ESTIMAÇÃO E PREDIÇÃO NOS MODELOS MISTOS NÃO BALANCEADOS

LUIS ALBERTO LOPEZ PEREZ

Estatístico

Orientador: PROF. DR. ANTONIO FRANCISCO IEMMA

Tese apresentada à Escola superior de
Agricultura "Luiz de Queiroz", da
Universidade de São Paulo, para
obtenção do título de Doutor em
Agronomia, Área de Concentração:
Estatística e Experimentação Agro-
nômica.

P I R A C I C A B A

Estado de São Paulo - Brasil

Dezembro - 1992

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

Lopez Perez, Luiz Alberto
L864e Estimação e predição nos modelos mistos não
balanceados. Piracicaba, 1992.
85p.

Tese - ESALQ
Bibliografia

1. Análise de variância - Componente 2. Estatística
aplicada 3. Método da máxima verossimilhança 4. Modelo
matemático I. Escola Superior de Agricultura Luiz de
Queiróz, Piracicaba

CDD 519.535

ESTIMAÇÃO E PREDIÇÃO NOS MODELOS MISTOS NÃO BALANCEADOS

LUIS ALBERTO LOPEZ PEREZ

Aprovado em 02-12-1992

Comissão Julgadora:

- Prof. Dr. Antonio Francisco Iemma.....ESALQ/USP
- Prof. Dr. Décio Barbin.....ESALQ/USP
- Prof^a. Dr^a. Maria Cristina Stolf Nogueira.....ESALQ/USP
- Prof. Dr. Lucio Benedicto Kroll.....UNESP
- Prof. Dr. Luiz Carlos Baida.....UNESP

Prof. Dr. Antonio Francisco Iemma
orientador

DEDICATÓRIA

- ▶ Ao meu Pai, na sua memória.

LUIS ALFREDO LOPEZ

- ▶ À minha mãe

BENEDICTA PEREZ

- ▶ À CLARA, DAVID ALBERTO e DANIEL F.

- ▶ Aos meus Irmãos.

AGRADECIMENTOS

- ▶ Ao Prof, Dr. Antonio Francisco lemma, pela sua orientação e apoio em todos os sentidos como professor e amigo.
- ▶ Aos meus professores do Departamento de Matemática e Estatística, em particular à Dra. Clarice G. B. Demetrio, Dr. Décio Barbin e Dr. Humberto de Campos.
- ▶ Aos colegas do programa de Doutorado.
- ▶ À mestre Maria Izalina Ferreira Alves.
- ▶ Aos Amigos Jairo Jimenez, Gladys de Jimenez e Ricardo Montalban.
- ▶ Aos meus sobrinhos Denis e René.

SUMÁRIO

	Página
RESUMO.....	i
SUMMARY.....	ii
1. INTRODUÇÃO.....	1
2. REVISÃO DA LITERATURA.....	6
2.1. Idéias Gerais.....	6
2.2. Resumo Histórico.....	14
3. RESULTADOS PRELIMINARES.....	17
3.1. Introdução.....	17
3.2. Modelo Estatístico.....	17
3.2.1. Valores Esperados e matrizes de variâncias e covariâncias.....	18
3.3. Estimação dos Efeitos Fixos e Aleatórios.....	19
3.4. Caracterização dos Preditores Lineares.....	24
3.5. Sobre a Obtenção de V^{-1}	29
3.6. Formas Explícitas do BLUE e do BLUP nos Modelos com Dois Critérios de Classificação.....	35
4. ESTIMAÇÃO DOS COMPONENTES DE VARIÂNCIA.....	40
4.1. Introdução.....	40
4.2. Método da Máxima Verossimilhança.....	40
4.3. Cálculo Assintótico dos Componentes de Variância.....	55
5. UM EXEMPLO ILUSTRATIVO.....	61
6. CONCLUSÕES.....	71
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	73
APÊNDICE PROGRAMA EM MATRIX IML/SAS.....	79

ESTIMAÇÃO E PREDIÇÃO NOS MODELOS MISTOS NÃO BALANCEADOS

Autor: LUIS ALBERTO LOPEZ PEREZ

Orientador: PROF. DR. ANTONIO FRANCISCO IEMMA

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo sobre as funções e preditores lineares nos modelos de efeitos mistos, com estrutura de dados balanceados e desbalanceados.

Propõe-se um método alternativo para a estimação dos preditores lineares, baseado nos multiplicadores de Lagrange os quais dependem linearmente da estimação dos efeitos fixos e aleatórios do modelo. A estimação desses efeitos dependem da estrutura da matriz associada de variâncias e covariâncias, por isto apresenta-se uma metodologia visando simplificar sua construção, assim como o cálculo da sua inversa.

