MODELOS DE POPULAÇÕES FINITAS E MÁXIMA VEROSSIMILHANÇA
RESTRITA NO PROBLEMA DE ESTIMATIVAS NEGATIVAS
PARA COMPONENTES DE VARIÂNCIA

DINARA WESTPHALEN XAVIER FERNANDEZ

Orientador: Prof. Dr. Décio Barbin

Dissertação apresentada à Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Agronomia. Área de Concentração: Estatística e Experimentação Agronômica.

P I R A C I C A B A
Estado de São Paulo - Brasil
Maio - 1991

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Livros da
Divisão de Biblioteca e Documentação - PCAP/USP

Fernandez, Dinara Westphalen Xavier

F363m Modelos de populações finitas e máxima verossimilhança restrita no problema de estimativas negativas para componentes de variância. Piracicaba, 1991, 119p. ilustr.

Diss.(Mestre) - ESALQ
Bibliografia.

1. Análise de variância - Componente 2. Estatística matemática aplicada 3. Estimativa negativa 4. Método da máxima verossimilhança restrita 5. Modelo matemático 6. População finita - Modelo matemático I, Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba

CDD 519.535

MODELOS DE POPULAÇÕES FINITAS E MAXIMA VEROSSIMILHANÇA
RESTRITA NO PROBLEMA DE ESTIMATIVAS NEGATIVAS
PARA COMPONENTES DE VARIANCIA

DONARA WESTPHALEN XAVIER FERNANDEZ

Aprovada em: 11.06.91

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Décio Barbin	ESALQ/USP
Profª Drª Maria Cristina Stolf Nogueira	ESALQ/USP
Prof. Dr. João Riboldi	IM/UFRGS

Prof. Dr. Décio Barbin

Orientador

Dedico, com carinho,

A meus pais,

Diva e Dinarte,

*pela força de enfrentar desafios
e constante estímulo.*

A meu esposo Dirney

e minha filha Dierê,

pelo encorajamento e

por iluminar todos os

momentos, provando que a

distância é nula quando

existe amor.

A G R A D E Ç O:

Ao Prof. Dr. Décio Barbin, Chefe do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ/USP, mestre e amigo, pela dedicação, permanente estímulo, e valiosa orientação.

Aos docentes do Curso de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agronômica da ESALQ/USP, pelo conhecimento e experiência transmitidos, especialmente, ao Prof. Dr. Humberto de Campos, pela receptividade.

As Professoras Dr^a Clarice Garcia Borges Demétrio e Dr^a Maria Cristina Stolf Nogueira, pelas sugestões.

Ao Prof. Dr. Antonio Francisco Iemma, pela atenção.

Ao Prof. Dr. João Riboldi, Chefe do Departamento de Estatística da UFRGS, pelo constante incentivo, eficiente colaboração e amizade.

A Direção do Instituto de Matemática da UFRGS e aos colegas do Departamento de Estatística, pela confiança depositada e, em especial, aos Professores Luiz Glock e Silvío Possoli, pelo apoio e amizade.

A CAPES, pela concessão da bolsa de estudos através do PICD.

Aos funcionários do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ/USP e do Instituto de Matemática da UFRGS, pela cooperação e manifestação de solidariedade.

Aos colegas do Curso de Pós-Graduação, pela convivência saudável, particularmente à Liciane Vaz de Arruda Silveira, Elvira Maria Alves de Freitas Barbosa e Silvio Sandoval, pela amizade e companheirismo que me ajudaram a crescer com a experiência de nossas interações, e ao João Maurício Motta, pelos ensinamentos e contribuição no desenvolvimento do módulo de MVR para o programa SOC.

A Rejane Alves, pela paciência na correção da digitação deste trabalho.

A Maria Izalina Ferreira Alves, pela excelente revisão da redação, despreendimento, e presença amiga.

A Rosa Maria Alves, pelo compartilhar espaços e multiplicar amizade, pela cooperação e apoio irrestritos.

A Diva Ferreira Alves, pelo calor humano e enriquecimento pessoal.

A todos os amigos que sabem a importância de uma palavra, um sorriso, um gesto de carinho.

A Deus por ter me dado perseverança, vontade e fé.

SUMARIO

	Página
RESUMO	iv
SUMMARY	v
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO DE LITERATURA	3
2.1. Métodos de Estimação Para Componentes de Vari- ância	4
2.1.1. Método da análise de variância	5
2.1.2. Métodos 1, 2 e 3 de Henderson	6
2.1.3. Método da máxima verossimilhança (MV) .	7
2.1.4. Método da máxima verossimilhança res- trita (MVR)	13
2.1.5. MINQUE e MIVQUE	19
2.2. Alguns Estudos Comparativos Entre os Métodos .	20
2.3. O Problema de Estimativas Negativas	23
3. MÉTODO	28
3.1. Estimação de Componentes de Variância em Mode- los Com População Finita	28
3.1.1. Introdução	28
3.1.2. Modelo Geral	30
3.1.3. Modelos Hierárquicos	34
3.1.4. Modelo de classificação cruzada	45
3.1.4.1. Classificação cruzada dupla ..	45
3.1.4.2. Classificação cruzada geral ..	48

	Página
3.1.5. Combinação de classificações hierárquica e cruzada	50
3.1.6. Modelos mistos	54
3.2. Estimação de Máxima Verossimilhança Restrita Para Componentes de Variância em Modelos Mistos	55
3.2.1. Introdução	55
3.2.2. O Modelo	57
3.2.3. Os Estimadores	65
3.2.4. Procedimento de Cálculo	74
3.2.4.1. A transformação W	75
3.2.4.2. Algoritmos	80
3.2.4.3. Estimação dos Efeitos Fixos ..	85
4. ILUSTRAÇÃO DOS MÉTODOS E DISCUSSÃO	86
4.1. Exemplo 1	86
4.2. Exemplo 2	89
4.3. Exemplo 3	93
4.4. Discussão	95
5. CONCLUSÕES	98
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	100
APÊNDICES	108

MODELOS DE POPULAÇÕES FINITAS E MÁXIMA VEROSSIMILHANÇA
RESTRITA NO PROBLEMA DE ESTIMATIVAS NEGATIVAS PARA
COMPONENTES DE VARIÂNCIA

Autora: DINARA WESTPHALEN XAVIER FERNANDEZ

Orientador: PROF. DR. DÉCIO BARBIN

RESUMO

Discutiram-se dois procedimentos com o intuito de contornar o problema de estimativas negativas para componentes de variância.

Constatou-se que o procedimento de adotar o modelo supondo Populações Finitas funciona satisfatoriamente para algumas situações. Já o procedimento da Máxima Verossimilhança Restrita exige que sejam desenvolvidos novos algoritmos que não apresentem dificuldades de cálculo.

FINITE POPULATION MODEL AND RESTRICTED MAXIMUM
LIKELIHOOD PROCEDURE ON PROBLEM OF THE NEGATIVES
ESTIMATES IN VARIANCE COMPONENTES

Author: DINARA WESTPHALEN XAVIER FERNANDEZ

Adviser: DÉCIO BARBIN

SUMMARY

Two statistical procedures were discussed in order to solve the problem of negative estimates in variance components.

When finite population model is adopted it worked out fine for some special situations. However the Restricted Maximum Likelihood Procedure showed the necessity of new algorithms developments free of calculations difficulties.

1. INTRODUÇÃO

A Análise de Variância, comumente utilizada para testar a significância de efeitos de tratamentos, é uma ferramenta que também permite estimar os componentes de variância, isto é, as variâncias associadas aos efeitos aleatórios do modelo. Esse método é conhecido como Método da Análise de Variância para estimar componentes de variância ou Método 1 de Henderson e consiste em igualar os quadrados médios observados (QMD) com seus valores esperados [ECQMD].

Os estimadores dos componentes de variância obtidos pelo Método da Análise de Variância não raramente nos conduzem a estimativas negativas. Isto pode ocorrer em qualquer modelo (misto ou aleatório) e em qualquer classificação (hierárquica ou cruzada), o que é uma situação bastante constrangedora, uma vez que os parâmetros considerados são essencialmente não negativos.

O objetivo do presente trabalho é discutir dois procedimentos que, conforme a literatura, visam remover as estimativas negativas dos componentes de variância e, assim, contribuir para a solução deste problema.

O primeiro procedimento foi sugerido por SEARLE & FAWCETT (1970) e consiste em supor o modelo em termos de populações finitas, em vez de populações infinitas.

O segundo procedimento é o da Máxima Verossimilhança Restrita.

2. REVISÃO DE LITERATURA

Ao se realizar uma Análise de Variância, além de testar a existência de diferenças entre médias de tratamentos, pode-se também estimar os componentes de variância.

Os componentes de variância são as variâncias associadas aos efeitos aleatórios de um modelo matemático.

Num experimento, quando são considerados todos os níveis de um fator (tratamento), temos um efeito fixo. Se apenas uma amostra de níveis do fator é considerada, temos um efeito aleatório.

No modelo

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

onde:

y_{ij} é a j -ésima observação do i -ésimo tratamento,

μ é a média geral,

α_i é o efeito aleatório do i -ésimo tratamento,

e_{ij} é o erro correspondente a (ij) -ésima observação com

$$E(\alpha_i) = 0 \quad \text{Var}(\alpha_i) = \sigma_\alpha^2$$

$$E(e_{ij}) = 0 \quad \text{Var}(e_{ij}) = \sigma_e^2$$

$$E(\alpha_i \alpha_k) = 0, \quad i \neq k, \quad E(\alpha_i e_{ij}) = 0, \quad E(e_{ij} e_{i'j'}) = 0,$$

$\forall i, i', j, j'$, temos

$$\text{Var}(y_{ij}) = \sigma_\alpha^2 + \sigma_e^2,$$

que são os componentes de variância.

Os componentes de variância têm grande aplicação em experimentos de melhoramento animal e vegetal para a obtenção dos índices de repetibilidade, coeficiente de herdabilidade, etc. Uma outra aplicação dos componentes de variância no campo da genética é quando estamos interessados em decompor a variância de um caráter, medida num ser vivo, em componentes de variância genética e ambiental. Dada a importância dos componentes de variância, existe crescente preocupação no sentido de melhor estimá-los, obtendo, desta forma, estimativas mais precisas.

2.1. Métodos de Estimação Para Componentes de Variância

Na literatura, encontram-se descritos vários métodos de estimação para componentes de variância. Neste capítulo, é apresentada uma revisão dos principais métodos.

CIÓL (1982) compilou os seguintes métodos de estimação de componentes de variância: momentos ou Análise de Variância; MINQUE (Minimum Norm Quadratic Unbiased Estimator), MIVQUE (Minimum Variance Quadratic Unbiased Estimator), MV (Máxima Verossimilhança) e MVR (Máxima Verossimilhança Restrita), acompanhados de algoritmos para a resolução numérica de problemas de estimação.

VALÉRIO FILHO (1983) descreveu os métodos de HENDERSON (1953) para determinação dos componentes de variância de dados não balanceados, visando facilitar suas aplicações práticas. Foram estudados o Método da Análise de Variância (Método 1 de Henderson), o Método do Ajuste para o

vício nos modelos mistos (Método 2 de Henderson) e o Método de ajustar constantes (Método 3 de Henderson).

2.1.1. Método da análise de variância

Dentre os métodos disponíveis para estimar componentes de variância, talvez o mais utilizado e estudado seja o da Análise de Variância.

Como as esperanças dos quadrados médios são funções lineares dos componentes de variância, podemos encontrar estimadores para esses componentes a partir do sistema de equações formado igualando-se os quadrados médios (QM) com seus valores esperados $[E(QM)]$.

Quando empregado em dados balanceados (modelo aleatório ou misto) e em dados não-balanceados (modelo aleatório) o método da ANOVA nos fornece estimadores não tendenciosos, de variância mínima entre uma classe de estimadores quadráticos não tendenciosos. No entanto, podem resultar estimativas negativas para os componentes de variância, ainda que, por definição, estes sejam positivos. Isto pode ocorrer em qualquer modelo (misto ou aleatório) e em qualquer classificação (hierárquica ou cruzada).

Este método, quando aplicado a dados não balanceados, é equivalente ao Método 1 de Henderson. Se os dados são não balanceados e o modelo é misto, os estimadores obtidos pelo método da ANOVA são tendenciosos (SEARLE, 1971a; 1971b).

2.1.2. Métodos 1, 2 e 3 de Henderson

HENDERSON (1953) desenvolveu três métodos que basicamente são o método dos momentos com pequenas modificações impostas pela estrutura dos dados, isto é, pelo seu não balanceamento.

O Método 1 de Henderson deve ser utilizado apenas para modelos aleatórios e é praticamente uma generalização do método usual da Análise de Variância para dados balanceados.

O Método 2 de Henderson é usado para modelos mistos desde que não existam interações e qualquer tipo de hierarquização entre efeitos fixos e aleatórios. Em síntese, este método consiste em inicialmente estimarmos os efeitos fixos do modelo; os dados são então ajustados por esses estimadores e os componentes de variância são estimados dos dados assim ajustados. Usando esse procedimento, realmente produziremos estimadores não viciados, mas em contrapartida, o procedimento não é definido de maneira única, pois envolve uma inversa generalizada.

O Método 3 de Henderson, baseado no método de ajustamento de constantes (denominação motivada pelo fato de que algumas vezes os efeitos fixos, em modelos de efeitos fixos, são chamados de constantes), é apropriado para modelos mistos e produz estimativas que são não tendenciosas, solucionando, portanto, o problema de tendenciosidade encontrado no método da ANOVA, quando o modelo é misto e os dados não

balanceados. Além disso, supre a limitação do Método 2 de Henderson para modelos que contêm interação entre efeito fixo e aleatório. Para dados balanceados, é idêntico ao Método da ANOVA, SEARLE (1968), possuindo como inconveniente o fato de não ser unicamente definido e envolver, na maioria das vezes, matrizes de grandes dimensões.

2.1.3. Método da máxima verossimilhança (MV)

Os estimadores de Máxima Verossimilhança usados, talvez pela primeira vez, por HERBACH (1959), para modelos aleatórios simples em dados balanceados, são não negativos, embora sejam truncados. Não levam em consideração a perda dos graus de liberdade devido à estimação dos efeitos fixos e, na maior parte das vezes, são não tendenciosos. Se os dados são balanceados, as soluções das equações de MV, nos modelos mistos e aleatórios, para componentes de variância, são quase as mesmas dos estimadores obtidos pelo método da ANOVA, diferindo nos divisores de certos quadrados médios, resultantes de algumas soluções serem tendenciosas (SEARLE, 1971a).

O procedimento de MV para estimação dos componentes de variância tem algumas características atraentes. Os estimadores de MV são funções de cada estatística suficiente, são consistentes, assintoticamente normais e eficientes [no sentido descrito por MILLER (1973)]. Certas deficiências de vários outros métodos não ocorrem na MV. Em

particular, o procedimento de MV é "sempre" bem definido, exatamente para muitas generalizações usuais dos modelos ordinários de ANOVA e, com MV, restrições de não negatividade de componentes de variância ou outras restrições do espaço dos parâmetros não causam dificuldades conceituais. Além disso, os estimadores de MV e a matriz de informação para uma dada parametrização do modelo podem ser prontamente obtidas delas para qualquer outra parametrização.

HAYMAN (1960) compara a estimação de MV para componentes de variância em experimentos genéticos com a análise de mínimos quadrados de MATHER (1949). O primeiro é um método iterativo e exige dois ciclos de cálculo, enquanto que o segundo só faz um ciclo. Este trabalho extra é compensado pela capacidade do primeiro método em tratar uma ampla classe de magnitude de variâncias. O segundo método superestima os erros derivados dos componentes de variância pequenos e fornece correspondentemente estimativas incorretas desses componentes. Uma situação inversa é considerada para estimativas de componentes de variância grandes. O método de NELDER (1953) fornece as mesmas estimativas dos componentes de variância que o método dos mínimos quadrados, mas suas estimativas dos erros concordam com as estimativas da MV, quando as observações são normalmente distribuídas.

HARTLEY & RAO (1967) desenvolvem um procedimento de MV para estimação de constantes desconhecidas e variâncias, incluindo o modelo geral misto de análise variância, envolvendo fatores fixos e aleatórios e interações. O

método se aplica a todos os casos onde a matriz do delineamento satisfaz certas condições de estimabilidade dos parâmetros. São discutidas a consistência e a eficiência assintótica dos estimadores e deduzidos os testes de hipótese e regiões de confiança.

KLOTZ & PUTTER (1969) definem e deduzem os estimadores de MV para o caso geral p-variado. Apresentam os métodos de cálculo e as fórmulas explícitas para o caso bi-variado.

SEARLE (1970) apresenta uma expressão geral para os elementos da matriz de informação dos estimadores de MV dos componentes de variância, deduzida para dados não balanceados de qualquer modelo misto. Esta expressão geral é utilizada para obter resultados explícitos em modelo aleatório de classificação hierárquica dupla.

Existem muitos algoritmos iterativos que podem ser utilizados para calcular os estimadores de MV. Os cálculos para cada iteração desses algoritmos estão associados com cálculos para estimação de efeitos fixos e aleatórios para valores dados dos componentes de variância.

SAHAI & THOMPSON (1973) apresentaram um método analítico simples para obter os estimadores de MV de um modelo aleatório balanceado num espaço restrito de parâmetros.

HEMMERLE & HARTLEY (1973) desenvolveram a transformação W, matriz de transformação, aplicada para o modelo misto de análise de variância para calcular estimadores de MV dos componentes de variância e parâmetros fixos.

Esta transformação não somente elimina a necessidade de explicitar o cálculo da inversa da matriz H^{-1} , $n \times n$, mas permite manipular os cálculos iterativos de modo que não dependam de n (número de observação) em nenhum passo. Embora não pertença a um método numérico particular, a transformação W é implementada com o algoritmo de Newton-Raphson modificado, no qual os componentes de variância são restritos a serem não-negativos.

MILLER (1973) desenvolveu uma teoria assintótica satisfatória para estimadores de MV para componentes de variância.

JENNRICH & SAMPSON (1976) discutem três algoritmos gerais para estimar a média e componentes de variância pelo método da MV em modelos mistos de análise de variância. Os algoritmos em discussão são o algoritmo de Newton-Raphson, o algoritmo dos escores de Fisher e o algoritmo de Hemmerle e Hartley. São dadas deduções dos dois primeiros e uma apresentação unificada para os três, fazendo algumas comparações teóricas e práticas possíveis. Para enriquecer os resultados de aplicação, os três algoritmos são apresentados numa sequência de cinco problemas. A transformação W de Hemmerle e Hartley é utilizada do começo ao fim para reduzir os trabalhosos cálculos associados com algoritmos de MV para componentes de variância. Os algoritmos fornecem um procedimento unificado para estimação e teste no modelo geral de análise de variância.

HARVILLE (1977) apresenta uma excelente revisão sobre procedimentos de MV para estimação de componentes de variância e problemas relacionados, enfatizando aspectos de cálculo. Os tópicos abordados incluem a situação corrente da teoria da MV aplicada na estimação de componentes de variância; a relação entre a estimação de MV para componentes de variância e a estimação de efeitos aleatórios e fixos nos modelos; a exploração dessa relação para propósitos de cálculo e aproximação; o uso de algoritmos numéricos para cálculo dos estimadores de MV para componentes de variância; o uso de MV como um veículo para relacionar os vários métodos que têm sido propostos para estimar componentes de variância; e uma discussão da direção para pesquisas futuras.

Todo esforço é feito para incentivar o ponto de vista de que o problema para estimação dos componentes de variância pode ser visto como um caso especial do problema do modelo linear geral, no qual os elementos da matriz de covariâncias são funções conhecidas de um vetor de parâmetros a ser estimado.

Recentes desenvolvimentos prometem incrementar grandemente a popularidade da MV como técnica para estimar componentes de variância. O interesse por estimadores de MV pode ser exaltado pela recente descoberta de OLSEN, SEELY & BIRKES (1976) de que, pelo menos para delineamentos não balanceados, existem estimadores na classe dos estimadores quadráticos não-viesados localmente melhores e de translação invariante que têm variância uniformemente menor que os es-

timadores de Henderson. Esses estimadores localmente melhores estão proximamente relacionados aos estimadores de MV (HOCKING & KUTNER, 1975).

Apesar dessas propriedades, os estimadores de MV não eram muito utilizados na prática. Existiam algumas razões para sua negligência; a mais importante delas é que, exceto para conjuntos relativamente simples, o cálculo dos estimadores de MV exigem soluções numéricas de problemas restritos de otimização não-lineares. Antes do advento dos computadores eletrônicos, essa exigência apresentava uma barreira virtualmente intransponível para uma ampla divulgação e utilização. Mesmo depois que os computadores se tornaram de uso comum, a MV não passou a ser muito utilizada para estimar componentes de variância, porque os algoritmos efetivos para cálculo não estavam prontamente disponíveis para utilização. Recentemente, vários trabalhos têm contribuído no sentido de oferecer procedimentos práticos para a estimação de componentes de variância por MV em muitas situações onde antes era impossível.

