Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”

Análise de modelos lineares mistos com um fator longitudinal
quantitativo e um qualitativo ordinal

Marina Rodrigues Maestre

Tese apresentada para obtenção do título de Doutora
em Ciências. Área de concentração: Estatística e Ex-
perimentação Agronômica

Piracicaba
2014

Marina Rodrigues Maestre
Bacharel em Estatística

**Análise de modelos lineares mistos com um fator longitudinal quantitativo e
um qualitativo ordinal**

versão revisada de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011

Orientador:
Prof. Dr. **CÉSAR GONÇALVES DE LIMA**

Tese apresentada para obtenção do título de Doutora em
Ciências. Área de concentração: Estatística e Experimen-
tação Agronômica

**Piracicaba
2014**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
DIVISÃO DE BIBLIOTECA - DIBD/ESALQ/USP

Maestre, Marina Rodrigues

Análise de modelos lineares mistos com um fator longitudinal quantitativo e um qualitativo ordinal / Marina Rodrigues Maestre.- - versão revisada de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011. - - Piracicaba, 2014.

85 p: il.

Tese (Doutorado) - - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", 2014.

1. Dois fatores longitudinais 2. Massa seca de raiz 3. Modelo linear misto 4. Estrutura de Covariância I. Título

CDD 519.5
M186a

"Permitida a cópia total ou parcial deste documento, desde que citada a fonte -O autor"

DEDICATÓRIA

Aos meus pais,
Edilberto Rodrigues Maestre e
Angélica Rebola Rodrigues.

Aos meus irmãos,
Edilberto Rodrigues Maestre Júnior e
Rodrigo Rodrigues Maestre.

Aos meus sobrinhos,
Carlos Eduardo e Mariana.

Às minhas tias,
Antonia e Mercedes e
às minhas avós Helena e Teresa.

Ao meu noivo,
Elias Silva de Medeiros.

DEDICO!

AGRADECIMENTOS

A Deus, por estar VIVA e por continuar me abençoando a todo momento.

A Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” e ao Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agronômica, pela oportunidade e conhecimentos adquiridos.

Ao Prof. Dr. César Gonçalves de Lima, pela orientação, amizade, apoio nas minhas decisões, confiança e crédito depositado neste trabalho.

Aos professores da banca do Exame de Qualificação pelas valiosas sugestões que ajudaram a definir o novo objetivo deste trabalho e aos professores da banca de Defesa desta tese, pelas contribuições.

Ao Prof. Dr. Décio Barbin, meu orientador no mestrado que sempre terei grande admiração. Agradeço a amizade e apoio em todas as horas.

Aos professores do Departamento de Ciências Exatas da ESALQ/USP, pela amizade, pela atenção, pelos conhecimentos transmitidos e agradável convivência.

Aos funcionários do Departamento de Ciências Exatas da ESALQ/USP, que contribuíram para que o tempo de duração dos estudos fosse o melhor possível, pela atenção e dedicação.

Às secretárias Luciane Brajão e Solange de Assis Paes Sabadin, por estarem sempre prontas a ajudar à todos.

Aos funcionários, Eduardo Bonilha, Jorge Alexandre Wiendl e Rosni Honofre Aparecido Pinto, por tantos socorros e suporte.

Ao grupo de estudos em modelos mistos (GEMMIX) da ESALQ pela troca de experiências.

A disponibilização do conjunto de dados da dissertação de Rafael Otto.

À Renata Alcarde e à Simone Daniela Sartorio, que se tornaram mais que amigas, verdadeiras irmãs. Agradeço a força, a dedicação, a atenção, o companheirismo, a presença nos momentos felizes e nos outros momentos também. Enfim, agradeço por toda a amizade e os muitos abraços dados nas horas difíceis e nas alegrias.

Aos amigos que sempre levarei no coração com muito carinho por todo apoio sempre, Lucimary Afonso dos Santos, Vanderly Janeiro, Wilson Alves de Oliveira e Irene.

Às amigas-irmãs que desde sempre são minhas companheiras, Caroline Sandi, Gilvana Rodrigues Maestre, Lidiane Vicente dos Anjos, Nayara Corrêa Farias e

Patrícia Hobold Meurer.

Às minhas tias que são minhas segundas-mães Antonia Águida Rebola Garcia e Mercedes Bendita Rebola que são meus anjos da guarda, sempre me incentivando e apostando na minha capacidade. Por toda a ajuda, torcida e abrigo.

Às amigas de república Alinne da Silva, Andrea Garcia, Cleucione de Oliveira Pessoa, Dinara Graziela Alves e Kelly Tagiane Souza que me deram muita força em momentos de tristeza e que estavam presentes comigo em muitos momentos de alegrias.

Agradeço à Rochane que me abrigou em sua casa no momento mais crítico de minha vida.

Agradeço ao Adriano Gonçalves e seu pai pela presteza comigo.

A todos os amigos da sala de estudos, as dúvidas tiradas, as trocas de conhecimentos, os momentos de descontração e os momentos dos cafezinhos na cozinha.

Aos amigos da minha turma de doutorado de 2010. Às horas de estudo em conjunto, que no segundo semestre de 2010 eram marcadas nos finais de semana, pois eu trabalhava em Sorocaba.

Aos professores e funcionários da UFSCar - *Campus* Sorocaba pela amizade, apoio e troca de experiências. Em especial, ao Prof. Dr. Júlio César Pereira e sua esposa Adriana por me ajudarem na minha chegada em Sorocaba, me dando dicas de transporte e moradia, sem contar no empréstimo de material para montar as minhas aulas.

Aos amigos do IBOPE Media - Ciência da Medição, por fazerem parte de uma nova etapa da minha história. Agradeço os ensinamentos, apoio, paciência, risadas e principalmente, a amizade.

À Coordenadoria para o Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa de estudos.

E a todos que, de forma direta ou indireta, contribuíram para a realização deste trabalho.

Agradecimento especial

À minha família que é a minha base. Meu pai, Edilberto Rodrigues Maestre, minha mãe, Angélica Rebola Rodrigues, meus irmãos Edilberto Rodrigues Maestre Júnior e Rodrigo Rodrigues Maestre, o apoio em todas as minhas decisões, a ajuda, o incentivo,

por estarem sempre ao meu lado, me aconselharem, por se alegrarem com as minhas alegrias e chorarem com as tristezas. Amo incondicionalmente todos vocês.

Aos meus sobrinhos Carlos Eduardo e Mariana, por encher nossa família de brilho e alegria. Por serem a esperança de um mundo melhor. Às minhas cunhadas Geovana e Pollyana, por darem apoio aos meus pais e nos ajudarem tanto.

Ao meu noivo, Elias Silva de Medeiros, por ser meu amigo, meu companheiro, por me apoiar, me ajudar, por me acompanhar em várias noites de estudo na ESALQ, por encarar comigo o desafio de mudar de cidade em busca da realização de um sonho, um emprego novo.

Agradeço, em especial, a todos os amigos anjos que estiveram ao meu lado no momento mais crítico de minha vida. A cirurgia! Vocês que rezaram, torceram, acompanharam todo o processo, ajudaram e apoiaram a mim e aos meus pais. E vocês que continuam rezando e torcendo por mim.

O MEU MUITO OBRIGADA!

SUMÁRIO

RESUMO	11
ABSTRACT	13
LISTA DE FIGURAS	15
LISTA DE TABELAS	17
1 INTRODUÇÃO	19
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	21
2.1 Abordagens utilizando medidas repetidas	21
2.2 Dados longitudinais	26
2.3 Modelo linear misto	27
2.3.1 Análise exploratória	29
2.3.2 Inferência estatística	30
2.3.3 Estruturas de covariâncias	34
2.3.4 Seleção de modelo	38
2.3.4.1 Estratégias para seleção de modelos	40
2.3.4.1.1 Top-down	41
2.3.4.1.2 Step-up	41
2.3.5 Diagnóstico dos resíduos	42
2.3.6 Tipos de resíduos	43
2.3.6.1 Resíduos padronizados, estudentizados e de Pearson	43
3 MATERIAL E MÉTODOS	45
3.1 Material	45
3.1.1 Massa seca de raiz de cana-de-açúcar	45
3.2 Métodos	46
3.2.1 Efeitos fixos e aleatórios	47
3.2.2 Estruturas de covariâncias adaptadas	48
3.2.3 Métodos de estimação e de seleção	50
3.2.4 Estimação e seleção dos efeitos fixos	50
3.2.5 Diagnóstico do ajuste	51
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	53
4.1 Massa seca de raiz (MSR) de cana-de-açúcar	53
4.1.1 Análise exploratória	53

4.1.2 Efeitos aleatórios - matriz $\mathbf{G}$	54
4.1.3 Matriz de covariâncias ($\mathbf{R}$)	56
4.1.4 Efeitos fixos	59
4.1.5 Diagnóstico do modelo selecionado - $m16$	63
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS	67
REFERÊNCIAS	69
APÊNDICES	73

RESUMO

Análise de modelos lineares mistos com um fator longitudinal quantitativo e um qualitativo ordinal

Os experimentos agronômicos que envolvem somente um fator longitudinal são bastante comuns. No entanto, existem casos em que as observações são tomadas considerando dois ou mais desses fatores, como nos casos em que são feitas medidas de uma variável resposta em profundidades diferentes ao longo do tempo, por exemplo. Admite-se que essas observações, tomadas de modo sistemático em cada unidade experimental, sejam correlacionadas e as variâncias nos diferentes níveis do fator longitudinal sejam heterogêneas. Com o uso de modelos mistos, essa correlação entre medidas repetidas e a heterogeneidade de variâncias podem ser modeladas convenientemente. Para que esses modelos sejam ajustados a um conjunto de dados envolvendo presença de dois fatores longitudinais, existe a necessidade de se adaptarem algumas estruturas de variâncias e covariâncias que são comuns em experimentos com somente um fator longitudinal. O objetivo do presente trabalho é utilizar a classe dos modelos lineares mistos para estudar a massa seca de raiz no solo de uma plantação de cana-de-açúcar. O experimento foi casualizado em blocos e as parcelas receberam quatro doses de nitrogênio. Foram feitas medidas repetidas ao longo de dois fatores longitudinais, sendo um qualitativo ordinal (profundidades) e um quantitativo (distâncias da linha de plantio). Por meio dos testes de razão de verossimilhanças, de Wald e utilizando os critérios de informação AIC e BIC, selecionou-se uma estrutura de covariâncias parcimoniosa e outra estrutura para explicar o comportamento médio das respostas. A verificação do ajuste foi feita por meio de gráficos de diagnósticos de resíduos.

Palavras-chave: Dois fatores longitudinais; Massa seca; Perfis; Covariância

ABSTRACT

Analysis of linear mixed models with one quantitative and one ordinal qualitative longitudinal factor

Agronomic experiments involving only one longitudinal factor are quite common. However, there are cases that the observations are made by considering two or more of these factors such as where measurements are made in a response variable at different depths along the time, for example. It is admitted that these observations, taken in a systematic way in each experimental unit are correlated and variances are heterogeneous in different levels of longitudinal factor. Using mixed models, this correlation between repeated measures and heterogeneity of variances can be modeled conveniently. To fit these models to data set involving presence of two longitudinal factors, there is need to adapt some variance and covariance structures that are common in experiments with only one longitudinal factor. The objective of this work is to use the class of linear mixed models to study the dry root mass in the soil of a plantation of cane sugar. The experiment was the randomized complete blocks design and parcels received four doses of nitrogen. Repeated measurements were made along two longitudinal factors being one ordinal qualitative (depths) and one quantitative (distances from the row). With the aid of likelihood ratio, Wald tests and using the AIC and BIC information criteria, we selected a parsimonious covariance structure and another structure to explain the average behavior of the responses. Checking the fit was made using diagnostic graphics of residuals.

Keywords: Two longitudinal factors; Dry mass; Profiles; Covariance

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Ilustrações sugerindo a inclusão de efeito aleatório no (a) intercepto, (b) coeficiente de primeiro grau e (c) coeficiente de segundo grau da curva de regressão - dados hipotéticos	29
Figura 2 - Exemplo de perfis médios (a) e perfis individuais (b) de pesos de aves	30
Figura 3 - Ilustração da coleta das amostras de solo para a cana-planta	45
Figura 4 - Perfis individuais da massa seca de raiz da cana da Profundidade 0-30 cm (a) e Profundidade 30-60 cm (b)	46
Figura 5 - Perfis individuais ao longo dos locais de observação, por dose de nitrogênio e por profundidade: (a) 0 kg ha ⁻¹ N, (b) 40 kg ha ⁻¹ N, (c) 80 kg ha ⁻¹ N e (d) 120 kg ha ⁻¹ N	57
Figura 6 - Curvas de regressão estimadas para as diferentes doses e profundidades - dados de MSR de cana	60
Figura 7 - Ajuste do modelo <i>m16</i> aos dados de MSR de cana	63
Figura 8 - Gráficos de diagnósticos dos resíduos condicionais padronizados	65
Figura 9 - Curvas quadráticas médias ajustadas para os dois níveis de Dose2 para <i>Prof</i> ₀₋₃₀ e uma para <i>Prof</i> ₃₀₋₆₀ , para o modelo selecionado (<i>m16</i>)	65
Figura 10 - Observações, curvas médias e curvas individuais - <i>m16</i> , (a) Doses 0 e 80 iguais e Profundidade 0-30 cm, (b) Doses 40 e 120 iguais e Profundidade 0-30 cm, (c) Doses 0, 40, 80 e 120 iguais Profundidade 30-60 cm	66

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Estrutura básica de dados longitudinais provenientes de experimentos casualizados em blocos	22
Tabela 2 - Classes de estruturas das matrizes de covariância (pdMat) positivas definidas disponíveis na biblioteca nlme do R	36
Tabela 3 - Classes das funções de variância (varFunc) disponíveis na biblioteca nlme do R	36
Tabela 4 - Classes das estruturas de correlação (corStruct) disponíveis na biblioteca nlme do R	36
Tabela 5 - Algumas das estruturas de covariâncias disponíveis no proc mixed do SAS	37
Tabela 6 - Usos de resíduos para fins de diagnóstico	43
Tabela 7 - Valores médios e desvios padrão de MSR (g dm^{-3}) das Doses de Nitrogênio (kg ha^{-1}), das Profundidades (cm) e dos Locais (cm)	53
Tabela 8 - Variâncias (diagonal), covariâncias (abaixo da diagonal) e correlações (acima da diagonal) amostrais, de massa seca de raiz da cana, por profundidade e local	54
Tabela 9 - Estruturas iniciais para os efeitos aleatórios, considerando a estrutura maximal para efeitos fixos, para dados de MSR de cana	54
Tabela 10 - Comparação inicial de modelos visando à inclusão de efeitos aleatórios pelo TRV	55
Tabela 11 - Estruturas de covariâncias intra-indivíduos (R) para os dados de MSR de cana	58
Tabela 12 - Comparação dos modelos $m3$, $m5$, $m6$, $m7$, $m8$ e $m9$ pelo TRV e pelos critérios de informação AIC e BIC	58
Tabela 13 - Comparação dos modelos $m7$, $m10$, $m11$ e $m12$ pelo teste da razão de verossimilhanças (TRV) para dados de MSR de cana	59
Tabela 14 - Teste de Wald para os parâmetros de efeito fixo do modelo maximal ($m7$) . .	59
Tabela 15 - Equações para os perfis médios ajustados para o modelo $m7$ - dados de MSR de cana	60
Tabela 16 - Estruturas dos efeitos fixos para testar igualdade de médias das Doses .	61
Tabela 17 - Medidas da qualidade do ajuste dos modelos $m7$, $m13$, $m14$, $m15$, $m16$ e $m17$	61
Tabela 18 - Estruturas para confirmar significância dos efeitos aleatórios ajustados aos dados de MSR de cana	62

Tabela 19 - Comparação dos modelos $m16$, $m18$, $m19$, $m20$ e $m21$ pelo teste da razão de verossimilhanças (TRV)	62
--	----

1 INTRODUÇÃO

Em diversas áreas de pesquisa é comum a realização de experimentos em que são tomadas medidas repetidas de uma ou mais variáveis respostas em ocasiões sucessivas na mesma unidade experimental, ao longo de um certo intervalo de tempo, por exemplo, o que caracterizam os experimentos longitudinais.

Embora sejam mais comuns os experimentos envolvendo somente um fator longitudinal, existem casos em que as observações são tomadas considerando dois ou mais desses fatores, como nos casos em que são feitas medidas de uma variável resposta nas quatro estações em três anos consecutivos, por exemplo. Nos estudos de fertilidade do solo podem-se considerar avaliações feitas em profundidades diferentes ao longo do tempo, ou ainda, avaliações feitas em profundidades diferentes, em distâncias diferentes do centro da unidade experimental, ao longo do tempo.

Considerando que essas medidas repetidas sejam feitas de modo sistemático em cada unidade experimental, ou seja, sem qualquer casualização, admite-se que as observações feitas nos distintos níveis do fator longitudinal sejam correlacionadas e as variâncias nos diferentes níveis sejam heterogêneas. A correlação entre medidas repetidas e a heterogeneidade de variâncias podem ser incluídas no modelo de análise com a especificação de modelos mistos (lineares ou não lineares) (PINHEIRO; BATES, 2000; WEST; WELCH; GALECKI, 2007).

Entende-se por modelos lineares mistos aqueles que contêm outros efeitos fixos além da média, e qualquer outro termo aleatório além do erro experimental (COSTA, 2003). A sua especificação envolve a escolha de um modelo para os valores médios e de uma estrutura parcimoniosa para a matriz de covariâncias dos níveis analisados.

Crowder e Hand (1990), Lima (1996), Vonesh e Chinchilli (1997), Verbeke e Molenberghs (2000), Molenberghs e Verbeke (2005), dentre outros, afirmam que as técnicas utilizadas para analisar os dados longitudinais incluem a análise de perfis uni e multivariada, a análise de curvas de crescimento e a metodologia baseada em modelos lineares mistos.

Para que sejam ajustados modelos lineares mistos a conjunto de dados envolvendo um fator longitudinal qualitativo ordinal e um quantitativo, existe a necessidade de se adaptarem algumas estruturas de variâncias e covariâncias que são comuns em estudos longitudinais com um único fator longitudinal.

A proposta do presente trabalho surgiu da necessidade de se estudar um conjunto de dados da dissertação de Otto (2007) em que foram aplicadas doses de nitrogênio (N-uréia) no sulco do plantio de uma plantação de cana-de-açúcar e a massa seca de raiz da cana (g dm^{-3}) foi observada. Essas observações foram tomadas em profundidades diferentes e a distâncias diferentes da linha de plantio da cana.

Diante do problema exposto, o objetivo do presente trabalho é utilizar a classe dos modelos lineares mistos para estudar os efeitos do fator de tratamento e a estrutura de variâncias e covariâncias de experimentos casualizados em blocos e que apresentam medidas repetidas ao longo de dois fatores longitudinais, sendo um qualitativo ordinal e um quantitativo. O presente trabalho pretende fornecer um material que ilustre a análise de conjuntos de dados com essas características.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta seção serão comentadas algumas das técnicas utilizadas para analisar dados com medidas repetidas. Serão apresentados alguns conceitos relacionados aos modelos mistos e aos dados longitudinais. Também será abordada a construção de um modelo linear misto com dois fatores longitudinais, assim como a estimação dos seus parâmetros de efeito fixo e a predição dos parâmetros de efeito aleatório. Serão apresentados também alguns conceitos sobre tipos de resíduos, bem como técnicas de diagnóstico para a verificação do ajuste dos modelos.

