) & \text{tr}(\mathbf{Z}_1' \mathbf{A}_0 \mathbf{Z}_1) & \text{tr}(\mathbf{Z}_2' \mathbf{A}_0 \mathbf{Z}_2) \\ \text{tr}(\mathbf{Z}_0' \mathbf{A}_1 \mathbf{Z}_0) & \text{tr}(\mathbf{Z}_1' \mathbf{A}_1 \mathbf{Z}_1) & \text{tr}(\mathbf{Z}_2' \mathbf{A}_1 \mathbf{Z}_2) \\ \text{tr}(\mathbf{Z}_0' \mathbf{A}_2 \mathbf{Z}_0) & \text{tr}(\mathbf{Z}_1' \mathbf{A}_2 \mathbf{Z}_1) & \text{tr}(\mathbf{Z}_2' \mathbf{A}_2 \mathbf{Z}_2) \end{bmatrix}.$$

Sabendo-se que $\mathbf{Z}_0 = \mathbf{I}_N$, $\mathbf{Z}_1 = \{d \mathbf{1}_{n_j}\}_{j=1}^b$ e $\mathbf{Z}_2 = \{d \{d \mathbf{1}_{n_{ij}}\}_{j=1}^b\}_i^a$ com \mathbf{A}_0 , \mathbf{A}_1 e \mathbf{A}_2 ,

já descritos, chega-se a:

$$C = \begin{bmatrix} \sum_i \sum_j n_{ij} - s & 0 & 0 \\ a - 1 & \sum_i \sum_j \frac{n_{ij}^2}{n_i} - \frac{\sum_j n_j^2}{N} & \sum_i \frac{\sum_j n_{ij}^2}{n_i} - \frac{\sum_i \sum_j n_{ij}^2}{N} \\ s - a - b + 1 & 0 & h_6 \end{bmatrix},$$

em que s é o número de caselas preenchidas e $h_6 = \text{tr}\{(\mathbf{I}_N - [\mathbf{X} \ \mathbf{Z}_1][\mathbf{X} \ \mathbf{Z}_1]^+) \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2'\}$, no qual $[\mathbf{X} \ \mathbf{Z}_1]^+$ é a inversa de Moore-Penrose das matrizes \mathbf{X} e \mathbf{Z}_1 concatenadas verticalmente. Searle et al. (1992) fornece um procedimento computacional para a obtenção de h_6 .

De posse dos valores de S e C , chegam-se às estimativas dos componentes de variâncias através de (16).

Apesar de inúmeros estudos teóricos e numéricos terem envolvido o método *ANOVA*, as novidades não acabam. Uma delas, por exemplo, são resultados de estudos como os de Kelly e Mathew (1994), que têm avaliado, por simulação e dados reais, os estimadores *ANOVA* modificados de modo que produzissem estimativas não negativas. Os autores concluíram que os estimadores modificados foram mais eficientes que os provenientes do *ANOVA* usual.

2.3.2 Método III de Henderson

Henderson (1953) definiu 3 especificações do método *ANOVA*, que são o Método I, II e III de Henderson ou de Ajuste de Constantes, para análises de dados não balanceados.

O método III baseia-se na obtenção das somas de quadrados semelhantes às análises para efeitos fixos.

Dado o modelo misto $y = X\beta + Zu + e$, obtém-se um vetor “b” através da junção de β e u . Assim:

$$y = Wb + e \quad (17)$$

Adotando-se procedimentos de cálculo análogos para modelos de efeitos fixos, tem-se a soma de quadrados do modelo (ou redução da soma de quadrados devido ao ajuste do modelo).

$$R(b) = b' W' y = y' W(W' W)^- W' y = y' W W^+ y \quad (18)$$

em que W^+ é a inversa de Moore Penrose da matriz W e $(W' W)^-$ é a inversa condicional de $W' W$.

Considerando-se a partição:

$$Wb = W_1 b_1 + W_2 b_2 \quad (19)$$

de forma que b_1 inclua efeitos fixos e aleatórios do modelo e b_2 somente os efeitos aleatórios (Searle et al., 1992. p.204).

Então:

$$R(b_1, b_2) = y' [W_1 \ W_2][W_1 \ W_2]^+ y. \quad (20)$$

Em seguida, comparam-se as seguintes reduções:

$$R(b_2|b_1) = R(b_1, b_2) - R(b_1) = y' [W_1 \ W_2][W_1 \ W_2]^+ y - y' W_1 W_1^+ y ;$$

baseando-se na relação $X^+ = (X'X)^-X'$, a expressão acima torna-se

$$y' [W_1 \ W_2] \{ [W_1 \ W_2]' [W_1 \ W_2] \}^- [W_1 \ W_2]' y - y' W_1 (W_1' W_1)^- W_1' y,$$

aplicando-se um resultado de Searle et al. (1992, p.450), pelo qual se $X=[X_1 \ X_2]$, então $X(X'X)^-X' = X_1(X_1'X_1)^-X_1' + M_1X_2(X_2'M_1X_2)^-X_2'M_1$, na primeira parcela desta subtração e considerando-se o resultado análogo para $W=[W_1 \ W_2]$, obtém-se

$$\begin{aligned} & y' [W_1(W_1'W_1)^-W_1' + M_1W_2(W_2'M_1W_2)^-W_2'M_1]y \\ &= -y' W_1(W_1'W_1)^- W_1'y \\ &= y' M_1W_2(W_2'M_1W_2)^-W_2'M_1y, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\text{em que } M_1 = I - W_1(W_1'W_1)^-W_1'. \quad (22)$$

Considerando-se y definido em (17), e sabendo-se que

$$E(y' Ay) = \text{tr}[W' A W E(bb')] + \sigma_e^2 \text{tr}(A),$$

aplica-se tal resultado em (21), denotando-se A como toda a quantidade entre y' e y chegando-se, de acordo com Searle et al. (1992, p.204), em

$$E[R(b_2|b_1)] = \text{tr}[W_2'M_1W_2E(b_2b_2')] + \sigma_e^2(p[W_1 \ W_2] - p[W_1]), \quad (23)$$

em que $p[\cdot]$ é o posto da matriz considerada.

Com base no resultado (23), tem-se que

$$\begin{aligned} E[R(\mathbf{u}|\beta)] &= \text{tr}[\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}E(\mathbf{u}\mathbf{u}')] + \sigma_e^2(p[\mathbf{X} \ \mathbf{Z}] - p[\mathbf{X}]) \\ &= \sum_i \text{tr}(\mathbf{Z}_i'\mathbf{M}\mathbf{Z}_i)\sigma_i^2 + \sigma_e^2(p[\mathbf{X} \ \mathbf{Z}] - p[\mathbf{X}]), \end{aligned} \quad (24)$$

ou seja, a esperança da redução dos efeitos aleatórios, dados os efeitos fixos, em que $\mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{X}\mathbf{X}^+$. Seguindo-se analogamente este princípio, encontra-se a esperança da soma de quadrados do erro:

$$\begin{aligned} E[\text{SQE}] &= E[\mathbf{y}|\beta, \mathbf{u}] \\ &= \text{tr}\{[\mathbf{X} \ \mathbf{Z}]'\mathbf{M}[\mathbf{X} \ \mathbf{Z}]E[\beta, \mathbf{u}][\beta, \mathbf{u}']\} + \sigma_e^2(N - p[\mathbf{X} \ \mathbf{Z}]). \end{aligned}$$

Substituindo-se $\mathbf{M} = \mathbf{I} - [\mathbf{X} \ \mathbf{Z}][\mathbf{X} \ \mathbf{Z}]^+$ e aplicando-se as propriedades $\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}$ e $\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{A}^+) = p[\mathbf{A}]$, dados em Searle et al. (1992, Apêndice M.4), chega-se a

$$E[\text{SQE}] = (N - p[\mathbf{X} \ \mathbf{Z}])\sigma_e^2, \quad (25)$$

em que N é o número de observações no vetor \mathbf{y} .

Utilizando-se o mesmo princípio de (23) e (24); o mesmo resultado seria encontrado pela partição:

$$E[\text{SQE}] = E[\mathbf{y}'\mathbf{y}] - E[R(\beta, \mathbf{u})].$$

Deste modo, obtém-se um sistema, formado por (24) e (25), pelo qual são obtidas as estimativas dos componentes de variância:

$$\begin{cases} E[R(\mathbf{u}|\beta)] = \sum_i \text{tr}(\mathbf{Z}_i' \mathbf{M} \mathbf{Z}_i) \hat{\sigma}_i^2 + (p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}] - p[\mathbf{X}]) \hat{\sigma}_e^2 \\ E[\text{SQE}] = \quad \quad \quad (N - p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}]) \hat{\sigma}_e^2 \end{cases}$$

2.3.2.1 Particularizações

Pode-se, então, obter as esperanças das reduções nos modelos em classificação simples, aninhada e cruzada.

i) Modelo Aleatório em Classificação Simples

Considerando-se o modelo descrito em 2.2, aplicando-se analogamente os resultados (23) e (24), tem-se a esperança da redução do modelo devido ao ajuste dos efeitos em \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} E[R(\mathbf{u}|\beta)] &= E[R(\alpha|\mu)] = E[\text{SQA}] \\ &= \text{tr}[(\mathbf{I} - \bar{\mathbf{J}}_N) \sigma_\alpha^2 \{\mathbf{d} \mathbf{J}_{ni}\}] + \sigma_e^2 (p[\mathbf{1}_N \quad \{\mathbf{d} \mathbf{J}_{ni}\}] - p[\mathbf{1}_N]) \\ &= \sigma_\alpha^2 \text{tr}[\{\mathbf{d} \mathbf{J}_{ni}\} - N^{-1} \mathbf{1}_N \{ \ell n_i \mathbf{1}'_{ni} \}] + \sigma_e^2 (a - 1). \end{aligned} \quad (26)$$

E, através de (26), chega-se à esperança da soma de quadrados do erro aleatório:

$$E[SQE] = E[\mathbf{y}'\mathbf{y} - R(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\alpha})] = (N - p[\mathbf{1}_N \quad \{\mathbf{d}\mathbf{1}_{ni}\}])\sigma_e^2 \quad (27)$$

ii) Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios

Segundo Searle et al. (1992, p.218), modelos aleatórios que tenham somente fatores aninhados tornam os resultados dos Métodos I, II e III de Henderson iguais ao resultado proveniente da análise de variância usual, que, por sua vez, foi descrita anteriormente.

iii) Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de Dois Fatores

Considerando-se o modelo descrito em 2.2, utilizando-se analogamente os resultados (23) e (24), chega-se à seguinte esperança da redução devido ao ajuste dos efeitos em \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 :

$$E[R(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2|\boldsymbol{\beta})] = \text{tr}(\mathbf{Z}'_1 \mathbf{M}\mathbf{Z}_1)\sigma_1^2 + \text{tr}(\mathbf{Z}'_2 \mathbf{M}\mathbf{Z}_2)\sigma_2^2 + \sigma_e^2(p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}] - p[\mathbf{X}]), \quad (28)$$

em que \mathbf{Z} corresponde à concatenação horizontal das matrizes de incidência \mathbf{Z}_1 e \mathbf{Z}_2 , de \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 , respectivamente. Calculam-se também as esperanças da redução devido ao ajuste de \mathbf{u}_2 e da soma de quadrados do resíduo.

$$E[R(\mathbf{u}_2|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}_1)] = \text{tr}\{\mathbf{I} - [\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}_1][\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}_2]^+ \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}'_2\sigma_2^2\} + \sigma_e^2(p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}] - p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}_1]). \quad (29)$$

$$E(\text{SQE}) = E[\mathbf{y}'\mathbf{y} - R(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)] = (N - p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}])\sigma_e^2. \quad (30)$$

Através de (28), (29) e (30), chega-se ao seguinte sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} R(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 | \boldsymbol{\beta}) = \text{tr}(\mathbf{M}\mathbf{Z}_1\mathbf{Z}_1')\hat{\sigma}_1^2 + \text{tr}(\mathbf{M}\mathbf{Z}_2\mathbf{Z}_2')\hat{\sigma}_2^2 + (p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}] - p[\mathbf{X}])\hat{\sigma}_e^2 \\ R(\mathbf{u}_2 | \boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}_1) = \lambda \hat{\sigma}_2^2 + (p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}] - p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}_1])\hat{\sigma}_e^2 \\ \mathbf{y}'\mathbf{y} - R(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = (N - p[\mathbf{X} \quad \mathbf{Z}])\hat{\sigma}_e^2 \end{array} \right.$$

em que

$$\lambda = \text{tr}\{(\mathbf{I} - [\mathbf{X} - \mathbf{Z}_1][\mathbf{X} - \mathbf{Z}_1]^+)\mathbf{Z}_2\mathbf{Z}_2'\} \quad (31)$$

2.3.2.2 Vantagens e Desvantagens

Nota-se que no sistema anterior, poder-se-ia usar $R(\mathbf{u}_1 | \boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}_2)$ no lugar de $R(\mathbf{u}_2 | \boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}_1)$ ou $R(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 | \boldsymbol{\beta})$. Assim, ter-se-iam 3 sistemas distintos gerando soluções distintas. Isso caracteriza uma deficiência deste método, uma vez que não se sabe qual o conjunto de equações mais apropriado.

Searle et al. (1992) apontam vantagens como a aplicabilidade do método III de Henderson em todos os modelos mistos, que seus estimadores são não tendenciosos e que os métodos I, II e III são iguais quando aplicados em dados balanceados. Uma característica desfavorável, apontada pelos mesmos autores, e sobre as quais não se sabe qual é a melhor escolha, é a possibilidade do uso de $R(\mathbf{u}_1 | \boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}_2)$ em vez de $R(\mathbf{u}_2 | \boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}_1)$. O método pode ser aplicado de diferentes

maneiras caso o modelo tenha 2 ou mais fatores cruzados, não se sabendo a maneira analítica mais adequada. E, como em todo processo baseado no método *ANOVA*, há possibilidade de obtenção de estimativas negativas.

2.3.3 Método da Máxima Verossimilhança (*ML*)

Descrito primordialmente por Herbach (1959), consiste na obtenção da moda ou maximização da função de verossimilhança das observações. Ao contrário do *ANOVA*, este método produz estimativas não negativas dos componentes de variância, no entanto, possui o inconveniente de ser estimado através de processos iterativos e não levar em conta a perda de graus de liberdade associada à estimação dos efeitos fixos. Esta primeira característica está sendo suplantada devido ao aparecimento de equipamentos e processos computacionais mais rápidos, mas a segunda faz com que o método seja tendencioso.

O método *ML* é restrito a situações baseadas em normalidade das observações, ou seja, com o modelo linear misto

$$y = X\beta + Zu + e$$

em que

$$y \sim N(X\beta, V) \text{ com } V = \sum_{i=1}^r Z_i Z_i' \sigma_i^2 + \sigma_e^2 I_N = \sum_{i=0}^r Z_i Z_i' \sigma_i^2 \quad (32)$$

sendo r o número de efeitos aleatórios do modelo e Z_0 correspondente a uma matriz identidade.

Pode-se, então, obter a verossimilhança em função de β e V (Searle et al., 1992. p.234):

$$L = L(\beta, V|y) = \frac{\exp[-1/2(y - X\beta)'V^{-1}(y - X\beta)]}{(2\pi)^{\frac{1}{2}N} |V|^{\frac{1}{2}}} \quad (33)$$

em que $|\cdot|$ é a função módulo.

Equações de máxima verossimilhança são obtidas através da derivada parcial do $\log L$, em relação aos parâmetros fixos e aleatórios, ou seja,

$$\begin{cases} \frac{\partial \log L}{\partial \beta} = X'V^{-1}y - X'V^{-1}X\beta \\ \frac{\partial \log L}{\partial \sigma_i} = -\frac{1}{2}\text{tr}(V^{-1}Z_iZ_i') + \frac{1}{2}(y - X\beta)'V^{-1}Z_iZ_i'V(y - X\beta) \end{cases} \quad (34)$$

que, após igualadas a zero, fornecem soluções que são candidatas a estimadores de máxima verossimilhança dos componentes de variância. É preciso antes verificar a matriz Hessiana e a função de verossimilhança no limite do espaço paramétrico em que a maximização deve estar confinada.

As soluções de máxima verossimilhança para os componentes de variância (simbolizadas por $\hat{\sigma}_e^2$ e $\hat{\sigma}_i^2$) serão estimadores se

$$\hat{\sigma}_e^2 > 0 \text{ e } \hat{\sigma}_i^2 \geq 0, i=1, \dots, r$$

Caso isto não ocorra ($\hat{\sigma}_i^2 < 0$), utiliza-se o procedimento chamado *pooling the minimum violator*, que repõe o valor negativo por zero e reestima σ_i^2 . Maiores informações podem ser encontrados em Herbach (1959).

As equações *ML* resultam em:

$$\begin{cases} \mathbf{X}'\hat{\mathbf{V}}^{-1}\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}'\hat{\mathbf{V}}^{-1}\mathbf{y} \\ \left\{ \sum_{i,j=0}^r \text{tr}(\hat{\mathbf{V}}^{-1}\mathbf{Z}_i\mathbf{Z}_i'\hat{\mathbf{V}}^{-1}\mathbf{Z}_j\mathbf{Z}_j') \right\} \hat{\sigma}^2 = \left\{ \mathbf{y}'\hat{\mathbf{P}}\mathbf{Z}_i\mathbf{Z}_i'\hat{\mathbf{P}}\mathbf{y} \right\}_{i=0}^r \end{cases} \quad (35)$$

em que

$$\mathbf{P} = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1} \quad (\hat{\mathbf{P}} \text{ é } \mathbf{P} \text{ com } \mathbf{V} \text{ substituído por } \hat{\mathbf{V}}). \quad (36)$$

As equações *ML* correspondem a funções polinomiais complicadas envolvendo os componentes de variância que nem sempre possuem forma definida, sendo, portanto, suas soluções obtidas por iterações (Searle et al., 1992).

Apesar de serem tendenciosos, os estimadores de máxima verossimilhança são consistentes, isto é, convergem assintoticamente para o valor dos parâmetros. Além disso, dadas pequenas amostras, as variâncias dos estimadores são subestimadas (Hartley e Rao, 1967).

2.3.3.1 Particularizações

Têm-se, a seguir, as equações *ML* para os modelos em classificação simples, aninhada e cruzada, especificadas analogamente ao método *ANOVA*.

i) Modelo Aleatório em Classificação Simples

Seja o modelo já descrito em (8), então tem-se o sistema:

$$\begin{bmatrix} \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_0Z_0'\dot{V}^{-1}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_0Z_0'\dot{V}^{-1}Z_1Z_1') \\ \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_1Z_1'\dot{V}^{-1}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_1Z_1'\dot{V}^{-1}Z_1Z_1') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\sigma}_e^2 \\ \dot{\sigma}_\alpha^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y'\dot{P}Z_0Z_0'\dot{P}y \\ y'\dot{P}Z_1Z_1'\dot{P}y \end{bmatrix},$$

em que

$$Z_0 = I_N \text{ e } P = V^{-1} - V^{-1}1_N(1_N'V^{-1}1_N)^{-1}1_N'V^{-1}.$$

ii) Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios

Seja o modelo descrito em (10), tem-se o seguinte sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_0Z_0'\dot{V}^{-1}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_0Z_0'\dot{V}^{-1}Z_1Z_1') & \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_0Z_0'\dot{V}^{-1}Z_2Z_2') \\ \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_1Z_1'\dot{V}^{-1}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_1Z_1'\dot{V}^{-1}Z_1Z_1') & \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_1Z_1'\dot{V}^{-1}Z_2Z_2') \\ \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_2Z_2'\dot{V}^{-1}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_2Z_2'\dot{V}^{-1}Z_1Z_1') & \text{tr}(\dot{V}^{-1}Z_2Z_2'\dot{V}^{-1}Z_2Z_2') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\sigma}_e^2 \\ \dot{\sigma}_\alpha^2 \\ \dot{\sigma}_\beta^2 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{y}' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_0 \mathbf{Z}_0' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{y} \end{bmatrix}$$

em que $\mathbf{P} = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1} \mathbf{1}_N (\mathbf{1}'_N \mathbf{V}^{-1} \mathbf{1}_N)^{-1} \mathbf{1}'_N \mathbf{V}^{-1}$. Tais equações são resolvidas iterativamente.

iii) Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de Dois Fatores

Considerando-se o modelo já descrito em (12), tem-se:

$$\begin{bmatrix} \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_0 \mathbf{Z}_0' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_0 \mathbf{Z}_0') & \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_0 \mathbf{Z}_0' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1') & \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_0 \mathbf{Z}_0' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2') \\ \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_0 \mathbf{Z}_0') & \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1') & \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2') \\ \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_0 \mathbf{Z}_0') & \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1') & \text{tr}(\dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2' \dot{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2') \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} \begin{bmatrix} \dot{\sigma}_e^2 \\ \dot{\sigma}_\beta^2 \\ \dot{\sigma}_\gamma^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_0 \mathbf{Z}_0' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{y} \end{bmatrix}$$

em que $\mathbf{P} = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}$. Os componentes de variâncias são encontrados através de procedimentos iterativos aplicados a este sistema.

2.3.3.2 Matriz Hessiana

A matriz Hessiana \mathbf{H} corresponde à matriz de segundas derivadas da função de verossimilhança, ou seja,

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \log L}{\partial \beta \partial \beta'} & \frac{\partial^2 \log L}{\partial \beta \partial \sigma^2} \\ \frac{\partial^2 \log L}{\partial \sigma^2 \partial \beta'} & \frac{\partial^2 \log L}{\partial \sigma^2 \partial \sigma^2} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X} & \{\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Z}_i\mathbf{Z}_i'\mathbf{P}\mathbf{y}\}_{i=0}^r \\ (*) & \frac{1}{2}\left\{ \sum_m -\text{tr}(\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Z}_i\mathbf{Z}_i'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Z}_j\mathbf{Z}_j') + 2\mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{Z}_i\mathbf{Z}_i'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Z}_j\mathbf{Z}_j'\mathbf{P}\mathbf{y} \right\}_{i,j=0}^r \end{bmatrix}$$

na qual (*) significa que a matriz é simétrica.

A matriz Hessiana é um operador de grande importância, pois participa diretamente do método iterativo e define se o processo convergiu. Além disso, ela fornece variâncias para grandes amostras através de seu valor esperado, podendo ser negativa definida ou também indefinida.

2.3.3.3 Matriz de Informação de Fisher

Corresponde ao valor esperado da matriz Hessiana. Além disso, a sua inversa é, aproximadamente, a matriz de variância e covariância assintótica dos estimadores de máxima verossimilhança. Tem-se a seguinte notação:

$$\mathbf{I} \begin{bmatrix} \beta \\ \sigma^2 \end{bmatrix} = -\mathbf{E}[\mathbf{H}] = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \left\{ \sum_{i,j=0}^m \text{tr}(\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Z}_i\mathbf{Z}_i'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Z}_j\mathbf{Z}_j') \right\}_{i,j=0}^m \end{bmatrix} \quad (37)$$

Searle (1970) apresentou uma expressão geral para os elementos desta matriz para dados não balanceados de diversos modelos mistos.

2.3.4 Método da Máxima Verossimilhança Restrita (REML)

É também conhecido como Método da Máxima Verossimilhança Residual. Foi utilizado por Thompson (1962) para dados balanceados e por Patterson e Thompson (1971) para modelos mistos.

Sua diferença em relação ao método *ML* está na perda dos graus de liberdade utilizados na estimação dos efeitos fixos. Isto porque este método maximiza parte da verossimilhança invariante aos efeitos fixos, ou seja, maximiza os efeitos aleatórios (Thompson, 1962). Uma característica importante é a consequente eliminação do viés na estimação dos componentes de variância (Swallow e Monahan, 1984).

Portanto, seu princípio básico está na estimação dos métodos baseados nos resíduos calculados depois do ajuste de mínimos quadrados para os efeitos fixos do modelo.

Este método utiliza combinações lineares das observações em vez das próprias observações, ou seja,

$$\mathbf{K}'\mathbf{y} = \mathbf{K}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{K}'\mathbf{Z}\mathbf{u} \text{ em que } \mathbf{K}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{K}'\mathbf{X} = \mathbf{0} \quad (38)$$

e

$$\mathbf{K}' = \mathbf{C}' [\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'] = \mathbf{C}' (\mathbf{I} - \mathbf{X}\mathbf{X}^+) = \mathbf{C}' \mathbf{M}, \quad (39)$$

para qualquer vetor \mathbf{C} de ordem apropriada à realização deste produto.