Para a estimação dos componentes da variância, o modelo é escrito em termos das decomposições ortogonais lineares, através das quais se estabelece uma relação entre os sub-índices associados aos efeitos do modelo e os produtos de Kronecker das matrizes identidades de ordem s (I_s) e, quadradas de elementos unitários de ordem s (J_s), com a qual o cálculo dos estimadores de máxima verossimilhança dos componentes de variância associados fica sensivelmente simplificado.

ESTIMATION AND PREDICTION WITH MIXED UNBALANCED MODELS

Author: LUIS ALBERTO LOPEZ PEREZ

Adviser: PROF. DR. ANTONIO FRANCISCO IEMMA

SUMMARY

This work makes a study about the linear functions and predictors in models with mixed effects with balanced and unbalanced datums.

Here is presented an alternative method for the estimation of the linear predictors based on the Lagrange's multipliers, which depend linearly on the estimation of the fixed and aleatory effects of the model. The estimation of these effects depend on the structure of the associate variances and covariances matrix; that's why, a methodology is presented to facilitate its construction and the calculation of its inverse.

For the estimation of the variance's components, the model is written in terms of linear orthogonal decompositions, that allow to establish a relationship between the subindex associated with the effects of the model and the Kronecker products of the identities matrices of order s (I_s) and the square matrices of order s (J_s), notation this, that supplies the calculation of the maximum likelihood estimators of the associate variance's components.

1. INTRODUÇÃO

A teoria estatística desenvolvida para a análise de modelos lineares com estrutura de dados desbalanceada, têm sido amplamente estudada e difundida nas últimas décadas, enfatizando preferencialmente os modelos de efeitos fixos como podem ser vistos em livros relativamente novos como os de DODGE (1985), HOCKING (1985), SEARLE (1987), dentre outros.

Ocorre porém, em muitas situações experimentais, que um ou mais fatores podem estar associados a processos de amostragem, já que não é possível levar em consideração toda a população. Fatores desse tipo são ditos aleatórios, e caracterizam os modelos de efeitos aleatórios.

Pode acontecer ainda que sejam estudados de forma simultânea, efeitos fixos e aleatórios, caracterizando-se assim os modelos mistos. Situações como essas são muito frequentes em experimentos com seres vivos, tanto na área animal como vegetal.

Segundo SCHEFFÉ (1959), esse tipo de modelo foi amplamente estudado por Fisher em 1918, que o denominou modelo de componentes de variância, com grande repercussão nos estudos da genética quantitativa. A partir daí, foram difundidos em muitas outras disciplinas do conhecimento científico, mas considerando apenas os arranjos experimentais com estrutura de dados

balanceados. Apenas a partir dos estudos de HENDERSON (1953), foram abordados os modelos de componentes de variância com estruturas de dados desbalanceados.

Motivados pelas múltiplas aplicações, muitos pesquisadores contribuíram no desenvolvimento de novas técnicas e procedimentos para estimar os componentes de variância nos modelos mistos, sobressaindo-se os trabalhos de HARTLEY & RAO (1967) que apresentam o clássico método da máxima verossimilhança.

Outros trabalhos clássicos são os de PATTERSON & THOMPSON (1971) que desenvolveram o método da máxima verossimilhança restrita (REML) e o procedimento desenvolvido por RAO (1971-1972) e LA MOTTE (1973) conhecido como MINQUE, dentre outros.

Nos modelos mistos três aspectos são fundamentais:

- i) Estimacão dos efeitos fixos.
- ii) Estimacão dos efeitos aleatórios.
- iii) Estimacão dos componentes de variância.

Nesta sequência, no presente trabalho, pretende-se abordar o modelo dos efeitos mistos com estrutura balanceada e não balanceada, desenvolvendo-se os resultados teóricos básicos para satisfazer tais aspectos, de acordo com a seguinte sequência: No capítulo 2 apresenta-se uma revisão da literatura na qual verificou que não há muitos trabalhos desenvolvidos referente aos aspectos (i) e (ii), e que, no entanto, a maioria dos trabalhadores abordam os modelos mistos visando encontrar metodologias para estimacão dos componentes de variância ou seja do aspecto iii).

No capítulo 3, caracteriza-se a forma geral de modelo de efeitos mistos, introduzindo a distribuição normal nos resíduos, embora muitos dos métodos de estimação das componentes não exijam essa propriedade distribucional.

A seguir, nas estimativas pelo método dos mínimos quadrados generalizados, são obtidas as estruturas gerais dos melhores estimadores lineares não viesados (BLUE- best linear unbiased estimator), e dos melhores preditores lineares -(BLUP best linear unbiased predictor); neste trabalho apresenta-se uma forma alternativa para a obtenção dos preditores.

O estudo dos preditores lineares não tem sido ainda muito difundido embora tenha grandes aplicações práticas, principalmente em melhoramento animal, por exemplo em programas de inseminação artificial, quando se quer estudar os méritos genéticos dos reprodutores.