2.1 Abordagens utilizando medidas repetidas

O termo medidas repetidas, segundo Diggle (1988), refere-se àqueles casos em que se observa uma ou mais variáveis respostas repetidamente na mesma unidade experimental. Nesses estudos, as variáveis respostas podem ser contínuas (peso, volume, consumo, conversão alimentar etc.) ou discretas (contagem de algum evento, presença ou ausência de algum sintoma etc.). As unidades experimentais, como indivíduos, plantas, animais, canteiros etc., podem estar classificadas em diferentes grupos, segundo um ou mais fatores (ou tratamentos) como sexo, densidade de plantio, espaçamento entre linhas de plantio etc.

Barbosa (2009) comenta que os estudos envolvendo medidas repetidas permitem avaliar mudanças globais na resposta com mais eficiência, ou seja, possibilitam a análise do comportamento dos perfis médios e requerem um menor número de unidades amostrais do que os estudos que envolvem uma única observação da variável resposta em cada parcela. Salienta ainda que tais estudos envolvem um alto custo para garantir a observação das unidades experimentais nos instantes pré-determinados, que é frequente a presença de dados incompletos e que a análise estatística é, em geral, mais difícil.

Um caso particular de medidas repetidas é denominado dados longitudinais, no qual o comportamento da variável resposta é observado ao longo de uma direção específica, sendo o tempo a mais comum. Uma característica inerente aos dados longitudinais é a ausência da independência entre as observações, uma vez que as mesmas são realizadas sequencialmente na mesma unidade experimental. Outra característica é a possível heterogeneidade de variâncias das respostas obtidas nos diversos níveis do fator longitudinal observados. Ainda, segundo Singer, Nobre e Rocha (2012), estudos desta natureza

são caracterizados pela dimensão ordenada ao longo da qual as medidas intra-unidades experimentais são repetidas.

Nos estudos longitudinais está associado a cada unidade experimental (i, j) um vetor $\mathbf{y}_{ij}^t = [y_{ij1}, y_{ij2}, \dots, y_{ijb}]$, denominado *perfis individuais de respostas*, cujos componentes são os valores observados da variável resposta nas b níveis do fator longitudinal.

Admitindo que y_{ijk} corresponde à resposta do i -ésimo bloco, do j -ésimo tratamento no k -ésimo nível do fator longitudinal, para $i = 1, \dots, r$, $j = 1, \dots, a$ e $k = 1, \dots, b$, na Tabela 1 está apresentada a estrutura básica de um conjunto de dados longitudinais, para observações completas, regulares e balanceadas, provenientes de um delineamento casualizado em blocos.

Tabela 1 – Estrutura básica de dados longitudinais provenientes de experimentos casualizados em blocos

Blocos	Tratamentos	Níveis do fator Longitudinal			
		1	2	...	b
1	1	y_{111}	y_{112}	...	y_{11b}
1	2	y_{121}	y_{122}	...	y_{12b}
...	...	...	...	...	...
1	a	y_{1a1}	y_{1a2}	...	y_{1ab}
2	1	y_{211}	y_{212}	...	y_{21b}
2	2	y_{221}	y_{222}	...	y_{22b}
...	...	...	...	...	...
2	a	y_{2a1}	y_{2a2}	...	y_{2ab}
...	...	...	...	...	...
r	1	y_{r11}	y_{r12}	...	y_{r1b}
r	2	y_{r21}	y_{r22}	...	y_{r2b}
...	...	...	...	...	...
r	a	y_{ra1}	y_{ra2}	...	y_{rab}

A forma mais simples de se analisar um experimento longitudinal é supor que ele seja um ensaio em parcelas subdivididas nos níveis do fator longitudinal (MILLIKEN; JOHNSON, 2009), em que os níveis dos fatores de tratamento sejam aleatorizados às parcelas e os níveis do fator longitudinal sejam os níveis do tratamento aplicado (sem aleatorização) às subparcelas. Esta forma de análise supõe dois erros, um associado à variabilidade das respostas em nível de parcelas e o outro em nível de subparcelas. A especificação do modelo no esquema de parcela subdividida nos níveis do fator longitudinal induz uma estrutura particular chamada estrutura uniforme ou de simetria composta,

como em (1),

$$\Sigma_{(b \times b)} = \begin{bmatrix} (\sigma_p^2 + \sigma_s^2) & \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 \\ \sigma_p^2 & (\sigma_p^2 + \sigma_s^2) & \dots & \sigma_p^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_p^2 & \sigma_p^2 & \dots & (\sigma_p^2 + \sigma_s^2) \end{bmatrix} \quad (1)$$

em que, σ_p^2 é a variância associada ao erro entre indivíduos, ou parcelas, e σ_s^2 é a variância associada ao erro intra-indivíduos, ou entre as subparcelas dentro da mesma parcela, como em (2),

$$\text{cov}(y_{ijk}, y_{ij'k'}) = \begin{cases} \sigma_p^2 + \sigma_s^2, & j = j', \quad k = k', \\ \sigma_p^2, & j = j'. \end{cases} \quad (2)$$

Neste caso a variância entre as observações feitas no mesmo tratamento ($j = j'$) e mesmo nível do fator longitudinal ($k = k'$) é igual a $\sigma_p^2 + \sigma_s^2$ e a variância entre as observações feitas no mesmo tratamento ($j = j'$) e níveis diferentes do fator longitudinal ($k \neq k'$) é σ_p^2 .

A forma mais simples de analisar os dados de um experimento no qual dois fatores longitudinais estão envolvidos é considerando um esquema de parcelas sub-subdivididas, admitindo que os níveis do segundo fator longitudinal correspondem aos níveis do fator aplicados às sub-subparcelas. Nesta forma de analisar, admite-se três erros, sendo o terceiro erro associado às sub-subparcelas. A estrutura da matriz de covariâncias (3) associada a este esquema admite variâncias e covariâncias homogêneas, considerando os diferentes níveis de subparcela e de sub-subparcela na mesma parcela.

$$\begin{bmatrix} \sigma_p^2 + \sigma_s^2 + \sigma_{ss}^2 & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 & \vdots & \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 & \vdots & \dots & \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_p^2 + \sigma_s^2 & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 + \sigma_{ss}^2 & \vdots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 & \vdots & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 & \vdots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 + \sigma_{ss}^2 & \vdots & \dots & \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 & \vdots & \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 & \vdots & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 + \sigma_{ss}^2 & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 & \vdots & \sigma_p^2 & \dots & \sigma_p^2 & \vdots & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 & \dots & \sigma_p^2 + \sigma_s^2 + \sigma_{ss}^2 \end{bmatrix} \quad (3)$$

em que, σ_{ss}^2 é a variância associada ao erro da sub-subparcela.

Neste caso, tem-se,

$$cov(y_{ijkl}, y_{ij'k'l'}) = \begin{cases} \sigma_p^2 + \sigma_s^2 + \sigma_{ss}^2, & j = j', \quad k = k', \quad l = l', \\ \sigma_p^2 + \sigma_s^2, & j = j', \quad k = k', \\ \sigma_p^2, & j = j'. \end{cases} \quad (4)$$

Sendo j, j' níveis do fator de tratamento, k, k' níveis de um fator longitudinal e l, l' níveis do segundo fator longitudinal.

Caso as variâncias das respostas em cada nível do fator longitudinal ou as covariâncias das respostas entre níveis distintos sejam diferentes, uma alternativa é a análise multivariada de perfis, que assume a estrutura de covariâncias mais geral (não estruturada ou completamente parametrizada) para as medidas feitas ao longo dos níveis do fator longitudinal.

Neste caso, admite-se que os vetores de observações ($\mathbf{y}_{ij}$'s) são independentes e obedecem à distribuições normais multivariadas, sendo o número de variáveis igual ao número de níveis do fator longitudinal (b). A matriz de covariâncias não estruturada (UN) é dada por (5).

$$cov(\mathbf{y}_{ij}) = \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1b} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \dots & \sigma_{2b} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sigma_{b1} & \sigma_{b2} & \dots & \sigma_b^2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

As principais desvantagens da análise multivariada de perfis são: necessidade de perfis individuais de respostas completos e o baixo poder dos testes de hipóteses associados, devido ao elevado número de parâmetros.

Para que na análise dos dados seja utilizada uma abordagem univariada (esquema de parcelas subdivididas ou sub-subdivididas), a estrutura da matriz de covariâncias intra-indivíduos deve ser uniforme. Entretanto, Huynh e Feldt (1970) apresentaram uma condição necessária e suficiente para a matriz de covariâncias amostral, em que,

$$\sigma_{kk'} = \frac{\sigma_k^2 + \sigma_{k'}^2}{2} - \lambda, \quad k \neq k',$$

sendo λ a diferença entre as médias das variâncias e as médias das covariâncias.

Se a condição de esfericidade for satisfeita os testes F relativos ao fator de tratamento e à interação do fator tratamento com o(s) fator(es) longitudinal(is) passam a ser exatos.

Um teste para verificar essa condição foi proposto por Mauchly (1940), cuja estatística é dada por:

$$W = \frac{(b-1)^{b-1} |\mathbf{P}^t \mathbf{S} \mathbf{P}|}{tr\{\mathbf{P}^t \mathbf{S} \mathbf{P}\}^{b-1}}$$

em que $\mathbf{S}$ é a matriz de covariâncias amostrais, de dimensões $b \times b$; $\mathbf{P}$ é uma matriz de contrastes ortogonais de dimensão $b \times (b-1)$ e tr é o operador traço. Sob a hipótese nula, tem-se que:

$$\chi_{calc}^2 = - \left[\nu - \frac{2b^2 - 3b + 3}{6(b-1)} \right] \ln(W),$$

que tem distribuição quiquadrado com $\frac{1}{2}b(b-1) - 1$ graus de liberdade, quando ν (número de graus de liberdade do resíduo) é grande.

Se a condição de esfericidade (hipótese nula) for aceita, a análise pode ser feita utilizando a abordagem univariada, caso contrário, deve-se utilizar a abordagem multivariada. Contudo, Andrade e Singer (1986) afirmaram que apesar da estrutura H-F não ser tão restritiva quanto à estrutura uniforme, ela também não é totalmente adequada para representar a estrutura de covariâncias de dados longitudinais. Além disso, assim como no método univariado, a análise de variância multivariada (MANOVA) não trata bem a estrutura desbalanceada de dados, e não incorpora facilmente covariáveis que variam ao longo dos níveis do fator longitudinal e desconsidera dados não-regulares.

Segundo Crowder e Hand (1990), o teste de esfericidade é o mais utilizado na verificação da condição de esfericidade e alertaram para o fato de que, como todos os testes que envolvem variâncias e covariâncias, este teste é bastante sensível à não normalidade dos dados.

Uma abordagem mais abrangente e atual envolve a especificação de modelos lineares mistos em dois estágios, proposta por Laird e Ware (1982), fazendo uso das ideias de Harville (1977). Essa abordagem revolucionou a análise desse tipo de dados, pois a família de modelos proposta possibilitou o uso de diversas estruturas das matrizes de variâncias e covariâncias entre unidades e intra unidades experimentais.

2.2 Dados longitudinais

O especial interesse desses estudos se dá quando o objetivo é avaliar mudanças de comportamento da resposta média ou respostas individuais com respeito às medidas repetidas ao longo dos níveis do fator longitudinal especificado. Assim, esses estudos permitem que a variável resposta seja observada em unidades amostrais sob níveis constantes de outras covariáveis que podem influenciá-la. Dessa planejamntos provêm informações sobre variações individuais nos níveis da variável resposta.

Fatores que possam influenciar na resposta podem ser controlados em condições mais adequadas quando é utilizado este tipo de planejamento. As estimativas de contrastes associados às diferenças entre os valores médios das respostas de diferentes níveis do fator longitudinal são mais precisas nesses experimentos. E tais ensaios possibilitam o estudo da mudança de comportamento da resposta média da unidade experimental ao longo dos níveis do fator longitudinal, incorporando informações sobre a variação individual na análise.

Com os dados da Tabela 1, monta-se a matriz contendo os ra perfis individuais na sua forma multivariada de respostas, como segue:

$$\mathbf{Y}_{ra \times b} = \begin{bmatrix} y_{111} & y_{112} & \cdots & y_{11b} \\ y_{121} & y_{122} & \cdots & y_{12b} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{1a1} & y_{1a2} & \cdots & y_{1ab} \\ y_{211} & y_{212} & \cdots & y_{21b} \\ y_{221} & y_{222} & \cdots & y_{22b} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{2a1} & y_{2a2} & \cdots & y_{2ab} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{r11} & y_{r12} & \cdots & y_{r1b} \\ y_{r21} & y_{r22} & \cdots & y_{r2b} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{ra1} & y_{ra2} & \cdots & y_{rab} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_{11}^t \\ \mathbf{y}_{12}^t \\ \vdots \\ \mathbf{y}_{1a}^t \\ \mathbf{y}_{21}^t \\ \mathbf{y}_{22}^t \\ \vdots \\ \mathbf{y}_{2a}^t \\ \vdots \\ \mathbf{y}_{r1}^t \\ \mathbf{y}_{r2}^t \\ \vdots \\ \mathbf{y}_{ra}^t \end{bmatrix}$$

Uma vez que os estudos longitudinais podem conter muitos níveis, por exemplo, podem durar muito tempo, é fácil a existência de experimentos com dados incompletos ou que o intervalo entre duas medidas consecutivas dos níveis deste fator não seja constante (dados irregulares) ou, que não tenham sido observados em todos os níveis do fator longitudinal (dados desbalanceados).

2.3 Modelo linear misto

Lima (1996) afirmou que a análise de curvas de crescimento, que visa descrever o comportamento dos perfis médios de resposta por meio de curvas polinomiais ou não lineares, consegue uma maior versatilidade na análise de dados longitudinais com a possibilidade de modelar a estrutura de covariâncias, buscando estruturas intermediárias entre a completamente parametrizada e a uniforme. Para isso, especificam-se os Modelos Lineares Mistos, que admitem matrizes de covariâncias diferentes para cada unidade experimental, além da vantagem adicional de tratar de situações em que os dados são desbalanceados em relação aos níveis do fator longitudinal.

Para o caso em que os dados são balanceados, o modelo linear misto, designado inicialmente por Laird e Ware (1982) como *random-effects models* pode ser escrito como:

$$\mathbf{y}_{ij} = \mathbf{X}_{ij}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_{ij}\mathbf{b}_{ij} + \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} \quad (6)$$

em que,

$\mathbf{y}_{ij}$ ($b \times 1$) é o perfil de respostas do (ij)-ésimo indivíduo;

$\mathbf{X}_{ij}$ ($b \times p$) é uma matriz de posto $p < b$, conhecida e de especificação, associada ao vetor $\boldsymbol{\beta}$ ($p \times 1$) de parâmetros subpopulacionais desconhecidos;

$\mathbf{Z}_{ij}$ ($b \times q$) é uma matriz conhecida e de especificação, de posto coluna completo e associada ao vetor de efeitos aleatórios $\mathbf{b}_{ij}$ ($q \times 1$) de diferenças individuais em torno dos valores populacionais, e

$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$ ($b \times 1$) é um vetor de erros aleatórios.

As matrizes de especificação $\mathbf{X}_{ij}$ e $\mathbf{Z}_{ij}$ podem ser diferentes e variar entre unidades experimentais, estendendo o modelo para o caso de dados não balanceados em relação aos níveis dos fatores longitudinais. Supõe-se também que $\mathbf{b}_{ij}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$ são independentes, que $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{R}_{ij})$ e que $\mathbf{b}_{ij} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{G})$, para $i = 1, \dots, r$ e $j = 1, \dots, b$, em que, $\mathbf{R}_{ij}$ ($b \times b$) e $\mathbf{G}$ ($q \times q$) são matrizes de covariâncias. Ambas podem assumir a forma não estruturada (UN), a forma de simetria composta (CS), dentre outras.

O nome *modelo misto*, segundo Costa (2003), vem do fato de que o modelo contém parâmetros de efeitos fixos ($\boldsymbol{\beta}$) e parâmetros de efeitos aleatórios ($\mathbf{b}_{ij}$), além do erro experimental.

O modelo (6) pode ser formulado em dois estágios, em que são identificadas as características individuais e populacionais. No primeiro estágio, para cada unidade experimental (ij), tem-se:

$$\mathbf{y}_{ij}|\mathbf{b}_{ij} = \mathbf{X}_{ij}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_{ij}\mathbf{b}_{ij} + \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} \sim N(\mathbf{X}_{ij}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_{ij}\mathbf{b}_{ij}, \mathbf{R}_{ij}), \quad (7)$$

em que, $\mathbf{R}_{ij}$ é conhecida como matriz de dispersão condicional e está associada ao erro condicional $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} = \mathbf{y}_{ij} - \mathbf{X}_{ij}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}_{ij}\mathbf{b}_{ij}$. Por exemplo, quando $\mathbf{R}_{ij} = \sigma^2\mathbf{I}_{(b)}$, o modelo é conhecido como modelo com independência condicional e reflete a independência e a homogeneidade de variâncias das observações intra-indivíduos.

No segundo estágio, assume-se que $\mathbf{b}_{ij} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{G})$ é independente de $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$ obtendo-se o modelo marginal (ou não condicional):

$$\mathbf{y}_{ij} \sim N(\mathbf{X}_{ij}\boldsymbol{\beta}, \mathbf{V}_{ij}) \quad (8)$$

em que, a matriz $\mathbf{V}_{ij} = \mathbf{Z}_{ij}\mathbf{G}\mathbf{Z}_{ij}^t + \mathbf{R}_{ij}$ é chamada matriz de dispersão marginal e está associada ao erro marginal $\mathbf{e}_{ij} = \mathbf{y}_{ij} - \mathbf{X}_{ij}\boldsymbol{\beta}$, que é dado pela soma $\mathbf{e}_{ij} = \mathbf{Z}_{ij}\mathbf{b}_{ij} + \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$.

Quando há interesse em ajustar curvas (de crescimento, por exemplo) aos dados longitudinais, os modelos lineares mistos assumem a existência de curvas médias para cada nível do fator de tratamento ($\mathbf{X}_{ij}\boldsymbol{\beta}$) em torno das quais existem variações aleatórias ($\mathbf{Z}_{ij}\mathbf{b}_{ij}$) das curvas individuais e também a existência de variações aleatórias de medidas ($\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$), que são independentes dos efeitos aleatórios individuais ($\mathbf{b}_{ij}$) (LIMA, 1996).

A inclusão de efeito aleatório a um coeficiente da curva de regressão média pode ser sugerida numa avaliação visual dos gráficos de perfis individuais. A Figura 1 apresenta panoramas ilustrativos em que se propõe o ajuste de um polinômio de segundo grau para explicar o comportamento da resposta média a um tratamento ao longo dos níveis do fator longitudinal e a inclusão de efeito aleatório ao intercepto, coeficiente de primeiro grau, ou coeficiente de segundo grau.

