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

Modelos de regressão aleatória usando como bases as funções polinomiais de Legendre, de Jacobi modificadas e trigonométricas, com uma aplicação na análise genética dos pesos de bovinos da raça Nelore

Osmar Jesus Macedo

Tese apresentada para obtenção do título de Doutor em Agronomia. Área de concentração: Estatística e Experimentação Agronômica

Piracicaba
2007

Osmar Jesus Macedo
Licenciado em Matemática

Modelos de regressão aleatória usando como bases as funções polinomiais de Legendre, de Jacobi modificadas e trigonométricas, com uma aplicação na análise genética dos pesos de bovinos da raça Nelore

Orientador:

Prof. Dr. **Décio Barbin**

Tese apresentada para obtenção do título de Doutor em Agronomia. Área de concentração: Estatística e Experimentação Agronômica

Piracicaba
2007

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
DIVISÃO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - ESALQ/USP

Macedo, Osmar Jesus

Modelos de regressão aleatória usando como bases as funções polinomiais de Legendre, de Jacobi modificadas e trigonométrica, com uma aplicação na análise genética dos pesos de bovinos da raça Nelore / Osmar Jesus Macedo. - Piracicaba, 2007.

100 p. : il.

Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, 2007.
Bibliografia.

1. Componentes de variância 2. Gado Nelore 3. Funções de Jacobi 4.
Melhoramento genético animal 5. Polinômios de Legendre I. Título

CDD 636.291

Dedicatória

A **Deus** nas pessoas do **Pai**, do **Filho** e do **Espírito Santo**, fonte de graças e bênçãos em todos os momentos de minha vida e de minha família.

À **Nossa Senhora Aparecida**, mãe querida do céu que sempre intercede por mim junto a **santíssima trindade**.

Aos meus familiares

Maria de Fátima Anjoletto Macedo, minha esposa

Carlos Alberto Anjoletto Macedo, meu filho

Mara Claudia Anjoletto Macedo, minha filha

Maria Ganzarolli Anjoletto, minha sogra e

Lurdes Gerônimo Macedo, minha mãe,

peessoas que me amam incondicionalmente e se doaram, se dedicaram, oraram e apoiaram-me insistentemente para que este projeto de doutoramento pudesse ser concluído.

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Prof. Décio Barbin pela orientação firme e a colaboração dispensada ao trabalho, ao apoio e a amizade.

Ao Prof. Gerson Barreto Mourão pela colaboração dispensada ao trabalho, a orientação, ao apoio e a amizade.

Aos professores e funcionários dos Departamentos de Ciências Exatas da ESALQ/USP e do CPTL/UFMS, a atenção, a compreensão e a amizade.

Aos professores Joanir Pereira Eler, José Bento Sterman Ferraz e Júlio César Carvalho Balieiro do Departamento de Ciências Básicas da FZEA/USP de Pirassununga, pela cedência dos dados e do laboratório de informática.

A Técnica em Informática Elisângela Chicaroni de Mattos Oliveira do Departamento de Ciências Básicas da FZEA/USP de Pirassununga, a gentileza e ao apoio junto ao laboratório de informática.

A Lúcio Borges de Araújo e a Cesar Augusto Taconeli, a amizade, a compreensão e a boa convivência nos tempos de república.

A Angela Mello Coelho e ao Prof. Bill Venables, a valiosíssima ajuda na leitura e correções do abstract.

A Elisabeth Strapasson, a Ana Maria Souza de Araujo e a Lúcio Borges de Araújo pelo socorro prestado na ocasião em que minha pressão sangüínea este em alta.

A Antonio Williams Moita, ao apoio e a preciosíssima amizade.

Aos professores e alunos do Departamento de Ciências Exatas da ESALQ/USP, proprietários de veículos, pelas caronas concedidas.

Aos amigos dos cursos de mestrado e doutorado do Departamento de Ciências Exatas da ESALQ/USP, que se tornaram meus verdadeiros irmãos.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenadoria para o Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) o apoio financeiro em forma de bolsa de estudos.

A todas as pessoas que de forma direta ou indireta, contribuíram para a realização deste trabalho.

SUMÁRIO

RESUMO	7
ABSTRACT	8
LISTA DE FIGURAS	9
LISTA DE TABELAS	10
1 INTRODUÇÃO	12
2 DESENVOLVIMENTO	15
2.1 Revisão da Literatura	15
2.1.1 Bases de funções ortonormais	15
2.1.1.1 Polinômios de Legendre	17
2.1.1.2 Polinômios de Jacobi	21
2.1.1.3 Sistema de funções trigonométricas	23
2.1.2 Estimação de parâmetros pelo método da máxima verossimilhança	25
2.1.2.1 Estimando os efeitos fixos e aleatórios no modelo misto	25
2.1.3 Máxima verossimilhança restrita - REML	30
2.1.4 Modelo animal	37
2.1.5 Funções de covariâncias	38
2.1.6 Aplicação das funções de covariâncias em modelos mistos	44
2.2 Metodologia	49
2.2.1 Material	49
2.2.2 Métodos	51
2.2.2.1 Análise de regressão aleatória	51
2.2.2.2 Análise de regressão aleatória via polinômios de Legendre	53
2.3 Resultados	59
2.3.1 Resultados das análises com os efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente de animal nos modelos de regressão aleatória	59
2.3.2 Resultados das análises com os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos e de ambiente permanente de animal nos modelos de regressão aleatória	64

2.3.3 Resultados das análises com os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos, de ambiente permanente de animal e de ambiente permanente materno nos modelos de regressão aleatória	70
2.4 Discussão	77
3 CONSIDERAÇÕES FINAIS	85
REFERÊNCIAS	87
APÊNDICES	89
ANEXOS	95

RESUMO

Modelos de regressão aleatória usando como bases as funções polinomiais de Legendre, de Jacobi modificadas e trigonométricas, com uma aplicação na análise genética dos pesos de bovinos da raça Nelore

Com o objetivo de avaliar o desempenho dos modelos mistos quando se assumem bases de funções ortonormais de Legendre, Jacobi modificadas e trigonométricas como covariáveis dos coeficientes aleatórios, os dados referentes à pesagem corporal de animais da raça Nelore do nascimento aos 800 dias, foram analisados com modelos que assumiram inicialmente coeficientes aleatórios de efeito genético direto e efeito permanente animal (dois fatores aleatórios), em seguida foi acrescentado o efeito genético materno (três fatores aleatórios) e finalmente assumiram-se também os coeficientes aleatórios de efeito permanente materno (quatro fatores aleatórios). Foram considerados como efeitos fixos, as idades da mãe ao parto, os grupos contemporâneos e uma regressão linear por polinômios de Legendre. Os dados oriundos da fazenda Mundo Novo fornecidos pelo Grupo de Melhoramento Animal da FZEA/USP continham 61.975 pesagens corporais de 20.543 animais e informações de 26.275 animais da raça Nelore no “pedigree”. O número de pesagem por animal não ultrapassou a seis e cada animal forneceu apenas uma medida em cada um dos seguintes intervalos de idade (em dias): 1 – 69, 70 – 159, 160 – 284, 285 – 454, 455 – 589 e 590 – 800. O propósito desse estudo foi comparar o ajuste da curva média de crescimento dos animais por intermédio de modelos mistos sob influência das funções ortonormais com dois, três e quatro fatores aleatórios. Um segundo propósito do trabalho foi investigar o comportamento das curvas dos componentes aleatórios estimados por meio dos modelos selecionados em cada base de funções nos três grupos distintos de efeitos aleatórios e examinar o comportamento das curvas dos coeficientes de herdabilidade obtidas a partir das curvas dos componentes aleatórios. Por meio do aplicativo WOMBAT, as análises foram realizadas usando-se o algoritmo PX-AI. Em função da parcimônia, o critério de informação bayesiano de Schwarz (BIC) foi adotado para selecionar os modelos que melhor se adequaram aos dados, que em ordem crescente de seus valores foram: com dois fatores aleatórios, os modelos de Legendre com seis covariáveis (ML26), de Jacobi Modificado com cinco covariáveis (MJ25) e o trigonométrico com seis covariáveis (MT26); com três fatores aleatórios, os modelos com seis covariáveis (MJ36, ML36, MT36); e com quatro fatores aleatórios, os modelos de Jacobi Modificado com cinco covariáveis (MJ45), de Legendre com cinco covariáveis (ML45), e o trigonométrico com seis covariáveis (MT46). Dentre os nove modelos selecionados, o modelo com o menor BIC foi o modelo MJ36, porém o modelo MJ45 apresentou estimativas de componentes de variância muito próximas do modelo MJ36. As estimativas dos componentes de variância e dos coeficientes de herdabilidade obtidas pelos modelos com funções de Jacobi modificadas, nos extremos do intervalo, ficaram abaixo das obtidas pelos modelos com funções de Legendre e no interior do intervalo elas foram concordantes, ficando entre 0,2 e 0,3. As estimativas obtidas dos modelos com funções trigonométricas se diferenciaram dos demais e foram muito baixas no extremo do intervalo para modelos com mais de dois fatores aleatórios. A média das curvas de crescimento que mais se aproximou da tendência média dos dados em cada ponto do intervalo foi obtida pelo modelo MJ26.

Palavras-chave: Polinômios de Legendre; Polinômios de Jacobi; Regressão aleatória; Coeficiente de herdabilidade

ABSTRACT

Random coefficient regression models using the Legendre polynomials, modified Jacobi polynomials and trigonometric functions as bases, with an application to genetic analysis of the weight of cattle from the Nellore breed

This work's statistical objective is to assess the performance of random coefficient regression models when Legendre, modified Jacobi and trigonometric functions are used as the covariate basis. This was studied with an application to a genetic analysis of the body weight of cattle from the Nellore breed. In the period 1981 to 2002 body weight data of animals were collected from the birth to the 800th day of life. An initial two random factor model used random coefficients for the direct genetic and environment animal effects. A second three random factors model introduced an additional random term for coefficients maternal genetic effects. Our final model, with four random factors, included environment maternal effects. Average growth curve was modeled by a fixed linear regression on days of age nested within contemporary group and ages of dams at calving. The data come from the Mundo Novo farm, and were provided by the Animal Breeding Genetic Group of the FZEA/USP. There were 61,975 body weights measured on 20,543 animals. In addition, information from 26,275 pedigree Nellore animals was included. No animal was weighed more than six times, and each animal supplied at most one measure within each of the following age intervals (in days): 1-69, 0-159, 160-284, 285-454, 455-589 and 590-800. This study aimed to compare the animal's mean growth curve using mixed models with the orthonormal function bases, in the case of two, three and four random factors. A second aim was to investigate the estimated random components curve behaviour using the selected models with each base of functions in the three distinct random effect groups and to examine the behaviour of the heritability coefficient curves obtained through the random component curves. The analysis was done using the PX-AI and the WOMBAT device. For parsimony, the Schwartz Bayesian information criterion (BIC) was adopted to select the best models. This criterion suggested two random factors, the for Legendre model, six covariates (ML26), for the Modified Jacobi model, five covariates (MJ25) and for the trigonometric model, six covariates (MT26). With three random factors, the models all required six covariates (MJ36, ML36, MT36). Finally, with four random factors, the Modified Jacobi model required five covariates (MJ45), the Legendre model required five covariates (ML45), and the trigonometric model required six covariates (MT46). Within the nine selected models, the MJ36 model was the one with the smaller BIC, however the MJ45 model presented variance components estimates very similar to the MJ36 model. The variance components and heritability coefficient estimates from the models with modified Jacobi functions were bellow the ones obtained with Legendre functions even at the extreme end of the intervals. In the interior of the interval, however, they were in agreement, staying between 0.2 and 0.3. The estimates obtained with trigonometric functions differed from the others and were much lower at the interval extremes for models with more than two random factors.

Keywords: Legendre polynomials; Jacobi polynomials; Random regression; Heritability

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Segundo passo do processo de Gram-Schmidt	18
Figura 2 - Gráficos dos seis primeiros polinômios de Legendre	20
Figura 3 - Gráficos dos seis primeiros polinômios de Jacobi modificados	22
Figura 4 - Gráficos das seis primeiras funções trigonométricas	24
Figura 5 - Dispersão das médias dos pesos corporais de animais nos 670 grupos con- temporâneos	50
Figura 6 - Curvas das variâncias genética aditiva direta ($\hat{\sigma}_a^2$), de ambiente permanente de animal ($\hat{\sigma}_{pe}^2$) e residuais ($\hat{\sigma}_e^2$), estimadas por intermédio dos modelos ML26, MJ25 e MT26	61
Figura 7 - Curvas dos coeficientes de herdabilidade estimados por intermédio dos mo- delos ML26, MJ25 e MT26	62
Figura 8 - Médias das curvas de crescimento estimadas por meio dos modelos ML26, MJ25 e MT26 em contraste com a tendência média dos dados	63
Figura 9 - Curvas das variâncias: genética aditiva direta ($\hat{\sigma}_a^2$), genética materna ($\hat{\sigma}_m^2$), de ambiente permanente de animal ($\hat{\sigma}_{pe}^2$) e residuais ($\hat{\sigma}_e^2$), estimadas por intermédio dos modelos ML36, MJ36 e MT36	66
Figura 10 - Curvas dos coeficientes de herdabilidade estimadas pelos modelos ML36, MJ36 e MT36	68
Figura 11 - Médias das curvas de crescimento estimadas por meio dos modelos ML36, MJ36 e MT36 em contraste com a tendência média dos dados	69
Figura 12 - Curvas das variâncias genética aditiva direta ($\hat{\sigma}_a^2$), aditiva materno ($\hat{\sigma}_m^2$), de ambiente permanente de animal ($\hat{\sigma}_{pe}^2$), de ambiente permanente materno ($\hat{\sigma}_{mpe}^2$) e residuais ($\hat{\sigma}_e^2$), estimadas pelos modelos ML45, MJ45 e MT46	74
Figura 13 - Curvas dos coeficientes de herdabilidade estimados pelos modelos ML45, MJ45 e MT46	75
Figura 14 - Médias das curvas de crescimento estimadas por meio dos modelos ML45, MJ45 e MT46 em contraste com a tendência média dos dados	76

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Número de pesagens, peso mínimo, peso máximo, peso médio e o desvio padrão dos dados em cada intervalo de idade	49
Tabela 2 - Número de parâmetros (p), valor do log da função de verossimilhança ($\log(L)$), teste da razão de máxima verossimilhança (LRT), Critério de Akaike (AIC) e de informação bayesiano de Schwarz (BIC) para os modelos de regressão aleatória ajustados com diferentes ordens para os efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente de animal	60
Tabela 3 - Estimativas dos componentes de variância e dos coeficientes de herdabilidade obtidas por meio dos modelos ML26, MJ25 e MT26, em função da idade na pesagem	62
Tabela 4 - Número de parâmetros (p), valor do log da função de verossimilhança ($\log(L)$), teste da razão de máxima verossimilhança (LRT), critério de Akaike (AIC) e o critério de informação bayesiano de Schwarz (BIC) para os modelos de regressão aleatória ajustados com diferentes ordens para os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos e de ambiente permanente de animal	65
Tabela 5 - Estimativas dos componentes de variância, dos coeficientes de herdabilidade (h^2) e da proporção da variância total devida ao efeito genético materno (h_m^2) obtidas por meio dos modelos ML36, MJ36 e MT36, em função da idade na pesagem	67
Tabela 6 - Número de parâmetros (p), valor do log da função de verossimilhança ($\log(L)$), teste da razão de máxima verossimilhança (LRT), critério de Akaike (AIC) e o critério de informação bayesiano de Schwarz (BIC) para os modelos de regressão aleatória ajustados com diferentes ordens para os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos, de ambiente permanente de animal e de ambiente permanente materno	71

Tabela 7 - Estimativas dos componentes de variância, dos coeficientes de herdabilidade h^2 e a proporção da variância total devida ao efeito genético materno h_m^2 obtidas por meio dos modelos ML45, MJ45 e MT46, em função da idade na pesagem	73
Tabela 8 - Elementos das matrizes $\widehat{\mathbf{K}}_a$ (estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva), $\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$ (estimativas das variâncias e covariâncias coeficientes aleatórios de efeitos de ambiente permanente de animal) e $\widehat{\mathbf{R}}$ (estimativas das variâncias residuais), estimados por meio dos modelos ML26, MJ25, MT26	90
Tabela 9 - Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva ($\widehat{\mathbf{K}}_a$), de genética aditiva materno ($\widehat{\mathbf{K}}_m$), de ambiente permanente de animal ($\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$) e estimativas das variâncias residuais ($\widehat{\mathbf{R}}$), obtidas por meio dos modelos ML36 e MJ36	91
Tabela 10 - Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva ($\widehat{\mathbf{K}}_a$), de genética aditiva materno ($\widehat{\mathbf{K}}_m$), de ambiente permanente de animal ($\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$) e estimativas das variâncias residuais ($\widehat{\mathbf{R}}$), obtidas por meio do modelo MT36	92
Tabela 11 - Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva ($\widehat{\mathbf{K}}_a$), de genética aditiva materno ($\widehat{\mathbf{K}}_m$), de ambiente permanente de animal ($\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$), de ambiente permanente materno ($\widehat{\mathbf{K}}_{mpe}$) e estimativas das variâncias residuais ($\widehat{\mathbf{R}}$), obtidas por meio dos modelos ML45 e MJ45	93
Tabela 12 - Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva ($\widehat{\mathbf{K}}_a$), de genética aditiva materno ($\widehat{\mathbf{K}}_m$), de ambiente permanente de animal ($\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$), de ambiente permanente materno ($\widehat{\mathbf{K}}_{mpe}$) e estimativas das variâncias residuais ($\widehat{\mathbf{R}}$), obtidas por meio do modelo MT46	94

1 INTRODUÇÃO

Nas pesquisas recentes dos programas de melhoramento genético animal, funções de covariâncias e os modelos de regressão aleatória têm sido considerados como uma alternativa para o ajuste dos dados que são obtidos, seqüencialmente, no mesmo animal ao longo do tempo e que apresentam um padrão de covariâncias estruturado. Nesses estudos as medidas de cada animal, tomadas ao longo do tempo, como por exemplo: a tomada de peso mensal ou da produção diária de leite do animal, podem ser consideradas como observações de características fenotípicas distintas e únicas.

Características fenotípicas que podem ser medidas, como por exemplo, o peso corporal de um animal, podem ser tomadas infinitas vezes num animal ao longo do tempo e sob a visão de que essas são características distintas, pensou-se na possibilidade de modelar os dados provenientes dos estudos de melhoramento genético através de uma função contínua. Nesse sentido, os efeitos aleatórios que aparecem nos modelos de animais, inclusive os erros de medida, passam a ser representados como funções contínuas.

Os polinômios de Legendre por formarem um conjunto de funções contínuas ortonormais no intervalo $[-1, 1]$ têm sido amplamente aplicados nos processos de estimação de funções de covariâncias e nos modelos de regressão aleatória após Kirkpatrick, Lofsvold e Bulmer (1990).

No estudo apresentado por Scarpel (2004) observou-se que regressões polinômiais de 4º e de 5º graus apresentaram melhores resultados para a estimação de efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente materno, através de regressão aleatória em dados de crescimento ponderal de bovinos da raça Guzerá, além disso, Meyer (2005) confirma a necessidade de altas ordens para os polinômios de Legendre no ajuste dos dados e observa que tais polinômios apresentam problemas nas aproximações e esses tendem a crescer com o aumento na ordem de ajuste do modelo produzindo estimativas não confiáveis de componentes de variância e parâmetros genéticos nas proximidades dos extremos do intervalo de tempo em estudo. Tais problemas são atribuídos às fortes oscilações que as curvas polinomiais de Legendre apresentam nos extremos do intervalo $[-1, 1]$.

A autora afirma ainda que o problema prevalece principalmente nas idades mais

altas e com menos registros, nos conjuntos de dados com mais registros nas idades iniciais do que nas idades posteriores, e nas análises onde proporções significativas de animais tiveram menos registros que a ordem de ajuste dos polinômios.

A exigência de graus elevados para os polinômios de Legendre e os problemas apresentados por esta técnica de modelagem nos extremos do intervalo, têm motivado o estudo dos modelos de regressão aleatória por meio de funções pertencentes às bases de funções polinomiais de Jacobi modificadas e de funções trigonométricas. As funções pertencentes à base de polinômios de Jacobi modificados podem ser ortonormalizadas para o intervalo $[-1, 1]$ e as funções da base trigonométrica podem ser ortonormalizadas para o intervalo $[0, 2\pi]$.

Com esse estudo pretende-se identificar possíveis diferenças no ajuste dos modelos de regressão aleatória, influenciados pelas funções das bases polinomiais de Legendre e de Jacobi modificadas e da base de funções trigonométricas, quando aplicados na modelagem dos dados de pesagem corporal de animais bovinos da raça Nelore.

A proposta do estudo é considerar modelos de regressão aleatória que assumam as mesmas suposições para efeitos fixos, porém, em três situações distintas de fatores aleatórios. Na primeira situação são considerados fatores aleatórios os coeficientes de efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente animal, designados como modelos de dois fatores aleatórios. Em seguida um novo grupo de modelos, agora considerando os coeficientes de efeitos de genética aditiva, de efeitos genéticos maternos e os de ambiente permanente animal como fatores aleatórios, designados como modelos de três fatores aleatórios. Uma terceira situação é caracterizada pelo grupo de modelos que consideram como fatores aleatórios os coeficientes de efeitos genéticos aditivos, os de efeitos genéticos maternos, os de ambiente permanente animal e os de ambiente permanente materno, designados como modelos de quatro fatores aleatórios. Para a obtenção das estimativas dos componentes de variância, o método da máxima verossimilhança restrita pode ser aplicado.

Para cada base de funções ortonormais, uma combinação do teste da razão de máxima verossimilhança (LRT) com os critérios de informação de Akaike (AIC) e de informação bayesiano de Schwarz (BIC) associados a questão da parcimônia do modelo, pode ser usada para selecionar o modelo que melhor se ajustar aos dados.

Um dos interesses nesse estudo é comparar o ajuste da curva média de cresci-

mento ponderal dos animais em cada base de funções ortonormais nos grupos com dois, três e quatro fatores aleatórios considerados na modelagem. Assim, os modelos selecionados em cada base de funções ortonormais no grupo que considera dois fatores de coeficientes aleatórios são comparados entre si, a mesma metodologia é aplicada nos grupos que consideram três e quatro fatores de coeficientes aleatórios.

É de interesse também, investigar o comportamento das curvas dos componentes aleatórios estimados por meio dos modelos selecionados em cada base de funções ortonormais nos três grupos distintos de efeitos aleatórios e conseqüentemente, examinar o comportamento das curvas estimadas para os coeficientes de herdabilidade obtidas a partir das curvas dos componentes aleatórios.

2 DESENVOLVIMENTO

2.1 Revisão da Literatura

Nesta seção é apresentada a fundamentação teórica para a proposta do modelo de regressão aleatória, as suposições do modelo e os cálculos algébricos e matriciais necessários para a descrição da função de verossimilhança restrita.

2.1.1 Bases de funções ortonormais

As seqüências ortonormais totais são, freqüentemente, utilizadas nas resoluções de problemas práticos, como em mecânica quântica e estatística. Por exemplo, em melhoramento genético, os modelos de regressão aleatória passaram a ser utilizados no ajuste de curva de crescimento ponderal para cada indivíduo em estudo, cujos efeitos aleatórios são representados por funções contínuas e em geral, as funções escolhidas são os polinômios de Legendre.

O objetivo desta subseção é mostrar os procedimentos matemáticos para se obter uma seqüência ortonormal total em $L^2[-1, 1]$ a qual consiste de funções que sejam relativamente simples de serem manipuladas. Como os polinômios formam uma classe de funções que atendem a essa necessidade, em geral são indicados para a construção de seqüências ortonormais.

Segundo Kreyszig (1978), um espaço X de todas as funções a valores reais com domínio em $[-1, 1]$ e dotado do produto interno dado por:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \int_{-1}^1 x(t)y(t)dt, \quad \text{para } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X, \quad (1)$$

define um espaço de Hilbert o qual é representado por $L^2[-1, 1]$.

Sejam as funções potências $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \dots$, em que

$$\varphi_0(t) = 1, \quad \varphi_1(t) = t, \quad \varphi_2(t) = t^2, \dots, \varphi_j(t) = t^j, \dots, \quad t \in [-1, 1].$$

Seja $\Delta(t) = (a + bt)^\alpha(a - bt)^\beta$, em que, $\alpha > -1$, $\beta > -1$; $a, b \in \mathbb{R}$ e $a \neq b$ se $a = 0$ ou $b = 0$. As restrições sobre α e β são necessárias para garantir a integrabilidade de $\Delta(t)$ sobre o intervalo $[-1, 1]$. Se α e β assumirem valores inteiros não negativos, $\Delta(t)$ é uma

função polinomial e portanto, $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$, em que $x_0(t) = \varphi_0(t)\Delta(t)$, $x_1(t) = \varphi_1(t)\Delta(t)$, $x_2(t) = \varphi_2(t)\Delta(t), \dots, x_j(t) = \varphi_j(t)\Delta(t), \dots$, $t \in [-1, 1]$, é uma seqüência de polinômios de peso $\Delta(t)$. Esta é uma seqüência linearmente independente de funções, logo, é possível aplicar o processo de Gram-Schmidt para construir uma seqüência de polinômios $(\mathbf{e}_k)_{k \in \mathbb{N}}$ que seja linearmente independente e ortonormalizada no espaço $L^2[-1, 1]$, com a seguinte propriedade:

$$\text{EG} \{ \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \} = \text{EG} \{ \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \}, \text{ para todo } n,$$

em que, $\text{EG} \{ \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \}$ é o conjunto de todas as combinações lineares possíveis entre os vetores $\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$, chamado de espaço gerado pelas funções polinomiais $\{ \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \}$. Analogamente, $\text{EG} \{ \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \}$ é o espaço gerado pelas funções potências com peso $\Delta(t)$ e expressas pelo conjunto de funções $\{ \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \}$.

