MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO DE COMPONENTES DE VARIÂNCIA EM MODELOS MISTOS DESBALANCEADOS

SANDRA DENISEN DO ROCIO MARCELINO

Bacharel em Estatística

Orientador: Prof. Dr. **ANTONIO FRANCISCO IEMMA**

Dissertação apresentada à Escola Superior de
Agricultura “Luiz de Queiroz”, 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

Fevereiro - 2000

ERRATA			
10	3ª linha	dos quadrados médios	das esperanças dos quadrados médios
12	19ª linha	Particionando-se u	Particionando-se o vetor $\mathbf{u}$
13	2ª linha	Naturalmente	Analogamente
13	18ª linha	o método	um dos métodos
15	14ª linha	entre dois componentes de variância	entre variâncias
18	21ª linha	$E(s_i) = \dots = \text{tr} \left[\sum_{j=0}^r Z_j A_i Z_j' \right] \sigma_j^2$	$E(s_i) = \text{tr}(A_i V) = \text{tr} \left[A_i \sum_{j=0}^r Z_j Z_j' \sigma_j^2 \right]$ $= \text{tr} \left[\sum_{j=0}^r Z_j' A_i Z_j \sigma_j^2 \right]$
19	22ª linha	σ^2 é o vetor	$\sigma^2 = \left\{ \sigma_j^2 \right\}_{j=0}^r$ é o vetor
19	22ª linha	s um vetor	$s = \left\{ s_i \right\}_{i=0}^r$ é um vetor
20	4ª linha	$\sum_i J n (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_i J n \bar{y}_{i.}^2 - J n \bar{y}_{...}^2$	$\sum_i J n (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_i J n \bar{y}_{i..}^2 - J n \bar{y}_{...}^2$
20	6ª linha	$\sum_i n_i (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_i n_i \bar{y}_{i.}^2 - n_{..} \bar{y}_{...}^2$	$\sum_i n_i (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_i n_i \bar{y}_{i..}^2 - n_{...} \bar{y}_{...}^2$
24	18ª linha	constituem algumas	constituem em algumas
29	20ª linha	nomais e eficientes	normais e eficientes
31	8ª linha	$(p'_1 + \dots + p'_i) \sigma_i^2 = \sum_{i=0}^r p'_i \sigma_i^2 = p' \sigma^2$	$(p'_1 + p'_2 + \dots + p'_i) \sigma^2 = \sum_{i=0}^r p'_i \sigma_i^2 = p' \sigma^2$
31	10ª linha	impõem-se	impõe-se
36	1ª linha	visando uma	visando a uma
38	18ª linha	são consideradas	são considerados
51	3ª linha	Diz a literatura	Segundo Searle (1992)
60	15ª linha	como em (88)	como em (61)
56	2ª linha	método ML	método REML
61	17ª linha	disponíveis	disponíveis nos softwares estatísticos
66	6ª linha	AIC maior	AIC menor
71	5ª linha	superior	Inferior
71	14ª linha	superior	inferior
75	6ª linha	superior	inferior
76	12ª linha	superestimadas	superiores
76	13ª linha	subestimadas	inferiores
76	18ª linha	subestimadas	inferiores

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
DIVISÃO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - Campus "Luiz de Queiroz"/USP

Marcelino, Sandra Denisen do Rocio

Métodos de estimação de componentes de variância em modelos mistos
desbalanceados / Sandra Denisen do Rocio Marcelino. - - Piracicaba, 2000.
83 p.

Dissertação (mestrado) - - Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, 2000.
Bibliografia.

1. Análise multivariada 2. Análise de variância 3. Estatística aplicada 4. Modelo
matemático I. Título

CDD 519.535

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

A Deus,
pela determinação e coragem.

Ao Dinarte e Vinicius,
pela compreensão, apoio e estímulo.

Ao meus pais,
pelo carinho e apoio.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Antonio Francisco Iemma, pela paciência, profissionalismo, orientação, e principalmente pelas lições de vida.

Aos professores do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ/USP pelo apoio.

Aos funcionários do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ/USP pelos serviços prestados.

À Rosa e à Diva que me acolheram com carinho e me ajudaram a superar as maiores dificuldades.

À Iza pela amizade, estímulo e conselhos oportunos.

Aos meus colegas Afranio, Adilson, Maria Helena, Jeanete, Wilson, Idemauro e Christián, da turma de Mestrado, pela saudável convivência, pelos momentos de alegria, união e colaboração. Saudades!!

Aos demais colegas de outras turmas pela amizade.

Ao CNPQ pela bolsa concedida.

Ao Dinarte pela confiança, paciência, sempre presente, acreditando sempre em meu sucesso e ao Vinícius pelas horas de espera por carinho e atenção.

À minha família, em especial à minha irmã Silmara pela colaboração num período especial.

A todos aqueles que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

SUMÁRIO

	Página
LISTA DE TABELAS.....	vii
RESUMO.....	ix
SUMMARY.....	xi
1 INTRODUÇÃO.....	1
2 REVISÃO DE LITERATURA.....	5
3 METODOLOGIA.....	12
3.1 Introdução.....	12
3.2 Estimação.....	13
3.3 Predição dos efeitos aleatórios.....	15
3.4 Métodos de estimação de componentes de variância.....	17
3.4.1 Estimação com base no método dos momentos.....	17
3.4.1.1 Método da análise de variância: ANOVA.....	18
3.4.1.2 Método I de Henderson.....	19
3.4.1.3 Método II de Henderson.....	20
3.4.1.4 Método III de Henderson.....	22
3.4.2 Estimação com base na função de máxima verossimilhança.....	24
3.4.2.1 Método da máxima verossimilhança: ML.....	25
3.4.2.2 Método da máxima verossimilhança restrita: REML.....	27
3.4.3 Estimação com base em funções quadráticas.....	30
3.4.3.1 Estimador quadrático não-viesado de norma mínima: MINQUE.....	30
3.4.3.2 Estimador quadrático não-viesado de variância mínima: MIVQUE.....	32
3.4.3.3 Estimador quadrático não-viesado de norma mínima iterativo: I-MINQUE.....	33

3.4.4	Aspectos computacionais	34
3.4.5	Estruturas gerais da matriz de variâncias e covariâncias	35
4	ILUSTRAÇÃO DOS MÉTODOS APRESENTADOS.....	38
4.1	Considerações iniciais	38
4.2.	Matriz de variâncias e covariâncias do tipo VC.....	41
4.2.1	Métodos derivados da teoria dos momentos	41
4.2.1.1	Estimativas ANOVA.....	41
4.2.1.2	Estimativas do tipo Henderson 1	44
4.2.1.3	Estimativas do tipo Henderson 2	47
4.2.1.4	Estimativas do tipo Henderson 3	51
4.2.2	Métodos derivados da função de verossimilhança	54
4.2.2.1	Estimativas de máxima verossimilhança	54
4.2.2.2	Estimativas de máxima verossimilhança restrita	55
4.2.3	Métodos derivados da função quadrática	57
4.2.3.1	Estimativas quadráticas não-viesadas de norma mínima	57
4.2.3.2	Estimativas quadráticas não-viesadas de variância mínima	59
4.2.3.3	Estimativas quadráticas não-viesadas iterativas de norma mínima.....	60
4.2.4	Considerações sobre as estimativas obtidas.....	60
4.3	Matrizes mais gerais de variâncias e covariâncias	61
4.3.1	Estimativas de máxima verossimilhança	62
4.3.2	Estimativas de máxima verossimilhança restrita	66
4.3.3	Estimativas quadráticas não-viesadas de variância mínima	71
5	CONCLUSÕES.....	76
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	78

LISTA DE TABELAS

	Página
1 Estruturas da matriz de variâncias e covariâncias.....	37
2 Dados de um experimento com classificação dupla cruzada.....	40
3 Expressões das formas quadráticas e suas esperanças, para o modelo (44).....	42
4 Somas de quadrados e suas esperanças para o modelo (45)	43
5 Expressões das formas quadráticas e suas esperanças, para o modelo (44), considerando-se os efeitos como aleatórios.	44
6 Formas quadráticas e suas esperanças, para o modelo (45), considerando-se os efeitos como aleatórios.	46
7 Expressões das formas quadráticas e respectivas esperanças, para o modelo (44), considerando-se o vetor resposta ajustado para os efeitos fixos	49
8 Formas quadráticas e suas esperanças para o modelo (45), considerando-se o vetor resposta ajustado para os efeitos fixos.....	50
9 Esperança das somas de quadrados para o modelo 44	52
10 Somas de quadrados e respectivas esperanças para o modelo 45.....	53
11 Programa para o modelo misto com $G = VC$	62
12 Estimativas do tipo ML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = VC$	63
13 Estimativas do tipo ML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = TOEP(1)$	64
14 Estimativas do tipo ML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = CS$	65

15 Estimativas do tipo ML obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = HF$	65
16 Estimativas do tipo REML obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = VC$	67
17 Estimativas do tipo REML obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = TOEP(1)$	68
18 Estimativas do tipo REML obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = CS$	69
19 Estimativas do tipo REML obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = HF$	70
20 Estimativas do tipo MIVQUE(0) obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = VC$	72
21 Estimativas do tipo MIVQUE(0) obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = TOEP(1)$	72
22 Estimativas do tipo MIVQUE(0) obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = CS$	73
23 Estimativas do tipo MIVQUE(0) obtidas através do PROC SAS/MIXED	
considerando $G = HF$	74

MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO DE COMPONENTES DE VARIÂNCIA EM MODELOS MISTOS DESBALANCEADOS

Autora: SANDRA DENISEN DO ROCIO MARCELINO

Orientador: Prof. Dr. ANTONIO FRANCISCO IEMMA

RESUMO

O presente trabalho tem por objetivo descrever de forma simples e concisa alguns métodos utilizados para a obtenção das estimativas dos componentes de variância em modelos mistos desbalanceados.

Há muitos métodos disponíveis, cada qual levando, em geral a resultados diferentes, e escolher um deles pode não ser uma tarefa simples. Alguns métodos exigem álgebra extensa enquanto que outros necessitam de métodos iterativos para suas soluções.

Neste estudo são apresentados nove métodos: Método da Análise de Variância (ANOVA); Métodos I, II e III de Henderson; Métodos da Máxima Verossimilhança (ML) e da Máxima Verossimilhança Restrita (REML), Método do Estimador Quadrático Não-viesado de Norma Mínima (MINQUE), Métodos do Estimador Quadrático Não-viesado de Variância Mínima (MIVQUE) e do MINQUE Iterativo (I-MINQUE).

Com o objetivo de ilustrar comparativamente, sem o apelo de competição, os nove métodos considerados, de modo a estar tão próximo quanto possível da realidade

do pesquisador, usuário dos métodos de estimação, considera-se um conjunto de dados desbalanceados, adaptado de Searle et al.(1992), para o qual adota-se o modelo misto de dois fatores com interação.

A ilustração é feita, então, em duas partes: na primeira as estimativas são obtidas tomando-se uma matriz de variâncias e covariâncias com estrutura do tipo VC, considerada *default* na grande maioria dos sistemas estatísticos disponíveis. Na segunda, para o mesmo conjunto de dados, exemplifica-se a utilização do PROC MIXED do sistema estatístico SAS na obtenção de estimativas através dos métodos ali disponíveis, considerando a ocorrência de diferentes matrizes de variâncias e covariâncias.

Exceto através das propriedades dos estimadores, não se pode concluir sobre um melhor método de estimação, mesmo porque os verdadeiros valores dos componentes de variância, para o conjunto de dados adotado para ilustração, são desconhecidos.

Poder-se-ia comparar os métodos, por exemplo, se fosse adotado um conjunto de dados simulados, com determinada distribuição e para o qual os componentes de variâncias fossem, à priori, conhecidos.

Para o conjunto de dados adotado para ilustração nesse estudo, observou-se que a matriz G de variâncias e covariâncias com estrutura do tipo TOEP(1) foi a que “melhor” descreveu os dados, independente do método adotado para obtenção das estimativas dos componentes de variância. No entanto, a experiência do pesquisador associada à natureza dos dados deve indicar a estrutura mais apropriada dentre as muitas disponíveis nos sistemas computacionais estatísticos.

METHODS OF ESTIMATION OF VARIANCE COMPONENTS IN UNBALANCED MIXED MODELS

Author: SANDRA DENISEN DO ROCIO MARCELINO

Adviser: Prof. Dr. ANTONIO FRANCISCO IEMMA

SUMMARY

The present research objective to describe in a simple and concise way some methods used to obtain the estimates of variance components in unbalanced mixed models.

There are many available methods, each one providing, in general, different results, so to choose one of them can not be a simple task. Some methods claim extensive algebra, while others need iterative methods to their solutions.

In this study are shown nine methods: methods of analysis of variance (ANOVA); methods I, II and III of Henderson; methods of maximum likelihood (ML) and of restricted maximum likelihood (REML), method of minimum variance quadratic unbiased estimator (MIVQUE); method of minimum norm quadratic unbiased estimator (MIVQUE) and iterative MINQUE (I-MINQUE).

With the objective to illustrate comparatively, without appeal of competition, the nine considerate methods, objecting to be as close as possible of researcher reality, user of methods of estimation, consider a unbalanced data set, adapted from Searle et al. (1992), for it adopt the mixed models with two factors and interaction.

So illustration is done, in two parts: at first the estimatives are gotten taking a matrix of variance and covariance with structure like VC, considered default in the most software statistics available. At second, to the same data set, example the utilization of PROC MIXED of Statistical Analysis System, SAS, to get the estimatives through methods there availables, considering the occurrence of different matrix of variance and covariance.

In this study, except through the properties of the estimators, we didn't get subvention to choose the better method for estimation, but it was possible to discard those methods less adequate.

We could compare the methods for instance, if we were using a group simulate datas, with variance components previously known.

For the data set used to exemplify the present study, we observed that the G matrix of variance and covariance with structure like TOEP(1) was that better described the datas, among those utilized, independent on the method adapted for to obtain the estimatives of variance components. However, the know how of the researcher associated to the origin of the datas must indicate the most appropriate structure among those several available in the statistical systems.

1 INTRODUÇÃO

A análise de experimentos com dados desbalanceados tem merecido, nas últimas décadas, uma atenção especial por parte dos pesquisadores. Tal ocorrência, sem dúvida, tem sido motivada pelo espantoso avanço da informática e pelo desenvolvimento recente de técnicas relacionadas aos modelos lineares, como pode ser visto em Milliken & Johnson (1984); Searle (1987); Iemma (1991; 1993a e b; 1995a e b; 1997a e b); Mondardo (1994); Camarinha Filho (1995), Mondardo & Iemma (1998); Iemma & Claustrioux (1999); Oykawa & Iemma (1999); Claustrioux & Iemma (1999), entre outros.

Um fato a ser ressaltado é que uma maioria significativa de tais estudos tem considerado apenas os modelos para fatores de efeitos fixos.

Por outro lado, como é bem sabido, em muitas situações práticas um ou mais fatores podem estar associados a processos de amostragem, caracterizando os fatores de efeitos aleatórios e, nesse contexto, assumem grande importância os modelos de efeitos aleatórios bem como os modelos de efeitos mistos.

De modo geral, três aspectos são fundamentais na discussão dos modelos mistos desbalanceados:

i) a estimação e os testes de hipóteses sobre os efeitos fixos, discutidos com detalhes em Iemma & Perri (1996); Perri & Iemma (1996); Montebelo (1997); Perri (1998); Montebelo & Iemma (1999); Perri & Iemma (1999) entre outros;

ii) a predição dos efeitos aleatórios, como em Perez (1992), entre outros;

iii) a estimação dos componentes de variância, para a qual está direcionado o foco deste estudo.

Por serem fundamentais em muitas áreas do saber, como por exemplo a genética, a estimação dos componentes de variância têm merecido atenção especial dos pesquisadores e, sendo assim, vários métodos de estimação têm sido propostos desde Fisher¹ (1918). No entanto, se por um lado a facilidade de acesso aos sistemas computacionais estatísticos simplificou sobremaneira a atuação dos profissionais da área, por outro, a grande quantidade de métodos relatados na literatura tem gerado problemas de escolha ao profissional das áreas aplicadas, muitas vezes não iniciado nas técnicas mais refinadas da análise estatística.

Na verdade, se a estimação é feita sobre dados desbalanceados, o valor obtido pode ser função do método utilizado. Em outras palavras, diferentes métodos de estimação podem levar a diferentes estimativas para um mesmo parâmetro. Nesse contexto, como pode o pesquisador optar seguramente por um deles?

Para ilustrar esse fato, imagine um pesquisador da área de melhoramento animal, realizando uma revisão bibliográfica sobre tema de seu interesse. Suponha, ainda, que ele tenha selecionado, dentre vários outros, três artigos considerados extremamente úteis para seus propósitos, pois além de tratarem especificamente de seu tema de interesse, exemplificam sua metodologia através de conjuntos de dados muito semelhantes ao seu. Aparentemente seu problema de revisão estaria resolvido. No entanto, ao detalhar os artigos, o pesquisador observa que os autores estão radicados a diferentes centros de pesquisas e que têm formações acadêmicas e práticas diferentes. Assim, como é natural, têm à disposição diferentes sistemas estatísticos e, por conseguinte, as estimativas dos componentes de variância foram obtidas através de diferentes métodos. Para agravar o problema, e isto é um fato bastante comum, para um dado componente, digamos σ_A^2 , estão publicados, um em cada artigo, os valores $\hat{\sigma}_A^2 = 329,45$; $\hat{\sigma}_A^2 = -107,06$ e $\hat{\sigma}_A^2 = 33,88$. Sem dúvida, o pesquisador estará diante de

¹ FISHER, R.A. The correlation between relatives on the supposition of Medelian inheritance. **Trans. Roy Soc. Edinburgo**, v.52, p.399-433, 1918.

um impasse, principalmente se ele se der conta de que muitos outros métodos de estimação estão disponíveis.

Problemas desse tipo têm preocupado os usuários de tal modo que Searle (1987; p.495) afirma, textualmente, que um dos principais problemas com a estimação dos componentes de variância, para dados desbalanceados, consiste no fato de que muitos métodos de estimação estão disponíveis e optar por um deles pode ser uma questão não trivial.

É nessa direção que estão postos os objetivos desta dissertação, que tem como meta o usuário das ciências aplicadas.

Assim, o presente estudo busca fornecer aos usuários dos métodos de estimação de componentes de variância em modelos mistos desbalanceados, subsídios para a opção tão confortável quanto possível do método mais adequado para a obtenção das estimativas, em suas pesquisas.

Nesse contexto, pretende-se neste estudo:

1. Apresentar, de modo simples e conciso, as características teóricas mais relevantes e ilustrar numericamente os principais métodos de estimação de componentes de variância em modelos mistos com dois fatores cruzados e interação, com dados desbalanceados. Essa escolha justifica-se pelo fato de que tal modelo é o mais simples que já evidencia as regras e as dificuldades inerentes aos modelos mais parametrizados.

Assim, serão abordados nove métodos derivados de três conceitos clássicos da estimação estatística: os momentos, a função de verossimilhança e as funções quadráticas.

Dentre aqueles derivados dos momentos estão o método de Fisher¹ (1918) e os três métodos de Henderson (1953); dentre os derivados da função de verossimilhança estão o método da máxima verossimilhança, de Hartley & Rao (1967) e da máxima verossimilhança restrita, de Patterson & Thompson (1971) e, dentre aqueles

derivados da estimação sobre funções quadráticas estão os métodos dos estimadores quadráticos de norma mínima (Rao ,1971a), de variância mínima (Rao, 1971b) e iterativo de norma mínima, segundo Searle (1987).

2. Ilustrar a utilização do procedimento *mixed* (PROC MIXED) do Sistema Estatístico SAS (*Statistical Analysis System*) na obtenção de estimativas através dos métodos ali disponíveis, considerando a ocorrência de diferentes matrizes de variâncias e covariâncias.

Não se discutem, aqui, os critérios de convergência como os de Akaike e de Schwarz, bem como não são efetuadas comparações do PROC MIXED com outros procedimentos do sistema estatístico SAS e nem com procedimentos fornecidos por outros sistemas estatísticos. Detalhes sobre o tema podem ser obtidos em Schwarz (1993); Latour et al. (1994); Perri & Iemma (1998 e 1999) e em Montebelo & Iemma (1999), entre outros.

A idéia, neste caso, é a de fornecer ao leitor informações básicas sobre um programa para obtenção das estimativas através dos métodos incorporados no PROC MIXED, entrada dos dados e interpretação dos resultados.