As matrizes $\mathbf{Z}_{ij}$ podem conter quaisquer covariáveis que afetem diferentemente as unidades experimentais, e a forma de especificação das matrizes $\mathbf{X}_{ij}$ é bastante similar àquela utilizada nos modelos de regressão. As colunas de $\mathbf{X}_{ij}$ podem estar associadas aos fatores que definem a estrutura das subpopulações (tratamentos); ao fator

Figura 1 – Ilustrações sugerindo a inclusão de efeito aleatório no (a) intercepto, (b) coeficiente de primeiro grau e (c) coeficiente de segundo grau da curva de regressão - dados hipotéticos

longitudinal, identificando a forma da curva a ser ajustada, por exemplo, e aos efeitos das covariáveis na resposta média.

2.3.1 Análise exploratória

Uma análise descritiva preliminar do conjunto de dados longitudinais pode sugerir modelos para os efeitos fixos e aleatórios. Rao e Rao (1966), Pinheiro e Bates (2000), dentre outros, representaram num mesmo gráfico todos os perfis individuais de respostas, unindo as observações tomadas em cada indivíduo por meio de segmentos de reta. Esses gráficos, chamados de diagramas paralelos de dispersão (*parallel plots*), servem para detectar a presença de indivíduos com observações discrepantes, ou mesmo, indivíduos associados a perfis discrepantes e podem sugerir um modelo tanto para a resposta média quanto a necessidade de inclusão de efeitos aleatórios (Figura 2) (RUTTER; ELASHOFF, 1994¹ apud LIMA, 1996).

¹RUTTER, C.M.; ELASHOFF, R.M. Analysis of longitudinal data: random coefficient regression modelling. **Statistics in Medicine**, v.13, p. 1211-1231, 1994.

Figura 2 – Exemplo de perfis médios (a) e perfis individuais (b) de pesos de aves

Weiss e Lazaro (1992² apud LIMA, 1996) propuseram o uso desses gráficos para avaliar os resíduos condicionais, caso em que devem refletir apenas a variabilidade intra-indivíduos. Apesar de serem muito versáteis, pois podem ser construídos mesmo quando os dados são incompletos ou irregulares ao longo do fator longitudinal, Suyama (1995) alertou para o fato que eles nem sempre têm a clareza necessária para a identificação precisa de um modelo de efeitos aleatórios. Pinheiro (2012) indica que sejam feitos gráficos de intervalos de confiança dos parâmetros da parte fixa do modelo para cada indivíduo para sugerir em quais parâmetros devem ser incluídos efeitos aleatórios.

2.3.2 Inferência estatística

Segundo Camarinha Filho (2002), um dos problemas centrais do ajuste dos modelos mistos a um conjunto de observações é a estimação dos componentes de variância e covariâncias dos efeitos aleatórios e qual a metodologia mais adequada para estimação dos efeitos fixos.

Em geral, a seleção de modelos está ligada à possibilidade de se estimarem parâmetros associados às definições do modelo ou de se predizer o comportamento das

²WEISS, R.E.; LAZARO, C.G. Residual plots for repeated measures. **Statistics in Medicine**, v.11, p.115-124, 1992.

suas variáveis aleatórias para um dado conjunto de observações. Segundo o mesmo autor, isso ocorre, na verdade, devido as esperanças de efeitos fixos e variâncias populacionais de variáveis aleatórias serem estimáveis, enquanto que as variáveis aleatórias podem ser preditas, mas não estimadas, uma vez que não possuem valor fixo.

Assim, no uso de modelos fixos, devem-se estimar os próprios efeitos fixos, enquanto que os modelos aleatórios prestam-se para estimar os componentes de variância (das variáveis aleatórias), bem como para a predição das próprias variáveis aleatórias. Dessa forma, os modelos mistos podem servir para a estimação de médias de um modo mais preciso, uma vez que deve-se levar em conta a influência dos componentes de variância que podem ser estimados pelo modelo, ou ainda para a predição, servindo de base para o processo de seleção de modelos.

Os parâmetros desconhecidos de $\mathbf{G}$ e $\mathbf{R}_{ij}$ no modelo (8) compõem o vetor $\boldsymbol{\theta}$ e são estimados com base no método da máxima verossimilhança.

Para a totalidade das observações, o modelo (6) pode ser escrito como:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{b} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (9)$$

em que, os vetores $\mathbf{y}$ ($rab \times 1$), $\mathbf{b}$ ($raq \times 1$) e $\boldsymbol{\varepsilon}$ ($rab \times 1$) são construídos empilhando-se os vetores $\mathbf{y}_{ij}$, $\mathbf{b}_{ij}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$, respectivamente; $\mathbf{X}$ ($rab \times p$) é obtida empilhando-se as matrizes $\mathbf{X}_{ij}$, e a matriz $\mathbf{Z} = \text{diag}[\mathbf{Z}_{11}, \mathbf{Z}_{12}, \dots, \mathbf{Z}_{ra}]$ ($rab \times raq$).

Como $\mathbf{b}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}$ têm distribuições normais com médias nulas e

$$\text{cov} \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \boldsymbol{\varepsilon} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

a matriz de variâncias e covariâncias do vetor de observações, $\mathbf{y}$, é dada por:

$$\mathbf{V} = \mathbf{Z}\mathbf{W}\mathbf{Z}^t + \mathbf{R}, \quad (11)$$

sendo, $\mathbf{W} = \text{diag}[\mathbf{G}, \mathbf{G}, \dots, \mathbf{G}]$ ($raq \times raq$) e $\mathbf{R} = \text{diag}[\mathbf{R}_{11}, \mathbf{R}_{12}, \dots, \mathbf{R}_{ra}]$ ($rab \times rab$).

Quando as matrizes $\mathbf{W}$ e $\mathbf{R}$ são conhecidas, as expressões para o estimador de $\boldsymbol{\beta}$ e o preditor de $\mathbf{b}$ podem ser escritas como

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = [\mathbf{X}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}]^{-1}\mathbf{X}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y} \quad (12)$$

$$\widehat{\mathbf{b}} = \mathbf{WZ}^t\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}). \quad (13)$$

Neste caso, $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ é o melhor estimador não viesado (BLUE) de $\boldsymbol{\beta}$ e $\widehat{\mathbf{b}}$ é o melhor preditor não viesado (BLUP) de $\mathbf{b}$ (McLEAN; SANDERS; STROUP, 1991). Porém, na maioria das vezes o vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ é desconhecido e para estimá-lo pode ser utilizada a teoria da máxima verossimilhança. Menos duas vezes o logaritmo da função de verossimilhança do modelo (6) é escrito como

$$-2\ell(\mathbf{y}; \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\theta}) = rab \log(2\pi) + \log |\mathbf{V}| + (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^t \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}). \quad (14)$$

Minimizando esta expressão analiticamente para $\boldsymbol{\beta}$, obtém-se o estimador

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}) = [\mathbf{X}^t \mathbf{V}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}) \mathbf{X}]^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{V}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}) \mathbf{y} \quad (15)$$

que substituindo em (14), produz menos duas vezes o perfil de verossimilhança de $\widehat{\boldsymbol{\theta}}$, que pode ser escrito da forma

$$-2\ell(\mathbf{y}; \widehat{\boldsymbol{\theta}}) = rab \log(2\pi) + \log |\mathbf{V}(\widehat{\boldsymbol{\theta}})| + [\mathbf{y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\widehat{\boldsymbol{\theta}})]^t \mathbf{V}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}) [\mathbf{y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\widehat{\boldsymbol{\theta}})]. \quad (16)$$

Camarinha Filho (2002) cita duas desvantagens do método de estimação da máxima verossimilhança para estimação dos componentes de variância: (a) não consideram a perda de graus de liberdade resultante da estimação dos parâmetros de efeitos fixos do modelo; (b) são deduzidos sob a suposição de uma particular forma paramétrica, geralmente normal, para a distribuição do vetor de dados.

O primeiro desses problemas pode, de fato, ser eliminado pelo método da máxima verossimilhança restrita (PATTERSON; THOMPSON, 1971). Em relação ao segundo problema, Harville (1977) mostra que os estimadores de máxima verossimilhança, deduzidos com base na normalidade, podem ser perfeitamente adaptados quando a forma da distribuição não for especificada.

Os estimadores obtidos pelo método de máxima verossimilhança restrita com dados balanceados são idênticos aos estimadores ANOVA que são não-viesados e de variância mínima. Searle (1987) e Searle, Casella e McCulloch (1992) ressaltam que, sob normalidade, os estimadores de máxima verossimilhança restrita além de idênticos aos estimadores ANOVA, podem ser obtidos de forma analítica.

No método da máxima verossimilhança restrita, a função de verossimilhança é fatorada em duas partes independentes, uma referente aos efeitos fixos e outras aos efeitos aleatórios, sendo assim, uma delas é totalmente livre dos efeitos fixos, de maneira que a função densidade de probabilidade das observações é dada pela soma das funções densidade de probabilidade de cada parte (PATTERSON; THOMPSON, 1971). Camarinha Filho (2002) comenta que a maximização da função densidade de probabilidade referente aos efeitos aleatórios, em relação aos componentes de variância, elimina o viés resultante da perda de graus de liberdade na estimação dos efeitos fixos do modelo. Essa verossimilhança é chamada de máxima verossimilhança restrita ou residual. Restrita no sentido de que se refere somente a matriz $\mathbf{V}$ e residual por estar associada à matriz dos resíduos, $\mathbf{R}$.

O método MVR foi introduzido por Patterson e Thompson (1971) como um método de estimação de componentes de variância no contexto de delineamentos desbalanceados em blocos incompletos. Posteriormente, Harville (1977) e Verbyla e Cullis (1990) contribuíram com derivações alternativas e mais gerais do método.

Alcarde (2012) comenta que este método leva em consideração o número de graus de liberdade envolvidos na estimação dos parâmetros fixos do modelo no processo de estimação de $\boldsymbol{\theta}$. A fórmula para menos duas vezes o logaritmo da função de verossimilhança restrita ou residual é

$$-2\ell_R(\mathbf{y}; \boldsymbol{\theta}) = a(rb - p) \log(2\pi) + \log |\mathbf{V}(\boldsymbol{\theta})| + [\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\theta})]^t \mathbf{V}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) [\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\theta})] + \log |\mathbf{X}^t \mathbf{V}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{X}| \quad (17)$$

sendo ap o posto da matriz $\mathbf{X}$.

Obtidas as estimativas de MV ou de MVR de $\boldsymbol{\theta}$ e conseqüentemente de $\mathbf{W}$ e $\mathbf{R}$, os parâmetros $\boldsymbol{\beta}$ e $\mathbf{b}$ são estimados e preditos, respectivamente, resolvendo-se o sistema de equações do modelo misto (HENDERSON, 1984):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{X} & \mathbf{X}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{X} & \mathbf{Z}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{Z} + \hat{\mathbf{W}}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\beta}} \\ \hat{\mathbf{b}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{y} \\ \mathbf{Z}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{y} \end{bmatrix} \quad (18)$$

e uma solução deste sistema de equações é

$$\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\beta}} \\ \hat{\mathbf{b}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\mathbf{X}^t \hat{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \hat{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{y} \\ \hat{\mathbf{W}} \mathbf{Z}^t \hat{\mathbf{V}}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}) \end{bmatrix} \quad (19)$$

$$= \hat{\mathbf{C}} \begin{bmatrix} \mathbf{X}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{y} \\ \mathbf{Z}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{y} \end{bmatrix},$$

em que,

$$\hat{\mathbf{C}} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{X} & \mathbf{X}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{X} & \mathbf{Z}^t \hat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{Z} + \hat{\mathbf{W}}^{-1} \end{bmatrix}^{-1}. \quad (20)$$

Schaalje *et al.* (1991) propõem um procedimento alternativo para a estimação dos parâmetros, em que os métodos de mínimos quadrados ordinários e mínimos quadrados generalizados são utilizados em três etapas para ajustar um modelo linear a dados longitudinais gerados por planejamentos casualizados em blocos, considerados de efeito aleatório.

Nas situações em que não existem soluções explícitas para os estimadores de máxima verossimilhança (MV) ou de máxima verossimilhança restrita (MVR) de $\boldsymbol{\theta}$, as estimativas correspondentes são obtidas por meio de processos iterativos. Denotando-se por $\boldsymbol{\Phi}$ o conjunto de m parâmetros que se deseja estimar e por $\ell(\boldsymbol{\Phi})$ o logaritmo da função de verossimilhança, os processos iterativos para encontrar o valor $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$ que maximiza $\ell(\boldsymbol{\Phi})$ têm, geralmente, a forma $\boldsymbol{\Phi}^{(w+1)} = f(\boldsymbol{\Phi}^{(w)})$ para $w = 0, 1, \dots$, em que w denota a ordem da iteração, f é uma função que depende do processo iterativo empregado e $\boldsymbol{\Phi}^{(0)}$ é um valor inicial do conjunto de parâmetros que deve ser fornecido no início do processo (LIMA, 1996).

Segundo Barbosa (2009), para encontrar a melhor estrutura aleatória aos dados, deve-se utilizar o método de estimação da máxima verossimilhança restrita (MVR), pois ao invés de otimizar diretamente a verossimilhança das observações, este método otimiza a integral da verossimilhança dos resíduos. Em outras palavras, ignora qualquer informação prévia sobre os efeitos fixos e utiliza todos os dados para fazer as inferências. Esta alteração garante, pelo menos nos casos balanceados, que os parâmetros de efeito aleatório sejam estimados sem viés, e por essa razão, o estimador de máxima verossimilhança restrita é, geralmente, preferido em modelos lineares mistos, contendo todas as informações sobre os parâmetros de variância.

2.3.3 Estruturas de covariâncias

Nos estudos em que estão envolvidos fatores longitudinais, espera-se que a correlação entre observações feitas em uma mesma unidade experimental decresça à

medida que a distância entre duas medidas repetidas aumente. Alternativas naturais à estrutura completamente parametrizada são aquelas associadas às séries temporais (BOX; JENKINS; REINSEL, 1994; MORETTIN; TOLOI, 2004). Logo, as estruturas associadas aos processos AR(1) (autoregressivos de primeira ordem) e MA (médias móveis) são especialmente úteis quando há um número pequeno de unidades experimentais e um número grande de observações repetidas na mesma unidade, devido a sua parametrização parcimoniosa. Estruturas de covariâncias utilizando modelos autoregressivos de médias móveis (ARMA) para situações que envolvem dados incompletos foram estudadas por Rochon e Helms (1989) e Geary (1989).

A estrutura ideal para a matriz de covariâncias depende da maneira pela qual as observações foram obtidas e do conhecimento sobre o mecanismo gerador das observações. Diggle (1988) comentou que a matriz de covariâncias deve ser suficientemente flexível para incluir, no mínimo, três fontes diferentes de variação aleatória, nomeadamente:

- (i) a variação devida aos efeitos aleatórios, quando as unidades de investigação formam uma amostra aleatória da população de interesse;
- (ii) a variação que pode ser explicada por correlação serial, em que se esperam observações próximas mais fortemente correlacionadas que observações mais distantes e
- (iii) a variação devida a erros de medida.

De acordo com Singer, Nobre e Rocha (2012), no contexto dos modelos mistos, a covariância entre as observações obtidas em uma mesma unidade amostral pode ser modelada indiretamente por meio dos efeitos aleatórios, $\mathbf{b}_{ij}$, que representam a variabilidade entre as unidades amostrais; diretamente pela matriz $\mathbf{R}_{ij}$, que representa as covariâncias das observações intra-unidades amostrais como nos modelos lineares usuais; ou ainda, como uma combinação de $\mathbf{b}_{ij}$ e $\mathbf{R}_{ij}$, permitindo deste modo incluir na estrutura de covariâncias as três fontes de variação: os efeitos aleatórios na matriz $\mathbf{G}$, a variação devida a erros de medida e a correlação serial na matriz $\mathbf{R}_{ij}$.

Diferentes estruturas de matriz positiva definida podem ser usadas para representar a matriz de covariância $\mathbf{G}$, de efeitos aleatórios com a função `lme()` da biblioteca `nlme` que estão organizados em diferentes códigos na classe `pdMat` no programa R (R CORE TEAM, 2013). Algumas dessas estruturas estão listadas na Tabela 2.

Tabela 2 – Classes de estruturas das matrizes de covariância (pdMat) positivas definidas disponíveis na biblioteca nlme do R

Classe	Descrição
pdSymm	Positiva-definida geral
pdDiag	Diagonal
pdIdent	Múltipla da identidade
pdCompSymm	Simetria composta
pdBlocked	Bloco diagonal

Fonte: Pinheiro e Bates (2000)

A estrutura da matriz de covariâncias intra-indivíduo, $\mathbf{R}_{ij}$, pode ser flexivelmente modelada usando uma combinação das estruturas de correlação, com as funções de variância $\mathbf{V}_{ij}$, que são organizadas nas classes `corStruct` e `varFunc`, respectivamente, da função `lme()` da biblioteca `nlme`. As Tabelas 3 e 4 listam as classes mais usuais para cada uma delas.

Tabela 3 – Classes das funções de variância (varFunc) disponíveis na biblioteca nlme do R

Classe	Descrição
varExp	Exponencial da covariante da variância
varPower	Potência da covariante da variância
varConstPower	Constante somada a uma potência da covariante de variância
varIdent	Diferentes variâncias por níveis de um fator
varFixed	Pesos fixos, determinado por covariante de variância
varComb	Combinação de funções de variância

Fonte: Pinheiro e Bates (2000)

Tabela 4 – Classes das estruturas de correlação (corStruct) disponíveis na biblioteca nlme do R

Classe	Descrição
corAR1	AR(1)
corARMA	ARMA(p,q)
corCAR1	AR(1) contínua
corCompSymm	Simetria Composta
corExp	Exponencial - correlação espacial
corGauss	Gaussiana - correlação espacial
corLin	Linear - correlação espacial
corRation	Quadrática Racional-correlação espacial
corSpher	Esférica - correlação espacial
corSymm	Matriz de correlação geral

Fonte: Pinheiro e Bates (2000)

Algumas das estruturas mais utilizadas para as matrizes de covariâncias $\mathbf{G}$ e $\mathbf{R}_i$ e que se encontram implementadas no `proc mixed` do SAS® (*Statistical Analysis System*) são apresentadas na Tabela 5.

Tabela 5 – Algumas das estruturas de covariâncias disponíveis no proc mixed do SAS

Estrutura	Descrição	Nº de Parâmetros	(i, j) -ésimo elemento
AR(1)	Autoregressiva(1)	2	$\sigma^2 \rho^{ i-j }$
ARH(1)	Heterogênea AR(1)	$t + 1$	$\sigma_i \sigma_j \rho^{ i-j }$
CS	Simetria Composta	2	$\sigma_1^2 + \sigma^2 I(i = j)$
CSH	CS Heterogênea	$t + 1$	$\sigma_i \sigma_j [\rho I(i \neq j) + I(i = j)]$
HF	Huynh-Feldt	$t + 1$	$(\sigma_i^2 + \sigma_j^2)/2 + \lambda I(i \neq j)$
UN	Não Estruturada	$t(t + 1)/2$	σ_{ij}
UN(q)	Banda	$\frac{q}{2}(2t - q + 1)$	$\sigma_{ij} 1(i - j < q)$
VC	Componentes de Variância	1	$\sigma_k^2 I(i = j)$ i corresponde ao k -ésimo efeito

Fonte: SAS Institute Inc. (2008) - User's Guide The MIXED Procedure

Nota: Nesta tabela, t corresponde ao número de níveis do fator longitudinal. $I(.) = 1$ quando o argumento $(.)$ é verdadeiro e $I(.) = 0$ caso contrário.