Sejam

$$\mathbf{K}'\mathbf{y} \sim \mathbf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K})$$

e sua função de log-verossimilhança

$$\log L_R = -\frac{1}{2}(\mathbf{N}-r)\log 2\pi - \frac{1}{2}\log|\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K}| - \frac{1}{2}\mathbf{y}'\mathbf{K}(\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K})^{-1}\mathbf{K}'\mathbf{y} \quad (40)$$

As equações de máxima verossimilhança restrita podem ser derivadas das equações ML através da substituição de \mathbf{y} por $\mathbf{K}'\mathbf{y}$, de \mathbf{X} por $\mathbf{K}'\mathbf{X}$, de \mathbf{Z} por $\mathbf{K}'\mathbf{Z}$ ou de \mathbf{V} por $\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K}$.

Deste modo, têm-se as equações $REML$ para os componentes de variância:

$$\left\{ \text{tr}(\mathbf{Z}_i' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_j \mathbf{Z}_j' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_i) \right\}_{i,j=0}^r \dot{\sigma}^2 = \left\{ \mathbf{y}' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i' \dot{\mathbf{P}} \mathbf{y} \right\}_{i=0}^r, \quad (41)$$

em que $\mathbf{P} = \mathbf{K}(\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K})^{-1}\mathbf{K}'$, sendo $\dot{\mathbf{P}}$ igual a \mathbf{P} contendo $\dot{\mathbf{V}}$.

2.3.4.1 Particularizações

Seguem as particularizações das equações geradoras das soluções *REML* para os modelos em classificação simples, aninhada e cruzada.

i) Modelo Aleatório de Classificação Simples

Para o modelo descrito em (8), têm-se as seguintes equações *REML*:

$$\begin{bmatrix} \text{tr}(\dot{P}Z_0Z_0'\dot{P}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{P}Z_0Z_0'\dot{P}Z_1Z_1') \\ \text{tr}(\dot{P}Z_1Z_1'\dot{P}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{P}Z_1Z_1'\dot{P}Z_1Z_1') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\sigma}_e^2 \\ \dot{\sigma}_\alpha^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y'\dot{P}Z_0Z_0'\dot{P}y \\ y'\dot{P}Z_1Z_1'\dot{P}y \end{bmatrix},$$

cujos resultados são obtidos por processos iterativos, tal como o método *ML*.

ii) Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios

De acordo com o modelo descrito em (10), têm-se as seguintes equações para estimação dos componentes de variância :

$$\begin{bmatrix} \text{tr}(\dot{P}Z_0Z_0'\dot{P}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{P}Z_0Z_0'\dot{P}Z_1Z_1') & \text{tr}(\dot{P}Z_0Z_0'\dot{P}Z_2Z_2') \\ \text{tr}(\dot{P}Z_1Z_1'\dot{P}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{P}Z_1Z_1'\dot{P}Z_1Z_1') & \text{tr}(\dot{P}Z_1Z_1'\dot{P}Z_2Z_2') \\ \text{tr}(\dot{P}Z_2Z_2'\dot{P}Z_0Z_0') & \text{tr}(\dot{P}Z_2Z_2'\dot{P}Z_1Z_1') & \text{tr}(\dot{P}Z_2Z_2'\dot{P}Z_2Z_2') \end{bmatrix} \times$$

$$x \begin{bmatrix} \dot{\sigma}_e^2 \\ \dot{\sigma}_\alpha^2 \\ \dot{\sigma}_\beta^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y' \dot{P} Z_0 Z_0' \dot{P} y \\ y' \dot{P} Z_1 Z_1' \dot{P} y \\ y' \dot{P} Z_2 Z_2' \dot{P} y \end{bmatrix}$$

que são resolvidas através de métodos iterativos. Segue-se procedimento e notação análogos para o caso do modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores, com a ressalva de que o vetor de componentes de variâncias é composto por σ_e^2 (erro), σ_β^2 (fator aleatório) e σ_γ^2 (interação).

2.3.4.2 Matriz Hessiana

De modo semelhante ao método *ML*, mas derivando-se a função restrita somente em relação aos efeitos aleatórios (Searle et al., 1992), tem-se:

$$H_R = \frac{\partial^2 \log L_R}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{Z}_j \mathbf{Z}_j' \mathbf{P} \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i') - y' \mathbf{P} \mathbf{Z}_j \mathbf{Z}_j' \mathbf{P} \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i' \mathbf{P} y$$

2.3.4.3 Matriz de Informação de Fisher

No caso, não há diferença em relação à matriz Hessiana:

$$- E \left(\frac{\partial^2 \log L_R}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} \right) = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{Z}_j \mathbf{Z}_j' \mathbf{P} \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i') \quad (42)$$

Independente da suposição de normalidade, soluções das equações *REML* para dados balanceados são iguais aos estimadores *ANOVA*. Tais soluções serão estimadores *REML* se as condições de não negatividade forem satisfeitas.

Searle et al. (1992) comenta que o método *REML* tem sido considerado como preferido ao *ML* devido a sua equivalência ao *ANOVA* quando os dados são balanceados.

2.3.5 Métodos Baseados em Critérios Prestabelecidos

Diferente do empirismo adotado pelo método *ANOVA* (de igualar somas de quadrados aos seus valores esperados) e dos princípios de máxima verossimilhança, existem métodos que produzem estimadores para satisfazer critérios como a norma mínima (da variância ou do quadrado médio do erro) e que sejam funções quadráticas dos dados não tendenciosos. Esses métodos são denominados de *MINVAR*, *MINQUE* e *MIVQUE(0)*.

2.3.5.1 Critérios

Considerando o modelo linear misto

$$y = X\beta + Zu + e = X\beta + \sum_{i=0}^r Z_i u_i \Rightarrow V = \text{var}(y) = \sum_{i=0}^r Z_i Z_i' \sigma_i^2$$

E seja $P' \sigma^2$ uma combinação linear dos componentes de variância em que P' é um vetor conhecido, tal combinação pode ser estimada pela forma

quadrática $y' Ay$, em que A é simétrica e é determinada de acordo com critérios impostos a $y' Ay$, que serão caracterizados a seguir:

2.3.5.1.1 Não Tendenciosidade

Considerando

$$P' \sigma^2 = E(y' Ay) = \sum_i \text{tr}(AZ_i Z_i') \sigma_i^2 + \beta' X' AX \beta, \quad (43)$$

Ter-se-á $X' AX = 0$ para que $P' \sigma^2$ seja uma combinação linear somente de variâncias. Isto implica em:

$$P_i = \text{tr}(AZ_i Z_i') \quad (44)$$

Caso A seja não negativa definida, tem-se que esta é uma condição suficiente para que $AX = 0$.

2.3.5.1.2 Invariância à Translação (*Translation Invariance*)

Se o valor de uma forma quadrática $y' Ay$ é invariante às alterações dos fatores fixos β , então $y' Ay$ é “invariante à translação”.

Esta propriedade implica na não tendenciosidade pois, ao considerar a alteração,

$$\beta + \xi,$$

então

$$y' Ay = (y - X\xi)' A(y - X\xi). \quad (45)$$

Reorganizando a quantidade acima, chega-se a

$$(2\mathbf{y} + \mathbf{X}\xi)' \mathbf{A}\mathbf{X}\xi = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{Z}\mathbf{X}\xi = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{X}' \mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{0},$$

que constitui uma implicação da não tendenciosidade comentada no item anterior.

2.3.5.1.3 Variância Mínima

Considerando \mathbf{y} distribuído normalmente, a variância mínima é aplicada a $\mathbf{y}' \mathbf{A}\mathbf{y}$, ou através da minimização de

$$\text{var}(\mathbf{y}' \mathbf{A}\mathbf{y}) = 2\text{tr}[(\mathbf{A}\mathbf{V})^2] + 4\beta' \mathbf{X}' \mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{X}\beta \quad (46)$$

ou do erro quadrático médio

$$\begin{aligned} \text{EQM}(\mathbf{y}' \mathbf{A}\mathbf{y}) &= \text{var}(\mathbf{y}' \mathbf{A}\mathbf{y}) + [E(\mathbf{y}' \mathbf{A}\mathbf{y}) - \mathbf{P}' \sigma^2]^2 = \\ &= 2\text{tr}[(\mathbf{A}\mathbf{V})^2] + 4\beta' \mathbf{X}' \mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{X}\beta + [\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{V}) + \beta' \mathbf{X}' \mathbf{A}\mathbf{X}\beta - \mathbf{P}' \sigma^2]^2 \end{aligned}$$

2.3.5.1.4 Estimação de Variância Mínima (MINVAR)

Supondo-se a normalidade, sejam os critérios definidos anteriormente:

a) Não tendenciosidade,

$$\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{Z}\mathbf{Z}'_i) = \mathbf{P}_i$$

b) Invariância à translação,

$$\mathbf{AX} = \mathbf{0}$$

c) Variância mínima

$$\text{var}(\mathbf{y}' \mathbf{A} \mathbf{y}) = 2\text{tr}[(\mathbf{AV})^2] + 4\beta' \mathbf{X}' \mathbf{A} \mathbf{V} \mathbf{A} \mathbf{X} \beta = 2\text{tr}(\mathbf{AV})^2 \text{ (pois } \mathbf{AX} = \mathbf{0})$$

Escolhendo-se \mathbf{A} de modo que $\text{tr}(\mathbf{AV})^2$ seja minimizada com \mathbf{V} positiva definida, chega-se às equações *MINVAR*:

$$\left\{ \text{tr}(\mathbf{PZ}_i \mathbf{Z}_i' \mathbf{PZ}_j \mathbf{Z}_j') \right\}_{i,j=0}^r \sigma^2 = \left\{ \mathbf{c}' \mathbf{Z}_i' \mathbf{P} \mathbf{y} \right\} \quad (47)$$

Cujas soluções são estimadores não tendenciosos, invariantes aos parâmetros de locação e de variância mínima.

Se tais equações são utilizadas iterativamente, tem-se o *PSEUDO-MINVAR*, que gera estimadores tendenciosos idênticos às soluções *REML*.

2.3.5.1.5 Estimação Quadrática Não Tendenciosa de Norma Mínima (*MINQUE*)

A estimação de norma mínima proposta por Rao (1972) e LaMotte (1973) se caracteriza por:

- a) Não requerer suposição de normalidade;
- b) Minimizar a norma euclidiana.

O procedimento é semelhante ao anterior: estima-se $\mathbf{P}' \sigma^2$ por $\mathbf{y}' \mathbf{A} \mathbf{y}$ com $\mathbf{A} = \mathbf{A}'$, $\mathbf{AX} = \mathbf{0}$ sendo $\mathbf{P}_i = \text{tr}(\mathbf{AZ}_i \mathbf{Z}_i')$. Mas, além disso, há uma minimização da norma euclidiana, ou seja, dado o modelo

$$y = X\beta + \sum_{i=0}^r Z_i u_i$$

Caso os efeitos aleatórios u_i sejam conhecidos, pode-se utilizar $u_i' u_i / q_i$ como um estimador “natural” de σ_i^2 (Rao, 1972), em que q_i é o número de níveis de cada fator u_i . Aplicando-se este raciocínio, estima-se $P' \sigma^2$ como

$$P' \tilde{\sigma}^2 = \sum_i P_i \frac{u_i' u_i}{q_i} = u' \left\{ \frac{P_i I_{q_i}}{q_i} \right\} u = u' \Delta u, \quad (48)$$

enquanto o estimador usual é

$$P' \hat{\sigma}^2 = y' A y = u' Z' A z u. \quad (49)$$

Procedendo-se através de

$$P' \hat{\sigma}^2 - P' \tilde{\sigma}^2 = u' (Z' A Z - \Delta) u, \quad (50)$$

tem-se então, a norma euclidiana

$$\text{tr}(FF') = \text{tr}[(AV_0)^2] - \sum_i P_i \frac{\sigma_{0,i}^2}{q_i} \quad (51)$$

em que

$$F = D^{1/2} (Z' A Z - \Delta) D^{1/2} \quad (52)$$

sendo

$$\mathbf{D} = \{d\sigma_{0,i}^2 \mathbf{I}_{q_i}\}, \quad (53)$$

ou seja, \mathbf{D} corresponde à $\text{var}(\mathbf{u})$ com valores pré-determinados no lugar de σ_i^2 .

Uma vez que a minimização deve ser aplicada aos elementos de \mathbf{A} , somente o termo $\text{tr}[(\mathbf{A}\mathbf{V}_0)^2]$ será minimizado. A diferença em relação ao *MINVAR* está no uso de \mathbf{V}_0 no lugar de \mathbf{V} .

Têm-se, então, as equações *MINQUE*:

$$\{\text{mtr}(\mathbf{P}_0 \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i' \mathbf{P}_0 \mathbf{Z}_j \mathbf{Z}_j')\} \hat{\sigma}^2 = \{\mathbf{c} \mathbf{y}' \mathbf{P}_0 \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i' \mathbf{P}_0 \mathbf{y}\} \quad (54)$$

Estimadores *MINQUE* possuem norma mínima local que, sob normalidade, implica em variância mínima, passando a ser chamado de *MIVQUE*. Na vizinhança de σ_0^2 , os estimadores são não tendenciosos, sendo que, para diferentes valores de σ_0^2 , têm-se diferentes valores para as estimativas resultantes (Swallow e Searle, 1978).

2.3.5.2 *MINQUE(0)* : Um Caso Peculiar

O estimador *MINQUE(0)* corresponde ao *MINQUE* com matriz de variância e covariância \mathbf{V} igual à identidade. Isso corresponde ao uso de valores iniciais nulos para os componentes de variância do fator aleatório σ_0^2 e iguais a 1 para variância residual $\sigma_{0,0}^2$, o que é computacionalmente vantajoso (Searle, 1987). O sistema de equações torna-se igual a:

$$\{\text{mtr}(\mathbf{M} \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i' \mathbf{M} \mathbf{Z}_j \mathbf{Z}_j')\} \hat{\sigma}^2 = \{\mathbf{c} \mathbf{y}' \mathbf{M} \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i' \mathbf{M} \mathbf{y}\} \quad (55)$$

em que $M = I - XX^+$. Em caso de normalidade das observações, têm-se os estimadores quadráticos não tendenciosos de variância mínima *MIVQUE(0)*, utilizados por Corbeil e Searle (1976) como valores iniciais no cálculo de estimativas *REML* e postos como opção *default* no procedimento *VARCOMP* do SAS. Hartley, Rao e Lamotte (1978) desenvolveram um algoritmo baseado em características deste método e observaram uma consistência efetiva de seus resultados, além de um bom desempenho como valor inicial de estimativas *ML*.

Equações *MINQUE* também são obtidas por aplicação dos mínimos quadrados ordinários para estimação de σ^2 .

2.3.5.2.1 Particularizações

Seguem algumas particularizações do *MIVQUE(0)* para os modelos em classificação simples, aninhada e cruzada.

i) Modelo Aleatório em Classificação Simples

Considerando-se o modelo apresentado em (8) no item 2.2, têm-se as seguintes equações *MIVQUE(0)*:

$$\begin{bmatrix} \text{tr}(MZ_0Z_0'MZ_0Z_0') & \text{tr}(MZ_0Z_0'MZ_1Z_1') \\ \text{tr}(MZ_1Z_1'MZ_0Z_0') & \text{tr}(MZ_1Z_1'MZ_1Z_1') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_e^2 \\ \hat{\sigma}_\alpha^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y'MZ_0Z_0'My \\ y'MZ_1Z_1'My \end{bmatrix}$$

Lembrando que Z_0 e Z_1 são as matrizes de incidência e $M = I - XX^+$.

ii) Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios

Seja o modelo apresentado em (10) de 2.2, tem-se o sistema matricial:

$$\begin{bmatrix} \text{tr}(\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2) \\ \text{tr}(\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2) \\ \text{tr}(\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_e^2 \\ \hat{\sigma}_\alpha^2 \\ \hat{\sigma}_\beta^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}'\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0\mathbf{M}\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1\mathbf{M}\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2\mathbf{M}\mathbf{y} \end{bmatrix}$$

pele qual os componentes de variância são obtidos através uma única iteração.

iii) Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de Dois Fatores

Seja o modelo apresentado em (12) de 2.2, tem-se o seguinte sistema de equações

$$\begin{bmatrix} \text{tr}(\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2) \\ \text{tr}(\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2) \\ \text{tr}(\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2\mathbf{MZ}_0\mathbf{Z}'_0) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2\mathbf{MZ}_1\mathbf{Z}'_1) & \text{tr}(\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2\mathbf{MZ}_2\mathbf{Z}'_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_e^2 \\ \hat{\sigma}_\alpha^2 \\ \hat{\sigma}_\gamma^2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{y}'\mathbf{M}\mathbf{Z}_0\mathbf{Z}_0'\mathbf{M}\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{M}\mathbf{Z}_1\mathbf{Z}_1'\mathbf{M}\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{M}\mathbf{Z}_2\mathbf{Z}_2'\mathbf{M}\mathbf{y} \end{bmatrix}.$$

sendo os componentes de variâncias obtidos através de uma única iteração.

2.3.6 Método Bayesiano

A teoria Bayesiana julga que a descrição da incerteza deve ser feita por meio de probabilidades e, por essa razão, descreve probabilisticamente toda quantidade desconhecida (Sáfadi, 1997).

Em geral, pode-se dizer que a estimação Bayesiana dos componentes de variância baseia-se nas distribuições qui-quadrado invertida e gama invertida como *posteriori* de σ^2 (Box e Tiao, 1992). Esta é uma escolha comum para variâncias de distribuições normais, uma vez que seus valores são positivos, correspondendo ao espaço paramétrico dos componentes de variâncias.

Métodos Bayesianos são fortemente relacionados a modelos hierarquizados, sendo estes especificados em estágios ou níveis de hierarquia que proporcionam um adequado caminho para transcorrer a estimação Bayesiana (Searle et al., 1992).

2.3.6.1 Modelo misto hierarquizado

Seja o modelo

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e}$$

em que o vetor de parâmetros fixos β e vetor de variáveis aleatórias u são não conhecidos. X e Z são matrizes de incidência dos efeitos fixos e aleatórios, respectivamente, sendo conhecidos e e é um vetor aleatório não conhecido. A partir deste enfoque, efeitos fixos e aleatórios são considerados de uma mesma forma: são não-observáveis.

Na modelagem hierarquizada, a distribuição de e fornece a distribuição de amostragem (correspondente à distribuição clássica dos dados condicionado a todos os parâmetros), sendo o primeiro estágio da hierarquia. A distribuição de β e u fornecem a distribuição *a priori* para o primeiro estágio da hierarquia, ou seja, para a distribuição de e .

No primeiro estágio, tem-se um modelo linear ordinário fixo, uma vez que β e u são considerados fixos e desconhecidos. Portanto, dado $u = u_0$ e $\beta = \beta_0$, tem-se

$$y = X\beta_0 + Zu_0 + e.$$

O segundo estágio especifica $f(\beta, u)$, a distribuição das variáveis não observáveis β e u . Os componentes de variância estão abaixo do segundo estágio pois são parâmetros tanto da distribuição de e como de β e u .

2.3.6.2 A hierarquia normal

É a mais utilizada na literatura (Searle et al., 1992).

Sejam as distribuições

$$\beta \sim N(\beta_0, B), u \sim N(0, D) \text{ e } e \sim N(0, R)$$

com β , u e e independentes em que B , D e R são as respectivas matrizes de variâncias e covariâncias destas variáveis. Deste modo, têm-se os seguintes momentos:

$$E(y|\beta) = X\beta \text{ e } \text{var}(y|\beta) = ZDZ' + R = V$$

$$E(y) = X\beta_0 \text{ e } \text{var}(y) = XB X' + ZDZ' + R = XB X' + V$$

Os componentes de variâncias em B , D e R podem ser modelados segundo

a) Primeiro estágio:

$$(y|u, \beta, R) \sim N(X\beta + Zu, R)$$

b) Segundo estágio:

$$\beta \sim N(\beta_0, B) \quad u \sim N(0, D)$$

2.3.6.3 Estimação dos Componentes de Variância

Formalmente, estimam-se os componentes de variância, obtendo-se a distribuição *a posteriori* e, logo em seguida, a sua média. Considerando-se a hierarquia normal e utilizando-se do Teorema de Bayes (Mood et al., 1974), (Box e Tiao, 1992), tem-se:

$$\pi(D|y) = \frac{\int \dots \int f(y|\beta, u, \beta_0, B, D, R) \pi(\beta|\beta_0, B) \pi(u, D) \pi(\beta_0) \pi(B, D, R) d\beta du d\beta_0 dB dR}{\int \dots \int f(y|\beta, u, \beta_0, B, D, R) \pi(\beta|\beta_0, B) \pi(u, D) \pi(\beta_0) \pi(B, D, R) d\beta du d\beta_0 dB dR dD}$$

em que $\pi(\beta_0)$ é a distribuição *a priori* de β_0 e $\pi(B, D, R)$ representa a *a priori* dos componentes de variância (Searle et al., 1992).

Existem inconvenientes inerentes à manipulação de integrais, como se pôde verificar anteriormente. Algumas dificuldades foram enumeradas por Hill (1965) e Tiao e Tan (1965), relacionadas à estimação dos componentes de variância por um modelo em classificação simples. Contudo, o emprego de algoritmos e técnicas mais recentes, como o *Gibbs Sampling*, tem diminuído tal problema. Esclarecimentos e simulações acerca desta técnica são encontrados em Sáfadi (1997).

2.3.6.4 Funções de verossimilhança

Considerando o modelo hierarquizado em que

$$y \sim f(y|\beta, \mathbf{u}, \mathbf{R}), \beta \sim f(\beta|\beta_0, \mathbf{B}) \text{ e } \mathbf{u} \sim f(\mathbf{u}|\mathbf{D})$$

são, respectivamente, a densidade amostral e dos parâmetros, a função de verossimilhança para este modelo (também chamada de verossimilhança completa) é dada por

$$L(\beta_0, \mathbf{B}, \mathbf{D}, \mathbf{R}|y) = \iint f(y|\beta, \mathbf{u}, \mathbf{R})f(\beta|\beta_0, \mathbf{B})f(\mathbf{u}|\mathbf{D})d\beta d\mathbf{u} \quad (56)$$

Caso outra hierarquia ou diferentes densidades sejam especificados, chega-se a diferentes verossimilhanças.

Se for considerada, por exemplo, uma hierarquia normal com um “ponto de massa” como *priori* de β , ou seja, sua densidade concentra toda massa num ponto, equivalendo à exclusão de $f(\beta)$ da hierarquia (Searle et al., 1992), considera-se, então, o modelo em que

$$(y|\beta, u) \sim N(X\beta + Zu, R) \quad 1^\circ \text{ estágio}$$

$$u|D \sim N(0, D) \quad 2^\circ \text{ estágio}$$

cuja função de verossimilhança ou (densidade marginal) é:

$$\begin{aligned} L(\beta, D, R|y) &= \int L(\beta, u, D, R) du = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}N} |V|^{\frac{1}{2}}} \exp\left[-\frac{1}{2}(y - X\beta)' V^{-1}(y - X\beta)\right] \end{aligned} \quad (57)$$

em que $V = ZDZ' + R$, idêntica à verossimilhança do modelo misto comum. Pode-se, então, deduzir que a estimação de máxima verossimilhança corresponde a uma verossimilhança condicional, integrada em relação a u , com β fixo e não conhecido.

Em contrapartida, a estimação de máxima verossimilhança restrita pode ser derivada a partir de uma hierarquia em que β tem “densidade” *priori* não informativa ou *flat* em que $f(\beta) = 1$, assim,

$$(y|\beta, u) \sim N(X\beta + Zu, R),$$

em que $\beta \sim \text{Uniforme}(-\infty, \infty)$ (não constituindo uma densidade propriamente dita uma vez que, se integrada no seu intervalo, terá valor 0 em vez de 1) e $(u|D) \sim N(0, D)$ sendo β, u independentes.