Dois outros problemas que têm impedido que os estimadores de MV para componentes de variância se tornem populares são os seguintes: (1) os estimadores de MV para componentes de variância não consideram a perda dos graus de liberdade resultantes da estimação dos efeitos fixos do modelo; (2) os estimadores de MV são deduzidos sob a suposição de uma particular forma paramétrica, geralmente Normal, para a distribuição do vetor de dados.

O primeiro desses problemas pode de fato ser eliminado por PATTERSON & THOMPSON (1971) através do procedimento de Máxima Verossimilhança Restrita (MVR). Com respeito ao segundo problema, HARVILLE (1977b) mostra que os estimadores de MV deduzidos com base na normalidade podem ser justamente adequados quando a forma da distribuição não é especificada.

SWALLOW & MONAHAN (1984), utilizando simulação por Monte Carlo, comparam os estimadores de componentes de variância obtidos pelos métodos de ANOVA, MIVQUE, MV e MVR, para um modelo aleatório de classificação simples com dados não balanceados. Os estimadores são comparados através do "viés" e erro quadrático médio. Os resultados indicam que os estimadores de ANOVA são bons, exceto para dados seriamente não balanceados, quando $\sigma_a^2/\sigma_e^2 < 0.5$, onde σ_a^2 e σ_e^2 são componentes de variância entre e dentro, respectivamente.

2.1.4. Método da máxima verossimilhança restrita (MVR)

Com a intenção de eliminar as deficiências apresentadas pelo método da MV, foram desenvolvidos os estimadores de MVR, cuja idéia básica é obter os estimadores de MV para os componentes de variância eliminando os efeitos fixos. Uma comparação muito simples dos dois métodos é a seguinte:

Dado o modelo

$$y_i = \mu + e_i, \\ i = 1, \dots, n$$

e

$$\text{Var}(e) = I \sigma_e^2,$$

o estimador de MV para σ_e^2 é

$$\sum_i (y_i - \bar{y}.)^2 / n$$

e de MVR é

$$\sum (y_i - \bar{y}.)^2 / n-1$$

com esperanças $(n-1)\sigma_e^2/n$ e σ_e^2 , respectivamente.

Historicamente, a estimação de componentes de variância e covariância por MVR iniciou sendo desenvolvida por muitos pesquisadores para específicos modelos de ANOVA balanceados, incluindo ANDERSON & BANCROFT (1952) e RUSSEL & BRADLEY (1958) e foi estendida para todo modelo balanceado de ANOVA por THOMPSON (1962). Mais tarde foi colocado em sua forma geral para modelos não balanceados por PATTERSON & THOMPSON (1971). Uma extensão para modelos multivariados para casos especiais de matriz de delineamento igual para todos os tratamentos e todos os tratamentos medidos em todos os indivíduos foi feita por THOMPSON (1973). Esta restrição foi removida por SCHAEFFER *et alii* (1978) para o caso de covariância residual nula entre tratamentos, como seria a situação para medidas de diferentes tratamentos em diferentes animais.

PATTERSON & THOMPSON (1971) dividiram a função de verossimilhança, sob condição de normalidade, em duas

partes, de modo que a maximização da parte livre dos efeitos fixos fornecesse os estimadores de MV para os componentes de variância e a outra fornecesse os estimadores para os efeitos fixos.

Um desenvolvimento para dados não balanceados considerando dados balanceados como caso especial, é dado por CORBEIL & SEARLE (1976b). Para dados balanceados, os estimadores de MVR são idênticos aos estimadores de ANOVA, mas se os dados são não balanceados, estes não são os mesmos, conforme CORBEIL & SEARLE (1976a, 1976b).

GIANOLA & FERNANDO (1986) salientam que tanto os estimadores de MV como os de MVR não são afetados pela seleção dos dados. HENDERSON (1986) acrescenta que esses estimadores são capazes de produzir variâncias amostrais e erros quadráticos médios menores que outros métodos que fornecem estimadores não tendenciosos. Estas últimas propriedades também são apresentadas pelos estimadores de MIVQUE.

Embora apresente ainda outras propriedades altamente desejáveis, tais como produzir estimadores únicos que não dependem dos primeiros utilizados, logo que surgiu, o método da MVR era pouco utilizado na prática, devido a suas exigências de cálculo. Mais recentemente, vários algoritmos têm sido desenvolvidos e podem ser vistos como candidatos para calcular estimadores de MV ou de MVR.

HARVILLE (1977) revisou o desenvolvimento e muitos dos problemas associados com MV e MVR. Ele apresenta um algoritmo que consiste na iteração das equações de MIVQUE

até sua convergência, desde que a convergência ocorra dentro do espaço dos parâmetros.

MEYER (1983) apresentou um algoritmo para estimação simultânea dos componentes de variância e covariância, baseado no Método dos escores de FISHER (MSC). Este procedimento adapta a covariância ambiental entre tratamentos e também permite que diferentes números de tratamentos sejam medidos em diferentes indivíduos.

HENDERSON (1984a, 1984b e 1986) tem defendido um algoritmo de maximização da esperança (EM) pela sua comparativa simplicidade de cálculo (por iteração), e por sua propriedade de forçar estimativas que caiam dentro do espaço de parâmetros permitido. Utilizando pequenos exemplos, HENDERSON (1984a) ilustra algoritmos de MVR para uma variedade de situações, incluindo modelos com efeitos genéticos aditivos e dominantes, efeitos diretos e maternos, e um modelo de classificação tríplice.

MEYER (1985) desenvolveu a MVR de forma análoga ao algoritmo de ANDERSON (1973). O procedimento envolve uma transformação numa escala canônica reduzindo uma análise a q-variáveis para q correspondentes análises univariadas. A convergência foi rápida, mas não existe garantia de que as estimativas da matriz de variâncias e covariâncias irão cair no espaço dos parâmetros. O autor aponta que na análise de tratamentos altamente correlacionados existe uma grande chance que, devido a amostragem, a estimativa para os pais (em experimentos genéticos) da matriz de variâncias e co-

variâncias seja definida não-positiva. A probabilidade de que isso ocorra cresce com o número de variáveis (HILL & THOMPSON, 1978).

Um algoritmo foi desenvolvido por MEYER (1986) para acelerar a razão de convergência quando comparada com EM, bem como decrescer o tempo por iteração, quando comparado com MSC. Este algoritmo foi denominado Shor Cut (SHC) e combina aspectos do algoritmo EM para estimar os "componentes de efeitos aleatórios dentro" com o MSC para estimar os "componentes de efeitos aleatórios entre". O procedimento pode ser utilizado para estimar componentes de variância e covariância num modelo misto multivariado, quando registros são perdidos para alguns tratamentos. Uma desvantagem do SHC é que não há garantia de que as estimativas caiam dentro do espaço dos parâmetros, embora o autor considerasse o processo razoavelmente robusto diante de estimativas fora do espaço dos parâmetros.

Muitos algoritmos têm sido utilizados para obter estimativas de MVR para os componentes de variância. Exceto para delineamentos balanceados, a iteração é exigida para solucionar a maximização das equações, então, dependendo da matriz de incidência, dos valores básicos dos parâmetros e do algoritmo utilizado, a convergência pode ou não estar no espaço dos parâmetros (HENDERSON (1986)).

Enquanto esses algoritmos foram testados para tratamentos simples (HARVILLE, 1977b; DEMPSTER *et alii*, 1977) e para tratamentos múltiplos com igual informação em

todos os tratamentos [THOMPSON (1973), SCHAEFFER *et alii* (1978), MEYER (1983)], temos poucos elementos para considerar o procedimento desses algoritmos para tratamentos com informações perdidas. Raramente foram testados mais do que dois tratamentos, isto é, MEYER (1986) só apresentou resultados para dois tratamentos.

VALENTE (1988) utilizou a MVR para estimar componentes de variância e covariância em tratamentos múltiplos com informações perdidas para alguns tratamentos.

HENDERSON (1986) apresentou um algoritmo EM para múltiplos tratamentos e afirmou que ele garante que estimativas de variâncias serão positivas definidas e matrizes de covariâncias serão definidas positivas. Para isso ser verdadeiro, os valores iniciais devem definir matrizes de variâncias-covariâncias definida positiva e assim permanecer depois de cada iteração. SCHAEFFER *et alii* (1986) encontraram este princípio quando aplicaram transformação canônica para conduzir a análise de múltiplos tratamentos.

Alguns autores propuseram o uso de restrições para garantir que todas as estimativas caiam dentro do espaço dos parâmetros. Como apontou HARVILLE (1977): "O algoritmo iterativo de Henderson para calcular estimadores de MV para componentes de variância e seus análogos MVR não são afetados pelas restrições no espaço dos parâmetros, com isso, componentes negativos simplesmente nunca são encontrados. Infelizmente, nenhum dos algoritmos modificados discutidos tem esta propriedade." Visto que MSC e reparametriza-

ções tais como SHC são algoritmos modificados, não garantem estimativas dentro do espaço dos parâmetros. Portanto, precisamos ter o cuidado de fazer ajustes em suas estimativas. A seguir, de HARVILLE (1977): "Quando uma iteração foi obtida com valores negativos ou próximos de negativo para um ou mais elementos, fazem-se estes elementos iguais a zero e com efeito restringem-na a serem zero nas subsequentes iterações. Esta aproximação para o problema não é satisfatória porque pode causar a convergência para um ponto que não é sempre um máximo global restrito."

2.1.5. MINQUE e MIVQUE

Os estimadores MINQUE (Minimum Norm Quadratic Unbiased Estimator) são os estimadores quadráticos não tendenciosos de mínima norma e os estimadores MIVQUE (Minimum Variance Quadratic Unbiased Estimator) são os estimadores quadráticos não tendenciosos de mínima variância.

Estes métodos de estimação desenvolvidos por RAO (1970, 1971a, 1971b, 1972) satisfazem a algumas propriedades, tais como: invariância quanto à translação de efeitos fixos, não tendenciosidade, mínima norma da diferença entre um estimador e seu verdadeiro valor, e mínima variância do estimador, sendo estas duas últimas propriedades que os tornam distintos.

Tanto o MINQUE como o MIVQUE também podem produzir estimativas negativas para os componentes de variância

e, em certas situações são equivalentes, de acordo com RAO (1970) e com HARVILLE (1977), quando aplicados a dados normalmente distribuídos, uma vez que estes têm coeficiente de curtose zero. HARVILLE (1977), ainda argumenta que o método MINQUE, considerando-se certos aspectos, é idêntico aos estimadores de MVR.

2.2. Alguns Estudos Comparativos Entre os Métodos

Para comparar os vários estimadores de componentes de variância tem sido utilizado o erro quadrático médio (EQMD) como principal medida de eficácia.

KLOTZ *et alii* (1969) estudaram o erro quadrático médio de vários estimadores no modelo inteiramente ao acaso, balanceado.

LOW (1969), utilizando o modelo de blocos incompletos balanceados, estudou o problema da falta de segurança para os estimadores não tendenciosos de variância mínima obtidos pelos métodos usuais, quando a distribuição não é completa e mostrou que as estatísticas suficientes são alcançadas através de tabelas de análise de variância comuns. Também apresentou a transformação de três estatísticas suficientes para estimadores não tendenciosos de quatro parâmetros e mais dois estimadores não tendenciosos para zero, e construiu outros estimadores, obtendo e comparando variâncias e estudando a admissibilidade e inadmissibilidade dos estimadores.

BASSON (1970) descreveu um método para obtenção de variâncias das estimativas dos Métodos 1, 2 e 3 de Henderson num modelo em blocos incompletos balanceados com efeitos aleatórios, admitindo normalidade, e concluiu que nenhum desses métodos é uniformemente melhor que os outros, devendo cada um ser escolhido em função da relação existente entre as variâncias.

HOCKING & KUTNER (1975), estabeleceram comparações numéricas entre os seguintes métodos de estimação para componentes de variância: MV, MVR, MINQUE e Método 1 de Henderson, no modelo de blocos incompletos balanceados, aleatório. Concluíram que os estimadores de MV apesar de sua tendenciosidade bastante evidente, possuem menores variâncias e erro quadrático médio, e que se a tendenciosidade não for de importância fundamental, esse procedimento é melhor do que os outros.

CORBEIL & SEARLE (1976a) apresentaram comparações entre os estimadores de MV e MVR para quatro modelos balanceados (inteiramente ao acaso, aleatório; classificação hierárquica, aleatório; classificação cruzada sem interação, misto; classificação cruzada com interação, misto) e entre os estimadores de MVR, Métodos 2 e 3 de Henderson e um método iterativo, no modelo misto de classificação cruzada sem interação com dados não balanceados. Utilizando como critério de comparação o erro quadrático médio, os resultados mostraram ser mais eficientes para os estimadores de MV, tanto para dados balanceados como não balanceados. Quando a

razão $\sigma^2_{\beta}/\sigma^2$ ou o número de repetições era muito pequeno, em dados balanceados, os estimadores de MVR mostraram-se mais eficientes.

SERAPHIN (1984) compara numericamente três estimadores para componentes de variância em dois modelos lineares genético estatísticos de cruzamento, para dados balanceados e não balanceados, utilizando como medida de eficiência de cada estimador, o erro quadrático médio, além do tempo gasto em Unidade Central de Processamento (CPU) e outras características, tais como: estimativas médias para cada componente de variância, valor mínimo e máximo encontrado, número de estimativas negativas e experimentos cujo processo de estimação não convergiu. Os estimadores estudados foram: ajuste de constantes ou Método 3 de Henderson, estimadores de MV e MIVQUE; considerados para o Modelo I (classificação hierárquica, aleatório) e Modelo II (fatorial, misto, com interação). O autor concluiu que, uniformemente, nenhum dos métodos, ajuste de constantes e MIVQUE, é melhor do que o outro para os modelos estudados, embora o método MIVQUE tenha apresentado maior rapidez e eficiência como estimador. Já o método da MV, baseado somente nos dados de eficiência, apresentou resultado melhor apenas no Modelo II, podendo, portanto, ser empregado para esse modelo, desde que não se considere de fundamental importância a tendenciosidade e os problemas de convergência e tempo.

GONÇALVES (1984), utilizando simulação, compara quatro métodos de estimação para componentes de variân-

cia: Método 3 de Henderson, MV, MVR e MIVQUE ϕ (que é o MIVQUE com valores a priori $\sigma_G^2 = 0$ e $\sigma_e^2 = 1$, onde σ_G^2 é a variância genética e σ_e^2 é a variância do erro), no caso particular de blocos aumentados em que os tratamentos comuns a todos os blocos são de efeitos fixos e os restantes aleatórios. O desempenho dos estimadores é avaliado através de sua tendenciosidade, coeficiente de variação e erro quadrático da análise realizada, a autora concluiu, para o caso onde $\sigma_G^2/\sigma_e^2 \geq 1$, que o desempenho dos estimadores depende do tamanho do experimento: para experimentos grandes, o método da MV foi superior aos outros; para experimentos de tamanho médio, o MIVQUE ϕ e o MV tiveram desempenho similar; para experimentos pequenos, todos os métodos, exceto o Método 3 de Henderson, tiveram o mesmo desempenho. Para o caso onde $\sigma_G^2/\sigma_e^2 < 1$, o Método 3 de Henderson e MV tiveram desempenho melhor que o método MIVQUE ϕ , para todos os tamanhos de experimentos considerados.

2.3. O Problema de Estimativas Negativas

Um fato desagradável que acompanha a estimação de componentes de variância é o de encontrarmos, em certas ocasiões, estimativas negativas desses componentes. Este problema tem merecido tratamento especial por parte dos estatísticos e vem se mostrando responsável, recentemente, por inúmeras contribuições na área de componentes de variância.

A título de ilustração, considerem-se os seguintes dados apresentados por McHUGH & MIELKE (1968):

I \ J	1	2	3	Σ
1	1059	1237	949	3245
2	1245	1341	1332	3918
3	1283	1078	1129	3490
4	1101	988	1262	3351
Σ	4688	4644	4672	14004

que, analisados através do modelo:

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

para

$$i = 1, 2, 3, 4 \quad j = 1, 2, 3$$

resultou no quadro de análise de variância a seguir:

ANÁLISE DE VARIÂNCIA				
C. V.	G. L.	SQ	QM	ECQMD
Trat.	2	248	124	$\sigma_e^2 + 4\sigma_\alpha^2$
Res.	9	195668	21740,89	σ_e^2
Total	11	195916		

A estimativa dos componentes de variância pelo método da ANOVA é

$$\hat{\sigma}_e^2 = QME = 21740,89$$

$$QMA = \hat{\sigma}_e^2 + 4\hat{\sigma}_\alpha^2 \Rightarrow \hat{\sigma}_\alpha^2 = \frac{QMA - QME}{4} = -5404,22$$

Ou seja, o método de estimação escolhido forneceu uma estimativa negativa para σ_{α}^2 .

SEARLE (1971a) enumera alguns procedimentos alternativos para contornar o problema de estimativas negativas para componentes de variância:

i) Aceitar a estimativa negativa, admitindo que o verdadeiro valor do componente é zero (0). Embora possa parecer lógico, isto afeta as propriedades dos estimadores, tendo em vista que a estimação foi truncada.

ii) Eliminar o parâmetro correspondente no modelo e reestruturar a análise de variância, obtendo uma ponderação dos quadrados médios restantes e, com isso, obter novas estimativas dos componentes de variância restantes.

iii) Considerar a obtenção de estimativas negativas como uma indicação da utilização de um modelo errôneo.

Na tentativa de contornar este problema, HERBACH (1959) usa estimadores de MV que são não negativos, mas apresentam a desvantagem de serem truncados e viciados.

THOMPSON (1962) desenvolveu um algoritmo que resulta da maximização da função de verossimilhança dos quadrados médios, sujeita a um conjunto de restrições, que recebe a denominação de Princípio da Máxima Verossimilhança Restrita. Esse procedimento também provoca um truncamento e o estimador resultante é viciado.

RAO (1972) estendeu o método MINQUE para estimação de componentes de variância e de covariância. As estimativas obtidas, após uma modificação introduzida pelo autor, são não negativas.

LAMOTTE (1973) desenvolveu, dentro da classe dos estimadores quadráticos não viciados, as condições para obtermos estimativas não negativas de combinações lineares dos componentes de variância. Complementando essa idéia, BEZERRA (1976) discutiu as condições de estimabilidade não negativa dos estimadores quadráticos não viciados para componentes de variância e mostrou que, se conhecermos a relação entre σ_{α}^2 e σ_e^2 num modelo aleatório simples com dados balanceados, podemos calcular a probabilidade de obtermos uma estimativa negativa para o componente σ_{α}^2 .

PEREIRA (1983) apresentou novas estimativas dos componentes de variância através do método dos momentos, quando determinamos uma estimativa negativa dos componentes de variância em modelos aleatórios, mistos e fixos de classificação hierárquica, bem como a expressão da estimativa da correlação negativa entre as variáveis, já que a presença de correlação negativa entre os elementos de uma mesma parcela (correlação intra-classe) pode ocasionar estimativas negativas de componentes de variância.

No aspecto da reconsideração do modelo, SEARLE & FAWCETT (1970) discutem o procedimento de adotar o modelo em termos de populações finitas, em vez de populações infinitas, o que nos leva a encontrar estimativas não negativas

onde, anteriormente, sob a suposição de populações infinitas, eram negativas.

Em todos esses trabalhos até aqui citados, a estimação de componentes de variância foi vista sob a luz dos métodos que produzem estimativas negativas e apresentados vários procedimentos que tentam contornar a situação.

Uma outra abordagem para o problema de estimativas negativas, considerada mais fundamentada, é sugerir métodos alternativos de estimação que não produzam estimativas negativas para os componentes de variância. Neste sentido, podemos estudar a estimação dos componentes de variância dentro do aspecto bayesiano e através do método da MVR.

Com HILL (1965) e TIAO & TAN (1965) surgiram os primeiros trabalhos utilizando a inferência bayesiana para obtenção de componentes de variância, num modelo aleatório em dados balanceados e não balanceados. Também BEZERRA (1976) estudou o problema da estimação dos componentes de variância dentro do contexto bayesiano, tendo por base o modelo aleatório em classificação simples balanceado. A grande vantagem prática do uso dos métodos bayesianos é que as estimativas dos componentes de variância são sempre não negativas.

PATTERSON & THOMPSON (1971) desenvolveram o método da Máxima Verossimilhança Restrita que tem sido aceito, segundo MEYER (1986), como o método preferido para estimar parâmetros genéticos, isto é, componentes de variância e covariância para experimentos de melhoramento animal.