O preditor, por si só é uma variável aleatória que é função de outro conjunto de variáveis aleatórias (geralmente os componentes de variância). Este fato pode dificultar o desenvolvimento teórico. No entanto, sob a suposição de normalidade, o preditor pode ser entendido como uma esperança condicional da distribuição normal multivariada.

No entanto, no caso do BLUE, se faz notar neste trabalho, que quando a estrutura dos dados é balanceada e a matriz associada aos efeitos fixos é de posto completo (caso dos modelos de médias ou quando se faz reparametrização), a estimativa dos parâmetros associada aos efeitos fixos, não vai depender da natureza da matriz de componentes de variância.

Neste capítulo também são estudadas formas gerais para obtenção da inversa da matriz de componentes de variância, gerando-se uma "regra simples" no caso de dados balanceados e de modelos hierárquicos com estruturas desbalanceadas, simplificando sobremaneira os cálculos computacionais.

Uma vez caracterizada a inversa da matriz, finalmente no capítulo 3, apresentam-se formas explícitas para se obter o BLUE e o BLUP nos modelos com um e dois critérios de classificação, e ainda no caso de arranjos em blocos ao acaso, com estrutura de médias. Com isto, procura-se dar ao leitor resultados imediatos nestes modelos. Além disso observa-se que, se a estrutura dos dados for balanceada, e se a matriz associada aos efeitos fixos é de posto coluna completo, então o BLUE não depende dos componentes aleatórios.

No capítulo 4 são estudados métodos de estimação dos componentes de variância, baseados na teoria normal e no método da máxima verossimilhança. Inicialmente são apresentadas "Regras Práticas" para se construir matrizes ortogonais, que associadas às combinações lineares dos componentes de variância, facilitam a estimativa de tais componentes, levando-se em consideração a invariância dos estimadores de máxima verossimilhança. Observa-se, então, que este trabalho apresenta uma contribuição também neste sentido.

De forma genérica, e através dos exemplos, são estimadas funções dos respectivos componentes, levando-se em conta a facilidade de estimação dos componentes com base nas "Regras Práticas".

Ademais são apresentados os algoritmos de Newton-Raphson e os Escores de Fisher para se estimar os componentes de variância no caso de grandes amostras, ou ainda no caso de não ser possível escrever combinações lineares de componentes de variância da forma descrita anteriormente.

Finalmente leva-se a cabo um desenvolvimento computacional, usando o procedimento MATRIX do SAS.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1. Idéias gerais

Nesta seção, são apresentados os trabalhos de um conjunto de pesquisadores que têm contribuído no desenvolvimento de técnicas e procedimentos de análise, estimação e predição dos modelos de efeitos mistos, principalmente no que se relaciona com estruturas de dados desbalanceados.

SCHEFFÉ (1959) no seu livro clássico de Análise de Variância, busca esclarecer e unificar a teoria básica da Análise de Variância, desenvolvida até a referida data. Ali são estudados com muita clareza os modelos de efeitos aleatórios e mistos com estrutura desbalanceada, embora nada seja apresentado quanto aos preditores, fato justificável pois apenas na última década esse tema tem sido abordado com maior interesse.

HARVEY (1964) faz uso dos mínimos quadrados para desenvolver todo um procedimento aritmético que permite obter as estimativas de parâmetros, somas dos quadrados, esperanças dos quadrados médios e estimativas de componentes de variância nos modelos mistos com mais de um fator de classificação. Ele só leva em consideração o modelo superparametrizado, e também nada fala sobre os preditores.

HARTLEY & RAO (1967) a partir do modelo de efeitos mistos,

$$Y = x\alpha + u_1 b_1 + \dots + u_c b_c + e \quad [2.11]$$

e assumindo que Y segue uma distribuição normal multivariada com matriz de variâncias e covariâncias.

$$\sigma^2 H = \sigma^2 [I_n + \gamma_1 u_1 u_1' + \dots + \gamma_c u_c u_c'] \quad [2.21]$$

onde $\gamma_i = \sigma_i^2 / \sigma^2$; fizeram uso do método de estimação de máxima verossimilhança (ML) para estimar α , σ^2 e γ_i , $i: 1, \dots, c$, mas na estimação dos γ_i como não existe uma solução implícita, desenvolveram um método numérico analítico para obter estas estimativas. Discutiram a eficiência e consistência assintótica dos estimadores e finalmente como trabalham sob normalidade, testaram hipóteses e construíram regiões de confiança. Este é um trabalho clássico na obtenção dessas estimativas.

HARTLEY (1967) partindo do modelo [2.11], desenvolve um procedimento geral para obter de modo direto os valores numéricos dos coeficientes associados aos quadrados médios esperados em alguns modelos mistos desbalanceados, assim como em algumas análises de variâncias, ou seja o método é restrito embora constitui uma ferramenta prática e simples, na obtenção desses coeficientes. A técnica por ele desenvolvida é aplicável ao caso dos modelos superparametrizados.