Derivando-se a função de verossimilhança em relação a β e u , obtém-se:

$$L(\mathbf{D}, \mathbf{R}|\mathbf{y}) = \iint L(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}, \mathbf{D}, \mathbf{R} | \mathbf{y}) d\mathbf{u} d\boldsymbol{\beta} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}(N-p)} |\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left[-\frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{K} (\mathbf{K}' \mathbf{V} \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}' \mathbf{y}\right] \quad (58)$$

também chamada de verossimilhança marginal, em que p é o posto de \mathbf{X} , \mathbf{K} é uma matriz $N \times (N-p)$ de posto $N-p$ que satisfaz $\mathbf{K}'\mathbf{X} = \mathbf{0}$,
Sendo

$$L(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{u}, \mathbf{D}, \mathbf{R}|\mathbf{y}) =$$

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} |\mathbf{R}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left\{-\frac{1}{2} [\mathbf{y} - (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u})]' \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y} - (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u})]\right\}$$

$$\times \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}q} |\mathbf{D}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{u}' \mathbf{D}^{-1} \mathbf{u}\right) \quad (59)$$

em que q é a ordem da matriz de variâncias e covariâncias, \mathbf{D} , dos efeitos em \mathbf{u} .

2.3.6.5 Considerações assumidas

Visando uma delimitação em torno das possibilidades apresentadas, foram seguidas algumas considerações:

- a) Em vez de D , a matriz de variâncias e covariâncias de u , será utilizado G , que é diagonal, implicando na independência dos componentes de u , uma vez que a hierarquia normal foi considerada.
- b) θ será adotado como o vetor de todos os componentes de variância não conhecidos de G e R .
- c) β terá *priori* uniforme ($p(\beta|\theta) = 1$) $\forall \theta$, e independente de u .

2.3.6.6 Posteriori condicional em relação aos efeitos do modelo

Sejam as densidades:

- a) de y :

$$P(y|\beta, u, \theta) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} |R(\theta)|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(y - X\beta - Zu)'R(\theta)^{-1}(y - X\beta - Zu)\right\} \quad (60)$$

- b) de u :

$$P(u|\theta) = (2\pi)^{-\frac{q}{2}} |G(\theta)|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}u'G(\theta)^{-1}u\right\}, \quad (61)$$

tem-se a *posteriori* condicional para β e u (Searle et al., 1992):

$$P(\beta, u|y, \theta) \propto P(y|\beta, u, \theta)P(u|\theta)$$

em que

N e q são o número de observações em y e efeitos em u , respectivamente;

$R(\theta)$ e $G(\theta)$ são matrizes de componentes de variância residuais e dos efeitos em \mathbf{u} , respectivamente.

2.3.6.7 *Posteriori* Marginal dos Componentes de Variância

Sejam

a) $\pi(\theta)$

b) $P(\theta|\mathbf{y}) = \int P(\mathbf{y} | \beta, \mathbf{u}, \theta) P(\beta, \mathbf{u} | \theta) \pi(\theta) d\beta d\mathbf{u}$

as distribuições *priori* e *posteriori* de marginal de θ em que

$$L(\theta) = P(\mathbf{y}|\theta) = \iint P(\mathbf{y} | \beta, \mathbf{u}, \theta) P(\mathbf{u}|\theta) d\beta d\mathbf{u} \quad (62)$$

chamada de função de verossimilhança restrita, cuja moda corresponde aos estimadores *REML* de θ (Box e Tiao, 1992), também ilustrada em (58). Verifica-se que a densidade de β ou é Uniforme $(-\infty, \infty)$ ou é omitida da hierarquia (Searle et al., 1992). Tal procedimento pode levar a cálculos de modas *a posterioris* marginais livre de efeitos fixos que proporcionam melhores aproximações de que modas ou médias *a posterioris* de distribuições conjuntas (O'Hagan, 1976).

2.3.6.8 *Priori* Não Informativa de Jeffreys

Uma distribuição *a priori* representa o conhecimento acerca dos parâmetros antes da condução de um experimento. Ela é classificada como informativa ou não informativa. Estudos com *prioris* informativas com uso do *Gibbs Sampling* e *Importance Sampling* são encontrados, respectivamente, em e Sáfadi (1997), Gelfand e Smith (1990) e Sun et al. (1996).

Segundo Box e Tiao (1992), a *priori* não-informativa expressa uma ignorância relativa à informação que pode ser extraída de um experimento particular. E em correspondência à mudança deste experimento, ela pode ser modificada. Os mesmos expõem uma tabela sintetizadora de algumas *prioris* não-informativas e *posteriores* correspondentes.

Jeffreys, citado em Box e Tiao (1992), formulou a seguinte regra: a distribuição *a priori* para um único parâmetro θ é aproximadamente não uniforme se é proporcional à raiz quadrada da medida de informação de Fisher.

Na estimação dos componentes de variância, tal *priori* é proporcional ao determinante da matriz de informação de Fisher, ilustrada em (42).

Deste modo, tem-se a *posteriori* dos componentes de variância

$$P(\theta|y) \propto [I(\theta)]^{1/2} L(\theta|y)$$

na qual verificar-se-á sua aproximação pelo produto de duas densidades gama invertida (Wolfinger e Kass, 2000):

$$IG(X|a,b) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} X^{-1-a} \exp\left(-\frac{b}{X}\right), \quad (63)$$

em que:

X , a e $b > 0$ sendo X a variável em questão que, no caso, é o componente de variância ou alguma combinação linear entre estes componentes.

2.3.6.9 Particularizações

Seguem algumas especificações relacionadas, neste tópico, somente ao modelo aleatório em classificação simples. Os resultados da Tabela 1, a seguir, são baseados no item 2.3.1 i).

i) Modelo Aleatório em Classificação Simples:

Seja o modelo

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij}$$

Com $i = 1, \dots, I$ e $j = 1, \dots, n_i \geq 1$ com $N = \sum_i n_i$, em que

$$\alpha_i \sim N(0, \sigma_\alpha^2) \quad e \sim N(0, \sigma_e^2).$$

A análise de variância usual está apresentada na Tabela 1.

Tabela 1 – Análise de variância de modelo aleatório em classificação simples, não balanceado.

CV	GL	SQ	EQM
Tratamentos	$v_\alpha = a - 1$	S_α	$\sigma_{\alpha e}^2 = \sigma_e^2 + k_1 \sigma_\alpha^2$
Resíduo	$v_e = N - a$	S_e	σ_e^2
Total	$N - 1$		

em que:

$$S_{\alpha} = \sum_i n_i (\bar{y}_i - \bar{y}_{..})^2 ,$$

$$S_e = \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_i.)^2 ,$$

$$k_1 = \frac{N - \frac{\sum_i n_i^2}{N}}{(a-1)} ,$$

de acordo com Barbin (1993).

Box e Tiao (1992, p.250) apresentam o seguinte Teorema, que proporciona meios para o desenvolvimento da função de verossimilhança:

Teorema 1 : Sejam x_1, \dots, x_n n observações independentes de uma distribuição Normal, $N(0, \sigma^2)$. Seja \bar{x} a média amostral e $(x_i - \bar{x})(i = 1, \dots, n)$ o resíduo. Então:

- a) \bar{x} tem distribuição $N(0, \sigma^2/n)$, independente de $x_i - \bar{x}$.
- b) $\sum (x_i - \bar{x})^2 \sim \sigma^2 \chi_{n-1}^2$
- c) $\sum (x_i - \bar{x})^2$ é uma estatística suficiente para σ^2 .

Deste modo, são deduzidas as seguintes características para os dados da Tabela 1:

a) $\bar{y}_i \sim N(\mu, \frac{\sigma_{\alpha}^2}{n_i})$;

b) \bar{y}_i são independentes de $y_{ij} - \bar{y}_i$;

$$c) \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_i)^2 = S_e \sim \sigma_e^2 \chi^2(v_e);$$

$$d) \sum_i n_i (\bar{y}_i - \bar{y}_{..})^2 = S_\alpha \sim \sigma_e^2 \chi^2(v_\alpha);$$

e) S_1 é suficiente para σ_e^2 .

Assim, a verossimilhança conjunta (Box e Tiao, 1992) de μ , σ_e^2 e $\sigma_{\alpha e}^2$ é

$$L(\mu, \sigma_e^2, \sigma_{\alpha e}^2 | y) \propto$$

$$(\sigma_e^2)^{-\frac{ve}{2}} (\sigma_{\alpha e}^2)^{-\frac{(v_\alpha+1)}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{N(\bar{y}_{..} - \mu)^2}{\sigma_{\alpha e}^2} + \frac{S_\alpha}{\sigma_{\alpha e}^2} + \frac{S_e}{\sigma_e^2} \right] \right\}.$$

Verifica-se que os expoentes $-v_e/2$ e $-(v_\alpha+1)/2$ são devido a v_e observações independentes de uma população $N(0, \sigma_e^2)$ e $v_\alpha+1$ observações independentes de uma população $N(\mu, \sigma_{\alpha e}^2/n_i)$.

Considerando *a priori*

$$P(\mu, \sigma_e^2, \sigma_{\alpha e}^2) = P(\mu)P(\sigma_e^2, \sigma_{\alpha e}^2)$$

com $P(\mu) = \text{Uniforme}(-\infty, \infty)$ e $P(\sigma_e^2, \sigma_{\alpha e}^2) = \sigma_e^{-2} \sigma_{\alpha e}^{-2}$, que pode ser obtido a partir da matriz de informação de Fisher, tem-se

$$P(\mu, \sigma_e^2, \sigma_{\alpha e}^2) \propto \sigma_e^{-2} \sigma_{\alpha e}^{-2}$$

A densidade *a posteriori* de $(\mu, \sigma_e^2, \sigma_{\alpha e}^2)$ será

$$P(\mu, \sigma_e^2, \sigma_\alpha^2 | y) \propto (\sigma_e^2)^{-\left(\frac{v_e}{2}+1\right)} (\sigma_\alpha^2)^{-\frac{1}{2}(v_\alpha+1)-1} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{S_e}{\sigma_e^2} + \frac{S_\alpha}{\sigma_\alpha^2} + \frac{N(\bar{y}-\mu)^2}{\sigma_\alpha^2}\right]\right\}$$

em que

$$-\infty < \mu < \infty \text{ e } (\sigma_e^2, \sigma_\alpha^2) > 0.$$

Para se obter a distribuição *a posteriori* dos componentes de variância, basta integrar a distribuição anterior em relação a μ , produzindo

$$P(\sigma_e^2, \sigma_\alpha^2 | y) \propto (\sigma_e^2)^{-\left(\frac{v_e}{2}+1\right)} (\sigma_e^2 + k\sigma_\alpha^2)^{-\frac{1}{2}(v_\alpha+1)} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{S_e}{\sigma_e^2} + \frac{S_\alpha}{\sigma_\alpha^2}\right]\right\}$$

que é proporcional ao produto de gamas invertidas

$$IG(\sigma_e^2 | v_e/2, 2) IG(\sigma_\alpha^2 | v_\alpha/2, 2),$$

ou ao produto de duas qui-quadrados invertidas (Box e Tiao, 1992):

$$\chi^{-2}(v_e) \chi^{-2}(v_\alpha)$$

que correspondem à distribuição de $1/X$ se $X \sim \chi^2(\cdot)$.

2.4 Estatísticas de Avaliação dos Estimadores

Verifica-se com frequência o uso de viés e do EQM como critérios adotados nas avaliações de diversos estimadores e, em especial, dos estimadores de componentes de variância. As definições estão apresentadas a seguir e podem ser consultadas em Klotz et al. (1969), Mood et al. (1974), entre outros.

2.4.1 Viés

O viés de um estimador pontual T , de um parâmetro θ , é a diferença entre o valor esperado de T e θ , ou seja,

$$\text{Viés} = [E(T) - \theta]$$

Em particular, se o estimador tiver viés nulo, então $E(T) = \theta$.

2.4.2 Erro quadrático médio (EQM)

Segundo Box e Tiao (1992), critérios como a não tendenciosidade, linearidade de funções de y e variância mínima foram substituídos pelo critério do mínimo EQM quando se verificou que um estimador tendencioso frequentemente produz menor EQM que aqueles não tendenciosos.

O erro quadrático médio de um estimador pontual T , de um parâmetro θ , é descrito como

$$\text{EQM} = E(T - \theta)^2$$

Mood et al. (1974) demonstraram que o EQM decompõe-se, na variância, somado com o viés ao quadrado:

$$\text{EQM} = \text{Var}(T) + [E(T) - \theta]^2.$$

Logo, o EQM relaciona precisão e acurácia. Portanto, um estimador com boas propriedades desta estatística tem variância e viés pequenos.

Particularmente, se o estimador tiver viés nulo, então

$$[E(T) - \theta]^2 = \text{Var}(T).$$

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Origem dos dados

Os dados utilizados neste estudo foram originários de três tipos de fontes: simulação, Associação Brasileira dos Criadores de Zebu (ABCZ) e literatura. Os dados simulados serviram como meio para aplicação e detecção de algum padrão do viés ou erro quadrático médio (EQM) dos componentes de variância obtidos por métodos clássicos nas diversas situações que serão abordadas. Os dados reais, provenientes da ABCZ, foram escolhidos como uma referência para verificação comportamental dos resultados de cada método clássico, numa estrutura contendo um alto não balanceamento e elevado número de níveis para cada fator, diferente das situações empregadas na simulação. Dados extraídos de Littel et al. (1996) foram incluídos para ilustrar o método Bayesiano, disponível no programa SAS®.

3.2 Simulação dos Dados

Foram implementados programas em SAS® com o objetivo de gerar dados com distribuição normal e variâncias homogêneas através da função *RANNOR*, exposta em Box e Müller (1958), para os seguintes modelos: i) aleatório em classificação simples; ii) aleatório em classificação aninhada em dois estágios; iii) misto em classificação cruzada com interação de dois fatores. Tais modelos foram descritos no Referencial Teórico.

A geração dos números aleatórios pelos programas criados requer valores paramétricos para a média geral e componentes de variância envolvidos nos modelos. Foram, então, adotados os valores $\mu=10$ para a média geral,

$\sigma_a^2 = 0,05; 0,25; 0,50; 1,00$ e $2,50$ para as variâncias dos efeitos aleatórios e $\sigma_e^2 = 1$ para o erro, resultando em 5 valores de razão de variâncias σ_a^2/σ_e^2 , conforme procedimento adotado por Swallow e Monahan (1984) em que σ_a^2 é a variância dos efeitos aleatórios envolvidos no modelo. Os valores paramétricos foram escolhidos segundo motivação prática e informação retirada de trabalhos como Corbeil e Searle (1976b), Swallow e Searle (1978), Swallow e Monahan (1984), Chaloner (1987), Valério Filho (1991), entre outros.

Aos dados gerados em cada modelo foram consideradas três situações de não balanceamento: o caso balanceado, um não balanceamento “moderado” e um não balanceamento “acentuado”. Os modelos foram classificados como balanceados quando apresentavam o mesmo número de observações (repetições) por tratamento, sendo este representado por α_i para o modelo aleatório em classificação simples; pelas associações entre α_i e β_j para o modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios e pelos arranjos entre α_i , efeito fixo, e β_j , aleatório, para o modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores.

No modelo aleatório simples, o não balanceamento foi processado segundo a técnica exposta por Swallow e Searle (1978), Swallow e Monahan (1984) e Chaloner (1987). A técnica utiliza a estrutura “*n-patterns*” que considera os tratamentos e o número de observações (repetições) por tratamentos. A estrutura foi definida como balanceada se houvesse o mesmo número de observações por tratamento, como, por exemplo, $P_1 = (5, 5, 5)$. Definiram-se os tipos de não balanceamento “moderado” e “acentuado” a partir da manipulação da estrutura balanceada de modo que houvesse diferenças, “moderadas” ou “acentuadas”, entre o número de observações de cada tratamento envolvido, como $P_2 = (3, 5, 7)$ ou $P_3 = (1, 5, 9)$, respectivamente. Estas

denominações estão entre aspas devido à subjetividade de seus significados, já que não existem, de fato, padrões absolutos de não balanceamento moderado ou acentuado.

Esta metodologia foi adaptada ao modelo aleatório em classificação simples, obtendo-se três situações de não balanceamento: balanceado, não balanceamento “moderado”, MO (de modo a se obter uma redução de 20% dos dados), e não balanceamento “acentuado”, AC (promovendo uma redução de 40%).

No modelo aleatório em classificação simples, foi utilizado um tamanho de amostra pequeno, com 20 tratamentos ($\alpha_1, \dots, \alpha_{20}$), com 5 repetições cada, que no caso balanceado correspondeu a 100 observações; o não balanceamento “moderado” resultou em 80 observações e o não balanceamento “acentuado” implicou em 60 observações. Com um tamanho de amostra médio (40 tratamentos, com 5 repetições cada), e caso balanceado, obtiveram-se 200 observações; o não balanceamento “moderado” resultou em 160 observações e pelo não balanceamento “acentuado” obtiveram-se 120 observações. O tamanho de amostra grande (60 tratamentos com 5 repetições em cada), no caso balanceado, levou um total 300 observações; o não balanceamento “moderado” resultou em 240 observações e o não balanceamento “acentuado” em 180 observações.

Nos modelos aleatório em classificação aninhada em dois estágios e misto em classificação cruzada com interação de dois fatores, o não balanceamento foi feito segundo procedimentos descritos em Corbeil e Searle (1976b), Valério Filho (1991) e Fernandez (1998), que utilizaram a função *RANUNI* do SAS para gerar o número de observações por tratamento, a partir do conjunto balanceado. Ao contrário não balanceamento adotado no modelo simples, as reduções não atingiram exatamente os percentuais de 20% e 40%, respectivamente, para não balanceamentos “moderado” e “acentuado”. Esta falta

de exatidão, também verificada em Valério Filho (1991), foi devida à aleatoriedade dos números gerados pela função *RANUNI*.

No modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios, utilizou-se um tamanho de amostra pequeno (2 níveis do fator α e 5 níveis de β) que, no caso balanceado, correspondeu a 80 observações, com 8 repetições nas subclasses $\alpha\beta$; o não balanceamento “moderado” resultou num total de 62 observações, com repetições que variaram de 4 a 8; o não balanceamento “acentuado” implicou em 46 observações, com repetições que variaram de 0 a 8. Com o tamanho de amostra médio (3 níveis de α e 8 níveis de β) obtiveram-se, para o caso balanceado, 192 observações, com 8 repetições nas subclasses $\alpha\beta$; o não balanceamento “moderado” resultou em 144 observações, com repetições variando de 4 a 8, e o não balanceamento “acentuado” totalizou 97 observações, com repetições que variaram de 0 a 8. O tamanho de amostra grande (4 níveis de α e 10 níveis de β) resultou, no caso balanceado, em 320 observações, com 8 repetições por grupo $\alpha\beta$; o não balanceamento “moderado” resultou em 250 observações, com repetições variando de 4 a 8, e o não balanceamento “acentuado” correspondeu a 154 observações, com repetições variando de 4 a 8.

No modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores, foram utilizadas as mesmas configurações do modelo em classificação aninhada, descrito anteriormente.

Os componentes de variância foram estimados, para cada modelo, pelos métodos *ANOVA* (Método III de Henderson), *ML*, *REML* e *MIVQUE(0)*, já descritos no Referencial Teórico, por meio do procedimento *MIXED* do SAS, próprio e flexível para análise de modelos lineares mistos (Perri, 1998).

Desta forma, os dados foram gerados para cada um dos modelos, considerando-se 5 razões de variâncias, 3 níveis de não balanceamento e 3 tamanhos de amostras, proporcionando 45 configurações por modelo e método de estimação. Cada configuração foi replicada 15000 vezes.

A captação dos componentes de variância de cada experimento foi realizada através do procedimento *IML* (SAS, 2000), que foi preparado para determinar a média de valores do viés e erro quadrático médio (EQM) de suas 15000 replicações em cada configuração e para cada componente de variância envolvido no modelo.

Os efeitos aleatórios e erros foram gerados em cada modelo por meio de sementes definidas, de modo que todos os métodos de estimação dos componentes de variância fossem comparados diante de dados gerados pelas mesmas sementes, que totalizaram 8 em todo o estudo e foram distribuídas da seguinte maneira: sementes S_1 e S_2 , utilizadas, respectivamente, na geração de efeitos aleatórios do fator e do erro, no modelo aleatório em classificação simples; sementes S_3 , S_4 e S_5 , usadas na geração de efeitos do fator aleatório principal, aninhado e erro, para o modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios e, finalmente, as sementes S_6 , S_7 e S_8 , utilizadas na geração de efeitos um dos fatores principais, interação e erro, no modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores. Tudo isto para garantir uma igualdade de condições para estimação dos componentes de variâncias por diferentes métodos.

As estimativas negativas dos componentes de variâncias, obtidas pelo método *ANOVA*, foram convertidas em zero conforme recomendado por Searle (1971) e por Swallow e Monahan (1984). Estes autores também concluíram que tal procedimento diminui os problemas computacionais no cálculo de estimativas *ML* e *REML*, uma vez que os resultados do *ANOVA* são utilizados como valores iniciais de seus processos iterativos. Entretanto, Kelly e Mathew (1994) propuseram o uso de estimadores *ANOVA* não negativos em vez dos usuais no cálculo de estimativas pontuais de componentes de variâncias.

Para o cálculo de estimativas *ML* e *REML*, utilizaram-se as opções *default* do SAS/MIXED (versão 8), estabelecendo-se um número máximo de 50 iterações com o critério de convergência igual a

$$\frac{\mathbf{g}_k' \mathbf{H}_k^{-1} \mathbf{g}_k}{|f_k|} \leq 1\text{E} - 8$$

em que f_k é o valor da função objetivo ($-2\log$ da função de verossimilhança), g_k é a primeira derivada da função objetivo e H_k é a Hessiana da função objetivo. O índice k corresponde ao contador de iterações.

Os experimentos cujas estimativas *REML* e *ML* não convergiram foram descartados, como procedido por Corbeil e Searle (1976a), Swallow e Monahan (1984), Seraphin (1984) e Seraphin et al. (1990).

3.2.1 Avaliação dos Estimadores

Em todos modelos considerados, após os procedimentos de simulação em cada método de estimação, foram calculadas as médias correspondentes às estatísticas viés e EQM para cada configuração, ao longo das 15000 replicações (simulações), para cada componente de variância envolvido no modelo através do procedimento IML do SAS, com base nas expressões dos itens 2.4.1 e 2.4.2.

Pôde-se estimar o viés através de

$$\text{Viés} = \frac{\sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^2}{N} - \sigma^2 ,$$

em que i é o índice contador do número de replicações (simulações), $\hat{\sigma}_i^2$ é a estimativa do componente de variância resultante da simulação i , σ^2 é o valor paramétrico do componente e N é o número total de simulações.

Estimou-se o EQM de cada componente de variância por:

$$EQM = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{\sigma}_i^2 - \sigma^2)^2}{N},$$

em que i é o índice contador do número de replicações (simulações), $\hat{\sigma}_i^2$ é a estimativa do componente de variância resultante da simulação i , σ^2 é o valor paramétrico do componente e N é o número total de simulações.

3.3 Uma Aplicação em Dados Reais em Bovinos Nelore

Os métodos clássicos e modelos anteriormente descritos foram aplicados em 2000 registros de peso à desmama de bovinos Nelore, fornecidos pela Associação Brasileira dos Criadores de Zebu (ABCZ), referentes a animais nascidos no período de 1976 a 1994. As informações são oriundas de animais criados em regime de pastagens, semi-confinamento e confinamento. Para formação dos arquivos, foram impostas restrições utilizando procedimentos do SAS. Os reprodutores (touro) com número inferior a cinco filhos foram descartados. Apenas fazendas com o mínimo de 20 animais e rebanhos com pelo menos 10 registros num mesmo ano, criados somente em regime de pastagens, foram incluídos no estudo. Estas restrições foram importantes para a consistência e qualidade dos dados. Maiores detalhes acerca dos dados e modelos podem ser vistos em Machado et al. (1999).