3. METODO

3.1. Estimação de Componentes de Variância em Modelos com População Finita

3.1.1. Introdução

Em modelos de componentes de variância, os efeitos aleatórios são usualmente assumidos como provenientes de uma população infinita. Populações finitas têm também sido consideradas: BENNETT & FRANKLIN (1954), CORNFIELD & TUKEY (1956) e WILK & KEMPTHORNE (1956), discutem vários casos para dados balanceados. Entretanto, para dados não balanceados, a não ser o tratamento dado por Tukey para classificação simples, a única discussão sobre modelos de população finita surgiu com GAYLOR & HARTWELL (1969), que apresentaram com detalhes somente a classificação hierárquica tríplice.

SEARLE & FAWCET (1970) sugerem o procedimento de adotar o modelo em termos de populações finitas, em lugar de populações infinitas, a fim de encontrar estimativas não negativas para os componentes de variância, onde, sob a suposição de populações infinitas, resultavam em estimativas negativas.

A razão da utilização do modelo para população finita origina-se na seguinte situação envolvida no delineamento:

Quando se trabalha com uma classificação hierárquica com dois fatores A e B, o modelo é dado por:

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

onde:

y_{ijk} é a observação da variável aleatória ($i = 1, \dots, n_a$ classes com $j = 1, \dots, n_b$ observações por classe);

μ é a média populacional;

α_i é o efeito (aleatório) do fator A;

β_{ij} é o efeito (aleatório) do fator B dentro de A;

e_{ijk} é o erro associado à observação y_{ijk} , e supondo que:

α_i tem média zero, variância σ_a^2 e são independentes;

β_{ij} tem média zero, variância σ_b^2 e são independentes;

α_i e β_{ij} são mutuamente independentes;

trata-se de um "modelo infinito".

Neste modelo, tem-se dois estágios de amostragem envolvidos: o primeiro, correspondente ao fator A, onde uma amostra aleatória de tamanho n_a ($i = 1, \dots, n_a$) é considerada; o segundo, correspondente ao fator B, onde uma amostra aleatória de tamanho n_b ($j = 1, \dots, n_b$) é associada a cada i .

É claro que a independência estatística entre as variáveis aleatórias está baseada numa suposição de população infinita. Entretanto, se de fato, a amostragem

está sendo realizada sob um universo existente, então a população é necessariamente finita. Como, na prática, a amostragem é sem reposição, surge uma dependência estatística de α_i e β_{ij} .

McHUGH & MIELKE (1968) mostra que a estimativa de um componente de variância negativo ocorre em situações em que a suposição de independência estatística entre as variáveis é falsa, ou seja, não podemos considerar que as populações são infinitas.

SEARLE & FAWCETT (1970) apresentam uma regra para converter as esperanças dos quadrados médios na análise de variância dos modelos infinitos, em esperanças para modelos finitos, que se aplica a dados balanceados e não balanceados, em classificação hierárquica e cruzada, bem como na mistura delas. Desde que as esperanças dos quadrados médios sob populações infinitas encontram-se disponíveis na literatura, a regra aqui desenvolvida permite a substituição de modelos de população infinita para finita.

3.1.2. Modelo Geral

Considere-se um modelo com os fatores A, B, ..., K, representando N_θ o tamanho da população do θ -ésimo fator. Os efeitos são e_i , para $i = 1, \dots, N_\theta$, com θ tomando os valores A, B, ..., K. Como é costume (GAYLOR & HARTWELL, 1969), assume-se que a média de cada população é zero (0), assim:

$$\sum_{i=1}^{N_e} e_i = 0 \quad \text{e} \quad \sigma_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N_e} e_i^2}{N_e - 1} \quad [11]$$

é definida como variância populacional.

Consequentemente,

$$\left(\sum_{i=1}^{N_e} e_i \right)^2 = \sum_{i=1}^{N_e} e_i^2 + \sum_i \sum_{i'} e_i e_{i'} = 0, \quad i \neq i',$$

isto é,

$$\sum_i \sum_{i'} e_i e_{i'} = - \sum_{i=1}^{N_e} e_i^2$$

$$\sum_i \sum_{i'} e_i e_{i'} = - (N_e - 1) \sigma_e^2, \quad i \neq i' \quad [12]$$

Ao se obterem dados amostrais, admite-se que os efeitos das populações finitas (e erros) do modelo são obtidos aleatoriamente e sem reposição. Desta forma, a suposição de independência estatística entre os efeitos e_i e $e_{i'}$, $i \neq i'$, fica prejudicada.

Se e_r é um valor amostral do efeito e , então, por [11]:

$$\text{Média}(e_r) = E(e_r) = \frac{\sum_{i=1}^{N_e} e_i}{N_e} = 0$$

e

$$\text{Var}(\theta_r) = E(\theta_r^2) = \frac{\sum_{i=1}^{N_\theta} \theta_i^2}{N_\theta} = \frac{1}{N_\theta} (N_\theta - 1) \sigma_\theta^2 = \left(1 - \frac{1}{N_\theta}\right) \sigma_\theta^2$$

$$\therefore \text{Var}(\theta_r) = (1 - N_\theta^{-1}) \sigma_\theta^2 \quad [13]$$

e, para dois valores amostrais, θ_r e θ_s :

$$\begin{aligned} \text{COV}(\theta_r, \theta_s) &= E(\theta_r \theta_s) = \frac{1}{N_\theta(N_\theta - 1)} \sum_i^{N_\theta} \sum_{i'}^{N_\theta} \theta_i \theta_{i'}, \quad i \neq i' \\ &= \frac{1}{N_\theta(N_\theta - 1)} - (N_\theta - 1) \sigma_\theta^2 \\ \therefore \text{COV}(\theta_r, \theta_s) &= - \frac{\sigma_\theta^2}{N_\theta} \end{aligned} \quad [14]$$

Desde que os valores correspondentes a [13] e a [14] para populações infinitas são σ_θ^2 e 0, respectivamente, as esperanças dos quadrados médios em modelos de população finita não são as mesmas que as de população infinita.

Em cada caso, os valores esperados são funções lineares dos componentes de variância, cujos coeficientes dos componentes são determinados para modelos de populações finitas, de acordo com [13] e [14].

Suponha que y representa o vetor de observações, com vetor de médias μ e matriz de covariâncias V . Então, qualquer soma de quadrados é uma forma quadrática em y , ou seja, $y'Qy$, e seu valor esperado é

$$E(y'Qy) = \text{tr}(QV) + \mu'Q\mu \quad [15]$$

Assim, os quadrados médios da análise de variância com dados balanceados e seus análogos para dados desbalanceados são formas quadráticas das observações. Além disso, a soma das linhas de Q é zero, isto é, $Q1 = 0$, onde 1 é o vetor de uns; em modelos aleatórios, $\mu = \mu \cdot 1$ e, também, em [5] $\mu' Q \mu = \mu' Q 1 \mu = 0$. Portanto, considerando somente a expressão original, denotando por M , [5] pode ser escrita como:

$$E(M) = E(y' Q y) = \text{tr}(Q V).$$

Este resultado independe se o modelo é de população finita ou infinita. Aplica-se a ambos e podemos escrever

$$E_{\infty}(MD) = \text{tr}(Q V_{\infty}) \quad \text{e} \quad E_F(MD) = \text{tr}(Q V_F) \quad [6]$$

para modelos de população infinita e finita, respectivamente. Como Q é a mesma em ambos os casos, a única diferença entre as duas esperanças dos quadrados médios é o uso de V_F em lugar de V_{∞} . A natureza exata dessa diferença pode ser verificada ao olhar o modo como V_{∞} será alterado para V_F quando se trocar população infinita para finita. A alteração depende dos resultados [3] e [4]. Quaisquer que sejam eles, é indiferente para [6] se Q é proveniente de dados balanceados ou desbalanceados. Em cada caso, [6] permanece, e assim a troca a ser feita para derivar V_F de V_{∞} produzirá $E_F(MD)$ de $E_{\infty}(MD)$, tanto para dados balanceados como desbalanceados. A discussão e os resultados a seguir, portanto, aplicam-se igualmente para ambos os tipos de dados.

3.1.3. Modelos Hierárquicos

É oportuno, no desenvolvimento do resultado geral, considerar três casos separadamente: modelos hierárquicos (consistindo unicamente de classificação hierárquica); modelos de classificação cruzada (sem classificação hierárquica); e modelos envolvendo combinações de classificação hierárquica e cruzada.

Para se discutir modelos hierárquicos, considera-se inicialmente um modelo hierárquico duplo com os fatores A e B dentro de A:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_{j(i)} + e_{ijk}.$$

A obtenção de V_F a partir de V_ω leva em consideração o efeito de [3] e [4] nos vários elementos de V_ω .

Os elementos diagonais de V_ω são:

$$VC(y_{ijk}) = \sigma_A^2 + \sigma_B^2 + \sigma_e^2 \quad [7]$$

e por [3] passam a ser elementos diagonais em V_F :

$$(1 - N_A^{-1}) \sigma_A^2 + (1 - N_B^{-1}) \sigma_B^2 + (1 - N_e^{-1}) \sigma_e^2 \quad [8]$$

onde N_e é o tamanho da população de erros.

São também elementos de V_ω :

$$COV(y_{ijk}, y_{ijk'}) = \sigma_A^2 + \sigma_B^2, \quad [9]$$

que é a covariância entre observações que estão na mesma sub-casela dos dados, mas têm diferentes termos de erro. No caso de população finita, esses erros terão covariância $-(\sigma_e^2/N_e)$, de acordo com [4]. Então, na correspondência de [9] para um modelo de população finita, as σ_s^2 podem ser

trocadas exatamente como foi feito em [7] e [8], mas surgirá ainda o termo $-(\sigma_e^2/N_e)$. Portanto, [9] ficará em V_F :

$$(1 - N_A^{-1}) \sigma_A^2 + (1 - N_B^{-1}) \sigma_B^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} \quad [110]$$

Similarmente, em V_∞ , a

$$\text{COV}(y_{ijk}, y_{ijk'}) = \sigma_A^2 \quad [111]$$

é a covariância entre observações que estão no mesmo nível de A, mas em diferentes níveis de B. Portanto, no caso de populações finitas, essas covariâncias envolvem $-(\sigma_B^2/N_B)$, como em [4]. Logo, em V_F [11] fica:

$$(1 - N_A^{-1}) \sigma_A^2 - N_B^{-1} \sigma_B^2 \quad [112]$$

Também, pela mesma razão, os elementos de V_∞ que são zero, isto é,

$$\text{COV}(y_{ijk}, y_{i'jk'}) = 0 \quad i \neq i' \quad [113]$$

tornam-se, em V_F :

$$-N_A^{-1} \sigma_A^2 \quad [114]$$

Em [8], [110], [112] e [114], pode-se ver que V_F tem $-N_A^{-1} \sigma_A^2$ em cada elemento. Portanto, V_F pode ser expressa por

$$V_F = (-N_A^{-1} \sigma_A^2) 11' + V_F^* \quad [115]$$

Como já foi discutido, $Q1 = 0$; então,

$$QV_F = QV_F^*.$$

Assim, [16] torna-se

$$E_F(M) = \text{tr}(QV_F^*) \quad [116]$$

Por [115], V_F^* é obtida adicionando-se $N_A^{-1} \sigma_A^2$ a cada elemento de V_F . Portanto, os elementos de V_F^* são:

$$\text{COV}(y_{ijk}, y_{ijk'}) = \begin{cases} \left(\sigma_A^2 - \frac{\sigma_B^2}{N_B} \right) + \left(\sigma_B^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} \right) + \sigma_e^2, & [17] \\ i=i', j=j', k=k' \\ \left(\sigma_A^2 - \frac{\sigma_B^2}{N_B} \right) + \left(\sigma_B^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} \right), & [18] \\ i=i', j=j' \\ \left(\sigma_A^2 - \frac{\sigma_B^2}{N_B} \right), & i=i' \quad [19] \\ \text{zero}, & i \neq i' \quad [20] \end{cases}$$

Os elementos correspondentes para V_∞ são dados em [7], [9], [11] e [13]. Comparando os dois conjuntos de elementos, observa-se que V_F^* pode ser obtida de V_∞ se

$$\begin{bmatrix} \sigma_A^2 \\ \sigma_B^2 \\ \sigma_e^2 \end{bmatrix} \text{ de } V_\infty \text{ for substituído por } \begin{bmatrix} \sigma_A^2 - \frac{\sigma_B^2}{N_B} \\ \sigma_B^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} \\ \sigma_e^2 \end{bmatrix} \quad [21]$$

Portanto, como $E_\infty(MD) = \text{tr}(QV_\infty)$ e $E_F(MD) = \text{tr}(QV_F^*)$ como em [6] e [16], respectivamente, substituindo-se [21] em $E_\infty(MD)$ obtém-se $E_F(MD)$; isto é, colocando a substituição de [21] nas esperanças dos quadrados médios num modelo de popu-

lação infinita, produziremos as correspondentes esperanças dos quadrados médios de um modelo de população finita.

Essa discussão, em termos de classificação hierárquica dupla, se estende a qualquer modelo hierárquico. Em geral, cada elemento diagonal de V_{ω} é a soma de todos os componentes de variância do modelo

$$\sum_{\theta=A}^K \sigma_{\theta}^2$$

e, por [3] torna-se

$$\sum_{\theta=A}^K (1 - N_{\theta}^{-1}) \sigma_{\theta}^2$$

em V_F ; [7] e [8] ilustram isso. Similarmente, em cada elemento diferente de zero da diagonal de V_{ω} , está a soma de certas σ_{θ}^2 's do modelo, que por [3] torna-se $(1 - N_{\theta}^{-1}) \sigma_{\theta}^2$ em V_F . Também os elementos que em V_{ω} têm covariância zero, por [4] são diferentes de zero em V_F sob a forma $-(\sigma_{\gamma}^2 / N_{\gamma})$, chamada de covariância entre os dois níveis do fator hierarquizado dentro de cada sub-fator, cujas variâncias são os elementos de V_{ω} . Exemplos disso são vistos nas equações [10] e [12]. Finalmente, os elementos zero de V_{ω} são covariâncias entre observações de diferentes níveis do fator A e assim, em V_F , devido a dependência, essas covariâncias são $-(\sigma_A^2 / N_A)$, como exemplificado em [13] e [14]. É claro que observações em diferentes níveis do fator A estão também em diferentes níveis de todos os outros fatores, mas desde que as populações são definidas somente dentro de fatores dentro dos quais são hierárquicos (e em particular dentro de A), somente $-(\sigma_A^2 / N_A)$ entra nessa covariância. Esta também é a

razão pela qual o termo $-(\sigma_{\gamma}^2/N_{\gamma})$ surge em cada um dos outros elementos de V_F .

A substituição indicada em [21] para classificação dupla hierárquica estende-se prontamente a cada classificação hierárquica de ordem k . Além disso, como visto, na substituição de

$$\sigma_A^2 \text{ por } \sigma_A^2 - \frac{\sigma_B^2}{N_B}$$

em [21], B é o fator hierárquico dentro de A . Similarmente, na substituição de

$$\sigma_B^2 \text{ por } \sigma_B^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e},$$

onde σ_e^2 é a variância do erro, o termo erro pode ser pensado como um "fator" hierárquico dentro de B , a sub-classificação máxima do modelo. Desta maneira, a troca [21] pode ser generalizada.

Seja $\gamma:e$ denotando o fator γ imediatamente hierárquico dentro de e , e seja N_{γ} o tamanho da população γ dentro de cada nível do fator e (para cada nível, o mesmo tamanho populacional). Por exemplo: numa classificação hierárquica dupla, onde B é hierárquico dentro de A e o "fator" erro é hierárquico dentro de B ; o fator hierárquico imediatamente dentro de A é B (isto é, para $\gamma:A$, o fator γ é B e não o fator erro). Então temos a seguinte regra.

Regra: As esperanças dos quadrados médios em modelos de classificação hierárquica são obtidas a partir dos valores das populações infinitas pela substituição de σ_e^2 por

$$\sigma_e^2 = \frac{\sigma_\gamma^2}{N_\gamma} \quad [22]$$

onde σ_γ^2 é o componente de variância do fator γ : θ (γ imediatamente hierárquico dentro de θ).

Três exemplos da Regra [22] estão mostrados na

Tabela 1.

Tabela 1 - Classificação hierárquica: substituições necessárias para obtenção das esperanças dos quadrados médios em modelos com populações finitas, a partir de populações infinitas.

SIMPLES A	DUPLA B dentro de A	TRÍPLICE B dentro de A, C dentro de B
σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e}$	σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \frac{\sigma_B^2}{N_B}$	σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \frac{\sigma_B^2}{N_B}$
	σ_B^2 por $\sigma_B^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e}$	σ_B^2 por $\sigma_B^2 - \frac{\sigma_C^2}{N_C}$
		σ_C^2 por $\sigma_C^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e}$

Para ilustrar seu uso, apresenta-se, na Tabela 2, o quadro da análise de variância usual de uma classificação simples para modelos de população infinita, e os seus correspondentes resultados para população finita.

Tabela 2 - Análise de variância.

$$\text{Modelo: } y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij}, \quad i = 1, \dots, a; \\ j = 1, \dots, n.$$

C. V.	G. L.	QM	EC QM	
			POPULAÇÃO INFINITA	POPULAÇÃO FINITA
A	a-1	QMA	$\sigma_e^2 + n\sigma_A^2$	$\sigma_e^2 + n \left[\sigma_A^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} \right]$
Erro	n-a	QME	σ_e^2	σ_e^2

Este caso de classificação simples nos transporta à discussão para modelos de população finita como alternativa de modelos de população infinita enfocada por McHUGH & MILKE (1968).

No caso de população infinita, o estimador não viesado usual para componentes de variância entre classes é o familiar

$$\hat{\sigma}_{A;\infty}^2 = (QMA - QME)/n \quad [23]$$

onde QMA e QME são os quadrados médios entre e dentro das classes, respectivamente, com n observações em cada classe. Para populações finitas, esses quadrados médios têm esperanças

$$E_F(QMA) = n \left[\sigma_A^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} \right] + \sigma_e^2 \quad e \quad E_F(QME) = \sigma_e^2 \quad [24]$$

e então:

$$\begin{aligned}
E_F \left[\hat{\sigma}_{A;\infty}^2 \right] &= E_F \left[\frac{QMA - QME}{n} \right] = \frac{1}{n} E_F(QMA) - \frac{1}{n} E_F(QME) \\
&= \frac{1}{n} \left[\sigma_e^2 + n \left(\sigma_{A;F}^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} \right) \right] - \frac{1}{n} \sigma_e^2 = \\
&= \frac{1}{n} \sigma_e^2 + \sigma_A^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} - \frac{1}{n} \sigma_e^2 = \sigma_{A;F}^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e},
\end{aligned}$$

onde $\sigma_{A;F}^2$ é o componente de variância entre classes para população finita; e, portanto, $E_F \left[\hat{\sigma}_{A;\infty}^2 \right]$ pode ser negativa. Além disso, se $\hat{\sigma}_{A;\infty}^2$ é negativa, o estimador não viciado sugerido por [23] para o caso de população finita é:

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_{A;F}^2 &= \left[QMA - \left(1 - \frac{n}{N_e} \right) QME \right] / n = QME \left[\frac{QMA}{QME} - \left(1 - \frac{n}{N_e} \right) \right] / n = \\
&= QME \left[F - \left(1 - \frac{n}{N_e} \right) \right] / n \quad [25]
\end{aligned}$$

e será positivo se $N_e < n/(1-F)$, com $1-F$ sendo positivo pois $F < 1$ quando $\hat{\sigma}_{A;\infty}^2$ de [23] é negativo. Assim, quando um estimador para população infinita é negativo, o estimador para população finita será positivo desde que consideremos que a população é finita quando $N_e < \frac{n}{1-F}$. Como $n/(1-F)$ é próximo de n quando F (<1) é próximo de zero, usando $\hat{\sigma}_{A;F}^2$ em lugar de $\hat{\sigma}_{A;\infty}^2$ é pouco provável que se tenha muito ganho sempre que F está próximo de zero, especialmente se n é pequeno. Por outro lado, quando F é ligeiramente menor do que 1, $n/(1-F)$ é então apreciavelmente maior do que n , e a postulação sobre população finita para o termo aleatório

precisa ser considerada a fim de se obter uma estimativa positiva para o componente de variância $\hat{\sigma}_{A;F}^2$ em vez de usar a negativa $\hat{\sigma}_{A;\infty}^2$. Neste sentido, pode-se notar por [23] e [25] que:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_{A;F}^2 &= \left[QMA - \left(1 - \frac{n}{N_e} \right) QME \right] / n = \left[QMA - \left(\frac{N_e - n}{N_e} \right) QME \right] / n = \\ &= \left[QMA - \frac{N_e \cdot QME - n \cdot QME}{N_e} \right] / n = \frac{QMA}{n} - \frac{N_e \cdot QME - n \cdot QME}{n \cdot N_e} = \\ &= \frac{QMA}{n} - \frac{QME}{n} + \frac{QME}{N_e} = \left[\frac{QMA - QME}{n} \right] + \frac{QME}{N_e} = \\ &= \hat{\sigma}_{A;\infty}^2 + \frac{QME}{N_e}\end{aligned}$$

Para ilustrar, retomemos o exemplo de McHUGH e MIELKE (1968) apresentado em 2.3, cuja análise de variância, acompanhada das esperanças dos quadrados médios nos casos de população infinita e finita é a seguinte:

ANÁLISE DE VARIÂNCIA				
C. V.	G. L.	Q. M.	ECQ. M. D	
			INFINITA	FINITA
Trat.	2	124	$\sigma_e^2 + n \sigma_\alpha^2$	$\sigma_e^2 + n \left[\sigma_\alpha^2 - \sigma_{e/N_e}^2 \right]$
Resíduo	9	21740,89	σ_e^2	σ_e^2
Total	11			

Assumindo população finita com $n_e = N_e$, tem-se:

$$QMA = \hat{\sigma}_e^2 + N_e \left[\hat{\sigma}_\alpha^2 - \hat{\sigma}_{e/N_e}^2 \right] = \hat{\sigma}_e^2 + N_e \hat{\sigma}_\alpha^2 - \hat{\sigma}_e^2 = N_e \hat{\sigma}_\alpha^2$$

$$\therefore \hat{\sigma}_\alpha^2 = QMA/N_e = 124/4 = 31,$$

obtendo, desta forma, uma estimativa positiva para σ_α^2 .