No processo de Gram-Schmidt, primeiro se estabelece que $\mathbf{e}_0 = \frac{1}{\|\mathbf{x}_0\|} \mathbf{x}_0$. Em seguida, define-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \mathbf{x}_1 - \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle \mathbf{e}_0, \text{ para obter } \mathbf{e}_1 = \frac{1}{\|\mathbf{v}_1\|} \mathbf{v}_1; \\ \mathbf{v}_2 &= \mathbf{x}_2 - \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{e}_1 \rangle \mathbf{e}_1 - \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{e}_0 \rangle \mathbf{e}_0, \text{ para obter } \mathbf{e}_2 = \frac{1}{\|\mathbf{v}_2\|} \mathbf{v}_2; \\ &\vdots \\ \mathbf{v}_n &= \mathbf{x}_n - \langle \mathbf{x}_n, \mathbf{e}_{n-1} \rangle \mathbf{e}_{n-1} - \langle \mathbf{x}_n, \mathbf{e}_{n-2} \rangle \mathbf{e}_{n-2} - \dots - \langle \mathbf{x}_n, \mathbf{e}_0 \rangle \mathbf{e}_0, \text{ para obter } \mathbf{e}_n = \frac{1}{\|\mathbf{v}_n\|} \mathbf{v}_n. \end{aligned}$$

2.1.1.1 Polinômios de Legendre

Se $\alpha = \beta = 0$ em $\Delta(t)$, tem-se uma função peso constante e unitária, portanto, $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ passa a ser uma seqüência de funções potências e sua ortonormalização produz os polinômios de Legendre. A explicitação de suas expressões segue os seguintes passos:

Primeiro Passo: O primeiro elemento de $(\mathbf{e}_k)_{k \in \mathbb{N}}$ é o vetor que está na direção e no sentido do vetor $\mathbf{x}_0$ cuja norma é igual a 1. Dessa forma, o vetor $\mathbf{e}_0$ pode ser escrito como:

$$\mathbf{e}_0 = \frac{1}{\|\mathbf{x}_0\|} \mathbf{x}_0.$$

Como a norma do vetor $\mathbf{x}_0$ é a raiz quadrada do produto interno do vetor $\mathbf{x}_0$ com ele mesmo, tem-se

$$\|\mathbf{x}_0\| = (\langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 \rangle)^{1/2} = \left(\int_{-1}^1 x_0(t) x_0(t) dt \right)^{1/2} = \left(\int_{-1}^1 1 dt \right)^{1/2} = \sqrt{2},$$

logo,

$$e_0(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \times 1 = \sqrt{\frac{1}{2}}.$$

Segundo Passo: O vetor $\mathbf{x}_1$ pode ser escrito como a soma de dois vetores, o vetor projeção de $\mathbf{x}_1$ na direção de $\mathbf{e}_0$ com um vetor $\mathbf{v}_1$ perpendicular a esse vetor projeção. Assim,

$$\mathbf{x}_1 = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle \mathbf{e}_0 + \mathbf{v}_1.$$

Então, $\mathbf{v}_1 = \mathbf{x}_1 - \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle \mathbf{e}_0$ é um vetor não nulo, pois, a seqüência de funções potências $(\mathbf{x}_j)_{j \in \mathbb{N}}$ é linearmente independente e além disso, $\mathbf{v}_1 \perp \mathbf{e}_0$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v}_1, \mathbf{e}_0 \rangle &= \int_{-1}^1 v_1(t) e_0(t) dt = \int_{-1}^1 [e_0(t) x_1(t) - (e_0(t))^2 \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle] dt \\ &= \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle - (e_0(t))^2 \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle t \Big|_{-1}^1 = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle - 2 \frac{1}{2} \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle = 0, \end{aligned}$$

e desse modo pode-se tomar o vetor

$$\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\|\mathbf{v}_1\|} \mathbf{v}_1.$$

A Figura 1 transmite a idéia geométrica dos procedimentos algébricos descritos na construção da função $\mathbf{e}_1$.

Figura 1 – Segundo passo do processo de Gram-Schmidt

A expressão do vetor $\mathbf{v}_1$ no ponto t é

$$\begin{aligned} v_1(t) &= x_1(t) - \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{e}_0 \rangle e_0(t) = t - \langle t, \sqrt{2} \rangle \sqrt{2} \\ &= t - \sqrt{2} \int_{-1}^1 \sqrt{2} t \, dt = t - 2 \left(\frac{t^2}{2} \right) \Big|_{-1}^1 = t, \end{aligned}$$

e

$$\|\mathbf{v}_1\| = (\langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1 \rangle)^{1/2} = \left(\int_{-1}^1 t^2 \, dt \right)^{1/2} = \left(\frac{t^3}{3} \Big|_{-1}^1 \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}},$$

segue que, a função polinomial $e_1(t)$ pode ser escrita da forma

$$e_1(t) = \frac{1}{\|\mathbf{v}_1\|} v_1(t) = \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{3}}} t = \sqrt{\frac{3}{2}} t.$$

Terceiro Passo: Seguindo o raciocínio do passo dois, o vetor

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{x}_2 - \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{e}_0 \rangle \mathbf{e}_0 - \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{e}_1 \rangle \mathbf{e}_1$$

não é nulo, pois, $\mathbf{v}_2 \perp \mathbf{e}_0$ e $\mathbf{v}_2 \perp \mathbf{e}_1$. Então, pode-se definir

$$\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\|\mathbf{v}_2\|} \mathbf{v}_2.$$

Sendo $e_0(t) = \sqrt{\frac{1}{2}}$, $e_1(t) = \sqrt{\frac{3}{2}} t$ e $x_2(t) = t^2$, tem-se:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}_2, \mathbf{e}_0 \rangle e_0(t) &= \sqrt{\frac{1}{2}} \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{1}{2}} t^2 dt = \frac{1}{2} \frac{t^3}{3} \Big|_{-1}^1 = \frac{1}{3}; \\ \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{e}_1 \rangle e_1(t) &= \sqrt{\frac{3}{2}} t \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{3}{2}} t^3 dt = \frac{3}{2} t \left(\frac{t^4}{4} \Big|_{-1}^1 \right) = 0; \\ v_2(t) &= x_2(t) - \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{e}_1 \rangle e_1(t) - \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{e}_0 \rangle e_0(t) = t^2 - \frac{1}{3} = \frac{3t^2-1}{3}; \\ \|v_2\| &= \left(\int_{-1}^1 \left(\frac{3t^2-1}{3} \right)^2 dt \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{1}{9}} \left(\int_{-1}^1 (9t^4 - 6t^2 + 1) dt \right)^{1/2} = \\ &= \frac{1}{3} \left(\left(9 \frac{t^5}{5} - 6 \frac{t^3}{3} + t \right) \Big|_{-1}^1 \right)^{1/2} = \frac{1}{3} \left((9 \frac{2}{5} - 6 \frac{2}{3} + 2) \Big|_{-1}^1 \right)^{1/2} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{5}}.\end{aligned}$$

Então,

$$e_2(t) = \frac{1}{\|\mathbf{v}_2\|} v_2(t) = \frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{2}} \left(\frac{3t^2-1}{3} \right) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{2}} (3t^2 - 1).$$

Passo (n+1)-ésimo: Tomando o vetor $\mathbf{v}_n$ perpendicular aos vetores $\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_{(n-1)}$ e da forma

$$\mathbf{v}_n = \mathbf{x}_n - \sum_{k=0}^{n-1} \langle \mathbf{x}_n, \mathbf{e}_k \rangle \mathbf{e}_k,$$

verifica-se que $\mathbf{v}_n$ é um vetor não nulo.

De modo análogo aos passos anteriores, o vetor $\mathbf{e}_n$ pode ser da forma

$$\mathbf{e}_n = \frac{1}{\|\mathbf{v}_n\|} \mathbf{v}_n.$$

Cada vetor $\mathbf{e}_n$, $n \in \mathbb{N}$, assim obtido é um polinômio, pois, no processo de Gram-Schmidt foram tomadas combinações lineares dos vetores $\mathbf{x}'_j$ s e o grau de $\mathbf{e}_n$ é n . Para o propósito prático, é preciso explicitar as fórmulas da polinomial $e_n(t)$ para todo $n \in \mathbb{N}$. Segundo Kreyszig, (1978)

$$e_n(t) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(t), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

sendo que

$$P_n(t) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dt^n} [(t^2 - 1)^n]. \quad (2)$$

Aplicando o teorema binomial para $(t^2 - 1)^n$ e diferenciando o resultado n vezes, termo a termo, obtém-se da equação (2)

$$P_n(t) = \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{(2n-2j)!}{2^n j! (n-j)! (n-2j)!} t^{n-2j},$$

em que $N = \frac{n}{2}$ se n é par e $N = \frac{n-1}{2}$ se n é ímpar. Portanto,

$$P_0(t) = 1;$$

$$P_1(t) = t;$$

$$P_2(t) = \frac{1}{2}(3t^2 - 1);$$

$$P_3(t) = \frac{1}{2}(5t^3 - 3t);$$

$$P_4(t) = \frac{1}{8}(35t^4 - 30t^2 + 3); \quad P_5(t) = \frac{1}{8}(63t^5 - 70t^3 + 15t),$$

são exemplos explícitos para as polinomiais $P_n(t)$, $n \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$.

A expressão

$$\phi_n(t) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{(2n-2j)!}{2^n j! (n-j)! (n-2j)!} t^{n-2j},$$

em que $N = \frac{n}{2}$ se n é par e $N = \frac{n-1}{2}$ se n é ímpar, é chamada de polinômio de Legendre de grau n . Os gráficos dos seis primeiros polinômios de Legendre encontram-se na Figura 2 e explicitamente suas respectivas expressões são:

$$\phi_0(t) = \sqrt{\frac{1}{2}};$$

$$\phi_1(t) = \sqrt{\frac{3}{2}}t;$$

$$\phi_2(t) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{2}}(3t^2 - 1);$$

$$\phi_3(t) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{7}{2}}(5t^3 - 3t);$$

$$\phi_4(t) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{9}{2}}(35t^4 - 30t^2 + 3);$$

$$\phi_5(t) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{11}{2}}(63t^5 - 70t^3 + 15t).$$

Figura 2 – Gráficos dos seis primeiros polinômios de Legendre

2.1.1.2 Polinômios de Jacobi

Suponha que $x(t)$ e $y(t)$ são duas funções contínuas em $[a, b]$. Seja $w(t)$ uma função positiva e integrável em $[a, b]$. O produto interno de $x(t)$ e $y(t)$ com relação a $w(t)$, é definida por Khuri (2003) por

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_w = \int_{-1}^1 x(t)y(t)w(t)dt. \quad (3)$$

Os polinômios de Jacobi são ortogonais no intervalo $[-1, 1]$ com relação a função $w(t) = (1-t)^\alpha(1+t)^\beta$, $\alpha > -1$, $\beta > -1$ e são determinados tomando-se a sequência de funções potências $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ e aplicando-se o processo de ortonormalização de Gram-Schmidt com o produto interno dado por (3). Esses polinômios, denotados por $P_n^{(\alpha, \beta)}(t)$, podem ser derivados a partir da fórmula:

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(t) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-t)^{-\alpha} (1+t)^{-\beta} \frac{d^n}{dt^n} [(1-t)^{\alpha+n} (1+t)^{\beta+n}], \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Uma observação importante a se fazer é que esta fórmula conduz aos polinômios de Legendre quando $\alpha = \beta = 0$.

Uma sequência de polinômios de Jacobi modificada, $(\omega_n)_{n \in \mathbb{N}}$, pode ser obtida ortonormalizando, pelo processo de Gram-Schmidt, a sequência $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} = (\varphi_n \Delta)_{n \in \mathbb{N}}$, em que, $\Delta(t) = (1 - \frac{1}{2}t^2)$ com o produto interno definido em (1). Este procedimento é equivalente a ortonormalizar a sequência de funções potências $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de acordo com a definição (3), em que $w(t) = (\Delta(t))^2 = (1 - \frac{1}{2}t^2)^2$. Na Figura 3 estão os gráficos dos seis primeiros polinômios de Jacobi modificados e as suas expressões explícitas são:

1. $\omega_0(t) = \sqrt{\frac{30}{43}} \left[-\frac{1}{2}t^2 + 1 \right];$
2. $\omega_1(t) = \sqrt{\frac{210}{71}} \left[t(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right];$
3. $\omega_2(t) = \sqrt{\frac{94.815}{8.542}} \left[t^2(-\frac{1}{2}t^2 + 1) - \frac{71}{301}(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right];$
4. $\omega_3(t) = \sqrt{\frac{738.045}{17.438}} \left[t^3(-\frac{1}{2}t^2 + 1) - \frac{107}{213}t(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right];$
5. $\omega_4(t) = \sqrt{\frac{6.348.777.435}{38.543.072}} \left[t^4(-\frac{1}{2}t^2 + 1) - \frac{35.922}{46.981}t^2(-\frac{1}{2}t^2 + 1) + \frac{8.719}{140.943}(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right];$
6. $\omega_5(t) = \sqrt{\frac{56.162.876.765}{86.605.408}} \left[t^5(-\frac{1}{2}t^2 + 1) - \frac{115.790}{113.347}t^3(-\frac{1}{2}t^2 + 1) + \frac{238.065}{1.246.817}t(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right].$

Figura 3 – Gráficos dos seis primeiros polinômios de Jacobi modificados

Uma sequência ortonormal total no espaço $L^2[a, b]$ é $(\mathbf{q}_n)_{n \in \mathbb{N}}$, sendo que

$$\mathbf{q}_n = \frac{1}{\|\mathbf{p}_n\|} \mathbf{p}_n, \quad \mathbf{p}_n(t) = P_n(s), \quad s = s(t) = 1 + 2 \frac{t-b}{b-a} = 2 \frac{t-a}{b-a} - 1.$$

A demonstração segue observando que $a \leq t \leq b$ corresponde a $-1 \leq s \leq 1$ e a ortogonalidade é preservada pela transformação linear $t \mapsto s$.

Portanto, é possível obter uma sequência ortonormal em $L^2[a, b]$ para qualquer intervalo $[a, b]$.

2.1.1.3 Sistema de funções trigonométricas

O conjunto $\{1, \cos t, \text{sen } t, \cos 2t, \dots, \cos kt, \text{sen } kt, \dots\}$ é chamado de sistema de funções trigonométricas. Segundo Pallas (2005) é fácil mostrar que as funções do sistema trigonométrico satisfazem às relações de ortogonalidade sobre o intervalo $[-\pi, \pi]$:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos nt \cos kt \, dt = \begin{cases} 0 & \text{para } n \neq k, \\ \pi & \text{para } n = k; \end{cases} \quad (4)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nt \text{sen } kt \, dt = \begin{cases} 0 & \text{para } n \neq k, \\ \pi & \text{para } n = k; \end{cases} \quad (5)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nt \cos kt \, dt = 0 \quad \text{para todo } n \text{ e } k; \quad (6)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos kt \, dt = \begin{cases} 2\pi & \text{para } k = 0, \\ 0 & \text{para } k \neq 0; \end{cases} \quad (7)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } kt \, dt = 0 \quad \text{para todo } k. \quad (8)$$

Tomando as funções do sistema trigonométrico no espaço X das funções a valores reais com domínio em $[-\pi, \pi]$, o produto interno é dado da forma

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} x(t)y(t)dt, \quad \text{em que } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X.$$

Segue então, que o número

$$\|\mathbf{f}\| = \left[\int_{-\pi}^{\pi} f^2(t)dt \right]^{1/2},$$

em que $\mathbf{f}$ é uma função do sistema trigonométrico, é a norma da função $\mathbf{f}$.

Calculando a norma de todas as funções do sistema trigonométrico definidas no intervalo $[-\pi, \pi]$ obtêm-se:

$$\|\mathbf{1}\| = \sqrt{2\pi} \quad \text{e} \quad \|\text{sen } \mathbf{k}t\| = \|\cos \mathbf{k}t\| = \sqrt{\pi}, \quad \mathbf{k} = 1, 2, \dots$$

Logo, de (4) até (8) segue que o conjunto

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{\cos t}{\sqrt{\pi}}, \frac{\text{sen } t}{\sqrt{\pi}}, \frac{\cos 2t}{\sqrt{\pi}}, \dots, \frac{\cos kt}{\sqrt{\pi}}, \frac{\text{sen } kt}{\sqrt{\pi}}, \dots \right\}$$

é um sistema de funções trigonométricas ortonormais no intervalo $[-\pi, \pi]$.

As funções trigonométricas $\text{sen } t$ e $\text{cos } t$ são periódicas e seus respectivos períodos são iguais a 2π , o que implica que as funções trigonométricas ortonormais no intervalo $[-\pi, \pi]$ também são ortonormais no intervalo $[0, 2\pi]$. Dessa forma, o ajuste de um intervalo $[a, b]$ qualquer, em que $a < b$, para o intervalo $[0, 2\pi]$ é realizado pela seguinte transformação linear:

$$s = s(t) = 2\pi + 2\pi \frac{t - b}{b - a}.$$

A Figura 4 mostra o gráfico das seis primeiras funções trigonométricas com domínio no intervalo $[0, 2\pi]$.

Figura 4 – Gráficos das seis primeiras funções trigonométricas

2.1.2 Estimação de parâmetros pelo método da máxima verossimilhança

Para o estudo de estimação de componentes de variância pelo método da máxima verossimilhança considera-se o modelo misto

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e}, \quad (9)$$

em que $\mathbf{y}$ é um vetor de dados observados, $N \times 1$, $\mathbf{b}$ é um vetor de parâmetros de efeitos fixos, $p \times 1$, $\mathbf{X}$ é uma matriz de coeficientes conhecidos, $N \times p$, $\mathbf{u}$ é um vetor de parâmetros de efeitos aleatórios, $r \times 1$, $\mathbf{Z}$ é uma matriz de coeficientes, $N \times r$ e $\mathbf{e}$ é um vetor de erros, $N \times 1$. É assumido para o modelo (9) que $E(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\mathbf{b}$, $E(\mathbf{y}|\mathbf{u}) = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u}$, $E(\mathbf{u}) = E(\mathbf{e}) = 0$, $Var(\mathbf{u}) = \mathbf{G}$, $Var(\mathbf{e}) = \mathbf{R}$ e $Cov(\mathbf{u}, \mathbf{e}') = 0$, de modo que,

$$Var(\mathbf{y}) = Var(\mathbf{X}\mathbf{b}) + Var(\mathbf{Z}\mathbf{u}) + Var(\mathbf{e}) = \mathbf{Z}Var(\mathbf{u})\mathbf{Z}' + Var(\mathbf{e}) = \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \mathbf{R} = \mathbf{V}.$$

2.1.2.1 Estimando os efeitos fixos e aleatórios no modelo misto

Assumindo que $\mathbf{y}$, $\mathbf{u}$ e $\mathbf{e}$ tenham distribuição normal multivariada,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{u} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} \sim N \left(\begin{bmatrix} \mathbf{X}\mathbf{b} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \mathbf{R} & \vdots & \mathbf{Z}\mathbf{G} & \mathbf{R} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{G}\mathbf{Z}' & \vdots & \mathbf{G} & \emptyset \\ \mathbf{R} & \vdots & \emptyset & \mathbf{R} \end{bmatrix} \right), \quad (10)$$

em que $\emptyset$ representa uma matriz nula e $\mathbf{0}$ um vetor nulo. Martins et al. (1997) descrevem a função densidade de probabilidade conjunta de $\mathbf{y}$ e $\mathbf{u}$ como o produto da função densidade de probabilidade condicional de $\mathbf{y}$ dado $\mathbf{u}$, pela função densidade de probabilidade de $\mathbf{u}$,

$$f(\mathbf{y}, \mathbf{u}) = f(\mathbf{y}|\mathbf{u})f(\mathbf{u});$$

ou seja,

$$f(\mathbf{y}, \mathbf{u}) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}|\mathbf{R}|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{Z}\mathbf{u})' \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{Z}\mathbf{u})] \right\} \frac{1}{(2\pi)^{r/2}|\mathbf{G}|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{u}' \mathbf{G}^{-1} \mathbf{u}] \right\}, \quad (11)$$

em que N e r são, respectivamente, o posto das matrizes $\mathbf{R}$ e $\mathbf{G}$. Para a maximização da função dada por (11), toma-se $\mathcal{L}(\mathbf{b}, \mathbf{u}) = \ln [f(\mathbf{y}, \mathbf{u})]$, daí,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{b}, \mathbf{u}) &= -\frac{1}{2}(N - r) \ln(2\pi) - \frac{1}{2}(\ln |\mathbf{R}| + \ln |\mathbf{G}|) - \\ &\quad -\frac{1}{2} (\mathbf{y}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} - 2\mathbf{y}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X}\mathbf{b} - 2\mathbf{y}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z}\mathbf{u} + 2\mathbf{b}' \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{b}' \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X}\mathbf{b} + \\ &\quad + \mathbf{u}' \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{u}' \mathbf{G}^{-1} \mathbf{u}). \end{aligned}$$

Aplicando os resultados apresentados no Anexo B, na derivação de $\mathcal{L}(\mathbf{b}, \mathbf{u})$ em relação a $\mathbf{b}$ e $\mathbf{u}$, obtêm-se as seguintes equações:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{b}, \mathbf{u})}{\partial \mathbf{b}} &= \frac{\partial(\mathbf{y}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} - \frac{\partial(\mathbf{b}' \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \mathbf{u})}{\partial \mathbf{b}} - \frac{1}{2} \frac{\partial(\mathbf{u}' \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \mathbf{u})}{\partial \mathbf{b}} \\ &= \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} - \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \mathbf{u} \end{aligned} \quad (12)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{b}, \mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} &= \frac{\partial(\mathbf{y}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} - \frac{\partial(\mathbf{b}' \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} - \frac{1}{2} \frac{\partial(\mathbf{b}' \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} \mathbf{b})}{\partial \mathbf{u}} - \frac{1}{2} \frac{\partial(\mathbf{u}' \mathbf{G}^{-1} \mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \\ &= \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} - \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \mathbf{u} + \mathbf{G}^{-1} \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (13)$$

Tomando $\hat{\mathbf{b}}$ e $\hat{\mathbf{u}}$ de tal maneira que as equações (12) e (13) se tornem nulas, chega-se às equações de modelos mistos (EMM):

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} - \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} \hat{\mathbf{b}} - \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \hat{\mathbf{u}} \\ \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} - \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} \hat{\mathbf{b}} - \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \hat{\mathbf{u}} - \mathbf{G}^{-1} \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \Leftrightarrow \\ \begin{bmatrix} \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} \hat{\mathbf{b}} + \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \hat{\mathbf{u}} \\ \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} \hat{\mathbf{b}} + \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{G}^{-1} \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} \\ \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} \end{bmatrix} \Leftrightarrow \\ \begin{bmatrix} \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} & \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} & \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{X}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} \\ \mathbf{Z}' \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

Henderson et al. provaram que a solução $\hat{\mathbf{b}}$, fornecida pelo sistema (14), é também uma solução de mínimos quadrados generalizados (GLS), utilizando-se um modelo que ignora $\mathbf{u}$, ou seja,

$$\mathbf{y} = \mathbf{X} \mathbf{b} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

em que $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{Z} \mathbf{u} + \mathbf{e}$.