Os modelos estatísticos considerados foram os seguintes:

i) Modelo aleatório em classificação simples

$$y_{ji} = \mu + \alpha_i + e_{ij} ,$$

em que

y_{ji} é o peso à desmama do bezerro j filho do touro i ;

μ é o peso médio à desmama;

α_i é o efeito do touro i , $\alpha_i \sim N(0, \sigma_\alpha^2)$;

e_{ij} é o erro associado ao peso dos bezerros, $e_{ij} \sim N(0, \sigma_e^2)$.

ii) Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + e_{ijk} ,$$

em que

y_{ijk} é o peso à desmama do bezerro k filho da vaca j acasalada com o touro i ;

μ é o peso médio à desmama;

α_i é o efeito do touro i , $\alpha_i \sim N(0, \sigma_\alpha^2)$;

β_j é o efeito da vaca j acasalada com o touro i , $\beta_j \sim N(0, \sigma_\beta^2)$;

e_{ijk} é o erro associado ao peso dos bezerros $e_{ijk} \sim N(0, \sigma_e^2)$.

iii) Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + e_{ijk} ,$$

em que

y_{ijk} é o peso à desmama do bezerro k filho do touro j nascido na época i ;

μ é o peso médio à desmama;

α_i é o efeito fixo de época de nascimento i , $i=1$ (época seca), $i=2$ (época chuvosa);

β_j é o efeito do touro j , $\beta_j \sim N(0, \sigma_\beta^2)$;

γ_{ij} é o efeito da interação época x touro, $\gamma_{ij} \sim N(0, \sigma_\gamma^2)$;

ϵ_{ijk} é o erro associado ao peso dos bezerros, $\epsilon_{ijk} \sim N(0, \sigma_\epsilon^2)$.

3.4 Uma Ilustração do Método Bayesiano

Através dos dados extraídos de Littel et al. (1996), foram estimados os componentes de variância baseados na média, mediana e moda de uma amostra *a posteriori* de tamanho 10000 gerada pelo algoritmo *Independence Chain*, opção *default* na versão 8 do SAS. Maiores detalhes acerca deste algoritmo são encontrados em Wolfinger e Kass (2000).

Valores modais das estimativas dos componentes de variância foram obtidos através do ajuste não-paramétrico pela técnica de *Kernel Density*. Tal ajuste consiste na estimação da *Kernel*, que é uma função de densidade conhecida. É calculada, então, a média dos pontos observados para criar uma aproximação por alisamento. No SAS, a função *Kernel default* é a normal. Maiores detalhes acerca da estimação pela Densidade *Kernel* univariada podem ser encontrados em Jones et al. (1996).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados referentes ao viés e EQM dos componentes de variância do fator e erro aleatórios, são apresentados segundo diferentes métodos de estimação *ANOVA*, *ML*, *REML* e *MIVQUE(0)*, razões de variâncias, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostra em cada um dos modelos estudados. Um exemplo é mostrado em dados reais de peso à desmama de bovinos Nelore e uma ilustração do método Bayesiano é abordada em dados extraídos da literatura, como foi mencionado em Material e Métodos.

4.1 Modelo Aleatório em Classificação Simples: Viés de σ_{α}^2

Os vieses médios de 15000 simulações em cada uma das 45 configurações estudadas estão apresentados nas Tabelas 2, 3 e 4. Os valores tabelados que mostram vieses relativos estimados iguais ou superiores a 10% da razão de variâncias estão em negrito e foram chamados de vieses "altos", para fins de destaque e orientação da discussão, conforme procedimento adotado por Swallow e Monahan (1984).

Observa-se, nas razões de variâncias maiores ou iguais a 0,25 da Tabela 2, que os vieses do estimador *ML* de σ_{α}^2 foram mais altos, enquanto o método *REML* foi o menos tendencioso. O valor absoluto do viés deste método aumentou com o crescimento da razão de variâncias e, algumas vezes, com o grau de não balanceamento. Pôde-se constatar, também, que na razão de variâncias mais baixa ($\sigma_{\alpha}^2/\sigma_{\epsilon}^2 = 0,05$) ocorreram vieses maiores que 10% em quase todos os métodos e níveis de não balanceamento estudados, sendo que o

método *ML* mostrou menor viés e o *ANOVA* foi mais tendencioso de todos os métodos.

TABELA 2 – Viés de σ_a^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_\alpha^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação simples. Amostra de tamanho pequeno (N=100).

σ_a^2/σ_e^2	NB (*)	<i>ANOVA</i>	<i>ML</i>	<i>REML</i>	<i>MIVQUE(0)</i>
0,05	BA	0,0134	0,0036	0,0134	0,0134
	MO	0,0203	0,0059	0,0176	0,0172
	AC	0,0348	0,0174	0,0317	0,0307
0,25	BA	0,0017	-0,0206	0,0017	0,0017
	MO	0,0014	-0,0250	0,0014	0,0008
	AC	0,0073	-0,0226	0,0069	0,0070
0,50	BA	0,0018	-0,0333	0,0018	0,0018
	MO	-0,0010	-0,0413	-0,0006	-0,0012
	AC	0,0016	-0,0433	0,0009	0,0020
1,00	BA	0,0032	-0,0569	0,0032	0,0032
	MO	-0,0016	-0,0687	-0,0015	-0,0018
	AC	0,0005	-0,0710	-0,0005	0,0011
2,50	BA	0,0072	-0,1281	0,0072	0,0072
	MO	-0,0026	-0,1469	-0,0032	-0,0025
	AC	0,0011	-0,1459	0,0004	0,0019

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

Verificou-se, ainda, que em amostras de tamanho médio (N=200) também ocorreram vieses “altos”, em sua maioria na relação de variâncias de 0,05 (Tabela 3). Neste caso, os métodos *ANOVA*, seguidos do *REML* e *MIVQUE(0)*, foram os mais tendenciosos, ao contrário do *ML*. No entanto, esta situação mudou nas razões de variâncias maiores ou iguais a 0,5, nas quais os

estimadores *ML* possuíram maiores vieses e o método *REML* mostrou-se menos tendencioso.

TABELA 3 – Viés de σ_α^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_\alpha^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação simples. Amostra de tamanho médio (N=200).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0062	0,0010	0,0062	0,0062
	MO	0,0104	0,0038	0,0099	0,0098
	AC	0,0192	0,0081	0,0156	0,0151
0,25	BA	0,0007	-0,0105	0,0007	0,0007
	MO	0,0003	-0,0124	0,0004	0,0004
	AC	0,0011	-0,0147	0,0011	0,0009
0,50	BA	0,0014	-0,0162	0,0014	0,0014
	MO	0,0005	-0,0187	0,0005	0,0005
	AC	0,0001	-0,0227	0,0002	0,0003
1,00	BA	0,0026	-0,0274	0,0026	0,0026
	MO	0,0013	-0,0307	0,0011	0,0013
	AC	0,0009	-0,0352	0,0008	0,0012
2,50	BA	0,0062	-0,0615	0,0062	0,0062
	MO	0,0036	-0,0666	0,0028	0,0038
	AC	0,0038	-0,0705	0,0036	0,0045

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

Na amostra de tamanho grande (N=300), encontraram-se sete vieses acima de 10%, todos localizados na razão de variâncias de 0,05 (Tabela 4). O método *ML* mostrou-se novamente como o mais tendencioso, com exceção de valores na razão de variâncias de 0,05 em todos os níveis de não balanceamento. Nas razões maiores ou iguais a 0,25, o *REML* produziu estimativas menos tendenciosas.

Além disso, houve um decréscimo dos valores dos vieses à medida que aumentava o tamanho de amostra. Estes resultados concordam com os encontrados por Swallow e Monahan (1984) e Chaloner (1987), Valério Filho (1991) e Fernandez (1998).

TABELA 4 - Viés de σ_a^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_\alpha^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e diferentes métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação simples. Amostra de tamanho grande (N=300).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0035	-0,0002	0,0035	0,0035
	MO	0,0066	0,0018	0,0060	0,0059
	AC	0,0137	0,0058	0,0110	0,0106
0,25	BA	0,0003	-0,0073	0,0003	0,0003
	MO	0,0001	-0,0085	0,0000	-0,0001
	AC	0,0016	-0,0088	0,0016	0,0018
0,50	BA	0,0005	-0,0112	0,0005	0,0005
	MO	0,0003	-0,0125	0,0002	0,0000
	AC	0,0021	-0,0130	0,0020	0,0026
1,00	BA	0,0011	-0,0189	0,0011	0,0011
	MO	0,0006	-0,0205	0,0007	0,0003
	AC	0,0035	-0,0205	0,0032	0,0042
2,50	BA	0,0028	-0,0423	0,0028	0,0028
	MO	0,0014	-0,0444	0,0019	0,0010
	AC	0,0072	-0,0426	-0,0064	0,0086

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

O estimador *ML* registrou viés negativo em quase todas as situações estudadas. Swallow e Monahan (1984), Searle et al. (1992), entre outros, explicam o viés negativo do estimador *ML* como sendo atribuído ao fato de não

considerar a perda em graus de liberdade associada com a estimação dos efeitos fixos, pois o *ML* usa “a” em vez de “a-1” como graus de liberdade do tratamento nos modelos em classificação simples. Isto é bem evidente para pequenos valores de “a”; por outro lado, à medida que “a” cresce (o que equivale a aumentar o tamanho da amostra), o viés torna-se de pequena importância. Os estimadores *ANOVA*, *REML* e *MIVQUE(0)* apresentaram vieses pouco expressivos, registrando-se pequenas diferenças entre eles.

Verificou-se, em todas as tabelas, que o estimador *ML* foi o menos tendencioso quando $\sigma_a^2/\sigma_e^2=0,05$ e que tal fato se deve às associações entre os valores de vieses negativos e positivos causados, respectivamente, por razões de variâncias baixas e restrição para evitar valores negativos (Swallow e Monahan, 1984). O *ML* tornou-se mais tendencioso à proporção que a razão de variâncias aumentou e, como constatado em Valério Filho (1991), foi inversamente proporcional aos tamanhos de amostra considerados.

A Figura 1 ilustra o comportamento dos viés do estimador de σ_a^2 em amostra de tamanho pequeno ($N=100$) e grau de não balanceamento “acentuado” à medida que cresce a relação de variâncias. Nota-se que o valor absoluto do viés do estimador *ML* cresceu com o aumento da razão de variâncias. Apesar de não haver aparentemente grandes diferenças entre os vieses dos outros métodos, pois todos foram muito baixos, a Tabela 2 mostrou que o *REML* foi menos tendencioso nas razões de variâncias maiores que 0,25.

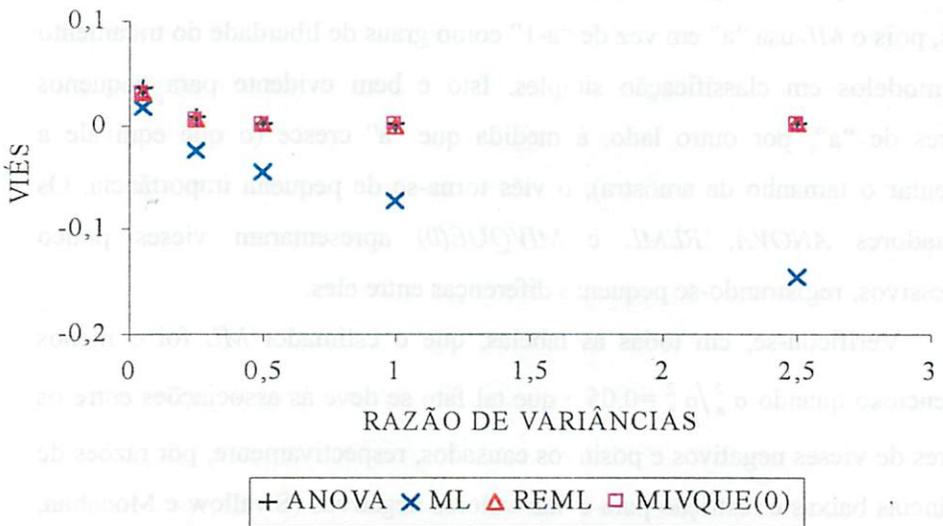


FIGURA 1 – Relação do viés dos estimadores de σ_{α}^2 com o crescimento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=100$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação simples.

4.2 Modelo Aleatório em Classificação Simples: Viés de σ_{ϵ}^2

Os vieses de todos os estimadores do erro (não mostrados) representam baixos valores em quase todas as condições estudadas. Na amostra de tamanho pequeno, foram registrados apenas seis casos com valores acima de 10%, todos eles nos métodos *ML* e *REML* com razão de variância de 0,05. Quando o tamanho da amostra passa para a categoria média, ainda nesta razão de variâncias, registraram-se analogamente seis casos acima de 10% com os métodos *ML* e *REML*. Em amostra de tamanho grande, nenhum caso foi notado.

A Figura 1 ilustra o comportamento do viés do estimador de σ_{ϵ}^2 , em amostra de tamanho pequeno ($N=100$) e grau de não balanceamento “acentuado”, à medida que cresce a relação de variâncias. Verifica-se uma

produção de subestimativas pelos métodos *ML* e *REML* nas razões 0,05 e 0,25. Nas outras razões, não houve grandes diferenças entre os vieses de todos os métodos.

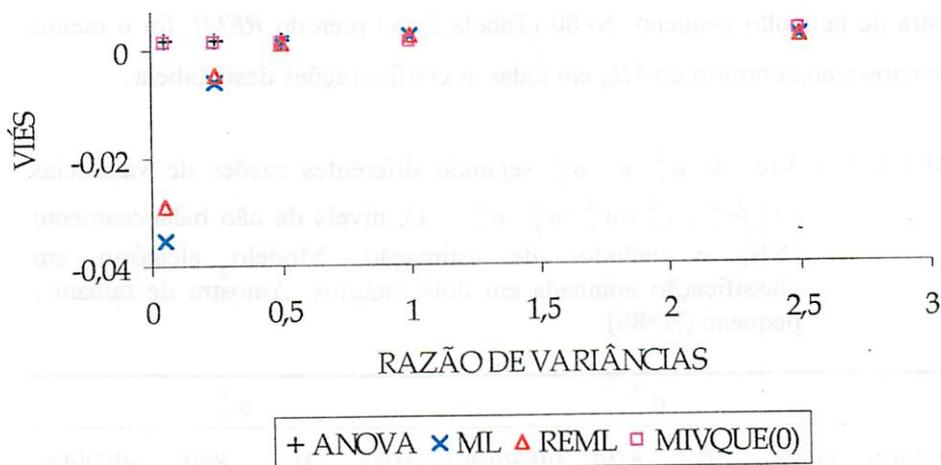


FIGURA 2 – Relação do viés do estimador de σ_c^2 com o crescimento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=100$) e não balanceamento acentuado. Modelo aleatório em classificação simples.

com o crescimento da razão de variâncias e registrou uma tendência de ligeiro aumento com a mudança no nível de não balanceamento.

Verificou-se também que para $\sigma_a^2/\sigma_c^2=0,05$ ocorreram vieses maiores que 10% em todos os métodos e graus de não balanceamento estudados, na amostra de tamanho pequeno, $N=80$ (Tabela 5). O método *REML* foi o menos tendencioso, ao contrário do *ML*, em todas as configurações desta tabela.

TABELA 5 – Viés de σ_a^2 e σ_β^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_c^2 , $\sigma_a^2=\sigma_\alpha^2=\sigma_\beta^2$, $\sigma_c^2=1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios. Amostra de tamanho pequeno ($N=80$).

σ_a^2/σ_c^2	NB(*)	σ_α^2				σ_β^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0118	-0,0272	0,0104	0,0118	0,0126	-0,0015	0,0066	0,0126
	MO	0,0165	-0,0264	0,0143	0,0164	0,0196	0,0028	0,0124	0,0195
	AC	0,0225	-0,0263	0,0185	0,0220	0,0341	0,0087	0,0222	0,0306
0,25	BA	0,0177	-0,1361	0,0174	0,0177	0,0016	-0,0261	-0,0096	0,0016
	MO	0,0255	-0,1341	0,0244	0,0254	0,0021	-0,0288	-0,0105	0,0028
	AC	0,0306	-0,1362	0,0268	0,0298	0,0091	-0,0309	-0,0072	0,0113
0,50	BA	0,0268	-0,2713	0,0267	0,0268	0,0005	-0,0433	-0,0172	0,0005
	MO	0,0378	-0,2678	0,0365	0,0377	-0,0016	-0,0489	-0,0209	-0,0007
	AC	0,0434	-0,2714	0,0368	0,0422	0,0008	-0,0567	-0,0227	0,0049
1,00	BA	0,0456	-0,5415	0,0456	0,0456	0,0007	-0,0751	-0,0299	0,0007
	MO	0,0625	-0,5354	0,0599	0,0622	-0,0045	-0,0840	-0,0367	-0,0032
	AC	0,0695	-0,5415	0,0569	0,0676	-0,0040	-0,0947	-0,0411	0,0010
2,50	BA	0,1025	-1,3515	0,1025	0,1025	0,0020	-0,1702	-0,0671	0,0020
	MO	0,1356	-1,3422	-0,0810	0,1350	-0,0102	-0,1836	0,1261	-0,0081
	AC	0,1488	-1,3526	0,1113	0,1441	-0,0111	-0,1999	-0,0886	-0,0033

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

TABELA 6 – Vieses de σ_{α}^2 e σ_{β}^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_{\alpha}^2 = \sigma_{\beta}^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios. Amostra de tamanho médio (N=192).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	σ_{α}^2				σ_{β}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0045	-0,0189	0,0041	0,0045	0,0044	0,0003	0,0024	0,0044
	MO	0,0046	-0,0200	0,0038	0,0045	0,0100	0,0039	0,0068	0,0098
	AC	0,0086	-0,0201	0,0066	0,0083	0,0190	0,0069	0,0116	0,0163
0,25	BA	0,0098	-0,0894	0,0098	0,0098	-0,0003	-0,0058	-0,0029	-0,0003
	MO	0,0050	-0,0940	0,0049	0,0050	0,0035	-0,0035	0,0001	0,0035
	AC	0,0103	-0,0957	0,0085	0,0100	0,0025	-0,0088	-0,0030	0,0046
0,50	BA	0,0173	-0,1769	0,0173	0,0173	-0,0012	-0,0091	-0,0050	-0,0012
	MO	0,0073	-0,1851	0,0071	0,0073	0,0047	-0,0047	0,0002	0,0047
	AC	0,0151	-0,1874	0,0120	0,0148	0,0008	-0,0137	-0,0063	0,0031
1,00	BA	0,0323	-0,3515	0,0323	0,0323	-0,0030	-0,0161	-0,0093	-0,0030
	MO	0,0123	-0,3667	0,0120	0,0123	0,0071	-0,0076	-0,0001	0,0072
	AC	0,0256	-0,3697	0,0192	0,0251	0,0002	-0,0208	-0,0104	0,0031
2,50	BA	0,0772	-0,8753	0,0772	0,0772	-0,0084	-0,0375	-0,0224	-0,0084
	MO	0,0281	-0,9115	0,0258	0,0280	0,0133	-0,0173	-0,0020	0,0136
	AC	0,0582	-0,9186	0,0388	0,0572	-0,0018	-0,0383	-0,0200	0,0039

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

Pode-se observar também que, com a amostra de tamanho médio (N=192), todas as estimativas *ML* de σ_{α}^2 mostraram vieses “altos” (Tabela 6), em todas as razões de variâncias. Os outros métodos produziram vieses de σ_{α}^2 “altos” somente na razão de variância de 0,05 e grau de não balanceamento “acentuado” (Tabela 6). Portanto, houve um comportamento do viés um pouco melhor que o anterior (Tabela 5), o que já era esperado, uma vez que se

aumentou o tamanho da amostra em aproximadamente 2,5 vezes. Notou-se um aumento dos vieses “altos” do método *ML* de σ_{α}^2 , juntamente com a razão de variâncias e o grau de não balanceamento. Por outro lado, é bom mencionar que tal fato não ocorreu com frequência nos vieses mais baixos, produzidos pelos outros métodos quando $\sigma_{\alpha}^2/\sigma_{\epsilon}^2 \geq 0,25$, classificados na categoria de grupo sem grande importância na magnitude de condições estudadas. Semelhante ao resultado da Tabela 5, o *ML* foi o mais tendencioso de todos os métodos, ao contrário do *REML*. Apesar disso, as estimativas do *ANOVA* e *MIVQUE(0)* ficaram próximas dos resultados do *REML*.

Na amostra de tamanho grande ($N=320$), os estimadores *ML* de σ_{α}^2 também foram “altos” em todas razões de variâncias (Tabela 7) com valores menores que os encontrados nas categorias anteriores (Tabelas 5 e 6). Nenhum caso de viés alto ocorreu em outros métodos. Este comportamento, como mencionado anteriormente, foi atribuído ao tamanho de amostra, que é quatro vezes maior que a amostra de tamanho pequeno. Acredita-se que com uma amostra de tamanho maior, pode-se conseguir um estimador *ML* com viés menor, como o que foi encontrado neste estudo. A amostra de tamanho grande permitiu obter vieses baixos em todos os outros métodos, razões de variância e condições de não balanceamento, como se pode ver na Tabela 7. Novamente, observou-se nos vieses “altos” de σ_{α}^2 , produzidos pelo método *ML*, um crescimento de sua magnitude quando se passou da estrutura balanceada para a não balanceada e se aumentou a razão de variâncias.

O estimador *ML* de σ_{α}^2 mostrou viés negativo em todas as situações consideradas no estudo e os estimadores *ANOVA*, *REML* e *MIVQUE(0)* apresentaram vieses ora positivos, ora negativos, sem nenhuma tendência definida.

TABELA 7 – Vieses de σ_{α}^2 e σ_{β}^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_c^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_{\alpha}^2 = \sigma_{\beta}^2$, $\sigma_c^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios. Amostra de tamanho grande (N=320).

σ_a^2/σ_c^2	NB(*)	σ_{α}^2				σ_{β}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0011	-0,0153	0,0010	0,0011	0,0024	0,0007	0,0015	0,0024
	MO	0,0013	-0,0159	0,0010	0,0013	0,0036	0,0012	0,0023	0,0035
	AC	0,0028	-0,0163	0,0022	0,0028	0,0091	0,0036	0,0055	0,0077
0,25	BA	0,0007	-0,0707	0,0007	0,0007	0,0012	-0,0003	0,0005	0,0012
	MO	-0,0002	-0,0721	-0,0002	-0,0001	-0,0013	-0,0030	-0,0022	-0,0015
	AC	0,0008	-0,0738	0,0009	0,0010	0,0011	-0,0023	-0,0008	0,0008
0,50	BA	0,0005	-0,1393	0,0005	0,0005	0,0019	-0,0001	0,0009	0,0019
	MO	-0,0012	-0,1414	-0,0013	-0,0011	-0,0026	-0,0048	-0,0037	-0,0031
	AC	0,0000	-0,1439	0,0001	0,0003	0,0014	-0,0025	-0,0008	0,0009
1,00	BA	0,0001	-0,2765	0,0001	0,0001	0,0033	0,0001	0,0016	0,0033
	MO	-0,0030	-0,2798	-0,0032	-0,0027	-0,0052	-0,0083	-0,0067	-0,0059
	AC	-0,0012	-0,2831	-0,0010	-0,0006	0,0027	-0,0031	-0,0008	0,0017
2,50	BA	-0,0012	-0,6884	-0,0012	-0,0012	0,0072	0,0004	0,0036	0,0072
	MO	-0,0083	-0,6947	-0,0092	-0,0075	-0,0126	-0,0189	-0,0155	-0,0141
	AC	-0,0045	-0,7015	-0,0054	-0,0028	0,0069	-0,0035	-0,0003	0,0051

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

Nas razões de variâncias 1,00 e 2,50, as estimativas *ML* foram novamente as mais tendenciosas, enquanto o *MIVQUE(0)* foi o método menos tendencioso. Nas outras razões, os métodos *ANOVA* e *REML* alternaram a menor tendenciosidade com valores muito próximos.

A Figura 3 apresenta a evolução dos vieses dos estimadores de σ_{α}^2 na amostra de tamanho pequeno (N=100) e grau de não balanceamento

“acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. Os vieses de σ_e^2 foram muito baixos e praticamente próximos de zero em quase todos os métodos, com exceção do *ML*, cujo viés negativo aumentou com a razão de variâncias. Os outros métodos produziram baixos vieses.