Também observa-se que

$$\hat{\sigma}_{\alpha;F}^2 = \hat{\sigma}_{\alpha;\omega}^2 + QME/N_e = -5404,22 + 21740,89/4 = 31,$$

onde:

$\hat{\sigma}_{\alpha;F}^2$ é a estimativa de σ_α^2 no caso de população finita, e
 $\hat{\sigma}_{\alpha;\omega}^2$ é a estimativa de σ_α^2 no caso de população infinita.

A importância de [22] é que ela se aplica tanto a dados balanceados como a dados não balanceados. Por exemplo, numa classificação hierárquica com três níveis para dados desbalanceados, as esperanças dos quadrados médios são apresentadas por GAYLOR e HARTWELL (1969) e aqui reproduzidas na Tabela 3. Considere-se a população constituída por A classes, B sub-classes dentro de cada classe A, e C sub-sub-classes dentro de cada sub-classe B. O modelo é:

$$y_{ijkl} = \mu + \alpha_i + \beta_{j(i)} + \gamma_{k(ij)} + e_{l(ijk)}$$

com

$$i = 1, \dots, A; j = 1, \dots, B_i; k = 1, \dots, C_{ij}$$

e

$$l = 1, \dots, n_{ijk} \text{ ou } \omega$$

e

$$\sum_{i=1}^A \alpha_i = \sum_{j=1}^B \beta_{j(i)} = \sum_{k=1}^C \gamma_{k(ij)} = 0.$$

Note que B e C aparecem nas esperanças dos quadrados médios e tanto podem ser finitos como infinitos. No último caso, a tabela se reduz aos resultados apresentados por ANDERSON & BANCROFT (1952). Ainda, se os dados forem balanceados, isto é, $b_i = b$, $c_{ij} = c$ e $n_{ijk} = n$, obtemos resultados fornecidos por BENNETT & FRANKLIN (1954).

Tabela 3 - Esperança dos quadrados médios para modelos hierárquicos com dados desbalanceados em populações finitas ou infinitas.

C.V.	G.L.	COEFICIENTES DOS COMPONENTES DE VARIANCIAS NAS EQND			
		σ_o^2	σ_c^2	σ_b^2	σ_a^2
A	a-1	1	$\sum_i^a \sum_j^{b_i} \sum_k^{c_{ij}} \left[n_{ijk}^2 - \frac{n_{ij.}^2}{c_{ij}} \right] f_i$	$\sum_i^a \sum_j^{b_i} \left[n_{ij.}^2 - \frac{n_{i..}^2}{b_i} \right] f_i$	$\sum_i^a n_{i..} f_i$
B dentro de A	$\sum_i b_i - 1$	1	$\sum_i^a \sum_j^{b_i} \sum_k^{c_{ij}} \left[n_{ijk}^2 - \frac{n_{ij.}^2}{c_{ij}} \right] f_{ij}$	$\sum_i^a \sum_j^{b_i} n_{ij.}^2 f_{ij}$	
C dentro de B	$\sum_i \sum_j c_{ij} - \sum_i b_i$	1	$\sum_i^a \sum_j^{b_i} \sum_k^{c_{ij}} n_{ijk}^2 f_{ijk}$		
Erro	$n - \sum_i \sum_j c_{ij}$	1			

onde:

$$f_i = \left[\frac{\frac{1}{n_{i..}} - \frac{1}{n_{...}}}{a-1} \right]; \quad f_{ij} = \frac{\left(\frac{1}{n_{ij.}} - \frac{1}{n_{i..}} \right)}{\left(\sum_i^a b_i - a \right)}$$

$$f_{ijk} = \frac{\left(\frac{1}{n_{ijk}} - \frac{1}{n_{ij.}} \right)}{\left(\sum_i^a \sum_j^{b_i} c_{ij} - \sum_i b_i \right)}$$

Em geral, a regra [22] se aplica a qualquer classificação hierárquica com dados balanceados ou não. Na prática, σ_e^2 é conservado e em modelos nos quais somente algumas populações são finitas, tem infinitos N 's para as outras populações.

3.1.4. Modelo de classificação cruzada

3.1.4.1 Classificação cruzada dupla

Na classificação cruzada dupla com fatores A e B, os valores amostrados das populações dos dois efeitos principais, A_i e B_j , terão ambos propriedades similares a [3] e [4]. Além disso, definindo os efeitos da interação das populações de modo que:

$$\sum_{i=1}^{N_A} (AB)_{ij} = 0, \text{ para todo } j \quad \text{e} \quad \sum_{j=1}^{N_B} (AB)_{ij} = 0, \text{ para todo } i,$$

nos leva a definir:

$$\sigma_{AB}^2 = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} (AB)_{ij}^2 / (N_A - 1) (N_B - 1) \quad [26]$$

Deste modo, através da extensão dos procedimentos [3] e [4], obtemos:

$$E[(AB)_{ij} (AB)_{i'j'}] = \begin{cases} \left[\frac{(N_A - 1)(N_B - 1)}{N_A N_B} \right] \sigma_{AB}^2, & \text{para } i=i' \text{ e } j=j' \\ \left[\frac{-(N_A - 1)}{N_A N_B} \right] \sigma_{AB}^2, & \text{para } i=i' \text{ e } j \neq j' \\ \left[\frac{-(N_B - 1)}{N_A N_B} \right] \sigma_{AB}^2, & \text{para } i \neq i' \text{ e } j=j' \\ \left[\frac{1}{N_A N_B} \right] \sigma_{AB}^2, & \text{para } i \neq i' \text{ e } j \neq j' \end{cases} \quad [27]$$

onde $(AB)_{ij}$ e $(AB)_{i'j'}$ são dois valores amostrais do efeito da interação.

Agora, o modelo é:

$$y_{ijk} = \mu + A_i + B_j + (AB)_{ij} + e_{ijk},$$

com $E(y_{ijk}) = \mu$ e A_i , B_j e e_{ijk} sendo amostras de populações finitas com propriedades similares a [3] e [4]; e $(AB)_{ij}$ com as propriedades indicadas em [27].

Para obter V_F de V_ω , consideremos inicialmente os elementos de V_ω :

$$\text{COV}(y_{ijk}, y_{i'j'k'}) = \begin{cases} \sigma_A^2 + \sigma_B^2 + \sigma_{AB}^2 + \sigma_e^2 = \text{Var}(y_{ijk}) = v_1, \\ \text{para } i=i', j=j' \text{ e } k=k' \\ \sigma_A^2 + \sigma_B^2 + \sigma_{AB}^2 = v_2, & \text{para } k \neq k' \\ \sigma_A^2 = v_3, & \text{para } j \neq j' \\ \sigma_B^2 = v_4, & \text{para } i \neq i' \\ 0 = v_5, & \text{para } i \neq i', j \neq j' \end{cases} \quad [28]$$

Sob a condição de populações finitas, não é difícil mostrar que os elementos de V_F correspondentes a V_∞ podem ser escritos como:

$$\begin{aligned}
 f_1 &= f_5 + f_1^* \text{ com } f_1^* = (\sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2 / N_B) + (\sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2 / N_A) + (\sigma_{AB}^2 - \sigma_e^2 / N_e) + \sigma_e^2, \\
 f_2 &= f_5 + f_2^* \text{ com } f_2^* = (\sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2 / N_B) + (\sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2 / N_A) + (\sigma_{AB}^2 - \sigma_e^2 / N_e), \\
 f_3 &= f_5 + f_3^* \text{ com } f_3^* = (\sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2 / N_B), \\
 f_4 &= f_5 + f_4^* \text{ com } f_4^* = (\sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2 / N_A), \\
 f_5 &= f_5 + f_5^* \text{ com } f_5^* = 0
 \end{aligned} \tag{29}$$

onde:

$$f_5 = -\sigma_A^2 N_A^{-1} - \sigma_B^2 N_B^{-1} + \sigma_{AB}^2 N_A^{-1} N_B^{-1}$$

Como f_5 participa de cada elemento de V_F , este pode ser escrito como $V_F = f_5 \mathbf{1}\mathbf{1}' + V_F^*$ onde os f^* 's são os elementos de V_F^* . Portanto, como $E_F(MD) = \text{tr}(QV_F)$ com $Q\mathbf{1} = 0$, temos $E_F(MD) = \text{tr}(QV_F^*)$, exatamente como em modelos hierárquicos.

Além disso, comparando [29] com [28] é evidente que os f^* 's são os v 's com

$$\sigma_A^2 \text{ substituído por } \sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2 / N_B,$$

$$\sigma_B^2 \text{ substituído por } \sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2 / N_A,$$

$$\sigma_{AB}^2 \text{ substituído por } \sigma_{AB}^2 - \sigma_e^2 / N_e,$$

e

$$\sigma_e^2 \text{ substituído por } \sigma_e^2, \tag{30}$$

e assim $E_F(MD)$ é $E_\infty(MD)$.

Esses resultados estão mostrados na Tabela 4.

Tabela 4 - Classificação Cruzada: Substituições necessárias para obtenção das Esperanças dos Quadrados Médios em modelos com populações finitas a partir de populações infinitas.

SIMPLES A	DUPLA A e B	TRIPLA A, B e C
σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \sigma_{\bullet\bullet}^2 / N_{\bullet}$	σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2 / N_B$	σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2 / N_B - \sigma_{AC}^2 / N_C + \sigma_{ABC}^2 / N_A N_C$
	σ_B^2 por $\sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2 / N_A$	σ_B^2 por $\sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2 / N_A - \sigma_{BC}^2 / N_C + \sigma_{ABC}^2 / N_A N_C$
	σ_{AB}^2 por $\sigma_{AB}^2 - \sigma_{\bullet\bullet}^2 / N_{\bullet}$	σ_C^2 por $\sigma_C^2 - \sigma_{AC}^2 / N_A - \sigma_{BC}^2 / N_B + \sigma_{ABC}^2 / N_A N_B$
		σ_{AB}^2 por $\sigma_{AB}^2 - \sigma_{ABC}^2 / N_C$
		σ_{AC}^2 por $\sigma_{AC}^2 - \sigma_{ABC}^2 / N_B$
		σ_{BC}^2 por $\sigma_{BC}^2 - \sigma_{ABC}^2 / N_A$
		σ_{ABC}^2 por $\sigma_{ABC}^2 - \sigma_{\bullet\bullet\bullet}^2 / N_{\bullet\bullet}$

3.1.4.2. Classificação cruzada geral

O modelo de classificação cruzada tripla é obtido por uma natural extensão dos métodos usados nas equações [27] a [30] para o caso de classificação dupla. Os resultados estão mostrados na Tabela 4. Para obtê-los, todas as três interações duplas dos fatores no modelo se comportam como [26] e o comportamento da interação tripla é semelhante, embora existam oito diferentes termos nas partes de [27] e não apenas quatro como mostrou-se aqui. É claro que a complexidade algébrica dos passos é maior do que o caso de classificação dupla. Vejamos o resultado geral.

É simples: numa classificação cruzada, de ordem r , com efeitos principais $A, B, \dots, R$, substitui-se o componente erro por ele mesmo, como na classificação hierárquica; para o componente de interação de ordem mais elevada substitui-se:

$$\sigma_{AB\dots R}^2 \quad \text{por} \quad \sigma_{AB\dots R}^2 - \frac{\sigma_e^2}{N_e} \quad [31]$$

e para qualquer outra interação ou componente de efeito principal $\sigma_{DE\dots L}^2$, onde $DE\dots L$ é um subconjunto para cada 1, 2, ..., $r-1$ letras para $A, B, \dots, R$, substitui-se

$$\sigma_{DE\dots L}^2 \quad \text{por} \quad \sigma_{DE\dots L}^2 \prod (1 - g_e) \quad [32]$$

onde e pertence a todo efeito principal que cruza $DE\dots L$ e g_e é uma função operacional tal que multiplica σ^2 por g_e acrescentando e como subscrito de σ^2 e divide o resultado por N_e . Por exemplo,

$$\sigma_A^2 g_B = \sigma_{AB}^2 / N_B \quad \text{e} \quad \sigma_{AB}^2 g_C = \sigma_{ABC}^2 / N_C.$$

Além disso, a multiplicação por g é simbólica (isto é, $g_A g_B = g_{AB}$), assim

$$\sigma_A^2 g_B g_C = \sigma_{ABC}^2 / N_B N_C \quad \text{e} \quad \sigma_A^2 g_B g_C g_D = \sigma_{ABCD}^2 / N_B N_C N_D.$$

Com g_e usado desta maneira, exemplos de [32] podem ser vistos na Tabela 4; isto é, numa classificação tripla cruzada,

σ_A^2 é substituído por:

$$\begin{aligned} \sigma_A^2 \prod_{e=B}^C (1-g_e) &= \sigma_A^2 (1-g_B) (1-g_C) = (\sigma_A^2 - \sigma_A^2 g_B) (1-g_C) = \\ &= \sigma_A^2 - \sigma_A^2 g_B - \sigma_A^2 g_C + \sigma_A^2 g_B g_C = \\ &= \sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2 / N_B - \sigma_{AC}^2 / N_C + \sigma_{ABC}^2 / N_B N_C \end{aligned}$$

simultaneamente σ_{AB}^2 é substituído por

$$\sigma_{AB}^2 (1 - g_C) = \sigma_{AB}^2 - \sigma_{AB}^2 g_C = \sigma_{AB}^2 - \sigma_{ABC}^2 / N_C$$

Os resultados da tabela 4 são para modelos que têm todas as interações possíveis entre eles. Quando um modelo não tem todas as interações que poderiam ser incluídas as esperanças dos quadrados médios para população finita são obtidos inicialmente encontrando seus valores em populações infinitas com todas as interações incluídas, depois fazendo as substituições acima e colocando as variâncias das interações identicamente iguais a zero.

3.1.5. Combinação de classificação hierárquica e cruzada

Agora estender-se-á o resultado [32] de classificações cruzadas para modelos consistindo de qualquer combinação de classificação hierárquica e cruzada. As regras [22] e [32], respectivamente, para classificações puramente hierárquica e cruzada, serão casos especiais para regras mais gerais.

Tomar-se-á como ponto inicial a classificação hierárquica.

Para γ hierárquico dentro de e , seja $h_{\gamma:e}$ uma função operacional, semelhante a natureza de g_e [32], mas tal que $h_{\gamma:e}$ multiplica somente

$$\sigma_e^2 \quad e \quad \sigma_e^2 \cdot h_{\gamma:e} = \sigma_\gamma^2 / N_\gamma \quad [33]$$

Operacionalmente, o efeito de multiplicar σ_{θ}^2 por $h_{\gamma:\theta}$ é acrescentar $\gamma:\theta$ ao subscrito de σ_{θ}^2 e então "cancelar" os θ 's porque θ ocorre à direita dos "dois pontos" em h e também em σ^2 ; o resultado, σ_{γ}^2 , é dividido por N_{γ} , como em [33]. A vantagem desta notação, $h_{\gamma:\theta}$, será evidente na aplicação geral.

Para classificação hierárquica, a regra [22] pode ser escrita como a substituição de

$$\sigma_{\theta}^2 \quad \text{por} \quad \sigma_{\theta}^2(1-h_{\gamma:\theta}) \quad [34]$$

onde γ é o fator imediatamente hierárquico dentro de θ . Isto também inclui a regra de trocar σ_{θ}^2 por ele mesmo porque $h_{\gamma:\theta} = 0$, desde que não existe fator hierárquico dentro do fator erro.

Para classificação cruzada, a regra [34] para a interação de ordem mais elevada é substituir:

$$\sigma_{AB...R}^2 \quad \text{por} \quad \sigma_{AB...R}^2(1-h_{\theta:AB...R}) = \sigma_{AB...R}^2 - \frac{\sigma_{\theta}^2}{N_{\theta}} \quad [35]$$

que é a [31]. A partir daí, σ_{θ}^2 vem da definição [33] na qual, é claro, θ não é necessariamente o efeito principal mas pode ser, como aqui, uma interação.

Finalmente, o resultado geral [32] pode ser melhorado ao fazer o cálculo para classificação hierárquica efetuando sua multiplicação pela expressão $1-h_{\gamma:\theta_{DE...L}}$ para qualquer fator γ que é o fator imediatamente hierárquico dentro de $\theta_{DE...L}$, onde $\theta_{DE...L}$ é qualquer efeito principal D, E, ... ou L ou qualquer fator interação desses efeitos principais. Assim, para englobar todas as combinações das classificações hierárquicas ou cruzadas, incluindo o "fator" erro, generaliza-se a regra seguinte.

Regra: Num modelo com fatores A, B, ..., R que tanto pode ser hierárquico quanto cruzado, substitui-se:

$$\sigma_{DE...L}^2 \text{ por } \sigma_{DE...L}^2 \prod (1-g_{\theta}) \prod \left(1-h_{\gamma:\theta_{DE...L}} \right) \quad [36]$$

onde θ pertence a todo efeito principal que cruza DE...L e γ é o fator hierárquico dentro de $\theta_{DE...L}$.

Ao usar $\theta_{DE...L}$ no subscrito de h, [36] estipula o termo erro como um fator hierárquico, como ilustrado em [35], e da mesma forma também prevê situações nas quais um fator precisa ser hierárquico dentro da interação de dois (ou mais) outros fatores. De qualquer modo, fatores hierárquicos são usualmente hierárquicos justamente dentro de fatores únicos e não interações deles, em cujo caso, com exceção de [31], o resultado geral [36] torna-se, substituir:

$$\sigma_{DE...L}^2 \text{ por } \sigma_{DE...L}^2 \prod (1-g_{\theta}) \prod_{\theta=D}^L (1-h_{\gamma:\theta}) \quad [37]$$

onde θ pertence a todo efeito principal que cruza DE...L.

Exemplos de [37] estão mostrados na Tabela 5, nas três primeiras entradas. Assim:

σ_A^2 é substituído por:

$$\begin{aligned} \sigma_A^2 (1-g_B) (1-h_{P:A}) &= (\sigma_A^2 - \sigma_A^2 g_B) (1-h_{P:A}) = \\ &= \sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2 / N_B - \sigma_P^2 / N_P + \sigma_{PB}^2 / N_P N_B, \end{aligned}$$

σ_B^2 é substituído por:

$$\sigma_B^2 (1-g_A) = \sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2 / N_A$$

e

σ_{AB}^2 é substituído por:

$$\sigma_{AB}^2 (1-h_{P:A}) = \sigma_{AB}^2 - \sigma_{PB}^2 / N_P.$$

Tabela 5 - Combinação de Classificações cruzadas e hierárquicas: substituições necessárias para obtenção das esperanças dos quadrados médios em modelos com populações finitas e populações infinitas.