2 REVISÃO DE LITERATURA

Segundo Scheffé (1959), Fisher¹, em 1918, estudou amplamente a teoria de modelos mistos, com grande repercussão na área de genética quantitativa. A tais modelos, Fisher¹ denominou Modelos de Componentes de Variância, e desenvolveu o método hoje conhecido como Método da Análise de Variância ou Método ANOVA.

Dada a importância do tema, muitos métodos têm sido propostos para a estimação dos componentes de variância, para modelos de efeitos aleatórios e modelos de efeitos mistos, balanceados e desbalanceados.

Henderson (1953) apresenta três métodos de estimação do tipo ANOVA, que consistem em igualar as esperanças das formas quadráticas de interesse aos respectivos quadrados médios e resolver o sistema formado para os componentes de variância.

Nesse artigo, o autor descreve os métodos de estimação dos componentes de variância, conhecidos como Métodos I, II e III de Henderson, e os ilustra através de exemplo numérico com aplicação na genética. Comenta que o Método I é apropriado para modelos aleatórios fornecendo, para tais modelos, estimativas não viesadas dos componentes de variância. Por outro lado, se o Método I é aplicado aos modelos mistos as estimativas obtidas, para os componentes de variância, são viesadas.

O autor argumenta, ainda, que o Método II é adequado aos modelos mistos, desde que tais modelos não envolvam interação entre efeitos fixos e aleatórios. Nesse caso, fornece estimativas não viesadas. Havendo interação entre efeitos fixos e aleatórios, as estimativas obtidas para os componentes de variância são viesadas.

O Método III de Henderson é apropriado a qualquer modelo misto. Sua aplicação é baseada nas reduções das somas de quadrados, devidas ao ajuste do modelo completo e de sub-modelos. As estimativas dos componentes de variância são obtidas igualando-se as diferenças obtidas através das reduções nas somas de quadrados, às suas respectivas esperanças.

Hartley & Rao (1967) aplicam o método da máxima verossimilhança, ML, ao modelo misto geral, método este que consiste em maximizar a função densidade de probabilidade das observações, em relação aos efeitos fixos e aos componentes de variância. Tal método, segundo os autores, fornece estimativas não negativas, mas viesadas, para os componentes de variância.

Os autores discutem, ainda, a consistência e a eficiência assintótica dos estimadores dos componentes de variância, além de sugerirem algoritmos para calcular simultaneamente as estimativas de máxima verossimilhança de ambos os componentes, fixos e aleatórios.

Searle (1968) reformula os métodos de Henderson (1953), reescrevendo-os matricialmente, enfocando, principalmente, o Método II, ao qual sugere algumas modificações, generalizando-o. O autor enfatiza o comentário de Henderson (1953), a respeito da inadequação da aplicação do Método II, a modelos que envolvam interação entre efeitos fixos e aleatórios.

O autor mostra, também, nesse artigo, que o Método III de Henderson utiliza o método de “Ajustamento de Constantes” de Yates², no qual as somas de quadrados para cada fator são calculadas através da diferença entre as somas de quadrados obtidas pelo ajuste do modelo completo e de um sub-modelo que exclua o fator de interesse. As somas de quadrados são então igualadas às respectivas esperanças matemáticas, fornecendo as estimativas dos componentes de variância.

² YATES, F. The analysis of multiple classifications with unequal numbers in the different classes. **Journal of the American Statistical Association**, v.29, p.51-66, 1934.

O autor argumenta que os métodos de Henderson (1953) são de fácil aplicação, do ponto de vista teórico, mas na prática, se as matrizes envolvidas nas somas de quadrados são de altas dimensões, a utilização dos métodos torna-se trabalhosa.

Rao (1970), apresenta um novo estimador de variâncias heterocedásticas em modelos lineares, conhecido como Estimador Quadrático Não-viesado de Norma Mínima, MINQUE. O método de obtenção baseia-se na restrição de que a norma Euclidiana da matriz núcleo, das formas quadráticas de interesse, seja mínima.

O autor aplica o método MINQUE ao modelo linear de Gauss-Markoff, $y = X\theta + \varepsilon$, com matriz de dispersão diagonal e apresenta um procedimento para obtenção dos estimadores MINQUE no caso geral, para modelos de efeitos fixos.

Em 1971, Rao desenvolve metodologia para obtenção dos estimadores para os componentes de variância e combinações lineares desses componentes, para modelos mistos, satisfazendo algumas propriedades: invariância quanto à translação dos efeitos fixos, não tendenciosidade e norma mínima da diferença entre o estimador e seu verdadeiro valor ou variância mínima do estimador. Os estimadores, assim obtidos, são chamados, respectivamente, MINQUE, se possuem norma mínima (Rao, 1971a) e Estimador Quadrático Não-viesado de Variância Mínima, MIVQUE, se possuem variância mínima (Rao 1971b).

Tais métodos baseiam-se na estimação de funções quadráticas dos componentes de variância, através de formas quadráticas. A condição de norma mínima do MINQUE é imposta à matriz núcleo das formas quadráticas das observações. O MIVQUE utiliza a restrição de que a matriz núcleo das formas quadráticas das observações seja determinada de tal forma que os estimadores obtidos sejam de variância mínima.

Patterson & Thompson (1971) propõem uma modificação do método da máxima verossimilhança, para delineamentos em blocos, e generalizam este método para qualquer modelo de análise de variância. Os autores utilizam os procedimentos da máxima verossimilhança para modelos mistos, balanceados ou não, separando a função de verossimilhança (L) em duas partes independentes: uma referente aos efeitos fixos

(L'') e outra referente aos efeitos aleatórios (L'). Maximizam, inicialmente, a função L'' para obtenção dos estimadores dos efeitos fixos. A maximização da função L' fornece os estimadores dos componentes de variância, não viesados, pois considera os graus de liberdade da parte fixa. Para conjuntos de dados desbalanceados, as estimativas assim obtidas são viesadas. Esse método é conhecido como Método da Máxima Verossimilhança Restrita, REML.

Rao (1972) generaliza o problema de estimação dos componentes de variância, considerando a estimação de variâncias heterocedásticas no modelo linear de Gauss-Markoff, apresentado em (Rao, 1970), como um caso especial do modelo de componentes de variância.

O autor desenvolve, também, modelos envolvendo componentes de covariância e mostra que para estimá-los, podem ser utilizados os mesmos princípios do método MINQUE.

Valério Filho (1983) apresenta um estudo dos métodos da Análise de Variância e dos Métodos I, II e III de Henderson, elucidando aspectos teóricos, aplicando-os a modelos fixos, aleatórios e mistos, para dados desbalanceados. O autor conclui que o método I é uma extensão do método ANOVA e que o método II é uma modificação do método I, visando à aplicação em modelos mistos que não incluam interação entre efeitos fixos e aleatórios. O método III pode ser aplicado tanto a modelos mistos quanto a modelos aleatórios.

Milliken & Johnson (1984) apresentam uma obra na qual discutem estimativas pontuais e por intervalo, testes de hipóteses sobre efeitos fixos e aleatórios, tanto para dados balanceados como desbalanceados.

Seraphin (1984) faz uma comparação numérica, através de simulação, dos estimadores de componentes de variância obtidos pelo Método III de Henderson, Máxima Verossimilhança e MIVQUE, em dois modelos genético-estatísticos de cruzamentos, para dados balanceados e desbalanceados, com dois fatores: hierárquico aleatório e fatorial misto com interação.

Searle (1987) apresenta a teoria de modelos lineares para dados desbalanceados. Apresenta, ainda, uma breve discussão sobre os métodos de estimação de componentes de variância, em modelos mistos, para dados balanceados e desbalanceados. O autor discute as vantagens e desvantagens dos métodos de estimação: ANOVA, métodos I, II e III de Henderson, ML, REML, MINQUE e MIVQUE.

Valério Filho (1991) apresenta um estudo comparativo dos métodos para estimação de componentes de variância, disponíveis no PROC VARCOMP: ANOVA, ML, REML, MIVQUE(0), através de simulação de dados, considerando combinações entre valores de variâncias, associadas aos fatores aleatórios em estudo, número de níveis de efeitos fixos e níveis de desbalanceamento.

O autor compara as estimativas obtidas pelos métodos ANOVA, MIVQUE, ML e REML, para dois modelos: o modelo cruzado misto e o modelo hierárquico misto, para dados balanceados e desbalanceados, utilizando como critério de comparação o erro quadrático médio e o viés. O autor conclui que os métodos ANOVA, ML e MIVQUE(0) são equivalentes para dados balanceados. Já para dados desbalanceados, o desempenho de cada método depende, sobretudo, do componente e do critério utilizado na comparação, mas de uma forma geral, os métodos ML e REML apresentaram melhores resultados.

Perez (1992) apresenta um trabalho sobre estimação e predição nos modelos mistos não balanceados, enfocando o método da máxima verossimilhança para estimação dos componentes de variância.

Searle et al. (1992) apresentam uma obra extensa sobre a estimação dos componentes de variância e análise de modelos mistos, tanto para dados balanceados como desbalanceados.

Nessa obra, os autores apresentam, também, detalhes no que se refere à teoria dos métodos, além de apresentar ilustrações para cada método. No entanto, o que se observou, quanto à obra de Searle et al. (1992), foi o fato de que para alguns métodos, enfocando modelos mistos desbalanceados, foi utilizada ilustração considerando apenas dados balanceados e/ou modelo aleatórios.

Barbin (1993) apresenta um trabalho sobre componentes de variância, enfatizando o método ANOVA para modelos balanceados. Apresenta, também, um método prático, o Método de Hicks³, para obtenção dos quadrados médios nos modelos balanceados, sugerindo uma modificação nesse método, visando à coerência entre os resultados obtidos em seu estudo e os resultados obtidos através do método dedutivo. O autor apresenta, também, aplicações na determinação do tamanho de amostras e em estudos de melhoramento genético.

Schwarz (1993) apresenta um artigo sobre a teoria do método ANOVA para modelos mistos balanceados, enfocando testes de hipóteses e estimação pontual e intervalar das funções estimáveis dos efeitos fixos e dos componentes de variância. Faz também uma comparação entre os *softwares* BMDP, *Biomedical Computer Programs*, versões 3 e 8; SAS, *Statistical Analysis System*, com as *procedures* GLM, *General Linear Model*, e VARCOMP, *Variance Components* e, SPSS, *Statistical Package for the Social Sciences*, no módulo MANOVA, *Multivariate Analysis of Variance*.

Verneque (1994) apresenta procedimentos numéricos de estimação de componentes de covariância, em análise multivariada, pelo método da Máxima Verossimilhança Restrita em modelos mistos, aplicados ao melhoramento animal. Faz também, uma comparação de diversos procedimentos numéricos para resolução de sistema de equações lineares e apresenta um algoritmo para simulação de valores genéticos em modelos mistos.

Gilmour et al. (1995) descrevem e aplicam o algoritmo AI, *Average Information*, para estimar os componentes de variância pelo método da máxima verossimilhança restrita em modelos mistos com erros correlacionados. Os autores comparam tal procedimento com os algoritmos FS, *Fisher Scoring*, DF, *Derivate Free* e EM, *Expectation Maximum*. Concluem que o Algoritmo AI apresenta propriedades de convergência similares ao algoritmo FS, constituindo-se numa alternativa viável aos

³ HICKS, C.R. **Fundamental concepts in the design of experiments**. 2. ed. Nova Iorque. Holt. Rinehart and Wiston. 1973. 349p.

algoritmos DF e EM, nas áreas de melhoramento animal e vegetal, pois converge com um número menor de iterações.

Richardson & Welsh (1995) apresentam duas definições de máxima verossimilhança e máxima verossimilhança restrita robustas, no sentido de limitar a influência das observações *outliers* sobre as estimativas dos componentes de variância, fazendo aplicações a dados de experimentos biológicos e químicos.

Os autores apresentam, ainda, um estudo através de simulação, para investigar as propriedades assintóticas dos estimadores e também para examinar as vantagens dos métodos robustos, então propostos.

Montebelo (1997) e; Montebelo & Iemma (1999), discutem as idéias básicas para a interpretação das hipóteses mais comumente testadas pelos pesquisadores das ciências aplicadas, além de discutir a utilização de diversos *softwares* estatísticos, quando da obtenção das estimativas dos componentes de variância para modelos mistos.

Perri (1998) e; Perri & Iemma (1999), apresentam um estudo sobre ajuste de modelos mistos de classificação dupla, utilizando os procedimentos GLM, VARCOMP e MIXED do SAS. Os autores discutem a performance de cada procedimento, concluindo que o PROC MIXED é o procedimento apropriado para a análise de modelos mistos.

Utilizando dados de peso de bovinos, os autores ilustram os métodos de estimação de componentes de variância em modelos mistos, disponíveis no SAS, fazendo uso dos critérios AIC (*Akaike's Information Criterion*) e BIC (*Schwarz's Bayesian Criterion*) para comparar estruturas da matriz de variâncias e covariâncias consideradas no estudo. Nesse estudo são abordadas, ainda, as funções estimáveis e respectivas hipóteses testadas sobre os efeitos fixos para o conjunto de dados utilizados.

3 METODOLOGIA

3.1 Introdução

Segundo a natureza do vetor θ , de parâmetros, o modelo linear geral, $y = X\theta + \varepsilon$, pode ser caracterizado como de efeitos fixos, aleatórios ou mistos. Quando o vetor θ descreve simultaneamente parâmetros de efeitos fixos e aleatórios, fica caracterizado o modelo misto.

O modelo geral misto, na forma matricial, é dado em Searle et al.(1992), como:

$$y = X\theta + Zu + \varepsilon, \quad (1)$$

onde:

y é o vetor $n \times 1$ de realizações de variáveis aleatórias;

X é a matriz $n \times p$, dita matriz do delineamento, de coeficientes conhecidos, correspondentes aos efeitos fixos;

θ é o vetor $p \times 1$ de efeitos fixos desconhecidos;

Z é a matriz $m \times p$, dita matriz do delineamento, de coeficientes conhecidos, correspondentes aos efeitos aleatórios;

u é o vetor $m \times 1$ de efeitos aleatórios desconhecidos;

ε é o vetor $n \times 1$ de variáveis aleatórias não observáveis, dito vetor dos erros.

Particionando-se u em r sub-vetores de dimensão $m_i \times 1$, tal que $\sum_{i=1}^r m_i = m$,

tem-se que $u' = [u'_1, u'_2, \dots, u'_r]$, onde cada sub-vetor u_i tem como elementos os

efeitos correspondentes a todos os níveis de um único fator de efeito aleatório e m_i é a dimensão de u_i . Naturalmente Z é particionada de acordo com u . Então o modelo (1) pode ser reescrito como:

$$y = X\theta + \sum_{i=1}^r Z_i u_i + \varepsilon = X\theta + \sum_{i=0}^r Z_i u_i, \quad (2)$$

onde $u_0 = \varepsilon$ e $Z_0 = I$.

Para cada u_i são aqui adotadas as propriedades sobre os valores esperados, variâncias e covariâncias:

1. $E(y) = X\theta$;
2. $E(u_i) = \phi, \quad \forall i$;
3. $\text{var}(u_0) = \text{var}(\varepsilon) = Z_0 \sigma_0^2 = R = I \sigma_\varepsilon^2$;
4. $\text{var}(u_i) = G, \quad \forall i \neq 0$;
5. $\text{cov}(u_i, u_{i'}) = 0, \quad \forall i$.

Logo,

$$V = \text{var}[y] = \text{var}[Zu + \varepsilon] = Z \text{var}(u) Z' + I \sigma_\varepsilon^2 = ZGZ' + I \sigma_\varepsilon^2 \quad (3)$$

Assim, tem-se, segundo Latour et al. (1994):

$$E \begin{bmatrix} u \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \text{var} \begin{bmatrix} u \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G & 0 \\ 0 & I \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (4)$$

3.2 Estimação

Nos modelos de efeitos fixos, $y = X\theta + \varepsilon$, com $\varepsilon \sim (\phi, I\sigma^2)$, o método de estimação mais utilizado na literatura tem sido, entre outros, o Método de Estimação de Mínimos Quadrados Ordinários, OLSE: *Ordinary Least Square Estimation*. Esse método conduz ao sistema de equações normais dado por $X'X\theta = X'y$, onde as soluções

$\theta^o = (X'X)^{-1} X'y$ são soluções aproximadas de mínimos quadrados para $y = X\theta$ inconsistente, conforme Lemma (1987).

Conforme visto anteriormente, nos modelos mistos tem-se, em geral, interesse na estimação e nos testes sobre os efeitos fixos, na predição dos efeitos aleatórios e na estimação dos componentes de variância.

Assim, quando se tem um modelo misto, como o dado em (2), com matriz de variâncias e covariâncias dada por (3), o método de estimação preferido ao Método de Mínimos Quadrados Ordinários tem sido o Método de Estimação de Mínimos Quadrados Generalizados, GLSE: *Generalized Least Square Estimation*, que conduz ao sistema de equações normais generalizadas $X'V^{-1}X\theta = X'V^{-1}y$, onde as soluções $\theta^o = (X'V^{-1}X)^{-1} X'V^{-1}y$ são obtidas considerando-se os componentes de variância.

Para obter-se o BLUE: *Best Linear Unbiased Estimator* de uma função estimável dos efeitos fixos, $k'\theta$, basta que se utilize o Teorema de Gauss Markov: o BLUE de $k'\theta$ é $k'\theta^o$ onde θ^o é qualquer solução das equações normais generalizadas.

Seja $k'\theta = \lambda'X\theta$ uma função estimável dos efeitos fixos do modelo (2). Assim, tem-se:

$$\text{BLUE}(\lambda'X\theta) = \lambda'X(X'V^{-1}X)^{-1} X'V^{-1}y, \quad (5)$$

considerando-se, desta forma, os componentes de variâncias dos efeitos aleatórios na estimação das funções estimáveis dos efeitos fixos. A variância de (5) é dada por:

$$\text{var}[\text{BLUE}(\lambda'X\theta)] = \lambda'X(X'V^{-1}X)^{-1} X'y \quad (6)$$

No entanto, em (6) é requerido o conhecimento da matriz V de variâncias e covariâncias, matriz esta que envolve os componentes de variância que se deseja estimar.

Uma alternativa interessante consiste na obtenção de um conjunto de estimativas dos componentes de variâncias e na utilização dessas estimativas em lugar dos componentes em V , obtendo-se $\hat{V}$.

Então, substitui-se V por $\hat{V}$ e assim tem-se:

$$\text{BLUE}_{\hat{V}}(\lambda'X\theta) = \lambda'X(X'\hat{V}^{-1}X)^{-1}X'\hat{V}^{-1}y \quad (7)$$

Um grave problema que ocorre na obtenção de (7) consiste no fato de que, conforme já comentado, muitos métodos estão disponíveis podendo levar a diferentes estimativas dos componentes e, portanto, a diferentes estimativas da matriz V .

Segundo Milliken & Johnson (1984) e Kachar & Harville (1984), para dados desbalanceados, o estimador de mínimos quadrados generalizados de um função estimável $\lambda'X\theta$ é $\lambda'X\hat{\theta}_{\hat{V}}$, onde:

$$\lambda'X\hat{\theta}_{\hat{V}} = \lambda'X(X'\hat{V}^{-1}X)^{-1}X'\hat{V}^{-1}y \quad (8)$$

Cabe ressaltar, aqui, que em áreas como a genética, a medicina e a zootecnia entre outras, a estimação dos componentes de variância não se presta apenas para otimizar o BLUE de funções dos efeitos fixos, mas possui interpretação própria.

Por exemplo, na área da genética, como citado por Barbin (1993), o coeficiente de herdabilidade do animal, no sentido amplo, é a razão entre dois componentes de variância: a variância genética e a variância total ou fenotípica.

Esse enfoque específico dos componentes de variância, vem sendo observado desde Fisher¹ (1918) e pode ser visto, dentre muitos outros, em trabalhos como os de Henderson (1953), Seraphin (1984), Verneque (1994) e Perri (1998), cuja ilustração dos métodos se dá na área da genética quantitativa.

3.3 Predição dos efeitos aleatórios

No modelo misto dado em (1), o vetor u é um vetor de variáveis aleatórias. Sendo assim, pode-se ter interesse em saber que valores de u poderiam estar associados a um particular vetor y de observações. Ou seja, dado um vetor y de observações, qual seria um estimador da média condicional $E(u|y)$?