Nesse caso, $E(\mathbf{y}) = \mathbf{X} \mathbf{b}$, $Var(\mathbf{y}) = \mathbf{V} = \mathbf{Z} \mathbf{G} \mathbf{Z}' + \mathbf{R}$ e a função densidade de probabilidade de $\mathbf{y}$ pode ser escrita na forma

$$f(\mathbf{y}) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2} |\mathbf{V}|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [(\mathbf{y} - \mathbf{X} \mathbf{b})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X} \mathbf{b})] \right\}.$$

Para a maximização dessa função toma-se $\mathcal{L}(\mathbf{b}) = \ln[f(\mathbf{y})]$, daí,

$$\mathcal{L}(\mathbf{b}) = -\frac{1}{2} N \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{V}| - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X} \mathbf{b})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X} \mathbf{b}).$$

Aplicando as regras de derivação apresentadas no Anexo B na derivação da função $\mathcal{L}(\mathbf{b})$ em relação a $\mathbf{b}$, obtém-se:

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} = \mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y} - \mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}\mathbf{b}. \quad (15)$$

Tomando $\hat{\mathbf{b}}$ de tal modo que a equação (15) se torne nula, obtêm-se as equações GLS para $\mathbf{b}$ que são dadas por

$$\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}. \quad (16)$$

Na segunda equação em (14) verifica-se que

$$\hat{\mathbf{u}} = (\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} - (\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}}. \quad (17)$$

Substituindo $\hat{\mathbf{u}}$ nas equações de $\hat{\mathbf{b}}$ em (14), pelo segundo membro da equação (17), tem-se

$$\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} - \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} + \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \Leftrightarrow$$

$$\mathbf{X}'[\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}]\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{X}'[\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}]\mathbf{y}.$$

Como as equações GLS para $\hat{\mathbf{b}}$, dadas por (16), são $\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}$, prova-se que

$$\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}. \quad (18)$$

De fato, pós-multiplicando ambos os membros do sistema (18) por $\mathbf{V} = \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \mathbf{R}$, obtêm-se as seguintes equivalências:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1} &= \mathbf{V}^{-1} \quad \Leftrightarrow \\ [\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}](\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \mathbf{R}) &= \mathbf{V}^{-1}\mathbf{V} \quad \Leftrightarrow \\ \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \mathbf{R}^{-1}\mathbf{R} - [\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \\ + \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{R}] &= \mathbf{I} \quad \Leftrightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R^{-1}ZGZ' + I - [R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + G^{-1})^{-1}Z'R^{-1}ZGZ' + \\
+ R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + G^{-1})^{-1}Z'I] &= I \Leftrightarrow \\
R^{-1}ZGZ' + I - [R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + G^{-1})^{-1}(Z'R^{-1}ZGZ' + Z')] &= I \Leftrightarrow \\
R^{-1}ZGZ' + I - [R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + G^{-1})^{-1}(Z'R^{-1}ZGZ' + G^{-1}GZ')] &= I \Leftrightarrow \\
R^{-1}ZGZ' + I - [R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + G^{-1})^{-1}(Z'R^{-1}Z + G^{-1})GZ'] &= I \Leftrightarrow \\
R^{-1}ZGZ' + I - R^{-1}ZIGZ' &= I \Leftrightarrow \\
I &= I.
\end{aligned}$$

Harville (1977) substitui $\hat{\mathbf{u}}$ por $\mathbf{G}\hat{\mathbf{v}}$ e neste caso, o sistema de equações normais do modelo misto equivalente ao sistema apresentado em (14) é

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G} + \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{v}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \end{bmatrix}. \quad (19)$$

A segunda equação em (19) é equivalente a

$$\begin{aligned}
(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G} + \mathbf{I})\hat{\mathbf{v}} &= \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} - \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} \Leftrightarrow \\
\hat{\mathbf{v}} &= (\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G} + \mathbf{I})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}}). \quad (20)
\end{aligned}$$

Uma demonstração análoga a que foi realizada para mostrar a igualdade em (18) prova que

$$\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}(\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1},$$

e, além disso, tem-se que

$$\begin{aligned}
\mathbf{Z}'\mathbf{V}^{-1} &= \mathbf{Z}'[\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}(\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}] \Leftrightarrow \\
\mathbf{Z}'\mathbf{V}^{-1} &= \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}(\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1} \\
&\quad - (\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1} + (\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1} \Leftrightarrow \\
\mathbf{Z}'\mathbf{V}^{-1} &= \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1} - (\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G} + \mathbf{I})(\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1} \\
&\quad + (\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1} \Leftrightarrow \\
\mathbf{Z}'\mathbf{V}^{-1} &= (\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}. \quad (21)
\end{aligned}$$

Substituindo (21) em (20) obtém-se

$$\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{Z}'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}}). \quad (22)$$

Por (16), sabe-se que $\hat{\mathbf{b}} = (\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}$, portanto, (22) pode ser reescrita por

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{v}} &= \mathbf{Z}'\mathbf{V}^{-1}[\mathbf{y} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}] \Leftrightarrow \\ \hat{\mathbf{v}} &= \mathbf{Z}'[\mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}]\mathbf{y} = \mathbf{Z}'\mathbf{P}\mathbf{y},\end{aligned}$$

com

$$\mathbf{P} = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}. \quad (23)$$

Isolando $\hat{\mathbf{b}}$ na primeira equação do sistema (19) tem-se

$$\hat{\mathbf{b}} = (\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} - \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}\hat{\mathbf{v}})$$

que ao ser substituído na segunda equação do sistema (19) obtém-se

$$\begin{aligned}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} - \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}\hat{\mathbf{v}}) + (\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})\hat{\mathbf{v}} &= \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \Leftrightarrow \\ (\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G})\hat{\mathbf{v}} - \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}\hat{\mathbf{v}} &= \\ \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} - \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} &\Leftrightarrow \\ [\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G} - \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}]\hat{\mathbf{v}} &= \\ \mathbf{Z}'[\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}]\mathbf{y} &\Leftrightarrow \\ \{\mathbf{I} + \mathbf{Z}'[\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}]\mathbf{Z}\mathbf{G}\}\hat{\mathbf{v}} &= \\ \mathbf{Z}'[\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}]\mathbf{y} &\Leftrightarrow \\ (\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{S}\mathbf{Z}\mathbf{G})\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{Z}'\mathbf{S}\mathbf{y} &\Leftrightarrow \\ \hat{\mathbf{v}} = (\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{S}\mathbf{Z}\mathbf{G})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{S}\mathbf{y},\end{aligned}$$

com $\mathbf{S} = \mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}$.

O sistema (19) é importante por não exigir a inversão da matriz $\mathbf{G}$, porém, em (14), a matriz de coeficientes do sistema sempre é definida positiva simétrica ou semidefinida, o que pode ser uma propriedade útil do ponto de vista computacional.

2.1.3 Máxima verossimilhança restrita - REML

Segundo Harville (1977) e Meyer (1991), o método de máxima verossimilhança para estimar os componentes de variância, constantemente é criticado por não levar em consideração os graus de liberdade perdidos na estimação dos efeitos fixos contidos no vetor $\mathbf{b}$.

Este problema pode ser contornado usando o método de aproximação de máxima verossimilhança restrita, no qual substitui o vetor respostas $\mathbf{y}$ por uma combinação linear, chamada de contraste de erros, $\mathbf{Sy}$ com esperança zero, isto é, $\mathbf{SX} = \mathbf{0}$. O número máximo possível de combinações lineares de contrastes de erros é $N - p^*$, em que p^* é o posto da matriz $\mathbf{X}$.

Searle (1979) definiu

$$\mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}' \quad (24)$$

e observou a seguinte propriedade:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^2 &= \mathbf{M}\mathbf{M} = (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}')(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}') \\ &= \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}' - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}' + \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}' = \mathbf{M} = \mathbf{M}'. \end{aligned} \quad (25)$$

Além disso,

$$\mathbf{MX} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{X}'\mathbf{M} = \mathbf{0} \quad \text{e} \quad (26)$$

$$\text{tr}(\mathbf{M}) = \text{tr}(\mathbf{I}) - \text{tr}(\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}') = r(\mathbf{M}) = N - p^*, \quad (27)$$

em que $r(\mathbf{M})$ representa o posto de $\mathbf{M}$.

Por (25) e (27) pode-se concluir que $\mathbf{M}$ é simétrica e idempotente de posto $N - p^*$ e portanto, sua decomposição na forma canônica sob similaridade ortogonal é

$$\mathbf{UMU}' = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N-p^*} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix},$$

em que $\mathbf{U}$ é uma matriz ortogonal, ou seja, $\mathbf{UU}' = \mathbf{I}$.

Considerando a partição de $\mathbf{U}' = [\mathbf{A}_{N-p^*} \quad \mathbf{Q}_{p^*}]$, em que $\mathbf{A}$ é formada pelas primeiras $N - p^*$ colunas de $\mathbf{U}'$, tem-se

$$\mathbf{M} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N-p^*} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \mathbf{U}' = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{Q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N-p^*} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A}' \\ \mathbf{Q}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} \mathbf{I}_{N-p^*} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A}' \\ \mathbf{Q}' \end{bmatrix} = \mathbf{A} \mathbf{A}'. \quad (28)$$

Os vetores colunas de $\mathbf{A}$ vêm da matriz ortogonal $\mathbf{U}$, portanto, $\mathbf{A}' \mathbf{A} = \mathbf{I}_{N-p^*}$. Pré-multiplicando por $\mathbf{A}'$ e pós-multiplicando por $\mathbf{A}$ a matriz $\mathbf{M} = \mathbf{A} \mathbf{A}'$ obtém-se

$$\mathbf{M} \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}' \mathbf{A} = \mathbf{I}_{N-p^*} \mathbf{A} = \mathbf{A} \quad \text{e} \quad \mathbf{A}' \mathbf{M} = \mathbf{A}' \mathbf{A} \mathbf{A}' = \mathbf{I}_{N-p^*} \mathbf{A}' = \mathbf{A}'; \quad (29)$$

e pós-multiplicando $\mathbf{A}' \mathbf{M} = \mathbf{A}'$ por $\mathbf{X}$ e usando o fato que $\mathbf{M} \mathbf{X} = \mathbf{0}$, apresentado em (26), chega-se à expressão $\mathbf{A}' \mathbf{X} = \mathbf{0}$.

Com a ajuda de (29) é fácil verificar que $\mathbf{A}(\mathbf{A}' \mathbf{V} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}'$ é a inversa Moore-Penrose de $\mathbf{M} \mathbf{V} \mathbf{M}$. A inversa, $(\mathbf{A}' \mathbf{V} \mathbf{A})^{-1}$ existe porque $\mathbf{A}'$ tem posto linha completo e $\mathbf{V}$ é uma matriz definida positiva.

A matriz dada em (23),

$$\mathbf{P} = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-} \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1}, \quad (30)$$

é uma generalização da matriz $\mathbf{M}$, pois, quando $\mathbf{V} = \mathbf{I}$, $\mathbf{P}$ torna-se $\mathbf{M}$. Com operações algébricas simples, é possível mostrar que $\mathbf{P}$ possui muitas propriedades e as mais simples são:

$$\mathbf{P} \mathbf{X} = \mathbf{0} \quad \text{e} \quad \mathbf{X}' \mathbf{P} = \mathbf{0}; \quad (31)$$

$$\mathbf{P} \mathbf{V} = \mathbf{I} - \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-} \mathbf{X}'; \quad (32)$$

$$\mathbf{P} \mathbf{V} \mathbf{P} = \mathbf{P}; \quad (33)$$

$$(\mathbf{P} \mathbf{V})^2 = \mathbf{P} \mathbf{V}; \quad (34)$$

$$\text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{V}) = r(\mathbf{P} \mathbf{V}) = r(\mathbf{P}) = N - p^*. \quad (35)$$

Searle (1979) apresenta algumas relações importantes entre as matrizes $\mathbf{M}$ e $\mathbf{P}$, iniciando com

$$\mathbf{P} \mathbf{M} = \mathbf{P} - \mathbf{P} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-} \mathbf{X}' = \mathbf{P} \quad \text{e} \quad \mathbf{M} \mathbf{P} = \mathbf{P} - \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-} \mathbf{X}' \mathbf{P} = \mathbf{P}, \quad (36)$$

pois, $\mathbf{P}\mathbf{X} = \mathbf{0}$ e $\mathbf{X}'\mathbf{P} = \mathbf{0}$ conforme (31). Pós-multiplicando (32) por $\mathbf{M}$ e usando (26) tem-se, $\mathbf{P}\mathbf{V}\mathbf{M} = \mathbf{M} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{M} = \mathbf{M}$, e do mesmo modo, pós-multiplicando (36) por $\mathbf{V}\mathbf{M}$ obtém-se

$$\mathbf{P}\mathbf{M}\mathbf{V}\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{V}\mathbf{M} = \mathbf{M}\mathbf{P}\mathbf{V}\mathbf{M} = \mathbf{M}. \quad (37)$$

De (36) e (37) estabelece-se que $\mathbf{P}$ é a inversa de Moore-Penrose da matriz $\mathbf{M}\mathbf{V}\mathbf{M}$ e por unicidade, conclui-se que

$$\mathbf{P} = \mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}'. \quad (38)$$

Se em $\mathbf{V} = \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \mathbf{R}$, a matriz $\mathbf{Z}$ for nula, então, $\mathbf{V}$ torna-se $\mathbf{R}$ e $\mathbf{P}$ dada em (23) torna-se

$$\mathbf{S} = \mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{P}, \text{ quando } \mathbf{Z} = \mathbf{0}.$$

Os mesmos resultados apresentados de (31) até (38) são válidos para a matriz $\mathbf{S}$, evidentemente, substituindo as matrizes $\mathbf{P}$ por $\mathbf{S}$ e $\mathbf{V}$ por $\mathbf{R}$.

Uma matriz

$$\mathbf{K}' = \mathbf{W}'\mathbf{M}, \quad (39)$$

para alguma matriz $\mathbf{W}'$, de “rank” linha completo igual a $N - p^*$ e $\mathbf{M}$ dada por (24) satisfaz $\mathbf{K}'\mathbf{X} = \mathbf{0}$, pois, $\mathbf{M}\mathbf{X} = \mathbf{0}$ conforme (26).

Searle (1979) mostra que a função de verossimilhança é invariante pela escolha da matriz $\mathbf{K}'$, pois, a parte diferenciável do logaritmo natural da função de verossimilhança é a mesma para todas as matrizes $\mathbf{K}' = \mathbf{W}'\mathbf{M}$ possíveis.

Como $E(\mathbf{K}'\mathbf{y}) = \mathbf{0}$ e $Var(\mathbf{K}'\mathbf{y}) = \mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K}$, segue que $\mathbf{K}'\mathbf{y} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K})$ e a função de densidade conjunta de $\mathbf{K}'\mathbf{y}$ é dada por

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

O logaritmo da função de verossimilhança é dado por

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{(N - p^*)}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K}|) - \frac{1}{2} \mathbf{y}'\mathbf{K}(\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K}')^{-1}\mathbf{K}'\mathbf{y}, \quad (40)$$

em que $\boldsymbol{\theta}$, com elementos θ_i , $i = 1, \dots, k$, é o vetor de componentes de variância e covariância a serem estimados de modo que $\mathbf{V}$ seja linear em $\boldsymbol{\theta}$, ou seja, $\mathbf{V} = \sum_{i=1}^k \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \theta_i} \theta_i$.

De (28), segue que, $\mathbf{K}' = \mathbf{W}'\mathbf{M} = \mathbf{W}'\mathbf{A}\mathbf{A}'$ e, portanto, pode-se escrever $\mathbf{K}' = \mathbf{F}'\mathbf{A}'$, em que $\mathbf{F}' = ({}_{N-p^*}\mathbf{W}'_N)({}_N\mathbf{A}_{N-p^*})$.

Além disso, $N - p^* = r(\mathbf{K}') \leq r(\mathbf{F}') \leq N - p^*$, daí, $r(\mathbf{F}') = N - p^*$, o que indica a não singularidade de $\mathbf{F}$. Então,

$$|\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K}| = |\mathbf{F}'\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{F}| = |\mathbf{F}'||\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}||\mathbf{F}| = |\mathbf{F}|^2|\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}| \quad \text{e} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}(\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K})^{-1}\mathbf{K}' &= \mathbf{A}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\mathbf{A}' \\ &= \mathbf{A}(\mathbf{F}^{-1})^{-1}(\mathbf{F}'\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{F})^{-1}[(\mathbf{F}')^{-1}]^{-1}\mathbf{A}' \\ &= \mathbf{A}[(\mathbf{F}')^{-1}\mathbf{F}'\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{F}\mathbf{F}^{-1}]^{-1}\mathbf{A}' \\ &= \mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}' = \mathbf{P}. \end{aligned} \quad (42)$$

Substituindo (41) e (42) em (40) obtém-se a expressão

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{(N - p^*)}{2} \ln(2\pi) - \ln(|\mathbf{F}|) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}|) - \frac{1}{2} \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y}. \quad (43)$$

Considerando a partição de $\mathbf{X}$ da forma, ${}_N\mathbf{X}_q = [\mathbf{X}^* \quad \mathbf{Q}]$, em que ${}_N\mathbf{X}_{p^*}^*$ é uma matriz constituída por quaisquer p^* colunas linearmente independentes de $\mathbf{X}$ e $\mathbf{Q}$ uma matriz, $N \times (q - p^*)$, formada pelas colunas de $\mathbf{X}$ que não aparecem em $\mathbf{X}^*$, pode-se observar que

$$\mathbf{K}'\mathbf{X} = \mathbf{K}'[\mathbf{X}^* \quad \mathbf{Q}] = [\mathbf{K}'\mathbf{X}^* \quad \mathbf{K}'\mathbf{Q}] = \mathbf{0},$$

então, as linhas de $\mathbf{K}'$ e as colunas de $\mathbf{X}^*$ são linearmente independentes e portanto, a matriz $[\mathbf{K} \quad \mathbf{X}^*]$ de ordem N é uma matriz não singular. Em particular, se $\mathbf{F} = \mathbf{I}$, segue que $\mathbf{K}' = \mathbf{A}'$, logo, $[\mathbf{A} \quad \mathbf{X}^*]$ também é não singular. Dessa forma,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}' \\ \mathbf{X}^{*'} \end{bmatrix} \mathbf{V} \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{X}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A} & \mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{X}^* \\ \mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}\mathbf{A} & \mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}\mathbf{X}^* \end{bmatrix}. \quad (44)$$

Se uma matriz quadrada $\mathbf{A}$, for subdividida da forma

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{D} & \mathbf{E} \end{bmatrix},$$

em que as submatrizes da diagonal principal são quadradas e $\mathbf{E}$ é não singular, da álgebra linear tem-se que

$$|\mathbf{A}| = |\mathbf{E}||\mathbf{B} - \mathbf{C}\mathbf{E}^{-1}\mathbf{D}|. \quad (45)$$

Uma outra propriedade do determinante é: $|\mathbf{I} + \mathbf{A}\mathbf{E}| = |\mathbf{I} + \mathbf{E}\mathbf{A}|$, em que $\mathbf{A}$ e $\mathbf{E}$ são matrizes quadradas e compatíveis com a operação produto de matrizes.

Tomando o determinante em ambos os lados em (44) e aplicando (45), obtém-se

$$|\mathbf{V}| \begin{vmatrix} \mathbf{A}'\mathbf{A} & \mathbf{A}'\mathbf{X}^* \\ \mathbf{X}^{*'}\mathbf{A} & \mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^* \end{vmatrix} = |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}| |\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}\mathbf{X}^* - \mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}\mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{X}^*|,$$

recordando que $\mathbf{A}'\mathbf{A} = \mathbf{I}$ e $\mathbf{A}'\mathbf{X} = \mathbf{0}$, e, portanto, $\mathbf{A}'\mathbf{X}^* = \mathbf{0}$, segue que

$$|\mathbf{V}| \begin{vmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^* \end{vmatrix} = |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}| |\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V} \{ \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}' \} \mathbf{V}\mathbf{X}^*|;$$

isto é, usando (38), a igualdade acima pode ser escrita da forma

$$|\mathbf{V}| |\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*| = |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}| |\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}(\mathbf{V}^{-1} - \mathbf{P})\mathbf{V}\mathbf{X}^*|. \quad (46)$$

Substituindo $\mathbf{X}$ por $\mathbf{X}^*$ na definição de $\mathbf{P}$ em (23), obtém-se a matriz

$$\mathbf{P}^* = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}.$$

Para provar que $\mathbf{P} = \mathbf{P}^*$ é preciso observar que a matriz $\mathbf{V}^{-1}$ é simétrica e definida positiva, portanto, existe uma matriz $\mathbf{L}$ não singular tal que $\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{L}'\mathbf{L}$. Dessa forma, $\mathbf{L}\mathbf{X} = [\mathbf{L}\mathbf{X}^* \quad \mathbf{L}\mathbf{Q}]$. Então, a expressão matricial de $\mathbf{P}$ dada na equação (23) pode ser da forma

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1} \\ &= \mathbf{L}'\mathbf{L} - \mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{L}'\mathbf{L} \\ &= \mathbf{L}' \left\{ \mathbf{I} - [\mathbf{L}\mathbf{X}^* \quad \mathbf{L}\mathbf{Q}] \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}' \\ \mathbf{Q}'\mathbf{L}' \end{bmatrix} [\mathbf{L}\mathbf{X}^* \quad \mathbf{L}\mathbf{Q}]^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}' \\ \mathbf{Q}'\mathbf{L}' \end{bmatrix} \right\} \mathbf{L} \\ &= \mathbf{L}' \left\{ \mathbf{I} - [\mathbf{L}\mathbf{X}^* \quad \mathbf{L}\mathbf{Q}] \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{X}^* & \mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{Q} \\ \mathbf{Q}'\mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{X}^* & \mathbf{Q}'\mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{Q} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}' \\ \mathbf{Q}'\mathbf{L}' \end{bmatrix} \right\} \mathbf{L} \\ &= \mathbf{L}' \left\{ \mathbf{I} - [\mathbf{L}\mathbf{X}^* \quad \mathbf{L}\mathbf{Q}] \begin{bmatrix} (\mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{X}^*)^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}' \\ \mathbf{Q}'\mathbf{L}' \end{bmatrix} \right\} \mathbf{L} \\ &= \mathbf{L}' \left[\mathbf{I} - \mathbf{L}\mathbf{X}^*(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}' \right] \mathbf{L} \\ &= \mathbf{L}'\mathbf{L} - \mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{X}^*(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}'\mathbf{L}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{L}'\mathbf{L} \\ &= \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{P}^*, \text{ portanto,} \\ \mathbf{P} &= \mathbf{P}^*. \end{aligned} \quad (47)$$

Agora, substituindo $\mathbf{P} = \mathbf{P}^*$, obtido em (47), na igualdade (46), resulta em

$$\begin{aligned}
|\mathbf{V}||\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*| &= |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}||\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}(\mathbf{V}^{-1} - \mathbf{P}^*)\mathbf{V}\mathbf{X}^*| \\
&= |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}||\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}(\mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1} + \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1})\mathbf{V}\mathbf{X}^*| \\
&= |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}||\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{X}^*| \\
&= |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}||\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*| \\
&= |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}||\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*|(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*)^{-1}|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*| \\
&= |\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}|\frac{|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*|^2}{|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|} \quad \Rightarrow \\
|\mathbf{A}'\mathbf{V}\mathbf{A}| &= \frac{|\mathbf{V}||\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|}{|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*|}. \tag{48}
\end{aligned}$$

De (48) a expressão do logaritmo da função de verossimilhança descrita em (43) pode ser reescrita da forma

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{(N-p^*)}{2} \ln(2\pi) - \ln(|\mathbf{F}|) + \ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*|) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{V}|) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|) - \frac{1}{2} \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y}. \tag{49}$$

Os três primeiros termos em (49) dependem somente de $\mathbf{X}$, $\mathbf{A}$ e $\mathbf{K}$, portanto, não dependem de nenhum parâmetro do modelo. Logo, a menos de uma constante aditiva, o logaritmo da função de verossimilhança de $\mathbf{K}'\mathbf{y}$ para qualquer matriz $\mathbf{K}'$ especificada em (39) é

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_1(\boldsymbol{\theta}) &= -\frac{1}{2} \ln(|\mathbf{V}|) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|) - \frac{1}{2} \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y} \\
&= -\frac{1}{2} \ln(|\mathbf{V}|) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|) - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}}) \\
&= -\frac{1}{2} \ln(|\mathbf{V}|) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|) - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}})' \mathbf{P} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}})
\end{aligned} \tag{50}$$

Trocando a matriz $\mathbf{X}$ por $\mathbf{X}^*$ na matriz de coeficientes das equações normais dadas em (14), tem-se

$$\mathbf{C}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}^* & \mathbf{X}^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}^* & \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1} \end{bmatrix}.$$

Aplicando (45), pode-se escrever

$$|\mathbf{C}^*| = |\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}| |\mathbf{X}^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}^* - \mathbf{X}^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}^*|$$

$$\begin{aligned}
|\mathbf{C}^*| &= |\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}| |\mathbf{X}^{*'} \underbrace{\{\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\}}_{=\mathbf{V}^{-1} \text{ por (18)}} \mathbf{X}^*| \\
|\mathbf{C}^*| &= |\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}| |\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*| \Rightarrow \\
\ln(|\mathbf{C}^*|) &= \ln(|\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}|) + \ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|) \Rightarrow \\
\ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|) &= \ln(|\mathbf{C}^*|) - \ln(|\mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}|). \tag{51}
\end{aligned}$$

Observando que

$$\begin{aligned}
|\mathbf{V}| &= |\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \mathbf{R}| = |\mathbf{R}||\mathbf{I} + \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'| \\
|\mathbf{V}| &= |\mathbf{R}||\mathbf{I} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{G}| \\
|\mathbf{V}| &= |\mathbf{R}||\mathbf{G}^{-1} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}||\mathbf{G}| \Rightarrow \\
\ln(|\mathbf{V}|) &= \ln(|\mathbf{R}|) + \ln(|\mathbf{G}^{-1} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}|) + \ln(|\mathbf{G}|) \Rightarrow \\
\ln(|\mathbf{G}^{-1} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}|) &= \ln(|\mathbf{V}|) - \ln(|\mathbf{R}|) - \ln(|\mathbf{G}|), \tag{52}
\end{aligned}$$

e substituindo (52) na expressão (51), obtém-se

$$\begin{aligned}
\ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|) &= \ln(|\mathbf{C}^*|) - (\ln(|\mathbf{V}|) - \ln(|\mathbf{R}|) - \ln(|\mathbf{G}|)) \\
\ln(|\mathbf{X}^{*'}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}^*|) &= \ln(|\mathbf{C}^*|) - \ln(|\mathbf{V}|) + \ln(|\mathbf{R}|) + \ln(|\mathbf{G}|),
\end{aligned}$$

Assim, o logaritmo da função de verossimilhança dada por (50) pode ser reescrita da forma

$$-2\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \text{const} + \ln(|\mathbf{R}|) + \ln(|\mathbf{G}|) + \ln(|\mathbf{C}^*|) + \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y}, \tag{53}$$

concordando com a expressão do logaritmo da função de verossimilhança apresentado por Meyer (1989 e 1998).

2.1.4 Modelo animal

Se $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e}$, dado por (9), representa um modelo animal linear multivariado, então $\mathbf{u}$ sempre inclui um subvetor de efeitos genéticos aditivos dos animais, $\mathbf{a}$, e pode conter efeitos aleatórios adicionais, como por exemplo, efeitos genéticos maternal dos animais e efeitos ambientais permanentes.

Para simplificar, suponha que $\mathbf{u} = \mathbf{a}$ e que todos os animais tenham sido medidos em todas as t idades e em cada idade uma única vez.

Sejam $\mathbf{G}_0$ e $\mathbf{R}_0$ as matrizes, $t \times t$, de covariâncias genética aditiva e residual, respectivamente, entre as medidas. Isto significa que $\text{var}(\mathbf{a}) = \mathbf{G} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{G}_0$, em que $\mathbf{A}$ é a matriz de parentesco dos animais e $\otimes$ representa o produto direto de matrizes.