2 CRUZADOS E 1 HIERÁRQUICO	
A e B CRUZADOS, e P HIERÁRQUICO DENTRO DE A	
σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2/N_B - \sigma_P^2/N_P + \sigma_{PB}^2/N_P N_B$	
σ_B^2 por $\sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2/N_A$	
σ_{AB}^2 por $\sigma_{AB}^2 - \sigma_{PB}^2/N_P$	
σ_P^2 por $\sigma_P^2 - \sigma_{PB}^2/N_B$	
σ_{PB}^2 por $\sigma_{PB}^2 - \sigma_e^2/N_e$	
2 CRUZADOS E 2 HIERÁRQUICO	
A e B CRUZADOS, e P DENTRO DE A e Q DENTRO DE B	A e B CRUZADOS, e P DENTRO DE Q DENTRO DE B
σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2/N_B - \sigma_P^2/N_P + \sigma_{PB}^2/N_P N_B$	σ_A^2 por $\sigma_A^2 - \sigma_{AB}^2/N_B - \sigma_P^2/N_P + \sigma_{PB}^2/N_P N_B$
σ_B^2 por $\sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2/N_A - \sigma_Q^2/N_Q + \sigma_{AQ}^2/N_A N_Q$	σ_B^2 por $\sigma_B^2 - \sigma_{AB}^2/N_A$
σ_{AB}^2 por $\sigma_{AB}^2 - \sigma_{AQ}^2/N_Q - \sigma_{PB}^2/N_P + \sigma_{PQ}^2/N_P N_Q$	σ_{AB}^2 por $\sigma_{AB}^2 - \sigma_{PB}^2/N_P$
σ_P^2 por $\sigma_P^2 - \sigma_{PB}^2/N_B$	σ_P^2 por $\sigma_P^2 - \sigma_{PB}^2/N_B - \sigma_Q^2/N_Q + \sigma_{QB}^2/N_Q N_B$
σ_{PB}^2 por $\sigma_{PB}^2 - \sigma_{PQ}^2/N_Q$	σ_{PB}^2 por $\sigma_{PB}^2 - \sigma_{QB}^2/N_Q$
σ_Q^2 por $\sigma_Q^2 - \sigma_{AQ}^2/N_A$	σ_Q^2 por $\sigma_Q^2 - \sigma_{QB}^2/N_B$
σ_{AQ}^2 por $\sigma_{AQ}^2 - \sigma_{PQ}^2/N_P$	σ_{QB}^2 por $\sigma_{QB}^2 - \sigma_e^2/N_e$
σ_{PQ}^2 por $\sigma_{PQ}^2 - \sigma_e^2/N_e$	

A dedução dos outros resultados da Tabela 5, segue de modo semelhante. É claro que quando não existem fatores hierárquicos, os termos h são zero e [36] e [37] se reduzem a [32] para modelos de classificação cruzada. Da mesma forma, quando não existem fatores cruzados, os termos g são zero e [36] e [37] se reduzem a [34] e consequentemente a [22] para modelos hierárquicos. Desta forma, [36], e sua forma simplificada [37], aplica-se a todos os modelos.

3.1.6. Modelos mistos

A discussão precedente refere-se a modelos com efeitos aleatórios e às esperanças dos quadrados médios na análise de variância para dados balanceados e aos "quadrados médios" usados em análises de variância análogas para dados desbalanceados (Método 1 de HENDERSON, 1953), como discutido em SEARLE (1968). Nesses casos, não existem termos em μ nos quadrados médios. Similarmente, para modelos mistos o procedimento também se aplica ao quadrado médio que não contém termos de efeitos fixos.

Com dados balanceados, é suficiente que isto ocorra sempre em análise de variância para estimar componentes de variância, e assim essa regra para troca da esperança do quadrado médio de população infinita para população finita se aplica.

Com dados desbalanceados, a mesma situação aparece no Método das Constantes Ajustadas (Método 3 de

HENDERSON, 1953), denominação motivada pelo fato de que algumas vezes os efeitos fixos em modelos de efeitos fixos são chamados de constantes. Este método não usa soma de quadrados da ANOVA, mas reduções nas somas de quadrados, devido ao ajustamento de constantes e os componentes de variância são estimados através do ato de igualar cada redução calculada ao seu valor esperado sob o modelo completo. SEARLE (1968) mostra que, neste método, sempre existem diferenças entre certos resíduos que não contém os efeitos fixos e assim são usados para estimar as variâncias não tendenciosamente. Para essas diferenças [35] também se aplica.

O procedimento geral [35] tem, portanto, aplicação ampla. Pode ser utilizado para dados balanceados e desbalanceados em modelos aleatórios ou mistos.

3.2. Estimação de Máxima Verossimilhança Restrita Para Componentes de Variância em Modelos Mistos

3.2.1. Introdução

Considere-se o modelo misto da análise de variância representado por um vetor de observações y tal que

$$y = X \mu + U \beta + e \quad [38]$$

onde:

μ é um vetor dos efeitos fixos;

β é um vetor dos efeitos aleatórios;

X e U as respectivas matrizes do delineamento e

e é um vetor de erros tendo variância σ^2 .

As diferentes variâncias dos elementos de β e de e são os componentes de variância do modelo.

O procedimento de MV de HARTLEY & RAO (1967) produz a estimação simultânea dos efeitos fixos e dos componentes de variância pela maximização de y em relação a cada elemento de μ e em relação a cada componente de variância.

Em contraste, CORBEIL & SEARLE (1976b) desenvolveram estimadores (e suas variâncias para amostras grandes) que são livres dos efeitos fixos, no sentido de que a verossimilhança não contém μ ; isto é, maximizaram a verossimilhança sobre um conjunto restrito de parâmetros. Esta é uma generalização do procedimento sugerido por THOMPSON (1962) que considerou o problema somente para dados balanceados e para modelos completamente casualizados. O procedimento aqui desenvolvido é aplicável para dados não balanceados gerais (incluindo, é claro, dados balanceados, os quais são, justamente, um caso especial), e é também aplicável a modelos mistos para qualquer mistura de efeitos fixos e aleatórios. Isto é conseguido pela adaptação da transformação utilizada por PATTERSON & THOMPSON (1971) que procedeu à partição da função de verossimilhança em duas partes, sendo uma delas inteiramente livre dos efeitos fixos e sua maximização resulta no que chamamos de estimadores de máxima verossimilhança restrita (MVR) para os componentes de variância. Foi feita uma adaptação da transformação descrita por HEMMERLE e HARTLEY (1973) que simplifica grandemente o cálculo dos estimadores de HARTLEY e RAO, auxilia o cálculo

dos estimadores de MVR e também simplifica a dedução de suas variâncias para amostras grandes. Finalmente, maximizando a parte da verossimilhança não utilizada pelos estimadores de MVR, obtém-se a estimação dos efeitos fixos, baseados nos estimadores de MVR.

Os estimadores de MVR não são somente invariantes para os efeitos fixos do modelo, mas são também livres das estimativas dos efeitos fixos. Além disso, em muitos casos de dados balanceados (igual número de observações em subclasses) investigados, os estimadores de MVR são idênticos aos familiares estimadores de análise de variância (ANOVA) para tais dados. Os estimadores de MV de HARTLEY & RAO não possuem esta propriedade e ela é considerada em razão das propriedades ótimas dos estimadores de ANOVA para componentes de variância para dados balanceados.

3.2.2. O modelo

Seja o modelo [38] caracterizado por

$$y = X \mu + U_1 b_1 + U_2 b_2 + \dots + U_c b_c + e \quad [39]$$

onde:

y é um vetor de n observações;

μ é um vetor de k constantes desconhecidas (efeitos fixos do modelo);

X é uma matriz de incidências $n \times k$, de rank coluna completo, correspondente a μ e com $k < n$;

U_i é uma matriz do delineamento $n \times m_i$ associada com o i -ésimo fator aleatório, com

$$\sum_{i=1}^c m_i + k < n;$$

b_i é um vetor de m_i variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas segundo $N(0; \sigma_i^2)$ com os b_i 's sendo mutuamente independentes;

e é um vetor de n variáveis aleatórias i.i.d. $N(0; \sigma^2)$ e independente dos b_i 's.

Portanto, y tem distribuição Normal multivariada com

$$\text{média } E(y) = X \mu$$

e

$$\text{variância } \text{Var}(y) = V = H \cdot \sigma^2 \quad [40]$$

onde

$$H = \sum_{i=1}^c \gamma_i U_i U_i' + I_n$$

para

$$\gamma_i = \sigma_i^2 / \sigma^2 \quad [41]$$

pois

$$\begin{aligned} V(y) &= V(X \mu + U_1 b_1 + \dots + U_c b_c + e) = \\ &= U_1 V(b_1) U_1' + \dots + U_c V(b_c) U_c' + V(e) = \\ &= U_1 \sigma_1^2 U_1' + \dots + U_c \sigma_c^2 U_c' + \sigma^2 I = \\ &= \sigma^2 \left[U_1 \sigma_1^2 / \sigma^2 U_1' + \dots + U_c \sigma_c^2 / \sigma^2 U_c' + \sigma^2 / \sigma^2 I \right] = \\ &= \sigma^2 \left[U_1 \gamma_1 U_1' + \dots + U_c \gamma_c U_c' + I \right] = \\ &= \sigma^2 \left[\sum_{i=1}^c \gamma_i U_i U_i' + I \right] = \sigma^2 H. \end{aligned}$$

tem-se que μ é um vetor do número máximo de funções estimáveis linearmente independentes dos efeitos fixos. O mais simples desses vetores tem como seus elementos as médias populacionais de todas as células de efeitos fixos que contém dados. A correspondente X de [39] assume uma forma simples.

Define-se y como sendo as observações ordenadas tal que todas elas, dentro de cada célula dos fatores de efeitos fixos, seguem sequencialmente um e outro. Se existem k dessas células contendo dados, com a t -ésima delas tendo $n_t \neq 0$ observações, então

$$X = \begin{bmatrix} 1_{n_1} & & & 0 \\ & 1_{n_2} & & \\ & & \dots & \\ 0 & & & 1_{n_k} \end{bmatrix} = \sum_{t=1}^k 1_{n_t} \quad [42]$$

onde 1_{n_t} é um vetor de n_t uns e $\sum^+$ representa uma soma direta de matrizes.

Uma ilustração é dada a seguir em termos de um exemplo numérico apresentado por BOWKER & LIEBERMAN (1968), que consiste de três observações em cada célula de uma classificação cruzada dupla com três linhas e duas colunas:

Um engenheiro de garantia de qualidade ao trabalhar com um componente eletrônico industrial percebe, intuitivamente, que existe grande variabilidade entre os fornos utilizados por sua firma para testar a vida dos vários componentes. Para verificar se está ou não correto, ele escolheu um tipo de componente e obteve os dados apresentados na Tabela 6, para três temperaturas comumente

utilizadas para testar a vida destes itens. O componente é acionado no forno até falhar. Dois fornos aleatoriamente escolhidos foram utilizados no experimento.

Tabela 6
Tempo dos componentes (em minutos)

TEMP	FORNOS	
	F1	F2
500°F	237	178
	254	179
	246	183*
550°F	208	146
	178	145
	187	141
600°F	192*	142
	186	125
	183	136

O modelo para y_{pqr} , r-ésima observação na p-ésima linha e q-ésima coluna é

$$y_{pqr} = \mu + \alpha_p + \beta_q + (\alpha\beta)_{pq} + e_{pqr}$$

para $p = 1, 2, 3$; $q = 1, 2$ e $r = 1, 2, 3$ onde μ é a média geral; α_p é o efeito devido à p-ésima linha; β_q é o efeito devido à q-ésima coluna; $(\alpha\beta)_{pq}$ é o efeito da interação e e_{pqr} é o termo erro associado à observação y_{pqr} .

HEMMERLE & HARTLEY (1973) adaptaram o exemplo para ilustrar dados não balanceados, com a retirada de duas observações (assinaladas com * na Tabela 6), de modo que o número de observações em cada célula aparece na Tabela 7.

Tabela 7

	COLUNA 1	COLUNA 2	TOTAL
linha 1	3	2	5
linha 2	3	3	6
linha 3	2	3	5

Agora, $r = 1, 2, \dots, n_{pq}$ para $n_{pq} = 2$ ou 3 .

Considerando dados desta natureza como sendo de um modelo misto com efeito de linha fixo, temos $n = 16$ observações para o modelo [39], com $c = 2$ fatores aleatórios nas colunas com $m_1 = 2$ níveis e interações com $m_2 = 6$ níveis.

A razão dos componentes de variância para esses fatores são, respectivamente, $\gamma_1 = \sigma_{\beta}^2 / \sigma^2$ e $\gamma_2 = \sigma_{\alpha\beta}^2 / \sigma^2$ de acordo com [41]. As células dos fatores de efeitos fixos estão nas linhas, que são três, e, assim, para X de [42], $k=3$ e os valores de n_i são $n_1=5$, $n_2=6$ e $n_3=5$.

Matricialmente, o modelo para os dados da Tabela 6 é:

$$H = \sum_{i=1}^n \gamma_i U_i U_i' + I_n = \gamma_1 U_1 U_1' + \gamma_2 U_2 U_2' + I_{16} =$$

[illegible]

3.2.3. Os estimadores

Dada a função de verossimilhança para

$$y \sim N(X\mu, H\sigma^2),$$

$$L(y, \mu, \sigma^2, y) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2} |H|^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} (y - X\mu)' H^{-1} (y - X\mu) \right],$$

o logaritmo da função de verossimilhança é

$$\begin{aligned} \lambda = & -\frac{1}{2} n \log_e 2\pi - \frac{1}{2} n \log_e \sigma^2 - \frac{1}{2} \log_e |H| - \\ & - \frac{1}{2\sigma^2} (y - X\mu)' H^{-1} (y - X\mu) \end{aligned} \quad [43]$$

Para reparti-la em duas partes, uma delas livre de μ , PATTERSON & THOMPSON (1971) sugerem a transformação singular

$$\begin{bmatrix} S \\ X' H^{-1} \end{bmatrix} y$$

onde

$$S = I - X(X'X)^{-1}X' = \sum_{i=1}^k \left(I_{n_i} - \frac{1}{n_i} J_{n_i} \right) \quad [44]$$

é simétrica e idempotente, sendo J_{n_i} uma matriz de uns, $n_i \times n_i$.

Desde que SX é nula, pois

$$SX = [I - X(X'X)^{-1}X']X = X - X(X'X)^{-1}X'X = X - XI = X - X = 0,$$

Sy tem distribuição $N(0; SHS\sigma^2)$ independentemente de $X'H^{-1}y$.

É claro que a distribuição de Sy é livre dos efeitos fixos μ e, portanto, sua função de verossimilhança forma a base de nossa dedução dos estimadores dos componentes de variância envolvidos em $H\sigma^2$. Entretanto, para evitar a singularidade de SHS surgida da forma de S mostrada em [44], utilizamos uma alternativa para S dela derivada pela

retirada da n_1 -ésima, $(n_1 + n_2)$ -ésima, $(n_1 + n_2 + \dots + n_k)$ -ésima, ..., $(n_1 + n_2 + \dots + n_k)$ -ésima linhas. Tal matriz, notada por T , tem ordem $(n-k) \times n$ e é dada por

$$T = \sum_{t=1}^k \left[\left(I_{n_t-1} \mid 0_{n_t-1} \right) - n_t^{-1} J_{(n_t-1) \times n_t} \right] \quad [45]$$

$$= \sum_{t=1}^k \left(I_{n_t} - n_t^{-1} J_{n_t-1} \mid -n_t^{-1} 1_{n_t-1} \right) \quad [46]$$

onde 0_{n_t-1} é um vetor de zeros de ordem n_t-1 e $J_{(n_t-1)}$ é uma matriz de ordem $(n_t-1) \times n_t$ cujos elementos são uns.

Para o exemplo que estamos considerando, temos:

$$n_1 = 5, \quad n_2 = 6 \quad \text{e} \quad n_3 = 5, \quad \text{então}$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} ; \quad X'X = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix} ;$$

[illegible]

Por [46] :

$$T = \left[\begin{array}{cc} \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] - \frac{1}{5} \left[\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right] & 4\phi_6 \end{array} & \begin{array}{c} 4\phi_5 \\ \\ \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} 5\phi_5 \cdot \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] - \frac{1}{6} \left[\begin{array}{cccccc} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right] & 5\phi_5 \end{array} & \\ \begin{array}{c} 4\phi_5 \\ \\ 4\phi_6 \end{array} & \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] - \frac{1}{5} \left[\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right] \\ \\ \end{array} \end{array} \right] =$$

4/5	-1/5	-1/5	-1/5	-1/5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-1/5	4/5	-1/5	-1/5	-1/5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-1/5	-1/5	4/5	-1/5	-1/5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-1/5	-1/5	-1/5	4/5	-1/5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	5/6	-1/6	-1/6	-1/6	-1/6	-1/6	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	-1/6	5/6	-1/6	-1/6	-1/6	-1/6	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	-1/6	-1/6	5/6	-1/6	-1/6	-1/6	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	-1/6	-1/6	-1/6	5/6	-1/6	-1/6	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	-1/6	-1/6	-1/6	-1/6	5/6	-1/6	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4/5	-1/5	-1/5	-1/5	-1/5	-1/5
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1/5	4/5	-1/5	-1/5	-1/5	-1/5
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1/5	-1/5	4/5	-1/5	-1/5	-1/5
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1/5	-1/5	-1/5	4/5	-1/5	-1/5

Como pode-se observar, retirando as últimas linhas de cada sub-matriz de S, reproduz-se T.

Para X de [42] é prontamente visto que

$$TX = 0 \quad [47]$$

e pela própria natureza de T, é fácil mostrar que

$$T'(TT')^{-1}T = S \quad [48]$$

como verificamos numericamente através dos dados.

A transformação agora utilizada é

$$z = \begin{bmatrix} T \\ X'H^{-1} \end{bmatrix} y = \begin{bmatrix} Ty \\ X'H^{-1}y \end{bmatrix} \quad [49]$$

e com vistas em [47], sua distribuição é

$$z \sim N \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ X'H^{-1}X \mu \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} THT' \sigma^2 & 0 \\ 0 & X'H^{-1}X \sigma^2 \end{bmatrix} \right\} \quad [50]$$

Esta transformação é não singular porque X' e T de [42] e [45] têm, cada uma, "rank" linha completo e, de [47], as linhas de T são linearmente independentes das linhas de X'.

Considere-se agora o logaritmo da verossimilhança de z. Isto é, de [49] e [50], o logaritmo da verossimilhança de Ty e de $X'H^{-1}y$, denotados por λ_1 e λ_2 , respectivamente:

$$\begin{aligned} \lambda_1 = & -\frac{1}{2} (n - k) \log_e 2\pi - \frac{1}{2} (n - k) \log_e \sigma^2 \\ & - \frac{1}{2} \log_e |THT'| - \frac{1}{2\sigma^2} y'T'(THT')^{-1}Ty \end{aligned} \quad [51]$$

$$\begin{aligned}
\lambda_2 &= -\frac{1}{2} k \log_e 2\pi - \frac{1}{2} k \log_e \sigma^2 - \frac{1}{2} \log_e |X'H^{-1}X| \\
&\quad - \frac{1}{2\sigma^2} (X'H^{-1}y - X'H^{-1}X\mu)' (X'H^{-1}X)^{-1} (X'H^{-1}y - X'H^{-1}X\mu) \\
&= -\frac{1}{2} k \log_e 2\pi - \frac{1}{2} k \log_e \sigma^2 - \frac{1}{2} \log_e |X'H^{-1}X| \\
&\quad - \frac{1}{2\sigma^2} (y - X\mu)' H^{-1}X (X'H^{-1}X)^{-1} X'H^{-1}(y - X\mu) \quad [52]
\end{aligned}$$

Como λ_1 não envolve μ , os estimadores de σ^2 e dos γ_i 's, chamados estimadores de máxima verossimilhança restrita (MVR) são, seguindo o método de PATTERSON & THOMPSON (1971), os valores de σ^2 e γ_i 's que maximizam λ_1 .

Derivando [51] vem:

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial \sigma^2} = -\frac{1}{2\sigma^2} (n - k) + \frac{1}{2\sigma^4} y'T'(THT')^{-1}T y \quad [53]$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \lambda_1}{\partial \gamma_i} &= -\frac{1}{2} \text{tr} \left[U_i' T'(THT')^{-1}T U_i \right] + \\
&\quad + \frac{1}{2\sigma^2} y'T'(THT')^{-1}T U_i U_i' T'(THT')^{-1}T y \quad [54]
\end{aligned}$$

para $i = 1, 2, \dots, c$, onde $\text{tr}(Q)$ é o traço da matriz Q .

Igualando [53] e [54] a zero, obtemos os estimadores de MVR. É claro que as equações resultantes não têm solução analítica e devem ser resolvidas numericamente. Um procedimento iterativo é atribuir valores iniciais para

$$\gamma' = \{\gamma_1, \dots, \gamma_c\}$$

e então:

(i) resolver

$$\hat{\sigma}^2 = y'T'(THT')^{-1}Ty/(n-k) \quad [55]$$

baseado em [53] e

(ii) utilizar os γ valores e $\hat{\sigma}^2$ de [55] para calcular os novos γ valores que fazem [54] aproximar-se de zero. A repetição de (i) e (ii), terminando em (i), é continuada até que o grau de acurácia desejado seja obtido.