O interesse está na descrição funcional simples do comportamento médio da variável resposta ao longo dos níveis do fator longitudinal (LIMA, 1996), bem como, busca-se uma estrutura de covariâncias com menos parâmetros que a estrutura (5), para explicar a variabilidade entre as respostas observadas na mesma unidade experimental.

Enquanto nos estudos com medidas repetidas a escolha dos modelos para a estrutura de covariâncias intra-unidades amostrais depende de informações sobre o tipo de estudo, seu planejamento (balanceado ou não) e se existem dados omissos ou não, por outro lado, nos estudos longitudinais, é mais razoável utilizar informações sobre o comportamento da resposta ao longo das condições de avaliação na modelagem da estrutura de covariâncias intra-unidades amostrais.

Singer, Nobre e Rocha (2012) sugeriram a seguinte estratégia para a identificação da estrutura de covariâncias intra-unidades amostrais para estudos longitudinais.

1. Análise do gráfico de perfis médios para propor um modelo para os efeitos fixos;
2. Análise dos gráficos de perfis individuais e de perfis individuais centralizados para identificar padrões que indiquem possíveis efeitos aleatórios e heterocedasticidade ao longo das condições de avaliação;
3. Análise das matrizes de covariâncias e correlações intra-unidades amostrais, quando for possível calculá-las, para identificar seus padrões de variação.
4. Análise da matriz de gráficos de dispersão das observações padronizadas quando for possível construí-los;

5. Análise de gráficos de linhas das matrizes de covariâncias e correlações amostrais versus defasagens;
6. Análise do variograma amostral proposto por Diggle *et al.* (2002);
7. No caso de dados longitudinais completos, análise do gráfico das linhas da matriz de covariâncias intra-unidades amostrais por meio de técnicas de regressão polinomial para a identificação de efeitos aleatórios;
8. No caso de dados longitudinais incompletos, análise dos perfis individuais por meio de técnicas de regressão polinomial para a identificação de efeitos aleatórios;
9. Utilização dos critérios de informação como ferramenta auxiliar para seleção das estruturas de covariâncias intra-unidades amostrais identificadas;
10. Análise de resíduos.

2.3.4 Seleção de modelo

Suyama (1995) buscou identificar os efeitos aleatórios a partir de diagramas paralelos de dispersão das linhas da matriz de dispersão amostral dos dados. Após a identificação de alguns modelos para os efeitos fixos e aleatórios, testes estatísticos podem ser usados para selecionar o modelo mais adequado.

O teste de Wald é utilizado para avaliar a significância dos efeitos fixos do modelo. A estatística para testar $H_0: \mathbf{C}\boldsymbol{\beta} = 0$, em que $\mathbf{C}$ ($c \times p$) é uma matriz de constantes conhecidas e de posto completo c ($c \leq p$) é escrita como:

$$\mathbf{Q}_c = (\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}})^t [\mathbf{C} \widehat{cov}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}) \mathbf{C}^t]^{-1} (\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}),$$

sendo $\widehat{cov}(\widehat{\boldsymbol{\beta}})$ uma estimativa da matriz de covariâncias de $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ dada por:

$$cov(\widehat{\boldsymbol{\beta}}) = \left(\sum_{ij} \mathbf{X}_{ij}^t \mathbf{V}_{ij}^{-1} \mathbf{X}_{ij} \right)^{-1} \quad (21)$$

Sob H_0 a estatística $\mathbf{Q}_c$ tem distribuição assintótica χ_c^2 . Dividindo $\mathbf{Q}_c$ por c , obtém-se uma outra estatística que tem distribuição F com c e $abr - posto(\mathbf{X})$ graus de liberdade (LIMA, 1996; BARBOSA, 2009).

Segundo Verbeke e Molenberghs (2000), o teste Wald não é adequado para uso com modelos lineares mistos que são especificados condicionalmente aos efeitos aleatórios $\mathbf{b}_{ij}$. O teste não leva em conta a estimação dos parâmetros de efeito aleatório e pode subestimar a variação dos efeitos fixos.

Um teste alternativo para os parâmetros de covariâncias é o teste- z de Wald. Segundo West, Welch e Galecki (2007), este teste é assintótico e exige que o fator com o qual os efeitos aleatórios estão associados tenha um grande número de níveis. Este teste estatístico também apresenta propriedades desfavoráveis quando testa hipóteses sobre parâmetros de covariâncias, que assumem valores nos limites do seu espaço paramétrico. Por exemplo: quando é testada a inclusão de um efeito aleatório no modelo, a hipótese da nulidade (H_0) impõe que a variância deste efeito aleatório seja nula. Não se admite valores negativos para a estatística de teste. Devido a esses inconvenientes, Verbeke e Molenberghs (2000), West, Welch e Galecki (2007), dentre outros autores, sugeriram que ao invés da utilização do teste- z de Wald para os parâmetros de covariâncias, recomenda-se a utilização do teste da razão de verossimilhanças (TRV). Quando o valor assumido pela hipótese se encontra no limite do espaço paramétrico, a estatística do teste se aproxima de uma mistura de distribuições χ^2 e o nível de significância do teste (*valor - p*) é calculado por:

$$valor - p = 0,5 \times P(\chi_{H_0}^2 > TRV) + 0,5 \times P(\chi_{H_1}^2 > TRV), \quad (22)$$

sendo $\chi_{H_0}^2$ e $\chi_{H_1}^2$ os quantis da distribuição qui-quadrado com números de graus de liberdade dados pelos números de efeitos aleatórios dos modelos sob as hipóteses H_0 e H_1 , respectivamente, e TRV é o valor calculado da razão de verossimilhanças.

Quando o espaço paramétrico de um modelo é um subconjunto do espaço paramétrico de outro modelo, diz-se que o primeiro está aninhado ou encaixado no segundo. Estes modelos são considerados com estruturas hierárquicas. Sendo assim, o teste da razão de verossimilhanças pode ser utilizado para selecionar tanto os efeitos fixos quanto os aleatórios em modelos hierárquicos ou encaixados (SUYAMA, 1995), por meio da comparação de modelos mais simples com modelos mais gerais.

Observe-se que os resultados desses testes devem ser encarados sob um ponto de vista exploratório e não sob uma ótica inferencial, pois as estatísticas a eles relacionadas têm propriedades assintóticas (ANDRADE; SINGER, 1986).

Segundo Schluchter (1992³ apud LIMA, 1996), quando se utiliza o método de estimação por meio da MVR, não deve ser utilizado o teste da razão de verossimilhanças para os efeitos fixos, pois durante o processo de estimação, os efeitos fixos são excluídos da verossimilhança maximizada.

Para a seleção de efeitos fixos e aleatórios, quando os modelos não estão encaixados, Wolfinger (1993), Verbeke e Molenberghs (2000), West, Welch e Galecki (2007), dentre outros autores propuseram a utilização dos Critérios de Informação de Akaike (AKAIKE, 1974) e Bayesiano (SCHWARZ, 1978). Estes critérios baseiam-se na teoria da decisão e consideram no seu cálculo, o logaritmo natural da função de verossimilhança (restrita ou não) e o número de parâmetros do modelo ajustado aos dados e são definidos como:

$$AIC = -2\ell(\mathbf{y}; \boldsymbol{\theta}) + 2d$$

$$BIC = -2\ell(\mathbf{y}; \boldsymbol{\theta}) + d\log(n)$$

em que $\ell(\mathbf{y}; \boldsymbol{\theta})$ é o logaritmo natural da função de verossimilhança calculada com as estimativas dos parâmetros em $\boldsymbol{\theta}$, d é o número total de parâmetros de efeitos fixos e aleatórios sendo estimados e preditos, respectivamente, e n é o número de observações.

Alcarde (2012) comentou que valores baixos para os critérios AIC e BIC são considerados como representativos de um melhor ajuste e o modelo que apresenta o menor valor de AIC (ou BIC) será considerado o melhor dentre os modelos não encaixados. Vale salientar que, segundo Freitas (2007), o critério BIC penaliza os modelos com maior número de parâmetros e que nem sempre os dois critérios concordam na indicação do melhor modelo. A autora disse ainda que a performance do AIC é superior à do BIC para identificar o melhor modelo.

2.3.4.1 Estratégias para seleção de modelos

O principal objetivo do processo de seleção de modelos é escolher aquele mais simples (que tenha menor número de parâmetros) e que forneça o melhor ajuste aos dados observados. Como na maioria das vezes não se conhece o modelo teórico que explica o comportamento dos perfis médios de respostas e indica a real estrutura de covariâncias,

³SCHLUCHTER, M.D. Likelihood-based methods for the analysis of continuous longitudinal data. IN: **Meeting of Western North American Region of the Biometrics Society and the Institute of Mathematical Statistics**, 1992. Corvallis, Oregon, 1992.

a construção de um modelo linear misto adequado passa pelo ajuste de uma série de modelos com estruturas diferentes para a parte fixa e para a parte aleatória do modelo.

A seguir, são apresentadas duas estratégias utilizadas na seleção do melhor modelo.

2.3.4.1.1 Top-down

A estratégia *top-down* (VERBEKE; MOLENBERGHS, 2000) é iniciada com o ajuste do modelo maximal para os termos de efeitos fixos possíveis e de interesse (e interações) com o intuito de explicar bem a variação sistemática nas respostas antes de investigar as várias estruturas de covariâncias para descrever a variação aleatória dos dados.

Na sequência, deve-se buscar uma estrutura para os efeitos aleatórios a serem incluídos no modelo, ou seja, a melhor estrutura para a matriz de variâncias e covariâncias $\mathbf{G}$. Essa seleção dos componentes de variância pode ser auxiliada pelos testes apresentados na Seção 2.3.4.

Uma vez ajustado o modelo maximal para o componente sistemático e selecionados os termos aleatórios, o restante da variabilidade é devida ao erro experimental intra-indivíduos. Assim, uma estrutura apropriada para a matriz de variâncias e covariâncias $\mathbf{R}$ deve ser selecionada.

Em seguida, deve-se reduzir o modelo, utilizando os testes estatísticos ou critérios de informação apresentados na Seção 2.3.4 para verificar se certos parâmetros de efeito fixo são necessários ao modelo, restando somente efeitos fixos significativos.

2.3.4.1.2 Step-up

A estratégia *step-up* (WEST; WELCH; GALECKI, 2007) inicia com o ajuste de um modelo contendo somente o efeito da média geral para a parte fixa. Para a parte aleatória, sugere a inclusão de todos os possíveis termos de efeitos aleatórios, bem como efeitos dos termos não aleatorizados, como o efeito de blocos. Em seguida são incluídos no modelo efeitos de covariáveis, de fatores de tratamento e efeitos aleatórios associados a eles.

A importância da manutenção desses efeitos no modelo é testada utilizando os testes ou os critérios de informação apresentados na Seção 2.3.4.

2.3.5 Diagnóstico dos resíduos

A verificação das pressuposições associadas aos modelos estocásticos ajustados a dados longitudinais é bastante importante embora, na prática, seja de difícil execução. Para que a distribuição das observações tenha uma especificação correta, os estimadores de máxima verossimilhança devem ser consistentes e assintoticamente eficientes. Com objetivo de avaliar a normalidade dos dados, Dempster e Ryan (1985) propuseram o uso de gráficos de probabilidade normais ponderados (*weighted normal plots*). Já para a normalidade dos efeitos aleatórios, Lange e Ryan (1989) propuseram que esta seja verificada com o uso de um teste baseado na comparação entre as funções de distribuição empírica e teórica das suas estimativas.

Sendo confirmada a normalidade aproximada dos dados, a identificação de indivíduos com observações (ou associados a curvas) aberrantes pode ser feita utilizando-se os diagramas paralelos de dispersão (LIMA, 1996). Waternaux, Laird e Ware (1989) utilizaram as distâncias de Mahalanobis entre os vetores de resíduos individuais e a origem para identificar tais observações discrepantes. Segundo Liski (1991), medidas baseadas na estatística Traço de Hotelling-Lawley são úteis para detectar a influência de subconjuntos (unitários ou não) de medidas aberrantes nos modelos mistos de análise de variância. Rutter e Elashoff (1994 apud LIMA, 1996) sugeriram avaliar as diferenças nos valores dos parâmetros estimados e no logaritmo da verossimilhança entre as análises com e sem a presença dos indivíduos com observações (ou associados a curvas) aberrantes.

Segundo Singer, Nobre e Rocha (2012), a verificação das pressuposições assumidas pelo modelo selecionado pode ser concretizada por meio de algumas técnicas de diagnóstico que englobam a avaliação do ajuste e a análise de sensibilidade que objetiva estudar a variação dos resultados da análise quando a formulação inicial do modelo é ligeiramente modificada. Se esta variação for “substancial” no sentido de mudar as conclusões, diz-se que o modelo não é robusto. Nesse caso, as conclusões devem ser tomadas de forma cautelosa, ou então deve-se optar por outro modelo.

West, Welch e Galecki (2007) utilizaram várias técnicas formais e informais, como a construção de gráficos dos resíduos. Comentaram, ainda, que a análise de diagnóstico em modelos lineares mistos é mais complexa que dos modelos lineares clássicos, devido a presença de efeitos aleatórios e diferentes estruturas de covariâncias.

2.3.6 Tipos de resíduos

Autores como Verbeke e Lesaffre (1997) e Pinheiro e Bates (2000) estenderam a definição de resíduos para modelar a variabilidade em três tipos de resíduos para acomodar a fonte de variabilidade extra presente nos modelos lineares mistos:

- i) Resíduos marginais: $\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$, que predizem os erros marginais $\mathbf{e} = \mathbf{y} - E(\mathbf{y})$;
- ii) Resíduos condicionais: $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{b}}$, que predizem os erros condicionais $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - E(\mathbf{y}|\mathbf{b})$;
- iii) BLUP (*best linear unbiased predictor*), melhor preditor não viesado: $\mathbf{Z}\hat{\mathbf{b}}$, que prediz os efeitos aleatórios $\mathbf{Zb} = E(\mathbf{y}|\mathbf{b}) - E(\mathbf{y})$.

Cada tipo de resíduo é indicado para avaliar alguma suposição do modelo (6), como indicado na Tabela 6.

Tabela 6 – Usos de resíduos para fins de diagnóstico

Diagnóstico para	Tipo de resíduo	Gráfico
Linearidade dos efeitos ($E[\mathbf{y}] = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$)	Marginal	$\hat{\mathbf{e}}_{ij}$ versus Variáveis explicativas
Presença de observações discrepantes	Condicional	$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{ij}^*$ versus Índices das observações
Homogeneidade dos erros condicionais ($\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$)	Condicional	$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{ij}^*$ versus Valores ajustados
Normalidade dos erros condicionais ($\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$)	Condicional	Quantil-quantil da distribuição normal para os resíduos condicionais padronizados
Normalidade dos efeitos aleatórios ($\mathbf{b}_{ij}$)	EBLUP	Quantil-quantil ponderados da distribuição normal para ($\mathbf{b}_{ij}$)

Fonte: Nobre e Singer (2007)

Geralmente, resíduos condicionais em sua forma básica não são os mais adequados para verificar as suposições do modelo e detectar pontos atípicos (*outliers*). Mesmo que os resíduos do verdadeiro modelo sejam não correlacionados e tenham variância homogênea, os resíduos condicionais tenderão a ser correlacionados e suas variâncias podem ser diferentes para diferentes grupos de indivíduos (WEST; WELCH; GALECKI, 2007).

2.3.6.1 Resíduos padronizados, estudentizados e de Pearson

Para evitar problemas com a interpretação de resíduos condicionais que podem ter variâncias diferentes, seus valores são divididos por seus desvios padrões verdadeiros ou estimados. Como os verdadeiros desvios padrões são raramente conhecidos, na

prática, os resíduos padronizados (*standardized*) são obtidos com os desvios padrões estimados, chamados de resíduos estudentizados (*studentized*) (WEST; WELCH; GALECKI, 2007).

A divisão dos resíduos pela estimativa do desvio padrão da variável dependente resulta nos resíduos de Pearson. Segundo os mesmos autores, esse tipo de resíduos é apropriado se for assumido que a variabilidade dos parâmetros de efeitos fixos pode ser ignorada.

Segundo sugestão feita por Nobre e Singer (2007), utiliza-se o gráfico de quantis normais (*Q-Q plot*) com envelope simulado para estudar a normalidade dos erros condicionais padronizados. A presença de observações atípicas é avaliada num gráfico desses resíduos *versus* os índices das observações. A homocedasticidade dos resíduos condicionais padronizados é avaliada no gráfico desses erros *versus* os valores ajustados pelo modelo. Estes e alguns outros estudos para validar o modelo selecionado estão resumidos na Tabela 6, em que, os $\hat{\epsilon}_{ij}^*$ são os resíduos condicionais padronizados e os EBLUP são os BLUPs empíricos dos efeitos aleatórios.

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Material

3.1.1 Massa seca de raiz de cana-de-açúcar

O conjunto de dados analisado no presente trabalho é referente a uma parte dos que constam na dissertação de Otto (2007) e são provenientes de experimentos com cana-de-açúcar realizados na Usina Santa Adélia, localizada em Jaboticabal, SP.

Cada parcela experimental foi constituída de 48 sulcos espaçados em 150 cm, com 15 m de comprimento, totalizando 1.080 m² por parcela. O delineamento experimental foi casualizado em blocos com 4 tratamentos, referente às doses de 40, 80 e 120 kg ha⁻¹ N aplicado na forma de uréia no sulco de plantio, além de uma testemunha (sem N mineral), com 4 repetições.

A variável resposta observada é a massa seca de raiz de cana-de-açúcar (MSR), em g dm⁻³. Para coletar as amostras de solo, foi utilizada uma sonda cujo diâmetro interno é 5,5 cm. As amostras foram peneiradas (malha de 2 mm), secas em estufa e obtida a massa seca. As observações foram tomadas em julho de 2006 antes do corte da cana.

A MSR foi avaliada sobre a linha de plantio e a 30 e 60 cm dela, tanto à direita como à esquerda (Local: 0, 30 e 60) e também em duas profundidades (Profundidade: 0 a 30 cm e 30 a 60 cm), conforme a Figura 3.

Figura 3 – Ilustração da coleta das amostras de solo para a cana-planta

Os 32 perfis individuais de MSR separados por nível de Profundidade (16 para a Profundidade 0-30 cm e 16 para a Profundidade 30-60 cm) estão representados na Figura 4.

Figura 4 – Perfis individuais da massa seca de raiz da cana da Profundidade 0-30 cm (a) e Profundidade 30-60 cm (b)

Pode-se observar na Figura 4 uma maior variabilidade na massa seca de raiz de cana-de-açúcar na Profundidade 0-30 cm e na linha de plantio ($\text{Local} = 0$). Observa-se também que existe uma diminuição da MSR à medida que aumenta a distância da linha de plantio. Com relação a variabilidade, nota-se uma diminuição à medida que aumenta a distância da linha de plantio.