Assumi-se que $\mathbf{y}$ esteja ordenado de acordo com as idades dentro dos animais e que a $\text{var}(\mathbf{e}) = \mathbf{R} = \mathbf{I}_N \otimes \mathbf{R}_0$, com $\mathbf{I}_N$ representando a matriz identidade de ordem N .

Usando os resultados do Anexo A, o logaritmo da função de verossimilhança restrita dada por (53), passa a ser

$$\begin{aligned}
 -2\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) &= \text{const} + \ln(|\mathbf{R}|) + \ln(|\mathbf{G}|) + \ln(|\mathbf{C}^*|) + \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y} \\
 &= \text{const} + \ln(|\mathbf{I}_N \otimes \mathbf{R}_0|) + \ln(|\mathbf{A} \otimes \mathbf{G}_0|) + \ln(|\mathbf{C}^*|) + \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y} \\
 &= \text{const} + \ln(|\mathbf{I}_N|^t |\mathbf{R}_0|^N) + \ln(|\mathbf{A}|^t |\mathbf{G}_0|^{N_A}) + \ln(|\mathbf{C}^*|) + \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y} \\
 &= \text{const} + N \ln(|\mathbf{R}_0|) + t \ln(|\mathbf{A}|) + N_A \ln(|\mathbf{G}_0|) + \ln(|\mathbf{C}^*|) + \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y},
 \end{aligned}$$

em que, N_A é o número total de animais na análise, incluindo todos os parentes que não possuem registros de dados.

2.1.5 Funções de covariâncias

Os pesos corporais de gado de corte observados ao longo da vida dos animais constituem uma das principais fontes de informação para as avaliações genéticas, imprescindíveis para a tomada de decisão, como por exemplo, num programa de melhoramento de animais bovinos voltados para a produção de carne.

Os pesos corporais de um animal podem ser tomados num conjunto finito de pontos do intervalo da reta que representa o período do nascimento até uma determinada idade desse animal. Assim, cada animal envolvido num programa de melhoramento, fornecerá uma quantidade finita e distinta de dados referentes ao seu peso corporal em idades pré definidas pelo pesquisador, denominadas idades padrão que podem ser escolhidas por critérios biológicos, econômicos ou simplesmente cronológicos, portanto, são classes arbitrárias.

Atualmente, os pesquisadores têm considerado o peso, tomado numa determinada idade t , do animal, como sendo uma medida da característica de crescimento deste animal.

Quando uma característica específica de um indivíduo sofre mudanças com o passar do tempo, as suas medidas podem ser representadas pela trajetória dada por uma função, cujo o argumento é o tempo. Essa afirmação pode ser facilmente compreendida, pois, teoricamente, a mensuração desta característica individual e específica poderia ser obtida em cada uma das infinitas idades possíveis do indivíduo num intervalo de tempo pré-determinado de sua vida.

Nesse contexto, pode ser do interesse do pesquisador, conforme Kirkpatrick; Lofsvold e Bulmer (1990), utilizar uma teoria preditiva para a resposta evolutiva na trajetória de crescimento para a seleção, visando ao aumento do valor econômico dos animais domesticados, à redução de custos e à redução do espaço de tempo necessário para o abate, quando se utilizam modelos de seleção artificiais.

De acordo com Kirkpatrick e Lofsvold¹ (1992 apud SAKAGUTI et al. 2003), adotando-se o conceito de característica distinta em cada idade padrão, independentemente do critério adotado para a definição das idades padrão, impõe-se uma classificação descontínua

¹Kirkpatrick, M.; Lofsvold, D. Measuring selection and constraint in the evolution of growth. **Evolution**, v. 46. n. 4, p. 954-971, 1992.

a um conjunto de dados que têm base contínua, a idade.

Ainda, segundo Sakaguti et al. (2003), através de técnicas multivariadas, uma análise conjunta dos pesos associados às idades padrão pode fornecer informações sobre as relações lineares existentes entre cada par de idades. Isto se traduz na impossibilidade de se fazerem inferências sobre os pesos dos animais em idades distintas daquelas adotadas como padrão.

Uma solução seria incluir mais informações a respeito das características em estudo, no conjunto de dados, aumentando o número de idades padrão, porém, o número de parâmetros a serem estimados no modelo poderia se tornar um problema para a análise dos dados, além do esforço computacional extra exigido.

Diante da dificuldade exposta e a possibilidade de mudança, com o passar do tempo, de um ou mais fenótipos do indivíduo, cujo interesse é relevante para a pesquisa, surge na literatura a proposta de descrever o comportamento das características através de funções contínuas, pois seus valores podem ser tomados e considerados distintos em cada uma das infinitas possibilidades de medidas dos animais no intervalo de tempo considerado no estudo.

As trajetórias dessas funções são denominadas de “características de dimensão infinita” (KIRKPATRICK; HILL e THOMPSON 1994, p. 57).

Segundo Kirkpatrick; Hill e Thompson (1994), as medidas de características consideradas como medidas de dimensão infinita produzem estimativas mais acuradas da variação de suas respostas, tanto para a seleção de animais pelos métodos artificial e natural, quando comparados com técnicas convencionais. Estimativas melhores das covariâncias fenotípicas podem ser obtidas se as medidas estiverem ordenadas no tempo.

Numa aproximação infinito dimensional, a estrutura de covariâncias é modelada como uma função de covariâncias com domínio constituído de pontos ao longo de uma trajetória (tempo) definida. Nessa direção, obtidos os dados, o problema, segundo Werf (2001), consiste em estimar uma função de covariâncias que permita:

- (i) uma mudança gradual das covariâncias sobre o tempo;
- (ii) uma relação entre as covariâncias e tempos distintos;
- (iii) predizer variâncias e covariâncias em pontos ao longo da trajetória, mesmo que um nú-

mero pequeno de observações tenham sido feitas nessa trajetória, usando as informações de todas as medidas obtidas.

O interesse quando se trabalha com características genéticas mutáveis no tempo, está nos parâmetros que descrevem tais mudanças e, particularmente, no caso de criação de animais, o interesse maior se concentra nos parâmetros genéticos. Esses parâmetros podem trazer informações que possibilitam a manipulação de tais mudanças.

Uma função de covariâncias pode ser definida como uma função contínua que dá as variâncias e as covariâncias entre características medidas em diferentes pontos sobre uma trajetória (KIRKPATRICK e HECKMAN, 1989). Um dos métodos para a estimação de funções de covariâncias foi introduzido na literatura por Kirkpatrick; Lofsvold e Bulmer (1990). Considerações são apresentadas por esses autores na fundamentação da teoria das funções de covariâncias:

- (i) a trajetória de crescimento de um indivíduo pode ser pensada como uma soma de duas ou mais funções contínuas. Pelo menos uma dessas funções deve representar o componente genético aditivo na trajetória de crescimento herdada dos pais e uma segunda função deve representar o componente que é atribuível aos efeitos ambientais, como nutrição, e a dominância genética;
- (ii) os componentes aditivos e não aditivos são definidos como sendo independentes um do outro e assumem distribuição normalmente multivariada na população, conforme a suposição padrão admitida em modelos de genética quantitativa de múltiplas características;
- (iii) finalmente, é assumido que os efeitos de flutuação genética aleatória, mutação, supressão do efeito de um gene por outro gene não-alelo e recombinação sobre a trajetória de crescimento médio são desprezíveis.

Para estimar a matriz de covariâncias $\mathcal{G}$ é preciso estimar primeiro a matriz de covariâncias $\mathbf{G}$ padrão para efeitos genéticos. Os pesos dos mesmos indivíduos em duas idades a_i e a_j são consideradas duas características distintas se $i \neq j$, e o valor de G_{ij} é a covariância genética aditiva para os pesos dos indivíduos nas idades a_i e a_j .

Dados os pesos dos animais em t pontos distintos no tempo, uma matriz $\hat{\mathbf{G}}$, $t \times t$, pode ser estimada e as entradas da matriz $\hat{\mathbf{G}}$ fornecem estimativas diretas da função de covariâncias genéticas aditivas $\mathcal{G}$ em t^2 pontos, pois, $G_{ij} = \mathcal{G}(a_i, a_j)$, com i e j pertencentes ao conjunto de índices $\{1, 2, \dots, t\}$.

Os valores $\mathcal{G}$ entre as idades medidas podem ser estimados por interpolação de curvas suaves. Dessa forma, é aceita a suposição implícita de que as variâncias e as covariâncias não mudam de maneira descontínua. Várias técnicas podem ser usadas para estimar uma função de covariâncias contínua $\mathcal{G}$ a partir da matriz de covariâncias $\hat{\mathbf{G}}$ observada. Segundo Kirkpatrick; Lofsvold e Bulmer (1990), uma das opções é usar uma família que envolva funções ortogonais de ajuste dos dados. A escolha de famílias distintas afeta a interpolação mas não afeta as estimativas para a função de covariâncias nas idades em que os dados foram tomados.

Uma função de covariâncias é análoga a uma matriz de covariâncias de dimensão infinita. O valor da função de covariâncias $\mathcal{P}(a_1, a_2)$ corresponde à covariância fenotípica entre os valores das características nas idades a_1 e a_2 . A variância fenotípica na idade a_1 é escrita em termos da função de covariâncias como $\mathcal{P}(a_1, a_1)$.

De forma semelhante, a estrutura de covariância genética aditiva de uma população pode ser descrita pela função de covariâncias genéticas aditivas $\mathcal{G}$.

Kirkpatrick; Lofsvold e Bulmer (1990) utilizam os métodos de genética quantitativa padrão para obter uma estimativa da matriz de covariâncias, $t \times t$, para as medidas nessas idades e em seguida, estimam a função de covariâncias básica para essa matriz estimada.

A função de covariâncias genéticas aditivas $\mathcal{G}$ pode ser aproximada para qualquer grau de precisão especificado, usando um conjunto completo de funções ortogonais tais como os polinômios de Legendre (COURANT E HILBERT², 1953, p. 65 apud KIRKPATRICK; LOFSVOLD E BULMER, 1990). Assim, a covariância genética aditiva entre os pesos dos indivíduos nas idades a_1 e a_2 , por exemplo, é

$$\mathcal{G}(a_1, a_2) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} [\mathbf{K}_{\mathbf{G}}]_{ij} \phi_i(a_1^*) \phi_j(a_2^*), \quad (54)$$

²Courant, R., and Hilbert, D., **Methods of mathematical physics**, Vol. 1. New York, Wiley, 1953.

em que

$$a_i^* = \frac{2}{a_{max} - a_{min}}(a_i - a_{min}) - 1, \quad (55)$$

sendo que a_{min} e a_{max} são, respectivamente, o primeiro e o último elemento do vetor $\mathbf{a}$ das idades consideradas no conjunto de dados; a_1 e a_2 são os dois primeiros elementos do vetor $\mathbf{a}$. Os elementos do vetor $\mathbf{a}^*$ são as idades originais ajustadas pela equação (55) reescaladas para o domínio dos polinômios de Legendre que é o intervalo $[-1, 1]$, se a família de polinômios ortogonais escolhida for os polinômios de Legendre.

A matriz $\mathbf{K}_G$ na equação (54) é a matriz de coeficientes associada à função de covariâncias $\mathcal{G}$. Seus elementos, $[\mathbf{K}_G]_{ij}$, são constantes, dependem de $\mathbf{G}$ e da família de funções ortogonais ϕ escolhida para a interpolação.

A expansão completa da equação (54) envolve uma infinidade de matrizes coeficientes que só podem ser estimadas se houver uma infinidade de dados. Como as medidas dos pesos dos animais só podem ser observadas em t idades, uma versão truncada de $\mathbf{K}_G$ deve ser estimada. Kirkpatrick, Lofsvold e Bulmer (1990) apresentam dois métodos para a estimação da matriz de coeficiente $\mathbf{K}_G$.

A estimativa de ordem completa de $\mathcal{G}$: A estimativa de ordem completa da função de covariâncias genética aditiva, denotada por $\hat{\mathcal{G}}$, é encontrada calculando-se a matriz de coeficientes $\hat{\mathbf{K}}_G$ cuja função de covariância correspondente reproduz exatamente a matriz de covariâncias genética aditiva estimada $\hat{\mathbf{G}}$. Escrevendo a matriz de covariâncias observada em termos das funções ortogonais usando a equação (54), tem-se:

$$\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{\Phi} \hat{\mathbf{K}}_G \mathbf{\Phi}^T, \quad (56)$$

sendo que a matriz $\mathbf{\Phi}$ é definida de modo que $[\mathbf{\Phi}]_{ij} = \phi_j(a_i^*)$ $i, j \in \{0, 1, 2, \dots, t\}$ cuja expressão pode ser encontrada em (??).

A matriz $\hat{\mathbf{K}}_G$ é a estimativa da matriz de coeficientes que aparece na equação (54), truncada para a dimensão $t \times t$ pelo número (t) de idades representadas na matriz $\hat{\mathbf{G}}$. Rearranjando-se a equação (56), encontra-se uma expressão que pode ser usada para o cálculo da matriz de coeficientes estimada:

$$\hat{\mathbf{K}}_G = \mathbf{\Phi}^{-1} \hat{\mathbf{G}} [\mathbf{\Phi}^T]^{-1}.$$

A matriz $\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{G}}$ obtida por esse processo pode ser substituída na equação (54) para se obter uma estimativa da função de covariâncias $\mathcal{G}$ para todas as idades compreendidas no intervalo de tempo no qual os dados foram observados.

O segundo método desenvolvido por Kirkpatrick; Lofsvold e Bulmer (1990) para estimar a matriz coeficientes para a função $\mathcal{G}$ é o que se segue.

A estimativa de ordem reduzida de $\mathcal{G}$: Encontrar uma estimativa de ordem reduzida para a função $\mathcal{G}$ significa obter um conjunto de k funções ortogonais para ajustar $\hat{\mathbf{G}}$, sendo $k < t$. A notação utilizada para a estimativa de ordem reduzida de $\mathcal{G}$ é $\tilde{\mathcal{G}}$ e da correspondente estimativa reduzida da matriz de coeficientes é $\tilde{\mathbf{K}}_{\mathcal{G}}$. O método consiste de duas partes:

- Primeiro, uma estimativa candidata de $\mathcal{G}$ é construída, usando o método dos mínimos quadrados ponderados para ajustar funções ortogonais que sejam as mais simples possíveis, na qual $\tilde{\mathcal{G}}$ se torne constante para todas as idades.
- Segundo, essa estimativa candidata é testada contra $\hat{\mathbf{G}}$ para se verificar a consistência estatística. Este teste é possível porque o procedimento desenvolvido produz uma aproximação estatística χ^2 , permitindo assim, verificar se há um ajuste de boa qualidade para a estimativa de $\hat{\mathbf{G}}$ reduzida.

Se este teste mostrar que $\tilde{\mathcal{G}}$ é consistente com $\hat{\mathbf{G}}$, então $\tilde{\mathcal{G}}$ é aceita, caso contrário, uma estimativa de ordem reduzida um pouco mais complexa passa a ser considerada, ou seja, o grau das funções ortogonais deve ser acrescido de uma unidade. O novo ajuste é novamente testado usando o teste χ^2 . Desse modo, o processo continua até se obter uma estimativa de ordem reduzida $\tilde{\mathbf{K}}_{\mathbf{G}}$ que seja consistente com $\hat{\mathbf{G}}$.

Se nenhuma das combinações mais simples de funções ortogonais ajustar os dados da matriz $\hat{\mathbf{G}}$, então a estimativa completa deve ser considerada.

2.1.6 Aplicação das funções de covariâncias em modelos mistos

Nos modelos para avaliação genética baseados em medidas repetidas, usualmente, existem pelo menos três componentes aleatórios a serem considerados:

- (i) Genético aditivo de animal;
- (ii) Ambiente permanente de animal;
- (iii) Ambiente temporário ou erro de medida.

Cada um desses componentes tem uma estrutura de covariâncias diferente. Meyer (1998) recomenda que se faça a substituição dos efeitos aleatórios essenciais por funções de covariâncias conforme a metodologia que se segue.

Considerando o modelo

$$y_i = \mu + \mathbf{u}_i + \mathbf{pm}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i, \quad (57)$$

em que $\mathbf{u}_i$ é o vetor com efeitos genéticos aditivos para as observações medidas sobre o animal i , e $\mathbf{pm}_i$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ são vetores com os efeitos de ambientes permanente e temporário, respectivamente. Tem-se

$$\text{var}(\mathbf{u}_i) = \mathbf{G}_0; \quad \text{var}(\mathbf{pm}_i) = \mathbf{C}_0 \quad \text{e} \quad \text{var}(\boldsymbol{\varepsilon}_i) = \mathbf{I}\sigma_\varepsilon^2.$$

Se todos os animais têm medidas nas mesmas idades, então, $\mathbf{G}_0$ é igual para cada animal assim como $\mathbf{C}_0$. O modelo (57) pode ser visto como modelo de característica múltipla, em que a matriz de covariância residual é

$$\text{var}(\mathbf{e}) = \text{var}(\mathbf{pm}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i) = \mathbf{C}_0 + \mathbf{I}\sigma_\varepsilon^2 = \mathbf{R}_0,$$

desde que $\mathbf{pm}_i$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_i$, sejam independentes.

Sendo os erros de medida independentes entre as idades, apenas uma função de covariâncias para o efeito genético aditivo e uma função de covariâncias para o efeito ambiental precisam ser escritas.

De acordo com Meyer e Hill (1997) pode-se assumir uma reparametrização com funções de covariâncias que se utilizam dos polinômios de Legendre para cada um dos efeitos

aleatórios, e com a mesma ordem (para facilitar a notação) para o ajuste:

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_0 &= \mathbf{\Phi} \mathbf{K}_a \mathbf{\Phi}', \\ \mathbf{C}_0 &= \mathbf{\Phi} \mathbf{K}_p \mathbf{\Phi}',\end{aligned}$$

o modelo (57) pode ser escrito como

$$y_i = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{\Phi}_i \mathbf{a}_i + \mathbf{\Phi}_i \mathbf{p}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i, \quad (58)$$

em que, $\mathbf{u}_i$ foi substituído por $\mathbf{\Phi}_i \mathbf{a}_i$ e $\mathbf{pm}_i$ por $\mathbf{\Phi}_i \mathbf{p}_i$.

Supondo que $\text{var}(\mathbf{a}_i) = \mathbf{K}_a$, $\text{var}(\mathbf{p}_i) = \mathbf{K}_p$ e que as funções de covariâncias são estimadas utilizando-se o ajuste completo, então, os modelos (57) e (58) são equivalentes, pois eles têm as mesmas esperanças e as mesmas variâncias:

$$\text{var}(\mathbf{\Phi}_i \mathbf{a}_i) = \mathbf{\Phi}_i \text{var}(\mathbf{a}_i) \mathbf{\Phi}_i' = \mathbf{\Phi}_i \mathbf{K}_a \mathbf{\Phi}_i' = \mathbf{G}_0 = \text{var}(\mathbf{u}_i)$$

e

$$\text{var}(\mathbf{\Phi}_i \mathbf{p}_i) = \mathbf{\Phi}_i \text{var}(\mathbf{p}_i) \mathbf{\Phi}_i' = \mathbf{\Phi}_i \mathbf{K}_p \mathbf{\Phi}_i' = \mathbf{C}_0 = \text{var}(\mathbf{pm}_i).$$

Se para cada animal, o número de observações tomadas não for o mesmo, o número de coeficientes aleatórios a serem estimados também não será o mesmo e portanto, a equivalência pode não ser exata, pois no ajuste da função de covariâncias seria necessário trabalhar com matrizes de covariâncias dos vetores de coeficientes aleatórios com dimensões distintas. Porém, nesse caso, o modelo de função de covariâncias exige apenas que a matriz de polinômios, $\mathbf{\Phi}_i$, seja diferente para cada conjunto de idades distintas e que os coeficientes de regressão aleatória possuam uma única estrutura de covariâncias ($\mathbf{K}_a$ e $\mathbf{K}_p$) para cada animal, independente do conjunto de idades em que foram tomadas as medidas de cada animal.

O número de efeitos aleatórios para serem estimados para cada animal no modelo (57) é igual ao número de idades nas quais as medidas do animal foram tomadas. Já no modelo (58) o número de efeitos genéticos aditivos é igual à ordem do ajuste para a função de covariância genética aditiva, isto é, a ordem de $\mathbf{K}_a$, e o número de efeitos de ambiente permanente é igual à ordem de $\mathbf{K}_p$.

Após ordenar os dados no vetor $\mathbf{y}$ de acordo com a classificação dos registros das características por animal, e de sobrepor os vetores $\mathbf{a}_i$ e $\mathbf{p}_i$ com k coeficientes aleatórios

cada, dentro dos vetores $\mathbf{a}$ e $\mathbf{p}$, do animal mais velho até o mais jovem (para simplificar a notação, assume-se que a ordem de ajuste das funções de covariâncias para ambos os efeitos aleatórios é a mesma, portanto a parte não nula das matrizes de incidência são iguais) e chamando de $\mathbf{Z}^*$ uma matriz bloco diagonal de ordem $n \times kN_a$, sendo $\mathbf{Z}_i^* = \Phi_i$ o bloco para o i -ésimo animal, o modelo misto pode ser escrito como

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}^*\mathbf{a} + \mathbf{Z}^*\mathbf{p} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

com $\mathbf{a}^T = \{\mathbf{a}_1^T, \dots, \mathbf{a}_{N_a}^T\}$ e $\mathbf{p}^T = \{\mathbf{p}_1^T, \dots, \mathbf{p}_{N_a}^T\}$, com $\mathbf{a}_i$ e $\mathbf{p}_i$, $i = 1, 2, \dots, N_a$, sendo os conjuntos de coeficientes de regressão aleatórios para o animal i , para efeitos de genética aditiva e ambiente permanente, respectivamente. Se todos os animais têm medidas sobre os mesmos pontos de idade, todos os $\mathbf{Z}_i^*$ são iguais e $\mathbf{Z}^* = \mathbf{I}_{N_a} \otimes \Phi$.

O modelo misto multivariado pode ser reescrito como um modelo misto com funções de covariâncias no formato de um modelo de regressão aleatória univariada, com cada efeito aleatório tendo k coeficientes de regressão aleatórios. Um modelo para N observações sobre N_a animais pode ser escrito como

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \sum_{j=0}^{k-1} \mathbf{Z}_j \mathbf{a}_j + \sum_{j=0}^{k-1} \mathbf{Z}_j \mathbf{p}_j + \boldsymbol{\varepsilon},$$

em que $\mathbf{Z}_j$ são matrizes $N \times kN_a$ para o j -ésimo polinômio, e $\mathbf{a}$ e $\mathbf{p}$ são vetores com os coeficientes de regressão para todos os animais associados aos efeitos genéticos aditivos e ambiente permanente, respectivamente. A matriz $\mathbf{Z}$ contém as variáveis regressoras, isto é, armazena aqueles valores polinomiais que foram calculados em Φ .

As variâncias e covariâncias dos efeitos aleatórios podem ser escritas como: $\text{var}(\mathbf{a}) = \mathbf{A} \otimes \mathbf{K}_a$; $\text{var}(\mathbf{p}) = \mathbf{I} \otimes \mathbf{K}_p$; e $\text{cov}(\mathbf{a}, \mathbf{p}) = 0$, em que $\mathbf{K}_a$ e $\mathbf{K}_p$ são os coeficientes para as funções de covariâncias dos efeitos genéticos aditivos e ambiente permanente, respectivamente.

A similaridade entre um modelo de regressão aleatória usando funções de covariâncias com um modelo misto usual de características múltiplas pode ser vista como segue.

O modelo misto multivariado para t características:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e},$$

com $\text{var}(\mathbf{y}) = \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}^T + \mathbf{R}$, $\mathbf{u}$ é um vetor de efeitos genéticos aditivos com $\text{var}(\mathbf{u}) = \mathbf{G}$. Se $\mathbf{u}$, assim como $\mathbf{y}$ estão ordenados por animal e características dentro de animais, $\mathbf{Z}$ é uma matriz bloco diagonal $\mathbf{Z}_i$ relativo a cada animal; $\mathbf{Z}_i$ é uma matriz, $q_i \times t$ com q_i número de características medidas para o animal i ; $\mathbf{Z}_i(m, k)$ é 1 se o m -ésimo registro é medido para a característica k , e 0 caso contrário. Além disso, é definido que $\text{var}(\mathbf{u}) = \mathbf{G} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{G}_0$ e $\text{var}(\mathbf{e}) = \mathbf{R} = \mathbf{I} \otimes \mathbf{Z}_i \mathbf{R}_0 \mathbf{Z}_i^T$, com matrizes $\mathbf{G}_0$ e $\mathbf{R}_0$ de ordem t com variâncias e covariâncias genéticas e residuais respectivamente. Se não há perda de valores e as matrizes de incidência são iguais para cada característica, tem-se que $\mathbf{Z}_i = \mathbf{I}_t$, e $\mathbf{R} = \mathbf{I} \otimes \mathbf{R}_0$.