Para ilustrar o processo, façamos $\gamma_1 = 20,00$ e $\gamma_2 = 0,30$ no nosso exemplo. Então:

H =

21,3	20,3	20,3	0	0	20	20	20	0	0	0	20	20	0	0	0
20,3	21,3	20,3	0	0	20	20	20	0	0	0	20	20	0	0	0
20,3	20,3	21,3	0	0	20	20	20	0	0	0	20	20	0	0	0
0	0	0	21,3	20,3	0	0	0	20	20	20	0	0	20	20	20
0	0	0	20,3	21,3	0	0	0	20	20	20	0	0	20	20	20
20	20	20	0	0	21,3	20,3	20,3	0	0	0	20	20	0	0	0
20	20	20	0	0	20,3	21,3	20,3	0	0	0	20	20	0	0	0
20	20	20	0	0	20,3	20,3	21,3	0	0	0	20	20	0	0	0
0	0	0	20	20	0	0	0	21,3	20,3	20,3	0	0	20	20	20
0	0	0	20	20	0	0	0	20,3	21,3	20,3	0	0	20	20	20
0	0	0	20	20	0	0	0	20,3	20,3	21,3	0	0	20	20	20
20	20	20	0	0	20	20	20	0	0	0	21,3	20,3	0	0	0
20	20	20	0	0	20	20	20	0	0	0	20,3	21,3	0	0	0
0	0	0	20	20	0	0	0	20	20	20	0	0	21,3	20,3	20,3
0	0	0	20	20	0	0	0	20	20	20	0	0	20,3	21,3	20,3
0	0	0	20	20	0	0	0	20	20	20	0	0	20,3	20,3	21,3

Com as matrizes y , T e H , obtemos, por [55]

$$\hat{\sigma}^2 = y' T (T H T')^{-1} T y / (16 - 3) = \frac{1029,0589}{13} = 79,1584$$

e calculamos os novos γ_1 e γ_2 através de

$$\text{tr} \left[U_1' T' (T H T')^{-1} T U_1 \right] = y' T' (T H T')^{-1} T U_1 U_1' T' (T H T')^{-1} T y / \hat{\sigma}^2$$

onde H contém γ_1 como incógnita e o valor inicial para

$$\gamma_2 = 0,30$$

e

$$\text{tr} \left[U_2' T' (T H T')^{-1} T U_2 \right] = y' T' (T H T')^{-1} T U_2 U_2' T' (T H T')^{-1} T y / \hat{\sigma}^2$$

onde H contém γ_2 como incógnita e γ_1 encontrado na expressão anterior.

O processo é repetido até chegar na precisão desejada. No caso, obteremos

$$\hat{\gamma}_1 = 18,57; \quad \hat{\gamma}_2 = 0,32 \quad \text{e} \quad \hat{\sigma}^2 = 78,84.$$

3.2.4. Procedimento de cálculo

Embora PATTERSON e THOMPSON (1971) tenham proposto um procedimento baseado no método dos escores de Fisher para $c = 1$ e sugerido como utilizá-lo para $c > 1$, a técnica de Newton-Raphson é melhor adaptada a problemas de encontrar sucessivos valores para γ que zerem [54] e foi efetivamente aplicada por HEMMERLE & HARTLEY (1973) para equações similares ao método da máxima verossimilhança de HARTLEY & RAO (1967). Utiliza-se sua aplicação aqui, o que simplifica a notação e procedimento de cálculo.

3.2.4.1. A transformação W

A técnica de Newton-Raphson, que é um procedimento iterativo numérico, para encontrar valores dos elementos de γ que zeram [54], utiliza a derivada parcial de segunda ordem para λ_1 , em relação aos γ_i 's, ou seja:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \gamma_i \partial \gamma_j} = & \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left[\underbrace{U_i' T' (THT')^{-1} T U_j}_{W_{ij}} \underbrace{U_j' T' (THT')^{-1} T U_i}_{W_{ij}} \right] - \\ & - \underbrace{y' T' (THT')^{-1} T U_i}_{w_i} \underbrace{U_i' T' (THT')^{-1} T U_j}_{W_{ij}} \underbrace{U_j' T' (THT')^{-1} T y / \sigma^2}_{w_j} \end{aligned} \quad [56]$$

para $i, j = 1, 2, \dots, c$.

Os produtos das matrizes em [54] e [56] são submatrizes da seguinte transformação W (matriz W) sugerida por HEMMERLE & HARTLEY (1973), cujo interesse se baseia no fato de que os cálculos iterativos podem ser efetuados utilizando quantidades que não dependem de n em nenhum passo:

$$W = \left\{ W_{ij} \right\} = \begin{bmatrix} U' \\ y' \end{bmatrix} T' (THT')^{-1} T \begin{bmatrix} U & y \end{bmatrix} \quad [57]$$

para $i, j = 1, 2, \dots, c+1$.

Então para $W_{i,c+1} \equiv w_i$ [54] e [56] ficam

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial \gamma_i} = - \frac{1}{2} \operatorname{tr}(W_{ii}) + \frac{1}{2\sigma^2} w_i' w_i \quad [58]$$

$$\frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \gamma_i \partial \gamma_j} = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(W_{ij} W_{ij}') - w_i' W_{ij} w_j / \sigma^2 \quad [59]$$

para $i, j = 1, 2, \dots, c$, e [54] fica

$$\hat{\sigma}^2 = W_{c+1,c+1}^{-1} / (n-k) \quad [60]$$

A transformação W para o exemplo que estamos considerando é:

$$\begin{aligned}
 W &= \begin{bmatrix} W_{11} & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & W_{22} & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & W_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_{11} & W_{12} & w_1 \\ W_{21} & W_{22} & w_2 \\ W_{31} & W_{32} & w_3 \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} U'_1 \\ U'_2 \\ y' \end{bmatrix} T'(THT')^{-1}T \begin{bmatrix} U_1 & U_2 & y \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} U'_1 T'(THT')^{-1}T U_1 & U'_1 T'(THT')^{-1}T U_2 & U'_1 T'(THT')^{-1}Ty \\ U'_2 T'(THT')^{-1}T U_1 & U'_2 T'(THT')^{-1}T U_2 & U'_2 T'(THT')^{-1}Ty \\ y' T'(THT')^{-1}T U_1 & y' T'(THT')^{-1}T U_2 & y' T'(THT')^{-1}Ty \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Então:

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial \gamma_1} = -\frac{1}{2} \operatorname{tr}(W_{11}) + \frac{1}{2\sigma^2} w'_1 w_1$$

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial \gamma_2} = -\frac{1}{2} \operatorname{tr}(W_{22}) + \frac{1}{2\sigma^2} w'_2 w_2$$

$$\frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \gamma_1 \partial \gamma_2} = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(W_{12} W'_{12}) - w'_1 W_{12} w_2 / \sigma^2 \quad e$$

$$\hat{\sigma}^2 = W_{33} / (16 - 3)$$

Numericamente, para $\gamma_1 = 18,57$ e $\gamma_2 = 0,34$

temos:

$$W = \begin{bmatrix} 0,027 & -0,027 & 0,008 & -0,008 & 0,009 & -0,009 & 0,008 & -0,008 & 1,448 \\ -0,027 & 0,027 & -0,008 & 0,008 & -0,009 & 0,009 & -0,008 & 0,008 & -1,448 \\ 0,008 & -0,008 & 0,452 & -0,452 & -0,235 & -0,235 & -0,209 & 0,209 & 8,854 \\ -0,008 & 0,008 & -0,452 & 0,452 & 0,235 & -0,235 & 0,209 & -0,209 & -8,854 \\ 0,009 & -0,009 & -0,235 & 0,235 & 0,479 & -0,479 & -0,235 & 0,235 & -5,026 \\ -0,009 & 0,009 & 0,235 & -0,235 & -0,479 & 0,479 & 0,232 & -0,235 & 5,026 \\ 0,008 & -0,008 & -0,209 & 0,209 & -0,235 & 0,235 & 0,452 & -0,452 & -2,379 \\ -0,008 & 0,008 & 0,209 & -0,209 & 0,235 & -0,235 & -0,452 & 0,452 & 2,379 \\ 1,448 & -1,448 & 8,854 & -8,854 & -5,026 & 5,026 & -2,379 & 2,379 & 1025,37 \end{bmatrix}$$

e portanto,

$$\text{tr}(W_{11}) = 0,053; w_1' w_1 = 4,192; \text{tr}(W_{22}) = 2,766;$$

$$w_2' w_2 = 218,619; \text{tr}(W_{12} W_{12}') = 0,001; w_1' W_{12} w_2 = 0,041;$$

$$W_{33} = 1025,387; \hat{\sigma}^2 = 1025,387/13 = 78,87$$

Os elementos de W de [58] a [60] exigem, de [57], calcular $(THT')^{-1}$, de ordem $n-k$ que é menor que n , ordem da matriz a ser invertida para máxima verossimilhança (H^{-1}). Para muitos conjuntos de dados, isto será exageradamente trabalhoso de calcular, mas a inversa pode ser reduzida a uma matriz de ordem $m = \sum_{i=1}^c m_i$, número total de níveis dos efeitos aleatórios do modelo. Embora para muitos casos esta matriz seja também muito grande, será sempre menor do que $n - k$, frequentemente muito menor, e em muitos casos será tal que a inversa pode ser calculada. Para conseguir esta redução, note de [41] que

$$H = I_n + U D U' \quad [61]$$

para

$$U = \begin{bmatrix} U_1 & U_2 & \dots & U_c \end{bmatrix} \quad [62]$$

$$D = \sum_{i=1}^c \gamma_i I_{m_i} \quad [63]$$

Então,

$$T'(THT')^{-1}T = S - SUM^{-1}U'S \quad [64]$$

para

$$M = D^{-1} + U'SU, \text{ de ordem } m. = \sum_{i=1} m_i \quad [65]$$

Para os dados do exemplo, como

$$m. = \sum_{i=1}^2 m_i = m_1 + m_2 = 2 + 6 = 8$$

níveis de efeitos aleatórios:

$$D = \sum_{i=1}^2 \gamma_i I_{m_i} = \begin{bmatrix} \gamma_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} & z\phi \\ \phi & \gamma_2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_1 & & & & & & & \phi \\ & \gamma_1 & & & & & & \\ & & \gamma_2 & & & & & \\ & & & \gamma_2 & & & & \\ & & & & \gamma_2 & & & \\ & & & & & \gamma_2 & & \\ & & & & & & \gamma_2 & \\ \phi & & & & & & & \gamma_2 \end{bmatrix}$$

$$M = \begin{bmatrix} 1/\gamma_1 + 3,9 & -3,9 & 1,2 & -1,2 & 1,5 & -1,5 & 1,2 & -1,2 \\ -3,9 & 1/\gamma_1 + 3,9 & -1,2 & 1,2 & -1,5 & 1,5 & -1,2 & 1,2 \\ 1,2 & -1,2 & 1/\gamma_2 + 1,2 & -1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1,2 & 1,2 & -1,2 & 1/\gamma_2 + 1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1,5 & -1,5 & 0 & 0 & 1/\gamma_2 + 1,5 & -1,5 & 0 & 0 \\ -1,5 & 1,5 & 0 & 0 & -1,5 & 1/\gamma_2 + 1,5 & 0 & 0 \\ 1,2 & -1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\gamma_2 + 1,2 & -1,2 \\ -1,2 & 1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1,2 & 1/\gamma_2 + 1,2 \end{bmatrix}$$

Agora, definimos

$$W_o = \begin{bmatrix} U' \\ Y' \end{bmatrix} S I U \quad YI = \begin{bmatrix} U'SU & U'Sy \\ Y'SU & Y'Sy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_{oo} & W_o \\ W_o' & W_o \end{bmatrix} \quad [66]$$

que, conforme [57] é W com H substituído por I . Então, ao utilizar [64]-[66] em [57], W fica

$$\begin{aligned}
 W &= \begin{bmatrix} U' \\ Y' \end{bmatrix} T'(THT')^{-1}T \begin{bmatrix} U & Y \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} U' \\ Y' \end{bmatrix} \left[S - S U M^{-1} U' S \right] \begin{bmatrix} U & Y \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} U' \\ Y' \end{bmatrix} S \begin{bmatrix} U & Y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} U' \\ Y' \end{bmatrix} S U M^{-1} U' S \begin{bmatrix} U & Y \end{bmatrix} = \\
 &= W_0 - \begin{bmatrix} U' \\ Y' \end{bmatrix} S U M^{-1} U' S \begin{bmatrix} U & Y \end{bmatrix} = \quad [67]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \begin{bmatrix} W_{00} & W_0 \\ W_0' & W_0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} U'S U M^{-1} U' S U & U'S U M^{-1} U' S Y \\ Y'S U M^{-1} U' S U & Y'S U M^{-1} U' S Y \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} W_{00} & W_0 \\ W_0' & W_0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} W_{00} M^{-1} W_{00} & W_{00} M^{-1} W_0 \\ W_0' M^{-1} W_{00} & W_0' M^{-1} W_0 \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} W_{00} - W_{00} M^{-1} W_{00} & W_0 - W_{00} M^{-1} W_0 \\ W_0' - W_0' M^{-1} W_{00} & W_0 - W_0' M^{-1} W_0 \end{bmatrix} \quad [68]
 \end{aligned}$$

No nosso exemplo:

$$W_0 = \begin{bmatrix} 3,9 & -3,9 & 1,2 & -1,2 & 1,5 & -1,5 & 1,2 & -1,2 & 211,3 \\ -3,9 & 3,9 & -1,2 & 1,2 & -1,5 & 1,5 & -1,2 & 1,2 & -211,3 \\ 1,2 & -1,2 & 1,2 & -1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 80,6 \\ -1,2 & 1,2 & -1,2 & 1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -80,6 \\ 1,5 & -1,5 & 0 & 0 & 1,5 & -1,5 & 0 & 0 & 70,5 \\ -1,5 & 1,5 & 0 & 0 & -1,5 & 1,5 & 0 & 0 & -70,5 \\ 1,2 & -1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1,2 & -1,2 & 60,2 \\ -1,2 & 1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1,2 & 1,2 & -60,2 \\ \hline 211,3 & -211,3 & 80,6 & -80,6 & 70,5 & -70,5 & 60,2 & -60,2 & 12533,5 \end{bmatrix}$$

e considerando $\gamma_1 = 18,57$ e $\gamma_2 = 0,34$, temos:

$$M = \begin{bmatrix} 3,954 & -3,9 & 1,2 & -1,2 & 1,5 & -1,5 & 1,2 & -1,2 \\ -3,9 & 3,954 & -1,2 & 1,2 & -1,5 & 1,5 & -1,2 & 1,2 \\ 1,2 & -1,2 & 4,141 & -1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1,2 & 1,2 & -1,2 & 4,141 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1,5 & -1,5 & 0 & 0 & 4,441 & -1,5 & 0 & 0 \\ -1,5 & 1,5 & 0 & 0 & -1,5 & 4,441 & 0 & 0 \\ 1,2 & -1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,141 & -1,2 \\ -1,2 & 1,2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1,2 & 4,141 \end{bmatrix}$$

3.2.4.2. Algoritmos

O cálculo de W [68] exige calcular [65] e [66].

Em [66]: para S de [44], o termo principal de

[66] é

$$\begin{aligned} W_{oo} &= U'SU = U' \left[I - X(X'X)^{-1}X' \right] U = \\ &= U'U - U'X(X'X)^{-1}X'U = \\ &= U'U - U'X \text{diag} \left\{ 1/n_1, \dots, 1/n_k \right\} X'U \end{aligned} \quad [69]$$

onde $U'U$ é a familiar "matriz dos coeficientes" para os efeitos aleatórios. Para o nosso exemplo:

$$U'U = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 3 & 0 & 3 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 2 & 0 & 3 & 0 & 3 \\ 3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

Em [69], uma típica sub-matriz de $U'X$ é

$$U'_iX = \left\{ n_{i(j),t} \right\} \quad [70]$$

para $j = 1, \dots, m_i$; $t = 1, \dots, k$; e $m_i \times k$ matriz cujos elementos típicos $n_{i(j),t}$ representa o número de observações

no j -ésimo nível do i -ésimo fator de efeito aleatório e no t -ésimo sub-total das células dos fatores de efeitos fixos.

Para os dados da Tabela 6, temos que as linhas são consideradas fixas, com $k=3$ níveis. O primeiro fator aleatório, que corresponde às colunas, tem $m_1=2$ níveis e, por [70]:

$$\begin{aligned}
 U_1'X &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} 3 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n_{1(1),1} & n_{1(1),2} & n_{1(1),3} \\ n_{1(2),1} & n_{1(2),2} & n_{1(2),3} \end{bmatrix} = \\
 &= \left\{ n_{1(j),t} \right\} \quad \text{para } j=1,2 \text{ e } t=1,2,3.
 \end{aligned}$$

O segundo fator aleatório são as interações, com $m_2=6$ níveis e em [70]

$$U_2' X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n_{2(1),1} & n_{2(1),2} & n_{2(1),3} \\ n_{2(2),1} & n_{2(2),2} & n_{2(2),3} \\ n_{2(3),1} & n_{2(3),2} & n_{2(3),3} \\ n_{2(4),1} & n_{2(4),2} & n_{2(4),3} \\ n_{2(5),1} & n_{2(5),2} & n_{2(5),3} \\ n_{2(6),1} & n_{2(6),2} & n_{2(6),3} \end{bmatrix} =$$

$$= \left\{ n_{2(j),t} \right\} \quad \text{para } j=1,2,\dots,6 \text{ e } t=1,2,3.$$

O segundo termo de [66] é

$$w_o = U' S y = \left\{ U_i' S y \right\}, \quad m_i x_1,$$

para $i = 1, \dots, c$.

De [44], $S y = x$ é o vetor y com cada observação substituída por seus desvios da média dos níveis dos fatores de efeitos fixos nos quais ele ocorre:

$$\begin{aligned} x = S y &= y - \left\{ \sum_{t=1}^k n_t^{-1} J_{n_t} \right\} y = \\ &= y - \left\{ \bar{y}_t 1_{n_t} \right\} \quad \text{para } t=1, \dots, k. \end{aligned}$$

Portanto,

$$w_0 = \left\{ U_i' x \right\}, \text{ para } i=1, \dots, c \quad [71]$$

é um vetor $m_i \times 1$ de totais dos x 's, referente a cada nível do i -ésimo fator aleatório.

Para ilustrar x , utilizamos a notação familiar ponto e barra para totais e médias, isto é,

$$y_{1..} = \sum_{r=1}^3 y_{11r} \quad \text{e} \quad \bar{y}_{11.} = \frac{y_{11}}{3}. \text{ Então}$$

$$x = \left\{ y_{pqr} - \bar{y}_{p..} \right\} \text{ para } p=1,2,3; q=1,2 \text{ e } r=1,2,\dots,n_{pq}$$

e w_0 de [71] é

$$w_0 = \begin{bmatrix} y_{.1.} - (3\bar{y}_{1..} + 3\bar{y}_{2..} + 2\bar{y}_{3..}) \\ y_{.2.} - (2\bar{y}_{1..} + 3\bar{y}_{2..} + 3\bar{y}_{3..}) \\ y_{11.} - 3\bar{y}_{1..} \\ y_{12.} - 2\bar{y}_{1..} \\ y_{21.} - 3\bar{y}_{2..} \\ y_{22.} - 3\bar{y}_{2..} \\ y_{31.} - 2\bar{y}_{3..} \\ y_{32.} - 3\bar{y}_{3..} \end{bmatrix}$$

O termo final para [66]

$$w_0 = y'Sy = x'x \quad [72]$$

é a soma de quadrados total dos x 's, isto é, soma de quadrados dentro das células dos y 's para as k células dos fatores fixos,

$$\text{e, no exemplo é } w_0 = \sum_{p=1}^3 \sum_{q=1}^2 \sum_{r=1}^{n_{pq}} (y_{pqr} - \bar{y}_{p..})^2.$$

Tendo calculado W_{oo} , w_o e w_o para W_o de [66], M^{-1} exigida para W em [68] vem de [65] e [66] como

$$M = D^{-1} + W_{oo} \quad [73]$$

Então, a matriz e termos dos vetores de W são

$$W_{oo} - W_{oo} M^{-1} W_{oo} = D^{-1} - D^{-1} M^{-1} D^{-1}$$

e

$$w_o - W_{oo} M^{-1} w_o = D^{-1} M^{-1} w_o, \quad [74]$$

o termo escalar $w_o - w_o' M^{-1} w_o$ permanece como está.