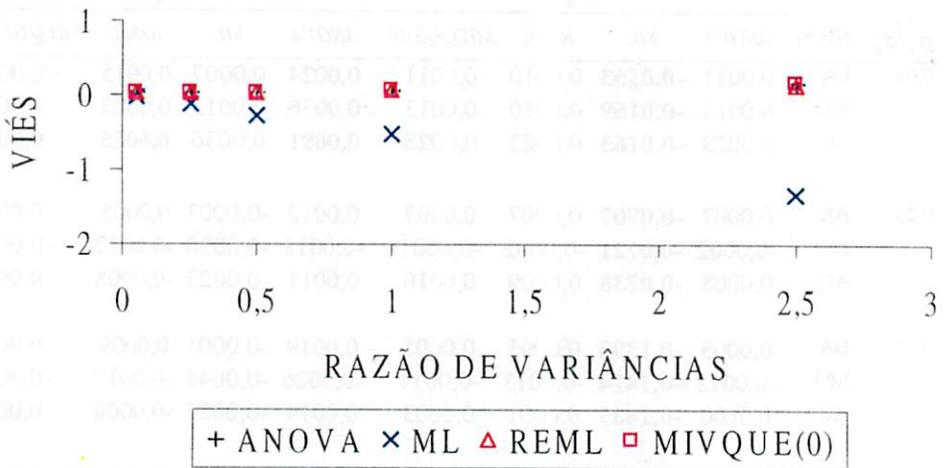


FIGURA 3 – Razão do viés de σ_α^2 com o crescimento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios.

valores um pouco acima do limite de 10% nas diversas razões de variâncias e algumas classes de não balanceamento.

Em amostra de tamanho pequeno (Tabela 5), foram registrados vieses maiores que 10% na razão $\sigma_a^2/\sigma_c^2=0,05$, em quase todos os métodos e graus de não balanceamento. Nesta mesma Tabela, verificou-se uma maior tendenciosidade do método *ML* para razão de variâncias maior ou igual a 0,25 (o contrário do que ocorreu com a razão 0,05). Nas razões de variância acima de 0,05, os vieses dos métodos *ANOVA*, *REML* e *MIVQUE(0)* foram inexpressivos. Constatou-se, na Tabela 5, que os vieses de σ_β^2 foram menores que os encontrados na estimação de σ_α^2 , excetuando-se alguns valores na razão $\sigma_a^2/\sigma_c^2=0,05$ e um valor em $\sigma_a^2/\sigma_c^2=2,50$ produzido pelo método *REML*.

Na amostra de tamanho médio (Tabela 6), na razão de variância de 0,05, foram encontrados sete casos de vieses “altos”, em sua maioria, nas categorias de não balanceamento “moderado” e “acentuado” nos métodos *ANOVA*, *REML* e *MIVQUE(0)*. Houve também uma melhoria no comportamento do viés com o aumento no tamanho da amostra. No método *ML* foi possível registrar um crescimento de magnitude do viés com o aumento do grau de não balanceamento (Tabela 6). O *ML* produziu menores vieses na razão de 0,05 e maiores na razão maior ou igual a 0,25. Para os outros métodos, não foi detectado nenhum padrão. Quando $\sigma_a^2/\sigma_c^2 \geq 0,25$, verificaram-se vieses de σ_β^2 menores que os produzidos na estimação de σ_α^2 .

Em amostra de tamanho grande (Tabela 7), os estimadores *ML* de σ_β^2 foram todos baixos e os únicos vieses “altos” aconteceram na razão de variância de 0,05 no nível de não balanceamento “acentuado” nos métodos *ANOVA*, *REML* e *MIVQUE(0)*. Esta menor tendenciosidade está relacionada ao maior tamanho de amostra utilizado. Os estimadores *ANOVA*, *ML*, *REML* e

MIVQUE(0) de σ_{β}^2 mostraram vieses positivos e negativos em todas as configurações estudadas, repetindo o mesmo comportamento (Tabelas 5 e 6). As estimativas do *ML* foram menos tendenciosas na razão de variâncias de 0,05, sendo que, em razões maiores e não balanceamento “acentuado”, o *REML* foi menos tendencioso. Ao contrário do que foi encontrado nas Tabelas 5 e 6, a Tabela 7 mostra que poucos vieses de σ_{β}^2 foram menores que os de σ_{α}^2 , excetuando-se todos aqueles produzidos pelos estimadores *ML* e alguns do *REML* e *MIVQUE(0)*.

Os vieses foram pouco expressivos, como foi encontrado com σ_{α}^2 dos modelos aleatórios em classificação simples e aninhada em dois estágios. Os resultados encontrados no presente trabalho são de certa forma concordantes com os de Valério Filho (1991) em seus estudos com modelo misto hierárquico em dois estágios. Pode-se dizer que todos os métodos de estimação produziram estimativas menos tendenciosas de σ_{β}^2 com a amostra de tamanho grande. O seu melhor desempenho pode ser atribuído ao maior número de graus de liberdade disponível na sua estimação.

A Figura 4 apresentou a evolução dos viés dos estimadores de σ_{β}^2 na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. Os vieses de σ_{β}^2 foram próximos de zero nas razões de variância menores ou iguais a 0,50 em todos os métodos. A partir daí, os vieses negativos do *ML* e *REML* cresceram com o aumento de σ_a^2/σ_e^2 (Figura 4).

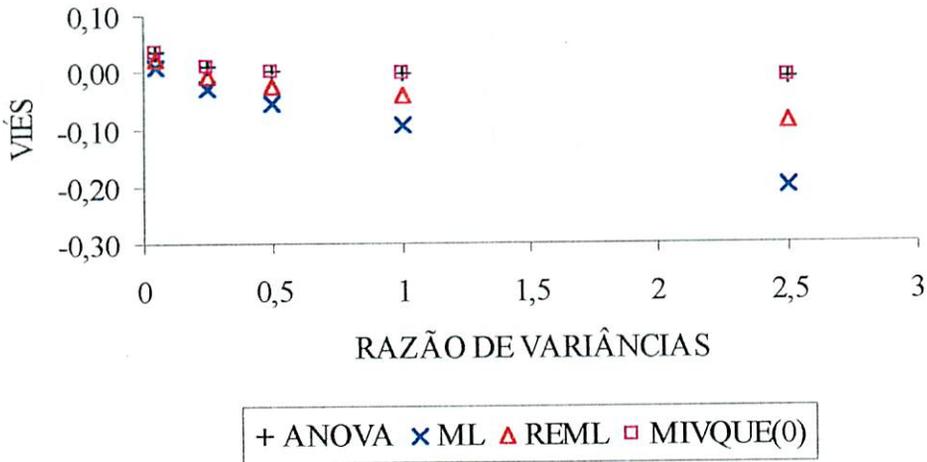


FIGURA 4 – Razão do viés dos estimadores de σ_{β}^2 com o crescimento da razão de variâncias na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios.

4.5 Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios: Viés de σ_e^2

Os vieses dos estimadores do resíduo (não mostrados) também apresentaram baixos valores em quase todas as condições estudadas. Exceções foram registradas na amostra de tamanho pequeno ($N=80$), em seis casos, nos métodos *ML* e *REML*, na razão de variâncias de 0,05, em todas as modalidades de não balanceamento. Na amostra de tamanho médio ($N=192$), encontraram-se cinco casos, sendo dois deles no método *REML*, nas categorias “moderada” e “acentuada” de não balanceamento, três no método *ML* nas três modalidades de não balanceamento. Na amostra de tamanho grande, apenas dois casos foram encontrados na categoria “acentuada”, um no método *REML* e outro em *ML*.

A Figura 5 apresentou a evolução dos vieses dos estimadores de σ_e^2 na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. Verificou-se a ocorrência de subestimativas por parte dos métodos *ML* e *REML* nas razões 0,05 e 0,25, enquanto os outros métodos produziram baixos valores de viés.

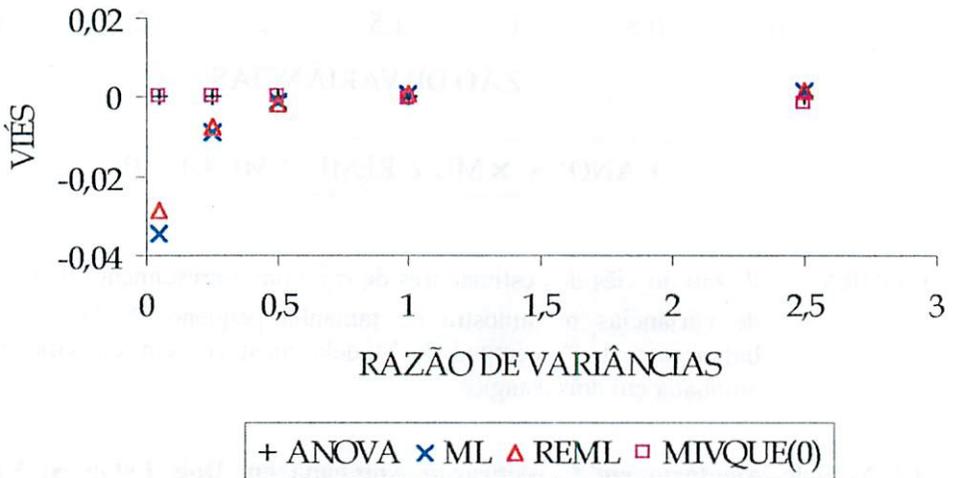


FIGURA 5 – Razão do viés dos estimadores de σ_e^2 com o crescimento da razão de variância na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios.

variâncias superiores a 0,05, em todos os níveis de não balanceamento. Ele cresceu com o aumento da razão de variâncias e quando se mudou do nível “moderado” para o “acentuado”. Na razão de variâncias de 0,05, os vieses foram “altos”, com exceção somente daqueles produzidos pelo *ML*, em todos os níveis de não balanceamento. Na razão 0,25, os vieses de todos os métodos foram altos. Na razão de variâncias 0,50 ocorreram vieses “altos” nas categorias “moderado” e “acentuado”, em todos os métodos de estimação. Na amostra de tamanho médio ($N=192$), os vieses do estimador *ML* de σ_{β}^2 foram todos altos, exceto na razão de variância de 0,05, em que foram desprezíveis (Tabela 9); porém, foram registrados valores mais baixos que os encontrados em amostra de tamanho pequeno.

Constataram-se vieses altos apenas na razão de variância de 0,05 em quase todos os graus de não balanceamento e métodos de estimação (Tabela 9). Mais uma vez destaca-se o melhor comportamento do viés como uma consequência do aumento do tamanho da amostra.

Nas razões de variância maiores ou iguais a 0,25 e em todos os níveis de não balanceamento e métodos estudados, os vieses foram baixos e classificados como irrelevantes. A Tabela 10 permite afirmar, como nos demais casos já comentados, que a magnitude dos vieses altos cresce com o aumento do grau de não balanceamento. Na amostra de tamanho grande ($N=320$), as estimativas *ML* de σ_{β}^2 também foram altas (Tabela 10), com os valores menores que os verificados nas classificações anteriores (Tabelas 8 e 9). É bom destacar que conseguiu-se encontrar três vieses desprezíveis entre os estimadores *ML* de σ_{β}^2 , o que não tinha acontecido em situações anteriores. Acredita-se que com uma amostra de tamanho maior, obter-se-ia estimadores *ML* de σ_{β}^2 com menor viés do que foi registrado neste estudo. A amostra de tamanho grande também permitiu baixos vieses nas razões de variância maiores que 0,05, em todos os

outros métodos e condições de não balanceamento (Tabela 10). Verificou-se, no método *ML*, um decréscimo de magnitude dos vieses quando se passou da estrutura balanceada para o não balanceamento “acentuado”.

O estimador *ML* de σ_{β}^2 subestimou os valores paramétricos em quase todas as configurações do estudo. Em todos os métodos de estimação, pode-se constatar uma tendência de i) crescimento do viés com o aumento da razão de variância; ii) diminuição, de uma maneira geral, do viés com o aumento do tamanho da amostra; iii) aumento do viés com o aumento do nível de não balanceamento. Nota-se um comportamento bem próximo dos métodos *ANOVA* e *MIVQUE(0)* em quase todas as situações. Deve-se lembrar também que os vieses dos métodos *ANOVA*, *REML* e *MIVQUE(0)* mostraram-se pouco importantes, como foi constatado nos modelos anteriores. Resultados semelhantes foram relatados por Valério Filho (1991).

Verifica-se, pela Tabela 8, que o método *ANOVA* produziu maiores vieses nas razões de 0,05 e 0,25, enquanto o *ML* foi o menos tendencioso. Nas razões de variâncias maiores ou iguais a 0,5, o *ML* produziu as estimativas mais tendenciosas. Nestas razões, o *REML* é o menos tendencioso.

Na Tabela 9, o método *ANOVA* é o mais tendencioso na razão de 0,05 e o *ML* é o menos tendencioso. Nas razões de variâncias maiores ou iguais a 0,25, o *ML* produz as estimativas mais tendenciosas, ao contrário do método *REML*.

A Tabela 10 mostra que as estimativas *ML* são as mais tendenciosas nas razões de variâncias maiores ou iguais a 0,25. O método *REML* foi menos tendencioso no nível “moderado” de não balanceamento, em todas as razões de variâncias, enquanto o *MIVQUE(0)* foi menos tendencioso no nível “acentuado” de não balanceamento, nas razões de variâncias maiores ou iguais a 0,25.

TABELA 8 – Viés de σ_{β}^2 (fator aleatório) e σ_{γ}^2 (interação) segundo diferentes relações entre variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_{\beta}^2 = \sigma_{\gamma}^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores. Amostra de tamanho pequeno (N=80).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	σ_{β}^2				σ_{γ}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0213	-0,0041	0,0123	0,0213	0,0240	-0,0184	0,0043	0,0240
	MO	0,0286	-0,0024	0,0160	0,0285	0,0325	-0,0176	0,0076	0,0325
	AC	0,0432	0,0011	0,0248	0,0409	0,0536	-0,0170	0,0157	0,0477
0,25	BA	0,0294	-0,0310	0,0262	0,0294	0,0114	-0,0844	-0,0175	0,0114
	MO	0,0379	-0,0275	0,0322	0,0380	0,0110	-0,0928	-0,0225	0,0120
	AC	0,0498	-0,0284	0,0366	0,0532	0,0267	-0,1004	-0,0168	0,0288
0,50	BA	0,0430	-0,0676	0,0416	0,0430	0,0102	-0,1486	-0,0320	0,0102
	MO	0,0532	-0,0611	0,0507	0,0536	0,0030	-0,1636	-0,0433	0,0043
	AC	0,0646	-0,0623	0,0529	0,0728	0,0160	-0,1778	-0,0388	0,0218
1,00	BA	0,0710	-0,1439	0,0706	0,0710	0,0134	-0,2691	-0,0561	0,0134
	MO	0,0850	-0,1333	0,0842	0,0855	-0,0023	-0,2917	-0,0755	-0,0012
	AC	0,0964	-0,1363	0,0781	0,1137	0,0124	-0,3074	-0,0635	0,0212
2,50	BA	0,1561	-0,3752	0,1561	0,1561	0,0267	-0,6254	-0,1257	0,0267
	MO	0,1789	-0,3605	0,1704	0,1798	-0,0079	-0,6584	-0,1543	-0,0080
	AC	0,1947	-0,3771	0,1454	0,2378	0,0233	-0,6575	-0,1179	0,0363

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

TABELA 9 – Viés de σ_{β}^2 (fator aleatório) e σ_{γ}^2 (interação) segundo diferentes relações entre variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_{\beta}^2 = \sigma_{\gamma}^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores. Amostra de tamanho médio (N=192).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	σ_{β}^2				σ_{γ}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0051	-0,0048	0,0031	0,0051	0,0075	-0,0146	0,0027	0,0075
	MO	0,0078	-0,0044	0,0043	0,0078	0,0130	-0,0142	0,0059	0,0126
	AC	0,0161	-0,0030	0,0091	0,0144	0,0276	-0,0162	0,0112	0,0239
0,25	BA	0,0031	-0,0287	0,0030	0,0031	0,0007	-0,0491	-0,0029	0,0007
	MO	0,0071	-0,0259	0,0065	0,0075	-0,0002	-0,0560	-0,0045	0,0001
	AC	0,0111	-0,0258	0,0089	0,0119	0,0078	-0,0729	-0,0033	0,0112
0,50	BA	0,0028	-0,0600	0,0028	0,0028	0,0001	-0,0817	-0,0042	0,0001
	MO	0,0105	-0,0540	0,0098	0,0111	-0,0025	-0,0907	-0,0073	-0,0023
	AC	0,0117	-0,0552	0,0091	0,0135	0,0045	-0,1167	-0,0072	0,0102
1,00	BA	0,0026	-0,1227	0,0026	0,0026	-0,0006	-0,1467	-0,0069	-0,0006
	MO	0,0183	-0,1103	0,0167	0,0197	-0,0052	-0,1573	-0,0119	-0,0049
	AC	0,0148	-0,1175	0,0061	0,0185	0,0053	-0,1906	-0,0068	0,0131
2,50	BA	0,0021	-0,3107	0,0021	0,0021	-0,0031	-0,3420	-0,0159	-0,0031
	MO	0,0424	-0,2822	0,0337	0,0462	-0,0127	-0,3539	-0,0217	-0,0118
	AC	0,0259	-0,3092	-0,0139	0,0349	0,0100	-0,4010	0,0072	0,0236

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

TABELA 10 – Viés de σ_{β}^2 (fator aleatório) e σ_{γ}^2 (interação) segundo diferentes relações entre variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_{\beta}^2 = \sigma_{\gamma}^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores. Amostra de tamanho grande (N=320).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	σ_{β}^2				σ_{γ}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0011	-0,0051	0,0005	0,0011	0,0033	-0,0134	0,0017	0,0033
	MO	0,0021	-0,0051	0,0009	0,0021	0,0057	-0,0141	0,0031	0,0056
	AC	0,0062	-0,0046	0,0029	0,0056	0,0135	-0,0157	0,0064	0,0121
0,25	BA	-0,0009	-0,0258	-0,0009	-0,0009	0,0007	-0,0374	0,0001	0,0007
	MO	-0,0006	-0,0255	-0,0005	-0,0007	0,0006	-0,0418	-0,0003	0,0005
	AC	0,0035	-0,0224	0,0030	0,0026	0,0008	-0,0555	-0,0011	0,0025
0,50	BA	-0,0020	-0,0518	-0,0020	-0,0020	0,0006	-0,0624	0,0001	0,0006
	MO	-0,0019	-0,0516	-0,0018	-0,0020	0,0009	-0,0665	0,0002	0,0007
	AC	0,0040	-0,0464	0,0038	0,0026	0,0001	-0,0852	-0,0015	0,0018
1,00	BA	-0,0042	-0,1037	-0,0042	-0,0042	0,0004	-0,1127	-0,0003	0,0004
	MO	-0,0040	-0,1033	-0,0037	-0,0040	0,0015	-0,1163	0,0005	0,0011
	AC	0,0061	-0,0941	0,0061	0,0037	-0,0001	-0,1415	-0,0017	0,0022
2,50	BA	-0,0103	-0,2593	-0,0103	-0,0103	-0,0003	-0,2639	-0,0016	-0,0003
	MO	-0,0095	-0,2579	-0,0093	-0,0094	0,0027	-0,2662	0,0011	0,0018
	AC	0,0132	-0,2382	0,0084	0,0077	-0,0002	-0,3064	0,0031	0,0037

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado.

A Figura 6 ilustra o comportamento do viés dos estimadores de σ_{β}^2 na amostra de tamanho pequeno (N=80) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. Nas razões de variância maiores ou iguais a 0,05, verificou-se uma tendência de crescimento do viés de σ_{β}^2 , estimado pelo ML, no sentido dos valores negativos e, quando considerado

outros métodos de estimação, houve uma tendência de crescimento do viés para valores positivos (Figura 6).

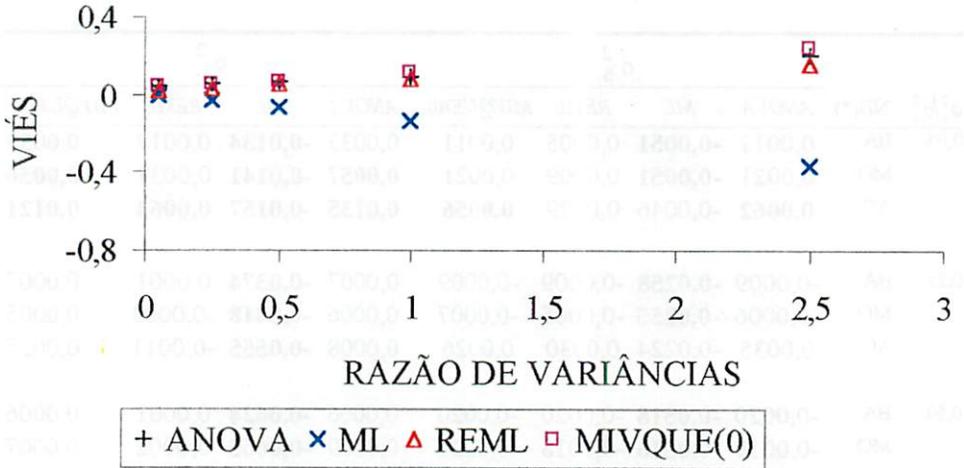


FIGURA 6 – Razão do viés dos estimadores de σ_{β}^2 com o crescimento da razão de variância em amostra de tamanho pequeno e não balanceamento “acentuado” (N=80). Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores.

4.7 Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de dois Fatores:

Viés de σ_{γ}^2

Os vieses médios são mostrados nas Tabelas 8, 9 e 10. Como nos itens anteriores, só serão discutidos vieses relativos estimados iguais ou superiores a 10%. Os viés do estimador *ML* de σ_{γ}^2 foi o mais alto e acima do limite estabelecido em todas as razões de variâncias e níveis de não balanceamento. Ele aumentou com o crescimento da razão de variâncias e da categoria de não balanceamento e diminuiu com o tamanho de amostra. Na Tabela 8, com a razão

de variância σ_a^2/σ_c^2 igual a 0,05, quase todos os vieses foram altos em todos os métodos de estimação e condições de não balanceamento, em amostra de tamanho pequeno (N=80). Quando $\sigma_a^2/\sigma_c^2=0,25$, ocorreram vieses de σ_y^2 baixos apenas no método *REML* na condição de não balanceamento “acentuado”. Estando as razões de variâncias acima de 0,25, as estimativas *ANOVA* foram as menos tendenciosas (Tabela 8), enquanto o método *ML* foi o estimador mais tendencioso.

Em amostra de tamanho médio (Tabela 9), os vieses do estimador *ML* de σ_y^2 foram todos altos, porém mais baixos que os obtidos em amostra de tamanho pequeno. Para os demais métodos, foram verificados alguns vieses “altos” apenas quando $\sigma_a^2/\sigma_c^2=0,05$. Na Tabela 9, quando $\sigma_a^2/\sigma_c^2 \geq 0,25$ e com exceção do método *ML*, todos os vieses foram baixos e inexpressivos, havendo uma menor tendenciosidade do *MIVQUE(0)* considerando-se o grau “moderado” de não balanceamento. Com a razão $\sigma_a^2/\sigma_c^2 \geq 0,5$, o método *ANOVA* foi o menos tendencioso, diante dos outros métodos, no grau de não balanceamento “acentuado”. Como foi observado anteriormente, a magnitude dos vieses “altos”, produzidos pelo método *ML*, cresceu com o aumento do grau de não balanceamento.

Na amostra de tamanho grande (N=320), os estimadores de *ML* de σ_y^2 foram também “altos” (Tabela 10), com os valores menores que os verificados nas classificações anteriores (Tabelas 8 e 9). Na razão de variâncias igual a 0,05, foram registrados cinco vieses altos nos outros métodos nos níveis de não balanceamento “moderado” e “acentuado”. Na Tabela 10, quando $\sigma_a^2/\sigma_c^2 \geq 0,25$ e com exceção do método *ML*, todos os vieses foram baixos e inexpressivos, havendo uma menor tendenciosidade do *ANOVA*, diante dos outros métodos, no grau de não balanceamento “acentuado”. No entanto, o *MIVQUE(0)* foi o menos

tendencioso considerando-se o grau “moderado” de não balanceamento. Os vieses “altos” cresceram quando se passou da estrutura balanceada para a não balanceada “acentuada”.