Supondo que se tenha um ajuste de ordem k para uma função de covariâncias no modelo de regressão aleatória (com $k < t$), e todos os animais foram medidos em cada uma das t idades, então é possível fazer uma comparação do modelo de regressão aleatória com um modelo múltiplo com todos os animais medidos para t características. Se uma função de covariâncias definida de tal modo que $\mathbf{K}_a$ e $\mathbf{K}_p$ podem ser estimadas de $\mathbf{G}_0$ e $(\mathbf{R}_0 - \text{var}(\boldsymbol{\varepsilon}))$, respectivamente, em que $\text{var}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{I}\sigma_\varepsilon^2$ é a variância do efeito de ambiente temporário, então

$$\begin{aligned} \text{var}(\mathbf{Z}^* \mathbf{a}) &= \mathbf{A} \otimes \Phi \mathbf{K}_a \Phi^T && \cong \mathbf{A} \otimes \mathbf{G}_0 = \text{var}(\mathbf{Z} \mathbf{u}) \text{ e} \\ \text{var}(\mathbf{Z}^* \mathbf{p} + \boldsymbol{\varepsilon}) &= \mathbf{I}_q \otimes \Phi \mathbf{K}_p \Phi^T + \mathbf{I}\sigma_\varepsilon^2 && \cong \mathbf{I}_q \otimes \mathbf{R}_0 = \text{var}(\mathbf{e}). \end{aligned}$$

O vetor de valores genéticos aditivos multivariado para um animal i , $\mathbf{u}_i$, pode, portanto, ser escrito como $\Phi \mathbf{a}_i$.

Um ajuste de ordem completa ($k = t$), torna o modelo de múltiplas variáveis equivalente ao modelo de regressão aleatória usando funções de covariâncias. A ordem ($k = t$) da função de covariâncias, usualmente, pode ser escolhida de modo que o ajuste da estrutura de covariâncias seja ótimo. Werf (2001) observa que, se k é muito menor do que t (isto é, quando as t características medidas são altamente correlacionadas), a estrutura de covariâncias descrita pela função de covariâncias será mais suave e, provavelmente, mais correta do que a estrutura de covariâncias para um modelo com t características e com $t(t+1)/2$ componentes de variância e covariância estimadas. O autor observa ainda, que o modelo multivariado para muitas características é, numericamente, pouco estável se a matriz de variâncias e covariâncias tem muitos autovalores próximos de zero, isto é, se o posto desta matriz é de fato muito menor do que t . Inversas de tais matrizes podem ser mal condicionadas.

Quando diferentes animais têm medidas em diferentes conjuntos de idades, os blocos diagonais na matriz de incidência $\mathbf{Z}$ não são muito diferentes do caso da igualdade. A variância do subconjunto de observações sobre cada animal é

$$\text{var}(\mathbf{y}_i) = \mathbf{\Phi}_i \mathbf{K}_a \mathbf{\Phi}_i^T + \mathbf{\Phi}_i \mathbf{K}_p \mathbf{\Phi}_i^T + \mathbf{I} \sigma_e^2 = \mathbf{G}_{0i} + \mathbf{R}_{0i},$$

em que $\mathbf{G}_{0i}$ e $\mathbf{R}_{0i}$ são as covariâncias genética e ambiental para as características medidas nos q_i pontos determinados pela idade do i -ésimo animal.

2.2 Metodologia

2.2.1 Material

Nos arquivos de dados fornecidos pelo Grupo de Melhoramento Animal, da Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos da Universidade de São Paulo, oriundos do rebanho Nelore Lemgruber da fazenda Mundo Novo localizada no município de Uberaba (MG), de propriedade do grupo Manah Agropastoril Ltda, utilizados neste estudo, estavam registrados 61.975 pesagens corporais de 20.543 animais e informações de 26.275 animais da raça Nelore no “pedigree”. O número de pesagem por animal não ultrapassou a seis e cada animal forneceu no máximo uma medida em cada um dos seguintes intervalos de idade (em dias): 1 – 69, 70 – 159, 160 – 284, 285 – 454, 455 – 589 e 590 – 800. Estas medidas de pesagem ocorreram no período de 1.981 a 2.002 e as idades dos animais foram classificadas em 7 classes, de acordo com a idade da mãe ao parto (CIMP).

Segundo Oliveira (2005), até o ano de 2.000 o rebanho acima citado se encontrava no município de Brotas (SP) e na sua transferência para o município de Uberaba (MG) não houve alterações nas configurações dos lotes de animais.

Tabela 1 – Número de pesagens, peso mínimo, peso máximo, peso médio e o desvio padrão dos dados em cada intervalo de idade

Idade (em dias)	N	Peso (kg)			desvio padrão
		mínimo	máximo	médio	
1 - 69	10.045	17	44	30,49	3,52
70 - 159	6.185	43	194	124,37	22,88
160 - 284	13.771	57	296	171,04	30,53
285 - 454	12.325	95	441	213,22	42,28
455 - 589	9.892	104	546	292,76	52,25
590 - 800	9.757	165	653	347,37	62,90

Em cada intervalo de idade representado na primeira coluna da Tabela 1, levou-se em consideração o grupo de manejo à desmama, o ano de nascimento e o sexo do animal

na constituição dos grupos contemporâneos (GC), desta forma os dados foram organizados em 670 grupos. Cada GC ficou com no mínimo 18 pesagens de animais, filhos de pelo menos dois touros distintos. A Figura 5 nos mostra a dispersão das médias dos pesos corporais dos animais calculadas dentro de cada grupo contemporâneo.

Figura 5 – Dispersão das médias dos pesos corporais de animais nos 670 grupos contemporâneos

2.2.2 Métodos

Todas as análises dos dados foram realizadas, empregando-se modelos de regressão aleatória que consideraram as funções ortonormais das idades dos animais como covariáveis dos coeficientes aleatórios. Além disso, uma regressão cúbica via polinômios de Legendre (sem o polinômio de Legendre de grau zero) foi adicionada aos efeitos CIMP e GC na parte de efeitos fixos do modelo.

2.2.2.1 Análise de regressão aleatória

Os modelos de regressão aleatória foram classificados em três grupos de acordo com o número de fatores aleatórios existentes no modelo:

Grupo 1 - Modelos que assumiram coeficientes aleatórios para os efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente de animal;

Grupo 2 - Modelos que assumiram coeficientes aleatórios para os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos e de ambiente permanente de animal;

Grupo 3 - Modelos que assumiram coeficientes aleatórios para os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos, de ambiente permanente materno e de ambiente permanente de animal.

Para cada grupo de modelos de regressão aleatória foram considerados como variáveis regressoras para os fatores aleatórios, funções pertencentes às bases de funções de Legendre, Jacobi Modificadas e trigonométricas. Com índices de zero a cinco, as expressões explícitas destas funções são:

Base 1 - Funções polinomiais de Legendre, para $t \in [-1, 1]$:

$$\begin{aligned} \phi_0(t) &= \sqrt{\frac{1}{2}} ; & \phi_1(t) &= \sqrt{\frac{3}{2}} t ; \\ \phi_2(t) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{2}} (3t^2 - 1) ; & \phi_3(t) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{2}} (5t^3 - 3t) ; \\ \phi_4(t) &= \frac{1}{8} \sqrt{\frac{9}{2}} (35t^4 - 30t^2 + 3) ; & \phi_5(t) &= \frac{1}{8} \sqrt{\frac{11}{2}} (63t^5 - 70t^3 + 15t) . \end{aligned}$$

Base 2 - Funções polinomiais de Jacobi modificadas, para $t \in [-1, 1]$:

$$\begin{aligned}
 \omega_0(t) &= \sqrt{\frac{30}{43}} \left[-\frac{1}{2}t^2 + 1 \right] ; \\
 \omega_1(t) &= \sqrt{\frac{210}{71}} \left[t(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right] ; \\
 \omega_2(t) &= \sqrt{\frac{94.815}{8.542}} \left[t^2(-\frac{1}{2}t^2 + 1) - \frac{71}{301}(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right] ; \\
 \omega_3(t) &= \sqrt{\frac{738.045}{17.438}} \left[t^3(-\frac{1}{2}t^2 + 1) - \frac{107}{213}t(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right] ; \\
 \omega_3(t) &= \sqrt{\frac{738.045}{17.438}} \left[t^3(-\frac{1}{2}t^2 + 1) - \frac{107}{213}t(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right] ; \\
 \omega_5(t) &= \sqrt{\frac{56.162.876.765}{86.605.408}} \left[t^5(-\frac{1}{2}t^2 + 1) - \frac{115.790}{113.347}t^3(-\frac{1}{2}t^2 + 1) + \frac{238.065}{1.246.817}t(-\frac{1}{2}t^2 + 1) \right] .
 \end{aligned}$$

Base 3 - Funções trigonométricas, para $t \in [0, 2\pi]$:

$$\begin{aligned}
 \psi_0(t) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} ; & \psi_1(t) &= \frac{\cos t}{\sqrt{\pi}} ; \\
 \psi_2(t) &= \frac{\text{sen } t}{\sqrt{\pi}} ; & \psi_3(t) &= \frac{\cos 2t}{\sqrt{\pi}} ; \\
 \psi_4(t) &= \frac{\text{sen } 2t}{\sqrt{\pi}} ; & \psi_5(t) &= \frac{\cos 3t}{\sqrt{\pi}} .
 \end{aligned}$$

A ordem de ajuste dos fatores aleatórios assumidos no modelo corresponde ao número de funções usadas como variáveis regressoras. Na primeira coluna da Tabela 1 verifica-se que os dados estão dispostos em seis intervalos distintos, portanto, a ordem máxima de ajuste dos fatores aleatórios dos modelos é seis.

2.2.2.2 Análise de regressão aleatória via polinômios de Legendre

Nessa subseção encontra-se uma descrição para a obtenção da função de verossimilhança restrita apenas para os modelos do Grupo 1 (pág. 51), pois, os resultados obtidos podem ser generalizados para os demais grupos.

O modelo (58) é uma regressão dos dados em que os polinômios de Legendre na matriz Φ foram considerados como variáveis regressoras e, $\mathbf{a}$ e $\mathbf{p}$ os coeficientes de regressão, respectivamente. Os coeficientes de regressão não foram os mesmos para cada animal, mas eles foram tirados de uma mesma população de coeficientes de regressão. Em outras palavras, os coeficientes de regressão em $\mathbf{a}$ e $\mathbf{p}$ foram considerados como coeficientes de regressão aleatória com $var(\mathbf{a}) = \mathbf{K}_a$ e $var(\mathbf{p}) = \mathbf{K}_p$.

No arquivo de dados, apresentado na seção 2.2, uma das colunas nos informou as idades dos animais na ocasião de suas respectivas pesagens, e pôde se verificar nos registros que a menor e a maior idade foram um e 800 dias, respectivamente. Portanto, as idades dos animais pertenciam ao intervalo $[1, 800]$ e a função

$$s(t_{ij}) = \text{idade mínima} + 2 \frac{t_{ij} - \text{idade máxima}}{\text{idade máxima} - \text{idade mínima}} = 1 + 2 \frac{t_{ij} - 800}{799}$$

é que padronizou a idade do i -ésimo animal na sua j -ésima pesagem, $t_{ij} \in [1, 800]$ para o intervalo de domínio dos polinômios de Legendre, $[-1, 1]$, em que $i \in \{1, 2, \dots, 20.543\}$, $j \in \{1, 2, \dots, q_i\}$ e $1 \leq q_i \leq 6$ representou o número de pesagem do i -ésimo animal.

Seja $t_{ij}^* = s(t_{ij})$ a j -ésima idade do animal $i = 1, 2, \dots, 20.543$, padronizada e seja $\phi_m(t_{ij}^*)$ o polinômio de Legendre de índice m , avaliado em t_{ij}^* . O modelo de regressão aleatória, para o animal $i = 1, 2, \dots, 20.543$, considerado foi:

$$y_{ij} = F + \sum_{m=0}^{k_a-1} a_{im} \phi_m(t_{ij}^*) + \sum_{m=0}^{k_p-1} p_{im} \phi_m(t_{ij}^*) + \varepsilon_{ij}, \quad (59)$$

em que a_{im} e p_{im} representaram os coeficientes de regressão aleatória para os efeitos aleatórios genéticos aditivos e de ambiente permanente para o animal $i = 1, 2, \dots, 20.543$, respectivamente, $k_a, k_p \in \{2, 3, 4, 5, 6\}$ denotaram a ordem de ajuste dos coeficientes de efeitos aleatórios genéticos aditivos e de ambiente permanente para o animal, respectivamente, $j \in \{1, 2, \dots, q_i\}$ indicou a ordem dos registros do animal, q_i informou o número de registros do animal i e ε_{ij} foi o erro residual.

O modelo (59) representou o Grupo 1 de regressão aleatória (pág. 51) e as variáveis regressoras dos coeficientes aleatórios foram tomadas na base de funções polinomiais de Legendre (pág. 51). Quando ϕ foi substituído por ω no modelo (59), as variáveis regressoras dos coeficientes aleatórios passaram a ser tomadas na base de funções polinomiais de Jacobi modificadas (pág. 51). Similarmente, a troca de ϕ por ψ fez o modelo (59) considerar a base de funções trigonométricas (pág. 51) como variáveis regressoras dos coeficientes aleatórios.

O modelo para o animal i na forma matricial foi representado por

$$\begin{bmatrix} y_{i1} \\ y_{i2} \\ \vdots \\ y_{iq_i} \end{bmatrix} = \mathbf{X}_i \mathbf{b}_i + \begin{bmatrix} \phi_0(t_{i1}^*) & \phi_1(t_{i1}^*) & \cdots & \phi_{K_a-1}(t_{i1}^*) \\ \phi_0(t_{i2}^*) & \phi_1(t_{i2}^*) & \cdots & \phi_{K_a-1}(t_{i2}^*) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(t_{iq_i}^*) & \phi_1(t_{iq_i}^*) & \cdots & \phi_{K_a-1}(t_{iq_i}^*) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i0} \\ a_{i1} \\ \vdots \\ a_{i(K_a-1)} \end{bmatrix} +$$

$$\begin{bmatrix} \phi_0(t_{i1}^*) & \phi_1(t_{i1}^*) & \cdots & \phi_{K_p-1}(t_{i1}^*) \\ \phi_0(t_{i2}^*) & \phi_1(t_{i2}^*) & \cdots & \phi_{K_p-1}(t_{i2}^*) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(t_{iq_i}^*) & \phi_1(t_{iq_i}^*) & \cdots & \phi_{K_p-1}(t_{iq_i}^*) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{i0} \\ p_{i1} \\ \vdots \\ p_{i(K_p-1)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{i1} \\ \varepsilon_{i2} \\ \vdots \\ \varepsilon_{iq_i} \end{bmatrix}$$

ou

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}_i \mathbf{b}_i + \phi_{ik_a} \mathbf{a}_i + \phi_{ik_p} \mathbf{p}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i,$$

em que

$$\mathbf{X}_i \mathbf{b}_i = \begin{bmatrix} CIMP_{s_{i1}} + GC_{r_{i1}} + \phi_1(t_{i1}^*)\beta_1 + \phi_2(t_{i1}^*)\beta_2 + \phi_3(t_{i1}^*)\beta_3 \\ CIMP_{s_{i2}} + GC_{r_{i2}} + \phi_1(t_{i2}^*)\beta_1 + \phi_2(t_{i2}^*)\beta_2 + \phi_3(t_{i2}^*)\beta_3 \\ \vdots \\ CIMP_{s_{iq_i}} + GC_{r_{iq_i}} + \phi_1(t_{iq_i}^*)\beta_1 + \phi_2(t_{iq_i}^*)\beta_2 + \phi_3(t_{iq_i}^*)\beta_3 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{y}_i = \begin{bmatrix} y_{i1} \\ y_{i2} \\ \vdots \\ y_{iq_i} \end{bmatrix}, \quad \phi_{ik_a} = \begin{bmatrix} \phi_0(t_{i1}^*) & \phi_1(t_{i1}^*) & \cdots & \phi_{(k_a-1)}(t_{i1}^*) \\ \phi_0(t_{i2}^*) & \phi_1(t_{i2}^*) & \cdots & \phi_{(k_a-1)}(t_{i2}^*) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(t_{iq_i}^*) & \phi_1(t_{iq_i}^*) & \cdots & \phi_{(k_a-1)}(t_{iq_i}^*) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_i = \begin{bmatrix} a_{i0} \\ a_{i1} \\ \vdots \\ a_{i(k_a-1)} \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i = \begin{bmatrix} \varepsilon_{i1} \\ \varepsilon_{i2} \\ \vdots \\ \varepsilon_{iq_i} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\phi}_{ik_p} = \begin{bmatrix} \phi_0(t_{i1}^*) & \phi_1(t_{i1}^*) & \cdots & \phi_{(k_p-1)}(t_{i1}^*) \\ \phi_0(t_{i2}^*) & \phi_1(t_{i2}^*) & \cdots & \phi_{(k_p-1)}(t_{i2}^*) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(t_{iq_i}^*) & \phi_1(t_{iq_i}^*) & \cdots & \phi_{(k_p-1)}(t_{iq_i}^*) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p}_i = \begin{bmatrix} p_{i0} \\ p_{i1} \\ \vdots \\ p_{i(k_p-1)} \end{bmatrix},$$

para todo $i = 1, 2, \dots, 20.543$ e todo $j = 1, 2, \dots, q_i$, $s_{ij} \in \{1, 2, \dots, 7\}$ e $r_{ij} \in \{1, 2, \dots, 670\}$.

De modo geral, o modelo de regressão aleatória para dois efeitos aleatórios na forma matricial foi expresso por:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}^*\mathbf{a} + \mathbf{Z}_D^*\mathbf{p} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (60)$$

em que, $\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 & \mathbf{y}_2 & \cdots & \mathbf{y}_{20.543} \end{bmatrix}^T$ o vetor que conteve pesagens dos 20.543 animais. As pesagens de cada indivíduo foram dispostas sempre após as pesagens de seus ancestrais e em ordem crescente de idade por ocasião de sua pesagem.

A matriz de incidência para os efeitos fixos do modelo foi representada por $\mathbf{X}$ e $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} CIMP_1 & CIMP_2 & \cdots & CIMP_7 & GC_1 & GC_2 & \cdots & GC_{670} & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \end{bmatrix}^T$ representou o vetor de parâmetros de efeitos fixos.

Os vetores $\mathbf{a} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots & \mathbf{a}_{20.543} \end{bmatrix}^T$ e $\mathbf{p} = \begin{bmatrix} \mathbf{p}_1 & \mathbf{p}_2 & \cdots & \mathbf{p}_{20.543} \end{bmatrix}^T$ representaram os coeficientes de regressão aleatória para os efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente de animal, respectivamente, e $\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 & \boldsymbol{\varepsilon}_2 & \cdots & \boldsymbol{\varepsilon}_{20.543} \end{bmatrix}^T$ o vetor de resíduos do modelo.

As matrizes de variáveis regressoras para os coeficientes de regressão aleatória para os efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente de animal, foram respectivamente,

$$\mathbf{Z}^* = \begin{bmatrix} \phi_{1k_a} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \phi_{2k_a} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \phi_{20.543k_a} \end{bmatrix} \quad \mathbf{Z}_D^* = \begin{bmatrix} \phi_{1k_p} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \phi_{2k_p} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ddots & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \phi_{20.543k_p} \end{bmatrix}$$

em que, k_a e k_p pertencentes ao conjunto $\{2, 3, 4, 5, 6\}$ representaram, respectivamente, a ordem de ajuste dos coeficientes de efeitos aleatórios de genética aditiva e de ambiente permanente de animal.

Adotou-se que $\mathbf{K}_A = \text{cov}(\mathbf{a}, \mathbf{a})$ e $\mathbf{K}_P = \text{cov}(\mathbf{p}, \mathbf{p})$ representam as matrizes de coeficientes para as funções de covariâncias genéticas aditivas e de ambiente permanente de animal, G_0 e C_0 , respectivamente. Assumiu-se que a parte fixa do modelo leva em conta os efeitos sistemáticos da idade, de modo que $\mathbf{a} \sim \mathbf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}_A \otimes \mathbf{A})$ e $\mathbf{p} \sim \mathbf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}_P \otimes \mathbf{I}_{20.543})$, e que $\text{cov}(\mathbf{a}, \mathbf{p}) = 0$. Suposto também, que $V(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{R}$, obteve-se

$$V(\mathbf{y}) = \mathbf{V} = \mathbf{Z}^*(\mathbf{K}_A \otimes \mathbf{A})\mathbf{Z}^{*'} + \mathbf{Z}_D^*(\mathbf{K}_P \otimes \mathbf{I}_{N_D})\mathbf{Z}_D^{*'} + \mathbf{R}.$$

Portanto, as equações do modelo misto (60), foram dadas pelo sistema

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}^* & \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}_D^* \\ \mathbf{Z}^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{Z}^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}^* + \mathbf{K}_A^{-1} \otimes \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{Z}^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}_D^* \\ \mathbf{Z}_D^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{Z}_D^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}^* & \mathbf{Z}_D^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}_D^* + \mathbf{K}_P^{-1} \otimes \mathbf{I}_{N_D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{a}} \\ \hat{\mathbf{p}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}_D^{*'}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \end{bmatrix}.$$

Escrevendo $\mathbf{Z} = [\mathbf{Z}^* \ \mathbf{Z}_D^*]$ e $\mathbf{u}^T = [\mathbf{a}^T \ \mathbf{p}^T]$ o modelo (60) pôde ser reescrito da forma

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}^*\mathbf{a} + \mathbf{Z}_D^*\mathbf{p} + \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{X}\mathbf{b} + [\mathbf{Z}^* \ \mathbf{Z}_D^*] \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} + \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}.$$

Da suposição apresentada em (10, pág. 25), verificou-se que $\mathbf{G} = V(\mathbf{u})$, e portanto,

$$\mathbf{G} = V(\mathbf{u}) = V\left(\begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_A \otimes \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_P \otimes \mathbf{I}_{N_D} \end{bmatrix},$$

daí seguiu que,

$$|\mathbf{G}| = |\mathbf{K}_A \otimes \mathbf{A}| |\mathbf{K}_P \otimes \mathbf{I}_{N_D}| = |\mathbf{K}_A|^{N_A} |\mathbf{A}|^{k_a} |\mathbf{K}_P|^{N_D}. \quad (61)$$

Substituindo (61) em (53), obteve-se a expressão do logaritmo da função de verossimilhança para o modelo de regressão aleatória (60) passando a ser escrita como

$$-2\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \text{const} + N_A \ln(|\mathbf{K}_A|) + k_a \ln(|\mathbf{A}|) + N_D \ln(|\mathbf{K}_P|) + \ln(|\mathbf{R}|) + \ln(|\mathbf{C}^*|) + \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y},$$

em que $\boldsymbol{\theta}$ é o vetor formado pelos parâmetros que aparecem como elementos das matrizes $\mathbf{K}_A$ e $\mathbf{K}_P$.

Para que o teste da razão de verossimilhança pudesse ser aplicado, os efeitos fixos considerados em todos os modelos foram: os 670 grupos contemporâneos (GC), as sete

classes de idade da mãe ao parto (CIMP) e o ajuste da curva de crescimento da população por meio dos polinômios de Legendre de grau um, dois e três.

As covariáveis associadas aos coeficientes aleatórios de cada modelo foram determinadas por uma única base de funções ortonormais e com a mesma ordem de ajuste para todos os fatores aleatórios considerados no modelo.

As estimativas dos componentes de variância foram obtidas pelo método da máxima verossimilhança restrita, utilizando-se o programa computacional WOMBAT, Meyer (2006). Na versão LINUX, o WOMBAT foi compilado através do Fedora Core 4 usando o compilador Pathscale EkopathTM FORTRAN 95, versão 2.2.1. Para realizar a análise dos dados, o WOMBAT exigiu um programa denominado arquivo de parâmetros, um arquivo com o registro dos dados e outro arquivo com as informações do “pedigree”. No arquivo de parâmetros foi especificado o modelo de análise, os valores iniciais dos componentes de variância e covariância associados aos vetores de efeitos aleatórios e o nome dos arquivos de entrada em que se encontravam os dados e as informações do “pedigree”.

Dentre os diversos algoritmos disponíveis para localizar o máximo da função de verossimilhança por intermédio do WOMBAT, foi utilizado o algoritmo PX-AI que combina o método do algoritmo PX (*parameter expanded*) que é uma variante do algoritmo EM (*expectation-maximisation*) com o método do algoritmo AI (*average information*) conforme Meyer (1997).

Obtidas as estimativas das matrizes de coeficientes K_a e K_p , foram calculadas as estimativas dos componentes de variância de efeitos genéticos considerando os vetores

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_0(t_L^*) & \phi_1(t_L^*) & \phi_2(t_L^*) & \phi_3(t_L^*) & \phi_4(t_L^*) & \phi_5(t_L^*) \end{bmatrix}, \quad (62)$$

$$\omega = \begin{bmatrix} \omega_0(t_J^*) & \omega_1(t_J^*) & \omega_2(t_J^*) & \omega_3(t_J^*) & \omega_4(t_J^*) & \omega_5(t_J^*) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad (63)$$

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_0(t_T^*) & \psi_1(t_T^*) & \psi_2(t_T^*) & \psi_3(t_T^*) & \psi_4(t_T^*) & \psi_5(t_T^*) \end{bmatrix}. \quad (64)$$

As transformações das matrizes de variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos genéticos aditivos, estimados pelos modelos com ordem de ajuste igual a

seis para os fatores aleatórios, em variâncias genética aditiva se deu pelas expressões:

$$\phi * \widehat{\mathbf{K}}_{a_L} * \phi^T, \quad \omega * \widehat{\mathbf{K}}_{a_J} * \omega^T, \quad \psi * \widehat{\mathbf{K}}_{a_T} * \psi^T, \quad (65)$$

em que, $t_L^*, t_J^* \in [-1, 1]$ e $t_T^* \in [0, 2\pi]$ são os valores de t transformados para os domínios das funções de Legendre, Jacobi modificadas e trigonométricas, respectivamente, e ainda, $\widehat{\mathbf{K}}_{a_L}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{a_J}$ e $\widehat{\mathbf{K}}_{a_T}$, denominadas de núcleos das transformações (65), são as matrizes de variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva associadas aos modelos de regressão aleatória que ajustou os dados com ordem seis nas bases de funções de Legendre, Jacobi modificadas e trigonométricas, respectivamente.