Como THOMPSON apontou, as vantagens do lado direito de [74] sobre o esquerdo, consistem na multiplicação de M^{-1} pela diagonal, em vez de matrizes simétricas. Com essas expressões, a implementação da técnica iterativa pode ser executada exatamente como HEMMERLE & HARTLEY (1973) sugeriram.

Primeiro, calcula-se W_{oo} , para os dados, utilizando [69]-[72]. Então, atribuímos um conjunto inicial de valores aos γ_i 's, $i=1, \dots, c$, e utilizando-os em D de [63], obtém-se M de [73] e calcula-se M^{-1} . Então, utiliza-se M^{-1} em [74] e [68] para obter W . Os elementos de W são então utilizados em [58], [59] e [60] para obter, pelo procedimento de Newton-Raphson, soluções das equações formadas igualando [53] e [54] a zero. Para cada iteração, D de [63] altera e, portanto, M de [73] também troca; consequentemente, por [74] mudam os termos de W .

Para o exemplo utilizado em 3.2.2, foi desenvolvida uma rotina para o módulo CM (Cálculo de Matrizes) do

programa SOC (Software Científico), cujos resultados, após 5 iterações, coincidiram com aqueles obtidos através dos pacotes BMDP (Biomedical Package) e SAS (Statistical Analysis System), conforme podemos verificar nos Apêndices 1, 2 e 3.

3.2.4.3. Estimação dos Efeitos fixos

No modelo descrito em [39] e [40], os estimadores de máxima verossimilhança para μ , assumindo H conhecida é

$$\hat{\mu} = (X' H^{-1} X)^{-1} X' H^{-1} y \quad [75]$$

onde de [61]

$$H^{-1} = (I + U D U')^{-1} = I - U (D^{-1} + U' U)^{-1} U'$$

Ao substituir os γ_i em D^{-1} por seus estimadores de MVR e notando o valor correspondente de H por $\tilde{H}$, um estimador de μ sugerido por [75] é

$$\mu = (X' \tilde{H}^{-1} X)^{-1} X' \tilde{H}^{-1} y \quad [76]$$

O desenvolvimento do estimador da matriz de covariâncias envolve o reconhecimento de que $\tilde{H}$ é somente um estimador de H . Ignorando esta complexidade vem:

$$\text{Var}(\mu) = (X' \tilde{H}^{-1} X)^{-1} X' \tilde{H}^{-1} \tilde{H} \tilde{H}^{-1} X (X' \tilde{H}^{-1} X)^{-1} \sigma^2$$

e ao utilizar novamente $\tilde{H}$ e $\tilde{\sigma}^2$ em lugar de H e σ^2 temos um estimador para sua variância dado por

$$\tilde{\text{Var}}(\mu) = (X' \tilde{H}^{-1} X)^{-1} \tilde{\sigma}^2$$

Não são conhecidas propriedades ótimas para este estimador ou para sua matriz de covariância, mas sabe-se, como pode ser prontamente observado, que $\hat{\mu}$ maximiza λ_2 de [52], para H conhecida.

4. ILUSTRAÇÃO DOS MÉTODOS E DISCUSSÃO

Para complementar e ilustrar os métodos, são apresentados três exemplos numéricos.

O Exemplo 1 é uma aplicação do procedimento de MVR descrito em 3.2.

Os Exemplos 2 e 3 têm problema de estimativas negativas para componentes de variância e, aqui, discute-se alternativas de solução, através dos métodos apresentados no presente trabalho.

4.1. Exemplo 1

A Tabela 8 mostra as estimativas dos componentes de variância para o modelo de classificação cruzada dupla que ilustrou 3.2. para dados não balanceados. Considera-se também os resultados para dados balanceados. Os programas e resultados obtidos pela SAS para MVR e MV encontram-se nos Apêndices 3 a 6.

É conveniente notar que neste exemplo não existe problema de estimativa negativa para os componentes de variância e, portanto, os resultados da Tabela 8 para a Análise de Variância dizem respeito ao método tradicional, isto é, não se referem a modelo com população finita.

Tabela 8: Estimativas dos componentes de variância

Método de estimação	Estimativa de		
	$\gamma_1 = \sigma_{\beta}^2 / \sigma^2$	$\gamma_2 = \sigma_{\alpha\beta}^2 / \sigma^2$	σ^2
Dados balanceados ($n_{pq} = 3$)			
ANOVA	21,55	0,32	69,78
MV	10,81	0	69,51
MVR	21,55	0,32	69,78
Dados não balanceados			
ANOVA	18,42	0,35	78,63
MV	9,33	0	77,53
MVR	18,57	0,34	78,64

Os resultados sugerem três comentários.

Primeiro, para dados balanceados os estimadores de MVR e ANOVA são idênticos, sugerindo que isto geralmente ocorra para dados desta natureza, desde que não exista problema de estimativa negativa para os componentes de variância. CORBEIL & SEARLE (1976b) que estudaram quatro casos de dados balanceados (esquema de classificação simples, hierárquico duplo e cruzada dupla com um fator tratado como fator de efeitos fixos, ambos com e sem interação) encontraram o mesmo resultado.

Segundo, o estimador de MV para γ_2 é zero, significando que o estimador para o componente de variância da interação $\sigma_{\alpha\beta}^2$ é também zero. Isto é uma consequência do algoritmo de cálculo; quando o valor calculado do estimador de MV é negativo, ele é tomado igual a zero. A consequência

disso é importante: implica não exatamente que o componente de variância está sendo estimado por zero, mas que o fator correspondente a esse componente (neste caso, o fator interação) não deve pertencer ao modelo e assim o modelo deve ser trocado para excluí-lo. Com a troca de modelo os outros componentes de variância são então estimados. Isto justifica o estimador σ^2 de MV ser diferente do obtido por ANOVA, no caso de dados balanceados, e diferente do estimador de constantes ajustadas no caso de dados não balanceados. Tendo em vista o fato de que, para dados balanceados os estimadores de ANOVA são conhecidos por terem desejáveis propriedades de mínima variância, e desde que, nesses dados, o estimador de ANOVA de $\sigma^2_{\alpha/\beta} = (0.32)(69.78) = 22.32$ está longe de ser zero, a solução apresentada na estimação de MV de eliminar o fator interação do modelo parece radical. A mesma situação ocorre em dados não balanceados, embora os estimadores de constantes ajustadas não têm propriedades de variância mínima como os estimadores de ANOVA em dados balanceados. Todavia, a estimação de MV para esses dados também elimina o fator interação. Em nenhum caso, a estimação de MVR faz isto.

Uma terceira característica desses resultados é que a estimativa de MV de $\gamma_1 = \sigma^2_{\beta} / \sigma^2$ em ambos os dados, balanceados e não balanceados, está muito próxima da metade daquela obtida pelos estimadores de MVR e ANOVA ou estimador das constantes ajustadas. Isto não é propriamente uma consequência da troca de modelo surgida da estimativa

negativa de γ_2 , já referida; isto também ocorre no próprio modelo com interação. Em ambos os casos, para dados balanceados, os divisores das soluções das equações de MV são os graus de liberdade, isto é, b (número de colunas), enquanto que para MVR é $b-1$. O efeito disto é a troca do estimador aproximadamente na razão $(b-1)/b$ que é igual a $1/2$ neste caso, pois $b=2$. Um efeito similar ocorre com dados não balanceados.

4.2. Exemplo 2

Para comparar o método apresentado em 3.1 e o método da MVR, foi criada uma situação de classificação cruzada dupla em que surge o problema de estimativa negativa. A partir dos dados de McHUGH & MIELKE (1968) que ilustraram 2.3, construiu-se a Tabela 9, onde constam as observações.

Tabela 9: Dados referentes a uma classificação dupla com duas observações por célula

FATOR A	FATOR B		
	1	2	3
1	1059	1237	949
	980	1040	760
2	1245	1341	1332
	1480	1560	1490
3	1283	1078	1129
	950*	980	975
4	1101	988	1262
	920	790*	1040

O modelo para y_{ijk} , k-ésima observação da i-ésimo nível de A e j-ésimo nível de B é

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + e_{ijk}$$

para

$$i = 1,2,3,4; \quad j = 1,2,3 \quad e \quad k = 1,2;$$

onde

μ média geral;

α_i é o efeito aleatório devido ao i-ésimo nível do fator A;

β_j é o efeito aleatório devido ao j-ésimo nível do fator B;

$(\alpha\beta)_{ij}$ é o efeito aleatório da interação e

e_{ijk} é o erro associado à observação y_{ijk} .

As estimativas dos componentes de variância foram realizadas através do Método da Análise de Variância, do método descrito em 3.1 e da MVR, para dados balanceados e também para dados não balanceados, a partir da retirada das observações assinaladas com *.

Os resultados da Análise de Variância, obtidos pelo SAS, se encontram na Tabela 10 e das estimativas dos componentes de variância na Tabela 11.

Tabela 10. Análise de Variância.

DADOS BALANCEADOS				
C.V.	g.l.	Q.M.	EC(Q.M.)	
A	3	219767,49	$\sigma_e^2 + 2 \sigma_{\alpha\beta}^2 + 6 \sigma_\alpha^2$	
B	2	260,54	$\sigma_e^2 + 2 \sigma_{\alpha\beta}^2 + 8 \sigma_\beta^2$	
A*B	6	27600,99	$\sigma_e^2 + 2 \sigma_{\alpha\beta}^2$	
Resíduo	12	19765,79	σ_e^2	
Total	23			

DADOS NÃO BALANCEADOS				
C.V.	g.l.	Q.M.	EC(Q.M.)	
A	3	194636,08	$\sigma_e^2 + 1,897 \sigma_{\alpha\beta}^2 + 0,0788 \sigma_\beta^2 + 5,4848 \sigma_\alpha^2$	
B	2	4166,21	$\sigma_e^2 + 1,8625 \sigma_{\alpha\beta}^2 + 7,2 \sigma_\beta^2$	
A*B	6	25832,70	$\sigma_e^2 + 1,7792 \sigma_{\alpha\beta}^2$	
Resíduo	10	16214,30	σ_e^2	
Total	21			

Tabela 11: Estimativas dos componentes de variância.

MÉTODO	DADOS BALANCEADOS			
	σ_α^2	σ_β^2	$\sigma_{\alpha\beta}^2$	σ_e^2
Análise de Variância	32027,75	-3417,56	3917,60	19765,79
População Finita	39694,69	32,57	13800,49	19765,79
MVR	33167,22	0	500,21	19765,64

DADOS NÃO BALANCEADOS				
	σ_α^2	σ_β^2	$\sigma_{\alpha\beta}^2$	σ_e^2
Análise de Variância	30704,31	-3071,85	5406,17	16214,30
População Finita	35208,99	306,51	13513,18	16214,30
MVR	29755,68	0	1746,48	16674,23

É importante ressaltar que os resultados para MVR foram obtidos através do procedimento VARCOMP do programa SAS, visto que o procedimento descrito em 3.2 exige que o modelo seja misto. O SAS utiliza as estimativas iniciais obtidas pelo MIVQUE0 e um procedimento iterativo até a convergência é alcançado através da função objetivo de log-verossimilhança da parte da verossimilhança que não contém os efeitos fixos. Como valores iniciais do processo iterativo o programa utiliza $\hat{\sigma}_e^2 = 1$ e os demais primeiros valores iguais a zero, o que simplifica as expressões do MIVQUE e então os cálculos exigidos.

Observou-se que a estimativa de σ_β^2 resultou negativa em ambos os dados (balanceados e não balanceados). No entanto, a estimativa supondo população finita corrigiu este problema, admitindo-se $N_A = 4$, $N_B = 3$ e $N_e = 2$, enquanto que a estimativa de MVR apresentou valor zero para o parâmetro em discussão. SWALLOW & MONAHAN (1984) ressaltam que os estimadores de MVR são por definição não negativos. Entretanto, valores negativos podem surgir no processo iterativo e, se utilizados, podem ocasionar matrizes singulares ou próximas da singularidade que afetam os cálculos, fazendo com que as estimativas sejam zeradas. Para este caso, é mais aconselhável efetuar a troca de modelo de população infinita para população finita.

4.3. Exemplo 3

Reportando-se, novamente, ao exemplo de McHUGH & MIELKE (1968) apresentado em 2.3 e, considere-se, além do modelo proposto naquela seção ($y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij}$), o seguinte:

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

onde

α_i é o efeito fixo devido ao i -ésimo nível do fator A;

β_j é o efeito aleatório devido ao j -ésimo nível do fator B;

e_{ij} é o erro associado à (ij) -ésima observação.

A Análise de Variância obtida pelo SAS, para o modelo misto está na Tabela 12 e as estimativas dos componentes de variância, para ambos os modelos, na Tabela 13.

Tabela 12: ANÁLISE DE VARIÂNCIA

C.V.	g.l.	Q.M.	EC(Q.M.)
A	3	29116,22	$\sigma_e^2 + \sum \alpha_i^2$
B	2	124,00	$\sigma_e^2 + 4 \sigma_\beta^2$
Resíduo	6	18053,22	σ_e^2
Total	11		

Tabela 13: Estimativas dos componentes de variância

Método	Modelo	$y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij}$		$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + e_{ij}$	
		σ_α^2	σ_e^2	σ_β^2	σ_e^2
Análise de Variância		-5404,22	21740,89	-4482,31	18053,22
População Finita		31,00	21740,89	31,00	18053,22
MVR		0,0000019	17810,55	0,00000151	13570,92

Para os dados analisados, em ambos os modelos, pode-se constatar que as estimativas para os componentes de variância resultaram em valores positivos, tanto no método da População Finita como da MVR.

Observou-se que as estimativas de σ_e^2 obtidas através do método da MVR diferiram consideravelmente das estimativas obtidas pelo método da Análise de Variância, o que causa certa estranheza já que isto não se verifica de forma tão acentuada nos demais exemplos. HENDERSON (1986) constatou que estimativas por MVR dependem da matriz de incidências, dos valores básicos dos parâmetros e dos algoritmos utilizados, e a convergência pode ou não ocorrer no espaço dos parâmetros. De modo que não se pode estar certo se a solução é um máximo global ou meramente um máximo local. Consequentemente, não se pode ter certeza de que a estimativa seja na verdade MVR.

A rotina para o módulo CM do SOC (Apêndice 7) foi adaptada para estes dados, considerando o modelo misto, para estimar γ . Verificou-se que as estimativas não convergem, independentemente do valor inicial utilizado para γ , pois à medida em que aumenta o número de iterações, o determinante da matriz W se aproxima de zero.

Segundo HEMERLE & HARTLEY (1973), embora não esteja associado a um método numérico particular, a transformação W está implementada em conjunto com o método modificado de Newton-Raphson no qual os componentes de variância

tem a restrição de não serem negativos e, portanto, o procedimento descrito em 3.2 não é adequado para essa situação.

4.4. Discussão

O método para População Finita em modelos aleatórios, que são de maior interesse para estimativas de componentes de variância, fornece estimativas positivas para esses componentes, no caso de dados balanceados e não balanceados, desde que as condições para suposição de população finita sejam satisfeitas.

No caso de modelos mistos, o procedimento se aplica apenas ao quadrado médio que não contém termos de efeitos fixos. Para dados balanceados, o procedimento é similar ao caso de modelos aleatórios. Para dados não balanceados, os componentes de variância são estimados igualando cada redução nas somas de quadrados calculadas pelo Método 3 de Henderson ao seu valor esperado sob o modelo completo, efetuando as respectivas substituições dos termos de população infinita para população finita.

No caso do procedimento de MVR adotado no presente trabalho, sabe-se que não foi desenvolvido tendo como objetivo específico resolver o problema de estimativas negativas para componentes de variância, já que nestas situações a matriz de transformação W tende a ser singular, o que implica na não convergência dos estimadores.

Além disso, este procedimento não se aplica a modelos aleatórios, pois a matriz X , que se refere aos efeitos fixos do modelo, desaparece, mas é adequado para modelos mistos, com ou sem interações. No entanto, o método da MVR pode também ser utilizado em modelos aleatórios, desde que o procedimento de cálculo o permita, como é o caminho utilizado pelo SAS.

O procedimento VARCOMP do SAS, que utiliza as estimativas iniciais do MIVQUE0, força a não negatividade para a estimação dos componentes de variância, o que significa que qualquer estimativa negativa para σ_a^2 é tomada como zero (as estimativas de σ_e^2 são sempre não negativas). Impor a não negatividade transgride a teoria da estimação do MIVQUE, desde que as estimativas negativas devem ser permitidas a fim de manter a não tendenciosidade, mas isto está de acordo com a prática comum, na qual o uso virtual sempre toma as estimativas negativas como zero, pelo menos quando se estimam componentes de variância individualmente. Ao forçar a não negatividade, perde-se a não tendenciosidade dos estimadores de MIVQUE0.

Como os resultados obtidos pelo SAS também podem conduzir a estimativas não satisfatórias para os componentes de variância, sugere-se que para uma vasta utilização do método da MVR sejam desenvolvidos novos procedimentos e algoritmos de cálculo.

Observou-se que, mesmo se tratando de dados balanceados, em situações em que ocorrem estimativas negati-

vas para os componentes de variâncias, pelo método da Análise de Variância, as estimativas da MVR não coincidem, pois podem não convergir ou serem assumidas como zero, o que contraria CORBEIL & SEARLE (1976).

Para solucionar o problema, sugere-se supor a população finita e calcular as estimativas dos componentes de variância pelo método da população finita, com os devidos cuidados.

5. CONCLUSÕES

O método para População Finita soluciona o problema de estimativas negativas para componentes de variância em modelos aleatórios ou mistos, no caso de dados balanceados e não balanceados, desde que as condições para suposição de população finita sejam satisfeitas.

O método da MVR, neste trabalho, foi utilizado como uma tentativa para solucionar o problema de estimativas negativas para componentes de variância, já que, estruturalmente, apresenta propriedades desejáveis. No entanto, constatou-se que o método pode não funcionar adequadamente em algumas situações e, conseqüentemente, deve ser aplicado com certa cautela.

Convém ressaltar que em situações em que ocorrem estimativas negativas dos componentes de variância através do Método de Análise de Variância, as estimativas e MVR podem não convergir ou serem zeradas, dependendo do procedimento adotado para cálculo. Isto acontece por falha dos algoritmos de cálculo que conduzem a matrizes não singulares ou próximas da singularidade, prejudicando a convergência dos estimadores. Em vista disso, conclui-se que uma utilização mais ampla do método da MVR depende basicamente do de-

seenvolvimento de procedimentos e algoritmos mais eficientes.

Neste caso, sugere-se supor a população finita e aplicar o método descrito em 3.1 com os respectivos cuidados.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, C.R. & BANCROFT, T.A. *Statistical Theory in Research*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1952. 399p.

ANDERSON, T.W. Asymptotically efficient estimation of covariance matrices with linear structure. *Annals of Mathematical Statistics*, Baltimore, 1: 135, 1973.

BASSON, R.P. A comparison of variances of some estimators in the balanced incomplete block (BIB) variance components model. *Biometrics*, Richmond, 26: 657-669, 1970.

BENNETT, C.A. & FRANKLIN, N.L. *Statistical analysis in chemistry and the chemical industry*. Wiley, N.Y., 1954, 724p.

BEZERRA, R.C.F. O problema de estimativas negativas. São Paulo, 1976. (Mestrado - Instituto de Matemática e Estatística/USP). 68p.

BOWKER, A.H. & LIEBERMAN, G.J. *Engineering Statistics*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1963, 585 p.

CIÓL, M.A. Métodos de estimação de componentes de variância em modelos mistos. Campinas, 1982. (Mestrado - UNICAMP). 126p.

CORBEIL, R.R. & SEARLE, S.R. A comparison of variance components estimators. *Biometrics*, Raleigh, 32: 779-791, 1976a.

- CORBELL, R.R. & SEARLE, S.R. Restricted maximum likelihood (REML) estimation of variance components in the mixed model. *Technometrics*, Richmond, 18: 31-38, 1976b.
- CORNFIELD, J. & TUKEY, J.W. Average values of mean squares in factorials. *Annals of Mathematical Statistics*, Baltimore, 27: 907-49, 1956.
- DEMPSTER, A.P.; LAIRD, N.M.; RUBIN, D.B. Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B*. London, 39: 1, 1977.
- GAYLOR, D.W. & HARTWELL, T.D. Expected mean squares for nested classifications. *Biometrics*, Raleigh, 25: 427-30, 1969.
- GIANOLA, D. & FERNANDO, R.L. Bayesian methods in animal breeding theory. *Journal of Animal Science*, 63: 217, 1986.
- GONÇALVES, N.M. Comparação de diversas metodologias para a análise de um delineamento aumentado com tratamentos fixos e aleatórios. Brasília, 1984. (Mestrado - UnB).
- GRAYBILL, F.A. *Introduction to Matrices with Applications in Statistics*. California, Wadsworth Publishing Co., 1969. 372p.
- HARVILLE, D.A. Maximum likelihood approaches to variance components estimation and to related problems. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 320-340, 1977a.
- HARVILLE, D.A. Maximum likelihood variance component estimation and related problems. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 72: 320, 1977b.