HARVEY (1970), apresenta procedimentos computacionais para estimar os componentes de variâncias e covariâncias, quando

algum conjunto de efeitos aleatórios interage com um ou dois conjuntos de efeitos fixos e a estrutura dos dados é não balanceada. No seu trabalho faz uso dos mínimos quadrados no processo de estimação, e também, só leva em consideração modelos superparametrizados.

HARTLEY & VAUGHN (1972), partindo do modelo [2.1], e sob normalidade com estrutura de covariâncias dada em [2.2], apresentam um desenvolvimento computacional para a solução das equações de máxima verossimilhança, baseado na solução assintótica de c-equações diferenciais. Esse método é conhecido como o de etapa ascendente. Mediante tal procedimento, é possível obter estimativas assintóticas de razões de variâncias as quais são de considerável importância nos estudos de herdabilidade genética.

HEMMERLE & HARTLEY (1973), novamente a partir do modelo [2.1] e levando em consideração [2.2], usam a transformação W na obtenção dos estimadores de máxima verossimilhança, tanto para os componentes fixos como para os componentes de variância. Essa transformação não só permite eliminar os cálculos explícitos e necessários na obtenção de H^{-1} , como também desenvolver os cálculos de forma que não dependam do número de observações em qualquer das etapas. O método da transformação W pode ser considerado como uma modificação do método de Newton-Raphson, no qual é imposta a restrição de que os componentes de variância sejam não negativos. Neste trabalho também apresentam a solução dos componentes de variância usando o método de Newton-Raphson, assim como exemplos de comparação entre os dois métodos.

SPEED & HOCKING (1974), a partir do fato de que a

determinação dos coeficientes associados aos componentes de variância nos quadrados médios esperados é de grande interesse, desenvolveram um método numérico para a estimação desses coeficientes e também dos componentes no caso de caselas com frequências desiguais. Um fato importante neste trabalho, foi que na solução das somas de quadrados e suas esperanças, estabelecem uma analogia com o modelo de efeitos fixos, facilitando a obtenção dos resultados, além disso quando se faz uma reparametrização do modelo ou quando se usa o modelo de médias, o método por eles apresentado facilita muito a obtenção dos resultados.

CORBELL & SEARLE (1976), novamente a partir do [2.1] e com a estrutura de variâncias-covariâncias [2.2], levando em consideração a normalidade, fizeram uma partição do modelo em duas partes, uma delas ficando livre dos efeitos fixos. A seguir ela é maximizada, obtendo-se assim o procedimento de estimação conhecido como o de máxima verossimilhança restrita (REML). Esse método têm a vantagem, sobre o de máxima verossimilhança, de que os estimadores REML, além de não serem invariantes apenas para os efeitos fixos no modelo, no caso balanceado, fornecem idênticos resultados aos obtidos pela Análise de Variância. Na solução do sistema, desenvolveram um algoritmo adaptando a transformação desenvolvida por HEMMERLE & HARTLEY (1973), a qual reduzindo a dimensão dos cálculos e utilizando matrizes de dimensão igual à do espaço dos parâmetros, ao invés de matrizes de dimensão do espaço amostral. Apresentaram alguns exemplos onde são comparadas as estimativas obtidas através da ANOVA, ML e REML, tanto no caso balanceado como desbalanceado. Este trabalho também foi

considerado um clássico na estimação dos componentes de variância.

HENDERSON (1977), calcula as variâncias dos estimadores quadráticos não viesados dos componentes de variância mediante métodos de simulação, examinando propriedades dos estimadores da variância e seus quocientes através da técnica de redução dos mínimos quadrados.

HARVEY (1979), apresentou o método do ajuste de constantes na análise de mínimos quadrados, aplicável nos seguintes casos:

- a) Um critério de classificação com e sem efeitos de covariáveis;
- b) Dois critérios de classificação com e sem interação levando em consideração os efeitos de covariáveis;
- c) Classificação múltipla e cruzada e com efeitos de covariáveis.

O autor considerou os modelos superparametrizados e a estrutura de dados desbalanceados; apresentou várias alternativas na obtenção dos coeficientes associados às esperanças dos quadrados médios. Esse trabalho tem sido amplamente difundido entre pesquisadores do setor agropecuário.

GOODNIGHT & SPEED (1980), calcularam as esperanças dos quadrados médios para a análise de variância associada com modelos não balanceados mistos, e calcularam os coeficientes desses quadrados médios esperados a partir de uma modificação da técnica desenvolvida por SPEED & HOCKING (1974). A modificação levou em conta a técnica da raiz quadrada ou de Cholesky na obtenção da matriz da forma quadrática associada à esperança dos quadrados

médios, no trabalho só consideram o caso de modelos superparametrizados.