As transformações das matrizes de variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de ambiente permanente, estimados pelos modelos com ordem de ajuste igual a seis para os fatores aleatórios, em variâncias de ambiente permanente se deu de forma análoga, substituindo a matriz $\widehat{\mathbf{K}}_{a_L}$ por $\widehat{\mathbf{K}}_{p_L}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{a_J}$ por $\widehat{\mathbf{K}}_{p_J}$ e $\widehat{\mathbf{K}}_{a_T}$ por $\widehat{\mathbf{K}}_{p_T}$ nos núcleos das transformações (65).

Para os modelos com ordem de ajuste $k < 6$, as transformações foram realizadas tomando as estimativas das matrizes K_a e K_p obtidas por esses modelos, e os vetores ϕ , ω e ψ definidos em (62), (63) e (64), respectivamente, com os seus k primeiros elementos.

2.3 Resultados

Para facilitar a apresentação dos resultados, os modelos de regressão aleatória foram identificados por MBnm, em que, M é a letra inicial da palavra modelo, B indica a base de funções ortonormais que foram utilizadas na análise (podendo ser L=Legendre, J=Jacobi e T=trigonométrica), $n \in \{2, 3, 4\}$ representa o número de efeitos aleatórios que foram considerados no modelo. Para os modelos do Grupo 1, Grupo 2 e Grupo 3 (pág. 51), n é igual a dois, três e quatro, respectivamente. E $m \in \{2, 3, 4, 5, 6\}$ denota a ordem de ajuste dos coeficientes de efeitos dos fatores aleatórios assumidos pelo modelo.

2.3.1 Resultados das análises com os efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente de animal nos modelos de regressão aleatória

Os valores do $\log$ da função de verossimilhança, dos testes da razão de máxima verossimilhança, critério de Akaike e informação bayesiano de Schwarz obtidos pelos modelos do Grupo 1 (pág. 51) quando ajustados aos dados, em que as funções pertencentes às Bases 1, 2 e 3 (pág. 51) foram utilizadas como covariáveis, encontram-se na Tabela 2.

Nas três bases de funções ortonormais, de acordo com o LRT (Tabela 2) foram constatadas diferenças significativas entre os valores do logaritmo da função de verossimilhança, pois todos os valores calculados de LRT foram superiores ao valor crítico da distribuição χ^2_{12} que é de aproximadamente 26,2 com 99% de probabilidade, indicando que o melhor ajuste aos dados em cada base de funções ortonormais ocorreu para os modelos com 48 parâmetros.

Em razão dos critérios AIC e BIC os modelos ML26 e MT26 foram selecionados. Na base de funções polinomiais de Jacobi modificada, o critério AIC, conduziu a seleção do modelo MJ26 enquanto o BIC conduziu a seleção do modelo MJ25. Neste caso, em função da parcimônia pode-se preferir o modelo MJ25.

Dentre os modelos ML26, MJ25 e MT26, observou-se na Tabela 2 que por meio dos valores do $\log(L)$ e dos critérios AIC e BIC para os respectivos modelos, o modelo ML26 melhor se ajustou aos dados.

Na Figura 6, encontram-se representadas as curvas estimadas pelos modelos ML26, MJ25 e MT26, por meio das transformações (65, pág. 58), das variâncias genética

Tabela 2 – Número de parâmetros (p), valor do log da função de verossimilhança ($\log(L)$), teste da razão de máxima verossimilhança (LRT), Critério de Akaike (AIC) e de informação bayesiano de Schwarz (BIC) para os modelos de regressão aleatória ajustados com diferentes ordens para os efeitos genéticos aditivos e de ambiente permanente de animal

Modelo	p	$\log(L)$	LRT	AIC	BIC
Legendre					
(1) ML22	12	-203.529,762	-	407.083,524	407.191,806
(2) ML23	18	-201.796,064	(2 - 1) 1.733,698	403.628,128	403.790,552
(3) ML24	26	-200.923,027	(3 - 2) 873,037	401.898,054	402.132,664
(4) ML25	36	-200.730,423	(4 - 3) 192,604	401.532,846	401.857,69
(5) ML26 ⁽¹⁾	48	-200.618,053	(5 - 4) 112,37	401.332,106	401.765,232
Jacobi Mod.					
(1) MJ22	12	-202.771,126	-	405.566,252	405.674,534
(2) MJ23	18	-201.970,384	(2 - 1) 800,742	403.976,768	404.139,19
(3) MJ24	26	-200.983,466	(3 - 2) 986,918	402.018,932	402.253,542
(4) MJ25	36	-200.700,086	(4 - 3) 283,38	401.472,172	401.797,018
(5) MJ26 ⁽²⁾	48	-200.654,785	(5 - 4) 45,301	401.405,57	401.838,698
Trigonométrica					
(1) MT22	12	-206.616,633	-	413.257,266	413.365,548
(2) MT23	18	-205.649,85	(2 - 1) 966,783	411.335,7	411.498,122
(3) MT24	26	-202.973,719	(3 - 2) 2.676,131	405.999,438	406.234,05
(4) MT25	36	-202.768,186	(4 - 3) 205,533	405.608,372	405.933,218
(5) MT26 ⁽³⁾	48	-201.806,617	(5 - 4) 961,569	403.709,234	404.142,36

⁽¹⁾ Modelo com função de Legendre, dois fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

⁽²⁾ Modelo com função Jacobi, dois fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

⁽³⁾ Modelo com função trigonométrica, dois fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

aditiva direta ($\hat{\sigma}_a^2$), de ambiente permanente de animal ($\hat{\sigma}_{pe}^2$) e residuais ($\hat{\sigma}_e^2$). O coeficiente de herdabilidade h^2 , definido como a proporção da variância genética aditiva em relação a variância fenotípica, $h^2 = \sigma_a^2 / (\sigma_a^2 + \sigma_{pe}^2 + \sigma_e^2)$, foi estimado para os modelos ML26, MJ25 e MT26 para $t \in [1, 800]$ e as curvas, assim obtidas, estão representadas na Figura 7.

Figura 6 – Curvas das variâncias genética aditiva direta ($\hat{\sigma}_a^2$), de ambiente permanente de animal ($\hat{\sigma}_{pe}^2$) e residuais ($\hat{\sigma}_e^2$), estimadas por intermédio dos modelos ML26, MJ25 e MT26

Na Tabela 3, encontram-se as estimativas das variâncias dos efeitos genéticos aditivos (σ_a^2), de ambiente permanente de animal (σ_{pe}^2), das variâncias residuais (σ_e^2) e dos coeficientes de herdabilidade (h^2), no vetor idade $t = [1, 120, 365, 550, 730, 800]$, obtidas por meio das transformações (65, pág. 58) cujos elementos das matrizes $\hat{K}_a$, $\hat{K}_{pe}$ e $\hat{R}$ encontram-se na Tabela 8 no Apêndice A.

Com os parâmetros fixos dos modelos ML26, MJ25 e MT26 estimados tornou-se possível obter uma curva de crescimento ponderal para cada um dos animais envolvidos na análise, mas a representação gráfica de todas as curvas de crescimento estimadas por

Tabela 3 – Estimativas dos componentes de variância e dos coeficientes de herdabilidade obtidas por meio dos modelos ML26, MJ25 e MT26, em função da idade na pesagem

<i>idade</i>	Legendre				Jacobi Modificado				Trigonométrica			
	$\hat{\sigma}_a^2$	$\hat{\sigma}_{p_e}^2$	$\hat{\sigma}_e^2$	$\hat{h}^2$	$\hat{\sigma}_a^2$	$\hat{\sigma}_{p_e}^2$	$\hat{\sigma}_e^2$	$\hat{h}^2$	$\hat{\sigma}_a^2$	$\hat{\sigma}_{p_e}^2$	$\hat{\sigma}_e^2$	$\hat{h}^2$
1	10,8	12,6	3,3	0,40	4,7	6	2	0,35	4,5	6,8	1,7	0,36
120	199,7	141,5	65,4	0,49	185,2	127,4	75,2	0,48	188,8	115,5	60,2	0,52
205	278	231,9	99	0,46	298,2	243,6	99,2	0,47	299,5	294,6	56,6	0,46
365	330,3	410,3	194,8	0,35	354,8	462,2	195,6	0,35	318,1	509,9	186,3	0,31
550	441,6	850	126,5	0,31	462,2	890,8	123,6	0,31	405,9	881,6	127,2	0,29
730	578,9	837,3	341	0,31	538,5	756,4	353,7	0,33	156,1	354,9	576,5	0,14
800	836,55	681,4	341	0,45	483,6	481,7	353,7	0,37	4,6	6,4	576,5	0,01

Figura 7 – Curvas dos coeficientes de herdabilidade estimados por intermédio dos modelos ML26, MJ25 e MT26

intermédio destes modelos não seria de fácil interpretação, por esta razão, foram representadas na Figura 8 apenas as curvas obtidas por meio da média das curvas de crescimento ponderal

ajustadas por modelos que estiveram sob a influência da mesma base de funções ortonormais juntamente com a média dos dados em cada idade $t \in [1, 800]$.

Figura 8 – Médias das curvas de crescimento estimadas por meio dos modelos ML26, MJ25 e MT26 em contraste com a tendência média dos dados

2.3.2 Resultados das análises com os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos e de ambiente permanente de animal nos modelos de regressão aleatória

Inicialmente, são apresentados na Tabela 4, o número de parâmetros, os valores do $\log$ da função de verossimilhança, dos critérios de Akaike e de informação bayesiano de Schwarz para os modelos do Grupo 2 (pág. 51) quando ajustados aos dados, em que as funções pertencentes às Bases 1, 2 e 3 (pág. 51) foram utilizadas como covariáveis.

Observou-se na Tabela 4 que de acordo com o LRT foram constatadas diferenças significativas entre os valores do logaritmo da função de verossimilhança, pois todos os valores calculados de LRT foram superiores ao valor crítico da distribuição χ^2_{18} que é de aproximadamente 34,8 com 99% de probabilidade, indicando que o melhor ajuste aos dados em cada base de funções ortonormais ocorreu para os modelos com 69 parâmetros. Isto significa que os modelos ML36, MJ36 e MT36 melhor se ajustaram aos dados nas bases de funções de Legendre, Jacobi modificadas e trigonométricas, respectivamente. Além disso, os critérios AIC e BIC também concordaram com LRT e selecionaram os mesmos modelos ML36, MJ36 e MT36.

Os valores do $\log(L)$, dos critérios AIC e BIC referentes aos modelos ML36, MJ36 e MT36 contidos na Tabela 4 mostram que o modelo MJ36 melhor se ajustou aos dados.

Com o objetivo de comparar os modelos ML36, MJ36 e MT36, por meio das transformações (65, pág. 58) foram calculadas as estimativas, obtidas por estes modelos, das variâncias genéticas com base nas matrizes de variâncias e covariâncias estimadas dos coeficientes aleatórios para efeitos genéticos aditivos ($\widehat{\mathbf{K}}_a$), para efeitos genéticos maternos ($\widehat{\mathbf{K}}_m$), para efeitos de ambiente permanente de animal ($\widehat{\mathbf{K}}_{p_e}$) e resíduo ($\widehat{\mathbf{R}}$) cujos elementos encontram-se nas Tabelas 9 e 10 no Apêndice B.

No núcleo das transformações em (65) foram utilizadas as matrizes $\widehat{\mathbf{K}}_{a_{ML36}}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{p_e_{ML36}}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{m_{ML36}}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{a_{MJ36}}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{p_e_{MJ36}}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{m_{MJ36}}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{a_{MT36}}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{p_e_{MT36}}$ e $\widehat{\mathbf{K}}_{m_{MT36}}$. As matrizes $\widehat{\mathbf{K}}$ de índice a , geraram as estimativas das variâncias dos efeitos genéticos aditivos, as de índice m geraram as estimativas das variâncias dos efeitos genéticos maternos e as de índice p_e geraram estimativas das variâncias do efeito de ambiente permanente de animal na idade t .

Tabela 4 – Número de parâmetros (p), valor do log da função de verossimilhança ($\log(L)$), teste da razão de máxima verossimilhança (LRT), critério de Akaike (AIC) e o critério de informação bayesiano de Schwarz (BIC) para os modelos de regressão aleatória ajustados com diferentes ordens para os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos e de ambiente permanente de animal

Modelo	p	$\log(L)$	LRT	AIC	BIC
Legendre					
(1) ML32	15	-203.407,473	-	406.844,946	406.980,298
(2) ML33	24	-201.595,384	(2 - 1) 1.812,089	403.238,768	403.455,332
(3) ML34	36	-200.712,346	(3 - 2) 883,038	401.496,692	401.821,538
(4) ML35	51	-200.520,033	(4 - 3) 192,313	401.142,066	401.602,264
(5) ML36 ⁽¹⁾	69	-200.405,027	(5 - 4) 115,006	400.948,21	401.570,674
Jacobi Mod.					
(1) MJ32	15	-202.648,892	-	405.327,784	405.463,136
(2) MJ33	24	-201.770,073	(2 - 1) 878,819	403.588,146	403.804,71
(3) MJ34	36	-200.769,313	(3 - 2) 1.000,76	401.610,626	401.935,47
(4) MJ35	51	-200.487,661	(4 - 3) 281,652	401.077,322	401.537,52
(5) MJ36 ⁽²⁾	69	-200.379,673	(5 - 4) 107,988	400.897,346	401.519,964
Trigonométrica					
(1) MT32	15	-206.481,309	-	412.992,618	413.127,97
(2) MT33	24	-205.436,291	(2 - 1) 45,018	410.920,582	411.137,146
(3) MT34	36	-202.767,69	(3 - 2) 3.668,601	405.607,38	405.932,24
(4) MT35	51	-202.553,912	(4 - 3) 213,778	405.209,824	405.670,02
(5) MT36 ⁽³⁾	69	-201.594,120	(5 - 4) 959,792	403.326,240	403.948,860

⁽¹⁾ Modelo com função de Legendre, três fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

⁽²⁾ Modelo com função Jacobi, três fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

⁽³⁾ Modelo com função trigonométrica, três fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

Na Figura 9, encontram-se representadas as curvas das variâncias estimadas por meio dos modelos ML36, MJ36 e MT36.

As curvas do coeficiente de herdabilidade, $h^2 = \sigma_a^2 / (\sigma_a^2 + \sigma_m^2 + \sigma_{p_e}^2 + \sigma_e^2)$, estimadas pelos modelos ML36, MJ36 e MT36, para $t \in [1, 800]$, estão representadas na Figura 10.

Figura 9 – Curvas das variâncias: genética aditiva direta ($\hat{\sigma}_a^2$), genética materna ($\hat{\sigma}_m^2$), de ambiente permanente de animal ($\hat{\sigma}_{pe}^2$) e residuais ($\hat{\sigma}_e^2$), estimadas por intermédio dos modelos ML36, MJ36 e MT36

Na Tabela 5, encontram-se as estimativas das variâncias dos efeitos genéticos aditivos (σ_a^2), variâncias dos efeitos genéticos maternos (σ_m^2) de ambiente permanente de animal (σ_{pe}^2), das variâncias residuais (σ_e^2), dos coeficientes de herdabilidade (h^2) e a proporção da variância total devida ao efeito genético materno $h_m^2 = \sigma_m^2 / (\sigma_a^2 + \sigma_m^2 + \sigma_{pe}^2 + \sigma_e^2)$, no vetor idade $t = [1, 120, 365, 550, 730, 800]$.

Com os parâmetros fixos dos modelos ML36, MJ36 e MT36 estimados tornou-se possível obter uma curva de crescimento ponderal para cada um dos animais envolvidos na análise, mas a representação gráfica de todas as curvas de crescimento estimadas por intermédio destes modelos não é de fácil interpretação, por esta razão, foram representadas

Tabela 5 – Estimativas dos componentes de variância, dos coeficientes de herdabilidade (h^2) e da proporção da variância total devida ao efeito genético materno (h_m^2) obtidas por meio dos modelos ML36, MJ36 e MT36, em função da idade na pesagem

<i>idade</i>	$\hat{\sigma}_a^2$	$\hat{\sigma}_m^2$	$\hat{\sigma}_{pe}^2$	$\hat{\sigma}_e^2$	$\hat{h}^2$	$\hat{h}_m^2$
Legendre						
1	2,8	0,8	3,6	4,9	0,23	0,068
120	99,7	65,5	148,0	65,9	0,26	0,173
205	162,2	102,4	260,8	98,8	0,26	0,164
365	258,1	99,7	474,1	194,2	0,25	0,097
550	350,5	106,2	894,2	126,0	0,24	0,072
730	413,3	111,4	783,0	336,3	0,25	0,068
800	758,3	84,7	569,2	336,3	0,43	0,048
Jacobi Modificado						
1	2,8	0,8	3,3	5,2	0,23	0,068
120	100,4	65,3	144,9	66,9	0,27	0,173
205	164,6	104,2	266,6	93,1	0,26	0,166
365	253,4	96,2	474,1	190,0	0,25	0,095
550	356,4	107,3	889,1	125,3	0,24	0,073
730	408,6	106,5	783,5	334,8	0,25	0,065
800	629,9	103,6	555,8	334,8	0,39	0,064
Trigonométrica						
1	3.0	49.3	6.5	2.0	0.05	0.811
120	95.1	49.2	138.0	60.3	0.28	0.144
205	164.6	62.1	315.1	56.6	0.28	0.104
365	218.0	139.0	514.9	185.4	0.21	0.131
550	317.8	65.7	872.6	127.9	0.23	0.047
730	123.0	60.1	352.7	575.4	0.11	0.054
800	3.1	49.3	6.6	575.4	0.00	0.078

na Figura 11 apenas as curvas obtidas por meio da média das curvas de crescimento ponderal ajustadas por modelos que estiveram sob a influência da mesma base de funções ortonormais juntamente com a média dos dados em cada idade $t \in [1, 800]$.

Figura 10 – Curvas dos coeficientes de herdabilidade estimadas pelos modelos ML36, MJ36 e MT36

Figura 11 – Médias das curvas de crescimento estimadas por meio dos modelos ML36, MJ36 e MT36 em contraste com a tendência média dos dados

2.3.3 Resultados das análises com os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos, de ambiente permanente de animal e de ambiente permanente materno nos modelos de regressão aleatória

Na Tabela 6 encontram-se o número de parâmetros, os valores do $\log$ da função de verossimilhança, dos critérios de Akaike e de informação bayesiano de Schwarz para os modelos do Grupo 3 (pág. 51) quando ajustados aos dados, em que as funções pertencentes às Bases 1, 2 e 3 (pág. 51) foram utilizadas como covariáveis.

Observou-se na Tabela 6 que de acordo com o LRT foram constatadas diferenças significativas entre os valores do logaritmo da função de verossimilhança, pois todos os valores calculados de LRT foram superiores ao valor crítico da distribuição χ^2_{24} que é de aproximadamente 42,9 com 99% de probabilidade, indicando que o melhor ajuste aos dados em cada base de funções ortonormais ocorreu para os modelos com 90 parâmetros. Isto significa que os modelos ML46, MJ46 e MT46 melhor se ajustaram aos dados nas bases de funções Legendre, Jacobi modificadas e trigonométricas, respectivamente. O critério AIC concordou com o teste da razão de máxima verossimilhança (LRT), porém, o critério BIC discordou do teste LRT e do critério AIC na seleção dos modelos das bases de funções polinomiais de Legendre e de Jacobi modificadas, selecionando os modelos ML45 e MJ45, com 66 parâmetros cada.

Os valores do $\log(L)$, dos critérios AIC e BIC referentes aos modelos ML45, MJ45 e MT46 contidos na Tabela 6 mostram que o modelo MJ45 melhor se ajustou aos dados.

Com o objetivo de comparar os modelos ML46, MJ46 e MT46, por meio das transformações (65, pág. 58) foram calculadas as estimativas, obtidas por estes modelos, das variâncias genéticas com base nas matrizes estimadas de variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios para efeitos genéticos aditivos ($\widehat{\mathbf{K}}_a$), para efeitos genéticos maternos ($\widehat{\mathbf{K}}_m$), para efeitos de ambiente permanente de animal ($\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$), para efeitos de ambiente permanente materno ($\widehat{\mathbf{K}}_{mpe}$) e na matriz de variâncias dos resíduos ($\widehat{\mathbf{R}}$) cujos elementos encontram-se nas Tabelas 11 e 12 no Apêndice C.

No núcleo da transformação em (65) foram utilizadas as matrizes $\widehat{\mathbf{K}}_{aML45}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{mML45}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{peML45}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{aMJ45}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{mMJ45}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{peMJ45}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{mpeMJ45}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{aMT46}$, $\widehat{\mathbf{K}}_{mMT46}$,

Tabela 6 – Número de parâmetros (p), valor do log da função de verossimilhança ($\log(L)$), teste da razão de máxima verossimilhança (LRT), critério de Akaike (AIC) e o critério de informação bayesiano de Schwarz (BIC) para os modelos de regressão aleatória ajustados com diferentes ordens para os efeitos genéticos aditivos, genéticos maternos, de ambiente permanente de animal e de ambiente permanente materno

Modelo	p	$\log(L)$	LRT	AIC	BIC
Legendre					
(1) ML42	18	-203.394,502	-	406.825,004	406.987,426
(2) ML43	30	-201.549,072	(2 - 1) 1.845,43	403.158,144	403.428,848
(3) ML44	46	-200.659,898	(3 - 2) 889,174	401.411,796	401.826,874
(4) ML45	66	-200.469,000	(4 - 3) 190,898	401.070,000	401.665,550
(5) ML46 ⁽¹⁾	90	-200.355,237	(5 - 4) 113,763	400.890,474	401.702,586
Jacobi Mod.					
(1) MJ42	18	-202.633,040	-	405.651,080	405.464,502
(2) MJ43	30	-201.720,920	(2 - 1) 1.110,542	403.501,84	403.772,546
(3) MJ44	46	-200.718,422	(3 - 2) 1.002,498	401.528,844	401.943,922
(4) MJ45	66	-200.436,947	(3 - 2) 281,475	401.005,894	401.601,442
(5) MJ46 ⁽²⁾	90	-200.345,526	(5 - 3) 90,896	400.871,052	401.683,164
Trigonométrica					
(1) MT42	18	-206.453,545	-	412.943,090	413.105,514
(2) MT43	30	-205.379,298	(2 - 1) 1.074,247	410.818,596	411.089,300
(3) MT44	46	-202.713,719	(3 - 2) 2.665,579	405.519,438	405.934,518
(4) MT45	66	-202.604,845	(4 - 3) 108,874	405.341.69	405.937,24
(5) MT46 ⁽³⁾	90	-201.325,018	(5 - 4) 2.279,827	400.830,036	401.642,148

⁽¹⁾ Modelo com função de Legendre, quatro fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

⁽²⁾ Modelo com função Jacobi, quatro fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

⁽³⁾ Modelo com função trigonométrica, quatro fatores aleatórios e ordem de ajuste igual a seis

$\widehat{\mathbf{K}}_{p_e MT46}$ e $\widehat{\mathbf{K}}_{mp_e MT46}$. As matrizes $\widehat{\mathbf{K}}$ de índice a , geraram as estimativas das variâncias do efeito genéticos aditivos, as de índice m geraram as estimativas das variâncias dos efeitos genéticos maternos, as de índice p_e geraram estimativas das variâncias do efeito de ambiente

permanente de animal e as de índice mp_e geraram estimativas das variâncias do efeito de ambiente permanente materno na idade t . Na Figura 12, encontram-se representadas as curvas das variâncias estimadas por meio dos modelos ML45, MJ45 e MT46.

O coeficiente de herdabilidade $h^2 = \sigma_a^2 / (\sigma_a^2 + \sigma_m^2 + \sigma_{p_e}^2 + \sigma_{mp_e}^2 + \sigma_e^2)$ foi estimado para os modelos ML45, MJ45 e MT46 para $t \in [1, 800]$ e as curvas, assim obtidas, estão representadas na Figura 13.

Na Tabela 7, encontram-se as estimativas das variâncias dos efeitos genéticos aditivos (σ_a^2), dos efeitos genéticos maternos (σ_m^2), de ambiente permanente de animal ($\sigma_{p_e}^2$), de ambiente permanente materno ($\sigma_{mp_e}^2$), das variâncias residuais (σ_e^2), a proporção da variância total devida ao efeito genético materno $h_m^2 = \sigma_m^2 / (\sigma_a^2 + \sigma_m^2 + \sigma_{p_e}^2 + \sigma_{mp_e}^2 + \sigma_e^2)$ e dos coeficientes de herdabilidade (h^2), no vetor idade $t = [1, 120, 365, 550, 730, 800]$.

Com os parâmetros fixos dos modelos ML45, MJ45, MT46 estimados, tornou-se possível obter a curva da média de todas as curvas de crescimento ajustadas por modelos da mesma base de funções ortonormais cuja representação encontra-se na Figura 14 juntamente com a média dos dados em cada idade $t \in [1, 800]$.