Como u e y são realizações de variáveis aleatórias, qualquer que seja a distribuição conjunta, pode-se mostrar que o preditor de u , que minimiza o quadrado médio dos erros de predição, é $E(u|y)$. Assim, $E(u|y)$ é chamado o melhor preditor de u .

Sob normalidade tem-se que:

$$\tilde{u} = E(u) + \text{cov}(u, y') [\text{var}(y)]^{-1} [y - E(y)] \quad (9)$$

No caso do modelo misto $y = X\theta + Zu + \varepsilon$ com:

$$\text{var}(u) = G \quad \text{e} \quad \text{cov}(u, y') = \text{cov}(u, u'Z') = GZ'$$

$$\text{var}(y) = ZGZ' + I\sigma_{\varepsilon}^2$$

tem-se:

$$\tilde{u} = GZ'V^{-1}(y - X\theta) \quad (10)$$

Portanto $\tilde{u}$ é uma função estimável de $X\theta$ e assim tem-se:

$$\text{BLUE}(\tilde{u}) = GZ'V^{-1}(y - X\theta^0) \quad (11)$$

Combinando os conceitos de predição e de melhor estimador linear não-viesado, tem-se o melhor preditor linear não-viesado, BLUP: *Best Linear Unbiased Predictor*.

Então:

$$\text{BLUP}(u) = GZ'V^{-1}(y - X\theta^0) \quad (12)$$

Quando a matriz V de variâncias e covariâncias é desconhecida, deve-se estimar os componentes de variância, utilizando-se um dos métodos disponíveis na literatura, obtendo-se $\hat{V}$. Então substitui-se V por $\hat{V}$ em (12) e assim tem-se:

$$\text{BLUP}(u)_{\hat{V}} = \hat{G}Z'\hat{V}^{-1}(y - X\theta_{\hat{V}}^0) \quad (13)$$

Não se pode perder de vista que, conforme comentado anteriormente, também aqui ocorrem problemas com a unicidade das estimativas.

3.4 Métodos de estimação de componentes de variância

De acordo com os argumentos descritos na introdução deste trabalho, dentre os diversos métodos de estimação de componentes de variância propostos pela literatura, nove são apresentados neste trabalho. Quatro deles derivam do método dos momentos: o Método ANOVA e os Métodos I, II e III de Henderson; dois deles utilizam a função de verossimilhança: o Método da Máxima Verossimilhança e o Método da Máxima Verossimilhança Restrita; e três baseiam-se na estimação quadrática dos componentes de variância das observações, ou de combinações lineares dos componentes de variância: os Métodos MINQUE, MIVQUE e I-MINQUE.

3.4.1 Estimação com base no método dos momentos

O método dos momentos, quando utilizado como técnica para estimar componentes de variância, pressupõe os seguintes passos:

1. Obter as somas de quadrados devidas aos parâmetros do modelo;
2. Calcular a esperança de cada soma de quadrados;
3. Igualar cada esperança obtida com os valores observados de cada soma de quadrados; e
4. Resolver o sistema de equações formado para os componentes de variância.

O método dos momentos apresenta a vantagem de não requerer a suposição de normalidade dos dados para a obtenção dos estimadores. No entanto, segundo Graybill⁴, citado por Milliken & Johnson (1984), quando os efeitos aleatórios do modelo considerado são normalmente distribuídos e as somas de quadrados são

⁴ GRAYBILL, F. A. **Theory and application of the linear model**. North Scituate, Mass.: Duxbury Press. 1976. 704p.

independentes, então os estimadores obtidos pelo método dos momentos são não-viesados e de mínima variância. Se, além disso, os efeitos aleatórios têm os quatro primeiros momentos iguais aos quatro primeiros momentos de uma distribuição normal, então os estimadores são do tipo quadrático, são não-viesados e têm variância mínima.

3.4.1.1 Método da análise de variância: ANOVA

Conforme Searle et al. (1992) seja, para um modelo balanceado, $s = \{y'A_i y\}_{i=0}^r$, um vetor de $r+1$ formas quadráticas em y , tal que A_i seja simétrica, $A_i = A_i'$, $\forall i$.

Ou seja, então,

$$E(s_i) = E(y'A_i y) = \text{tr}(A_i V) + E(y')A_i E(y) = \text{tr}(A_i V) + \theta'X'A_i X\theta \quad (14)$$

Ademais se $X'A_i X = \phi$, então o valor esperado de (14) não conterá termo referente aos efeitos fixos. Nos modelos balanceados, $X'A_i X = \phi$ sempre resulta nas somas de quadrados da tabela da análise de variância. (Searle et al., 1992).

Segundo esses autores, o método da Análise de Variância para dados desbalanceados consiste na obtenção das somas de quadrados correspondentes a cada fator do modelo considerado. Igualando-se, então, cada soma de quadrados à respectiva esperança, obtém-se um sistema de equações, cuja resolução fornece as estimativas ANOVA para o modelo considerado.

Pode-se reescrever (14), sujeita a $X'A_i X = \phi$, e considerando V de (3), como:

$$E(s_i) = \text{tr}[A_i V] = \text{tr}\left[A_i \sum_{j=0}^r Z_j Z_j' \sigma_j^2\right] = \sum_{j=0}^r \text{tr}[Z_j A_i Z_j'] \sigma_j^2, \quad (15)$$

onde σ^2 é o vetor de componentes de variâncias que será estimado e s um vetor da mesma ordem de σ^2 , de qualquer forma quadrática linearmente independente das observações.

Pode-se estender (15) para:

$$E(s) = C\sigma^2 \quad (16)$$

para alguma matriz C , tal que $C = \left\{ \text{tr}(Z_j' A_i Z_j) \right\}$ e $\sigma^2 = \left\{ \sigma_j^2 \right\}_{j=0}^r$

Então, se C é não singular,

$$\hat{\sigma}^2 = C^{-1}s \quad (17)$$

é um estimador não-viesado de σ^2 .

A matriz de dispersão de σ^2 é dada por:

$$\text{var}(\hat{\sigma}^2) = C^{-1} \text{var}(s) (C^{-1})' \quad (18)$$

onde os elementos de $\text{var}(s)$ são variâncias e covariâncias das formas quadráticas utilizadas como elementos de s .

Segundo Searle (1987), quando algumas formas do método geral ANOVA são aplicáveis, ou seja quando $E(s) = C\sigma^2$ existe, a metodologia tem a vantagem de fornecer estimadores não viesados para os componentes de variância.

Entretanto, não há uma maneira ótima de encontrar as formas quadráticas que serão utilizadas como elementos de s para $E(s) = C\sigma^2$. Muitas formas quadráticas, para modelos mistos, podem conter funções quadráticas dos efeitos fixos e aí não se pode aplicar a metodologia ANOVA. Não obstante, pode-se obter estimativas negativas para os componentes de variância e as propriedades distribucionais dos estimadores são desconhecidas, exceto sobre as suposições de normalidade do erro. (Searle, 1987).

3.4.1.2 Método I de Henderson

Henderson (1953) apresenta três métodos de estimação envolvendo formas quadráticas, que não são necessariamente somas de quadrados, pois nem sempre são “não negativas”, para as quais obtém seus valores esperados. As formas quadráticas aqui utilizadas são análogas às somas de quadrados utilizadas para dados balanceados, com tal analogia que certas somas de quadrados para dados balanceados se tornam

formas quadráticas para dados desbalanceados, conforme pode ser visto em Searle (1968).

Assim, por exemplo, as somas de quadrados para dados balanceados:

$$\sum_i Jn(\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_i Jn\bar{y}_{i.}^2 - IJn\bar{y}_{...}^2 \quad (19)$$

tornam-se, para dados desbalanceados em:

$$\sum_i n_i (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_i n_i \bar{y}_{i.}^2 - n_{..} \bar{y}_{...}^2 \quad (20)$$

O Método I de Henderson utiliza o lado direito da equação (20). Henderson (1953) comenta que tal método só pode ser utilizado se for assumido que, exceto para μ , todos os demais elementos do modelo são variáveis aleatórias não correlacionadas com média zero e variâncias distintas.

O Método I de Henderson consiste na obtenção do valor esperado de cada forma quadrática. Iguala-se, então, cada esperança obtida ao valor calculado através dos dados da respectiva forma quadrática, obtendo-se um sistema de equações, cuja resolução fornece as estimativas dos componentes de variância.

Segundo Searle (1968), o Método I de Henderson fornece estimativas não viesadas, com variância mínima, quando os dados são balanceados ou quando o modelo é aleatório e os efeitos não são correlacionados. Para grandes amostras, tal método fornece estimadores não viesados.

O Método I de Henderson não é adequado para modelos mistos. Pode ser adaptado a um modelo misto pela alteração do modelo, tratando-se os efeitos fixos como não existentes ou como aleatórios mas, nesse caso, os estimadores dos componentes de variância para os efeitos aleatórios são viesados. (Searle, 1968).

3.4.1.3 Método II de Henderson

O viés nas estimativas dos componentes de variância, obtidas pelo Método I de Henderson, devido à suposição de que os elementos fixos do modelo misto são

variáveis aleatórias, pode ser eliminado através do uso do Método II de Henderson. Segundo Searle (1968), esse método utiliza estimativas dos efeitos fixos, obtidas pelo método dos mínimos quadrados, corrigindo os dados com tais estimativas.

Na equação do modelo misto geral, $y = X\theta + Zu + \varepsilon$, como descrito em (1), separa-se o vetor $\mu 1$ dos efeitos fixos, redefinindo $X\theta$, como a parte do modelo que envolve os efeitos fixos, a menos da constante. Rescreve-se o modelo dado por (1) como:

$$y = \mu 1 + X\theta + Zu + \varepsilon \quad (21)$$

Resolvendo o sistema de equações normais:

$$\begin{bmatrix} X'X & X'Z \\ Z'X & Z'Z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta \\ u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X'y \\ Z'y \end{bmatrix} \quad (22)$$

obtem-se as soluções $\theta^0 = (X'X)^{-1} X'y$ para os efeitos fixos θ . Ajusta-se então os dados, utilizando-se as estimativas θ^0 da seguinte forma:

$$y_a = y - X\theta^0 = \mu_0^* 1 + Zu + K\varepsilon \quad (23)$$

onde y_a é o vetor de respostas ajustado para os efeitos fixos, exceto para $\mu_0^* \neq \mu$ e K é uma matriz conhecida. Os efeitos aleatórios são os mesmos de (21), portanto Zu não se altera.

Seja $\theta^0 = Ly$, solução das equações normais, onde a matriz L é escolhida de modo que $y_a = y - X\theta^0$ não dependa dos efeitos fixos. Segundo Searle et al. (1992), considerando o modelo dado em (21), se a matriz L satisfaz às condições:

- (i) $XLZ = 0$;
- (ii) todas as linhas de XL têm a mesma soma;
- (iii) $X - XLZ$ tem todas as linhas iguais,

então os resíduos do modelo ajustado para os efeitos fixos não dependem mais desses efeitos.

Assim, o Método II de Henderson consiste inicialmente na obtenção das estimativas para os efeitos fixos, e a seguir na aplicação do Método I aos resíduos restantes, ou seja, ao modelo (23), o modelo ajustado para os efeitos fixos.

O Método II de Henderson pode ser utilizado para modelos mistos, desde que tais modelos não possuam interação entre efeitos fixos e aleatórios, ou efeitos aleatórios aninhados dentro de efeitos fixos. (Searle, 1987).

3.4.1.4 Método III de Henderson

O Método III de Henderson, também chamado método de ajuste de constantes, utiliza as reduções nas somas de quadrados do modelo completo e de sub-modelos para estimar os componentes de variância, ao invés das somas de quadrados utilizadas pelos Métodos I e II de Henderson.

O Método III de Henderson consiste em obter os estimadores dos componentes de variância, construindo um sistema de equações a partir das diferenças entre as reduções nas somas de quadrado do modelo completo e de sub-modelos, igualando-as às respectivas esperanças matemáticas.

Considere o modelo dado por (1), $y = X\theta + Zu + \varepsilon$, onde X e Z são conhecidas e os erros são não correlacionados com média zero e variância comum σ_ε^2 .

Nesse contexto, seja uma matriz W particionada como $\begin{bmatrix} W_1 & | & W_2 \end{bmatrix}$, e seja o vetor δ' particionado como $\begin{bmatrix} \delta'_1 & | & \delta'_2 \end{bmatrix}$ de acordo com W . Então o modelo dado por (1) pode ser reescrito como:

$$y = X\theta + Zu + \varepsilon = W\delta + \varepsilon = W_1\delta_1 + W_2\delta_2 + \varepsilon \quad (24)$$

que é o modelo completo.

Considere então o sub-modelo $y = W_1\delta_1 + \varepsilon$, para o qual tem-se o sistema de equações normais:

$$W_1' W_1 \delta_1 = W_1' y, \quad (25)$$

cujas solução geral é dada por:

$$\hat{\delta}_1 = (W_1' W_1)^{-1} W_1' y$$

Denotando as reduções nas somas de quadrados do modelo completo (24) e do sub-modelo (25), respectivamente por $R[\delta_1, \delta_2]$ e $R[\delta_1]$, tem-se que:

$$R(\delta_1, \delta_2) = y'W(W'W)^{-1}W'y$$

$$R(\delta_1) = y'W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1'y$$

que são formas quadráticas em y .

Obtém-se também:

$$E[R(\delta_2 | \delta_1)] = E[R(\delta_1, \delta_2)] - E[R(\delta_1)] \quad (26)$$

onde:

$$E[R(\delta_1, \delta_2)] = E[y'W(W'W)^{-1}W'y] = E(y')W(W'W)^{-1}W'E(y) + \text{tr}[W(W'W)^{-1}W'\text{var}(y)]$$

mas,

$$E(y) = E(W\delta + \varepsilon) = E(W\delta) = WE(\delta)$$

e

$$\text{var}(y) = \text{var}(W\delta + \varepsilon) = W \text{var}(\delta)W' + I\sigma_\varepsilon^2$$

Logo:

$$\begin{aligned} E[R(\delta_1, \delta_2)] &= E(\delta')W'W(W'W)^{-1}W'WE(\delta) + \text{tr}[W(W'W)^{-1}W'W \text{var}(\delta)W' + W(W'W)^{-1}W'I\sigma_\varepsilon^2] \\ &= E(\delta')W'WE(\delta) + \text{tr}[W'W(E(\delta\delta') - E(\delta)E(\delta'))] + \sigma_\varepsilon^2 \text{tr}[W(W'W)^{-1}W'] \\ &= \text{tr}[W'WE(\delta\delta')] + \sigma_\varepsilon^2 r[W] \\ &= \text{tr}\left\{\begin{bmatrix} W_1'W_1 & W_1'W_2 \\ W_2'W_1 & W_2'W_2 \end{bmatrix} E(\delta\delta')\right\} + \sigma_\varepsilon^2 r(W) \end{aligned}$$

onde $r(W)$ é o posto da matriz W .

De modo análogo:

$$\begin{aligned} E[R(\delta_1)] &= E(\delta')W'W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1'WE(\delta) + \text{tr}\left[W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1'W \text{var}(\delta)W'\right] + \sigma_\varepsilon^2 \text{tr}\left[W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1'I\sigma_\varepsilon^2\right] \\ &= \text{tr}[W'W_1(W_1'W_1)^{-1}W'E(\delta\delta')] + \sigma_\varepsilon^2 r[W_1] \\ &= \text{tr}\left\{\begin{bmatrix} W_1'W_1 & W_1'W_2 \\ W_2'W_1 & W_2'W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1'W_2 \end{bmatrix} E(\delta\delta')\right\} + \sigma_\varepsilon^2 r(W_1) \end{aligned}$$

Portanto:

$$E[R(\delta_2 | \delta_1)] = \text{tr} \left\{ \begin{bmatrix} \phi & \phi \\ \phi & W_2'(I - W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1')W_2 \end{bmatrix} E \begin{bmatrix} \delta_1\delta_1 & \delta_1\delta_2 \\ \delta_2\delta_1 & \delta_2\delta_2 \end{bmatrix} \right\} + \sigma_\varepsilon^2 [r[W] - r[W_1]]$$

ou

$$E[R(\delta_2 | \delta_1)] = \text{tr} \left\{ W_2'(I - W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1')W_2 \right\} E(\delta_2\delta_2') + \sigma_\varepsilon^2 [r[W] - r[W_1]] \quad (27)$$

onde $E[\delta_2\delta_2'] = \text{var}[\delta_2] + E[\delta_2]E[\delta_2']$, que não envolve δ_1 .

Pode-se observar que $E[R(\delta_2 | \delta_1)]$, dada em (27), não depende de δ_1 , ou seja, não depende dos efeitos de δ_1 , sejam eles fixos ou aleatórios.

Então, no modelo linear misto, se na partição de δ' em $[\delta_1' | \delta_2']$ forem considerados em δ_1 , os efeitos fixos, e em δ_2 os efeitos aleatórios, $E[R(\delta_2 | \delta_1)]$ não conterá termos devidos aos efeitos fixos. A esperança é função, somente, de σ_ε^2 e das variâncias dos efeitos aleatórios em δ_2 , que são os componentes de variância que se deseja estimar.

O Método III de Henderson é apropriado para qualquer modelo misto e seus estimadores são não viesados. Uma desvantagem do Método III é que utiliza o modelo superparametrizado e para modelos com muitos fatores, há muitos sub-modelos envolvidos, além de matrizes de alta dimensão. (Searle, 1987).

3.4.2 Estimação com base na função de máxima verossimilhança

Os métodos baseados na função de máxima verossimilhança constituem algumas das técnicas mais comuns de estimação, em estatística. Tais métodos utilizam a suposição de normalidade dos dados, e através deles, obtém-se a função de verossimilhança, com base nos parâmetros do modelo. Os estimadores de máxima verossimilhança são aqueles valores dos parâmetros, constantes do espaço paramétrico, que maximizam o valor da função de verossimilhança. Por motivos práticos, maximiza-se o logaritmo da função de verossimilhança.

O processo de maximizar a função de verossimilhança sobre um espaço paramétrico geralmente requer a utilização de um processo numérico iterativo.

3.4.2.1 Método da máxima verossimilhança: ML

O método da máxima verossimilhança consiste em maximizar a função de verossimilhança das observações, em relação aos efeitos fixos e aos componentes de variância, exigindo a suposição de normalidade dos dados.

Seja o modelo misto $y = X\theta + \sum_{i=1}^r Z_i u_i + \varepsilon$, descrito em (2).

Na terminologia da análise de variância, o vetor θ compreende todos os níveis de todos os fatores de efeitos fixos, inclusive interações, enquanto que os vetores u_i , $i = 1, \dots, r$, compreendem todos os fatores de efeitos aleatórios do modelo.

Assumindo que os efeitos aleatórios e os erros têm distribuição normal, com média zero e matrizes de variâncias e covariâncias G e $I\sigma_\varepsilon^2$, respectivamente, o vetor y das observações terá média $X\theta$, e matriz de variâncias e covariâncias, V , conforme descrito em (3). Daí dizer que $y \sim N(X\theta, V)$, ou seja, o vetor y tem distribuição normal multivariada com média $X\theta$ e matriz de variâncias e covariâncias $V = ZGZ' + I\sigma_\varepsilon^2$.

Então, a função de verossimilhança de y é dada por:

$$L = L(\theta, V|y) = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{2}(y - X\theta)' V^{-1}(y - X\theta)\right\}}{(2\pi)^{n/2} |V|^{1/2}} \quad (28)$$

onde $|V|$ é o determinante da matriz V .

Os estimadores de máxima verossimilhança são fornecidos pela maximização da função L dada em (28). Por questões práticas, considera-se o máximo do logaritmo neperiano da função L , uma vez que a função logarítmica é estritamente crescente.