3.2 Métodos

Inicialmente, deve ser realizada uma análise exploratória dos dados do experimento, buscando identificar possíveis variabilidades nos efeitos dos fatores, bem como possíveis diferenças nas médias dos mesmos.

Para verificar a condição de esfericidade das matrizes de covariâncias entre as combinações dos níveis dos dois fatores longitudinais é realizado o teste de Mauchly. Diante da significância deste, deve-se considerar a forma não estruturada (UN) para a matriz de covariâncias. Esta possui $b(b+1)/2$ parâmetros, sendo b o número de níveis do fator longitudinal. Para o caso do conjunto de dados de MSR, $b = 6$ e a estrutura UN tem 21 parâmetros.

Como alternativa à forma UN, são utilizados os modelos mistos que admitem matrizes de covariâncias diferentes para cada unidade experimental, como aquelas

apresentadas na Seção 2.3.3.

3.2.1 Efeitos fixos e aleatórios

No processo de estabelecimento dos efeitos fixos e aleatórios que comporão o modelo misto será utilizada a estratégia *top-down*. Na definição do modelo maximal para a parte fixa propõe-se a análise dos gráficos de perfis das respostas para cada nível do fator longitudinal qualitativo, ao longo dos níveis do fator longitudinal quantitativo. Esta análise deverá sugerir o grau do polinômio que será adotado para todas as combinações de níveis do fator de tratamento e do fator longitudinal qualitativo.

A análise deste gráfico de perfis também poderá sugerir a inclusão de efeito aleatório em alguns dos coeficientes de regressão, como descrito na Seção 2.3. Porém, o processo de escolha dos efeitos aleatórios e da respectiva estrutura de covariâncias, iniciou-se com a inclusão de efeito aleatório a todos os coeficientes da curva polinomial e uma estrutura de covariâncias completamente parametrizada.

O modelo maximal (parte fixa) utilizado no estudo dos dados de massa seca da raiz (MSR, g dm⁻³), pode ser escrito como:

$$E(y_{ijkl}) = B_i + \beta_{0jk} + \beta_{1jk}Local_{jkl} + \beta_{2jk}Local_{jkl}^2, \quad (23)$$

para $i = 1, 2, 3, 4$; $j = 1, 2, 3, 4$; $k = 1, 2$ e $l = 1, 2, 3$, em que

$E(y_{ijkl})$ é a média de MSR da parcela, no i -ésimo Bloco, que recebeu a j -ésima Dose de nitrogênio, na k -ésima Profundidade e l -ésimo Local;

B_i é o efeito fixo do i -ésimo bloco;

β_{0jk} é o intercepto da parábola associada às parcelas que receberam a j -ésima Dose de nitrogênio e foram avaliadas na k -ésima Profundidade;

β_{1jk} é o coeficiente de primeiro grau da parábola associada às parcelas que receberam a j -ésima Dose de nitrogênio e foram avaliadas na k -ésima Profundidade;

β_{2jk} é o coeficiente de segundo grau da parábola associada às parcelas que receberam a j -ésima Dose de nitrogênio e foram avaliadas na k -ésima Profundidade.

Nesta notação: $Local_{jkl} = 0$ se $l = 1$; $Local_{jkl} = 30$ se $l = 2$ e $Local_{jkl} = 60$ se $l = 3$, para todas as combinações (j, k) .

O modelo 23 indica o ajuste de $4 \times 2 = 8$ parábolas distintas, correspondendo às combinações dos 4 níveis de Dose e 2 níveis de Profundidade. Ele pressupõe a existência de interação entre os níveis desses dois fatores e essa hipótese será testada oportunamente.

3.2.2 Estruturas de covariâncias adaptadas

Como o presente trabalho envolve a análise de dados com dois fatores longitudinais, é preciso uma adaptação nas estruturas de covariâncias mais comuns, de maneira a possibilitar a existência de estruturas mais complexas. Além da heterogeneidade de variâncias, é necessário admitir a presença de correlações entre os níveis de cada fator e também entre os níveis dos dois fatores longitudinais, ou seja, interação significativa entre os fatores. Por exemplo: pode existir uma correlação negativa entre as medidas de MSR feitas em profundidades diferentes e também uma correlação positiva entre as medidas de MSR feitas em uma profundidade e em diferentes distâncias da linha de plantio, que é um indício de interação entre os níveis dos dois fatores longitudinais.

A matriz de dispersão marginal ($\mathbf{V}_{ij}$) definida em (8) pode ser modelada por meio da especificação de efeitos aleatórios ($\mathbf{Z}_{ij}$), com sua correspondente estrutura de covariância entre indivíduos ($\mathbf{G}$), e da especificação de uma estrutura para as medidas intra indivíduos ($\mathbf{R}_{ij}$). Usualmente o processo inicia-se com a escolha dos efeitos aleatórios a serem incorporados ao modelo, admitindo $\mathbf{R}_{ij} = \sigma^2 \mathbf{I}$. Nesta fase consegue-se modelar a correlação (positiva) entre as unidades experimentais e a heterogeneidade de variâncias. Visando um melhor ajuste à estrutura de variâncias e correlações amostrais, o processo é finalizado verificando-se a necessidade de uma estrutura mais complexa para a matriz $\mathbf{R}_{ij}$.

A seguir são apresentadas algumas estruturas interessantes para a matriz de covariâncias intra-indivíduos ($\mathbf{R}_{ij}$), adaptadas para o caso de dois fatores longitudinais. Essas estruturas foram definidas admitindo-se que os três níveis dos Locais (segundo fator longitudinal) variam dentro de cada um dos dois níveis de Profundidades (primeiro fator longitudinal).

Tais estruturas foram obtidas utilizando os argumentos das classes `pdMat`, `varFunc` e `corStruct` da função `lme` da biblioteca `nlme` (PINHEIRO; BATES, 2000) do programa R (R CORE TEAM, 2013), mas dependendo das características de variabilidade e de correlação dos dados outras estruturas podem ser criadas.

1) Componentes de variância (VC) com heterogeneidade:

Impõe que as variâncias são diferentes nas duas profundidades e que as variâncias nos três locais avaliados na mesma profundidade são iguais. Envolve 2 parâmetros.

$$VCH = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_1^2 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_1^2 & | & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & | & \sigma_2^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$$

2) Simetria composta (CS) com heterogeneidade:

Impõe variâncias iguais nos diferentes locais avaliados na mesma profundidade, variâncias diferentes nas duas profundidades, covariâncias iguais entre as profundidades em diferentes locais e correlação igual entre as profundidades. Envolve 4 parâmetros.

$$CSH = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_1^2\rho & \sigma_1^2\rho & | & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho \\ \sigma_1^2\rho & \sigma_1^2 & \sigma_1^2\rho & | & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho \\ \sigma_1^2\rho & \sigma_1^2\rho & \sigma_1^2 & | & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho \\ \hline \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & | & \sigma_2^2 & \sigma_2^2\rho & \sigma_2^2\rho \\ \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & | & \sigma_2^2\rho & \sigma_2^2 & \sigma_2^2\rho \\ \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho & | & \sigma_2^2\rho & \sigma_2^2\rho & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$$

3) Não estruturada ou completamente parametrizada (UN):

Impõe variâncias diferentes em todas as combinações de níveis de local e profundidade e covariâncias diferentes entre cada uma dessas combinações. Envolve 21 parâmetros.

$$UN = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \sigma_{13} & | & \sigma_{14} & \sigma_{15} & \sigma_{16} \\ \sigma_{12} & \sigma_2^2 & \sigma_{23} & | & \sigma_{24} & \sigma_{25} & \sigma_{26} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_3^2 & | & \sigma_{34} & \sigma_{35} & \sigma_{36} \\ \hline \sigma_{14} & \sigma_{24} & \sigma_{34} & | & \sigma_4^2 & \sigma_{45} & \sigma_{46} \\ \sigma_{15} & \sigma_{25} & \sigma_{35} & | & \sigma_{45} & \sigma_5^2 & \sigma_{56} \\ \sigma_{16} & \sigma_{26} & \sigma_{36} & | & \sigma_{46} & \sigma_{56} & \sigma_6^2 \end{pmatrix}$$

4) Autorregressiva de 1ª ordem (AR(1)):

Impõe variâncias iguais para os diferentes locais em cada profundidade, variâncias diferentes entre as profundidades, covariâncias iguais entre as profundidades para os diferentes locais e correlação decrescente com o aumento do intervalo entre os níveis dos fatores longitudinais. Envolve 4 parâmetros.

$$AR(1) = \left(\begin{array}{ccc|ccc} \sigma_1^2 & \sigma_1^2\rho & \sigma_1^2\rho^2 & \sigma_{12}\rho^3 & \sigma_{12}\rho^4 & \sigma_{12}\rho^5 \\ \sigma_1^2\rho & \sigma_1^2 & \sigma_1^2\rho & \sigma_{12}\rho^2 & \sigma_{12}\rho^3 & \sigma_{12}\rho^4 \\ \sigma_1^2\rho^2 & \sigma_1^2\rho & \sigma_1^2 & \sigma_{12}\rho & \sigma_{12}\rho^2 & \sigma_{12}\rho^3 \\ \hline \sigma_{12}\rho^3 & \sigma_{12}\rho^2 & \sigma_{12}\rho & \sigma_2^2 & \sigma_2^2\rho & \sigma_2^2\rho^2 \\ \sigma_{12}\rho^4 & \sigma_{12}\rho^3 & \sigma_{12}\rho^2 & \sigma_2^2\rho & \sigma_2^2 & \sigma_2^2\rho \\ \sigma_{12}\rho^5 & \sigma_{12}\rho^4 & \sigma_{12}\rho^3 & \sigma_2^2\rho^2 & \sigma_2^2\rho & \sigma_2^2 \end{array} \right)$$

3.2.3 Métodos de estimação e de seleção

No processo de escolha da parte aleatória do modelo misto, utilizou-se o método da máxima verossimilhança restrita na estimação dos parâmetros dos modelos, porque a parte fixa do modelo foi mantida inalterada.

Modelos com estruturas encaixadas de efeitos aleatórios foram comparados utilizando o teste da razão de verossimilhanças (TRV) e os critérios de informação de Akaike (AIC) e Bayesiano (BIC). Somente esses dois critérios de informação foram utilizados na seleção de modelos, quando os modelos não apresentaram estruturas encaixadas (BARBOSA, 2009). Para os casos de comparações em que os parâmetros se encontram na fronteira do espaço paramétrico, a estatística do TRV segue uma mistura de χ^2 e o nível de significância do teste foi calculado por (22).

3.2.4 Estimação e seleção dos efeitos fixos

Após a escolha da parte aleatória do modelo misto, ajusta-se o modelo maximal para a parte fixa utilizando o método da máxima verossimilhança (MV). A significância dos seus parâmetros pode ser testada pelo teste de Wald, pelo TRV ou pelos critérios AIC e BIC, se os modelos estiverem encaixados. O TRV não é indicado na comparação envolvendo modelos não encaixados. Contrastes mais complexos envolvendo os níveis do fator de tratamento serão testados pelo teste de Wald.

O processo de seleção dos efeitos fixos é encerrado quando se conseguir um modelo parcimonioso, que consiga explicar com um menor número de parâmetros todas as características importantes do fenômeno em estudo.

O processo de escolha do modelo só finaliza após o retorno à fase de seleção dos efeitos aleatórios, para verificar se a seleção inicial precisa ser alterada, face às escolhas feitas na parte fixa do modelo.

3.2.5 Diagnóstico do ajuste

O diagnóstico dos modelos ajustados é feito, basicamente, por meio de métodos gráficos. Uma boa qualidade de ajuste é alcançada quando os pontos do gráfico dos valores preditos versus valores observados estão próximos de uma reta com inclinação de 45° passando pela origem do gráfico.

Os resíduos, em geral, no processo de modelagem estatística têm uma relação importante com a qualidade do ajuste do modelo selecionado, constituindo uma das etapas no processo de escolha do modelo adequado. São úteis para indicar a presença de heterogeneidade de variâncias, a presença de pontos aberrantes, que poderão ser influentes ou não, a normalidade desses resíduos também pode ser verificada por meio de gráficos, como gráfico de quantil-quantil da Normal e o histograma (ver Tabela 6). A suposição de normalidade também foi verificada com o uso do teste não-paramétrico de Shapiro-Wilk.

Por fim, foram feitos os gráficos com as observações, as curvas médias e as curvas com os efeitos aleatórios para verificar se o modelo selecionado está bem ajustado aos dados observados.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Massa seca de raiz (MSR) de cana-de-açúcar

4.1.1 Análise exploratória

Avaliando as estatísticas descritivas da massa seca de raiz (Tabela 7) para os fatores de efeito principal pode-se perceber que:

- a média e o desvio padrão da MSR nas doses 0 e 80 kg ha⁻¹ de N-uréia foram muito próximas e inferiores às respostas das doses 40 e 120 kg ha⁻¹;
- a média da MSR e o desvio padrão diminuem com o aumento da profundidade ou da distância da linha de plantio (local).

Tabela 7 – Valores médios e desvios padrão de MSR (g dm⁻³) das Doses de Nitrogênio (kg ha⁻¹), das Profundidades (cm) e dos Locais (cm)

	Doses				Profundidades		Locais		
	0	40	80	120	0-30	30-60	0	30	60
Média	0,35	0,62	0,37	0,48	0,65	0,26	0,97	0,27	0,12
Desvio Padrão	0,43	0,84	0,41	0,64	0,79	0,21	0,82	0,16	0,07

Na Tabela 8 encontram-se evidências para o uso de modelos mistos, uma vez que as variâncias parecem diferir, pois são maiores na primeira profundidade e no primeiro local e parece haver correlação não nula entre os níveis do mesmo fator longitudinal e entre níveis dos dois fatores. Alguns destes aspectos são observados nos perfis individuais de MSR apresentados na Figura 4 (Seção 3.1.1), que indicam a necessidade de inclusão de efeito aleatório no intercepto das curvas a serem ajustadas aos perfis médios. Os perfis individuais da Figura 4(a) indicam uma nítida tendência quadrática da MSR em função do aumento dos níveis de locais e que este comportamento não é tão nítido na Figura 4(b).

Tabela 8 – Variâncias (diagonal), covariâncias (abaixo da diagonal) e correlações (acima da diagonal) amostrais, de massa seca de raiz da cana, por profundidade e local

		Profundidade 0-30			Profundidade 30-60		
		Local 0	Local 30	Local 60	Local 0	Local 30	Local 60
Prof 0-30	Local 0	0,904	-0,043	0,462	0,546	0,398	0,222
	Local 30	-0,007	0,028	0,405	0,469	0,397	0,053
	Local 60	0,033	0,005	0,006	0,554	0,546	0,147
Prof 30-60	Local 0	0,083	0,013	0,007	0,026	0,354	0,060
	Local 30	0,035	0,006	0,004	0,005	0,009	-0,095
	Local 60	0,012	0,001	0,001	0,001	-0,001	0,003

O teste de Mauchly resultou significativo ($p < 0,05$) indicando que a matriz de covariâncias associadas às combinações dos níveis dos dois fatores longitudinais não tem uma estrutura esférica, portanto, não deve ser utilizada a abordagem univariada.

4.1.2 Efeitos aleatórios - matriz **G**

Para iniciar o processo de escolha da estrutura aleatória, considerou-se a estrutura maximal para os efeitos fixos apresentada em (23), com polinômios de 2º grau para cada combinação dos quatro níveis de dose (0, 40, 80 e 120 kg ha⁻¹ de N-uréia) e os dois níveis de profundidade (0-30cm e 30-60cm).

Apesar da indicação de inclusão de efeito aleatório ao intercepto das curvas, por meio da Figura 4, testou-se também a inclusão de efeitos aleatórios aos outros parâmetros das curvas, como indicado na Tabela 9.

Tabela 9 – Estruturas iniciais para os efeitos aleatórios, considerando a estrutura maximal para efeitos fixos, para dados de MSR de cana

Modelo	Efeitos Aleatórios
<i>m1</i>	Prof ₀₋₃₀ , Prof ₃₀₋₆₀ , Prof ₀₋₃₀ ×Local, Prof ₃₀₋₆₀ ×Local, Prof ₀₋₃₀ ×Local ² e Prof ₃₀₋₆₀ ×Local ²
<i>m2</i>	Prof ₀₋₃₀ , Prof ₃₀₋₆₀ , Prof ₀₋₃₀ ×Local, Prof ₃₀₋₆₀ ×Local e Prof ₀₋₃₀ ×Local ²
<i>m3</i>	Prof ₀₋₃₀ , Prof ₃₀₋₆₀ , Prof ₀₋₃₀ ×Local e Prof ₀₋₃₀ ×Local ²
<i>m4</i>	Prof ₀₋₃₀ , Prof ₀₋₃₀ ×Local e Prof ₀₋₃₀ ×Local ²

As matrizes de covariâncias de efeitos aleatórios (**G**) associadas a esses modelos têm as estruturas apresentadas a seguir, em que *P1* e *P2* substituem as profundidades 0-30 e 30-60, respectivamente; *L* e *L*² substituem os valores de *Local* e de *Local*².

$$\begin{aligned}
\mathbf{G}_{m1} &= \begin{pmatrix} \sigma_{P1}^2 & \sigma_{P1,P2} & \sigma_{P1,P1 \times L} & \sigma_{P1,P2 \times L} & \sigma_{P1,P1 \times L^2} & \sigma_{P1,P2 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P2} & \sigma_{P2}^2 & \sigma_{P2,P1 \times L} & \sigma_{P2,P2 \times L} & \sigma_{P2,P1 \times L^2} & \sigma_{P2,P2 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P1 \times L} & \sigma_{P2,P1 \times L} & \sigma_{P1 \times L}^2 & \sigma_{P1 \times L, P2 \times L} & \sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L, P2 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P2 \times L} & \sigma_{P2,P2 \times L} & \sigma_{P1 \times L, P2 \times L} & \sigma_{P2 \times L}^2 & \sigma_{P2 \times L, P1 \times L^2} & \sigma_{P2 \times L, P2 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P1 \times L^2} & \sigma_{P2,P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2} & \sigma_{P2 \times L, P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L^2}^2 & \sigma_{P1 \times L^2, P2 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P2 \times L^2} & \sigma_{P2,P2 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L, P2 \times L^2} & \sigma_{P2 \times L, P2 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L^2, P2 \times L^2} & \sigma_{P2 \times L^2}^2 \end{pmatrix} \\
\mathbf{G}_{m2} &= \begin{pmatrix} \sigma_{P1}^2 & \sigma_{P1,P2} & \sigma_{P1,P1 \times L} & \sigma_{P1,P2 \times L} & \sigma_{P1,P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P2} & \sigma_{P2}^2 & \sigma_{P2,P1 \times L} & \sigma_{P2,P2 \times L} & \sigma_{P2,P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P1 \times L} & \sigma_{P2,P1 \times L} & \sigma_{P1 \times L}^2 & \sigma_{P1 \times L, P2 \times L} & \sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P2 \times L} & \sigma_{P2,P2 \times L} & \sigma_{P1 \times L, P2 \times L} & \sigma_{P2 \times L}^2 & \sigma_{P2 \times L, P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P1 \times L^2} & \sigma_{P2,P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2} & \sigma_{P2 \times L, P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L^2}^2 \end{pmatrix} \\
\mathbf{G}_{m3} &= \begin{pmatrix} \sigma_{P1}^2 & \sigma_{P1,P2} & \sigma_{P1,P1 \times L} & \sigma_{P1,P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P2} & \sigma_{P2}^2 & \sigma_{P2,P1 \times L} & \sigma_{P2,P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P1 \times L} & \sigma_{P2,P1 \times L} & \sigma_{P1 \times L}^2 & \sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P1 \times L^2} & \sigma_{P2,P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L^2}^2 \end{pmatrix} \\
\mathbf{G}_{m4} &= \begin{pmatrix} \sigma_{P1}^2 & \sigma_{P1,P1 \times L} & \sigma_{P1,P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P1 \times L} & \sigma_{P1 \times L}^2 & \sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2} \\ \sigma_{P1,P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2} & \sigma_{P1 \times L^2}^2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Nesta fase inicial utilizou-se a estrutura $\mathbf{R} = \mathbf{I}\sigma^2$ para a matriz de covariâncias intra-indivíduos. Os modelos foram ajustados utilizando o método da MVR e comparados pelo teste da razão de verossimilhanças (TRV). Os resultados (Tabela 10) foram favoráveis ao modelo $m3$, que propõe efeitos aleatórios para os interceptos das duas curvas ($Prof_{0-30}$ e $Prof_{30-60}$) e para os coeficientes de grau 1 e grau 2 da curva relativa à $Prof_{0-30}$. A análise não indicou a necessidade de incluir efeitos aleatórios aos coeficientes de primeiro e segundo grau da curva relativa a $Prof_{30-60}$, devido à baixa variabilidade das respostas ao longo dos locais.