Considerando-se todos os tamanhos de amostra, verificou-se que o estimador *ML* de σ_{γ}^2 subestimou os valores paramétricos em todas as situações estudadas. Os estimadores *ANOVA*, *REML* e *MIVQUE(0)* apresentaram vieses ora positivos ora negativos.

A Figura 7 ilustra o comportamento do viés dos estimadores de σ_{γ}^2 na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. O viés de σ_{γ}^2 foi muito baixo e bem próximo de zero em todos os métodos, com exceção do *ML*, pelo qual eles cresceram com o aumento da razão de variâncias (Figuras 7).

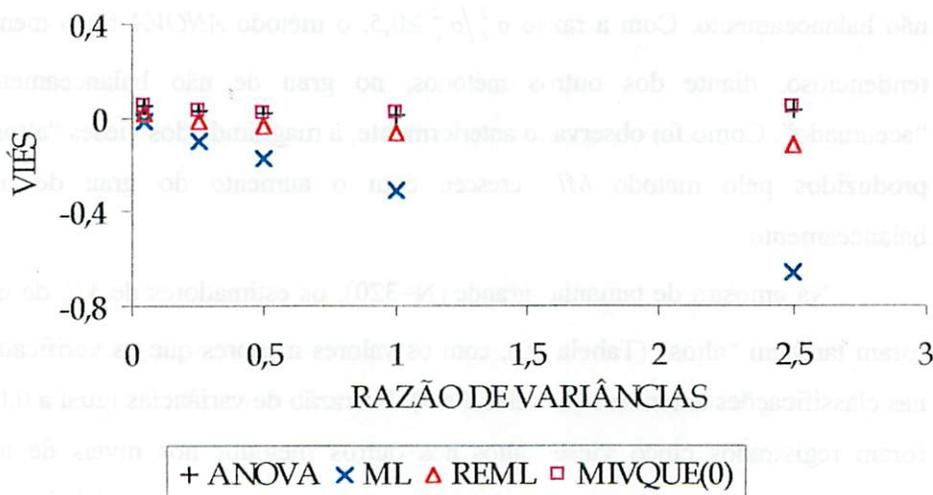


FIGURA 7 – Relação do viés dos estimadores de σ_{γ}^2 com o crescimento da razão de variâncias na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores.

4.8 Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de dois Fatores:

Viés de σ_c^2

Os vieses dos estimadores do erro mostraram valores baixos em quase todas as situações estudadas. Exceções aconteceram em seis casos, nos métodos *ML* e *REML*, em amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e médio ($N=192$), razão de variância de 0,05 em todas as categorias de não balanceamento. Na amostra de tamanho grande ($N=320$), foram encontrados cinco casos, sendo dois no método *REML*, nas categorias “moderada” e “acentuada”, e três no método *REML*, em todos os níveis de não balanceamento.

A Figura 8 ilustra o comportamento dos vieses do estimador de σ_c^2 na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. Os vieses de σ_c^2 produzidos pelos métodos *ML* e *REML* foram negativos e tendiam para valores em torno de zero à medida que a razão entre variâncias aumentava (Figura 8).

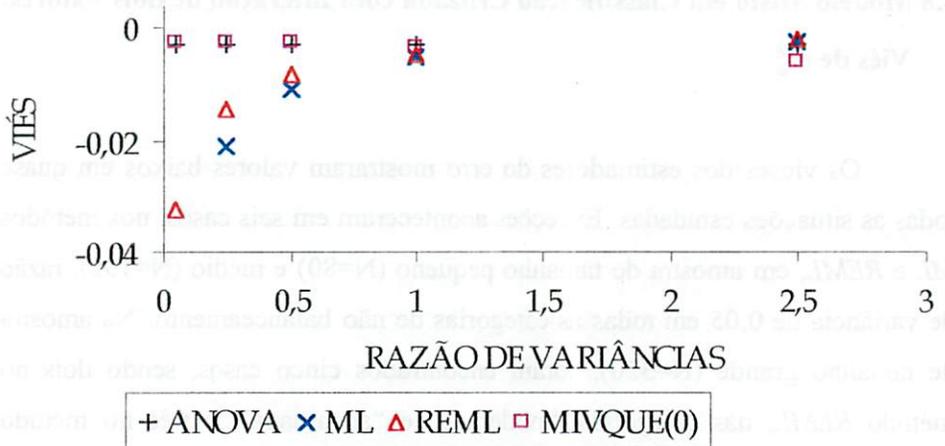


FIGURA 8 – Razão do viés dos estimadores de σ_c^2 com o crescimento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores.

4.9 Modelo Aleatório em Classificação Simples: Erro Quadrático Médio de σ_α^2

A média dos erros quadráticos médios obtidos em 15000 simulações, em cada um dos 4 métodos aplicados em 45 configurações estudadas, estão apresentadas nas Tabelas 11, 12 e 13.

Observa-se, nestas tabelas, que o estimador ML de σ_α^2 apresentou menor EQM em todos os métodos, razões de variâncias, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostra. O EQM de σ_α^2 cresceu com o aumento da razão de variâncias e dos níveis de não balanceamento e decresceu com o tamanho da amostra em todos os métodos. Tal comportamento quanto ao tamanho de

amostra pode ser explicado pelo Teorema Central do Limite, encontrado em Mood et al. (1974).

O estimador *MIVQUE(0)* teve um desempenho satisfatório, sendo, em geral, melhor que o *ANOVA* quando a razão de variâncias foi de 0,05 (mais próximo de zero), mas não superou o *ML* e o *REML*. Tal resultado pode ser explicado em Swallow (1981) e Swallow e Monahan (1984), segundo os quais as estimativas *MIVQUE(0)* só possuem variância mínima quando seus valores *prior*es estão próximos dos valores verdadeiros. No caso, a razão $\sigma_a^2/\sigma_e^2=0,05$ (um valor paramétrico “verdadeiro”, imposto na simulação) foi a mais próxima de seus valores *prior*es $\sigma_a^2=0$ e $\sigma_e^2=1$.

Quando σ_a^2/σ_e^2 foi maior ou igual a 0,25, o *MIVQUE(0)* e o *ANOVA* mostraram-se os piores estimadores de σ_a^2 , principalmente nas mais altas razões de variância e nos níveis de não balanceamento “moderado” e “acentuado”, em todos os tamanhos de amostra.

Foi, portanto, verificado um bom desempenho do estimador *ML* seguido do *REML* e *ANOVA*. O *MIVQUE(0)* foi, em geral, o método menos eficiente quanto ao EQM, fatos estes também constatados em Corbeil e Searle (1976), Seraphin (1984), Swallow e Monahan (1984), Seraphin (1990), Valério Filho (1991) e Fernandez (1998).

TABELA 11 – EQM de σ_a^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_\alpha^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação simples. Amostra de tamanho pequeno (N=100).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0051	0,0042	0,0051	0,0051
	MO	0,0075	0,0054	0,0070	0,0069
	AC	0,0125	0,0091	0,0119	0,0117
0,25	BA	0,0214	0,0197	0,0214	0,0214
	MO	0,0287	0,0261	0,0289	0,0292
	AC	0,0378	0,0343	0,0385	0,0414
0,50	BA	0,0519	0,0480	0,0519	0,0519
	MO	0,0671	0,0628	0,0683	0,0714
	AC	0,0814	0,0767	0,0832	0,0968
1,00	BA	0,1517	0,1402	0,1517	0,1517
	MO	0,1893	0,1736	0,1876	0,2083
	AC	0,2101	0,1931	0,2080	0,2675
2,50	BA	0,7674	0,7090	0,7674	0,7674
	MO	0,9328	0,8015	0,8644	1,0466
	AC	0,9624	0,8270	0,8921	1,2853

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

TABELA 12 – EQM de σ_a^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_\alpha^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação simples. Amostra de tamanho médio (N=200).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0028	0,0025	0,0028	0,0028
	MO	0,0039	0,0033	0,0038	0,0038
	AC	0,0065	0,0049	0,0057	0,0056
0,25	BA	0,0107	0,0103	0,0107	0,0107
	MO	0,0140	0,0135	0,0140	0,0148
	AC	0,0204	0,0193	0,0202	0,0220
0,50	BA	0,0255	0,0246	0,0255	0,0255
	MO	0,0309	0,0298	0,0309	0,0344
	AC	0,0423	0,0410	0,0426	0,0516
1,00	BA	0,0746	0,0717	0,0746	0,0746
	MO	0,0855	0,0807	0,0838	0,0984
	AC	0,1096	0,1026	0,1067	0,1473
2,50	BA	0,3778	0,3629	0,3778	0,3778
	MO	0,4157	0,3815	0,3966	0,4911
	AC	0,5125	0,4401	0,4577	0,7344

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

TABELA 13 – EQM de σ_a^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_\alpha^2$, $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação simples. Amostra de tamanho grande (N=300).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0020	0,0018	0,0020	0,0020
	MO	0,0028	0,0025	0,0027	0,0027
	AC	0,0045	0,0036	0,0040	0,0040
0,25	BA	0,0072	0,0070	0,0072	0,0072
	MO	0,0094	0,0092	0,0095	0,0100
	AC	0,0138	0,0133	0,0137	0,0154
0,50	BA	0,0170	0,0165	0,0170	0,0170
	MO	0,0207	0,0202	0,0207	0,0229
	AC	0,0278	0,0272	0,0279	0,0357
1,00	BA	0,0493	0,0480	0,0493	0,0493
	MO	0,0572	0,0547	0,0561	0,0653
	AC	0,0717	0,0674	0,0692	0,1024
2,50	BA	0,2481	0,2417	0,2481	0,2481
	MO	0,2779	0,2590	0,2658	0,3250
	AC	0,3347	0,2892	0,2971	0,5123

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

A Figura 9 ilustra o comportamento do EQM do estimador de σ_a^2 com amostra de tamanho pequeno (N=100) e grau de não balanceamento “acentuado”. Foi percebido, à medida que crescia a razão de variâncias, um aumento gradual da discrepância entre os métodos quanto ao EQM de σ_a^2 , sendo o MIVQUE(0) mais sensível ao aumento deste componente de variância.

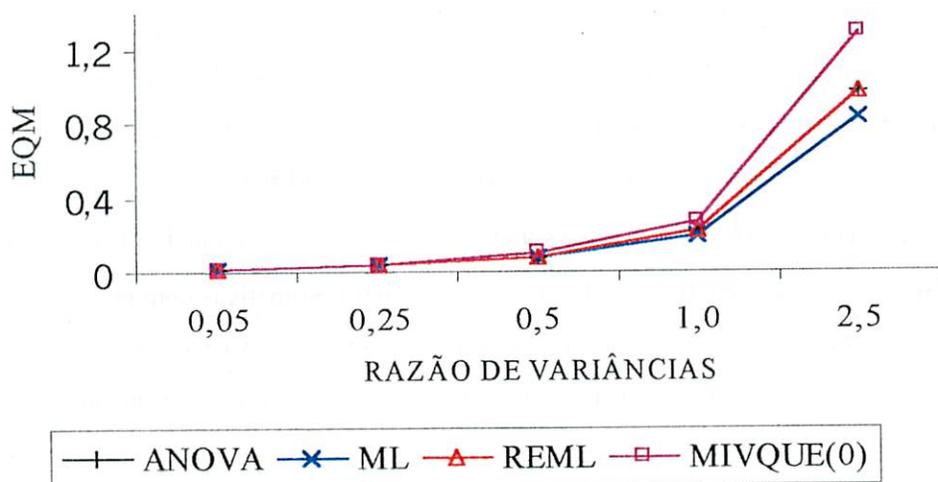


FIGURA 9 – Relação do EQM dos estimadores de σ_a^2 com o crescimento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=100$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação simples.

4.10 Modelo Aleatório em Classificação Simples: Erro Quadrático Médio de σ_c^2

O EQM de σ_c^2 cresceu com o aumento da razão de variâncias e dos níveis de não balanceamento e decresceu com o tamanho da amostra em todos os métodos estudados. No entanto, em geral, o componente de variância do erro foi o menos influenciado. Tal fato foi devido, provavelmente, ao seu número de graus de liberdade elevado em relação aos outros componentes.

Quando σ_a^2/σ_c^2 foi maior ou igual a 0,25, o *MIVQUE(0)* e o *ANOVA* mostraram-se os piores estimadores de σ_c^2 , principalmente nas mais altas razões

de variância e nos níveis de não balanceamento “moderado” e “acentuado”, em todos os tamanhos de amostra.

A Figura 10 ilustra o comportamento do EQM do estimador de σ_e^2 , em amostra de tamanho pequeno ($N=100$) e grau de não balanceamento “acentuado”. Esta Figura mostra com grande evidência o comportamento diferenciado do $MIVQUE(0)$ na estimação de EQM de σ_e^2 , a partir da relação de variâncias maior que 0,25. O $MIVQUE(0)$ produziu estimativas com maior EQM em todos os tamanhos de amostras, nas maiores razões de variâncias e em todos os níveis de não balanceamento, sendo o método menos adequado quanto a este critério nestas situações.

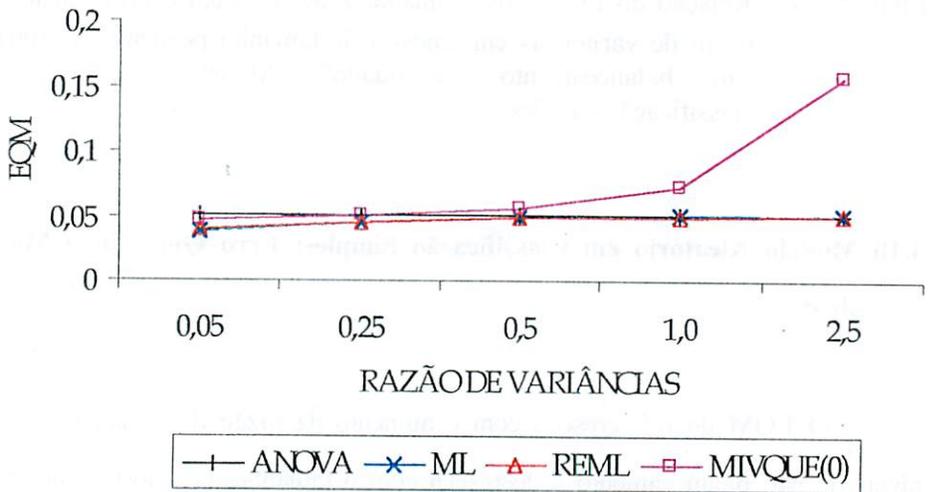


FIGURA 10 – Relação do EQM dos estimadores de σ_e^2 com o crescimento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=100$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação simples.

4.11 Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios: Erro Quadrático Médio de σ_{α}^2

Os erros quadráticos médios obtidos nas simulações podem ser vistos nas Tabelas 14, 15 e 16, relacionadas às amostras de tamanho pequeno ($N=80$), médio ($N=192$) e grande ($N=320$), respectivamente.

Os estimadores *ANOVA*, *ML*, *REML* e *MIVQUE(0)* de σ_{α}^2 , σ_{β}^2 e σ_{ϵ}^2 apresentaram maior EQM com o aumento da razão de variâncias em todos os tamanhos de amostra. O EQM cresceu com o aumento do nível de não balanceamento em todos os métodos, razões de variâncias em amostras de tamanhos pequenos e grandes.

Observa-se, em todas as tabelas, que o estimador *ML* de σ_{α}^2 teve menor EQM em todos os métodos, razões de variâncias, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostra.

Na Tabela 14, o estimador *ML* de σ_{α}^2 foi o de melhor desempenho em todas as razões de variância, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostra. Verificou-se um desempenho satisfatório do estimador *REML*, seguido do *MIVQUE(0)*. O pior resultado foi obtido pelo estimador *ANOVA* que produziu estimativas com maior EQM em todas as situações descritas acima. Na Tabela 15, o estimador *MIVQUE(0)* produziu maiores valores de EQM, uma vez que foram um pouco superiores aos obtidos pelo *ANOVA* em todas as situações. Tal resultado é mais evidente na Tabela 16, na qual o *MIVQUE(0)* teve a pior performance.

TABELA 14 - EQM σ_{α}^2 e σ_{β}^2 segundo diferentes razões de variâncias ($\sigma_a^2/\sigma_c^2, \sigma_a^2 = \sigma_{\alpha}^2 = \sigma_{\beta}^2$ e $\sigma_c^2 = 1$) níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios. Amostra de tamanho pequeno (N=80).

σ_a^2/σ_c^2	NB(*)	σ_{α}^2				σ_{β}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0130	0,0034	0,0128	0,0130	0,0060	0,0041	0,0051	0,0060
	MO	0,0161	0,0039	0,0157	0,0161	0,0084	0,0056	0,0071	0,0086
	AC	0,0198	0,0044	0,0193	0,0197	0,0143	0,0089	0,0120	0,0142
0,25	BA	0,1998	0,0644	0,1997	0,1998	0,0342	0,0289	0,0316	0,0342
	MO	0,2159	0,0668	0,2136	0,2153	0,0413	0,0346	0,0380	0,0441
	AC	0,2361	0,0702	0,2311	0,2337	0,0565	0,0475	0,0534	0,0714
0,50	BA	0,7451	0,2475	0,7451	0,7451	0,0966	0,0830	0,0899	0,0966
	MO	0,7849	0,2519	0,7750	0,7826	0,1099	0,0940	0,1018	0,1203
	AC	0,8427	0,2610	0,8047	0,8329	0,1441	0,1231	0,1337	0,2005
1,00	BA	2,8756	0,9691	2,8756	2,8756	0,3140	0,2713	0,2930	0,3140
	MO	2,9850	0,9774	2,9439	2,9766	0,3410	0,2920	0,3149	0,3804
	AC	3,1770	1,0029	3,0371	3,1370	0,4281	0,3520	0,3803	0,6436
2,50	BA	17,5888	5,9788	17,5888	17,5888	1,7154	1,4882	1,6050	1,7154
	MO	18,0768	6,0055	17,7789	18,0272	1,7946	1,5478	1,6538	2,0303
	AC	19,1501	6,0803	18,0322	18,8959	2,1703	1,6742	1,8051	3,4580

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

TABELA 15 - EQM σ_{α}^2 e σ_{β}^2 segundo diferentes razões de variâncias ($\sigma_a^2/\sigma_e^2, \sigma_a^2 = \sigma_{\alpha}^2 = \sigma_{\beta}^2$ e $\sigma_e^2 = 1$) níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios. Amostra de tamanho médio (N=192).

σ_a^2/σ_e^2 NB(*)	σ_{α}^2				σ_{β}^2			
	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05 BA	0,0052	0,0025	0,0052	0,0052	0,0025	0,0023	0,0024	0,0025
MO	0,0054	0,0025	0,0053	0,0054	0,0038	0,0033	0,0035	0,0039
AC	0,0072	0,0031	0,0070	0,0073	0,0068	0,0052	0,0058	0,0065
0,25 BA	0,0922	0,0481	0,0922	0,0922	0,0133	0,0128	0,0130	0,0133
MO	0,0883	0,0469	0,0880	0,0884	0,0176	0,0168	0,0172	0,0199
AC	0,1033	0,0519	0,1002	0,1054	0,0264	0,0253	0,0260	0,0351
0,50 BA	0,3504	0,1844	0,3504	0,3504	0,0365	0,0351	0,0357	0,0365
MO	0,3329	0,1785	0,3311	0,3332	0,0447	0,0426	0,0434	0,0528
AC	0,3816	0,1930	0,3656	0,3890	0,0633	0,0601	0,0612	0,0978
1,00 BA	1,3639	0,7209	1,3639	1,3639	0,1172	0,1132	0,1150	0,1172
MO	1,2924	0,6959	1,2840	1,2933	0,1362	0,1290	0,1310	0,1658
AC	1,4660	0,7429	1,3931	1,4935	0,1842	0,1666	0,1692	0,3145
2,50 BA	8,3741	4,4387	8,3741	8,3741	0,6355	0,6152	0,6243	0,6355
MO	7,9378	4,2858	7,8731	7,9424	0,7112	0,6705	0,6782	0,8838
AC	8,9481	4,5300	8,4335	9,1094	0,9368	0,7951	0,8030	1,7029

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

TABELA 16 - EQM σ_{α}^2 e σ_{β}^2 segundo diferentes razões de variâncias ($\sigma_a^2/\sigma_c^2, \sigma_a^2 = \sigma_{\alpha}^2 = \sigma_{\beta}^2$ e $\sigma_c^2 = 1$) níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios. Amostra de tamanho grande (N=320).

σ_a^2/σ_c^2 NB(*)	σ_{α}^2				σ_{β}^2			
	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05 BA	0,0029	0,0018	0,0029	0,0029	0,0016	0,0015	0,0015	0,0016
MO	0,0031	0,0019	0,0031	0,0032	0,0022	0,0021	0,0021	0,0022
AC	0,0039	0,0023	0,0039	0,0040	0,0035	0,0030	0,0031	0,0035
0,25 BA	0,0549	0,0356	0,0549	0,0549	0,0080	0,0079	0,0079	0,0080
MO	0,0564	0,0366	0,0563	0,0568	0,0095	0,0094	0,0094	0,0105
AC	0,0612	0,0387	0,0601	0,0637	0,0145	0,0142	0,0144	0,0188
0,50 BA	0,2103	0,1371	0,2103	0,2103	0,0221	0,0218	0,0220	0,0221
MO	0,2156	0,1399	0,2145	0,2171	0,0243	0,0238	0,0239	0,0280
AC	0,2285	0,1446	0,2222	0,2383	0,0351	0,0339	0,0342	0,0515
1,00 BA	0,8221	0,5369	0,8221	0,8221	0,0716	0,0708	0,0711	0,0716
MO	0,8427	0,5470	0,8371	0,8488	0,0752	0,0729	0,0733	0,0887
AC	0,8819	0,5559	0,8509	0,9208	0,1041	0,0959	0,0965	0,1642
2,50 BA	5,0636	3,3113	5,0636	5,0636	0,3900	0,3858	0,3875	0,3900
MO	5,1977	3,3716	5,1559	5,2360	0,3984	0,3830	0,3848	0,4777
AC	5,3967	3,3906	5,1743	5,6382	0,5341	0,4662	0,4666	0,8829

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

A Figura 11 apresenta a evolução do EQM do estimador de σ_{α}^2 , em amostra de tamanho pequeno (N=80) e grau de não balanceamento “acentuado”, com o crescimento da razão de variâncias.

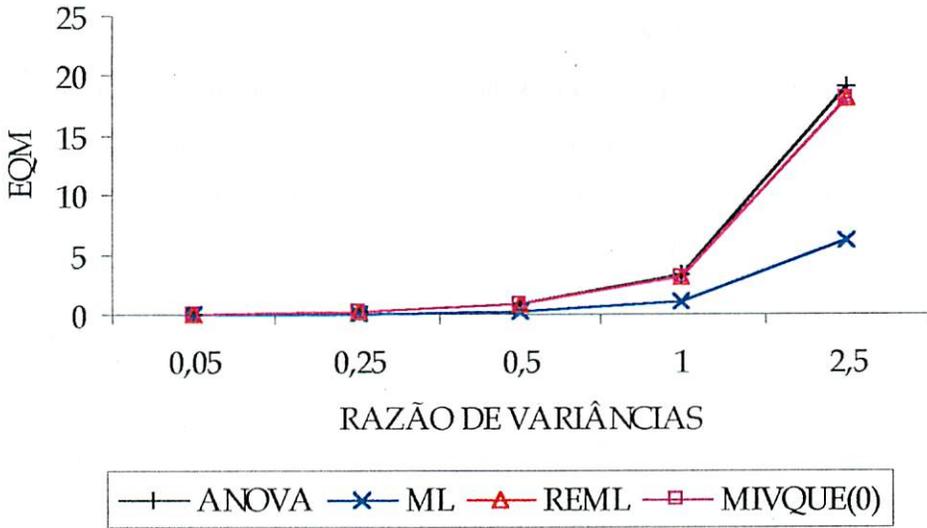


FIGURA 11 – Relação do EQM dos estimadores de σ_{α}^2 com o aumento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios.