Então, maximizar L , significa maximizar $\delta = \log L$:

$$\delta = \log L = -\frac{n}{2} \log 2\pi - \frac{1}{2} \log |V| - \frac{1}{2} (y - X\theta)' V^{-1} (y - X\theta) \quad (29)$$

Para maximizar δ , deriva-se (29) em relação a θ , em relação a σ_{ε}^2 e a cada σ_i^2 , obtendo-se as equações:

$$\frac{\partial \delta}{\partial \theta} = X' V^{-1} y - X' V^{-1} X \theta \quad (30)$$

Sabendo-se, conforme Searle et al. (1992), que $\frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} = Z_i Z_i'$;

$$\frac{\partial V^{-1}}{\partial \sigma_i^2} = -V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} V^{-1} \quad \text{e} \quad \frac{\partial \log |V|}{\partial \sigma_i^2} = \text{tr} \left(V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} \right), \quad \text{tem-se:}$$

$$\frac{\partial \delta}{\partial \sigma_i^2} = -\frac{1}{2} \text{tr} (V^{-1} Z_i Z_i') + \frac{1}{2} (y - X\theta)' V^{-1} Z_i Z_i' V^{-1} (y - X\theta) \quad (31)$$

Igualando-se as derivadas parciais (30) e (31) a zero, obtêm-se o sistema de equações:

$$\begin{cases} X' \tilde{V}^{-1} X \tilde{\theta} = X' \tilde{V}^{-1} y \\ \text{tr} (\tilde{V}^{-1} Z_i Z_i') = (y - X\tilde{\theta})' \tilde{V}^{-1} Z_i Z_i' \tilde{V}^{-1} (y - X\tilde{\theta}) \end{cases} \quad (32)$$

onde $\tilde{\theta}$ e $\tilde{V}$ representam as estimativas ML de θ e V .

As equações do sistema dadas por (32) devem ser resolvidas para $\tilde{\theta}$ e $\tilde{\sigma}_i^2$, onde os elementos $\tilde{\sigma}_i^2$ são os componentes de variância implícitos em $\tilde{V}$. Essas equações são não lineares nos elementos $\tilde{\sigma}_i^2$. Sendo assim, o sistema (32) é não linear em $\tilde{\sigma}_i^2$, havendo a necessidade de resolvê-lo utilizando-se algum processo numérico iterativo.

Alternativamente, considerando-se $I = V^{-1} V = V^{-1} \sum_{i=0}^r Z_i Z_i' \tilde{\sigma}_i^2$, o lado

esquerdo da segunda equação do sistema (32) pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
\text{tr}(\tilde{V}^{-1}Z_iZ_i'\tilde{V}^{-1}V) &= \text{tr}\left(\tilde{V}^{-1}Z_iZ_i'\tilde{V}^{-1}\sum_{j=0}^rZ_jZ_j'\tilde{\sigma}_j^2\right) \\
&= \sum_{j=0}^r\text{tr}(\tilde{V}^{-1}Z_iZ_i'\tilde{V}^{-1}Z_jZ_j')\tilde{\sigma}_j^2 \\
&= \left\{\text{tr}(\tilde{V}^{-1}Z_iZ_i'\tilde{V}^{-1}Z_jZ_j')\tilde{\sigma}_j^2\right\}_{j=0}^r
\end{aligned}$$

Isolando-se θ , na primeira equação do sistema (32), obtém-se:

$$\tilde{\theta} = (X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}y \quad (33)$$

Considerando-se o lado direito da segunda equação do sistema (32), e o resultado dado em (33), tem-se que:

$$(y - X\tilde{\theta})'\tilde{V}^{-1}Z_iZ_i'\tilde{V}^{-1}(y - X\tilde{\theta}) = y'\tilde{P}Z_iZ_i'\tilde{P}y$$

onde: $\tilde{P} = \tilde{V}^{-1} - \tilde{V}^{-1}X(X'\tilde{V}^{-1}X)^{-1}X'\tilde{V}^{-1}$.

Assim, pode-se reescrever as $r + 1$ equações do sistema (32) como:

$$\begin{cases} X'\tilde{V}^{-1}X\tilde{\theta} = X'\tilde{V}^{-1}y \\ \text{tr}(\tilde{V}^{-1}Z_iZ_i'\tilde{V}^{-1}Z_jZ_j')\tilde{\sigma}_j^2 = y'\tilde{P}Z_iZ_i'\tilde{P}y \end{cases} \quad (34)$$

Assim, o estimador de ML para $X\theta$ é dado por:

$$\text{MLE}(\lambda'X\theta) = \lambda'X(X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}y$$

O método da máxima verossimilhança é iterativo e fornece sempre estimativas não negativas dos componentes de variâncias, mas estas são viesadas, devido ao fato do método não considerar a perda dos graus de liberdade resultante da estimação dos efeitos fixos do modelo. (Searle et al., 1992).

3.4.2.2 Método da máxima verossimilhança restrita: REML

No método da máxima verossimilhança, estimam-se θ , σ_ε^2 e σ_i^2 , através da maximização da função de verossimilhança, L , dada em (28). Já no método da máxima verossimilhança restrita, a função de verossimilhança é dividida em duas partes

independentes, uma referente aos efeitos fixos (L'') e outra referente aos efeitos aleatórios (L'). Os componentes de variância referentes aos efeitos aleatórios, σ_ε^2 e σ_i^2 , são estimados pela maximização de L' e os efeitos fixos, θ , através da maximização de L'' .

Tal metodologia é uma variação do método da máxima verossimilhança para modelos mistos, proposta por Patterson & Thompson (1971) para delineamentos em blocos casualizados.

Preferivelmente ao uso do vetor y diretamente, o método de máxima verossimilhança restrita está baseado nas combinações lineares dos elementos de y , de tal forma que essas combinações não contenham nenhum dos efeitos fixos. Tais combinações são equivalentes aos resíduos obtidos após o ajuste dos efeitos fixos (Searle et al., 1992).

Os estimadores REML são obtidos maximizando-se a parte da função de verossimilhança de um vetor de combinações lineares das observações que é invariante a $X\theta$.

Seja $K'y$ esse vetor. Escreve-se, então, o modelo dado em (1), $y = X\theta + \sum_{i=1}^r Z_i u_i + \varepsilon$, como $K'y = K'X\theta + K'Zu + K'\varepsilon$, que é invariante para $X\theta$ se, e somente se, $K'X\theta = \phi \Rightarrow K'X = \phi$. Mas, $K'X = \phi$, se e somente se $K' = TM$, para $M = I - X(X'X)^-X'$ e algum T . A matriz K' deve ser de posto linha completo; e assim T também. Portanto $r[K'] = r[T] = n-r$ e $r[X] = r$.

Considerando-se $y \cap N(X\theta, V)$, tem-se, sob a condição $K'X = \phi$,

$$K'y \cap N(\phi, K'VK) \quad (35)$$

cujo logaritmo da função de verossimilhança é dado por:

$$\lambda = \log L = -\frac{n}{2} \log 2\pi - \frac{1}{2} \log |K'VK| - \frac{1}{2} y'K'V^{-1}Ky \quad (36)$$

Para estimar-se σ_i^2 , deriva-se (36) em relação a cada σ_i^2 . Igualando-se essa derivada a zero, obtém-se a seguinte equação:

$$-\frac{1}{2} \text{tr} \left[(K' \tilde{V} K)^{-1} K' Z_i Z_i' K \right] = -\frac{1}{2} y' K (K' \tilde{V} K)^{-1} K' Z_i Z_i' K (K' \tilde{V} K)^{-1} K' y$$

que pode ser reescrita como:

$$\text{tr} [\tilde{P} Z_i Z_i'] = y' \tilde{P} Z_i Z_i' \tilde{P} y \quad (37)$$

$$\text{com } \tilde{P} = K (K' \tilde{V} K)^{-1} K' = \tilde{V}^{-1} - \tilde{V}^{-1} X (X' \tilde{V}^{-1} X)^{-1} X' \tilde{V}^{-1}.$$

De modo análogo à obtenção das equações (34), pode-se reescrever as equações (37) como:

$$= \left\{ \text{tr} (\tilde{P} Z_i Z_i' \tilde{P} Z_j Z_j') \tilde{\sigma}_j^2 \right\}_{j=0}^r = y' \tilde{P} Z_i Z_i' \tilde{P} y \quad (38)$$

cujas soluções, por processo iterativo, fornece os estimadores de σ_i^2 .

O método da máxima verossimilhança restrita também é iterativo e exige normalidade, como o Método ML. No entanto, considera a perda dos graus de liberdade devido aos efeitos fixos, fornecendo estimadores não viesados e de variância mínima para dados balanceados.

Para dados desbalanceados, ambos os métodos fornecem estimativas viesadas. Entretanto, segundo Searle (1971), Harville (1977), citados por Perri & Iemma (1999) e Searle et al. (1992), dadas as propriedades dos estimadores REML, eles têm sido preferidos quando os dados são desbalanceados. Segundo Perri (1998), as razões para essa preferência são justificadas pelo fato dos estimadores REML serem funções de estatísticas suficientes, consistentes e assintoticamente normais e eficientes; levarem em consideração a perda dos graus de liberdade envolvidos nas estimativas dos efeitos fixos e, para dados balanceados serem idênticos aos estimadores ANOVA, de variância mínima e não-viesados;

3.4.3 Estimação com base em funções quadráticas

De acordo com Searle et al. (1992), os métodos de estimação de componentes de variância com base em estimadores quadráticos, como técnica, consistem em desenvolver estimadores de acordo com critérios pré-estabelecidos.

Assim, o método do estimador quadrático não-viesado de norma mínima (MINQUE) é o método que busca um estimador de norma mínima, que seja função quadrática dos dados e que seja, também, não viesado. Se, no entanto, variância mínima é o critério estabelecido no lugar de norma mínima, e os critérios de ser função quadrática das observações e ser não viesado são mantidos, então o que se busca é o estimador quadrático não-viesado de variância mínima. Ressalta-se, porém, que os critérios são impostos às matrizes núcleos das formas quadráticas utilizadas na estimação das funções quadráticas das observações.

3.4.3.1 Estimador quadrático não-viesado de norma mínima: MINQUE

Rao, (1971a) sugere um método de estimação, o método MINQUE, que não requer a suposição de normalidade dos dados, como os métodos ML e REML, apresentando, ainda, a vantagem de não necessitar de processo iterativo para resolução de suas equações, ou seja, as equações MINQUE têm soluções explícitas. Seu desenvolvimento envolve álgebra extensa e seu conceito utiliza um conjunto de pesos pré-atribuídos (w) para os componentes de variância desconhecidos.

Sendo assim, segundo Searle et al.(1992), diferentes pesos podem levar a diferentes estimativas para um mesmo conjunto de dados. O método MINQUE fornece estimativas não viesadas, invariantes e de norma mínima para os componentes de variância, fazendo uso de formas quadráticas.

Seja o modelo misto geral dado por (2), $y = X\theta + \sum_{i=1}^r Z_i u_i + \varepsilon$, com

$$E(y) = X\theta \text{ e } V = \sum_{i=0}^r Z_i Z_i' \sigma_i^2 = \sum_{i=0}^r W_i \sigma_i^2.$$

O problema está em estimar o valor médio θ e os componentes de variância σ_i^2 . De modo geral, admite-se para o desenvolvimento do método, que a estimativa de um componente de variância é obtida por uma combinação linear dos componentes.

Seja a combinação linear dos componentes dada por:

$$(p'_1 + p'_2 + \dots + p'_r) \sigma_i^2 = \sum_{i=0}^r p'_i \sigma_i^2 = p' \sigma^2 \quad (39)$$

onde p representa algum vetor conhecido.

Impõem-se, como estimador de (39), uma forma quadrática $y'Ay$. Então o MINQUE de $p' \sigma^2$ é $y'Ay$, tal que $A=A'$, $AX=\phi$ e $E(y'Ay) = \text{tr}(AV) + \theta'X'AX\theta = \text{tr}(AV) = \text{tr}(AZ_i Z_i') = p_i$, com $i = 0, \dots, r$, minimizando-se a norma euclidiana.

Segundo Searle et al. (1992), no modelo (1) os vetores u_i são desconhecidos, com média zero. Entretanto, segundo Rao (1972), se os vetores u_i são conhecidos, um “estimador natural” de σ_i^2 é dado por: $\frac{u_i' u_i}{q_i}$, onde q_i é a dimensão de u_i .

Então um estimador “natural” de $p' \widetilde{\sigma}^2$ é dado por:

$$p' \widetilde{\sigma}^2 = \sum_i p_i \frac{u_i' u_i}{q_i} = u' \Delta u \quad (40)$$

$$\text{onde } \Delta = \sum_i \frac{p_i}{q_i} I_{q_i}.$$

Segundo Searle et al. (1992), um outro estimador:

$$p'\hat{\sigma}^2 = y' Ay = u' Z' A Z u \quad (41)$$

pode ser utilizado. Então, a metodologia descrita por Rao (1971a), consiste em minimizar a diferença entre os estimadores dados por (40) e (41), considerando as condições: $A=A'$; $AX=\phi$ e $p_i = \text{tr}(AZ_i Z_i')$, com $i = 0, \dots, r$.

Em síntese, a estimação dos componentes de variância pelo método MINQUE consiste em utilizar-se as equações REML, dadas por (38), substituindo-se P por P_w e V por V_w , onde em lugar de σ^2 são considerados alguns pesos pré-fixados w .

Tem-se, então, o sistema:

$$\left\{ \text{tr}(P_w Z_i Z_i' P_w Z_j Z_j') \right\} \hat{\sigma}_j^2 = \{ y' P_w Z_i Z_i' P_w y \} \quad (42)$$

onde P_w é o projetor ortogonal dado por $P_w = V_w^{-1} - V_w^{-1} X (X' V_w^{-1} X)^{-1} X' V_w^{-1}$ e V é como em (3), considerando-se os pesos w em lugar de σ^2 .

A resolução do sistema (42) fornece as estimativas para os componentes de variância e covariância através do método MINQUE. Cabe ressaltar, porém, que as estimativas MINQUE não são obtidas iterativamente. Considera-se o primeiro resultado de (42), obtido a partir de um conjunto de pesos iniciais.

Se para a obtenção das estimativas pelo método MINQUE, considera-se os pesos pré-atribuídos (w), como as estimativas para os componentes de variância obtidas pelo método ANOVA, então o método MINQUE é denominado MINQUE(A).

Uma relação importante entre os métodos REML e MINQUE é que se o valor inicial no processo iterativo REML é w , então a primeira solução do sistema de equações para o REML é um estimador MINQUE.

3.4.3.2 Estimador quadrático não-viesado de variância mínima: MINQUE

O método MINQUE não exige nenhuma suposição sobre a forma da distribuição da variável aleatória y . No entanto, se a suposição usual de normalidade está

presente, a solução MINQUE tem a propriedade de ser uma função quadrática não-viesada das observações com variância mínima, ou seja, é um estimador quadrático não-viesado de variância mínima, MIVQUE. (Searle, 1987).

O estimador MIVQUE(A) utiliza as equações REML sem iteração, tomando as estimativas ANOVA como valores a priori. Embora a teoria MIVQUE especifique que os valores a priori sejam independentes dos dados, justifica-se o uso das estimativas ANOVA em decorrência da facilidade de obtenção.

De modo análogo, define-se o estimador MIVQUE(0), como um estimador MIVQUE, com a suposição à priori de que a matriz de variâncias e covariâncias é a matriz identidade.

3.4.3.3 Estimador quadrático não-viesado de norma mínima iterativo: I-MINQUE

O estimador MINQUE utiliza um vetor de pesos w como um valor pré-fixado de σ^2 e nenhuma iteração está envolvida. No entanto, tendo sido obtida uma solução $\tilde{\sigma}_1^2$, por exemplo, existe a idéia de utilizá-la como um novo vetor de pesos w , para o qual um novo conjunto de equações pode ser estabelecido e resolvido, produzindo $\tilde{\sigma}_2^2$, e assim sucessivamente. Isto leva a utilizar as equações MINQUE iterativamente para produzir o MINQUE Iterativo, ou os estimadores I-MINQUE. (Searle et al., 1992).

Portanto,

$$\text{I-MINQUE} = \text{REML}$$

Ressalta-se, porém, que o procedimento MINQUE não exige a suposição de normalidade das observações, suposição esta exigida pelo método da máxima verossimilhança restrita.

Brown⁵, citado por Searle (1987), mostra que, mesmo sem a suposição de normalidade sobre y , as soluções I-MINQUE têm propriedades de normalidade para grandes amostras.

3.4.4 Aspectos computacionais

A utilização de *softwares* estatísticos, quando da obtenção das estimativas dos componentes de variância para modelos mistos é discutida por Montebelo (1997), Montebelo & Iemma (1999), em cujos trabalhos os autores comparam doze procedimentos incorporados por dez sistemas computacionais estatísticos universalmente adotados.

Alguns dos métodos apresentados neste trabalho estão implementados nos procedimentos VARCOMP e MIXED do SAS, discutidos com detalhes por Iemma & Perri (1996), Perri & Iemma (1996 e 1999); Perri (1998) e Montebelo & Iemma (1999).

O PROC VARCOMP, idealizado para a estimação dos componentes de variância em um modelo linear geral, é apropriado para modelos de efeitos aleatórios. Estima a contribuição de cada efeito para a variância da variável dependente, utilizando os métodos ANOVA, ML, REML e MIVQUE(0), este último, *default* para os componentes de variância.

As estimativas ANOVA ou tipo I obtidas através do PROC VARCOMP são baseadas no Método III de Henderson, apresentado em 3.4.1.4. As estimativas ML e REML utilizam a transformação W descrita por Hartley & Rao (1967), onde W corresponde à matriz P das equações de máxima verossimilhança descritas em (34). O processo iterativo inicia-se com as estimativas MIVQUE(0).

⁵ BROWN. K. G. Asymptotic behavior of MINQUE - type estimators of variance components. *The Annals of Statistics*, v.4, p.746-754, 1976.

O PROC MIXED, idealizado para modelos mistos, ajusta o modelo misto geral dado em (1) através do método de mínimos quadrados generalizados, permitindo especificação de estruturas mais gerais da matriz de variâncias e covariâncias.

O PROC MIXED apresenta três métodos para a estimação dos componentes de variância: MIVQUE(0), o método ML e o REML (*default*). O procedimento para a obtenção dos estimadores ML e REML dos componentes de variância consiste em maximizar $-2\ln L(\text{ML})$, função completa de ML, ou a função restrita de REML, respectivamente, sob todos os parâmetros desconhecidos, utilizando uma modificação do método de Newton-Raphson para obter numericamente a matriz V. (SAS, 1992; SAS, 1997).

3.4.5 Estruturas gerais da matriz de variâncias e covariâncias

Na análise de modelos mistos, tanto a estimação e os testes sobre os efeitos fixos quanto a predição dos efeitos aleatórios dependem da estimação dos componentes de variância. A estimação dos componentes de variância depende da estrutura da matriz de variâncias e covariâncias dos efeitos aleatórios G, de R e dos métodos de estimação utilizados.

Para o modelo linear misto, $y = X\theta + Zu + \varepsilon$, dado em (1), tem-se:

$$E \begin{bmatrix} u \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \text{var} \begin{bmatrix} u \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G & 0 \\ 0 & R \end{bmatrix},$$

como apresentado em (4), ou seja, $y \sim N(X\theta, V)$, onde $V = ZGZ' + R$.

Segundo Latour et al. (1994), pode-se construir V montando-se a matriz Z de delineamento para os efeitos aleatórios e especificando-se estruturas para as matrizes G e R de variâncias e covariâncias.

Embora seja possível, através do PROC MIXED, especificar distintas estruturas para a matriz R de variâncias e covariâncias para os erros aleatórios, optou-se,

neste estudo, por adotar a estrutura $R = I\sigma_\varepsilon^2$, visando uma comparação entre os métodos de estimação.

Várias estruturas de covariâncias podem ser especificadas segundo as características dos dados, para a matriz G. (Searle et al., 1992; Latour et al., 1994; SAS, 1997).

Sendo assim, para ilustrar a utilização do PROC MIXED do sistema estatístico SAS, serão consideradas neste estudo, quatro estruturas para a matriz G de variâncias e covariâncias para os efeitos aleatórios do modelo (1) que estão entre as mais comumente utilizadas em problemas práticos e que estão disponíveis no PROC MIXED. São elas:

- Componentes de Variância, VC, estrutura *default* para a matriz G, cujo elemento (i, j) é dado por $\sigma_k^2 l(i = j)$ onde i corresponde ao k -ésimo elemento e $l(i = j)$ é igual a 1 quando $i = j$, e zero caso contrário;
- Diagonal, TOEP(1), dada por $I\sigma^2$, onde σ^2 é a composição das variâncias dos efeitos aleatórios;
- Simetria composta, CS, cujo elemento (i, j) é $\sigma_1^2 + \sigma^2 l(i = j)$ onde $l(i = j)$ é igual a 1 quando $i = j$, e zero caso contrário.
- Huynh-Feldt, HF, onde os elementos (i, j) são da forma $(\sigma_i^2 + \sigma_j^2) / 2 - \lambda l(i \neq j)$ onde λ são autovalores positivos associados à matriz de covariâncias e $l(i \neq j)$ é igual a 1 quando $i \neq j$, e zero caso contrário.