Tabela 7 – Estimativas dos componentes de variância, dos coeficientes de herdabilidade h^2 e a proporção da variância total devida ao efeito genético materno h_m^2 obtidas por meio dos modelos ML45, MJ45 e MT46, em função da idade na pesagem

<i>idade</i>	$\hat{\sigma}_a^2$	$\hat{\sigma}_m^2$	$\hat{\sigma}_{p_e}^2$	$\hat{\sigma}_{mp_e}^2$	$\hat{\sigma}_e^2$	$\hat{h}^2$	$\hat{h}_m^2$
Legendre							
1	2,6	0,2	7,0	0,7	1,4	0,22	0,019
120	110,2	24,6	142,6	7,7	67,7	0,29	0,064
205	162,3	37,1	242,5	52,5	110,7	0,27	0,061
365	265,0	43,0	465,2	42,5	197,7	0,26	0,042
550	368,8	61,1	881,2	28,4	126,7	0,25	0,042
730	418,9	81,3	776,4	19,1	343,3	0,26	0,050
800	561,1	76,5	469,6	21,5	343,3	0,38	0,052
Jacobi Modificado							
1	2,6	0,2	5,6	0,7	2,8	0,22	0,021
120	103,1	22,5	134,4	35,2	75,6	0,28	0,061
205	170,3	38,3	252,8	55,0	99,6	0,28	0,062
365	259,3	41,0	461,6	39,2	195,8	0,26	0,041
550	362,8	59,2	884,5	28,9	123,4	0,25	0,041
730	421,5	79,9	764,2	18,5	350,4	0,26	0,049
800	416,3	65,8	487,0	8,8	350,4	0,31	0,050
Trigonométrica							
1	97,9	25,8	195,1	44,6	2,4	0,27	0,070
120	20,6	1,9	19,9	2,4	71,4	0,18	0,017
205	32,4	10,7	89,8	16,2	71,1	0,15	0,049
365	61,9	4,8	130,8	5,7	185,2	0,16	0,012
550	27,7	3,7	59,7	5,7	121,2	0,13	0,017
730	141,8	16,9	180,6	36,9	345,3	0,20	0,023
800	98,6	25,9	196,5	44,9	345,3	0,14	0,036

Figura 12 – Curvas das variâncias genética aditiva direta ($\hat{\sigma}_a^2$), aditiva materno ($\hat{\sigma}_m^2$), de ambiente permanente de animal ($\hat{\sigma}_{pe}^2$), de ambiente permanente materno ($\hat{\sigma}_{mpe}^2$) e residuais ($\hat{\sigma}_e^2$), estimadas pelos modelos ML45, MJ45 e MT46

Figura 13 – Curvas dos coeficientes de herdabilidade estimados pelos modelos ML45, MJ45 e MT46

Figura 14 – Médias das curvas de crescimento estimadas por meio dos modelos ML45, MJ45 e MT46 em contraste com a tendência média dos dados

2.4 Discussão

No processo de estimação dos parâmetros, o tempo gasto para se obter a convergência do algoritmo PX-AI (*parameter expanded - average information*) nos modelos com o mesmo número de parâmetros foi relativamente o mesmo para as três bases de funções ortonormais e quando houve diferenças estas se deram fundamentalmente em razão da escolha dos valores iniciais dos parâmetros, obviamente que em modelos com 48 ou mais parâmetros o algoritmo PX-AI consumiu um tempo maior para atingir a convergência desejada.

O teste da razão de máxima verossimilhança (LRT), conforme apresentado nas Tabelas 2, 4 e 6, aponta diferenças significativas entre os valores do log da função de máxima verossimilhança em todos os grupos de modelos estudados. Para o conjunto de dados analisados, os valores absolutos do log da função de máxima verossimilhança foram superiores a 200.000 e isto pode ter dificultado a eficiência do teste LRT. Scarpel (2004) modelou dados de pesagens de 4.920 animais bovinos da raça Guzerá, encontrou em módulo, valores máximos para a função de verossimilhança próximos a 52.700. Nos modelos de regressão aleatória esses valores tendem a aumentar quando se aumenta o número de dados.

Verifica-se nas Tabelas 2, 4 e 6 que os valores do teste da razão de máxima verossimilhança para os modelos sob influência dos polinômios de Legendre se apresentaram em ordem decrescente nos grupos com dois, três e quatro efeitos aleatórios, a mesma observação vale para os modelos sob influência dos polinômios de Jacobi modificados, exceto na passagem do modelo MJ23 para o modelo MJ24 e na passagem do modelo MJ33 para o modelo MJ34, mas nos modelos sob influência das funções trigonométricas os valores do teste da razão de máxima verossimilhança seguiu uma tendência oscilatória nos grupos com dois, três e quatro efeitos aleatórios.

Ainda nas Tabelas 2, 4 e 6 observa-se que o critério de Akaike (AIC) concorda com o teste LRT e em todas as bases de funções e em todos os grupos de fatores aleatórios, o modelo com o maior número de parâmetros foi selecionado. O critério de informação bayesiano de Schwarz (BIC) discorda do teste LRT e do critério AIC na indicação do melhor modelo dentre os modelos da base de funções polinomiais de Jacobi modificadas com dois e quatro efeitos aleatórios, indicando os modelos MJ25 e MJ45, e dentre os modelos da base de funções polinomiais de Legendre com quatro fatores aleatórios, indicando o modelo ML45. Este

quadro mostra que até mesmo o critério de informação bayesiano de Schwarz (BIC) tido como o critério que penaliza modelos superparametrizados não foi muito eficiente, pois, das nove situações de escolha em apenas três o BIC penalizou os modelos com mais parâmetros. Estas observações levam a reflexão sobre a necessidade de novos estudos a respeito de um teste ou critério que seja estatisticamente mais eficiente na seleção de modelos de regressão aleatória, principalmente quando esses modelos são aplicados em conjuntos de dados relativamente grandes como é o caso do exemplo estudado neste trabalho.

Na Figura 6 as curvas de variâncias genéticas aditivas $\hat{\sigma}_a^2$ apresentadas no primeiro gráfico mostram que as curvas estimadas pelos modelos ML26 e MJ25 possuem um comportamento muito parecido no interior do intervalo de domínio e nos extremos os valores estimados por meio do modelo MJ25 são menores em relação aos valores estimados por meio do modelo ML26. A curva de variâncias $\hat{\sigma}_a^2$, estimada pelo modelo MT26 apresenta um comportamento muito atípico quando comparada às curvas estimadas pelos modelos ML26 e MJ25. O acréscimo do fator aleatório de efeito genético materno nos modelos não modificou muito o comportamento dessas curvas (Figura 9). Nos grupos com quatro fatores aleatórios, a curva de variâncias $\hat{\sigma}_a^2$, estimada pelo modelo MT46 ficou abaixo das curvas estimadas pelos modelos ML45 e MJ45, principalmente após o segundo subintervalo de idades (Figura 12).

A tendência de crescimento ou de decrescimento das curvas de variâncias genéticas aditivas $\hat{\sigma}_a^2$ obtidas por modelos sob influência das funções polinomiais ocorreu nos mesmos intervalos, apresentou resultados muito próximos no interior do intervalo de domínio e valores menores para as curvas estimadas por modelos de Jacobi modificado nas proximidades dos extremos do intervalo de domínio. Já a tendência de crescimento ou de decrescimento das curvas de variâncias genéticas aditivas $\hat{\sigma}_a^2$ obtidas por modelos sob influência das funções trigonométricas foi distinta daquelas obtidas por modelos polinomiais.

As curvas das variâncias de ambiente permanente $\hat{\sigma}_{pe}^2$, cuja representação se encontra no topo da Figura 6 à sua direita, possuem uma tendência de crescimento muito forte até, aproximadamente, os 600 dias, a partir do qual se reduzem bruscamente. Aqui, novamente se observa que a curva de variâncias de ambiente permanente $\hat{\sigma}_{pe}^2$, estimada pelo modelo MT26, possui um comportamento oscilatório muito diferente das curvas estimadas por meio dos modelos ML26 e MJ25 que se diferenciam apenas nas proximidades do extremo

superior do domínio onde a curva estimada pelo modelo MJ25 fica um pouco abaixo da curva estimada pelo modelo ML26. O acréscimo do fator aleatório de efeito genético materno nos modelos não modificou muito o comportamento dessas curvas (Figura 9). Nos grupos com quatro fatores aleatórios, a curva de variâncias de ambiente permanente $\hat{\sigma}_{pe}^2$, estimada pelo modelo MT46, ficou abaixo das curvas estimadas pelos modelos ML45 e MJ45, principalmente após o segundo subintervalo de idades (Figura 12).

As mesmas observações a respeito da tendência de crescimento e decrescimento feitas para as curvas de variâncias genéticas aditivas $\hat{\sigma}_a^2$ são válidas para as curvas de variâncias de ambiente permanente, $\hat{\sigma}_{pe}^2$.

As curvas das variâncias residuais $\hat{\sigma}_e^2$ encontram-se representadas no gráfico inferior da Figura 6, por hipótese elas foram consideradas como constantes em cada subintervalo, razão para as descontinuidades observadas. Verifica-se que as curvas estimadas por meio dos modelos ML26 e MJ25 estão muito próximas uma da outra, enquanto a curva estimada pelo modelo MT26 difere das demais curvas principalmente no segundo (159 - 284) e sexto (589 - 800) subintervalos do domínio. As mesmas observações valem para variâncias residuais $\hat{\sigma}_e^2$ obtidas pelos modelos quando se acrescentou fator aleatório de efeito genético materno (Figura 9). Nos grupos com quatro fatores aleatórios, as curvas de variâncias residuais $\hat{\sigma}_e^2$, estimadas por todos os modelos, estiveram próximas.

Pode-se concluir que as diferenças apresentadas por estas curvas de variâncias, mostram o quanto a natureza das funções, que pertencem às bases de funções ortonormais, influencia na estimação dos componentes de variância. As funções de Legendre e as de Jacobi modificadas são de natureza polinomial e, por esta razão, os modelos sob a influência dessas bases apresentaram resultados semelhantes no interior do domínio, diferenciando-se nos extremos. As funções trigonométricas não conseguiram captar as variâncias de efeitos genéticos aditivos e nem as de ambiente permanente de animal nos modelos com quatro fatores aleatórios e, além disso, apresentaram curvas de variâncias com oscilações significativas por todo o seu domínio.

Das curvas de variâncias foram estimadas as curvas dos coeficientes de herdabilidade do rebanho no decorrer do intervalo em estudo. Na Tabela 3 encontram-se os valores $\hat{\sigma}_a^2$, $\hat{\sigma}_{pe}^2$, $\hat{\sigma}_e^2$ e h^2 estimados por meio dos modelos ML26, MJ25 e MT26 nos pontos extremos

do domínio e nos pontos considerados como idades padrão por diversos pesquisadores. Os valores estimados para as variâncias e para os coeficientes de herdabilidade por meio dos modelos ML26 e MJ25 nas idades 120, 205, 365, 550 e 730 dias ficaram relativamente próximos e apresentaram grandes diferenças ao nascimento e aos 800 dias, nestas duas idades, os valores estimados para os coeficientes de herdabilidade pelo modelo MJ25 foram menores. Os valores estimados para os coeficientes de herdabilidade pelo modelo MT26 seguiu uma tendência oscilatória com valores muito baixos para as idades 730 e 800 dias quando comparados com os coeficientes de herdabilidade estimados pelos modelos ML26 e MJ25.

As discussões sobre os coeficientes de herdabilidade apresentados na Tabela 3 podem ser confirmadas na Figura 7, em que os valores estimados pelo modelo MT26 tendem a zero no último subintervalo. A descontinuidade das curvas nos extremos dos subintervalos se dá em razão da descontinuidade das curvas de variâncias residuais (Figura 6).

As curvas das variâncias $\hat{\sigma}_m^2$, representadas no topo à direita da Figura 9 são as curvas estimadas pelos modelos ML36, MJ36 e MT36. Elas mostram uma tendência de crescimento no primeiro e no segundo subintervalos do domínio e em seguida apresentam uma oscilação muito suave quando estimadas pelos modelos ML36 e MJ36. Ao serem estimadas pelo modelo MT36 a oscilação é visivelmente mais acentuada.

A presença dos coeficientes aleatórios de efeitos genéticos maternos nos modelos influenciaram nas estimativas dos coeficientes de herdabilidade, cujos valores diminuíram significativamente nas três bases de funções ortonormais, Legendre, Jacobi modificadas e trigonométricas, conforme os dados apresentados na Tabela 5 e a curva dos coeficientes de herdabilidade apresentada na Figura 10. As estimativas de h^2 pelos modelos ML36 e MJ36 são praticamente idênticas, exceto nas proximidades da idade 800 dias.

A concordância das estimativas de h^2 pelos modelos ML36 e MJ36 ao nascimento pode ser explicada pelo grande número de registros de pesagens nesta data juntamente com a presença dos coeficientes aleatórios de efeitos genéticos maternos nos modelos. Estes, por sua vez, mostraram valiosa contribuição na redução das estimativas dos coeficientes de herdabilidade na idade inicial e em todo o intervalo; porém, as estimativas dos coeficientes de herdabilidade pelo modelo MT36 sofreram reduções drásticas quando comparadas com as estimativas do modelo MT26, demonstrando falta de consistência por parte destes modelos.

As estimativas da herdabilidade materna (h_m^2), obtidas por meio dos modelos ML36 e MJ36, foram muito próximas, exceto aos 800 dias. O modelo MT36 apresentou uma estimativa de h_m^2 muito alta, próxima de 82%, e não esperada para o peso ao nascimento (Tabela 5).

Numa análise univariada, Oliveira (2005) trabalhando com dados coletados no rebanho Nelore Lemgruber de 1.968 até 2.004, mesmo rebanho considerado nesse estudo, estimou os valores 0,22; 0,24; 0,35; 0,35 e 0,36 para h^2 nas características de peso ao nascimento, aos 120 dias, ao desmame, aos 12 meses e aos sobreano, respectivamente, concordando com os valores de h^2 estimados por intermédio dos modelos ML36 e MJ36 nas idades ao nascimento e aos 120 dias, enquanto que nas demais idades, as estimativas de h^2 obtidas por este autor ficaram bem acima daquelas obtidas por intermédio dos modelos ML36 e MJ36. Os modelos de regressão aleatória levam em consideração as informações dos animais desde o nascimento até os 800 dias de vida para estimarem os valores de h^2 em cada idade pertencente a este intervalo, podendo assim, justificar as diferenças verificadas acima. Além disso, as suposições dos modelos ML36 e MJ36 são distintas daquelas utilizadas por Oliveira (2005), que não considerou no modelo os efeitos genéticos maternos e os de ambiente permanente para a característica de peso aos 550 dias. Ademais, a autora considerou que os efeitos genéticos aditivos diretos são correlacionados com os efeitos genéticos maternos, enquanto nos modelos de regressão aleatória a suposição é de que estes efeitos possuam covariâncias nulas.

Figueiredo (2001) realizou uma modelagem univariada para dados de pesagens de bovinos da raça Nelore, mesmo rebanho considerado nesse estudo, e apresentou 0,27 e 0,29 como estimativas de h^2 nas características de peso a desmama e ao sobreano, respectivamente, valores que não estão muito distantes das estimativas de herdabilidade obtida por meio dos modelos ML36 e MJ36.

Figueiredo et al. (2005) também realizaram um estudo dos dados de pesos de bovinos da raça Nelore, mesmo rebanho considerado nesse estudo e apresentaram estimativas de h^2 iguais a 0,29; 0,25; 0,42; 0,34 e 0,36 nas características de peso ao nascimento, aos 120 dias, a desmama, aos 12 meses e aos 18 meses, respectivamente. Exceto aos 120 dias, todas as estimativas de h^2 , obtidas por estes autores, ficaram acima das estimativas obtidas meio dos modelos ML36 e MJ36.

É possível que a presença dos dados de animais com idades superiores aos 550 dias nos modelos ML36 e MJ36 possam ter influenciados nas estimativas dos componentes de variância e, conseqüentemente, as estimativas de h^2 ficaram abaixo das estimativas encontradas na literatura.

Os modelos de regressão aleatória que consideraram os coeficientes aleatórios de efeitos de ambiente permanente materno apresentaram estimativas menores para as variâncias $\hat{\sigma}_m^2$ nas três bases de funções quando comparadas com as estimativas obtidas pelos modelos com apenas três efeitos aleatórios, como pode ser observado nas informações da Tabela 5 e nas da Tabela 7, conseqüentemente, as estimativas de h_m^2 também reduziram.

As estimativas das variâncias $\hat{\sigma}_a^2$, $\hat{\sigma}_m^2$, $\hat{\sigma}_{pe}^2$, $\hat{\sigma}_{mpe}^2$ e $\hat{\sigma}_e^2$ pelos modelos ML45 e MJ45 conduziram a estimativas de h^2 muito próximas, exceto nas proximidades aos 800 dias em que as estimativas do modelo MJ45 são menores que as do modelo ML45.

As conseqüências das estimativas das variâncias podem ser vistas na Figura 13, onde estão representadas as estimativas das curvas de coeficientes de herdabilidade estimados pelos modelos ML45, MJ45 e MT46. Nota-se que o modelo MT46 apresentou estimativas muito baixas quando comparadas às estimativas dos modelos ML45 e MJ45.

Os coeficientes de herdabilidade estimados pelos modelos ML45 e MJ45 são distintos no final do primeiro subintervalo (1 - 69 dias) e no início do segundo subintervalo (69 - 159 dias), talvez por escassez de informações dos dados nessa região, também apresentando diferenças nas proximidades da idade aos 800 dias.

Nas regiões onde houve discordância entre as estimativas de coeficientes de herdabilidade obtidas pelos modelos ML45 e MJ45 verificam-se que as estimativas do modelo MJ45 são inferiores às obtidas pelo modelo ML45. Surge aqui uma expectativa de que os modelos de regressão aleatória, sob a influência das funções ortonormais de Jacobi modificadas, possam minimizar os problemas que apresentam os modelos de regressão aleatória sob influência das funções ortonormais de Legendre, descritos por Meyer (2005), nos extremos do intervalo do tempo em estudo.

A presença dos coeficientes aleatórios de ambiente permanente materno nos modelos ML45 e MJ45 contribuiu para reduzir as estimativas dos coeficientes de herdabilidade nas proximidades do extremo superior do intervalo em estudo. Os valores de h^2 estimados

por ambos os modelos se concentraram entre 0,2 e 0,3 em quase toda a extensão do domínio, ficando um pouco abaixo dos valores estimados por Albuquerque e Meyer (2001), os quais trabalharam com classes de 4 dias na análise de peso de gado Nelore do nascimento até 630 dias, obtendo valores de h^2 entre 0,2 e 0,4 para as idades do nascimento até aos 450 dias, e entre 0,4 e 0,5 para o intervalo de idades dos 450 aos 630 dias.

Santoro et al. (2005), trabalhando com classes de 10 dias na análise de peso de gado Nelore do estado de Pernambuco, selecionaram um modelo de grau cinco com erros homogêneos e apresetando herdabilidade estimada entre 0 a 0,5 para as idades do nascimento até 60 dias, e entre 0,5 e 0,6 para as idades de 60 até 720 dias.

Estimativas menores para a herdabilidade mostrada pelos modelos ML45 e MJ45 quando comparadas com as estimativas obtidas por Albuquerque e Meyer (2001) e Santoro et al. (2005) podem ter ocorrido pelo fato dos modelos ML45 e MJ45 não terem classificado as idades em classes e/ou por razões associados à seleção realizada pelo proprietário da fazenda Mundo Novo na população bovina da qual originaram os dados.

As estimativas dos coeficientes de herdabilidade dos modelos ML45 e MJ45 estão muito próximas das estimativas de h^2 dos modelos ML36 e MJ36, exceto nas proximidades da idade aos 800 dias. Já as estimativas dos coeficientes de herdabilidade materna obtidas pelos modelos ML45 e MJ45 para os pesos nas idades um, 120, 205, 365, 550, 730 e 800 dias ficaram entre 1% e 6% enquanto que as estimativas de h_m^2 dos modelos ML36 e MJ36 para estas mesmas idades ficaram entre 5% e 17%.

Dentre ML26, MJ25 e MT26, selecionados pelo BIC, o modelo ML25 (com 48 parâmetros) é o que apresenta o menor valor BIC. Comparando os valores BIC para os modelos com três fatores aleatórios, ML36, MJ36 e MT36 o que apresenta o menor valor BIC é o modelo MJ36 (com 69 parâmetros) e para os modelos com quatro fatores aleatórios, ML45, MJ45 e MT46 o que apresenta o menor valor BIC é o modelo MJ45 (com 66 parâmetros).

Pelo critério de informação bayesiano de Schwarz, dentre os modelos ML25 (com 48 parâmetros), MJ36 (com 69 parâmetros) e MJ45 (com 66 parâmetros), seleciona-se o modelo MJ36; porém, o modelo MJ45 possui menos parâmetros que o modelo MJ36 e pode ser, a critério do pesquisador, preferido em função da parcimônia e das discussões anteriores que mostraram a importância da presença dos coeficientes aleatórios de efeitos de ambiente

permanente materno nos modelos de regressão aleatória, principalmente nas estimativas de h_m^2 .

Quanto ao ajuste das curvas de crescimento ponderal, em termos de curva média, as estimativas do modelo sob influência das funções trigonométricas nos fatores aleatórios do modelo MT26 foram as que mais se aproximaram da média pontual dos dados. Esta conclusão pode ser tomada após a análise dos gráficos apresentados nas Figuras 8, 11 e 14. A média das curvas estimadas pelos modelos, cujos fatores aleatórios foram influenciados pelas funções de Legendre e Jacobi Modificadas, não sofreram mudanças significativas quando os modelos passaram de dois para três e de três para quatro fatores aleatórios.

Nos dois últimos subintervalos, as curvas médias estimadas pelos modelos de regressão aleatória com dois, três ou quatro fatores aleatórios se afastaram da média pontual dos dados. Este fato pode ser justificado pela distribuição dos pesos dos animais, pois, dos 61.975 pesos corporais dos animais, 10.045 (16%) foram tomados na idade ao nascimento, não se tem nenhuma informação no intervalo $[2, 89]$, 33.278 (54%) foram tomados no intervalo $[90, 500]$ e 18.652 (30%) foram tomados no intervalo $[501, 800]$. Uma outra justificativa poderia ser encontrada na constituição dos grupos contemporâneos, cuja comprovação exigiria uma nova pesquisa.

3 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste estudo, o teste LRT e os critérios AIC e BIC foram conservadores, conduzindo nos a escolha de modelos com ordens de ajuste iguais a cinco ou seis, e portanto, há uma necessidade de promover novas pesquisas visando o desenvolvimento de outras diretrizes estatísticas que permitam a escolha do “melhor” modelo, principalmente para casos particulares como os estudados aqui. Tal proposta também foi discutida por Meyer (1998).

Na análise de dados de animais, as suposições exigidas pelos modelos de regressão aleatória conduzem nos constantemente ao cálculo do determinante de matrizes de altas dimensões, procedimento necessário para a avaliação do log da função de verossimilhança dentro de cada passo do algoritmo, principalmente se o conjunto de dados for relativamente grande. Isso demanda grande esforço computacional e técnicas avançadas de programação, um fator que pode prejudicar a pesquisa se o pesquisador não possuir recursos computacionais adequados ou se lhe faltar o conhecimento das técnicas necessárias para a programação.

Os programas computacionais “free”, capazes de realizarem análises de dados por meio dos modelos de regressão aleatória, permitem ao pesquisador executar suas tarefas dentro de seus limites. Portanto, se o pesquisador não possuir o domínio de técnicas de computação para criar programas ou para realizar mudanças nos programas de código aberto para que estes venham a suprir suas necessidades, pode tornar-se impossível o estudo de todas as metodologias associadas a possíveis soluções do problema em questão.

Na definição da bases de funções ortonormais, seção 2.1.1, na construção de funções ortonormais foi considerada a função auxiliar $\Delta(t) = (a + bt)^\alpha(a - bt)^\beta$, em que, $\alpha > -1$, $\beta > -1$; $a, b \in \mathbb{R}$ e $a \neq b$ se $a = 0$ ou $b = 0$. Para que a base de funções de Jacobi modificadas fosse obtida, seção 2.1.1.2, tomou-se em $\Delta(t)$, $a = \alpha = \beta = 1$ e $b = \sqrt{\frac{1}{2}}$. Com essa escolha, foi possível observar que as curvas dos componentes aleatórios estimadas por modelos que assumiram tais funções, apresentaram, nos extremos de seus domínios, trajetórias abaixo daquelas estimadas com funções de Legendre.

A sequência de funções $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$, em que $x_0(t) = \varphi_0(t) \Delta(t)$, $x_1(t) = \varphi_1(t) \Delta(t)$, $x_2(t) = \varphi_2(t) \Delta(t)$, $\dots$, $x_j(t) = \varphi_j(t) \Delta(t)$, $\dots$, $t \in [-1, 1]$, e $\varphi_n(t)$ com $n \in \{0, 1, \dots\}$ são as funções potências de t , não podem se anular simultaneamente em nenhum ponto do seu domínio. Ocorre que se $b \neq 0$, então, $\Delta(t)$ se anula nos pontos $t = -\frac{a}{b}$

e $t = \frac{a}{b}$. Portanto, a e b devem ser escolhidos de modo que $-\frac{a}{b}$ e $\frac{a}{b}$ não pertençam ao intervalo $[-1, 1]$. Levando-se em consideração esta observação, a função $\Delta(t)$ pode ser escolhida de infinitas maneiras, abrindo assim, uma nova perspectiva de pesquisas futuras nos modelos de regressão aleatória.

Também é objeto de pesquisa, a substituição das funções de Legendre pelas funções de Jacobi modificadas ou trigonométricas na parte de efeitos fixos, objetivando uma melhor aproximação da média das curvas estimadas pelo modelo com relação a tendência média dos dados, principalmente nos extremos do intervalo.