Percebe-se, na Figura 11, uma distinção do comportamento do estimador *ML* de σ_{α}^2 , em relação aos demais métodos, que cresce com a razão de variâncias. Ao contrário do *ML*, o estimador *ANOVA* foi o menos eficiente, seguido do *REML* e *MIVQUE(0)*, que produziram valores muito próximos.

4.12 Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios: Erro Quadrático Médio de σ_{β}^2

A Tabela 14 mostra que estimador *ML* de σ_{β}^2 foi o de melhor desempenho em todas as razões de variâncias, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostra. O estimador *REML*, seguido do *ANOVA*, ficou na segunda

posição, e o pior resultado foi obtido pelo $MIVQUE(0)$, que produziu maiores valores de EQM em todas as situações.

A Figura 12 apresenta a evolução do EQM do estimador σ_{β}^2 no tamanho de amostra pequeno ($N=80$) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. Há uma distinção do $MIVQUE(0)$ em relação aos outros métodos. O método ML , seguido do $REML$, foi o mais eficiente.

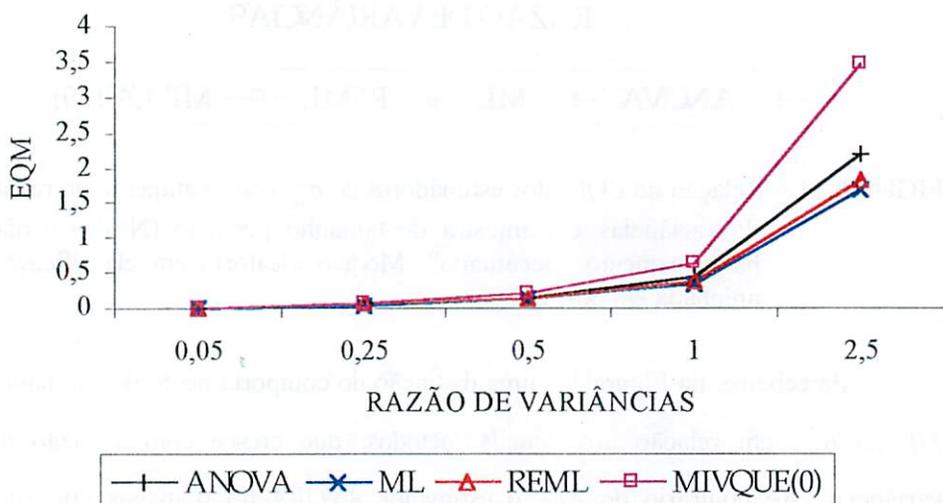


FIGURA 12 – Relação do EQM dos estimadores de σ_{β}^2 com o aumento da razão de variâncias na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios.

4.13 Modelo Aleatório em Classificação Aninhada em Dois Estágios: Erro Quadrático Médio de σ_c^2

O EQM dos estimadores de σ_c^2 segue o mesmo padrão encontrado nos outros componentes de variância, ou seja, são maiores com o aumento da razão de variâncias e do nível de não balanceamento, em todos os tamanhos de amostra.

Considerando todas as razões de variâncias, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostras, foi verificado um melhor desempenho do estimador *ML*. O estimadores *REML* e *ANOVA* são, respectivamente, outras melhores opções. O método *MIVQUE(0)* constituiu o pior método, uma vez que produziu valores discrepantes, principalmente nas maiores razões de variâncias. Este método proporcionou valores aceitáveis somente na menor razão de variâncias.

A Figura 13 apresenta a evolução do EQM do estimador de σ_c^2 na amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. Os valores do EQM de σ_c^2 indicam, com clara evidência, uma discrepância entre o estimador *MIVQUE(0)* e os outros estimadores que cresce com a razão de variâncias.

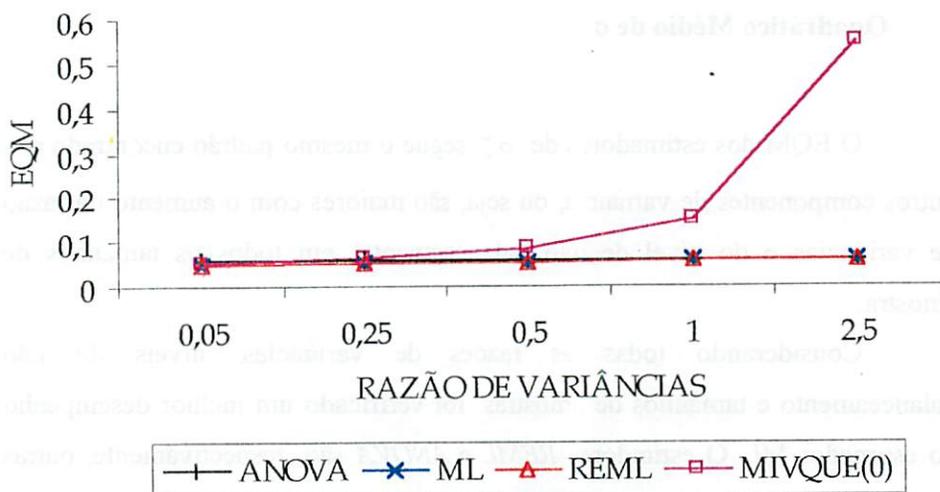


FIGURA 13 – Relação do EQM dos estimadores de σ_c^2 com o aumento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios.

4.14 Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de Dois

Fatores: Erro Quadrático Médio de σ_β^2

Os valores do EQM obtidos das simulações, em cada uma das 180 situações estudadas, estão apresentados nas Tabelas 17, 18 e 19, referentes ao componentes de variância do fator principal e interação, σ_β^2 e σ_γ^2 . O EQM de σ_β^2 , σ_γ^2 e σ_c^2 cresceu com o aumento da razão de variâncias e dos níveis de não balanceamento e decresceu com o tamanho da amostra em todos os métodos estudados.

Nota-se, pelas Tabelas 17, 18 e 19, que o estimador *ML* foi o mais eficiente, uma vez que produziu menores valores de EQM em todas as razões de

variâncias, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostras considerados. O estimador *REML* veio posteriormente como a segunda melhor opção e, logo em seguida, o *ANOVA*. O método *MIVQUE(0)* constituiu o pior método quanto ao EQM, uma vez que seus valores foram razoáveis apenas na menor razão entre variâncias, quando são equiparáveis ao *ANOVA*. À medida que o tamanho da amostra e/ou a razão de variâncias aumentou, tornou-se mais evidente a discrepância entre o *MIVQUE(0)* e os outros estimadores.

TABELA 17 – EQM de σ_{β}^2 e σ_{γ}^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_e^2 , $\sigma_a^2 = \sigma_{\beta}^2 = \sigma_{\gamma}^2$ e $\sigma_e^2 = 1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores. Amostra de tamanho pequeno (N=80).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	σ_{β}^2				σ_{γ}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0086	0,0045	0,0075	0,0086	0,0119	0,0035	0,0063	0,0119
	MO	0,0113	0,0055	0,0094	0,0114	0,0170	0,0043	0,0084	0,0173
	AC	0,0180	0,0082	0,0152	0,0189	0,0301	0,0058	0,0133	0,0288
0,25	BA	0,0916	0,0583	0,0907	0,0916	0,0685	0,0374	0,0499	0,0685
	MO	0,1006	0,0623	0,0981	0,1033	0,0798	0,0417	0,0559	0,0842
	AC	0,1284	0,0754	0,1205	0,1530	0,1081	0,0522	0,0763	0,1318
0,50	BA	0,3200	0,2076	0,3193	0,3200	0,1983	0,1173	0,1517	0,1983
	MO	0,3380	0,2150	0,3335	0,3481	0,2178	0,1271	0,1628	0,2335
	AC	0,4149	0,2443	0,3812	0,5076	0,2757	0,1569	0,2103	0,3698
1,00	BA	1,1916	0,7796	1,1911	1,1916	0,6511	0,3960	0,5102	0,6511
	MO	1,2304	0,7911	1,2164	1,2691	0,6833	0,4161	0,5249	0,7429
	AC	1,4848	0,8640	1,3311	1,8414	0,8298	0,4943	0,6513	1,1969
2,50	BA	7,1222	4,6832	7,1220	7,1222	3,5538	2,1888	2,8252	3,5538
	MO	7,2463	4,7018	7,1760	7,4804	3,5963	2,2330	2,8637	3,9539
	AC	8,6760	4,9838	7,6135	10,8475	4,2364	2,4822	3,2671	6,4849

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

TABELA 18 – EQM de σ_{β}^2 e σ_{γ}^2 segundo diferentes razões de variâncias (σ_a^2/σ_c^2 , $\sigma_a^2=\sigma_{\beta}^2=\sigma_{\gamma}^2$ e $\sigma_c^2=1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores. Amostra de tamanho médio (N=192).

σ_a^2/σ_c^2	NB(*)	σ_{β}^2				σ_{γ}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0031	0,0022	0,0030	0,0031	0,0036	0,0021	0,0030	0,0036
	MO	0,0040	0,0028	0,0038	0,0041	0,0053	0,0027	0,0042	0,0053
	AC	0,0066	0,0043	0,0063	0,0071	0,0107	0,0038	0,0070	0,0102
0,25	BA	0,0398	0,0313	0,0398	0,0398	0,0198	0,0168	0,0189	0,0198
	MO	0,0451	0,0343	0,0440	0,0482	0,0253	0,0212	0,0240	0,0274
	AC	0,0602	0,0446	0,0580	0,0761	0,1040	0,0315	0,0380	0,0527
0,50	BA	0,1431	0,1132	0,1431	0,1431	0,0545	0,0469	0,0525	0,0545
	MO	0,1573	0,1195	0,1524	0,1695	0,0652	0,0560	0,0624	0,0733
	AC	0,2017	0,1444	0,1848	0,2644	0,0421	0,0829	0,0947	0,1460
1,00	BA	0,5410	0,4293	0,5410	0,5410	0,1746	0,1511	0,1692	0,1746
	MO	0,5846	0,4437	0,5640	0,6332	0,1996	0,1705	0,1907	0,2296
	AC	0,7312	0,5046	0,6431	0,9799	0,3021	0,2365	0,2746	0,4648
2,50	BA	3,2647	2,5961	3,2647	3,2647	0,9415	0,8175	0,9151	0,9415
	MO	3,4921	2,6550	3,3674	3,7927	1,0453	0,8981	1,0117	1,2235
	AC	4,2885	2,8822	3,6724	5,8389	1,5153	1,1287	1,3511	2,4850

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

TABELA 19 – EQM de σ_{β}^2 e σ_{γ}^2 segundo diferentes razões de variâncias ($\sigma_a^2/\sigma_e^2, \sigma_a^2=\sigma_{\beta}^2=\sigma_{\gamma}^2$ e $\sigma_e^2=1$), níveis de não balanceamento (NB) e métodos de estimação. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores. Amostra de tamanho grande (N=320).

σ_a^2/σ_e^2	NB(*)	σ_{β}^2				σ_{γ}^2			
		ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)	ANOVA	ML	REML	MIVQUE(0)
0,05	BA	0,0018	0,0015	0,0018	0,0018	0,0020	0,0015	0,0019	0,0020
	MO	0,0022	0,0018	0,0022	0,0022	0,0028	0,0019	0,0025	0,0028
	AC	0,0033	0,0024	0,0031	0,0034	0,0052	0,0026	0,0040	0,0049
0,25	BA	0,0256	0,0214	0,0256	0,0256	0,0104	0,0098	0,0103	0,0104
	MO	0,0279	0,0231	0,0277	0,0281	0,0131	0,0122	0,0128	0,0145
	AC	0,0348	0,0279	0,0338	0,0369	0,0207	0,0187	0,0200	0,0269
0,50	BA	0,0932	0,0782	0,0932	0,0932	0,0289	0,0271	0,0287	0,0289
	MO	0,0998	0,0827	0,0988	0,1004	0,0334	0,0311	0,0328	0,0387
	AC	0,1197	0,0943	0,1137	0,1277	0,0491	0,0451	0,0476	0,0737
1,00	BA	0,3551	0,2984	0,3551	0,3551	0,0934	0,0880	0,0929	0,0934
	MO	0,3762	0,3115	0,3714	0,3787	0,1022	0,0945	0,1000	0,1215
	AC	0,4412	0,3421	0,4119	0,4716	0,1425	0,1261	0,1340	0,2340
2,50	BA	2,1562	1,8136	2,1562	2,1562	0,5083	0,4797	0,5063	0,5083
	MO	2,2673	1,8757	2,2355	2,2833	0,5344	0,4913	0,5209	0,6474
	AC	2,6212	2,0099	2,4237	2,8050	0,7187	0,6139	0,6678	1,2534

(*)BA:Balanceado, MO:Não Balanceamento Moderado e AC:Não Balanceamento Acentuado

A Figura 14 ilustra a relação do EQM do estimador de σ_{β}^2 na amostra de tamanho pequeno (N=80) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. O estimador *ML* teve a melhor performance, seguido posteriormente pelos métodos *REML*, *ANOVA* e *MIVQUE(0)*. Notou-se que o EQM dos métodos aumentavam com a razão de variâncias, sendo o

MIVQUE(0) o mais sensível a esse aumento, produzindo maiores valores de EQM.

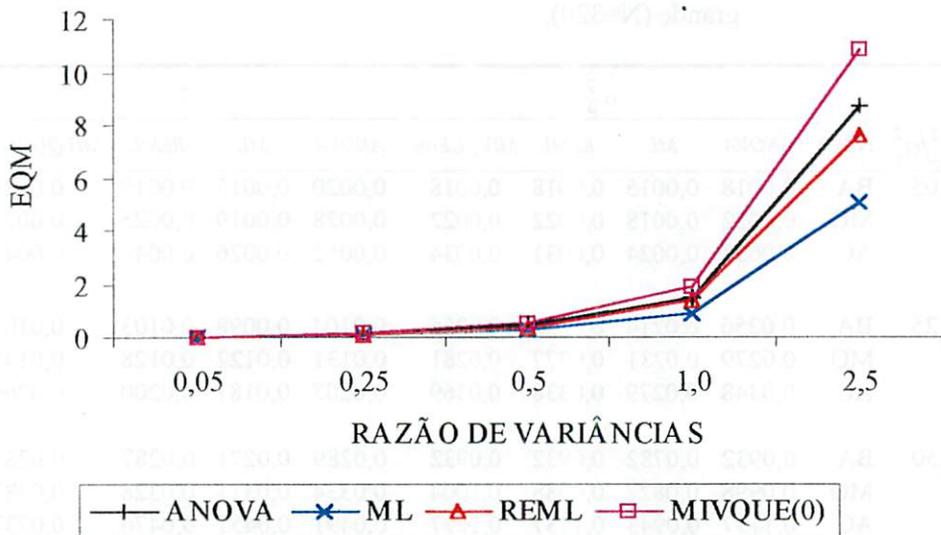


FIGURA 14 – Relação do EQM dos estimadores de σ_{β}^2 com o aumento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores.

4.15 Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de dois

Fatores: Erro Quadrático Médio de σ_{γ}^2

Semelhante ao estimador de σ_{β}^2 , o estimador *ML* do componente de variância da interação, σ_{γ}^2 , produziu menores valores de EQM em todas as razões de variâncias, níveis de não balanceamento e tamanhos de amostras considerados. O *REML* foi o segundo melhor, seguido do *ANOVA*. Novamente,

o *MIVQUE(0)* foi o pior método dentre os considerados, ficando mais ineficiente à medida que a razão de variâncias e níveis de não balanceamento aumentavam.

A Figura 15 ilustra a relação do EQM dos estimador de σ_{γ}^2 no tamanho de amostra pequeno ($N=80$) e grau de não balanceamento “acentuado” com o crescimento da razão de variâncias. Verificou-se uma mesma ordem entre os métodos de estimação quanto ao grau de eficiência dos estimadores de σ_{β}^2 e σ_{γ}^2 (Figuras 14 e 15). O estimador *ML* teve a melhor performance, seguido posteriormente pelos métodos *REML*, *ANOVA* e *MIVQUE(0)*. O EQM dos métodos aumentaram com a razão de variâncias, sendo, novamente, o *MIVQUE(0)* o mais sensível a esse aumento.

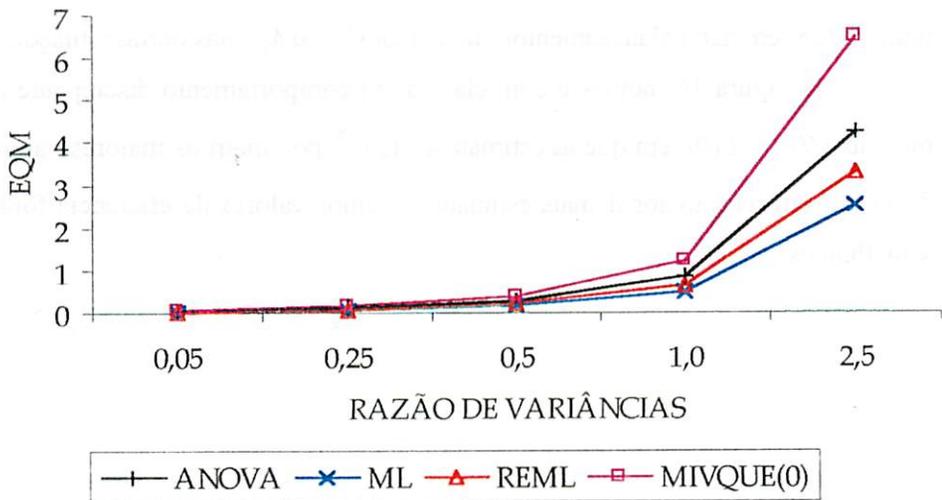


FIGURA 15 – Relação do EQM dos estimadores de σ_{γ}^2 com o aumento da razão de variâncias em tamanho de amostra pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores.

4.16 Modelo Misto em Classificação Cruzada com Interação de dois Fatores: Erro Quadrático Médio de σ_c^2

Foi verificada, em geral, uma equivalência entre os estimadores *ML* e *REML*. Em amostras de tamanhos pequeno ($N=80$) e médio ($N=192$), os menores valores foram produzidos em razões de variâncias de 0,05 e 0,25, pelo método *ML*, e nas razões de 0,5; 1,0 e 2,5 pelo método *REML*. O estimador *ANOVA* obteve valores próximos ao *ML* e *REML* e o estimador *MIVQUE(0)* foi o menos eficiente, gerando os maiores valores de EQM. No entanto, no maior tamanho de amostra ($N=320$), o método *ML* compartilhou sua superioridade com o *ANOVA*, que foi praticamente invariante ao aumento da razão de variâncias.

O método *ANOVA* foi mais eficiente nas razões de variâncias maiores ou iguais a 0,5, em não balanceamentos “moderados”, e o *ML* nas outras situações.

Na Figura 16, notou-se com clareza um comportamento discrepante do método *MIVQUE(0)*, em que as estimativas de σ_c^2 possuíam os maiores valores de EQM em relação aos demais estimadores, cujos valores de eficiência foram semelhantes.

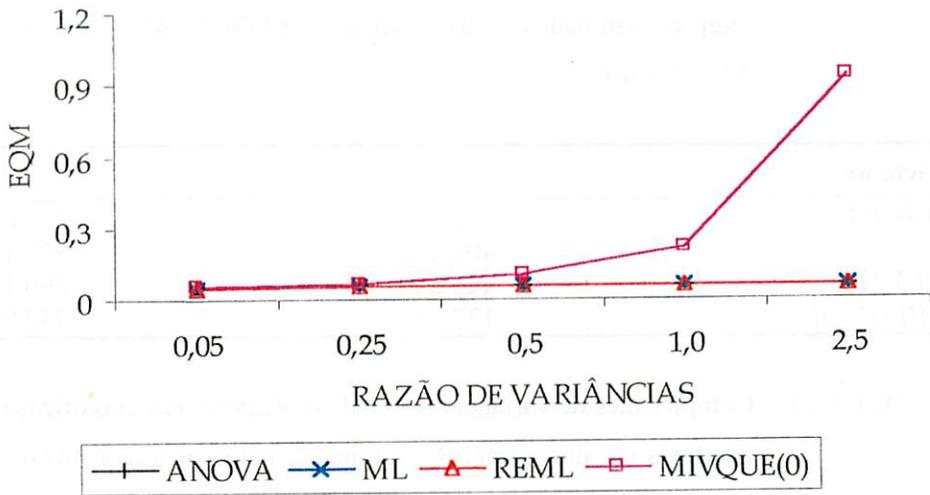


FIGURA 16 – Relação do EQM dos estimadores de σ_e^2 com o aumento da razão de variâncias em amostra de tamanho pequeno ($N=80$) e não balanceamento “acentuado”. Modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores.

TABELA 20 – Componentes de variância do modelo aleatório em classificação simples estimados pelos métodos *ANOVA*, *ML*, *REML* e *MIVQUE(0)*.

Métodos	$\hat{\sigma}_{\alpha}^2$	$\hat{\sigma}_e^2$
<i>ANOVA</i>	265,60	590,03
<i>ML</i>	409,23	590,11
<i>REML</i>	416,36	590,11
<i>MIVQUE(0)</i>	137,58	712,75

TABELA 21 – Componentes de variância do modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios, estimados pelos métodos *ANOVA*, *ML*, *REML* e *MIVQUE(0)*.

Métodos	$\hat{\sigma}_{\alpha}^2$	$\hat{\sigma}_{\beta}^2$	$\hat{\sigma}_e^2$
<i>ANOVA</i>	265,36	132,41	457,86
<i>ML</i>	224,68	158,55	440,32
<i>REML</i>	228,26	158,53	440,32
<i>MIVQUE(0)</i>	175,35	212,17	500,82

TABELA 22 – Componentes de variância do modelo misto em classificação cruzada com interação de dois fatores estimado pelos métodos *ANOVA*, *ML*, *REML* e *MIVQUE(0)*.

Métodos	$\hat{\sigma}_{\beta}^2$	$\hat{\sigma}_{\gamma}^2$	$\hat{\sigma}_e^2$
<i>ANOVA</i>	341,66	44,16	439,56
<i>ML</i>	362,45	62,09	440,27
<i>REML</i>	367,50	65,42	440,22
<i>MIVQUE(0)</i>	158,17	179,01	484,97

Observa-se, na Tabela 20, que o método *MIVQUE(0)* e o *ANOVA* produziram estimativas de σ_{α}^2 inferiores às produzidas pelos métodos *ML* e

REML, que, por sua vez, foram bem próximas. Evidenciou-se uma semelhança entre os métodos *ML*, *REML* e *ANOVA*, quando se observaram as estimativas de σ_c^2 , e um comportamento diferenciado do *MIVQUE(0)*, que produziu uma alta estimativa do componente de variância residual. Este mesmo tipo de comportamento foi observado quando se aplicou o modelo aleatório em classificação simples numa amostra maior de 9633 registros de peso à desmama dos bovinos. Os métodos *ML*, *REML* e o Bayesiano (incluído no estudo) apresentaram estimativas de σ_α^2 bastante próximas, com valores 341,35; 342,69 e 341,54, respectivamente, enquanto os métodos *MIVQUE(0)* e *ANOVA* estimaram σ_α^2 , obtendo estimativas iguais a 127,95 e 222,45. As estimativas de σ_c^2 foram muito próximas em todos os métodos, com exceção do *MIVQUE(0)*, que persistiu com valores altos para suas estimativas. Os valores encontrados foram 609,30; 609,29; 608,78; 608,81 e 702,40 nos métodos *ML*, *REML*, *ANOVA*, Bayesiano e *MIVQUE(0)*, respectivamente. Estes resultados sugerem que os métodos *ML* e *REML* têm resultados muito próximos e que o Bayesiano é um caminho promissor.

As Tabelas 21 e 22 mostram o mesmo tipo de comportamento em quase todas as estimativas σ_α^2 , σ_β^2 e σ_γ^2 , ou seja, os métodos *ML* e *REML* com valores bem próximos, o *ANOVA* e o *MIVQUE(0)* com valores inconsistentes em relação aos outros métodos. As estimativas de σ_c^2 foram regulares e consistentes nos métodos, com exceção do *MIVQUE(0)*, que mais uma vez produziu um valor discrepante.