A Tabela 1 descreve a notação e a forma de tais estruturas de G .

Tabela 1. Estruturas da matriz de variâncias e covariâncias

Estruturas de G	Notação	Exemplo da forma
Componentes de Variância (Variance Components)	VC	$\begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\alpha}^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\beta}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{\beta}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_{\beta}^2 \end{bmatrix}$
Diagonal (Toeplitz with one band)	TOEP(1)	$\begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma^2 \end{bmatrix}$
Simetria Composta (Compound Symmetry)	CS	$\begin{bmatrix} \sigma^2 + \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 \\ \sigma_1^2 & \sigma^2 + \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 \\ \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma^2 + \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 \\ \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma^2 + \sigma_1^2 & \sigma_1^2 \\ \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma^2 + \sigma_1^2 \end{bmatrix}$
Huynh-Feldt (Huynh-Feldt)	HF	$\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \frac{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}{2} - \lambda & \frac{\sigma_1^2 + \sigma_3^2}{2} - \lambda \\ \frac{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}{2} - \lambda & \sigma_2^2 & \frac{\sigma_2^2 + \sigma_3^2}{2} - \lambda \\ \frac{\sigma_1^2 + \sigma_3^2}{2} - \lambda & \frac{\sigma_2^2 + \sigma_3^2}{2} - \lambda & \sigma_3^2 \end{bmatrix}$

4 ILUSTRAÇÃO DOS MÉTODOS APRESENTADOS

4.1 Considerações iniciais

A ilustração dos métodos descritos neste estudo está feita em duas partes.

A primeira, apresentada em 4.2, tem como objetivo ilustrar comparativamente, sem o apelo de competição, os nove métodos considerados, de modo a estar tão próximo quanto possível da realidade do pesquisador, usuário dos métodos de estimação que, muitas vezes, não dispõe de meios para escolher a estrutura mais adequada da matriz de variâncias e covariâncias. Para tanto, através de um conjunto de dados desbalanceados, adaptados de Searle et al.(1992), constantes da Tabela 2, para o qual adota-se o modelo misto de dois fatores com interação, descrito em (43), são obtidas as estimativas tomando-se uma matriz de variâncias e covariâncias com estrutura do tipo VC, considerada *default* na grande maioria dos sistemas computacionais estatísticos disponíveis no mercado. Neste item, não há como indicar categoricamente o melhor método, uma vez que os verdadeiros valores dos parâmetros são desconhecidos.

A segunda, apresentada em 4.3, busca ilustrar uma situação mais próxima da ideal, na qual o pesquisador dispõe de meios para estudar a estrutura de covariâncias de seus dados. Aqui são ilustrados apenas os três métodos disponíveis no PROC MIXED do sistema estatístico SAS. Nesse contexto, são consideradas os quatro tipos de matrizes de variâncias e covariâncias descritas na Tabela 1, para as estruturas de G: VC, TOEP(1), CS e HF, escolhidas entre cerca de quarenta estruturas disponíveis no PROC MIXED do Sistema Estatístico SAS, conforme justificado anteriormente. Para tanto, considera-se o modelo descrito em (43) e os dados descritos na Tabela 2.

Para a ilustração numérica dos métodos, considere o modelo misto de dois fatores com interação, A fixo, B aleatório e interação AB aleatória, caracterizado pelo Modelo Superparametrizado:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk} \quad (43)$$

com $i = 1, 2;$ $j = 1, 2, 3$ $k = 1, \dots, n_{ij}$

onde:

y_{ijk} é a k-ésima observação no i-ésimo nível do fator A e j-ésimo nível do fator B;

μ é uma constante inerente a todas as observações;

α_i é o efeito fixo do nível i do fator A;

β_j é o efeito aleatório do nível j do fator B, onde $\beta_j \cap N(0, \sigma_\beta^2)$ e independentes;

$(\alpha\beta)_{ij}$ é o efeito aleatório da interação entre o i-ésimo nível do fator A e o j-ésimo nível do fator B, onde $\gamma_{ij} \cap N(0, \sigma_{\alpha\beta}^2)$ e independentes;

ε_{ijk} é o erro aleatório referente à observação y_{ijk} , onde $\varepsilon_{ijk} \cap N(0, \sigma_\varepsilon^2)$ e independentes.

β_j , $(\alpha\beta)_{ij}$ e ε_{ijk} são independentemente distribuídos.

Pode-se reescrever o modelo (43), matricialmente:

$$y = \mu 1 + X \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} + Z_1 \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix} + Z_2 \begin{bmatrix} (\alpha\beta)_{11} \\ (\alpha\beta)_{12} \\ (\alpha\beta)_{13} \\ (\alpha\beta)_{21} \\ (\alpha\beta)_{22} \\ (\alpha\beta)_{23} \end{bmatrix} + \varepsilon \quad (44)$$

onde:

1 é um vetor de elementos iguais a um, de dimensão 8×1 ;

X é uma matriz 8×2 de coeficientes relativos aos efeitos fixos α_i , do fator A;

Z_1 é uma matriz 8×3 de coeficientes relativos aos efeitos aleatórios β_j do fator B;

Z_2 é uma matriz 8×6 de coeficientes relativos à interação entre os efeitos α_i (fixos) e β_j (aleatórios);

$y_{ij} \sim N(X\theta, V)$, onde V é como em (3).

Seja o conjunto de dados desbalanceados, adaptados de Searle et al.(1992), apresentado na Tabela 2.

Tabela 2. Dados de um experimento com classificação dupla cruzada

Fator A	Fator B			
	j = 1	j = 2	j = 3	
i = 1	$y_{111} = 7,9$	$y_{121} = 6,0$	$y_{131} = 2,0$	
	$y_{112} = 8,1$	-	-	
	16,0(2)8,0	6,0(1)6,0	2,0(1)2,0	24,0(4)6,0
i = 2	$y_{211} = 8,0$	$y_{221} = 4,8$	$y_{231} = 12,0$	
	-	$y_{222} = 7,2$	-	
	8,0(1)8,0	12,0(2)6,0	12,0(1)12,0	32,0(4)6,0
	24,0(3)8,0	18,0(3)6,0	14,0(2)7,0	56,0(8)7,0

Fonte: Searle et al. (1992).

representado matricialmente através de (44), por:

$$\begin{bmatrix} 7,9 \\ 8,1 \\ 6 \\ 2 \\ 8 \\ 4,8 \\ 7,2 \\ 12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \mu + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\alpha\beta)_{11} \\ (\alpha\beta)_{12} \\ (\alpha\beta)_{13} \\ (\alpha\beta)_{21} \\ (\alpha\beta)_{22} \\ (\alpha\beta)_{23} \end{bmatrix} + \varepsilon \quad (45)$$

4.2. Matriz de variâncias e covariâncias do tipo VC

Para a obtenção das estimativas dos componentes de variância dos dados da Tabela 3, através do modelo (43), adotou-se uma matriz de variâncias e covariâncias com estrutura do tipo G=VC, descrita em (46), para os efeitos aleatórios e $R = I_9 \sigma_\varepsilon^2$ para os erros aleatórios:

$$G = \begin{bmatrix} I_3 \sigma_\beta^2 & \phi \\ \phi & I_6 \sigma_{\alpha\beta}^2 \end{bmatrix} \quad (46)$$

Assim, tem-se V dada em (3) caracterizada por :

$$V = ZGZ' + R = Z \begin{bmatrix} I_3 \sigma_\beta^2 & \phi \\ \phi & I_6 \sigma_{\alpha\beta}^2 \end{bmatrix} Z' + I_9 \sigma_\varepsilon^2 \quad (47)$$

onde Z é a matriz de delineamento referente aos efeitos aleatórios do modelo (43).

4.2.1 Métodos derivados da teoria dos momentos

4.2.1.1 Estimativas ANOVA

Seja σ^2 o vetor de componentes de variâncias a ser estimado dado por:

$$\sigma^2 = \begin{bmatrix} \sigma_\beta^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (48)$$

Para a obtenção das estimativas, através do Método da Análise de Variância, é necessário encontrar as formas quadráticas correspondentes às somas de quadrados.

De (15) tem-se que: $E(s_i) = \text{tr}(A_i V) = \text{tr}[Z_j A_i Z_j'] \sigma_j^2$, onde A_i são as matrizes núcleos das formas quadráticas, análogas às somas de quadrados para dados balanceados e V é a matriz de variâncias e covariâncias dada em (47).

Tabela 3. Expressões das formas quadráticas e suas esperanças, para o modelo (44)

Causas de Variação	Formas Quadráticas	Esperança das Formas Quadráticas
A	$SSA = y'(P_2 - P_1)y$	$E(SSB) = \text{tr}[(P_3 - P_1)V]$ $E(SSAB) = \text{tr}[(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)V]$ $E(SSE) = \text{tr}[(I - P)V]$
B	$SSB = y'(P_3 - P_1)y$	
AB	$SSAB = y'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)y$	
Resíduo	$SSE = y'(I - P)y$	
Total	$SST = y'(I - P_1)y$	

onde: $P = WW^+ = W(W'W)^-W'$, $W = [1 \ X \ Z_1 \ Z_2]$ (49)

$$P_1 = 1(1'1)^-1' = \frac{1}{n}J_n, \quad J_n \text{ uma matriz de elementos iguais a } 1 \quad (50)$$

$$P_2 = X(X'X)^-X' \quad (51)$$

$$P_3 = Z_1(Z_1'Z_1)^-Z_1' \quad (52)$$

$$P_4 = Z_2(Z_2'Z_2)^-Z_2' \quad (53)$$

Da Tabela 3 consideram-se, na composição da matriz C de (16), somente as esperanças dos fatores aleatórios:

$$E(SSB) = \left\{ \text{tr}[Z_1'(P_3 - P_1)Z_1] \quad \text{tr}[Z_2'(P_3 - P_1)Z_2] \quad \text{tr}[Z_0'(P_3 - P_1)Z_0] \right\} \sigma^2 \quad (54)$$

$$E(SSAB)' = \left[\begin{array}{c} \text{tr}[Z_1'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)Z_1] \\ \text{tr}[Z_2'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)Z_2] \\ \text{tr}[Z_0'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)Z_0] \end{array} \right] \sigma^2 \quad (55)$$

$$E(SSE) = \left\{ \text{tr}[Z_1'(I - P)Z_1] \quad \text{tr}[Z_2'(I - P)Z_2] \quad \text{tr}[Z_0'(I - P)Z_0] \right\} \sigma^2 \quad (56)$$

onde σ^2 é como em (48).

Considerando-se o modelo 45 e as equações dadas em (54 a 56) tem-se, respectivamente, as esperanças das somas de quadrados:

$$E(SSB) = \begin{bmatrix} 5.2500 & 2.8333 & 2.0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\epsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (57)$$

$$E(SSAB) = \begin{bmatrix} -0,2500 & 2,1667 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (58)$$

$$E(SSE) = \begin{bmatrix} 0,0000 & 0,0000 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (59)$$

Obtém-se, então, a Tabela 4, que sintetiza as somas de quadrados e respectivas esperanças para o modelo dado em (45).

Tabela 4. Somas de quadrados e suas esperanças para o modelo (45)

Causas de Variação	Somas de Quadrados	Esperança das Somas de Quadrados
A	SSA = 8,00	
B	SSB = 6,00	$\begin{aligned} &5,2500\sigma_{\beta}^2 + 2,8333\sigma_{\alpha\beta}^2 + 2,0000\sigma_{\varepsilon}^2 \\ &- 0,2500\sigma_{\beta}^2 + 2,1667\sigma_{\alpha\beta}^2 + 2,0000\sigma_{\varepsilon}^2 \\ &2,0000\sigma_{\varepsilon}^2 \end{aligned}$
AB	SSAB = 42,00	
Resíduo	SSE = 2,90	
Total	SST = 58,90	

Igualando-se as somas de quadrados às respectivas esperanças dadas na Tabela 4, considerando-se somente os efeitos aleatórios, obtém-se, conforme descrito em (16), o sistema:

$$\begin{bmatrix} 5,2500 & 2,8333 & 2,0000 \\ -0,2500 & 2,1667 & 2,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_{\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6,0 \\ 42,0 \\ 2,9 \end{bmatrix} \quad (60)$$

cujas resolução fornece as estimativas dos componentes de variância para o modelo (45):

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_{\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,1793 & -0,2345 & 0,0552 \\ 0,0207 & 0,4345 & -0,4552 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,5000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6,0 \\ 42,0 \\ 2,9 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_{\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -8,6124 \\ 17,0524 \\ 1,4500 \end{bmatrix} \quad (61)$$

As estimativas obtidas em (61) são não viesadas para os componentes de variância. Além disso, observa-se que a estimativa obtida para $\hat{\sigma}_{\beta}^2$ é negativa, fato que

pode causar embaraço ao usuário do método ANOVA, uma vez que, por definição, $\hat{\sigma}_\beta^2$, variância do fator aleatório B, é positiva.

Uma vez que os dados são desbalanceados, ser não viesado é a única propriedade do estimador ANOVA para os componentes de variância. Pode ser conveniente renunciar a tal método em função de outros, como o ML, por exemplo, que fornece estimativas viesadas, mas que para grandes amostras têm a propriedade de normalidade e eficiência assintóticas, como pode ser visto em Searle et al. (1992).

4.2.1.2 Estimativas do tipo Henderson 1

Para a obtenção das estimativas dos componentes de variância através do Método I de Henderson, considera-se, aqui, o fator fixo A como fator aleatório.

Calculam-se, então, as formas quadráticas para o modelo dado em (44), análogas às somas de quadrados para dados balanceados, como mostra a Tabela 5.

Tabela 5. Expressões das formas quadráticas e suas esperanças, para o modelo (44), considerando-se os efeitos como aleatórios.

Causas de Variação	Formas Quadráticas	Esperança das Formas Quadráticas
A	$SSA = y'(P_2 - P_1)y$	$E(SSA) = \text{tr}[(P_2 - P_1)V]$
B	$SSB = y'(P_3 - P_1)y$	$E(SSB) = \text{tr}[(P_3 - P_1)V]$
AB	$SSAB = y'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)y$	$E(SSAB) = \text{tr}[(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)V]$
Resíduo	$SSE = y'(I - P)y$	$E(SSE) = \text{tr}[(I - P)V]$

onde as matrizes núcleos das formas quadráticas são como em (49 a 53) e as esperanças são dadas por:

$$[E(SSA)]' = \begin{bmatrix} \text{tr}[X'(P_2 - P_1)X] \\ \text{tr}[Z_1'(P_2 - P_1)Z_1] \\ \text{tr}[Z_2'(P_2 - P_1)Z_2] \\ \text{tr}[Z_0'(P_2 - P_1)Z_0] \end{bmatrix}' \begin{bmatrix} \sigma_\alpha^2 \\ \sigma_\beta^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (62)$$

$$[E(SSB)]' = \begin{bmatrix} \text{tr}[X'(P_3 - P_1)X] \\ \text{tr}[Z_1'(P_3 - P_1)Z_1] \\ \text{tr}[Z_2'(P_3 - P_1)Z_2] \\ \text{tr}[Z_0'(P_3 - P_1)Z_0] \end{bmatrix}' \begin{bmatrix} \sigma_\alpha^2 \\ \sigma_\beta^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (63)$$

$$[E(SSAB)]' = \begin{bmatrix} \text{tr}[X'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)X] \\ \text{tr}[Z_1'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)Z_1] \\ \text{tr}[Z_2'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)Z_2] \\ \text{tr}[Z_0'(P_4 - P_2 - P_3 + P_1)Z_0] \end{bmatrix}' \begin{bmatrix} \sigma_\alpha^2 \\ \sigma_\beta^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (64)$$

$$[E(SSE)]' = \begin{bmatrix} \text{tr}[X'(I - P)X] \\ \text{tr}[Z_1'(I - P)Z_1] \\ \text{tr}[Z_2'(I - P)Z_2] \\ \text{tr}[Z_0'(I - P)Z_0] \end{bmatrix}' \begin{bmatrix} \sigma_\alpha^2 \\ \sigma_\beta^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (65)$$

Considerando-se as formas quadráticas dadas em (62 a 65), tem-se o sistema:

$$\begin{bmatrix} n - k_1' & k_3 - k_2' & k_3 - k_{23}' & a - 1 \\ k_4 - k_1' & n - k_2' & k_4 - k_{23}' & b - 1 \\ k_1' - k_4 & k_2' - k_3 & n - k_3 - k_4 + k_{23}' & n' \\ 0 & 0 & 0 & n - s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\alpha^2 \\ \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{SSA} \\ \text{SSB} \\ \text{SSAB} \\ \text{SSE} \end{bmatrix} \quad (66)$$

onde:

$$k_1 = \sum_i n_{i.}^2 \quad k_2 = \sum_j n_{.j}^2 \quad k_3 = \sum_i \frac{\sum_j n_{ij}^2}{n_{i.}} \quad k_4 = \sum_j \frac{\sum_i n_{ij}^2}{n_{.j}}$$

$$k_{23} = \sum_i \sum_j n_{ij}^2 \quad k_r = \frac{k_r}{N} \quad e \quad N' = s - a - b + 1$$

De acordo com as equações dadas em (62 a 65) e considerando-se os dados constantes da Tabela 2, obtém-se as esperanças para os fatores do modelo (45). Ressalta-se que aqui, o Fator A, fixo, é considerado como aleatório.

$$[E(SSA)] = \begin{bmatrix} 4,000 & 0,2500 & 1,5000 & 1,000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_\alpha^2 \\ \sigma_\beta^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (67)$$

$$[E(SSB)] = \begin{bmatrix} 0,3333 & 5,2500 & 2,8333 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\beta}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (68)$$

$$[E(SSAB)] = \begin{bmatrix} -0,3333 & -0,2500 & 2,1667 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\beta}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (69)$$

$$[E(SSE)] = \begin{bmatrix} 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\beta}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (70)$$

A Tabela 6 sintetiza as formas quadráticas e as respectivas esperanças para o modelo dado em (45).

Tabela 6. Formas quadráticas e suas esperanças, para o modelo (45), considerando-se os efeitos como aleatórios.

Causas de Variação	Valores das Formas Quadráticas: Somas de Quadrados	Esperança das Formas Quadráticas
A	SSA = 8,00	$4,0000\sigma_{\alpha}^2 + 0,2500\sigma_{\beta}^2 + 1,5000\sigma_{\alpha\beta}^2 + 1,0000\sigma_{\varepsilon}^2$
B	SSB = 6,00	$0,3333\sigma_{\alpha}^2 + 5,2500\sigma_{\beta}^2 + 2,8333\sigma_{\alpha\beta}^2 + 2,0000\sigma_{\varepsilon}^2$
AB	SSAB = 42,00	$-0,3333\sigma_{\alpha}^2 - 0,2500\sigma_{\beta}^2 + 2,1667\sigma_{\alpha\beta}^2 + 2,0000\sigma_{\varepsilon}^2$
Resíduos	SSE = 2,90	$2,0000\sigma_{\varepsilon}^2$

Igualando-se os valores das formas quadráticas às respectivas esperanças dadas na Tabela 6 obtém-se o sistema (71),

$$\begin{bmatrix} 4,0000 & 0,2500 & 1,5000 & 1,0000 \\ 0,3333 & 5,2500 & 2,8333 & 2,0000 \\ -0,3333 & -0,2500 & 2,1667 & 2,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_{\alpha}^2 \\ \hat{\sigma}_{\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8,0 \\ 6,0 \\ 42,0 \\ 2,9 \end{bmatrix} \quad (71)$$

cujas resoluções fornece as estimativas:

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\alpha^2 \\ \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,2397 & -0,0182 & -0,1421 & 0,0405 \\ -0,0331 & 0,1818 & -0,2149 & 0,0496 \\ 0,0331 & 0,0182 & 0,4149 & -0,4496 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 0,5000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 8,0 \\ 6,0 \\ 42,0 \\ 2,9 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\alpha^2 \\ \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4,0445 \\ -8,0545 \\ 16,4945 \\ 1,4500 \end{bmatrix} \quad (72)$$

Novamente, em (72) observa-se a ocorrência de estimativas negativas para as variâncias dos fatores A e B. Observa-se, também, que as estimativas dos componentes de variância obtidas pelo Método I de Henderson, σ_β^2 e $\sigma_{\alpha\beta}^2$ estão próximas das estimativas obtidas através do método ANOVA e que as estimativas obtidas para σ_ε^2 são idênticas.