HENDERSON JR. (1982), apresentou um resumo da estimação e teste de hipóteses para a análise de covariância em modelos mistos, incluindo o caso de coeficientes aleatórios de regressão. Considerou também o estudo de covariáveis não homogêneas de regressão no modelo misto, no contexto da interpretação de futuras diferenças da predição entre os níveis de um fator determinado ou da interação. Também examinou diferentes coeficientes aleatórios de regressão associados aos níveis dos efeitos aleatórios.

O autor considerou que os coeficientes da regressão são estimáveis sempre que as colunas da matriz de delineamento das covariáveis, sejam linearmente independentes das colunas da matriz de delineamento para os níveis dos fatores fixos e interações, a grande utilidade deste trabalho, consiste na análise feita sobre os modelos mistos com estruturas de covariáveis.

HENDERSON (1984 a,b), numa das obras clássicas de modelos lineares com efeitos aleatórios e mistos, mostrou uma clara tendência da sua utilização na ciência animal, principalmente no melhoramento genético. Apresentou um conjunto de técnicas e métodos para a estimação dos componentes de variância, e também do BLUE e do BLUP no caso do modelo superparametrizado com estruturas desbalanceadas e também com caselas vazias. A clareza no desenvolvimento teórico, e as múltiplas aplicações apresentadas, constituíram grande contribuição ao estudo desses modelos.

DODGE (1985), apresentou técnicas para a análise de

informações de dados obtidos de experimentos onde podem ocorrer caselas vazias. Argumentou que no caso de perda de parcela os delineamentos perdem sua simetria, e portanto, nem todas as funções paramétricas são estimáveis; levando a uma inferência inapropriada sob as hipóteses, e desse modo, a erros na conclusão dos resultados.

Para abordar o problema, o autor construiu a matriz de incidência N que fornece informações sob as funções estimáveis, introduz o algoritmo conhecido como do R -processo, que permite determinar quais os valores esperados das caselas são estimáveis. O autor não considerou o caso dos modelos mistos e aleatórios, isto é, só considerou os modelos de efeitos fixos.

HOCKING (1985), trabalhou com os modelos de médias com estruturas desbalanceadas e ainda com caselas vazias. Embora dê maior ênfase aos modelos dos efeitos fixos, quando aborde os modelos de efeitos aleatórios e mistos, apresentou técnicas de obtenção dos componentes de variância usando estimativas de máxima verossimilhança. Leva também a cabo testes de hipóteses usando a reparametrização encontrada em SPEED & HOCKING (1974).

GOLDSTEIN (1986) apresentou a técnica iterativa dos mínimos quadrados generalizados motivando o seu uso em muitas áreas. A grande vantagem do algoritmo apresentado está na sua generalidade sobre outros métodos de estimação como o de máxima verossimilhança. No tocante à não exigência de uma distribuição, sob normalidade os dois métodos fornecem resultados equivalentes na estimativa dos componentes de variância. O autor leva em consideração apenas

modelos hierárquicos e além de estimar os componentes de variância mostrou que essas estimativas satisfizeram muitas propriedades da convergência. Discutiu também, a aplicação do método dos mínimos quadrados iterativos restritos no caso de dados longitudinais a estimação em modelos múltiplos multivariados, e caselas vazias, além de modelos com erros de medida nas variáveis independentes.

SEARLE (1987) trabalhou com modelos não balanceados e considerou que é importante estudar este tipo de estrutura de dados pelo seguinte:

- a) a análise para o caso balanceado já tem sido amplamente estudada;
- b) o estudo de dados desbalanceados vem sendo amplamente aprofundado, provavelmente pelo uso cada vez maior dos computadores;
- c) a "assustadora" aritmética requerida na análise destes tipos de informações vem sendo facilitada pelo uso dos pacotes estatísticos.

A maior parte da teoria apresentada levou em consideração os modelos de médias e modelos de efeitos fixos, embora abordando modelos de efeitos mistos através de diferentes métodos de estimação.

SEARLE (1988) fez uma apresentação histórica dos modelos de efeitos aleatórios no período 1820-1947, além disso fez um desenvolvimento próprio dos métodos da máxima verossimilhança e máxima verossimilhança restrita na obtenção dos componentes de variância. O método está baseado na obtenção dos estimadores de

máxima verossimilhança a partir de um subconjunto de dados, onde cada partição fez uso do método de ML, e depois simplesmente combinou o conjunto de estimadores.

Mas como nem sempre existem sub-conjuntos independentes, foram usados os promédios na estimação dos respectivos componentes respectivos.

2.2. Resumo Histórico

Segundo SCHEFFÉ (1959) o método de estimação dos mínimos quadrados foi estudado de forma independente, e publicado em livros de problemas de Astronomia por Legendre em 1806 e Gauss em 1809.

Conforme MENDEZ (1978) os modelos de efeitos aleatórios foram inicialmente estudados por Airy em 1861 que propôs um modelo linear com efeitos aleatórios numa aplicação na Astronomia. Chauvenet citado por MENDEZ, em 1863, faz uso dos resultados de Airy numa aplicação à teoria de Bessel.