- HARTLEY, H.O. & RAO, J.N.K. Maximum-likelihood estimation for the mixed analysis of variance model. *Biometrika*, London, 54: 93-108, 1967.
- HAYMAN, B.I. Maximum likelihood estimation of genetic components of variation. *Biometrics*, Raleigh, september, 1960. p. 369-381.
- HEMMERLE, W.J. & HARTLEY, H.O. Computing Maximum Likelihood estimates for the mixed A.O.V. model using the W Transformation. *Technometrics*, vol. 15, 4: 819-831, 1973.
- HENDERSON, C.R. Estimation of variance and covariance componentes. *Biometrics*, Raleigh, 9: 226-252, 1953.
- HENDERSON, C.R. Applications of linear models in animal breeding. Guelph, Ont, 1984a.
- HENDERSON, C.R. Estimation of variances and covariances under multiple trait models. *Journal of Dairy Science*, 67: 1581, 1984b.
- HENDERSON, C.R. Recent developments in variance and covariance estimation. *Journal of Animal Science*, 63: 208, 1986.
- HERBACH, L.H. Properties of model II type analysis of analysis of variance tests, A: optimum nature of the F-test for model II, in the balanced case. *Annals of Mathematical Statistics*. Ann Arbor, 30: 939-959, 1959.
- HILL, B.M. Inference about variance components in the one-way model. *Journal of the American Statistical Association*, Baltimore, 60: 806-25, 1965.
- HILL, W.G. & THOMPSON, R. Probabilities of nonpositive definite between group or genetic covariance matrices. *Biometrics*, Raleigh, 34: 429, 1978.

- HOCKING, R.R. The analysis of Linear Models. Cole Publishing Company, California, 1985.
- HOCHING, R.R. & HUTNER, M.H. Some analytical and numerical comparisons of estimators for the mixed A.O.V. model. *Bimetrics*, Raleigh, 31: 19-27, 1975.
- JENNRICH, R.I. & SAMPSON, P.F. Newton-Raphson and related algoritms for maximum likelihood variance component estimation. *Technometrics*, vol. 18, 1: 11-17, 1976.
- KLOTZ, J.H.; MILTON, R.C.; ZACKS, S. Mean square efficiency of estimators of variance components. *Journal of the American Statistical Association*, Boston, 64: 1383-1402, 1969.
- KLOTZ, J. & PUTTER, J. Maximum likelihood estimation of multivariate covariance components for the balanced one-way layout. *The Annals of Mathematical Statistics*, vol. 40, 3: 1100-1105, 1969.
- LAMOTTE, L.R. On non-negative quadratic unbiased estimation of variance components. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 68: 728-30, 1973.
- LOW, L.Y. Estimators of variance components in the balanced incomplete block design. *Journal of the American Statistical Association*, Boston, 64: 1014-1030, 1969.
- MATHER, K. *Biometrical Genetics*. London, Methuen and Co. Ltd., 1949. 162p.
- McHUGH, R.B. & MIELKE, P.W. Jr. Negative variance estimates and statistical dependence in nested sampling. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 63: 1000-3, 1968.

- MEYER, K. Maximum likelihood procedures for estimating genetic parameters for later lactations of dairy cattle. *Journal of Dairy Science*, 66: 1988, 1983.
- MEYER, K. Maximum likelihood estimation of variance components for a multivariate mixed model with equal design matrices. *Biometrics*, Raleigh, 41: 151, 1985.
- MEYER, K. Between algorithms: A "short cut" restricted maximum likelihood procedure to estimate variance components. *Journal of Dairy Science*, 69: 1904, 1986.
- MILLER, J.J. Asymptotic properties and computation of maximum likelihood estimates in the mixed model of the analysis of variance. Technical Report, Stanford University, 12, 1973.
- NELDER, J.A. Statistical methods in biometrical genetics. *Heredity*, 7: 111-19, 1953.
- OLSEN, A.; SEELY, J.; BIRKES, D. Invariant Quadratic Unbiased estimation for two variance components. *Annals of Statistics*, 4: 878-90, 1976.
- PATTERSON, H.D. & THOMPSON, R. Recovery of interblock information when block sizes are unequal. *Biometrika*, Cambridge, 58: 545-554, 1971.
- PEREIRA, C. Método para contornar o problema de estimativas negativas em componentes de variância. Piracicaba, 1983. (Mestrado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP). 59p.
- PERES, C.A. & SALDIVA, C.D. Planejamento de Experimentos. 5^o SINAPE, SP., 1982.

- PRESS, S. J. **Applied Multivariate Analysis: using Bayesian and frequentist methods of inference.** 2.ed., Flórida, Robert E. Krieger Publishing Co., 1982. 600p.
- RAO, C. R. Estimation of heteroscedastic variances in linear models. **Journal of the American Statistical Association**, Boston, 65: 161-172, 1970.
- RAO, C. R. Estimation of variance and covariance components - MINQUE theory. **Journal of Multivariate Analysis**, New York, 1: 257-275, 1971a.
- RAO, C. R. Minimum variance quadratic unbiased estimation of variance components. **Journal of Multivariate Analysis**, New York, 1: 4445-456, 1971b.
- RAO, C. R. Estimation of variance and covariance components in linear models. **Journal of the American Statistical Association**, Boston, 67: 112-115, 1972.
- RUSSEL, T. S. & BRADLEY, R. A. One-way variances in a two-way classification. **Biometrika**, Cambridge, 45: 111-129, 1958.
- SAHAI, H. & THOMPSON, W. O. Non-negative maximum likelihood estimators of variance components in a simple linear model. **The American Statistical**, 27: 112-113, 1973.
- SCHAEFFER, L. R.; WILTON, J. W.; THOMPSON, R. Simultaneous estimation of variance and covariance components from multitrait mixed model equations. **Biometrics**, Raleigh, 34: 199, 1978.
- SEARLE, S. R. & FAWCETT, R. F. Expected mean square in variance components models having finite populations. **Biometrics**, Raleigh, 26: 243-54, 1970.

- SEARLE, S.R. Another look at Henderson's methods of estimating variance components. *Biometrics*, Richmond, 24: 749-787, 1968.
- SEARLE, S.R. Large sample variances of maximum likelihood estimators of variance components using unbalanced data. *Biometrics*, Raleigh, september 1970: 505-524, 1970.
- SEARLE, S.R. *Linear Models*. John Willey & Sons, New York, 1971a. 531p.
- SEARLE, S.R. Topics in variance component estimation (invited paper). *Biometrics*, Raleigh, 27: 1-76, 1971b.
- SERAPHIN, J.C. Comparação numérica de três estimadores de componentes de variância em alguns modelos genético-estatísticos de cruzamento. (Mestrado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP). 74p. 1984.
- SILVA, J.C. & HALLAUER, A.R. Estimation of epistatic variance in Iowa Stiff Stalk Synthetic Maize. *Journal of Heredity*, Washington, 66: 290-296, 1975.
- SWALLOW, W.H. & MONAHAN, J.F. Monte Carlo comparison of ANOVA, MINQUE, REML and ML estimators of variance components. *Technometrics*, vol.26, 1: 47-57, 1984.
- THOMPSON, W.A., Jr. The problem of negative estimates of variance components. *The Annals of Mathematical Statistics*, Baltimore, 33: 273, 1962.
- THOMPSON, R. The estimation of variance and covariance components with an application when records are subject to culling. *Biometrics*, Raleigh, 29: 257, 1973.

TIAO, G.C. & TAN, W.Y. Bayesian analysis of random-effect models in the analysis of variance I. Posterior distribution of variance components. *Biometrika*, London, 52: 37-53, 1965.

VALENTE, J. Multiple trait variance-covariance component estimation procedures with missing information for some traits. Ames, Iowa, 1988. (Doutorado - Iowa State University). 143p.

VALÉRIO FILHO, W.V. Métodos de Henderson para componentes de variância de dados não balanceados. Piracicaba, 1983. (Mestrado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP). 137p.

WILK, M.B. & KEMPTHORNE, O. Some aspects of the analysis of factorial experiments in a completely randomized design. *Annals of Mathematical Statistics*, Baltimore, 27: 950-85, 1956.

APÊNDICES

APÊNDICE 1

Rotina para o módulo CM do programa SOC:

```

                                Exemplos com n = 16.
cm
y={237 254 246 178 179 208 178 187 146 145 141 186 183 142
  125 136}';imprime y;
b={1 1 1 1 1 2 2 2 2 2 3 3 3 3}';imprime b;
x=delin(b);
imprime x;
u1={1 0,1 0,1 0,0 1,0 1,1 0,1 0,0 1,0 1,0 1,1 0, 1 0,0 1,0 1,0 1};
imprime u1;
u2={ 1 0 0 0 0 0,1 0 0 0 0 0,1 0 0 0 0 0,0 1 0 0 0 0,0 1 0 0 0 0,
      0 0 1 0 0 0,0 0 1 0 0 0,0 0 1 0 0 0,0 0 0 1 0 0, 0 0 0 1 0 0,0 0 0 1 0 0,
      0 0 0 0 1 0,0 0 0 0 1 0,0 0 0 0 1 0,0 0 0 0 1 0,0 0 0 0 1 0};
imprime u2;
teta0={22,0.35};imprime teta0;
tetal=teta0[1,];imprime tetal;
teta2=teta0[2,];imprime teta2;
s=ident(16) -x*inv(x'*x)*x';imprime s;
t=s[1:4 6:10 12:15,];imprime t;
inter=1;imprime inter;
cond=1;imprime cond;
enquanto (inter <=20 && cond >.0001){
    h=tetal*ui*ui' + teta2*u2*u2' +ident(16);
    a=t'*inv(t*h*t')*t;
imprime h;imprime a;
w={u1'*a*ui u1'*a*u2 u1'*a*y,u2'*a*ui u2'*a*u2 u2'*a*y,y'*a*ui y'*a*u2 y'*a*y};
imprime w;

den=13;
sigma=inv(den)*w[9,];imprime sigma;
st1=(-0.5)*traco(w[1:2,1:2]) +(0.5*inv(sigma))*w[1:2,9]'*w[1:2,9];
st2=(-0.5)*traco(w[3:8,3:8]) +(0.5*inv(sigma))*w[3:8,9]'*w[3:8,9];

v12=(0.5)*traco(w[1:2,3:8]*w[1:2,3:8]') -w[1:2,9]'*w[1:2,3:8]*w[3:8,9]*(inv(sigma));
v11=(0.5)*traco(w[1:2,1:2]*w[1:2,1:2]') -w[1:2,9]'*w[1:2,1:2]*w[1:2,9]*(inv(sigma));
v22=(0.5)*traco(w[3:8,3:8]*w[3:8,3:8]') -w[3:8,9]'*w[3:8,3:8]*w[3:8,9]*(inv(sigma));

v={ v11 v12,
    v12 v22};IMPRIME V;
st={st1,st2};IMPRIME ST;
tetas=teta0 -inv(v)*st;
cond=sqrt(squad(tetas- teta0)*inv(squad(teta0)));imprime cond;
imprime tetas;
teta0=tetas;
tetal=teta0[1,];
teta2=teta0[2,];
imprime inter;
inter=inter +1;
}
n=tetal*ui*ui' + teta2*u2*u2' +ident(16);
imprime h;
imprime sigma;
fim;

```

Resultados:

ESTIMATIVAS			
ITERAÇÕES	σ_e^2	γ_a^2	γ_b^2
1	77,7747	17,5693	0,3520
2	78,9207	18,5533	0,3412
3	78,8613	18,5688	0,3417
4	78,8468	18,5723	0,3419
5	78,8434		

APENDICE 2

Programa BMDP para MVR.

PAGE 1 BMDP3V
 BMDP3V - GENERAL MIXED MODEL ANALYSIS OF VARIANCE
 BMDP STATISTICAL SOFTWARE, INC.
 1964 WESTWOOD BLVD. SUITE 202
 LOS ANGELES, CA 90025
 (213) 475-5700
 PROGRAM REVISED FOR PC VERSION MAY 1984
 MANUAL REVISED -- 1983
 COPYRIGHT (C) 1983 REGENTS OF UNIVERSITY OF CALIFORNIA

TO SEE REMARKS AND A SUMMARY OF NEW FEATURES FOR
 THIS PROGRAM, STATE NEWS. IN THE PRINT PARAGRAPH.

01/01/80 AT 06:22:29

PROGRAM CONTROL INFORMATION

/problem title is 'fornoine'.
 /input variables are 5.
 format is free.
 /variable names are temp, forn, tf, rep, y.
 /group codes(1) are 1,2,3.
 codes(2) are 1,2.
 codes(3) are 1,2,3,4,5,6.
 /design dependent is y.
 fixed is temp.
 fname is temp.
 random is forn.
 rname is forn.
 random is tf.
 rname is tf.
 method=reml.
 /end

DEPENDENT VARIABLE y

PARAMETER	ESTIMATE	STANDARD DEVIATION	EST/ST. DEV.
ERR. VAR.	78.8423898183	35.3510805526	
CONSTANT	179.9779124688	27.2342934660	6.6085028648
temp	32.8413865017	4.4142006045	7.4399399757
temp	-12.4779124687	4.2890998948	-2.9092147350
forn	1464.3672751422	2098.0233913162	

APENDICE 3

Procedimento VARCOMP para MVR

Exemplo 1 com $n = 16$.

```

I PROGRAM EDITOR#####;
:Command ==>
:
:00001 data a; /*hemmerle temp(f) forno(a1) interac incomp1*/
:00002   input a b y @@;
:00003   cards;
:00004 1 1 237 1 1.254 1 1 246
:00005 1 2 178 1 2 179
:00006 2 1 208 2 1 178 2 1 187
:00007 2 2 146 2 2 145 2 2 141
:00008 3 1 186 3 1 183
:00009 3 2 142 3 2 125 3 2 136
:00010 ;
:00011 proc varcomp method=reml;
:00012   class a b;
:00013   model y=a*b / fixed=1;
:00014 run;
:00015
:00016
:00017
:00018
:00019
:00020
:00021
#####ZOOM#####
:OUTPUT#####;
:Command ==>
:
:
:          SAS      0:05 Thursday, September 29, 1988;
:
:
:   Restricted Maximum Likelihood Variance Components Estimation Procedure
:
:Dependent Variable: Y
:
:
:Iteration      Objective      Var(B)      Var(A*B)      Var(Error)
:
:  0      63.41341449      1269.52701231      0.00000001      91.55811913
:  1      63.41285906      1274.06218033      0.00000006      91.52695138
:  2      63.41233642      1278.46760636      0.00000039      91.49690480
:  3      63.41184803      1282.71474020      0.00000246      91.46814787
:  4      63.41138725      1286.84429407      0.00001527      91.44037695
:  5      63.41095032      1290.85987878      0.00009504      91.41350988
:  6      63.41052358      1294.76232525      0.00059136      91.38727924
:  7      63.41003086      1298.53608905      0.00368041      91.36024796
:  8      63.40900595      1302.06419710      0.02292164      91.32367959
:  9      63.40454958      1304.59434764      0.14333359      91.22320277
: 10      63.37851777      1301.30706353      0.91936326      90.71312389
#####ZOOM#####

```

[illegible]

APÊNDICE 4

Procedimento VARCOMP para MV:

Exemplo 1 com $n = 16$.

```

PROGRAM EDITOR#####;
:Command ==>
:
:
:00001 data a; /*hammerle temp(f) forno(ai) interac incompl*/
:00002   input a b y @@;
:00003   cards;
:00004 1 1 237 1 1 254 1 1 246
:00005 1 2 178 1 2 179
:00006 2 1 208 2 1 178 2 1 187
:00007 2 2 146 2 2 145 2 2 141
:00008 3 1 186 3 1 183
:00009 3 2 142 3 2 125 3 2 136
:00010 ;
:00011 proc varcomp method=ml;
:00012   class a b;
:00013   model y=a*b / fixed=1;
:00014 run;
:00015
:00016
:00017
:00018
:00019
:00020
:00021
#####ZOOM#####
:OUTPUT#####;
:Command ==>
:
:
:          SAS      0:01 Thursday, September 29, 1988:
:
:
:          Maximum Likelihood Variance Components Estimation Procedure
:
:Dependent Variable: Y
:
:
:
:Iteration      Objective      Var(B)      Var(A*B)      Var(Error)
:
:  0      78.38503712      1031.49069751 8.25905697094E-9      74.39097179
:  1      78.27291305      794.73081143      0      76.56566052
:  2      78.26385061      735.78408555      0      77.35118963
:  3      78.26355058      724.9464210      0      77.51122694
:  4      78.26354717      723.82414198      0      77.52810692
:  5      78.26354712      723.68567767      0      77.53019360
:  6      78.26354712      723.68831643      0      77.53045530
:
:
:          Convergence criterion met.
:
:
#####ZOOM#####

```

APÊNDICE 5

Procedimento VARCOMP para MVR

Exemplo 1 com $n = 18$

```

I PROGRAM EDITOR#####;
:Command ==>
:
:
:00001 data a; /*hemerlei temp(f) forno(al) compl*/
:00002   input a b y @@;
:00003   cards;
:00004 1 1 237 1 1 254 1 1 246
:00005 1 2 178 1 2 179 1 2 183
:00006 2 1 208 2 1 178 2 1 187
:00007 2 2 146 2 2 145 2 2 141
:00008 3 1 186 3 1 183 3 1 192
:00009 3 2 142 3 2 125 3 2 136
:00010 ;
:00011 proc varcomp method=reml;
:00012   class a b;
:00013   model y=a*b / fixed=1;
:00014 run;
:00015
:00016
:00017
:00018
:00019
:00020
:00021
#####ZOOM#####
I OUTPUT#####;
:Command ==>
:
:
:          SAS      1:01 Thursday, September 29, 1988:
:
:2:
:
:   Restricted Maximum Likelihood Variance Components Estimation Procedure
:
:Dependent Variable: Y
:
:
:
:Iteration      Objective      Var(B)      Var(A*B)      Var(Error)
:
:  0      70.31219818      1503.35185185      22.53703704      69.77777778
:  1      70.31219818      1503.35185185      22.53703704      69.77777778
:
:          Convergence criterion met.
:

```


APÊNDICE 7

Rotina para o módulo CM do programa SOC:

Exemplo 3.

```

CM
y=(1059 1237 949 1245 1341 1332 1283 1078 1129 1101 988 1262)';
imprime y;
b=(1 1 1 2 2 2 3 3 3 4 4 4)';imprime b;
x=delin(b);
imprime x;
ui=(1 0 0,0 1 0,0 0 1,1 0 0,0 1 0,0 0 1,1 0 0,0 1 0,0 0 1,
    1 0 0,0 1 0,0 0 1);
imprime ui;
teta0=(1);imprime teta0;
s=ident(12) -x*inv(x'*x)*x';imprime s;
t=s[1:2 4:5 7:8 10:11,];imprime t;
inter=1;imprime inter;
cond=1;imprime cond;
    enquanto (inter <=10 && cond >.001){
        h=teta0*ui*ui' + ident(12);
        a=t'*inv(t*h*t')*t;
        imprime h;imprime a;
        w=(ui'*a*ui ui'*a*y,y'*a*ui y'*a*y);
        imprime w;
        den=8;
        sigma=inv(den)*w(4,4);imprime sigma;
        st=(-0.5)*traco(w[1:3,1:3]) +(0.5*inv(sigma))*w[1:3,4]*w[1:3,4];
        imprime st;
        v=(0.5)*traco(w[1:3,1:3]*w[1:3,1:3]') -w[1:3,4]*w[1:3,1:3]*w[1:3,4]*(inv(sigma));
        imprime v;
        d=det(v);IMPRIME D;
        tetas=teta0 -inv(v)*st;
        cond=sqrt(squad(tetas- teta0)*inv(squad(teta0)));imprime cond;
        imprime tetas;
        teta0=tetas;
        imprime inter;
        inter=inter + 1;
    }
h=teta0*ui*ui' + ident(12);
imprime h;
imprime sigma;
im;

```

Resultados:

ESTIMATIVAS		
ITERAÇÕES	σ^2	γ
1	13694,916667	-0,147511
2	13615,534555	-0,042639
3	13577,291168	0,167056
4	13588,499308	0,586424
5	13549,182308	1,425148
6	13544,543125	3,102590
7	13542,228312	6,457473
8	13541,072094	13,167236
9	13540,494282	26,586763
10	13540,205450	53,000000