Não se pode perder de vista, veja por exemplo Henderson (1953) e Searle (1987), que o Método I de Henderson é mais adequado para modelos aleatórios, mas pode ser adaptado a um modelo misto, considerando-se temporariamente os fatores fixos, como aleatórios. Assim, mesmo fornecendo estimativas compatíveis com as do método ANOVA, descartada $\hat{\sigma}_\alpha^2$, o conjunto de dados descrito na Tabela 2 é proveniente de um modelo misto e, desse modo, as estimativas obtidas em (72) para os componentes de variância são viesadas.

4.2.1.3 Estimativas do tipo Henderson 2

Tem-se para o modelo (21), e considerando-se as matrizes do modelo (45), o sistema de equações normais, conforme o sistema (22), dado por:

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & 2 & 1 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 3 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \alpha_1\beta_1 \\ \alpha_1\beta_2 \\ \alpha_1\beta_3 \\ \alpha_2\beta_1 \\ \alpha_2\beta_2 \\ \alpha_2\beta_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 \\ 32 \\ 24 \\ 18 \\ 14 \\ 16 \\ 6 \\ 2 \\ 8 \\ 12 \\ 12 \end{bmatrix} \quad (73)$$

Resolvendo-se as equações normais dadas em (73), obtém-se as soluções θ^0 descritas em (74):

$$\theta^0 = \begin{bmatrix} 2,2500 \\ 4,7500 \\ 3,0000 \\ 1,6667 \\ 2,3333 \\ 2,7500 \\ 2,0833 \\ -2,5833 \\ 0,2500 \\ -0,4167 \\ 4,9167 \end{bmatrix} \quad (74)$$

A solução θ^0 , para os efeitos fixos, é dada pelas duas primeiras linhas de (74), linhas correspondentes aos efeitos fixos α_i .

Ajusta-se, então, os dados para os efeitos fixos, através das soluções obtidas para α_i , da seguinte forma:

$$X\alpha^0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2,25 \\ 4,75 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2,25 \\ 2,25 \\ 2,25 \\ 2,25 \\ 4,75 \\ 4,75 \\ 4,75 \\ 4,75 \\ 4,75 \end{bmatrix} \quad (75)$$

Usando-se o resultado de (75), obtém-se, conforme o sistema (23), o vetor:

$$y_a = y - X\alpha^0 = \begin{bmatrix} 7,9 \\ 8,1 \\ 6,0 \\ 2,0 \\ 8,0 \\ 4,8 \\ 7,2 \\ 12,0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2,25 \\ 2,25 \\ 2,25 \\ 2,25 \\ 4,75 \\ 4,75 \\ 4,75 \\ 4,75 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5,65 \\ 5,85 \\ 3,75 \\ -0,25 \\ 3,25 \\ 0,05 \\ 2,45 \\ 7,25 \end{bmatrix} \quad (76)$$

onde y_a é o vetor de respostas ajustado para os efeitos fixos, ou seja, ajustado para o fator A, exceto para $\mu_0^* \neq \mu$. Dado que os efeitos aleatórios são os mesmos de (21), Zu não se altera.

Então, o Método II de Henderson consiste em aplicar o Método I ao modelo ajustado para os efeitos fixos, $y_a = y - X\theta^0 = \mu_0^*1 + Zu + K\varepsilon$ dado por (23), onde K é uma matriz conhecida.

Obtém-se, então, de acordo com a Tabela 7, as formas quadráticas e respectivas esperanças para o modelo (44), considerando o vetor resposta ajustado para os efeitos fixos.

Tabela 7. Expressões das formas quadráticas e respectivas esperanças, para o modelo (44), considerando-se o vetor resposta ajustado para os efeitos fixos

Causas de Variação	Formas Quadráticas	Esperança das Formas Quadráticas
B	$SSB = y'(P_3 - P_1)y$	$E(SSB) = \text{tr}[(P_3 - P_1)V]$
AB	$SSAB = y'(P_a - P_3)y$	$E(SSAB) = \text{tr}[(P_a - P_3)V]$
Resíduo	$SSE = y'(I - P_a)y$	$E(SSE) = \text{tr}[(I - P_a)V]$

onde: $P_a = WW^+ = W(W'W)^-W'$, $W = [1 \quad Z_1 \quad Z_2]$

e P_1 e P_3 são como em (50 e 52), respectivamente.

A esperança da forma quadrática da Tabela 7 para SSB é como em (54).

Já as esperanças para $SSAB$ e SSE são dadas por:

$$E(SSAB)' = \begin{bmatrix} \text{tr}[Z_1'(P_a - P_3)Z_1] \\ \text{tr}[Z_2'(P_a - P_3)Z_2] \\ \text{tr}[Z_0'(P_a - P_3)Z_0] \end{bmatrix}' \sigma^2 \quad (77)$$

$$E(SSE) = \left\{ \text{tr}[Z_1'(I - P_a)Z_1] \quad \text{tr}[Z_2'(I - P_a)Z_2] \quad \text{tr}[Z_0'(I - P_a)Z_0] \right\} \sigma^2 \quad (78)$$

Considerando-se o modelo (45) e as equações dadas por (54), (77 e 78) tem-se que:

$$E(SSB) = \begin{bmatrix} 5,2500 & 2,8333 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (79)$$

$$E(SSAB) = \begin{bmatrix} 0,0000 & 3,3667 & 3,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (80)$$

$$E(SSE) = \begin{bmatrix} 0,0000 & 0,0000 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{\alpha}^2 \\ \sigma_{\alpha\beta}^2 \\ \sigma_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} \quad (81)$$

A Tabela 8 sintetiza os valores das formas quadráticas e das respectivas esperanças para o modelo (45), considerando o vetor resposta ajustado para os efeitos fixos.

Tabela 8. Formas quadráticas e suas esperanças para o modelo (45), considerando-se o vetor resposta ajustado para os efeitos fixos

Causas de Variação	Valores das Formas Quadráticas: Somas de Quadrados	Esperança das Formas Quadráticas
B	SSB = 12,0417	$5,2500\sigma_{\beta}^2 + 2,8333\sigma_{\alpha\beta}^2 + 2,0000\sigma_{\varepsilon}^2$
AB	SSAB = 36,4583	$0,3667\sigma_{\alpha\beta}^2 + 3,0000\sigma_{\varepsilon}^2$
Resíduos	SSE = 2,9000	$2,0000\sigma_{\varepsilon}^2$

Igualando-se os valores das formas quadráticas às suas esperanças, obtém-se o sistema:

$$\begin{bmatrix} 5,2500 & 2,8333 & 2,0000 \\ 0,0000 & 3,3667 & 3,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_{\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12,0417 \\ 36,4583 \\ 2,9000 \end{bmatrix} \quad (82)$$

cujas soluções fornecem as estimativas dos componentes de variância para o modelo (23),

$$y_{\bullet} = y - X\theta^0 = \mu_0^* 1 + Zu + K\varepsilon.$$

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,1905 & -0,1472 & 0,0303 \\ 0,0000 & 0,2727 & -0,4091 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,5000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 12,0417 \\ 36,4583 \\ 2,9000 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2,9848 \\ 8,7558 \\ 1,4500 \end{bmatrix} \quad (83)$$

Então, à exceção de $\hat{\sigma}_\varepsilon^2$, que é idêntica às anteriores, as demais estimativas de (83) diferem das estimativas obtidas pelos métodos ANOVA e I de Henderson. Diz a literatura que o Método II de Henderson pode ser utilizado para modelos mistos, desde que tais modelos não possuam interação entre fatores fixos e aleatórios. No entanto, o modelo aqui considerado (45) é um modelo misto com interação entre os fatores A fixo e B aleatório. Portanto, a aplicação do Método II de Henderson a tal modelo é inadequada e sendo assim, as estimativas obtidas em (83) são viesadas para os componentes de variância.

4.2.1.4 Estimativas do tipo Henderson 3

Considerando-se o modelo dado por (44), tem-se a redução na soma de quadrados devida ao ajuste dos parâmetros dada por:

$$R[\mu, \alpha, \beta, (\alpha\beta)] = y'W(W'W)^{-1}W'y \quad \text{com} \quad r(W) = r$$

Os sub-modelos de interesse são:

$$y = \mu 1 + e$$

$$y = \mu 1 + X\alpha + e$$

$$y = \mu 1 + X\alpha + Z_1\beta + e$$

com respectivas reduções:

$$R(u) = y'(11)^{-1}1'y = \frac{1}{n}y'Jy \quad ; \quad r(W_1) = 1$$

$$R(u, \alpha) = y'W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1'y \quad ; \quad W_1 = \begin{bmatrix} 1 & X \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad r(W_1) = q$$

$$R(u, \alpha, \beta) = y'W_1(W_1'W_1)^{-1}W_1'y \quad ; \quad W_1 = \begin{bmatrix} 1 & X & Z_1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad r(W_1) = s$$

Obtém-se, então, sucessivamente, os componentes de variância, através do conjunto de equações que pode ser obtido na Tabela 9.

Tabela 9. Esperança das somas de quadrados para o modelo 44

Somas de Quadrados	Esperanças
$SQE = \sum y^2 - R[\mu, \alpha, \beta, (\alpha\beta)]$	$(n-r)\sigma_e^2$
$R[\mu, \alpha, \beta, (\alpha\beta)] - R[\mu, \alpha, \beta]$	$h_1\sigma_{\alpha\beta}^2 + (r-s)\sigma_e^2$
$R[\mu, \alpha, \beta] - R[\mu, \alpha]$	$h_2\sigma_\beta^2 + h_3\sigma_{\alpha\beta}^2 + (s-q)\sigma_e^2$

onde os fatores h_1 , h_2 e h_3 são obtidos pela expressão:

$$E[R(\theta_2 | \theta_1)] = \text{tr} \left\{ \left[W_2' W_2 - \left(W_2' W_1 (W_1' W_1)^{-1} W_1' W_2 \right) \right] E(\theta_2 \theta_2') \right\} + \sigma_e^2 [r(W) - r(W_1)] \quad (84)$$

para a qual as matrizes W_1 e W_2 são especificadas em cada equação.

Considerando-se os dados da Tabela 2, foram obtidas as respectivas reduções nas somas de quadrados:

$$\begin{array}{ll} R(u) = 392,0000 & ; \quad r(W_1) = 1 \\ R(u, \alpha) = 400,0000 & ; \quad r(W_1) = q = 2 \\ R(u, \alpha, \beta) = 411,6364 & ; \quad r(W_1) = s = 4 \\ R[\mu, \alpha, \beta, (\alpha\beta)] = 448,0000 & ; \quad r(W) = r = 6 \\ y'y = 450,9000 & ; \quad r(I) = n = 8 \end{array}$$

Considerando-se as expressões das esperanças, constantes na Tabela 9, e a expressão dada em (84), calculam-se os coeficientes h_i , $i=1, 2, 3$, dos componentes de variância.

Tem-se, então, para a esperança da soma de quadrados da interação, o coeficiente h_1 , dado por.

$$h_1 = \text{tr} \left\{ \left[W_2' W_2 - \left(W_2' W_1 (W_1' W_1)^{-1} W_1' W_2 \right) \right] \right\} \sigma_{\alpha\beta}^2 = 2,4242 \sigma_{\alpha\beta}^2 \quad (85)$$

onde: $W_1 = \begin{bmatrix} 1 & X & Z_1 \end{bmatrix}$ e $W_2 = \begin{bmatrix} Z_2 \end{bmatrix}$.

De modo análogo ao cálculo de h_1 , dado em (85), são obtidos os coeficientes h_2 e h_3 .

De acordo com a Tabela 9, constrói-se, então, a Tabela 10, que sintetiza as somas de quadrados e respectivas esperanças.

Tabela 10. Somas de quadrados e respectivas esperanças para o modelo 45

Somas de Quadrados	Esperanças
$SQE = \sum y^2 - R[\mu, \alpha, \beta, (\alpha\beta)] = 450,90 - 448,00 = 2,90$	$2,0000\sigma_e^2$
$R[\mu, \alpha, \beta, (\alpha\beta)] - R[\mu, \alpha, \beta] = 448,00 - 411,64 = 36,3636$	$2,4242\sigma_{\alpha\beta}^2 + 2,0000\sigma_e^2$
$R[\mu, \alpha, \beta] - R[\mu, \alpha] = 411,6364 - 400,00 = 11,6364$	$5,0000\sigma_\beta^2 + 2,5758\sigma_{\alpha\beta}^2 + 6,0000\sigma_e^2$

de onde obtém-se o sistema:

$$\begin{bmatrix} 5,0000 & 2,5758 & 2,0000 \\ 0,0000 & 2,4242 & 2,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 2,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_e^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11,6364 \\ 36,3636 \\ 2,9000 \end{bmatrix} \quad (86)$$

cujá resolução fornece as estimativas:

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_e^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,2000 & -0,2125 & 0,0125 \\ 0,0000 & 0,4125 & -0,4125 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,5000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 11,6364 \\ 36,3636 \\ 2,9000 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_e^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -5,3640 \\ 13,8040 \\ 1,4500 \end{bmatrix} \quad (87)$$

Por construção, as estimativas obtidas em (87) são não viesadas para os componentes de variância do modelo (45). Novamente aqui a estimativa para σ_e^2 é idêntica às obtidas anteriormente, ressaltando o fato de que os métodos de estimação derivados da teoria dos momentos forneceram a mesma estimativa para a variância residual.

Observa-se que as estimativas obtidas pelo Método III de Henderson estão próximas das estimativas obtidas pelos métodos ANOVA e I de Henderson. Ressalta-se, porém, que tanto o método ANOVA quanto o método III de Henderson são adequados a modelos mistos, fato que não ocorre com os métodos I e II de Henderson.

Uma vantagem na aplicação do método III de Henderson, no contexto deste estudo, consiste no fato de que tal método está implementado no PROC VARCOMP do Sistema Estatístico SAS, sob a denominação “*type I*”, viabilizando sua aplicação a modelos mais parametrizados. Contudo, segundo Searle et al. (1992), a utilização de tal método deve ser cautelosa quando aplicada a modelos envolvendo mais de uma interação.

4.2.2 Métodos derivados da função de verossimilhança

4.2.2.1 Estimativas de máxima verossimilhança

Para a obtenção das estimativas dos componentes de variância através do método da Máxima Verossimilhança, deve-se resolver iterativamente as equações dadas por (34). A resolução de tal sistema de equações não lineares pode ser obtida utilizando-se o Método de Newton-Raphson, por exemplo.

O método de Newton-Raphson consiste em, inicialmente, supor um vetor solução inicial $(\sigma^2)^0$, e então aproximar as equações não lineares do sistema (34), utilizando as equações linearizadas pelas derivadas de tais equações em relação a $(\sigma^2)^0$. Tal linearização caracteriza um sistema de equações algébricas, cuja solução fornece um incremento que, adicionado a $(\sigma^2)^0$, fornece $(\sigma^2)^1$, que é uma melhor aproximação da solução do sistema não linear, e assim sucessivamente. O processo se repete até que a solução convirja, ou seja, até que o critério de convergência adotado seja satisfeito.

O método ML está implementado no PROC MIXED do Sistema Estatístico SAS, versão 6.12, construindo uma função objetivo dada por -2ℓ , ou seja, $-2 \log L$, e solucionando o sistema de equações ML, através do Método de Newton modificado. Dessa forma fornece sempre, por construção, estimativas não negativas para os componentes de variância. No entanto, tais estimativas são viesadas, uma vez que o método não considera a perda dos graus de liberdade, resultante da estimação dos efeitos fixos do modelo (SAS, 1997).

As estimativas obtidas neste estudo através do PROC MIXED do SAS são dadas por:

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_{\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_{\varepsilon}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,0000 \\ 5,1078 \\ 1,4278 \end{bmatrix} \quad (88)$$

Conforme Corbeil & Searle (1976), a solução das equações ML dadas em (86), podem não ser, necessariamente, estimativas ML, uma vez que os estimadores ML

são aqueles que maximizam a função de verossimilhança sobre o espaço paramétrico positivo dos componentes de variância. Sendo assim, as estimativas ML são sempre positivas, enquanto que as soluções das equações ML podem ser negativas. As estimativas obtidas em (88) pelo PROC MIXED, são estimativas ML e não solução das equações ML.

Observa-se que a estimativa obtida para σ_{β}^2 , que apresentou valores negativos em todos os métodos baseados na teoria dos momentos, assumiu, aqui, por construção, o valor zero. De modo análogo, o valor de σ_{ε}^2 , constante para os métodos anteriores, agora foi ligeiramente inferior. Quanto à interação entre os efeitos fixos e aleatórios, observou-se que o método ML forneceu estimativa com valor inferior àquelas obtidas através dos métodos derivados da teoria dos momentos.

Um fato relevante, discutido em Searle et al. (1992) é que apesar das estimativas obtidas pelo método ML serem viesadas, elas são algumas vezes preferidas às estimativas obtidas pelos métodos ANOVA e III de Henderson. Os autores justificam sua afirmação com base nas propriedades assintóticas dos estimadores ML.

4.2.2.2 Estimativas de máxima verossimilhança restrita

Para a obtenção das estimativas dos componentes de variância através do método da Máxima Verossimilhança Restrita, deve-se resolver iterativamente as equações dadas por (38). De modo análogo ao Método da Máxima Verossimilhança, o sistema (38) deve ser resolvido através de processo numérico iterativo.

O sistema de equações para o Método da Máxima Verossimilhança Restrita é similar ao sistema dado por (38), substituindo-se a matriz $\tilde{V}^{-1}$ de variâncias e covariâncias estimadas pela matriz $\tilde{P}$.

O método REML está implementado no PROC MIXED do Sistema Estatístico SAS, versão 6.12, e as estimativas para os componentes de variância são

obtidas minimizando-se a função objetivo dada por $-2l_R$, ou seja, $-2 \log L_R$, através do Método de Newton modificado. Dessa forma, o método ML fornece, por construção, estimativas não negativas para os componentes de variância.

As estimativas obtidas pelo método REML são não viesadas para dados balanceados. Já para dados desbalanceados as estimativas dos componentes de variância são viesados, embora o método considere a perda dos graus de liberdade devida ao ajuste dos efeitos aleatórios.

As estimativas obtidas através do PROC MIXED do SAS são dadas por:

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,0000 \\ 8,2152 \\ 1,4378 \end{bmatrix} \quad (89)$$

Observa-se que as estimativas obtidas em (89) são próximas às estimativas ML e diferentes das obtidas pelos demais métodos. A estimativa obtida para $\sigma_{\alpha\beta}^2$ pelo método REML é subestimada em relação às obtidas através dos métodos Anova, I e III de Henderson, sendo no entanto, muito próxima à estimativa obtida pelo método II de Henderson e ligeiramente superior à estimativa obtida pelo método ML. Já as estimativas obtidas para σ_ε^2 , a variância residual, é ligeiramente maior que a estimativa obtida pelo método ML, e menor que as estimativas obtidas pelos métodos derivados da teoria dos momentos. Pode ser observado, ainda, que as estimativas nulas obtidas através dos métodos ML e REML para σ_β^2 , correspondem às estimativas negativas obtidas através dos demais métodos.

Perri (1998) comenta que o método REML tem sido considerado por alguns autores (Searle, 1971; Corbeil & Searle, 1976; Harville, 1977, Searle et al., 1992; entre outros) o preferido para estimar componentes de variância de dados desbalanceados. As razões para essa preferência são justificadas pelas propriedades dos estimadores. Algumas dessas propriedades são:

- Os estimadores são funções de estatísticas suficientes, consistentes e assintoticamente normais e eficientes;

- Os estimadores REML com dados desbalanceados são como os estimadores ANOVA, de variância mínima e não viesados.
- Os estimadores REML levam em conta os graus de liberdade envolvidos nas estimativas dos efeitos fixos, ao passo que os estimadores ML não.