Segundo SEARLE (1988) os estudos mais recentes desses modelos encontram-se nos trabalhos de Fisher, que em 1918 publicou um artigo sobre genética quantitativa, onde utiliza:

- i) os termos variância e análise da variância;
- ii) na forma implícita o termo componentes de variância.

Em 1925 Fisher, citado por SEARLE, muito contribuiu à teoria dos componentes de variância quando apresentou a teoria da

Análise da Variância (ANOVA), nesse estudo, propõe um método de estimação dos componentes, igualando-se a soma dos quadrados da ANOVA ao seus quadrados médios esperados, obtendo assim um conjunto de equações lineares que, solucionado, fornece estimativas dos componentes de variância.

Também nesta data, estendeu a Análise de Variância de um modelo de classificação simples, desbalanceado, ao de classificação dupla (2 fatores) com interação.

Continuando com SEARLE (1988), tem-se que Tippet em 1931 classifica e estende o método de estimação da ANOVA, agregando à tabela a coluna dos quadrados médios esperados, e diz que no caso de dados desbalanceados "não é possível obter a soma dos quadrados dos desvios dos grupos de médias com relação a média geral, cada grupo vai ter diferentes ponderações".

Nesse período ainda não se concebia o estudo dos modelos mistos com dados desbalanceados como se vê em Tippet e também em Snedecor 1934, que diz, no caso de dados desbalanceados: "a relação direta entre a análise de variância e a correlação intraclasses desaparece se não houver igual frequência nas caselas".

Depois de 1947 o interesse pela estimação dos componentes de variância foi estudado amplamente pelas múltiplas aplicações com seres humanos, gado leiteiro, gado de corte, cereais, porcos e assim por diante. Em grande número de situações a estrutura dos dados é não balanceada.

Um marco inicial significativo dos estudos de componentes de variância no caso desbalanceado pode ser encontrado

em HENDERSON (1953), que seguindo o método de igualar a soma dos quadrados com os seus valores esperados, iguala uma variedade de formas quadráticas com os seus valores esperados.

Apresenta três métodos dos quais o método III é o de maior interesse, pelo fato de que nos modelos mistos as estimativas dos componentes de variância não são afetados pelos efeitos fixos. Tem a desvantagem de envolver cálculos das inversas generalizadas que podem ser muito trabalhosos no caso de um grande número de fatores.

No período 1967-1972 foram desenvolvidos três diferentes métodos considerados clássicos na estimação dos componentes, os quais são:

- a) de HARTLEY & RAO (1967) que apresentaram o método da máxima verossimilhança ($ML = MV$);
- b) de máxima verossimilhança restrita ($REML = MVR$) apresentada inicialmente por ANDERSON & BANCROFT (1952), extendida por PATTERSON & THOMPSON (1971), e por CORBELL & SEARLE (1976);
- c) O método da mínima norma quadrática MINQUE estudado simultaneamente por LA MOTTE (1973) e RAO (1971, 1972);

Com estes três métodos como base, muitos outros pesquisadores continuaram trabalhando nos estudos desses modelos, como pode ser observado na revisão de literatura.

3. RESULTADOS PRELIMINARES

3.1. Introdução

Como este trabalho busca atingir basicamente os modelos lineares com efeitos aleatórios e mistos, e, considerando-se que os três aspectos básicos no estudo dos modelos mistos são:

- i) estimação dos efeitos fixos;
- ii) estimação dos efeitos aleatórios;
- iii) obtenção da matriz inversa dos componentes de variância visando a obtenção da estimação desses componentes.

Então nessa ordem se faz o desenvolvimento deste capítulo.

3.2. Modelo Matemático

Seja o modelo linear

$${}_N y_1 = {}_N X_K \beta_1 + {}_N Z_q U_1 + {}_N e_1 \quad [3.1]$$

y: vetor das observações com dimensões $N \times 1$

X: matriz conhecida associada aos efeitos fixos de dimensões $N \times K$; $r[X] \leq \min\{N, K\}$

β : vetor de efeitos fixos desconhecidos de dimensões $k \times 1$

u : vetor não observável de dimensões $q \times 1$

$$q = \sum_{i=1}^s q_i \quad ; \quad u' = [u'_1, u'_2, \dots, u'_s]$$

u_i : vetor aleatório de dimensão $q_i \times 1$

Z : é usualmente uma matriz de incidência associada aos efeitos aleatórios, com dimensões $N \times q$ e, em geral observável:

$$Z = [z_1, z_2, \dots, z_s]'$$

Z_i : matriz observável de dimensões $N \times q_i$; $i = 1, 2, \dots, s$

e : vetor não observável ou vetor de erros no modelo de dimensões $N \times 1$

3.2.1. Valores esperados e matrizes de variâncias e covariâncias

As pressuposições básicas sobre os valores esperados e variâncias e covariâncias adotadas neste estudo, são:

i) se $u_0 = e$ então $u' = [u'_0, u'_1, \dots, u'_s]$, e

$$E(u_i) = 0, \quad \forall i = 0, 1, \dots, s \quad [3.2]$$

$$\text{ii) } \text{cov}(u_i, u_{i'}) = \begin{cases} \sigma_i^2 I_{q_i} & i = i' \\ 0 & i \neq i' \end{cases} \quad [3.3]$$