Tabela 10 – Comparação inicial de modelos visando à inclusão de efeitos aleatórios pelo TRV

Modelo	gl	-2ℓ	Comparação	χ_{calc}^2	valor- p
$m1$	46	107,31			
$m2$	40	112,40	$m1 \times m2$	5,09	0,469
$m3$	35	119,73	$m2 \times m3$	7,33	0,158
$m4$	31	130,98	$m3 \times m4$	11,24	0,017

No cálculo dos níveis descritivos (valores- p) dos testes indicados na Tabela

10 utilizou-se da mistura de distribuições χ^2 (VERBEKE; MOLENBERGHS, 2000). Por exemplo: para testar se o efeito aleatório associado a $Prof_{30-60} \times Local^2$ pode ser omitido do modelo $m1$, os modelos $m1$ e $m2$ são comparados pelo TRV e as hipóteses envolvidas podem ser escritas como:

$$H_0: \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{m2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

$$H_1: \mathbf{G} = \mathbf{G}_{m1}$$

e o nível descritivo é dado por

$$0,5 \times P(\chi_5^2 > 5,09) + 0,5 \times P(\chi_6^2 > 5,09) = 0,469.$$

A estrutura aleatória do modelo $m3$ foi comparada com $m3.1$, que admite que todos os efeitos aleatórios são não correlacionados, ou seja, que as covariâncias da matriz $\mathbf{G}_{m3}$ são nulas, assim,

$$H_0: \mathbf{G} = \text{diag}(\sigma_{P1}^2, \sigma_{P2}^2, \sigma_{P1 \times L}^2, \sigma_{P1 \times L^2}^2)$$

$$H_1: \mathbf{G} = \mathbf{G}_{m3}$$

O nível descritivo associado a este último teste foi favorável à estrutura $\mathbf{G}_{m3}$ (*valor - p* < 0,001), indicando que a covariância entre os interceptos para ambas as profundidades não é desprezível ($\sigma_{P1,P2}$), que as covariâncias entre cada um dos interceptos e os coeficientes de primeiro e segundo graus da profundidade 0-30 cm ($\sigma_{P1,P1 \times L}$, $\sigma_{P2,P1 \times L}$, $\sigma_{P1,P1 \times L^2}$ e $\sigma_{P2,P1 \times L^2}$ também são significativas), bem como a covariância entre os coeficientes linear e quadrático para a profundidade 0-30 cm ($\sigma_{P1 \times L, P1 \times L^2}$).

4.1.3 Matriz de covariâncias ($\mathbf{R}$)

Para auxiliar na escolha de uma estrutura de covariâncias intra-indivíduos mais complexa que $\mathbf{R} = \mathbf{I}\sigma^2$, foram construídos os gráficos dos perfis individuais para cada nível de dose e de profundidade, apresentados na Figura 5.

Todos os gráficos apresentados na Figura 5 sugerem uma heterogeneidade de variâncias da MSR nos diferentes níveis de Profundidade e de Local. Tanto esta variabilidade quanto uma possível correlação não nula entre seus níveis já podem ter

sido explicadas pela inclusão dos efeitos aleatórios. Deve-se testar se há homogeneidade de variâncias nos níveis do fator Local, e se existe diferença de variâncias nos níveis 30 e 60 cm para locais, se existe homogeneidade de variâncias para as diferentes Doses aplicadas, e como sugerido na Tabela 7, testar a homocedasticidade nas Doses 0 e 80 kg ha⁻¹ de N-uréia. Para que essas questões sejam respondidas foram definidas as estruturas apresentadas na Tabela 11.

Figura 5 – Perfis individuais ao longo dos locais de observação, por dose de nitrogênio e por profundidade: (a) 0 kg ha⁻¹ N, (b) 40 kg ha⁻¹ N, (c) 80 kg ha⁻¹ N e (d) 120 kg ha⁻¹ N

Na Tabela 11, a estrutura *m5* sugere somente diferença significativa para os níveis de profundidade. Já a *m6* sugere interação significativa dos níveis de profundidade e Locais. Em *m7*, a sugestão é que os níveis 30 e 60 para Locais sejam homogêneos. Para *m8* sugere que os níveis de Dose diferem para os níveis de Profundidade e os níveis de Locais. Já o modelo *m9* sugere que as doses 0 e 80 sejam iguais e as demais diferentes.

Tabela 11 – Estruturas de covariâncias intra-indivíduos ($\mathbf{R}$) para os dados de MSR de cana

Modelo	Variâncias	Nº parâmetros da matriz $\mathbf{R}$
$m5$	$diag(\sigma_{P1}^2, \sigma_{P1}^2, \sigma_{P1}^2, \sigma_{P2}^2, \sigma_{P2}^2, \sigma_{P2}^2)$	2
$m6$	$diag(\sigma_{L0,P1}^2, \sigma_{L30,P1}^2, \sigma_{L60,P1}^2, \sigma_{L0,P2}^2, \sigma_{L30,P2}^2, \sigma_{L60,P2}^2)$	6
$m7$	$diag(\sigma_{L0,P1}^2, \sigma_{L3060,P1}^2, \sigma_{L3060,P1}^2, \sigma_{L0,P2}^2, \sigma_{L3060,P2}^2, \sigma_{L3060,P2}^2)$	4
$m8$	$diag(\sigma_{L0,P1}^2, \sigma_{L3060,P1}^2, \sigma_{L3060,P1}^2, \sigma_{L0,P2}^2, \sigma_{L3060,P2}^2, \sigma_{L3060,P2}^2)$ diferente para cada nível de Dose	16
$m9$	$diag(\sigma_{L0,P1}^2, \sigma_{L3060,P1}^2, \sigma_{L3060,P1}^2, \sigma_{L0,P2}^2, \sigma_{L3060,P2}^2, \sigma_{L3060,P2}^2)$ iguais para as doses 0 e 80 e diferentes para os demais níveis	12

A Tabela 12 apresenta os resultados das comparações dos modelos descritos na Tabela 11, com o modelo $m3$ escolhido na seção anterior. Desses resultados pode-se concluir que:

- Dentre as estruturas encaixadas ($m3$, $m5$ e $m6$) o TRV indicou a escolha da estrutura $m6$, que propõe variâncias diferentes em cada profundidade e em cada local.
- A comparação dos modelos $m6$ e $m7$, que não são encaixados, foi favorável ao modelo $m7$, que apresentou os menores valores de AIC e BIC.
- A comparação das estruturas $m7$ e $m8$ pelo TRV foi favorável à estrutura $m7$, permitindo concluir que os dados de MSR para as diferentes doses apresentam variâncias iguais.
- A comparação das estruturas $m7$ e $m9$ pelos valores de AIC e BIC foi favorável ao modelo $m7$, confirmando que as variâncias da MSR nas diferentes doses foram consideradas iguais.

Tabela 12 – Comparação dos modelos $m3$, $m5$, $m6$, $m7$, $m8$ e $m9$ pelo TRV e pelos critérios de informação AIC e BIC

Modelo	gl	AIC	BIC	-2ℓ	Comparação	χ_{calc}^2	valor- p
$m3$	35	189,73	269,42	119,73			
$m5$	36	188,88	270,84	116,88	$m3 \times m5$	2,86	0,091
$m6$	38	187,58	274,10	111,58	$m3 \times m6$	8,15	0,043
$m7$	37	187,16	271,39	113,16	$m6 \times m7$	1,57	0,210
$m8$	40	192,22	283,29	112,22	$m7 \times m8$	0,93	0,818
$m9$	39	190,67	279,46	112,66	$m7 \times m9$	0,49	0,782

Outras estruturas intra-indivíduos mais simples (CS, AR(1)) ou mais complexa (UN) foram comparadas com a estrutura diagonal com heterogeneidade (diag c/het) do modelo $m7$ (Tabela 13), mas todas as comparações foram favoráveis à estrutura $m7$, que tem um número menor de parâmetros.

Tabela 13 – Comparação dos modelos $m7$, $m10$, $m11$ e $m12$ pelo teste da razão de verossimilhanças (TRV) para dados de MSR de cana

Estrutura	Modelo	gl	AIC	BIC	-2ℓ	Comparação	χ^2_{calc}	valor- p
diag c/ het	$m7$	37	187,16	271,39	113,16			
AR(1)	$m10$	38	187,28	273,79	111,28	$m7 \times m10$	1,886	0,171
CS	$m11$	38	188,48	275,00	112,49	$m7 \times m11$	0,671	0,413
UN	$m12$	52	211,38	329,77	107,38	$m7 \times m12$	5,773	0,983

Finalizando esta etapa do processo de escolha da melhor estrutura de covariâncias, escolheu-se a estrutura $\mathbf{G}_{m7}$ para os efeitos aleatórios e uma matriz de covariâncias intra-unidades ($\mathbf{R}_{ij}$) diagonal e com heterogeneidade de variâncias entre as duas profundidades e variâncias iguais para as medidas feitas a 30 e 60 cm da linha de plantio.

4.1.4 Efeitos fixos

Para verificar a igualdade dos coeficientes de regressão do modelo fixo maximal, com a estrutura de covariâncias escolhida na seção anterior ($\mathbf{G} = \mathbf{G}_{m3}$ e $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_{m7}$) utilizou-se o teste de Wald, com o modelo ajustado pelo método da máxima verossimilhança (MV). A partir dos resultados apresentados na Tabela 14 pode-se concluir que os coeficientes de regressão de graus 0, 1 e 2 do modelo maximal são significativamente ($p < 0,05$) não nulos.

Tabela 14 – Teste de Wald para os parâmetros de efeito fixo do modelo maximal ($m7$)

Coeficientes de regressão	gl numerador	gl denominador	F	valor- p
Dose $\times$ Prof ₀₋₃₀	4	57	12,134	<0,001
Dose $\times$ Prof ₃₀₋₆₀	4	57	19,262	<0,001
Dose $\times$ Prof ₀₋₃₀ $\times$ Local	4	57	55,786	<0,001
Dose $\times$ Prof ₃₀₋₆₀ $\times$ Local	4	57	33,253	<0,001
Dose $\times$ Prof ₀₋₃₀ $\times$ Local ²	4	57	3,005	0,0255
Dose $\times$ Prof ₃₀₋₆₀ $\times$ Local ²	4	57	6,131	0,0004

A Tabela 15 apresenta as equações de regressão ajustadas que explicam o comportamento médio da MSR ao longo dos Locais, para cada combinação de níveis dos

fatores dose e profundidade.

Tabela 15 – Equações para os perfis médios ajustados para o modelo $m7$ - dados de MSR de cana

Profundidade	Dose	Equação
0-30	0	$\hat{y} = 1,182 - 0,046Local + 0,0005Local^2$
	40	$\hat{y} = 2,150 - 0,081Local + 0,0008Local^2$
	80	$\hat{y} = 1,066 - 0,039Local + 0,0004Local^2$
	120	$\hat{y} = 1,352 - 0,039Local + 0,0003Local^2$
30-60	0	$\hat{y} = 0,342 - 0,008Local + 0,00007Local^2$
	40	$\hat{y} = 0,595 - 0,016Local + 0,00013Local^2$
	80	$\hat{y} = 0,475 - 0,014Local + 0,00012Local^2$
	120	$\hat{y} = 0,607 - 0,020Local + 0,00018Local^2$

Uma avaliação visual das curvas ajustadas (Figura 6) sugere que seja testada a igualdade das curvas referentes às quatro doses para a $Prof_{30-60}$.

Figura 6 – Curvas de regressão estimadas para as diferentes doses e profundidades - dados de MSR de cana

Pode-se observar na Figura 6(a) que as curvas médias para as Doses 0 e 80 foram muito próximas sugerindo que seja testada a igualdade das mesmas (Dose1). Além dessa igualdade, também sugere-se que a igualdade das curvas médias para as Doses 40 e 120 seja testada (Dose2). Pode-se testar também, o grau das curvas para a Profundidade 30-60 cm.

Na Tabela 16 estão as estruturas que foram comparadas na sequência da análise. Essas comparações se encontram na Tabela 17.

Tabela 16 – Estruturas dos efeitos fixos para testar igualdade de médias das Doses

Modelo	Efeitos Fixos
<i>m13</i>	$\text{Dose} \times \text{Prof}_{0-30} + \text{Dose} \times \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local} + \text{Dose} \times \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local}^2 + \text{Prof}_{30-60} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local}^2$
<i>m14</i>	$\text{Prof}_{0-30} + \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local} + \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local}^2 + \text{Prof}_{30-60} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local}^2$
<i>m15</i>	$\text{Dose1} \times \text{Prof}_{0-30} + \text{Dose1} \times \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local} + \text{Dose1} \times \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local}^2 + \text{Prof}_{30-60} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local}^2$
<i>m16</i>	$\text{Dose2} \times \text{Prof}_{0-30} + \text{Dose2} \times \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local} + \text{Dose2} \times \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local}^2 + \text{Prof}_{30-60} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local}^2$
<i>m17</i>	$\text{Dose2} \times \text{Prof}_{0-30} + \text{Dose2} \times \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local} + \text{Dose2} \times \text{Prof}_{0-30} \times \text{Local}^2 + \text{Prof}_{30-60} + \text{Prof}_{30-60} \times \text{Local}$

Tabela 17 – Medidas da qualidade do ajuste dos modelos *m7*, *m13*, *m14*, *m15*, *m16* e *m17*

Modelo	gl	AIC	BIC	-2ℓ	Comparação	χ^2_{calc}	valor- <i>p</i>
<i>m7</i>	37	-78,36	16,53	-152,36			
<i>m13</i>	28	-82,70	-10,89	-138,70	<i>m7</i> $\times$ <i>m13</i>	13,66	0,135
<i>m14</i>	19	-81,25	-32,52	-119,25	<i>m13</i> $\times$ <i>m14</i>	19,45	0,021
<i>m15</i>	25	-85,78	-21,68	-135,78	<i>m13</i> $\times$ <i>m15</i>	2,913	0,405
<i>m16</i>	22	-89,56	-33,14	-135,56	<i>m15</i> $\times$ <i>m16</i>	2,226	0,527
<i>m17</i>	21	-74,23	-20,37	-116,23	<i>m16</i> $\times$ <i>m17</i>	17,33	<0,001

Os resultados das comparações apresentadas na Tabela 17 mostram que a comparação da estrutura *m13* que ajusta uma curva para cada um dos quatro níveis de Doses para a *Prof*₀₋₃₀, e apenas um curva para a *Prof*₃₀₋₆₀ com a estrutura *m7*, que considera uma curva para cada nível de Dose e para cada nível de Profundidade, pelos critérios de informação, tem-se que os coeficientes de graus 0, 1 e 2, para essa profundidade, não diferem significativamente entre si.

Na sequência, ajustou-se a estrutura *m14*, em que considera somente uma curva para a *Prof*₀₋₃₀. Comparando *m13* com *m14*, tem-se que a igualdade dos coeficientes de graus 0, 1 e 2 das quatro curvas para a *Prof*₀₋₃₀ não deve ser considerada, pois pelo AIC indica que o modelo *m13* se ajusta melhor que o *m14*, já pelo BIC, por este penalizar o modelo com maior número de parâmetros, o melhor ajuste é para o *m14*. Portanto, para que se possa comparar as igualdades das médias de combinações dos níveis das Doses, considerou-se que a estrutura *m14* foi rejeitada pelo AIC.

Logo, a estrutura *m13* foi comparada à estrutura *m15*, em que considera igualdade dos coeficientes das curvas referentes às Doses 0 e 80 kg ha⁻¹ N para a *Prof*₀₋₃₀.

Nesta comparação, tem-se que a igualdade dessas duas curvas deve ser considerada, uma vez que os critérios AIC e BIC indicaram que a estrutura $m15$ tem um melhor ajuste em relação à $m13$.

Assim, comparou-se a estrutura $m15$ à $m16$ em que, além da igualdade das curvas referentes às Doses 0 e 80, a última considera também, a igualdade das curvas referentes às Doses 40 e 120 kg ha⁻¹ N para a $Prof_{0-30}$. Por esta comparação, segundo os critérios AIC e BIC, tem-se somente duas curvas para a $Prof_{0-30}$ e apenas uma para a $Prof_{30-60}$.

Ainda, testou-se a significância do coeficiente quadrático para a $Prof_{30-60}$ ($m16$) em relação a uma reta ($m17$). Nessa comparação, resultou que o coeficiente quadrático é significativo ao modelo, portanto, a estrutura $m16$ é a que se ajusta melhor aos dados de MSR.

Para verificar se a estrutura aleatória precisa ser modificada, os modelos apresentados na Tabela 18 foram comparados com $m16$ (Tabela 19).