4.2.3 Métodos derivados da função quadrática

4.2.3.1 Estimativas quadráticas não-viesadas de norma mínima

Considerando-se o sistema (42) e tomando-se as estimativas dos componentes de variância dadas por (61), obtidas através do método ANOVA, como os pesos w pré-fixados:

$$w = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -8,6124 \\ 17,0524 \\ 1,4500 \end{bmatrix}$$

tem-se a matriz V dada em (47), substituindo-se σ^2 por w :

$$V_w = \begin{bmatrix} 9,8900 & 8,4400 & 0,0000 & 0,0000 & -8,6124 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 8,4400 & 9,8900 & 0,0000 & 0,0000 & -8,6124 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 9,8900 & 0,0000 & 0,0000 & -8,6124 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 9,8900 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & -8,6124 \\ -8,6124 & -8,6124 & 0,0000 & 0,0000 & 9,8900 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & -8,6124 & 0,0000 & 0,0000 & 9,8900 & 8,4400 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & -8,6124 & 0,0000 & 0,0000 & 8,4400 & 9,8900 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & -8,6124 & 0,0000 & 0,0000 & 0,0000 & 9,8900 \end{bmatrix} \quad (90)$$

e o projetor ortogonal P_w , tem a forma:

$$P_w = \begin{bmatrix} 0,4376 & -0,2521 & -0,1055 & -0,0800 & 0,1639 & -0,0483 & -0,0483 & -0,0673 \\ -0,2521 & 0,4376 & -0,1055 & -0,0800 & 0,1639 & -0,0483 & -0,0483 & -0,0673 \\ -0,1055 & -0,1055 & 0,3580 & -0,1470 & -0,1917 & 0,1639 & 0,1639 & -0,1360 \\ -0,0800 & -0,0800 & -0,1470 & 0,3069 & -0,1360 & -0,0673 & -0,0673 & 0,2706 \\ 0,1639 & 0,1639 & -0,1971 & -0,1360 & 0,3580 & -0,1055 & -0,1055 & -0,1470 \\ -0,0483 & -0,0483 & 0,1639 & -0,0673 & -0,1055 & 0,4376 & -0,2521 & -0,0800 \\ -0,0483 & -0,0483 & 0,1639 & -0,0673 & -0,1055 & -0,2521 & 0,4376 & -0,0800 \\ -0,0673 & -0,0673 & -0,1360 & 0,2706 & -0,1470 & -0,0800 & -0,0800 & 0,3069 \end{bmatrix} \quad (91)$$

Considerando-se as matrizes dadas em (90 e 91) obtém-se, como em (42) o sistema:

$$\begin{bmatrix} 3,1640 & 7,8034 & 3,9022 \\ 1,5869 & 3,9022 & 1,9574 \\ 2,2550 & 3,1640 & 1,5869 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10,2449 \\ 5,3280 \\ 5,1050 \end{bmatrix} \quad (92)$$

de onde resultam as estimativas dos componentes de variância, pelo método MINQUE(A):

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,0193 & 41,6209 & -82,9590 \\ -0,7985 & -82,9590 & 166,5437 \\ 1,0325 & -0,0193 & -0,7985 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5,1050 \\ 10,2449 \\ 5,3280 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -8,2321 \\ 18,3656 \\ 0,8903 \end{bmatrix} \quad (93)$$

As estimativas dadas em (93), obtidas pelo método MINQUE, são não viesadas, invariantes e de norma mínima. Pode-se, novamente, observar a ocorrência de estimativa negativa para σ_β^2 , fato que não ocorre com as estimativas obtidas pelos métodos ML e REML. Quanto à interação, a estimativa obtida para $\sigma_{\alpha\beta}^2$ está próxima às estimativas obtidas pelos métodos ANOVA, I e III de Henderson, sendo, no entanto, maior que àquelas obtidas pelos métodos ML, REML e II de Henderson. Quanto à variância residual, observa-se que a estimativa obtida pelo método MINQUE está subestimada em relação aos demais métodos utilizados até agora.

Ressalta-se, porém, que se forem tomados outros valores para w , diferentes de (61), considerando-se o mesmo modelo dado em (45) e para o mesmo conjunto de dados descritos na Tabela 2, outras estimativas podem ser obtidas para os componentes de variância.

Em relação aos métodos ML e REML as estimativas MINQUE apresentam ainda a vantagem de não exigir normalidade dos dados, tornando-se assim, em termos estocásticos mais compatíveis com muitas situações práticas.

4.2.3.2 Estimativas quadráticas não-viesadas de variância mínima

Dado que a solução (93) foi obtida utilizando-se as estimativas dos componentes de variância obtidas através do método ANOVA, então, supondo-se a normalidade dos dados, tem-se que (93) é também solução para o Método MIVQUE(A).

Sendo assim, as estimativas obtidas em (93) além de invariantes, não viesadas e de norma mínima, são também estimativas de variância mínima.

Se for adotada a suposição à priori de que a matriz de variâncias e covariâncias dada em (3) é a matriz identidade, obtém-se as estimativas para os componentes de variância através do método MIVQUE(0).

$$P_0 = \begin{bmatrix} 0,7500 & -0,2500 & -0,2500 & -0,2500 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0,2500 & 0,7500 & -0,2500 & -0,2500 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0,2500 & -0,2500 & 0,7500 & -0,2500 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0,2500 & -0,2500 & -0,2500 & 0,7500 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,7500 & -0,2500 & -0,2500 & -0,2500 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0,2500 & 0,7500 & -0,2500 & -0,2500 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0,2500 & -0,2500 & 0,7500 & -0,2500 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0,2500 & -0,2500 & -0,2500 & 0,7500 \end{bmatrix} \quad (94)$$

então, de (38) e considerando-se P_0 de (94), resulta o sistema:

$$\begin{bmatrix} 5,000 & 12,6250 & 6,5000 \\ 15,0000 & 6,5000 & 6,5000 \\ 6,0000 & 5,0000 & 5,0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 32,00 \\ 64,00 \\ 50,90 \end{bmatrix} \quad (95)$$

do qual são obtidas as estimativas dos componentes de variância, pelo método MIVQUE(0):

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \\ \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -5,2245 \\ 14,4745 \\ 0,7750 \end{bmatrix} \quad (96)$$

Analisando as estimativas obtidas em (96), pode-se observar que a estimativa obtida para σ_β^2 também é negativa e está muito próxima da estimativa obtida

pelo método III de Henderson. Também a estimativa obtida para a interação está próxima à estimativa obtida pelo método III de Henderson. No entanto, $\hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2$ está subestimada em relação aos métodos ANOVA, I de Henderson e MINQUE(A), e superestimada em relação aos métodos II de Henderson, ML e REML. Novamente observa-se que a variância residual está ligeiramente subestimada em relação à estimativa obtida pelo método MINQUE(A) e muito inferior às estimativas obtidas através dos demais métodos.

Ressalta-se, porém, que o método MINQUE(0) considera a matriz de variâncias e covariâncias do modelo (42) como matriz identidade, fato nem sempre compatível com as situações práticas.

4.2.3.3 Estimativas quadráticas não-viesadas iterativas de norma mínima

O método I-MINQUE também utiliza as equações REML, iterativamente, com a vantagem de não exigir a normalidade dos dados.

Para os dados da Tabela 2, as estimativas dos componentes de variância através do método I-MINQUE são como em (89) se os pesos pré-fixados, w , forem como em (88), as estimativas obtidas pelo método ANOVA. Ressalta-se que, também aqui, outras estimativas podem ser obtidas, se forem tomados outros valores para w .

4.2.4 Considerações sobre as estimativas obtidas

Analisando as estimativas obtidas pelos métodos apresentados neste estudo, pode-se observar que tanto os métodos derivados da teoria dos momentos quanto os métodos derivados da função quadrática fornecem estimativas negativas para σ_{β}^2 . Somente os métodos ML e REML, por construção, fornecem apenas estimativas não negativas para os componentes de variância.

Quanto à interação, as estimativas obtidas pelos métodos ANOVA, I de Henderson e MINQUE(A) estão semelhantes e superestimadas em relação aos demais métodos. Os métodos II de Henderson, ML e REML fornecem estimativas subestimadas para a interação, quando comparadas às estimativas fornecidas pelos métodos III de Henderson e MIVQUE(A).

As estimativas obtidas para a variância residual estão constantes entre os métodos dos momentos e ligeiramente inferiores para os métodos derivados da função de verossimilhança. No entanto, as estimativas obtidas para σ_e^2 estão subestimadas pelos métodos MINQUE(A) e MIVQUE(A) em relação aos outros métodos apresentados neste estudo.

Fato relevante na escolha do método de estimação de componentes de variância é a adequação do método ao modelo considerado. Note-se, por exemplo, que para o conjunto de dados adotado para ilustração, o método II de Henderson, apesar de fornecer estimativas próximas às obtidas pelo método ML, é adequado a modelos mistos que não envolvam interação entre efeitos fixos e aleatórios, sendo incompatível com o modelo adotado neste estudo.

Além disso, nem sempre todos os métodos estão disponíveis. Nesse contexto, é indispensável considerar a existência de vários métodos de estimação de componentes de variância, bem como avaliar as vantagens e desvantagens de cada método.

4.3 Matrizes mais gerais de variâncias e covariâncias

Procurando ilustrar uma situação mais próxima da ideal, na qual o pesquisador dispõe de meios para estudar a estrutura de covariâncias de seus dados, são ilustrados, aqui, os três métodos disponíveis no PROC MIXED do sistema estatístico SAS: REML, ML e MIVQUE(0), considerando o conjunto de dados constantes da Tabela 2 e os quatro tipos de matrizes de variâncias e covariâncias, descritas na Tabela 1,

para as estruturas de G: VC, TOEP(1), CS e HF.

A Tabela 11 apresenta um programa com a estrutura *default*, VC, para a obtenção das estimativas dos componentes de variância, utilizando-se o PROC MIXED do SAS. Para as demais estruturas de G procede-se de modo análogo.

Tabela 11. Programa para o modelo misto com G = VC

```

data exemplo;
do A=1 to 2; do B=1 to 3; do rep=1 to 2;
input y @@; output;
end; end; end;
cards;
7.9 8.1
6 .
2 .
8 .
4.8 7.2
12 .
;
proc print;

proc mixed method=ml;
class A B;
model y = A;
random B A*B / type=vc;

proc mixed method=reml;
class A B;
model y = A;
random B A*B / type=vc;

proc mixed method=mivque0;
class A B;
model y = A;
random B A*B / type=vc;
run;

```

4.3.1 Estimativas de máxima verossimilhança

Através do método ML, o PROC MIXED fornece as estimativas dos componentes de variância, considerando, neste estudo, somente as quatro estruturas de G descritas na Tabela 1.

Para selecionar dentre as propostas, qual é a estrutura de G que descreve “melhor” os dados utiliza-se neste estudo o critério AIC, *Akaike's Information Criterion*. Ele pode ser utilizado para comparar modelos com os mesmos efeitos fixos, e diferentes

estruturas de G. O modelo com maior AIC é considerado o melhor.

Os resultados obtidos estão descritos nas Tabelas de 12 a 15. Ressalta-se, no entanto, que as estimativas ML aqui obtidas correspondem às estimativas obtidas em (88).

Tabela 12. Estimativas do tipo ML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando G = VC

ML Estimation Iteration History			
Iteration	Evaluations	Objective	Criterion
0	1	22.80337106	
1	2	21.14506314	0.00122622
2	1	21.13089862	0.00002984
3	1	21.13057813	0.00000002
4	1	21.13057792	0.00000000

Convergence criteria met.

Covariance Parameter Estimates (MLE)	
Cov Parm	Estimate
B	0.00000000
A*B	5.10781429
Residual	1.42768971

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Log Likelihood	-17.9168
Akaike's Information Criterion	-20.9168
Schwarz's Bayesian Criterion	-21.0360
-2 Log Likelihood	35.8336

Observa-se na Tabela 12 que o processo numérico para obtenção das estimativas ML convergiu na 4ª iteração, fornecendo, conforme visto em (4.2.2.1), as estimativas dos componentes de variância, quando G = VC:

$$\hat{\sigma}_\beta^2 = 0; \quad \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 = 5,1078; \quad \hat{\sigma}_e^2 = 1,4278;$$

Assim, considerando-se as estimativas dadas na Tabela 12, tem-se que a matriz V de variâncias e covariâncias de y, dada em (47), é constituída por:

$$G = \begin{bmatrix} 0I_3 & \phi \\ \phi & 5,1078I_6 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad R = 1,4278I_9$$

com AIC = -20,9168.

As estimativas obtidas pelo método ML são viesadas para os componentes de variância. Ressalta-se, porém, que tal método, por construção, fornece sempre estimativas não negativas para os componentes de variância.

Tabela 13. Estimativas do tipo ML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = \text{TOEP}(1)$

ML Estimation Iteration History			
Iteration	Evaluations	Objective	Criterion
0	1	22.80337106	
1	4	22.80337106	0.00000000

Convergence criteria met.

Covariance Parameter Estimates (MLE)	
Cov Parm	Estimate
Variance	-0.00000000
Residual	6.36250000

Model Fitting Information for Y

Description	Value
Observations	8.0000
Log Likelihood	-18.7532
Akaike's Information Criterion	-20.7532
Schwarz's Bayesian Criterion	-20.8326
-2 Log Likelihood	37.5064
Null Model LRT Chi-Square	0.0000
Null Model LRT DF	1.0000
Null Model LRT P-Value	1.0000

Observa-se na Tabela 13 que o processo numérico para obtenção das estimativas ML dos componentes de variância convergiu na primeira iteração, quando $G = \text{TOEP}(1)$, fornecendo as estimativas, conforme Tabela 1:

$$\hat{\sigma}^2 = 0; \quad \hat{\sigma}_\epsilon^2 = 6,3625;$$

Assim, a matriz V dada em (47) é constituída por:

$$G = 0 I_9 \quad \text{e} \quad R = 6,3625 I_9$$

com $\text{AIC} = -20,7532$.

Observa-se que a estimativa obtida para a variância residual pelo método ML, utilizando-se a estrutura $G = \text{TOEP}(1)$ está superestimada em relação à estimativa obtida pelo método ML, considerando $G = \text{VC}$.

Tabela 14. Estimativas do tipo ML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando
G = CS

ML Estimation Iteration History			
Iteration	Evaluations	Objective	Criterion
0	1	22.80337106	
Stopped because of infinite likelihood.			
Covariance Parameters at Last MLE Iteration			
Cov Parm	Estimate		
Variance	0.52243816		
CS	-0.26921378		
Residual	6.39447880		

Tabela 15. Estimativas do tipo ML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando
G = HF

ML Estimation Iteration History			
Iteration	Evaluations	Objective	Criterion
0	1	22.80337106	
1	2	23.37525681	0.24493204
.....			
35	0	-4.43587664	1.5407633E24

Did not converge.

Covariance Parameters at
Last MLE Iteration

Cov Parm	Estimate
Var(1)	4.25744016
Var(2)	4.15364094
Var(3)	4.17629932
Var(4)	4.40965788
Var(5)	4.57407510
Var(6)	4.57591474
.....	
HF	5.02854950
Residual	1.25393623

Observa-se nas Tabela 14 e 15 que o procedimento para obtenção das estimativas ML para G = CS e G = HF, respectivamente, não convergiu. Sendo assim não se pode considerar os valores obtidos em tais tabelas como estimativas dos componentes de variância.

O método ML não forneceu estimativas para os componentes de variância quando selecionou-se as estruturas CS e HF. Quanto às estruturas VC e TOEP(1), observa-se que as estimativas da variância residual são bem diferentes.

Quanto à estrutura da matriz G de variâncias e covariâncias, observa-se que ambas as estruturas VC e TOEP(1) possuem AIC semelhantes, sendo o valor de AIC menor para a estrutura TOEP(1). Rigorosamente, pode-se dizer que a estrutura TOEP(1) descreve “melhor” os dados.

Segundo Wolfinger⁶, citado por Perri (1998), a escolha da estrutura de G mais apropriada para a descrição dos dados da Tabela 2 não deve ser exclusivamente baseada em critérios como o AIC. Deve-se também considerar a natureza dos dados e a experiência do pesquisador.

4.3.2 Estimativas de máxima verossimilhança restrita

As estimativas para os componentes de variância obtidas pelo método REML, utilizando o PROC MIXED e considerando as quatro estruturas de G descritas na Tabela 1, são dadas nas Tabelas 16 a 19. O PROC MIXED fornece as estimativas REML como *default* para os componentes de variância.

⁶ WOLFINGER, R. Covariance structure selection in general mixed models. **Communications in Statistics Simulation and Computation**, v.22, n.4, p.1079-1106, 1993.

Tabela 16. Estimativas do tipo REML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = VC$

REML Estimation Iteration History			
Iteration	Evaluations	Objective	Criterion
0	1	21.60120945	
1	3	19.41497459	0.02419100
2	2	19.29730244	0.00182548
3	1	19.27766382	0.00007299
4	1	19.27694087	0.00000013
5	1	19.27693959	0.00000000

Convergence criteria met.

Covariance Parameter Estimates (REML)	
Cov Parm	Estimate
B	0.00000000
A*B	8.21520830
Residual	1.43777857

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Res Log Likelihood	-15.1521
Akaike's Information Criterion	-18.1521
Schwarz's Bayesian Criterion	-17.8397
-2 Res Log Likelihood	30.3042

Analisando-se a Tabela 16, observa-se que o processo numérico para obtenção das estimativas dos componentes de variância convergiu rapidamente. As estimativas obtidas pelo método REML, quando $G = VC$, conforme visto em (4.2.2.2.), são dadas por:

$$\hat{\sigma}_\beta^2 = 0; \quad \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 = 8,2152; \quad \hat{\sigma}_\epsilon^2 = 1,4378;$$

As estimativas REML são estabelecidas utilizando-se o algoritmo de Newton modificado, maximizando a função de verossimilhança no espaço paramétrico dos componentes de variância. Sendo assim, as estimativas REML são sempre positivas, mas viesadas para os componentes de variância, quando os dados são desbalanceados.

De acordo com (47), tem-se a matriz V de variâncias e covariâncias constituída por:

$$G = \begin{bmatrix} 0 I_3 & \phi \\ \phi & 8,2152 I_6 \end{bmatrix} \quad e \quad R = 1,4378 I_9$$

com AIC = -18,1521.

Tabela 17. Estimativas do tipo REML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = \text{TOEP}(1)$

REML Estimation Iteration History			
Iteration	Evaluations	Objective	Criterion
0	1	21.60120945	
1	2	21.44877749	0.01216872
2	1	21.22516419	0.02334704
3	1	20.95330430	0.00178180
4	1	20.93259997	0.00006389
5	1	20.93191420	0.00000010
6	1	20.93191316	0.00000000

Convergence criteria met.

Covariance Parameter Estimates (REML)	
Cov Parm	Estimate
Variance	6.70731484
Residual	1.67196273

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Res Log Likelihood	-15.9796
Akaike's Information Criterion	-17.9796
Schwarz's Bayesian Criterion	-17.7713
-2 Res Log Likelihood	31.9592
Null Model LRT Chi-Square	0.6693
Null Model LRT DF	1.0000
Null Model LRT P-Value	0.4133

Para a estrutura $G = \text{TOEP}(1)$, estimam-se dois parâmetros de covariâncias. Assim, na Tabela 17 tem-se as seguintes estimativas REML, de acordo com Tabela 1:

$$\hat{\sigma}^2 = 6,7073; \quad \hat{\sigma}_e^2 = 1,6720;$$

Logo, conforme visto em (47) tem-se:

$$G = 6,7073I_9 \quad \text{e} \quad R = 1,6720I_9$$

com $\text{AIC} = -17,9796$.

Observa-se que a estimativa para a variância residual obtida com $G=\text{TOEP}(1)$ é ligeiramente superior à estimativa obtida com $G=\text{VC}$.

O valor de AIC para $G=\text{TOEP}(1)$ também é ligeiramente superior ao valor obtido com $G=\text{VC}$, indicando que a estrutura $\text{TOEP}(1)$ pode ser mais adequada para a descrição dos dados.

Tabela 18. Estimativas do tipo REML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = CS$

REML Estimation Iteration History			
Iteration	Evaluations	Objective	Criterion
0	1	21.60120945	
1	2	21.45398514	0.00540247
2	1	21.26216348	0.00326762
3	1	20.94527069	0.00006543
4	1	20.93220767	0.00000118
5	1	20.93191336	0.00000000

Convergence criteria met.

Covariance Parameter Estimates (REML)	
Cov Parm	Estimate
Variance	6.70517181
CS	-0.00000000
Residual	1.67272561

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Res Log Likelihood	-15.9796
Akaike's Information Criterion	-18.9796
Schwarz's Bayesian Criterion	-18.6672
-2 Res Log Likelihood	31.9592
Null Model LRT Chi-Square	0.6693
Null Model LRT DF	2.0000
Null Model LRT P-Value	0.7156

Analisando-se a Tabela 18, observa-se que as estimativas dos componentes de variância, obtidas pelo método REML, quando $G = CS$, estão muito próximas às estimativas obtidas com $G = TOEP(1)$, convergindo na 5ª iteração:

$$\hat{\sigma}^2 = 6,7052; \quad CS = 0; \quad \hat{\sigma}_e^2 = 1,6727;$$

Assim, a matriz V dada em (47) é constituída por:

$$G = 6,7052 I_9 \text{ e } R = 1,6727 I_9$$

com $AIC = -18,9796$.