De [3.2] como $u_0 = e$; então $\text{Var}(e) = \sigma_e^2 I_N$ e também

$$\text{cov}(u_i, e) = 0; \quad i = 1, \dots, s.$$

$$\text{iii) } \text{Var}(y) = \text{Var}(X\beta + Zu + e) = Z\text{Var}(u)Z' + \text{Var}(e) + Z\text{cov}(u, e)$$

$$= ZDZ' + R = ZDZ' + \sigma_e^2 I_N ; R = \text{Var}(e) + Z\text{cov}(u,e) = \sigma_e^2 I_N$$

onde

$$D = \bigoplus_{i=1}^s \sigma_i^2 I_{q_i} ; \quad \oplus \text{ soma direta de matrizes.}$$

então

$$\begin{aligned} \text{Var}(y) &= Z \left(\bigoplus_{i=1}^s \sigma_i^2 I_{q_i} \right) Z' + \sigma_e^2 I_N \\ &= \sum_{i=0}^s Z_i D_i Z_i' = \sum_{i=0}^s Z_i Z_i' \sigma_i^2 \\ &= ZDZ' + R = V \end{aligned} \quad [3.4]$$

$$\text{cov}(y, u') = E[(y - E(y)) (u - E(u))']$$

$$= \sum_{i=1}^s Z_i^2 \sigma_i = ZD = C \quad [3.5]$$

$$\text{Neste caso } D_i = \sigma_i^2 T_{q_i} ; \quad i = 0, 1, \dots, s$$

então de forma conjunta é escrita:

$$\text{var} \begin{bmatrix} y \\ u \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V & C & R \\ C' & D & O \\ R & O & R \end{bmatrix} \quad [3.6]$$

3.3. Estimação dos Efeitos Fixos e Aleatórios

Pelo fato de que o maior interesse no processo de estimação do modelo [3.1], concentra-se nos melhores estimadores lineares não viesados (BLUES), os quais estão associados aos efeitos fixos do modelo, e os melhores preditores lineares não

viesados (BLUPS), associados aos efeitos aleatórios, nesta seção desenvolve-se a teoria pertinente, segundo as propostas deste estudo.

Seja o modelo [3.1] onde

$e \in (0, \sigma^2 R)$, ou em forma equivalente

$$E(e) = 0, \text{ Var}(e) = R \sigma^2$$

R não singular, então existe uma matriz A ortogonal tal que

$$A A' = R^{-1},$$

pré-multiplicando-se [3.1] por A' , tem-se:

$$A'y = A'X\beta + A'Zu + A'e \quad [3.7]$$

e então

$$W = T\beta + Fu + e^*$$

onde

$$W = A'y; T = A'X; F = A'Z \quad \text{desse modo,}$$

$$e^* \in (0, \sigma^2 I)$$

Assim ao aplicar-se o método dos mínimos quadrados generalizados em [3.7], obtém-se

$$Q = (W - T\beta - Fu)' (W - T\beta - Fu)$$

Igualando-se a zero as derivadas parciais

$$i) \quad \frac{\partial Q}{\partial \beta} = 0$$

$$ii) \quad \frac{\partial Q}{\partial u} = 0$$

Chega-se ao seguinte sistema

$$1) X' R^{-1} X \hat{\beta} + X' R^{-1} Z \hat{u} = X' R^{-1} y \quad [3.8]$$

$$2) Z' R^{-1} X \hat{\beta} + (Z' R^{-1} Z + D^{-1}) \hat{u} = Z' R^{-1} y$$

donde, para o valor de $\hat{u}$ na equação (2) de [3.8] tem-se:

$$\hat{u} = (Z' R^{-1} Z + D^{-1})^{-1} (Z' R^{-1} y - Z' R^{-1} X \beta^0) \quad [3.9]$$

e ao substituir-se [3.9] na equação (1) de [3.8], e usando-se em [3.4] o fato de que segundo HENDERSON & SEARLE (1981):

$$(A + UB\dot{V})^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U (I + B\dot{V} A^{-1}U)^{-1} B\dot{V}A^{-1} \quad [3.10]$$

obtem-se:

$$X' V^{-1} X \beta^0 = X' V^{-1} y$$

donde

$$\beta^0 = (X' V^{-1} X)^{-} X' V^{-1} y \quad [3.11]$$

É imediato verificar que [3.11] satisfaz

$$a) E(\beta^0) = E[(X' V^{-1} X)^{-} X' V^{-1} y] = \beta$$

$$b) BLUE(X\beta^0) = X(X' V^{-1} X)^{-} X' V^{-1} y$$

$$c) Var(\beta^0) = Var[(X' V^{-1} X)^{-} X' V^{-1} y] = (X' V^{-1} X)^{-} \sigma^2 \quad [3.12]$$

onde $(X' V^{-1} X)^{-}$ é uma inversa generalizada de $(X' V^{-1} X)$

d) Quando a matriz associada aos efeitos fixos é de posto coluna completa, então pode-se obter uma matriz B da forma

$$B = (X' V^{-1} X)^{-1} X' X$$

com a qual [3.11] é equivalente à solução dos mínimos quadrados ordinários (M.Q.O.).