Tabela 18 – Estruturas para confirmar significância dos efeitos aleatórios ajustados aos dados de MSR de cana

Modelo	Efeitos Aleatórios
$m18$	$Prof_{0-30}$, $Prof_{30-60}$, $Prof_{0-30} \times Local$, $Prof_{30-60} \times Local$ e $Prof_{0-30} \times Local^2$
$m19$	$Prof_{0-30}$, $Prof_{30-60}$, $Prof_{0-30} \times Local$, $Prof_{0-30} \times Local^2$ e $Prof_{30-60} \times Local^2$
$m20$	$Prof_{0-30}$, $Prof_{30-60}$ e $Prof_{0-30} \times Local^2$
$m21$	$Prof_{0-30}$, $Prof_{30-60}$ e $Prof_{0-30} \times Local$

Tabela 19 – Comparação dos modelos $m16$, $m18$, $m19$, $m20$ e $m21$ pelo teste da razão de verossimilhanças (TRV)

Modelo	gl	AIC	BIC	-2ℓ	Comparação	χ^2_{calc}	valor- p
$m16$	22	15,69	69,94	-28,31			
$m18$	27	18,44	85,02	-35,56	$m16 \times m18$	7,25	0,205
$m19$	27	18,37	84,95	-35,63	$m16 \times m19$	7,33	0,197
$m20$	18	44,63	89,01	8,63	$m16 \times m20$	36,93	<0,001
$m21$	18	44,64	89,03	8,64	$m16 \times m21$	36,95	<0,001

Uma vez que os modelos $m18$, $m19$, $m20$ e $m21$ são todos encaixados em $m16$, tem-se que pelo TRV da Tabela 19 que o modelo $m16$ continua sendo o que melhor se ajusta aos dados de MSR. As estimativas dos parâmetros para este modelo são apresentadas em (24), a matriz dos efeitos aleatórios $\mathbf{G}$ em (25) e a matriz de covariâncias intra-indivíduos ($\mathbf{R}_{ij}$) em (26).

$$\hat{y} = \begin{cases} 1,26 - 0,05Local + 0,0005Local^2, & Dose = 0 \text{ ou } 80 \text{ kg ha}^{-1} \text{ N, Profundidade } 0 - 30 \text{ cm} \\ 1,62 - 0,05Local + 0,0005Local^2, & Dose = 40 \text{ ou } 120 \text{ kg ha}^{-1} \text{ N, Profundidade } 0 - 30 \text{ cm} \\ 0,51 - 0,01Local + 0,0001Local^2, & \text{Profundidade } 30 - 60 \text{ cm} \end{cases} \quad (24)$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 0,852 & 0,024 & -0,046 & 0,0005 \\ 0,024 & 0,002 & -0,001 & 0,00001 \\ -0,046 & -0,001 & 0,002 & -0,00003 \\ 0,0005 & 0,00001 & -0,00003 & 0,0000003 \end{pmatrix} \quad (25)$$

Pela comparação $m16 \times m21$ da Tabela 19, tem-se que os valores para o coeficiente quadrático em (25) são significativos ao modelo.

$$\mathbf{R}_{ij} = diag \left(0,012, 0,002, 0,002, 0,022, 0,004, 0,004 \right). \quad (26)$$

4.1.5 Diagnóstico do modelo selecionado - $m16$

Na Figura 7 observa-se que os pontos estão muito próximos a reta, o que significa que os valores observados e ajustados estão muito próximos, ilustrando o bom ajuste desse modelo aos dados.

Nesta mesma Figura pode-se observar ainda, que existe uma concentração maior de pontos próximos à origem. Isto se deve ao fato de que há mais pontos com menor massa seca de raiz de cana e poucos pontos com maior MSR de cana.

Figura 7 – Ajuste do modelo $m16$ aos dados de MSR de cana

Na Figura 8 estão mostrados os gráficos de diagnóstico de resíduos. No gráfico 8(a), observa-se novamente o que foi citado. Há uma maior variação na amplitude

dos resíduos condicionais padronizados para os valores preditos mais próximos de zero. Porém, não há nenhum ponto fora da faixa de -3 a 3 . No gráfico 8(b) pode-se observar que não há pontos discrepantes (*outliers*).

Com relação a normalidade, observa-se nos gráficos 8(c) e 8(d) que os resíduos condicionais padronizados do modelo selecionado ($m16$) se aproximam bem da distribuição normal, o que é confirmado pelo valor- $p = 0,221$ do teste de Shapiro-Wilk.

Na Figura 9 pode-se observar que na Profundidade mais superficial, ou seja, $Prof_{0-30}$, as Doses de nitrogênio que resultam num maior MSR de cana são as 40 e 120 kg ha $^{-1}$ N. Na $Prof_{30-60}$ a curva ficou abaixo das duas curvas referentes à $Prof_{0-30}$, indicando que independentemente da dose de nitrogênio aplicada, a MSR de cana é sempre menor quanto maior a Profundidade. Pode-se observar também que a partir da linha de plantio a MSR diminui mais acentuadamente na $Prof_{0-30}$ e que além de 30 cm da linha de plantio, a MSR é praticamente a mesma nas duas profundidades e para as quatro doses de nitrogênio.

Pode-se notar na Figura 10 que a estrutura selecionada captou bem a variabilidade dos dados, indicando que o uso de modelos lineares mistos também explicou bem o comportamento da resposta média e das respostas individuais.

Figura 8 – Gráficos de diagnósticos dos resíduos condicionais padronizados

Figura 9 – Curvas quadráticas médias ajustadas para os dois níveis de Dose2 para $Prof_{0-30}$ e uma para $Prof_{30-60}$, para o modelo selecionado (m16)

Figura 10 – Observações, curvas médias e curvas individuais - m_{16} , (a) Doses 0 e 80 iguais e Profundidade 0-30 cm, (b) Doses 40 e 120 iguais e Profundidade 0-30 cm, (c) Doses 0, 40, 80 e 120 iguais Profundidade 30-60 cm

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Diante dos resultados apresentados podem ser feitas as seguintes considerações:

O uso de modelos lineares mistos na análise dos dados de massa seca de raiz, de um experimento envolvendo dois fatores longitudinais, foi bastante efetivo, pois conseguiu explicar bem o comportamento da resposta média e a estrutura complexa de correlações entre os níveis desses fatores e de variâncias heterogêneas.

A análise dos dispositivos gráficos utilizados na análise descritiva inicial serviu para indicar a inclusão de efeitos aleatórios e os modelos adequados para explicar o comportamento da resposta média.

As funções da biblioteca `nlme` do pacote `R` foram muito importantes na análise, proporcionando o ajuste dos diversos modelos, a comparação entre eles e a construção de gráficos de ótima qualidade, utilizados nos diagnósticos.

REFERÊNCIAS

- AKAIKE, H. A New Look at the Statistical Model Identification. **IEEE Transactions on automatic control**, New York, v. 19, n. 6, p. 716-723, Dec. 1974.
- ALCARDE, R. **Modelos lineares mistos em dados longitudinais com o uso do pacote ASReml-R**. 2012. 156 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2012.
- ANDRADE, D.F.; SINGER, J.M. **Análise de dados longitudinais**. In: SIMPÓSIO NACIONAL DE PROBABILIDADE E ESTATÍSTICA, 7., 1986, Campinas. Anais... Campinas: ABE, 1986. 106 p.
- BARBOSA, M. **Uma abordagem para análise de dados com medidas repetidas utilizando modelos lineares mistos**. 2009. 118 p. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2009.
- BOX, G.E.P.; JENKINS, G.M.; REINSEL, G. **Time Series Analysis: Forecasting and Control** 3rd ed. Englewood Cliffs: Prentice Hall. 1994. 598 p.
- CAMARINHA FILHO, J.A. **Modelos lineares mistos: estruturas de matrizes de variâncias e covariâncias e seleção de modelos**. 2002. 85 p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2002.
- COSTA, S.C. **Modelos lineares generalizados mistos para dados longitudinais**. 2003. 110 p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2003.
- CROWDER, M.J.; HAND, J. **Analysis of repeated measures**. London: Chapman & Hall, 1990. 257 p.
- DEMPSTER, A.P.; RYAN, L.M. Weighted normal plots. **Journal of the American Statistical Association**, Boston, V. 80, n. 392, p. 845-850, Dec., 1985.
- DIGGLE, P.J. An approach to the analysis of repeated measurements. **Biometrics**, Washington, V. 44, n. 4, p. 959-971, Dec., 1988.
- DIGGLE, P.J.; HEAGERTY, P.; LIANG, K.Y.; ZEGER, S.L. **Analysis of longitudinal data**. 2nd ed., Oxford: Oxford University Press, 2002. 379 p.
- FREITAS, E.G. **Análise de dados longitudinais em experimentos com cana-de-açúcar**. 2007. 74 p. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2007.
- GEARY, D.N. Modelling the covariance structure of repeated measurements. **Biometrics**, Washington, v. 45, n. 4, p. 1183-1195, Dec., 1989.
- HARVILLE, D.A. Maximum Likelihood Approaches to Variance Component Estimation and to Related Problems. **Journal of the American Statistical Association**, Alexandria, v. 72, n. 358, p. 320-338, Jun 1977.

- HENDERSON, C.R. **Applications of Linear Models in Animal Breeding**. Guelph: University of Guelph, 1984.
- HUYNH, H.; FELDT, L.S. Conditions under which mean square ratios in repeated measurements designs have exact F-distributions. **Journal of the American Statistical Association**, Boston, v. 65, n. 332, p. 1582-1589, Dec., 1970.
- LAIRD, N.M.; WARE, J.H. Random-effects models for longitudinal data. **Biometrics**, Washington, v. 38, n. 4, p. 963-974, Dec., 1982.
- LANGE, N.; RYAN, L. Assessing normality in random effects models. **The Annals of Statistics**, Hayward, v. 17, n. 2, p. 624-642, Jun., 1989.
- LIMA, C.G. **Análise de dados longitudinais provenientes de experimentos em blocos casualizados**. 1996. 126 p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 1996.
- LISKI, E.P. Detecting influential measurements in a growth curve model. **Biometrics**, Washington, v. 47, n. 2, p. 659-668, Jun., 1991.
- MAUCHLY, J.W. Significance test for sphericity of a normal n-variate distribution. **The Annals of Mathematical Statistics**, Berkeley, v. 11, n. 2, p. 204-209, Jun., 1940.
- McLEAN, R.A.; SANDERS, W.L.; STROUP, W.W. A unified approach to mixed linear models. **The American Statistician**, Washington, v. 45, n. 1, p. 54-64, Feb., 1991.
- MILLIKEN, G.A.; JOHNSON, D.E. **Analysis of messy data**. 2nd ed., : Designed Experiments. New York: Chapman & Hall, 2009. v. 1, 690 p.
- MOLENBERGHS G.; VERBEKE, G. **Models for discrete longitudinal data**. New York: Springer-Verlag, 2005. 683 p.
- MORETTIN, P.A.; TOLOI, C.N.C. **Análise de séries temporais**. Edgard Blücher: São Paulo, 2004. 535 p.
- NOBRE, J.S.; SINGER, J.M. Residual Analysis for Linear Mixed Models. **Biometrical Journal**, Weinheim, v. 49, n. 6, p. 863-875, Jan., 2007.
- OTTO, R. **Desenvolvimento de raízes e produtividade de cana-de-açúcar relacionados à adubação nitrogenada**. 2007. 117 p. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2007.
- PATTERSON, H.D.; THOMPSON, R. Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. **Biometrika**, London, v. 58, n. 3, p. 545-554, 1971.
- PINHEIRO, J.C. **Modelos não lineares de efeitos mistos em R**. In: Reunião Anual da Região Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria, 57., 2012, Piracicaba. Resumos... Piracicaba: ESALQ/USP, 2012.

PINHEIRO, J.C.; BATES, D.M. **Mixed-effects models in S and S-PLUS**. New York: Springer-Verlag, 2000. 528 p.

R: A Language and Environment for Statistical Computing, R Core Team, R Foundation for Statistical Computing, Vienna, 2013. Disponível em: <<http://www.R-project.org>>. Acesso em: 20 jan. 2014.

RAO, M.N.; RAO, C.R. Linked cross-sectional study for determining norms and growth rates: A pilot survey on Indian school-going boys. **Sankhya: The Indian Journal of Statistics, Series B**, Calcutta, v. 28, n. 3/4, p. 237-258, Dec., 1966.

ROCHON, J.; HELMS, R.W. Maximum likelihood estimation for incomplete repeated-measures experiments under an ARMA covariance structure. **Biometrics**, Washington, v. 45, n. 1, p. 207-218, Mar., 1989.

SAS Institute Inc. 2008. SAS/STAT ® 9.2 User's Guide. Cary, NC, USA: SAS Institute Inc.

SCHAALJE, B.; ZHANG, J.; PANTULA, S.G.; POLLOCK, K.H. Analysis of repeated-measurements data from randomized block experiments. **Biometrics**, Washington, v. 47, n. 3, p. 813-824, Sep., 1991.

SCHWARZ, G. Estimating the dimension of a model. **The Annals of Statistics**, Jerusalem, v. 6, n. 2, p. 461-464, 1978.

SEARLE, S.R. **Linear models for unbalanced data**. New York: John Wiley, 1987. 536 p.

SEARLE, S.R.; CASELLA, G.; MCCULLOCH, C.E. **Variance components**. New York: John Wiley, 1992. 501 p.

SINGER, J.M.; NOBRE, J.S.; ROCHA, F.M.M. **Análise de dados longitudinais** Versão parcial preliminar. São Paulo: USP. Departamento de Estatística. Março, 2012. 225 p.

SUYAMA, E. **Identificação de um modelo de efeitos aleatórios**. 1995. 129 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1995.

VERBEKE, G. LESAFFRE, E. The effect of misspecifying the random-effects distribution in linear mixed models for longitudinal data. **Computacional Statistics & Data Analysis**, Amsterdam, v. 23, n. 4, p. 541-556, 1997.

VERBEKE, G. and MOLENBERGHS, G. **Linear Mixed Models for Longitudinal Data**. New York: Springer-Verlag, 2000. 569 p.

VERBYLA, A.P.; CULLIS, B.R. Modelling in Repeated Measures Experiments. **Journal of the Royal Statistical Society**, London, v. 39, n. 3, p. 341-356, 1990.

VONESH, E.F.; CHINCHILLI, V.M. **Linear an nonlinear models for the analisys of repeated measurements**. New York: Marcel Dekker, 1997. 560 p.

WATERNAUX, C.; LAIRD, N.M.; WARE, J.H. Methods for analysis of longitudinal data: blood-lead concentration and cognitive development. **Journal of the American Statistical Association**, Boston, v. 84, n. 405, p. 33-41, Mar., 1989.

WEST, B.T.; WELCH, K.B.; GALECKI, A.T. **Linear mixed models:** A practical guide using statistical software. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2007. 339 p.

WOLFINGER, R.D. Covariance structure selection in general mixed models. **Communications in Statistics, Simulation and Computation**, New York, v. 22, n. 4, p. 1079-1106, 1993.

APÊNDICES

APÊNDICE A - MSR de cana-de-açúcar: Subrotina R para elaboração dos gráficos de perfis

```
rm(list = ls(all = TRUE))
require(longCatEDA)
dados = read.table("dados.txt", head = TRUE)

# Profundidade 0-30cm (Prof1)
prof1 = subset(dados, prof==1, c(local, massaraiz))
L0.prof1 = subset(prof1, local==0, massaraiz)
L30.prof1 = subset(prof1, local==30, massaraiz)
L60.prof1 = subset(prof1, local==60, massaraiz)
Local = seq(0, 60, 30)
cor(cbind(L0.prof1, L30.prof1, L60.prof1))
Dados.Local.prof1 = cbind(L0.prof1, L30.prof1, L60.prof1)
longContPlot(Dados.Local.prof1, Local, xaxt = "n", main = "",
              ylab = "MSR", xlab = "Local", cex.lab = 1.35,
              ylim = c(0, 3.6))
text(seq(0, 60, by = 30), par("usr")[3] - 0.02,
      labels = c(0, 30, 60), pos = 1, xpd = TRUE)

# Profundidade 30-60 cm (Prof2)
prof2 = subset(dados, prof==2, c(local, massaraiz))
L0.prof2 = subset(prof2, local==0, massaraiz)
L30.prof2 = subset(prof2, local==30, massaraiz)
L60.prof2 = subset(prof2, local==60, massaraiz)
cor(cbind(L0.prof2, L30.prof2, L60.prof2))
Dados.Local.prof2 = cbind(L0.prof2, L30.prof2, L60.prof2)
longContPlot(Dados.Local.prof2, Local, xaxt = "n", main = "",
              ylab = "MSR", xlab = "Local", cex.lab = 1.35,
              ylim = c(0, 3.6))
text(seq(0, 60, by = 30), par("usr")[3] - 0.02,
      labels = c(0, 30, 60), pos = 1, xpd = TRUE)
```

APÊNDICE B - Subrotina R para análise descritiva dos dados de MSR de cana-de-açúcar, para calcular as matrizes de covariâncias e correlações e o teste de Mauchly para os dados de MSR de cana-de-açúcar

```

rm(list = ls(all = TRUE))
raiz <- read.csv2("raiz.csv", head = TRUE)
raiz$bloco <- as.factor(raiz$bloco)
raiz$dose <- as.factor(raiz$dose)
raiz$prof <- as.factor(raiz$prof)
raiz$local <- as.factor(raiz$local)
attach(raiz)

# Tabelas descritivas
mediaDOSE <- tapply(massaraiz, dose, mean)
desvpadDOSE <- tapply(massaraiz, dose, sd)
tabela_descritivaDOSE <- data.frame(mediaDOSE, desvpadDOSE)
tabela_descritivaDOSE
mediaPROF <- tapply(massaraiz, prof, mean)
desvpadPROF <- tapply(massaraiz, prof, sd)
tabela_descritivaPROF <- data.frame(mediaPROF, desvpadPROF)
tabela_descritivaPROF
mediaLOCAL <- tapply(massaraiz, local, mean)
desvpadLOCAL <- tapply(massaraiz, local, sd)
tabela_descritivaLOCAL <- data.frame(mediaLOCAL, desvpadLOCAL)
tabela_descritivaLOCAL

# Matrizes de covariâncias e correlações amostrais
p1l0 <- c(massaraiz[prof=="1" & local=="0"])
p1l30 <- c(massaraiz[prof=="1" & local=="30"])
p1l60 <- c(massaraiz[prof=="1" & local=="60"])
p2l0 <- c(massaraiz[prof=="2" & local=="0"])
p2l30 <- c(massaraiz[prof=="2" & local=="30"])
p2l60 <- c(massaraiz[prof=="2" & local=="60"])
locais.profs <- cbind(p1l0, p1l30, p1l60, p2l0, p2l30, p2l60)
covar <- cov(locais.profs); covar
correl <- cor(locais.profs); correl

# Teste de Mauchly
bloco <- c(rep(seq(1, 4), each = 4))
bloco <- factor(bloco)
dose <- rep(c(0, 40, 80, 120), times = 4)
dose <- factor(dose)
raiz.lm <- lm(locais.profs ~ bloco + dose)
mauchly.test(raiz.lm, X = ~ 1)