Tabela 19. Estimativas do tipo REML obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = HF$

REML Estimation Iteration History			
Iteration	Evaluations	Objective	Criterion
	0	1	21.60120945
1	2	20.94105945	0.00004304
2	1	20.93206107	0.00000059
3	1	20.93191321	0.00000000
Convergence criteria met.			

Covariance Parameter Estimates (REML)		
Cov Parm	Estimate	
Var(1)	6.28484785	
Var(2)	6.28484785	
Var(3)	6.28484785	
Var(4)	6.28484785	
Var(5)	6.28484785	
Var(6)	6.28484785	
Var(7)	6.28484785	
Var(8)	6.28484785	
Var(9)	6.28484785	
HF	6.70623016	
Residual	1.67234877	

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Res Log Likelihood	-15.9796
Akaike's Information Criterion	-26.9796
Schwarz's Bayesian Criterion	-25.8343
-2 Res Log Likelihood	31.9592
Null Model LRT Chi-Square	0.6693
Null Model LRT DF	10.0000
Null Model LRT P-Value	1.0000

A Tabela 19 fornece as estimativas para os componentes de variância, obtidas pelo método REML, quando $G = HF$. Observe que o processo numérico para obtenção das estimativas convergiu na terceira iteração:

$$\hat{\sigma}_p^2 = 6,2848; \quad HF = 6,7062; \quad \hat{\sigma}_e^2 = 1,6723;$$

Assim, a matriz V dada em (47) é constituída por:

$$G = \begin{bmatrix} 6,2848 & \cdots & -0,42 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -0,42 & \cdots & 6,2848 \end{bmatrix} \quad e \quad R = 1,6723 I_9$$

com $AIC = -26,9796$.

Para o método REML, observa-se que a estrutura TOEP(1) para a matriz G é a que “melhor” descreve os dados. Observa-se, porém, que o valor de AIC para tal estrutura não é muito superior ao valor de AIC para as estruturas VC e CS. A estrutura HF, por sua vez, mostrou-se inadequada para a descrição dos dados, pois o seu valor de AIC foi bem superior ao AIC das demais estruturas.

Analisando-se as Tabelas 16 a 19, observa-se que as estimativas da variância residual são muito próximas para as opções TOEP(1), CS e HF, e menor para a opção $G = VC$. Observa-se ainda, que as estruturas TOEP(1) e CS levaram praticamente, às mesmas estimativas para os componentes de variância. Verifica-se através dos valores de AIC que a estrutura TOEP(1) para a matriz G é a que “melhor” descreve os dados. Observa-se, porém, que o valor de AIC para tal estrutura não é muito superior ao valor de AIC para as estruturas VC e CS. A estrutura HF, por sua vez, mostrou-se inadequada para a descrição dos dados, pois o seu valor de AIC foi bem superior ao AIC das demais estruturas.

4.3.3 Estimativas quadráticas não-viesadas de variância mínima

O método MIVQUE(0) fornece estimativas para os componentes de variância que são não viesadas, invariantes e de variância mínima (Searle, 1987).

Os resultados obtidos através do PROC MIXED, utilizando-se método MIVQUE(0) e as estruturas de G consideradas na Tabela 1, são apresentados nas Tabelas 20 a 23.

Ressalta-se que as estimativas MIVQUE(0), com $G = VC$, aqui obtidas não coincidem com as estimativas obtidas em (96), uma vez que aqui utiliza-se o PROC MIXED e as estimativas dadas em (96) são coerentes com as obtidas pelo PROC VARCOMP.

Tabela 20. Estimativas do tipo MIVQUE(0) obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = VC$

Covariance Parameter Estimates (MIVQUE0)		
Cov Parm	Estimate	
B	0.00000000	
A*B	14.47448980	
Residual	0.77500000	

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Res Log Likelihood	-15.5896
Akaike's Information Criterion	-18.5896
Schwarz's Bayesian Criterion	-18.2773
-2 Res Log Likelihood	31.1792

O método MIVQUE(0) não é iterativo. Considera a primeira iteração das equações dadas em (42), a partir de um conjunto de valores iniciais. As estimativas dos componentes de variância, obtidas pelo método MIVQUE(0), quando $G = VC$:

$$\hat{\sigma}_\beta^2 = 0; \quad \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 = 14,4745; \quad \hat{\sigma}_e^2 = 0,7750;$$

com matriz V de variâncias e covariâncias, dada em (47), constituída por:

$$G = \begin{bmatrix} 0 I_3 & \phi \\ \phi & 14,4745 I_6 \end{bmatrix} \quad e \quad R = 0,7750 I_9$$

e $AIC = -18,5896$.

Tabela 21. Estimativas do tipo MIVQUE(0) obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = TOEP(1)$

Covariance Parameter Estimates (MIVQUE0)		
Cov Parm	Estimate	
Variance	0.72237197	
Residual	7.27938005	

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Res Log Likelihood	-16.2718
Akaike's Information Criterion	-18.2718
Schwarz's Bayesian Criterion	-18.0636
-2 Res Log Likelihood	32.5437
Null Model LRT Chi-Square	0.0848
Null Model LRT DF	1.0000
Null Model LRT P-Value	0.7709

Na Tabela 21 pode-se observar as estimativas dos componentes de variância, obtidas pelo método MIVQUE(0), quando $G = \text{TOEP}(1)$, conforme Tabela 1:

$$\hat{\sigma}^2 = 0,7224; \quad \hat{\sigma}_\varepsilon^2 = 7,2794;$$

Observa-se que a estimativa da variância residual é muito superior à estimativa obtida pelo método MIVQUE(0) com $G = \text{VC}$. Ressalta-se, porém, que os valores de AIC para ambas as estruturas são muito próximos.

Assim, a matriz V dada em (47) é constituída por:

$$G = 0,7224 I_9 \quad \text{e} \quad R = 7,2794 I_9$$

com $\text{AIC} = -18,2718$.

Tabela 22. Estimativas do tipo MIVQUE(0) obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = \text{CS}$

Covariance Parameter Estimates (MIVQUE0)	
Cov Parm	Estimate
Variance	0.72237197
CS	0.00000000
Residual	7.27938005

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Res Log Likelihood	-16.2718
Akaike's Information Criterion	-19.2718
Schwarz's Bayesian Criterion	-18.9595
-2 Res Log Likelihood	32.5437
Null Model LRT Chi-Square	0.0848
Null Model LRT DF	2.0000
Null Model LRT P-Value	0.9585

Observa-se que as estimativas dos componentes de variância, obtidas pelo método MIVQUE(0), quando $G = \text{CS}$, são idênticas às obtidas quando $G = \text{TOEP}(1)$.

$$\hat{\sigma}^2 = 0,7224; \quad \text{CS} = 0; \quad \hat{\sigma}_\varepsilon^2 = 7,2794;$$

Sendo o valor de $\text{CS}=0$, tem-se que as matrizes G e R são idênticas às matrizes obtidas para $G=\text{TOEP}(1)$. Ou seja.

$$G = 0,7224 I_9 \quad \text{e} \quad R = 7,2794 I_9$$

com $\text{AIC} = -19,2718$.

Observa-se, porém, que os valores de AIC são ligeiramente diferentes.

Tabela 23. Estimativas do tipo MIVQUE(0) obtidas através do PROC SAS/MIXED considerando $G = HF$

Covariance Parameter Estimates (MIVQUE0)	
Cov Parm	Estimate
Var(1)	27.35661176
Var(2)	27.35661176
Var(3)	27.35661176
Var(4)	27.35661176
Var(5)	27.35661176
Var(6)	27.35661176
Var(7)	27.35661176
Var(8)	27.35661176
Var(9)	27.35661176
HF	15.38809411
Residual	7.27938005

Model Fitting Information for Y	
Description	Value
Observations	8.0000
Res Log Likelihood	-17.3154
Akaike's Information Criterion	-28.3154
Schwarz's Bayesian Criterion	-27.1701
-2 Res Log Likelihood	34.6308
Null Model LRT Chi-Square	0.0000
Null Model LRT DF	10.0000
Null Model LRT P-Value	1.0000

Para a estrutura de covariâncias $G=HF$ devem ser estimados 9 componentes de variância, o valor de $\lambda=HF$ e a variância residual. Observa-se que a Tabela 23 fornece as estimativas para os componentes de variância, obtidas pelo método MIVQUE(0), quando $G = HF$:

$$\hat{\sigma}_p^2 = 27,3566; \quad HF = 15,3881; \quad \hat{\sigma}_e^2 = 7,2794;$$

Assim, as estimativas apresentadas na Tabela 23 são:

$$G = \begin{bmatrix} 27,3566 & \dots & 11,9685 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 11,9685 & \dots & 27,3566 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad R = 7,2794 I_9$$

com $AIC = -28,3154$, indicando que a matriz HF é a “pior” dentre as quatro estudadas.

Analisando a Tabela 5, observa-se, novamente, que as estruturas TOEP(1) e CS levaram às mesmas estimativas dos componentes de variância, com pequena vantagem

em termos do valor de AIC para a opção $G = \text{TOEP}(1)$.

Quanto às estimativas para a variância residual, somente a estrutura VC forneceu valor discrepante. No entanto, o valor de AIC para tal estrutura mostrou-se semelhante aos valores de AIC para as estruturas TOEP(1) e CS. A estrutura HF, por sua vez, mostrou-se menos adequada que as demais para a descrição dos dados, pois o valor de AIC foi superior ao valor do AIC para as demais estruturas. Sendo assim, a estrutura TOEP(1) para a matriz G é, dentre as opções aqui apresentadas, a que “melhor” descreve os dados.

5 CONCLUSÕES

Analisando as estimativas obtidas pelos métodos apresentados neste estudo, pode-se observar que tanto os métodos derivados da teoria dos momentos quanto os métodos derivados da função quadrática fornecem estimativas negativas para σ_{β}^2 .

Somente os métodos ML e REML fornecem apenas estimativas não negativas para os componentes de variância. Ressalta-se, porém, que as estimativas foram obtidas através do PROC MIXED do SAS, procedimento este que utiliza, para obtenção das estimativas ML e REML, a maximização da função de verossimilhança e verossimilhança restrita, respectivamente, no espaço paramétrico positivo da função, através de uma modificação do Método de Newton.

Quanto à interação, as estimativas obtidas pelos métodos ANOVA, I de Henderson e MINQUE(A) estão semelhantes e superestimadas em relação aos demais métodos. Os métodos II de Henderson, ML e REML fornecem estimativas subestimadas para a interação, quando comparadas às estimativas fornecidas pelos métodos III de Henderson e MIVQUE(A).

As estimativas obtidas para a variância residual estão constantes entre os métodos dos momentos e ligeiramente inferiores para os métodos derivados da função de verossimilhança. No entanto, as estimativas obtidas para σ_e^2 estão subestimadas pelos métodos MINQUE(A) e MIVQUE(A) em relação aos outros métodos apresentados neste estudo.

Fato relevante na escolha do método de estimação de componentes de variância é a adequação do método ao modelo considerado. Note-se, por exemplo, que

para o conjunto de dados adotado para ilustração, o método II de Henderson, apesar de fornecer estimativas próximas às obtidas pelo método ML, é adequado a modelos mistos que não envolvam interação entre efeitos fixos e aleatórios, sendo incompatível com o modelo adotado neste estudo.

Além disso, nem sempre todos os métodos estão disponíveis. Nesse contexto, é indispensável considerar a existência de vários métodos de estimação de componentes de variância, bem como avaliar as vantagens e desvantagens de cada método.

Quando não se tem subsídios para a escolha do melhor método de estimação de componentes de variância, é possível, no contexto geral deste estudo, descartar os métodos menos adequados.

Exceto através das propriedades dos estimadores, não se pode concluir sobre um melhor método, mesmo porque os verdadeiros valores dos componentes de variância, para o conjunto de dados adotado para ilustração, são desconhecidos.

Poder-se-ia comparar os métodos, por exemplo, se fosse adotado um conjunto de dados simulados, com determinada distribuição e para o qual os componentes de variâncias fossem, à priori, conhecidos.

Quanto à seleção da estrutura da matriz de variâncias e covariâncias, para o conjunto de dados adotado para ilustração nesse estudo, observou-se que a matriz G de variâncias e covariâncias com estrutura do tipo TOEP(1) foi a que “melhor” descreveu os dados, dentre as utilizadas, independente do método adotado para obtenção das estimativas dos componentes de variância. No entanto, a experiência do pesquisador associada à natureza dos dados deve ser considerada na escolha da estrutura mais apropriada dentre as muitas disponíveis nos sistemas computacionais estatísticos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARBIN, D. **Componentes de variância**. Piracicaba: ESALQ/USP, 1993. 108p.

CAMARINHA FILHO, J.A. Teste de hipóteses em modelos lineares com dados desbalanceados e caselas vazias. Piracicaba, 1995, 142p. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

CLAUSTRIAUX, J.J.; IEMMA, A.F. **A propos des qualificatifs complet, orthogonal et équilibré en analyse de la variance**. Gembloux, 1999. v.2, 15p. (Notes de statistique et d' informatique)

CORBEIL, R.R.; SEARLE, S.R. A comparison of variance component estimators. **Biometrics**, v.32, p.779-791, 1976.

GILMOUR, A R.; THOMPSON, R.; CULLIS, B.R. Average information REML: an efficient algorithm for variance parameter in linear mixed models. **Biometrics**, v.51, p.1440-1450, 1995.

HARTLEY, H.O.; RAO, J.N.K. Maximum-likelihood estimation for the mixed analysis of variance model. **Biometrika**, v.54, p.93-108, 1967.

- HARVILLE, D.A. Maximum likelihood approaches to variances component estimation and to relates problems. **Journal of the American Statistical Association**, v.72, p.320-340, 1977.
- HENDERSON, C.R. Estimation of variance and variance components. **Biometrics**, v.9, p.226-252, 1953.
- IEMMA, A.F. **Tópicos em álgebra de matrizes**. Piracicaba: ESALQ, Departamento de Matemática e Estatística, 1987.
- IEMMA, A.F. **Testes de hipóteses em modelos lineares com amostras desequilibradas**. Gembloux, 1991. 101p.
- IEMMA, A.F. **Analises de varianza de experimentos com celdas vazias**. Piracicaba: Phi Sigma Rho Publicações, 1993a. 102p.
- IEMMA, A.F. **Análisis de varianza con datos desbalanceados**. Bogotá: Universidad Nacional de Colombia, 1993b. 120p.
- IEMMA, A.F. **Análise de variância de dados desbalanceados**. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE USUÁRIOS DO SAS, 4., Piracicaba, 1995. Piracicaba: ESALQ/USP, 1995a. 111p.
- IEMMA, A.F. Que hipóteses estatísticas testamos através do SAS em presença de caselas vazias? **Scientia Agricola**, v.52, p.210-220, 1995b.
- IEMMA, A.F. **Analyse des modeles mixtes par le logiciel SAS**. Gembloux, 1997a. 31p.

- IEMMA, A.F. **Hypothèses statistiques et fonctions estimables du logiciel SAS.** Gembloux, 1997b. 30p.
- IEMMA, A.F.; CLAUSTRIAUX, J.J. Etude des hypothèses de l'analyse de la variance à deux critères de classification: approche par l'exemple. Gembloux, 1999. v.3, 36p. (Notes de statistique et d'informatique).
- IEMMA, A.F.; PERRI, S.H.V. Procedimentos do sistema estatísticos SAS para análise de modelos mistos. **Multiciência**, v.1, p.38-58, 1996.
- KACKAR, R.N.; HARVILLE, D.A. Approximations for standard error of estimators of fixed and random effects in mixed linear models. **Journal of the American Statistical Association**, v.79, p.853-861, 1984.
- LATOUR, D.; LATOUR, K.; WOLFINGER, R.D. **Getting started with PROC MIXED.** Cary: SAS Institute, 1994. 121p.
- MILLIKEN, G.A.; JOHNSON, D.E. **Analysis of messy data:** designed experiments. New York: Chapman & Hall, 1984. 1v.
- MONDARDO, M. Estimabilidade de funções paramétricas com dados desbalanceados através do proc GLM do SAS: aplicações a pesquisa agropecuária. Piracicaba, 1994, 166p. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.
- MONDARDO, M.; IEMMA, A.F. Sobre os quatro tipos de funções estimáveis fornecidas pelo PROC GLM do SAS para dados desbalanceados. **Scientia Agricola**, v.55, n.2, p.172-182, 1998.

- MONTEBELO, M.I.L. Modelos lineares de efeitos mistos: formulação geral e utilização de alguns sistemas computacionais estatísticos. Piracicaba, 1997. 173p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.
- MONTEBELO, M.I.L.; IEMMA, A.F. Performance de alguns sistemas estatísticos no ajuste do modelo linear misto de classificação dupla. **Multiciência**, v.3, n.2, p.109-130, 1999.
- OIKAWA, S.M.; IEMMA, A.F. Hipóteses estatísticas com dados desbalanceados nos modelos com três fatores de efeitos fixos hierarquizados. **Scientia Agricola**, v.56, n.4, p.1123-1134, 1999. Suplemento.
- PATTERSON, H.D.; THOMPSON, R. Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. **Biometrika**, v.58, p.545-554, 1971.
- PEREZ, L.A.L. Estimação e predição nos modelos mistos não balanceados. Piracicaba, 1992. 83p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.
- PERRI, S.H.V. Ajuste de modelos mistos de classificação dupla: procedimentos do sistema estatístico SAS. Piracicaba, 1998. 126p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.
- PERRI, S.H.V.; IEMMA, A.F. **Ajuste de modelos mistos através do sistema estatístico SAS**. Piracicaba: ESALQ/USP, 1996. 75p.
- PERRI, S.H.V.; IEMMA, A.F. Procedimento "MIXED" do SAS para análise de modelos mistos. **Scientia Agricola**, v.56, p.959-967, 1999.

- RAO, C.R. Estimation of heterocedastic variances in linear models. **Journal of the American Statistical Association**, v.65, p.161-172, 1970.
- RAO, C.R. Estimation of variance and covariance components – MINQUE Theory. **Journal of Multivariate Analysis**, v.1, p.257-275, 1971a.
- RAO, C.R. Minimum variance quadratic unbiased estimation of variance components. **Journal of Multivariate Analysis**, v.1, p.445-456, 1971b.
- RAO, C.R. Estimation of variance and covariance components in linear models. **Journal of the American Statistical Association**, v.67, p.112-115, 1972.
- RICHARDSON, A.M.; WELSH, A.H. Robust restrict maximum likelihood in mixed linear models. **Biometrics**, v.51, p.1429-1439, 1995.
- SAS INSTITUTE. **SAS/STAT software: changes and enhancements**, release 6.07. Cary, 1992. chapter 16: The MIXED procedure. (SAS Technical Report P-229)
- SAS INSTITUTE. **SAS/STAT software: changes and enhancements through release 6.12**. Cary, 1997. chapter 18: The MIXED procedure.
- SCHEFFÉ, H. **The analysis of variance**. New York: John Wiley, 1959. 477p.
- SCHWARZ, C.J. The mixed-model ANOVA: the truth, the computer packages, the books. Part 1: Balanced Data. **The American Statistician**, v. 47(1), p.48-59, 1993.
- SEARLE, S.R. Another look at Henderson's methods of estimating variance components. **Biometrics**, v.24, p.749-778, 1968.

SEARLE, S.R. **Linear models**. New York: John Wiley, 1971. 532p.

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

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

SERAPHIN, J.C. Comparação numérica de três estimadores de componentes de variância em alguns modelos genético-estatísticos de cruzamentos. Piracicaba, 1984. 74p. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

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

VALÉRIO FILHO, W.V. Comparação de métodos para estimação de componentes da variância de dados através de simulação de dados. Piracicaba, 1991. 137p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

VERNEQUE, R.S. Procedimentos numéricos e estimação de componentes de variância em análise multivariada pelo método da máxima verossimilhança restrita - modelos mistos aplicados ao melhoramento animal. Piracicaba, 1994. 157p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.