REFERÊNCIAS

- ALBUQUERQUE, L. G.; MEYER, K. Estimates of covariance functions for growth from birth to 630 days of age in Nelore cattle. **Journal of Animal Science**, Albany, v.79, p. 2.776 – 2.789, 2001.
- FIGUEIREDO, L. G. G. **Estimativas de parâmetros genéticos de características de carcaças feitas por ultra-sonografia em bovinos da raça Nelore**. 2001. 67p. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos - Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2001.
- FIGUEIREDO, L. G. G. et al. Análise genética do temperamento em uma população da raça Nelore. **Livestock Research for Rural Development**, Cali, v. 17, n. 7, Art. 84, 2005. Disponível em: <<http://www.cipav.org.co/lrrd/lrrd17/7/gira17084.htm>>. Acesso em: 10 aug. 2007.
- HARVILLE, D. A. Maximum likelihood approaches to variance component estimation and to related problems. **Journal of the American Statistical Association**, Boston, v. 72, p. 320 – 338, 1977.
- Henderson, C. R. et al. Estimation of environmental and genetic trends from records subject to culling. **Biometrics**, Washington, v. 15, n. 2, p. 192-218, 1959.
- KHURI, A. I. **Advanced calculus with applications in statistics**. 2.ed. New York: John Wiley & Sons. 2003. 701 p.
- KIRKPATRICK, M.; HECKMAN, N. A quantitative genetic model for growth, shape, reaction norms, and other infinite-dimensional characters. **Journal of Mathematical Biology**, New York, v. 27, p. 429 – 450, 1989.
- KIRKPATRICK, M.; HILL, W. G.; THOMPSON, R. Estimating the covariance structure of traits during growth and ageing, illustrated with lactation in dairy cattle. **Genetical Research**, London, v. 64, p. 57 – 69, 1994.
- KIRKPATRICK, M.; LOFSVOLD, D.; BULMER M. Analysis of the inheritance, selection and evolution of growth trajectories. **Genetics**, Bethesda, v. 124, n. 4, p. 979 – 993, 1990.
- KREYSZIG E. **Introductory functional analysis with applications**. New York: John Wiley & Sons. 1978. 688 p.
- MARTINS, E. N. et al. **Cadernos didáticos 18: Uso de modelos mistos na avaliação genética animal**. Viçosa: UFV, 1997. 120 p.
- MEYER, K. **WOMBAT – A program for mixed model analyses by restricted maximum likelihood**. User notes. Animal Genetics and Breeding Unit, Armidale, 2006, 55 p. Disponível em: <<http://agbu.une.edu.au/~kmeyer/wombat.html>>. Acesso em: 28 mar. 2007.
- _____. Random regression analyses using B-splines to model growth of Australian Angus Cattle. **Genetics Selection Evolution**, Paris, v. 37, p. 473 – 500, 2005.

_____. Estimating covariance functions for longitudinal data using a random regression model. **Genetics Selection Evolution**, Paris, v. 30, p. 221 – 240, 1998.

_____. An “average information” restricted maximum likelihood algorithm for estimating reduced rank genetic covariance matrices or covariance functions for animal models with equal design matrices. **Genetics Selection Evolution**, Paris, v.23, p. 67 – 83, 1997.

_____. Estimating variances and covariances for multivariate animal models by restricted maximum likelihood. **Genetics Selection Evolution**, Paris, v. 23, p. 67 – 83, 1991.

_____. Restricted maximum likelihood to estimate variance components for animal models with several random effects using a derivative-free algorithm. **Genetics Selection Evolution**, Paris, v. 21, p. 317 – 340, 1989.

MEYER, K.; HILL, W. G. Estimation of genetic and phenotypic covariance functions for longitudinal or ‘repeated’ records by restricted maximum likelihood. **Livestock Production Science**, Amsterdam, v. 47, p. 185 – 200, 1997.

OLIVEIRA, H. P. Q. de. **Análise genética dos efeitos de linhagem materna em um rebanho Nelore**. 2005. 91p. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos - Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2005.

SAKAGUTI, E. S. et al. Avaliação do crescimento de bovinos jovens da raça tabapuã, por meio de análises de funções de covariâncias. **Revista Brasileira de Zootecnia**, Viçosa , v. 32, n. 4, p. 864 – 874, 2003.

SANTORO, K.R. et al. Uso de funções de covariância na descrição do crescimento de bovinos Nelore criados no estado de Pernambuco. **Revista Brasileira de Zootecnia**, Viçosa , v. 34, n. 6, p. 2290 – 2297, 2005 (supl.).

SCARPEL, L.C. P. **Estimativas de parâmetros e valores genéticos para peso corporal de bovinos da raça Guzerá usando-se regressão aleatória**. 2004. 71 p. Tese (Doutorado em zootecnia) - Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias - UNESP, Jaboticabal, 2004.

WERF, J. van der. **Random Regression in animal Breeding**. 2001. 50p. Course Notes, Armidale, Australia. University of New England.
<<http://www-personal.une.edu.au/~jvanderw/CFcoursenotes.pdf>>. Acesso em: 29 out. 2005.

PALLAS, L. **Harmonic analysis**. Disponível em:<http://uuslepo.it.da.ut.ee/~toomas_1/harmonic_analysis/>. Acesso em: 19 out. 2005.

SEARLE, S. R. **Notes on variance component estimation: a detailed account of maximum likelihood and kindred methodology**. New York: Biometrics Unit, Cornell University, Ithaca, 1979. 146 p.

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

APÊNDICES

APÊNDICE A - Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes de efeitos de genética aditiva, de ambiente permanente animal e estimativas das variâncias residuais

Tabela 8 – Elementos das matrizes $\widehat{\mathbf{K}}_a$ (estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva), $\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$ (estimativas das variâncias e covariâncias coeficientes aleatórios de efeitos de ambiente permanente de animal) e $\widehat{\mathbf{R}}$ (estimativas das variâncias residuais), estimados por meio dos modelos ML26, MJ25, MT26

Posição (l,c)	Legendre			Jacobi Modificado			Trigonométrica		
	$\widehat{\mathbf{K}}_{aML26}$	$\widehat{\mathbf{K}}_{peML26}$	$\widehat{\mathbf{R}}_{ML26}$	$\widehat{\mathbf{K}}_{aMJ25}$	$\widehat{\mathbf{K}}_{peMJ25}$	$\widehat{\mathbf{R}}_{MJ25}$	$\widehat{\mathbf{K}}_{aMT26}$	$\widehat{\mathbf{K}}_{peMT26}$	$\widehat{\mathbf{R}}_{MT26}$
1,1	618,45	773,97	3,25	620,38	789,68	2,02	1.378,70	2.045,10	1,76
1,2	162,46	323,77	0	154,41	329,43	0	-347,43	-656,08	0
1,3	-76,31	-136,68	0	35,97	-5,13	0	-235,83	-846,27	0
1,4	23,98	-56,91	0	55,34	1,00	0	-351,48	-461,64	0
1,5	-30,17	-11,45	0	-31,38	-14,36	0	-119,14	-293,45	0
1,6	-6,24	2,55	0	-	-	0	-205,96	-287,48	0
2,2	74,51	204,83	65,38	71,96	222,05	75,17	109,42	229,02	60,23
2,3	-14,09	-47,04	0	14,65	7,01	0	49,60	278,61	0
2,4	0,12	-56,25	0	12,27	-23,01	0	88,81	146,47	0
2,5	0,54	6,59	0	2,01	4,61	0	50,44	105,51	0
2,6	-1,36	9,003	0	-	-	0	36,58	86,69	0
3,3	22,59	27,66	98,99	7,07	2,63	99,22	114,72	631,05	56,57
3,4	-4,02	4,21	0	-0,02	-2,94	0	63,89	154,89	0
3,5	8,93	2,45	0	-4,63	1,41	0	33,00	139,57	0
3,6	10,93	0,94	0	-	-	0	39,77	154,93	0
4,4	6,43	20,24	194,78	9,68	6,60	195,65	101,55	110,20	186,28
4,5	3,23	-3,51	0	2,48	-2,99	0	32,28	61,32	0
4,6	1,53	-4,09	0	-	-	0	46,43	63,12	0
5,5	13,41	3,18	126,52	12,59	1,63	123,15	41,11	53,51	127,18
5,6	5,88	0,96	0	-	-	0	-0,05	35,26	0
6,6	9,62	1,08	340,98	-	-	353,65	49,78	52,64	576,53

APÊNDICE B - Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes de efeitos de genética aditiva, de genética aditiva materno, de ambiente permanente animal e estimativas das variâncias residuais

Tabela 9 – Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva ($\widehat{K}_a$), de genética aditiva materno ($\widehat{K}_m$), de ambiente permanente de animal ($\widehat{K}_{pe}$) e estimativas das variâncias residuais ($\widehat{R}$), obtidas por meio dos modelos ML36 e MJ36

Legendre											
$\widehat{K}_{aML36}$						$\widehat{K}_{mML36}$					
423,45	-	-	-	-	-	164,67	-	-	-	-	-
140,29	69,00	-	-	-	-	24,44	10,16	-	-	-	-
-55,89	-14,04	19,26	-	-	-	-24,21	-1,07	5,60	-	-	-
7,37	-0,49	0,14	5,33	-	-	11,06	-0,73	-2,54	1,95	-	-
-10,77	3,64	7,56	4,48	11,12	-	-13,17	-1,02	1,88	-1,06	1,58	-
-5,83	-1,60	10,42	1,82	5,66	9,19	-2,15	0,82	0,87	-0,54	0,40	0,30
$\widehat{K}_{peML36}$						$\widehat{R}_{ML36}$					
799,16	-	-	-	-	-	4,89	-	-	-	-	-
322,29	200,77	-	-	-	-	0	65,89	-	-	-	-
-135,60	-46,56	26,98	-	-	-	0	0	98,81	-	-	-
-52,28	-54,87	3,69	20,15	-	-	0	0	0	194,21	-	-
-15,93	5,05	1,90	-3,46	3,88	-	0	0	0	0	125,99	-
3,15	8,36	0,46	-3,67	0,89	0,77	0	0	0	0	0	336,28
Jacobi Modificado											
$\widehat{K}_{aMJ36}$						$\widehat{K}_{mMJ36}$					
430,54	-	-	-	-	-	166,11	-	-	-	-	-
136,22	64,45	-	-	-	-	21,70	9,58	-	-	-	-
20,62	10,38	9,51	-	-	-	7,22	3,22	2,38	-	-	-
32,51	9,32	1,13	6,28	-	-	16,97	0,64	0,36	2,48	-	-
-9,91	2,46	5,28	3,72	13,01	-	-11,50	-0,38	-0,12	-1,09	1,63	-
0,49	-0,12	8,44	1,071	8,034	10,66	2,80	1,28	0,82	0,31	0,33	0,51
$\widehat{K}_{peMJ36}$						$\widehat{R}_{MJ36}$					
815,64	-	-	-	-	-	5,20	-	-	-	-	-
330,28	215,98	-	-	-	-	0	66,94	-	-	-	-
6,63	9,70	5,43	-	-	-	0	0	93,11	-	-	-
11,09	-19,84	-3,23	7,70	-	-	0	0	0	190,00	-	-
-13,90	7,98	-1,30	-3,60	3,73	-	0	0	0	0	125,31	-
3,92	4,49	0,84	-0,92	0,07	0,31	0	0	0	0	0	334,81

Tabela 10 – Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva ($\widehat{\mathbf{K}}_a$), de genética aditiva materno ($\widehat{\mathbf{K}}_m$), de ambiente permanente de animal ($\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$) e estimativas das variâncias residuais ($\widehat{\mathbf{R}}$), obtidas por meio do modelo MT36

Trigonométrica											
$\widehat{\mathbf{K}}_{aMT36}$						$\widehat{\mathbf{K}}_{mMT36}$					
926,07	-	-	-	-	-	414,61	-	-	-	-	-
-253,57	83,44	-	-	-	-	-103,22	30,028	-	-	-	-
-234,74	57,23	107,42	-	-	-	-33,24	2,98	26,60	-	-	-
-230,60	64,83	61,23	68,31	-	-	-107,69	25,86	9,46	29,16	-	-
-107,87	46,75	34,51	28,99	40,26	-	-27,49	7,82	5,82	7,24	3,88	-
-121,13	20,73	34,90	23,39	-1,93	32,77	-68,79	15,60	10,04	17,98	4,55	12,70
$\widehat{\mathbf{K}}_{peMT36}$						$\widehat{\mathbf{R}}_{MT36}$					
2085,90	-	-	-	-	-	1,98	-	-	-	-	-
-650,95	225,76	-	-	-	-	0	60,32	-	-	-	-
-823,22	270,52	611,82	-	-	-	0	0	56,60	-	-	-
-475,38	145,37	149,82	114,66	-	-	0	0	0	185,38	-	-
-286,10	103,72	134,32	59,50	52,84	-	0	0	0	0	127,86	-
-302,30	87,47	151,46	67,76	34,09	56,29	0	0	0	0	0	575,44

APÊNDICE C - Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes de efeitos de genética aditiva, de genética aditiva materno, de ambiente permanente animal, de ambiente permanente materno e estimativas das variâncias residuais

Tabela 11 – Estimativas das variâncias e covariâncias dos coeficientes aleatórios de efeitos de genética aditiva ($\widehat{\mathbf{K}}_a$), de genética aditiva materno ($\widehat{\mathbf{K}}_m$), de ambiente permanente de animal ($\widehat{\mathbf{K}}_{pe}$), de ambiente permanente materno ($\widehat{\mathbf{K}}_{mpe}$) e estimativas das variâncias residuais ($\widehat{\mathbf{R}}$), obtidas por meio dos modelos ML45 e MJ45

Legendre										
$\widehat{\mathbf{K}}_{aML45}$					$\widehat{\mathbf{K}}_{mML45}$					
440,55	-	-	-	-	81,14	-	-	-	-	-
142,16	71,11	-	-	-	22,75	12,11	-	-	-	-
-55,78	-13,12	10,35	-	-	-6,97	-0,27	1,80	-	-	-
6,01	0,74	-2,81	6,43	-	3,52	-1,04	-0,43	1,31	-	-
-10,22	6,26	0,21	6,55	12,71	-4,12	-1,03	0,32	-0,21	0,25	-
$\widehat{\mathbf{K}}_{peML45}$					$\widehat{\mathbf{K}}_{mpeML45}$					
780,94	-	-	-	-	59,22	-	-	-	-	-
318,44	201,09	-	-	-	-2,80	0,80	-	-	-	-
-137,91	-50,63	26,50	-	-	-12,34	0,56	2,85	-	-	-
-54,53	-57,05	6,40	21,02	-	7,85	-0,13	-1,36	1,47	-	-
-15,58	-1,59	2,98	-1,20	0,66435	-4,86	0,58	1,15	-0,33	0,69	-
diag($\widehat{\mathbf{R}}_{ML45}$)										
1,39	67,66	110,70	197,70	126,67	343,26					
Jacobi Modificado										
$\widehat{\mathbf{K}}_{aMJ45}$					$\widehat{\mathbf{K}}_{mMJ45}$					
440,32	-	-	-	-	78,05	-	-	-	-	-
138,63	66,93	-	-	-	21,08	12,08	-	-	-	-
22,53	10,73	4,84	-	-	6,91	3,69	1,90	-	-	-
33,51	10,72	-0,72	6,90	-	7,64	1,01	0,85	1,43	-	-
-12,17	4,08	-3,22	4,54	10,57	-4,10	-0,48	-0,24	-0,44	0,33	-
$\widehat{\mathbf{K}}_{peMJ45}$					$\widehat{\mathbf{K}}_{mpeMJ45}$					
799,77	-	-	-	-	60,22	-	-	-	-	-
327,36	215,62	-	-	-	-3,45	0,72	-	-	-	-
0,78	7,52	2,52	-	-	-1,41	-0,10	0,16	-	-	-
5,224	-21,30	-2,56	6,90	-	7,22	-0,31	-0,17	1,06	-	-
-16,97	3,67	0,87	-3,14	1,77	-7,29	0,57	0,19	-0,72	1,01	-
diag($\widehat{\mathbf{R}}_{MJ45}$)										
2,8015	75,627	99,605	195,84	123,42	350,35					

ANEXOS

ANEXO A - Resultados em álgebra de matrizes: Somas e produtos diretos de matrizes

Neste anexo estão relacionados alguns dos resultados apresentados por Searle; Casella e McCulloch (1992) no apêndice M e que freqüentemente foram usados no desenvolvimento deste trabalho. As demonstrações de tais resultados foram omitidas, pois, o objetivo aqui é apenas listar as definições e resultados julgados como necessários para a compreensão do trabalho.

Dadas as matrizes $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k$, de qualquer ordem, define-se a operação soma direta entre estas matrizes como sendo

$$\bigoplus_{i=1}^k \mathbf{A}_i = \mathbf{A}_1 \oplus \mathbf{A}_2 \oplus \mathbf{A}_3 \oplus \dots \oplus \mathbf{A}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{A}_k \end{bmatrix}$$

Para uma matriz $\mathbf{A}$, de ordem $r \times c$ e com os elementos a_{ij} , para $i = 1, \dots, r$ e $j = 1, \dots, c$, define-se a operação produto direto entre a matriz $\mathbf{A}$ e uma matriz $\mathbf{B}$ de ordem qualquer como sendo

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} & \dots & a_{1c}\mathbf{B} \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} & \dots & a_{2c}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{r1}\mathbf{B} & a_{r2}\mathbf{B} & \dots & a_{rc}\mathbf{B} \end{bmatrix}$$

A definição de $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ se estende naturalmente para mais que duas matrizes; como por exemplo,

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} \otimes \mathbf{C} = \mathbf{A} \otimes (\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}),$$

e

$$\bigotimes_{i=1}^k \mathbf{A}_i = \mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2 \otimes \mathbf{A}_3 \otimes \dots \otimes \mathbf{A}_k.$$

Propriedades importantes do produto direto são:

(i) $(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})' = \mathbf{A}' \otimes \mathbf{B}'.$

(ii) Para os vetores $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$: $\mathbf{x}' \otimes \mathbf{y} = \mathbf{y}\mathbf{x}' = \mathbf{y} \otimes \mathbf{x}'.$

(iii) Para o escalar λ : $\lambda \otimes \mathbf{A} = \lambda \mathbf{A} = \mathbf{A} \otimes \lambda = \mathbf{A} \lambda$.

(iv) Para matrizes particionadas têm-se:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_2 \end{bmatrix} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{B} & \mathbf{A}_2 \otimes \mathbf{B} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{A} \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1 & \mathbf{B}_2 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} \mathbf{A} \otimes \mathbf{B}_1 & \mathbf{A} \otimes \mathbf{B}_2 \end{bmatrix}.$$

(v) Provado que as exigências para a multiplicação regular de matrizes estejam satisfeitas, a seguinte relação é válida:

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})(\mathbf{X} \otimes \mathbf{Y}) = \mathbf{A}\mathbf{X} \otimes \mathbf{B}\mathbf{Y}.$$

(vi) Para matrizes quadradas e não singulares, $(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \otimes \mathbf{B}^{-1}$.

(vii) Se $r_{\mathbf{A}}$ e $tr(\mathbf{A})$ representam o rank e o traço, respectivamente, da matriz $\mathbf{A}$, então,

$$r_{\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}} = r_{\mathbf{A}} r_{\mathbf{B}} \quad \text{e} \quad tr(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}) = tr(\mathbf{A}) tr(\mathbf{B}).$$

(viii) Se $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ são matrizes quadradas, então,

$$|\mathbf{A}_{p \times p} \otimes \mathbf{B}_{m \times m}| = |\mathbf{A}|^m |\mathbf{B}|^p$$

ANEXO B - Resultados em álgebra de matrizes: Diferenciação de expressões matriciais

Neste anexo estão relacionados alguns dos resultados apresentados por Searle; Casella e McCulloch (1992) no apêndice M e que freqüentemente foram usados no desenvolvimento deste trabalho. As demonstrações de tais resultados foram omitidas, pois, o objetivo aqui é apenas listar as definições e resultados julgados como necessários para a compreensão do trabalho.

Considerando o exemplo em que $\mathbf{a}' = [3 \ 5]$ e $\mathbf{x}' = [x_1 \ x_2]$, tem-se que

$$\lambda = \mathbf{a}'\mathbf{x} = 3x_1 + 5x_2,$$

então, o operador $\frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{x}}$ é definido como

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \lambda}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \lambda}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix} = \mathbf{a}.$$

Em geral este resultado se estende para

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{a}'\mathbf{x}) = \mathbf{a} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}'\mathbf{a}), \quad (66)$$

a segunda igualdade vem da expressão $\mathbf{a}'\mathbf{x} = \mathbf{x}'\mathbf{a}$, além disso,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}'}(\mathbf{a}'\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{a}'\mathbf{x}) \right]' \mathbf{a} = \mathbf{a}' = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}'}(\mathbf{x}'\mathbf{a}). \quad (67)$$

No caso de se ter os vetores $\mathbf{y}_{r \times 1}$ e $\mathbf{x}_{p \times 1}$, em que os elementos de $\mathbf{y}$ são funções diferenciáveis dos elementos de $\mathbf{x}$ a expressão para $\frac{\partial \mathbf{y}'}{\partial \mathbf{x}}$ é definido por

$$\frac{\partial \mathbf{y}'}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_r}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_r}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_p} & \frac{\partial y_2}{\partial x_p} & \dots & \frac{\partial y_r}{\partial x_p} \end{bmatrix}. \quad (68)$$

Similarmente a transposta de $\frac{\partial \mathbf{y}'}{\partial \mathbf{x}}$ é

$$\left(\frac{\partial \mathbf{y}'}{\partial \mathbf{x}} \right)' = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_r}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_r}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_p} & \frac{\partial y_2}{\partial x_p} & \dots & \frac{\partial y_r}{\partial x_p} \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial x_p} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_2}{\partial x_p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial y_r}{\partial x_1} & \frac{\partial y_r}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_r}{\partial x_p} \end{bmatrix} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}'}. \quad (69)$$

Em particular $\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}'} = \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{I}$. Portanto, se $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ são matrizes que não dependem de $\mathbf{x}$, então

$$\frac{\partial(\mathbf{A}\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}'} = \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}'} = \mathbf{A} \quad (70)$$

e

$$\frac{\partial(\mathbf{x}'\mathbf{B})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{B} = \mathbf{B}. \quad (71)$$

A derivada do produto interno $\mathbf{u}'\mathbf{v}$ em relação a $\mathbf{x}$, em que, cada elemento de $\mathbf{u}'$ e $\mathbf{v}$ é uma função de $\mathbf{x}$ é

$$\frac{\partial(\mathbf{u}'\mathbf{v})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{v}'}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{u}. \quad (72)$$

Para as formas quadráticas, os resultados de (66) até (72) produzem

$$\frac{\partial(\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{A}\mathbf{x}) + \frac{\partial(\mathbf{A}\mathbf{x})'}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{A}'\mathbf{x}.$$

Quando $\mathbf{A}$ é simétrica, o que ocorre usualmente no contexto de formas quadráticas, tem-se

$$\frac{\partial(\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{A}\mathbf{x}.$$

Se t é um escalar e $\mathbf{A}$ uma matriz, define-se $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \left\{ {}_m \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} \right\}$, em que $\left\{ {}_m \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} \right\}$ representa a matriz cujo (ij)-ésimo elemento é a derivada do elemento a_{ij} da matriz $\mathbf{A}$ em relação a t . Se a matriz $\mathbf{A}$ é não singular, ou seja, $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$, obtém-se que

$$\frac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial t} = -\mathbf{A}^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{A}^{-1}.$$

Supondo que a matriz $\mathbf{A}$ é uma matriz quadrada sem nenhuma relação de funcionalidade entre os seus elementos e denotando o cofator de a_{ij} em $|\mathbf{A}|$ por $|\mathbf{A}_{ij}|$, a derivada de $|\mathbf{A}|$ em relação a a_{ij} é

$$\frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial a_{ij}} = |\mathbf{A}_{ij}|. \quad (73)$$

Se $\mathbf{A}$ é simétrica, então

$$\frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial \theta} = \frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial \theta} + \frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial a_{ji}} \frac{\partial a_{ji}}{\partial \theta} = |\mathbf{A}_{ij}| + |\mathbf{A}_{ji}| = 2|\mathbf{A}_{ij}| \quad \text{para } i \neq j.$$

Portanto, se $\mathbf{A}$ for simétrica, a forma geral de sua derivada em relação a um de seus elementos é

$$\frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial a_{ij}} = (2 - \delta_{ij})|\mathbf{A}_{ij}|,$$

em que, δ_{ij} é o delta de Kronecker, $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$ e $\delta_{ij} = 1$ para $i = j$.

Supondo que $\mathbf{A}$ seja simétrica e que os seus elementos são funções do escalar t , tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln |\mathbf{A}|}{\partial t} &= \frac{1}{|\mathbf{A}|} \frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial t} = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \sum_{i \leq j} \frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial a_{ij}} \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \sum_{i \leq j} (2 - \delta_{ij}) |\mathbf{A}_{ij}| \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} \\ &= \frac{1}{|\mathbf{A}|} \sum_i \sum_j |\mathbf{A}_{ij}| \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} = \sum_i \sum_j \frac{|\mathbf{A}_{ij}|}{|\mathbf{A}|} \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} = \sum_i \sum_j a^{ij} \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} \\ &= \operatorname{tr} \left[(\mathbf{A}^{-1})' \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right] = \operatorname{tr} \left[\mathbf{A}^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right], \end{aligned}$$

em que a^{ij} é o (ij) -ésimo elemento da matriz $\mathbf{A}^{-1}$.

Quando o $\operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})$ existe, seu valor é $\sum_i \sum_j x_{ij} p_{ji}$. Portanto, $\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{ij}} = p_{ji}$,

logo

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial \mathbf{X}} \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{11}} & \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{1s}} \\ \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{21}} & \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{2s}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{r1}} & \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{r2}} & \cdots & \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{P})}{\partial x_{rs}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{21} & \cdots & p_{s1} \\ p_{12} & p_{22} & \cdots & p_{s2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ p_{1r} & p_{2r} & \cdots & p_{sr} \end{bmatrix} = \mathbf{P}',$$

em que $\mathbf{X}$ e $\mathbf{P}$ têm dimensões, $r \times s$ e $s \times r$, respectivamente.