```

APÊNDICE C - Subrotina R para ajuste de efeitos aleatórios para os dados de MSR de cana-de-açúcar

```

require(nlme)
raiz$unid.par <- as.factor(raiz$unid.par)
raiz$prof1 <- as.numeric(raiz$prof1)
raiz$prof2 <- as.numeric(raiz$prof2)
Local <- rep(rep(c(0, 30, 60)), times = 32)
raizgr <- groupedData(massaraiz ~ 1 | unid.par, data = raiz,
                      order.groups = F)

attach(raiz)
m1 <- lme(fixed = massaraiz ~ - 1 + dose:prof1 +
          dose:prof1:Local + dose:prof1:I(Local^2) +
          dose:prof2 + dose:prof2:Local + dose:prof2:I(Local^2),
          data = raizgr,
          random = ~ - 1 + prof1 + prof1:Local + prof1:I(Local^2) +
          prof2 + prof2:Local + prof2:I(Local^2))
m2 <- update(m1, random = ~ - 1 + prof1 + prof1:Local +
             prof1:I(Local^2) + prof2 + prof2:Local)
# Teste da razão de verossimilhanças
trv1 <- -2 * (m2$logLik - m1$logLik); trv1
# Mistura de qui-quadrados
p.valor1 <- 0.5 * (pchisq(trv1, 5, lower.tail = F)) +
           0.5 * (pchisq(trv1, 6, lower.tail = F)); p.valor1

m3 <- update(m1, random = ~ - 1 + prof1 + prof1:Local +
             prof1:I(Local^2) + prof2)
# Teste da razão de verossimilhanças
trv2 <- -2 * (m3$logLik - m2$logLik); trv2
# Mistura de qui-quadrados
p.valor2 <- 0.5 * (pchisq(trv2, 4, lower.tail = F)) +
           0.5 * (pchisq(trv2, 5, lower.tail = F)); p.valor2

m4 <- update(m1, random = ~ -1 + prof1 + prof1:Local + prof1:I(Local^2))
# Teste da razão de verossimilhanças
trv3 <- -2 * (m4$logLik - m3$logLik); trv3
# Mistura de qui-quadrados
p.valor3 <- 0.5 * (pchisq(trv3, 3, lower.tail = F)) +
           0.5 * (pchisq(trv3, 4, lower.tail = F)); p.valor3

m3.1 <- update(m1, random = pdDiag(~ - 1 + prof1 + prof1:Local
                                + prof1:I(Local^2) + prof2))
anova(m3.1, m3)

```

APÊNDICE D - Subrotina R para construir gráficos de perfis individuais para cada nível de dose e de profundidade para os dados de MSR de cana-de-açúcar

```
rm(list=ls(all=TRUE))
require(longCatEDA)
dados <- read.table("dados.txt", head=T)

# Para dose 0
d0p1 <- subset(dados, c(dose==0 & prof==1), c(local, massaraiz))
d0p2 <- subset(dados, c(dose==0 & prof==2), c(local, massaraiz))
plot(d0p1[1:3, ], type = "l", ylim = c(0, 3.6), xaxt = "n",
      ylab = "MSR", xlab = "Local", lty = 2, lwd = 2)
lines(d0p1[4:6, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d0p1[7:9, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d0p1[10:12, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d0p2[1:3, ], lwd = 2)
lines(d0p2[4:6, ], lwd = 2)
lines(d0p2[7:9, ], lwd = 2)
lines(d0p2[10:12, ], lwd = 2)
text(seq(0, 60, by = 30), par("usr")[3] - 0.02,
      labels = c(0, 30, 60), pos = 1, xpd = TRUE)
legend(25, 3.5, legend = c("Profundidade 0-30",
                           "Profundidade 30-60"), lty = c(2, 1), lwd = c(2, 2))

# Para dose 40
d40p1 <- subset(dados, c(dose==40 & prof==1), c(local, massaraiz))
d40p2 <- subset(dados, c(dose==40 & prof==2), c(local, massaraiz))
plot(d40p1[1:3, ], type = "l", ylim = c(0, 3.6), xaxt = "n",
      ylab = "MSR", xlab = "Local", lty = 2, lwd = 2)
lines(d40p1[4:6, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d40p1[7:9, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d40p1[10:12, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d40p2[1:3, ], lwd = 2)
lines(d40p2[4:6, ], lwd = 2)
lines(d40p2[7:9, ], lwd = 2)
lines(d40p2[10:12, ], lwd = 2)
text(seq(0, 60, by = 30), par("usr")[3] - 0.02,
      labels = c(0, 30, 60), pos = 1, xpd = TRUE)
legend(25, 3.5, legend = c("Profundidade 0-30",
                           "Profundidade 30-60"), lty = c(2, 1), lwd = c(2, 2))

# Para dose 80
d80p1 <- subset(dados, c(dose==80 & prof==1), c(local, massaraiz))
d80p2 <- subset(dados, c(dose==80 & prof==2), c(local, massaraiz))
plot(d80p1[1:3, ], type = "l", ylim = c(0, 3.6), xaxt = "n",
      ylab = "MSR", xlab = "Local", lty = 2, lwd = 2)
```

```

lines(d80p1[4:6, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d80p1[7:9, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d80p1[10:12, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d80p2[1:3, ], lwd = 2)
lines(d80p2[4:6, ], lwd = 2)
lines(d80p2[7:9, ], lwd = 2)
lines(d80p2[10:12, ], lwd = 2)
text(seq(0, 60, by = 30), par("usr")[3] - 0.02,
      labels = c(0, 30, 60), pos = 1, xpd = TRUE)
legend(25, 3.5, legend = c("Profundidade 0-30",
                           "Profundidade 30-60"), lty = c(2, 1), lwd = c(2, 2))

# Para dose 120
d120p1 <- subset(dados, c(dose==120 & prof==1), c(local, massaraiz))
d120p2 <- subset(dados, c(dose==120 & prof==2), c(local, massaraiz))
plot(d120p1[1:3, ], type = "l", ylim = c(0, 3.6), xaxt = "n",
      ylab = "MSR", xlab = "Local", lty = 2, lwd = 2)
lines(d120p1[4:6, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d120p1[7:9, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d120p1[10:12, ], lty = 2, lwd = 2)
lines(d120p2[1:3, ], lwd = 2)
lines(d120p2[4:6, ], lwd = 2)
lines(d120p2[7:9, ], lwd = 2)
lines(d120p2[10:12, ], lwd = 2)
text(seq(0, 60, by = 30), par("usr")[3] - 0.02,
      labels = c(0, 30, 60), pos = 1, xpd = TRUE)
legend(25, 3.5, legend = c("Profundidade 0-30",
                           "Profundidade 30-60"), lty = c(2, 1), lwd = c(2, 2))

```


APÊNDICE E - Subrotina R para ajuste de estruturas de covariâncias intra-ocasiões de observação para os dados de MSR de cana-de-açúcar

```

m5 <- update(m3, weights = varIdent(form = ~ 1 | prof))
anova(m3, m5)
m6 <- update(m3, weights = varComb(varIdent(form = ~ 1 | prof),
                                   varIdent(form = ~ 1 | local)))
anova(m3, m6)
raiz$local1[local==0] <- 1
raiz$local1[local==30 | local==60] <- 2
raiz$local1 <- as.factor(raiz$local1)
m7 <- update(m3, weights = varComb(varIdent(form = ~ 1 | prof),
                                   varIdent(form = ~ 1 | local1)))
anova(m6, m7)
m8 <- update(m3, weights = varComb(varIdent(form = ~ 1 | dose),
                                   varIdent(form = ~ 1 | prof), varIdent(form = ~ 1 | local1)))
anova(m7, m8)
raiz$dose1[dose==0 | dose==80] <- 1
raiz$dose1[dose==40] <- 2
raiz$dose1[dose==120] <- 3
raiz$dose1 <- as.factor(raiz$dose1)
m9 <- update(m3, weights = varComb(varIdent(form = ~ 1 | dose1),
                                   varIdent(form = ~ 1 | prof),
                                   varIdent(form = ~ 1 | local1)))
anova(m7, m9)

# Matriz R
m10 <- update(m7, corr = corAR1(form = ~ 1 | unid.par))
anova(m7, m10)
m11 <- update(m7, corr = corCompSymm(form = ~ 1 | unid.par))
anova(m7, m11)
m12 <- update(m7, corr = corSymm(form = ~ 1 | unid.par))
anova(m7, m12)

```

APÊNDICE F - Subrotina R para ajuste das curvas médias para cada dose e profundidade para os dados de MSR de cana-de-açúcar

```

bet <- fixef(m7); bet
bet0.0.1 <- bet[1];   bet1.0.1 <- bet[9];   bet2.0.1 <- bet[13]
bet0.40.1 <- bet[2];  bet1.40.1 <- bet[10];  bet2.40.1 <- bet[14]
bet0.80.1 <- bet[3];  bet1.80.1 <- bet[11];  bet2.80.1 <- bet[15]
bet0.120.1 <- bet[4]; bet1.120.1 <- bet[12]; bet2.120.1 <- bet[16]
bet0.0.2 <- bet[5];   bet1.0.2 <- bet[17];   bet2.0.2 <- bet[21]
bet0.40.2 <- bet[6];  bet1.40.2 <- bet[18];  bet2.40.2 <- bet[22]
bet0.80.2 <- bet[7];  bet1.80.2 <- bet[19];  bet2.80.2 <- bet[23]
bet0.120.2 <- bet[8]; bet1.120.2 <- bet[20]; bet2.120.2 <- bet[24]
x <- seq(0, 60, length.out = 10000)

# Profundidade 1
plot(c(0, 60), c(0, 2), type = "n", ylab = "MSR",
     xlab = "Local", main = paste(""), axes = F)
axis(1, c(0, 30, 60)); axis(2, seq(0, 2, 0.5))
lines(x, bet0.0.1 + bet1.0.1 * x + bet2.0.1 * I(x^2),
      col = 1, lwd = 3)
lines(x, bet0.40.1 + bet1.40.1 * x + bet2.40.1 * I(x^2),
      col = 2, lwd = 3)
lines(x, bet0.80.1 + bet1.80.1 * x + bet2.80.1 * I(x^2),
      col = 3, lwd = 3)
lines(x, bet0.120.1 + bet1.120.1 * x + bet2.120.1 * I(x^2),
      col = 4, lwd = 3)
legend(30, 2, legend = c("Dose 0", "Dose 40", "Dose 80",
                          "Dose 120"), col = c(1, 2, 3, 4), lty = c(1, 1, 1, 1),
      lwd = c(2, 2, 2, 2))

# Profundidade 2
plot(c(0, 60), c(0, 2), type = "n", ylab = "MSR",
     xlab = "Local", main = paste(""), axes = F)
axis(1, c(0, 30, 60)); axis(2, seq(0, 2, 0.5))
lines(x, bet0.0.2 + bet1.0.2 * x + bet2.0.2 * I(x^2),
      col = 1, lwd = 3)
lines(x, bet0.40.2 + bet1.40.2 * x + bet2.40.2 * I(x^2),
      col = 2, lwd = 3)
lines(x, bet0.80.2 + bet1.80.2 * x + bet2.80.2 * I(x^2),
      col = 3, lwd = 3)
lines(x, bet0.120.2 + bet1.120.2 * x + bet2.120.2 * I(x^2),
      col = 4, lwd = 3)
legend(30, 2, legend = c("Dose 0", "Dose 40", "Dose 80", "Dose 120"),
      col = c(1, 2, 3, 4), lty = c(1, 1, 1, 1), lwd = c(2, 2, 2, 2))

```

APÊNDICE G - Subrotina R para ajuste das estruturas dos efeitos fixos para testar igualdade de médias das Doses para os dados de MSR de cana-de-açúcar

```

m7.1 <- update(m7, method = "ML")
anova(m7.1, test = "Wald")
m13.1 <- update(m7.1, fixed = massaraiz ~ - 1 + dose:prof1 +
                dose:prof1:Local + dose:prof1:I(Local^2) +
                prof2 + prof2:Local + prof2:I(Local^2))
anova(m7.1, m13.1)
m14.1 <- update(m7.1, fixed = massaraiz ~ - 1 + prof1 + prof1:Local +
                prof1:I(Local^2) + prof2 + prof2:Local + prof2:I(Local^2))
anova(m14.1, m13.1)
m15.1 <- update(m7.1, fixed = massaraiz ~ - 1 + dose1:prof1 +
                dose1:prof1:Local + dose1:prof1:I(Local^2) +
                prof2 + prof2:Local + prof2:I(Local^2))

anova(m15.1, m13.1)
raiz$dose2[dose==0 | dose==80] <- 1
raiz$dose2[dose==40 | dose==120] <- 2
raiz$dose2 <- as.factor(raiz$dose2)
attach(raiz)
m16.1 <- update(m7.1, fixed = massaraiz ~ - 1 + dose2:prof1 +
                dose2:prof1:Local + dose2:prof1:I(Local^2) + prof2 +
                prof2:Local + prof2:I(Local^2))
anova(m16.1, m15.1)
m17.1 <- update(m7.1, fixed = massaraiz ~ - 1 + dose2:prof1 +
                dose2:prof1:Local + dose2:prof1:I(Local^2) + prof2 +
                prof2:Local)
anova(m17.1, m16.1)
anova(m16.1, test = "Wald")
m16 <- update(m16.1, method = "REML")

```

APÊNDICE H - Subrotina R para ajuste de efeitos aleatórios para confirmar a estrutura selecionada e para diagnóstico do modelo selecionado para os dados de MSR de cana-de-açúcar

```
# Ajuste de efeitos aleatórios
m18 <- update(m16, random = ~ - 1 + prof1 + prof1:Local +
              prof1:I(Local^2) + prof2 + prof2:Local)
anova(m16, m18)
m19 <- update(m16, random = ~ - 1 + prof1 + prof1:Local +
              prof1:I(Local^2) + prof2 + prof2:I(Local^2))
anova(m16, m19)
m20 <- update(m16, random = ~ - 1 + prof1 + prof1:I(Local^2) + prof2)
anova(m16, m20)
m21 <- update(m16, random = ~ - 1 + prof1 + prof1:Local + prof2)
anova(m16, m21)

# Diagnóstico do modelo selecionado
plot(fitted(m16), massaraiz, xlab = "Valores Preditos - m16",
     ylab = "MSR de cana"); abline(0, 1)
plot(fitted(m16), residuals(m16, type = "p"), ylim = c(-3, 3),
     xlab = "Valores Preditos - m16", ylab = "Resíduos Condicionais
     Padronizados")
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2))
plot(residuals(m16, type = "p"), ylim = c(-3, 3), xlab =
     "Índices", ylab = "Resíduos Condicionais Padronizados - m16")
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2))
qqnorm(m16, xlab = "Quantis Normais", ylab = "Resíduos
     Condicionais Padronizados - m16")
hist(residuals(m16, type = "p"), breaks = c(-2.75, -2.2, -1.65, -1.1,
     -0.55, 0, 0.55, 1.1, 1.65, 2.2, 2.75), main = "", xlab = "Resíduos
     Condicionais Padronizados - m16", ylab = "Frequência")
rug(residuals(m16, type = "p"))
shapiro.test(residuals(m16, type = "p"))
```

APÊNDICE I - Subrotina R para matrizes G e R, ajuste das curvas médias e individuais para o modelo selecionado para os dados de MSR de cana-de-açúcar

```

getVarCov(m16, type = "random.effects")
getVarCov(m16, type = "conditional")

betas <- fixef(m16);betas
beta0.080.1 <- betas[2]; beta0.40120.1 <- betas[3]; beta0.2 <- betas[1]
beta1.080.1 <- betas[6]; beta1.40120.1 <- betas[7]; beta1.2 <- betas[4]
beta2.080.1 <- betas[8]; beta2.40120.1 <- betas[9]; beta2.2 <- betas[5]

plot(c(0, 60), c(0, 3.5), type = "n", ylab = "MSR",
     xlab = "Local", main = paste(""), axes = F)
axis(1, c(0, 30, 60)); axis(2, seq(0, 3.5, 0.5))
lines(x, beta0.080.1 + beta1.080.1 * x + beta2.080.1 * I(x^2),
     col = 1, lwd = 3, lty = 1)
lines(x, beta0.40120.1 + beta1.40120.1 * x + beta2.40120.1 * I(x^2),
     col = 1, lwd = 3, lty = 2)
lines(x, beta0.2 + beta1.2 * x + beta2.2 * I(x^2),
     col = 1, lwd = 3, lty = 3)
legend(20, 3.5, legend = c("Prof 0-30 Dose 0=80",
    "Prof 0-30 Dose 40=120", "Prof 30-60"),
     col = c(1, 1, 1, 1), lty = c(1, 2, 3, 4),
     lwd = c(2, 2, 2, 2))

bi <- ranef(m16); bi
b01 <- matrix(c(bi[, 1]), 8, 2, byrow = T)
b11 <- matrix(c(bi[, 3]), 8, 2, byrow = T)
b21 <- matrix(c(bi[, 4]), 8, 2, byrow = T)
b02 <- matrix(c(bi[, 2]), 16, 2, byrow = T)
x <- seq(0, 60, length.out = 10000)

# Dose 0=80 Profundidade 0-30 cm
plot(c(0, 60), c(0, 3.5), type = "n", ylab = "MSR",
     xlab = "Local", main = paste(""), axes = F)
axis(1, c(0, 30, 60)); axis(2, seq(0, 3.5, 0.5))
points(local, massaraiz[dose2==1 & prof==1],
     pch = c(rep("*", 24)), col = c(rep("black", 24)))
for(i in 1:8)
lines(x, beta0.080.1 + b01[i, 1] + (beta1.080.1 + b11[i, 1]) * x +
    (beta2.080.1 + b21[i, 1]) * I(x^2), col = 2, lty = 2)
lines(x, beta0.080.1 + beta1.080.1 * x + beta2.080.1 * I(x^2),
     col = 1, lwd = 3)
legend(30, 3.5, legend = c("MSR", "Curva Média", "Curvas Individuais"),
     col = c(1, 1, 2), pch = c("*", "", ""), lty = c(0, 1, 2),
     lwd = c(1, 3, 1))

```

```

# Dose 40=120 Profundidade 0-30 cm
plot(c(0, 60), c(0, 3.5), type = "n", ylab = "MSR",
     xlab = "Local", main = paste(""), axes = F)
axis(1, c(0, 30, 60)); axis(2, seq(0, 3.5, 0.5))
points(local, massaraiz[dose2==2 & prof==1],
       pch = c(rep("*", 24)), col = c(rep("black", 24)))
for(i in 1:8)
lines(x, beta0.40120.1 + b01[i, 2] + (beta1.40120.1 +
    b11[i, 2]) * x + (beta2.40120.1 + b21[i, 2]) * I(x^2),
     col = 2, lty = 2)
lines(x, beta0.40120.1 + beta1.40120.1 * x + beta2.40120.1 * I(x^2),
     col = 1, lwd = 3)
legend(30, 3.5, legend = c("MSR", "Curva Média", "Curvas Individuais"),
     col = c(1, 1, 2), pch = c("*", "", ""),
     lty = c(0, 1, 2), lwd = c(1, 3, 1))

# Dose 0=40=80=120 Profundidade 30-60 cm
plot(c(0, 60), c(0, 3.5), type = "n", ylab = "MSR",
     xlab = "Local", main = paste(""), axes = F)
axis(1, c(0, 30, 60)); axis(2, seq(0, 3.5, 0.5))
points(local, massaraiz[dose2==1 & prof==2],
       pch = c(rep("*", 24)), col = c(rep("black", 24)))
points(local, massaraiz[dose2==2 & prof==2],
       pch = c(rep("*", 24)), col = c(rep("black", 24)))
for(i in 1:8)
lines(x, beta0.2 + b02[i, 1] + beta1.2 * x +
    beta2.2 * I(x^2), col = 2, lty = 2)
lines(x, beta0.2 + beta1.2 * x + beta2.2 * I(x^2),
     col = 1, lwd = 3)
legend(30, 3.5, legend = c("MSR", "Curva Média", "Curvas Individuais"),
     col = c(1, 1, 2), pch = c("*", "", ""), lty = c(0, 1, 2),
     lwd = c(1, 3, 1))

```

```

#####
#####

```