O valor discrepante do *MIVQUE(0)* verificado nas Tabelas 20, 21 e 22 pode ser devido à herdabilidade atribuída a essa característica, uma vez que, na simulação, a deficiência do *MIVQUE(0)* (avaliado pelo EQM) aumentou com a

razão de variâncias, que, por sua vez, é diretamente proporcional à herdabilidade.

4.18 Ilustração do Método Bayesiano Através do SAS

Os dados deste exemplo foram extraídos de Littell et al. (1996, p.573) e estão disponíveis na Tabela 23. Referem-se a um exemplo em Melhoramento Animal, em que cinco reprodutores (tous) são aleatoriamente retirados de uma população e cada reprodutor é acasalado com duas matrizes (vacas). Aplicou-se um modelo aleatório aninhado em dois estágios (balanceado e não balanceado), a partir do primeiro conjunto. O não balanceamento foi realizado através da eliminação de algumas observações do conjunto balanceado. O ganho de peso médio diário (GPMD) de cada progênie (bezerro) foi avaliado. O modelo deste experimento, exposto na seção 6.2, p.230 do trabalho citado, é:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_{ij} + \epsilon_{ijk}$$

em que

y_{ijk} é o GMPD da k -ésima progênie da j -ésima matriz aninhada com o i -ésimo reprodutor;

μ é uma constante;

α_i é o efeito do i -ésimo reprodutor, $\alpha_i \sim N(0, \sigma_\alpha^2)$;

β_{ij} é o efeito da j -ésima matriz acasalada com o i -ésimo touro, $\beta_{ij} \sim N(0, \sigma_\beta^2)$;

ϵ_{ijk} é o erro, $\epsilon_{ijk} \sim N(0, \sigma_\epsilon^2)$.

Littell et al. (1996) comentaram que o objetivo de um modelo desta natureza é estimar a variância associada aos efeitos aleatórios (por exemplo,

reprodutor e matriz). Na área de melhoramento animal, os pesquisadores desejam verificar se uma característica pode ser herdada e, se assim o for, quanto é herança paterna ou materna. Os componentes de variância são então estimados para calcular as herdabilidades e também, se houver interesse, identificar animais superiores com potencial para fins de melhoria do rebanho. Silva (1982) define a estimação dos componentes de variância como um ajuste de covariâncias fenotípicas ou observáveis para efeitos como idades dos animais, tipos de manejo, estações do ano e outros fatores que possam induzir erros na estimação dos parâmetros genéticos.

TABELA 23 – Dados balanceados e não balanceados para um modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios.

	Matriz	Reprodutor									
		1		2		3		4		5	
Balanceado	1	2,24	1,85	1,99	1,93	2,33	2,68	2,42	2,01	2,82	2,64
	2	2,05	2,41	2,72	2,32	2,69	2,71	1,86	1,79	2,58	2,56
Não balanceado	1	–	–	1,99	–	2,33	2,68	2,42	2,01	2,82	–
	2	2,05	2,41	2,72	2,32	2,69	–	1,86	1,79	2,56	–

Através do procedimento SAS/MIXED pela declaração *PRIOR*, em que se escolheu uma *priori* de Jeffreys e o algoritmo *Independence Chain (IC)* para geração da amostra aleatória *a posteriori* de uma Gama-Invertida (GI) de tamanho 10000, obtiveram-se os coeficientes da matriz de transformação e os parâmetros *a* e *b* correspondentes as suas distribuições *posteriores*. Os resultados estão resumidos na Tabela 24.

TABELA 24 – Coeficientes da matriz de transformação e parâmetros da densidade Gama Invertida usados no algoritmo *Independence Chain (IC)* em dados do modelo aleatório em classificação aninhada em dois estágios.

Dados	Parâmetro	σ_α^2	σ_β^2	σ_e^2	a	b
Balanceado	τ_1	4	2	1	2,0	0,6358
	τ_2	0	2	1	2,5	0,2818
	τ_3	0	0	1	5,0	0,1935
Não balanceado	τ_1	2,8961	1,6883	1	2,0550	0,4808
	τ_2	0	1,6811	1	1,9003	0,1903
	τ_3	0	0	1	2,5159	0,1463

A *priori* de Jeffreys para os componentes de variância é, então, proporcional a $(4\sigma_\alpha^2 + 2\sigma_\beta^2 + \sigma_e^2)^{-1}(2\sigma_\beta^2 + \sigma_e^2)^{-1}(\sigma_e^2)^{-1}$. Como relatam Wolfinger e Kass (2000), o algoritmo *Independence Chain* promove uma simulação precisa da *posteriori* quando os números inteiros são obtidos para os coeficientes e valores dos parâmetros a_i . Isto acontece com os dados balanceados do presente exemplo, uma vez que os coeficientes da matriz de transformação e a_i , $i = 1, 2$ e 3 , são inteiros e coincidem com os coeficientes da *priori* de Jeffreys (Tabela 24). Por outro lado, o mesmo não ocorreu com os dados não balanceados em que os coeficientes da matriz de transformação são, em geral, menores e fracionários.

As amostras de tamanho 10000 reúnem observações da distribuição *posteriori* conjunta de σ_α^2 , σ_β^2 e σ_e^2 dos experimentos balanceados e não balanceados, podendo incluir, se desejado for, os efeitos fixos e aleatórios paramétricos. A amostra de tamanho $N=10000$ é escolhida de tal forma que a média da distribuição *a posteriori* seja estimada com um desvio padrão igual a 1/100 daquele do parâmetro a ser estimado, permitindo uma acurácia de duas casas decimais. Para os dados balanceados, o algoritmo aceitou 79% das

propostas, com rejeições atribuídas à violação do limite inferior zero imposto aos três componentes de variância; nos dados não balanceados, essa porcentagem decresceu para 50%.

Em seguida, através do procedimento *KDE* (*Kernel Density Estimate*) do SAS, obtiveram-se valores médios, medianos, modais e os limites superior e inferior dos intervalos de credibilidade, a 95%, dos componentes de variância que estão apresentados na Tabela 25, juntamente com as estimativas *REML*.

TABELA 25 – Estimativas *REML* e provenientes da amostra *a posteriori* dos componentes de variância através do SAS/MIXED.

Dados	Param.	<i>REML</i>	Média	Mediana	Moda	LI ^(*)	LS ^(*)
Balanceado	σ_{α}^2	0,0513	0,1425	0,0705	0,0346	0,0048	0,6968
	σ_{β}^2	0,0370	0,0523	0,0388	0,0228	0,0030	0,1824
	σ_{ϵ}^2	0,0387	0,0443	0,0393	0,0324	0,0188	0,0977
Não balanc.	σ_{α}^2	0,0424	0,1414	0,0650	0,0301	0,0032	0,7267
	σ_{β}^2	0,0228	0,0568	0,0366	0,0164	0,0018	0,2278
	σ_{ϵ}^2	0,0591	0,0592	0,0506	0,0411	0,0205	0,1438

(*) LI e LS são os limites superior e inferior da estimativa por intervalo da moda com 95% de credibilidade.

Verifica-se, em geral, uma proximidade entre os valores modais, medianos e das estimativas *REML* em detrimento da média, salvo o valor da média da amostra *a posteriori* para σ_{ϵ}^2 , que está claramente próxima às outras estatísticas, em dados não balanceados. Tal comportamento foi comentado em Klotz, Milton e Zacks (1969) e em Box e Tiao (1992). Wolfinger (1996) cita que há mais informação para σ_{ϵ}^2 que os outros componentes, ou seja, eles são estimados com maiores graus de liberdade. Este fato pode ser visualizado pelas

Figuras 17 e 18, que revelam uma distribuição de σ_e^2 mais comportada que a dos outros componentes. As maiores magnitudes dos graus de liberdade proporcionaram intervalos de credibilidade menores para σ_e^2 e σ_β^2 , nos dados balanceados e não balanceados.

Percebe-se que os dados balanceados forneceram informações um pouco mais precisas acerca dos componentes de variância que os dados não balanceados, uma vez que, nesta categoria, os intervalos de credibilidade foram menores. Além disso, verifica-se, por inspeção gráfica, que as distribuições das amostras *a posteriori* para os dados balanceados estão mais concentradas em torno da moda.

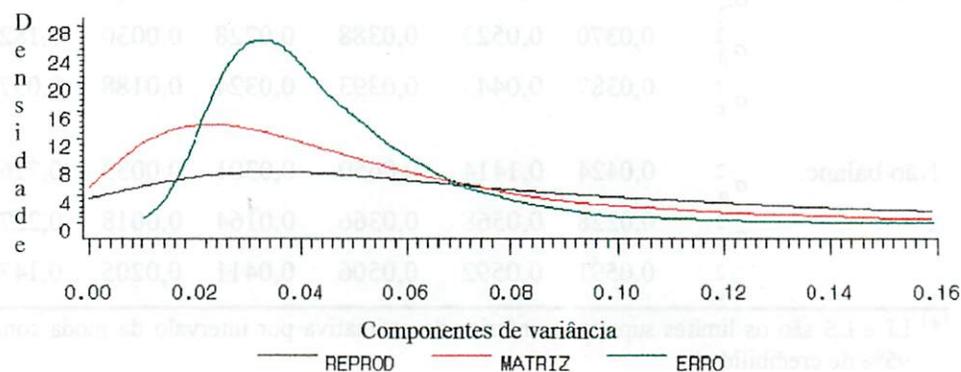


FIGURA 17 – Amostra da densidade *a posteriori* dos componentes de variâncias associados ao reprodutor, matriz e resíduo ajustada através da estimação por *Kernel Density* (Dados balanceados).

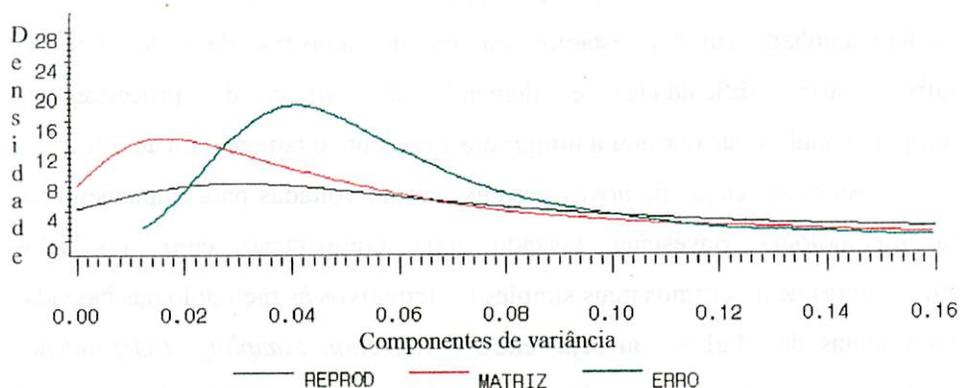


FIGURA 18 – Amostra da densidade *a posteriori* dos componentes de variâncias associados ao reprodutor, matriz e resíduo ajustada através da estimação por *Kernel Density* (Dados não balanceados).

Observa-se, ainda, na Tabela 25, que os valores modais da *posteriori* são inferiores aos obtidos nas estimativas *REML*. Wolfinger e Kass (2000) também encontraram resultados semelhantes e atribuem este comportamento à influência da *priori* de Jeffreys sobre a moda das distribuições *a posteriori*.

Chaloner (1987) comprovou, através de simulação de dados, uma superioridade da moda da *posteriori* sobre os estimadores de componentes de variância clássicos quanto ao viés e EQM.

4.19 Principais Dificuldades e Perspectivas para Estudos Futuros

As dificuldades encontradas concentram-se na elaboração e testes dos programas de simulação. Houve alguns problemas de convergência e muitos entraves e demoras na execução do algoritmo *Rejection Sampling (RS)*, do método Bayesiano, na declaração *PRIOR* do SAS/MIXED, inviabilizando a

inclusão deste método na simulação, aplicação e ilustração. A aplicação do modelo aninhado em dois estágios, em grandes amostras de dados, também sofreu várias dificuldades e demanda de tempo de processamento computacional, o que obrigou a limitar drasticamente o tamanho da amostra.

As perspectivas de novas pesquisas estão voltadas para implementação da metodologia Bayesiana visando uma comparação entre resultados provenientes de algoritmos mais simples e alternativos às metodologias baseadas em Cadeias de Markov, ou seja, entre o *Rejection Sampling*, *Independence Chain*, *Importance Sampling* e *Random Walk Chain*. Outro grande interesse está na comparação entre métodos tradicionais e Bayesianos na obtenção de componentes de variâncias em modelos mistos na predição e estimação do potencial genético de indivíduos em Melhoramento Animal.

CONCLUSÕES

- 5.1** O estimador *ML* de σ_α^2 é o indicado para modelo aleatório em classificação simples quando $\sigma_\alpha^2/\sigma_\epsilon^2 = 0,05$ por ser menos tendencioso e mais eficiente que os outros estimadores, e no caso dos demais modelos, os estimadores *ML* de σ_α^2 e σ_β^2 (modelo aninhado), e σ_β^2 e σ_γ^2 (modelo cruzado), apesar de: mais tendenciosos, apresentarem dificuldade de convergência e demandarem mais tempo de processamento computacional, revelaram-se, em geral, com melhor desempenho (menores variâncias) quando consideradas todas as configurações, em especial, onde a razão de variâncias foi de 0,05.
- 5.2** O estimador *REML* de σ_α^2 e σ_ϵ^2 é recomendado para relações de variâncias maiores ou iguais a 0,25 por apresentar menores vieses e erros quadráticos médios no modelo aleatório em classificação simples, e nos demais modelos, os estimadores *REML* e *ANOVA* são boas opções por serem, em geral, menos tendenciosos e apresentarem bons erros quadráticos médios.
- 5.3** O estimador *MIVQUE(0)*, em geral, teve os piores resultados.
- 5.4** Os estimadores mostraram-se com melhores propriedades na menor razão de variâncias, o maior tamanho de amostras e dados balanceados.
- 5.5** O método Bayesiano, disponível no programa SAS, mostrou ser uma alternativa viável, flexível e promissora para usuários menos familiarizados em metodologia Bayesiana.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALBERT, A. When is a sum of squares in the analysis of variance? **Annals of Statistics**, Hayward, v.4, p.775-778, July 1976.
- BARBIN, D. **Componentes de variância: teoria e aplicações**. 2.ed. Piracicaba: FEALQ, 1993. 120p.
- BOX, G.E.P.; MULLER, M.E. A note on the generation of random normal deviates. **Annals of Mathematical Statistics**, Baltimore, v.29, p.610-611, Dec. 1958.
- BOX, G.E.P.; TIAO, G.C. **Bayesian inference in statistical analysis**. Madison: Wiley Classics Library, 1992. 588p.
- BROEMELING, L.D. **Bayesian analysis of linear models**, New York: Dekker, 1985. 454p.
- CHALONER, K. A bayesian approach to the estimation of variance components for the unbalanced one way random model. **Technometrics**, Washington, v.29, n.3, p.323-337, Aug. 1987.
- CORBEIL, R.R.; SEARLE S.R. A comparison of variance components estimators. **Biometrics**, Raleigh, v.32, n.4, p.779-791, Dec. 1976a.
- CORBEIL, R.R.; SEARLE S.R. Restricted maximum likelihood (REML) estimation of variance components in the mixed model. **Technometrics**, Washington, v.18, n.1, p.31-38, Feb. 1976b.
- FERNANDEZ, D.W.X. **Análise da estabilidade de cultivares de trevo-branco e eficiência dos métodos de estimação de componentes de variância**. Porto Alegre, março, 1998. (Tese – Doutorado em Zootecnia, área de concentração em Plantas Forrageiras).
- FERNANDEZ, D.W.X. **Modelos de populações finitas e máxima verossimilhança restrita do problema de estimativas negativas para os componentes de variância**. Piracicaba: ESALQ, 1991. 118p. (Dissertação – Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica).

- GELFAND, A.E.; SMITH, F.M. Sampling-based approaches to calculating marginal densities. **Journal of American Statistical Association**, Washington, v.85, n.410, p.398-409, June 1990.
- GRAYBILL, F.A. On quadratic estimates of variance components. **Annals of Mathematical Statistics**, Baltimore, v.25, n.2, p.367-372, June 1954.
- GRAYBILL, F.A.; WORTHAN, A.W. A note on uniformly best unbiased estimators for variance components. **Journal of American Statistical Association**, Baltimore, v.51, p.266-268, Mar. 1956.
- HARTLEY, H.O.; RAO, J.N.K. Maximum likelihood estimation for the mixed analysis of variance model. **Biometrika**, Londres, v.54, n.1/2, p.93-108, June 1967.
- HARTLEY, H.O.; RAO, J.N.K.; LAMOTTE, L.R. A simple 'synthesis'-based method of variance component estimation. **Biometrics**, Raleigh, v.34, n.2, p.233-242, June 1978.
- HARVILLE, D.A. Quadratic unbiased estimation of variance components for the one-way classification. **Biometrika**, Baltimore, v.56, n.1/2, p.313-326, June 1969.
- HENDERSON, C.R. Estimation of variance and covariance components. **Biometrics**, Raleigh, v.9, n.1, p.226-252, Mar. 1953.
- HERBACH, L.H. Properties of Model II – Type analysis of variance tests, a: optimum nature of the F-test for model II in the balanced case. **Annals of Mathematical Statistics**, Baltimore, v.30, n.4, p.939-959, Dec. 1959.
- HILL, B.M. Inference about variance components in the one-way model. **Journal of American Statistical Association**, Washington, v.60, p.806-825, Sept. 1965.
- JONES, M.C.; MARRON, J.S.; SHEATHER, S.J. A brief survey of bandwidth selection for density estimation. **Journal of American Statistical Association**, Alexandria, v.91, n.433, p.401-407, Mar. 1996.
- KELLY, R.J.; MATHEW, T. Improved nonnegative estimation of variance components in some mixed models with unbalanced data. **Technometrics**, Washington, v.36, n.2, p.171-181, May 1994.

- KLOTZ, J.H.; MILTON, R.C.; ZACKS, S. Mean square efficiency of estimators of variance component. **Journal of American Statistical Association**, Washington, v.64, p.1383-1402, Dec. 1969.
- LAMOTTE, L.R. Invariant quadratic estimators in the random, one-way ANOVA model. **Biometrics**, Raleigh, v.32, n.4, p.793-804, Dec. 1976.
- LAMOTTE, L.R. Quadratic estimation of variance components. **Biometrics**, Raleigh, v.29, n.2, p.311-330, June 1973.
- LIMA, R.R.; AQUINO, L.H.; BEARZOTI, E. Método da máxima verossimilhança restrita para estimação dos componentes de variância. **Ciência e Prática**, Lavras, v.18, n.4, p.425-437, out./dez. 1994.
- LITTELL, R. C. et al. **SAS[®] system for mixed models**. Cary, NC: SAS Institute, 1996. 633p.
- MACHADO, P.F.A.; AQUINO, L.H.; GONÇALVES, T.M.. Estimativas de parâmetros genéticos e critérios de seleção em características ponderais de bovinos Nelore. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v.23, n.1, p.197-204, jan./mar. 1999.
- MILLIGAN, S.B. et al. Crop effects of broad sense heritabilities and genetic variances of sugarcane yield components. **Crop Science Society of America**, Madison, v.30, p.344-349, Mar./Apr. 1990.
- MOOD, A.M.; GRAYBILL, F.A.; BOES, D.C. **Introduction to the theory of statistics**. 3.ed. New York: McGraw-Hill, 1974. 564p.
- O'HAGAN, A. On posterior joint and marginal modes. **Biometrika**, London, v.63, n.2, p.329-333. Aug. 1976.
- PATTERSON, H.D.; THOMPSON, R. Recovery of interblock information when block sizes are unequal. **Biometrika**, Cambridge, v.58, n.3, p.545-554, Dec.1971.
- PERRI, S.H.V. **Ajuste de modelos mistos de classificação dupla: procedimentos do sistema estatístico "SAS"**. Piracicaba: ESALQ, 1998. 126p. (Tese – Doutorado em Estatística e Experimentação Agrônômica).

- RAO, C.R. Minimum variance quadratic unbiased estimation of variance components. **Journal of Multivariate Analysis**, New York, v.1, p.445-456, 1967.
- RAO, J.N.K. Estimation of variance and covariance components in linear models. **Journal of American Statistical Association**, Washington, v.67, p.112-115, Mar. 1972.
- SÁFADI, T. **Análise bayesiana de alguns modelos de séries temporais**. São Paulo: USP, 1997. 100p. (Tese – Doutorado em Estatística).
- SAS OnlineDoc HTML Format. **Version 8: For all systems**. USA, 2000. Software. ICD-ROM.
- SEARLE, S.R. Large sample variances of maximum likelihood estimators of variance components using unbalanced data. **Biometrics**, Raleigh, v.26, n.3, p.505-524, Sept. 1970.
- SEARLE, S.R. **Linear models**. New York: John Wiley & Sons, 1971. 532p.
- SEARLE, S.R. **Linear models for unbalanced data**. New York: John Wiley e Sons, 1987. 536p.
- SEARLE, S.R.; CASSELA, G.; MCCULLOCH, C.E. **Variance components**. New York: John Wiley & Sons, 1992. 501p.
- SERAPHIN, J.C. Comparação de estimadores de componentes da variância em dois modelos genético-estatísticos de cruzamentos. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília. v.25, n.1, p.57–65, jan. 1990.
- SERAPHIN, J.C. **Comparação numérica de três estimadores de componentes de variância em alguns modelos genético-estatísticos de cruzamentos**. Piracicaba: ESALQ, 1984. 75p. (Dissertação – Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica).
- SILVA, R.G. **Métodos de genética quantitativa aplicados ao melhoramento animal**. Ribeirão Preto: Sociedade Brasileira de Genética, 1982. 162p.
- SUN, L.; HSU, J.S.J.; GUTTMAN, I.; LEONARD, T. Bayesian methods for variance component models. **Journal of American Statistical Association**, Washington, v.91, n.434, p.743-752, June 1996.

- SWALLOW, W.H. Variances of locally minimum variance quadratic unbiased estimators ("MIVQUE's") of variance components. **Technometrics**, Washington, v.23, n.3, p.271-283, Aug. 1981.
- SWALLOW, W.H.; MONAHAN, J.F. Monte Carlo comparison of ANOVA, MIVQUE, MIVQUE(0), and ML estimators of variance components. **Technometrics**, Richmond, v.26, n.1, p.47-57, Feb. 1984.
- SWALLOW, W.H.; SEARLE, S.R. Minimum variance quadratic unbiased estimation (MIVQUE) of variance components. **Technometrics**, Washington, v.20, n.3, p.265-272, Aug. 1978.
- THOMPSON, W.A., Jr. The problem of negative estimates of variance components **Annals of Mathematical Statistics**, Baltimore, v.33, n.1, p.273-289, Mar. 1962.
- TIAO, G.C.; TAN, W.Y. Bayesian analysis of random-effect models in the analysis of variance I: Posterior distribution of variance components. **Biometrika**, Londres, v.52, p.37, June 1965.
- TOWNSEND, E.C.; SEARLE, S.R. Best quadratic unbiased estimation of variance components from unbalanced data in the 1-way random classification. **Biometrics**, Raleigh, v.27, p.643-657, Sept. 1971.
- VALÉRIO FILHO, W.V. **Comparação de métodos para estimação dos componentes da variância via simulação de dados**. Piracicaba: ESALQ, 1991. 160p. (Tese - Doutorado em Estatística e Experimentação Agrônômica).
- WOLFINGER, R.D.; KASS, R.E. Bayesian analysis of variance components model via Rejection Sampling. 1996. Disponível em <www.com.techsup/download/stat>. Acesso em: 25 out. 2000.
- WOLFINGER, R.D.; KASS, R.E. Nonconjugate bayesian analysis of variance components models. **Biometrics**, Washington, v.56, n.3, p.768-774, Sept. 2000.
- WRIGHT, D.R.; STERN, H.S.; BERGER, P.J. Comparing traditional and bayesian analyses of selection experiments in animal breeding. **Journal of Agricultural, Biological and Environmental Statistics**, Washington, v.5, n.2, p.240-256, June 2000.