Prova: Se B é não singular então

$$VX = XB \quad [3.13]$$

i) pela não singularidade de B, vai existir B^{-1} , de tal maneira que pré-multiplicando por V^{-1} e pós-multiplicando por B^{-1} e

transpondo, [3.13] passa a ser dado por

$$X' V^{-1} = (B')^{-1} X' \quad [3.14]$$

que pós-multiplicando por X, e invertendo tem-se

$$(X' V^{-1} X)^{-1} = (X' X)^{-1} B'$$

mas

$$B' = X' V X'^{-1} \Rightarrow (X' V^{-1} X)^{-1} = (X' X)^{-1} [X' V X'^{-1}]$$

e após multiplicar por $X' V^{-1}$ então

$$(X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} = (X' X)^{-1} X' V X'^{-1} X' V^{-1}$$

$$\Rightarrow (X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} = (X' X)^{-1} X' \quad [3.15]$$

$$\Leftrightarrow (X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} y = (X' X)^{-1} X' y$$

$$\Leftrightarrow \beta_{MQG}^{\circ} = \beta_{MQO}^{\circ} \quad [3.16]$$

Para ver a equivalência, se [3.16] é satisfeita, então em [3.15] ao pré-multiplicar por $X' X$ e pós-multiplicar por V obtém-se que $VX = XB$, com o qual fica demonstrado o teorema.

Observações:

- Se em [3.4] $Z_0 \neq I_N \Leftrightarrow R \neq \sigma_e^2 I_N$, então V é singular, assim de [3.1] tem-se que $X\beta^{\circ} = X(X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} y$, já não vai satisfazer a propriedade de ser um estimador não viesado.
- Se $u \cap N(0, D)$ e, $e \cap N(0, \sigma_e^2 I_N)$ então $X\beta^{\circ}$ obtido por mínimos quadrados generalizados é igual à solução de máxima verossimilhança - Ver HARTLEY & RAO (1967) e a seção [4.2] deste trabalho.

Agora ao substituir-se [3.11] em [3.9]

$$\begin{aligned}\hat{u} &= (Z' R^{-1} Z + D^{-1})^{-1} (Z' R^{-1} y - Z' R^{-1} X (X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} y) \\ &= (Z' R^{-1} Z + D^{-1})^{-1} Z' R^{-1} (y - X\beta^0)\end{aligned}\quad [3.17]$$

Em HENDERSON (1984,a) prova o resultado:

$$\text{se } K = ZD \text{ então } K' V^{-1} = D' Z' V^{-1}$$

ao substituir-se V^{-1} como em [3.10] e depois de somando-se e subtraindo-se a quantidade $D^{-1} (Z' R^{-1} Z + D^{-1})^{-1} Z' R^{-1}$ tem-se então que $K' V^{-1} = D' Z' V^{-1} = (Z' R^{-1} Z + D^{-1})^{-1} Z' R^{-1}$.

Sendo assim, chega-se a

$$\hat{u} = K' V^{-1} (y - X\beta^0) \quad [3.18]$$

que é equivalente a [3.17]

Pode-se observar que

$$\begin{bmatrix} y \\ u \end{bmatrix} \cap \left[\begin{bmatrix} X\beta \\ 0 \end{bmatrix} ; \begin{bmatrix} V & C \\ C' & D \end{bmatrix} \right] \quad [3.19]$$

então [3.18] é tido como o melhor preditor para u .

Desta, vê-se claramente que quando se leva em consideração [3.19] então

$$\hat{u} = E(u|y) \quad [3.20]$$

Observações: Do resultado obtido em [3.18] tem-se que:

$$i) \quad E(\hat{u}) = 0$$

$$\begin{aligned}ii) \quad V(\hat{u}) &= DZ' V^{-1} ZD - DZ' V^{-1} X (X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} ZD = \\ &= K' V^{-1} [I - \text{Var}(X\beta^0) V^{-1}] K\end{aligned}\quad [3.21]$$

iii) Pelo fato de que $X\beta^0$ é invariante $\forall \beta^0$, a solução do sistema

[3.8], então $\hat{u}$ têm solução única.

3.4. Caracterização dos Preditores Lineares

Seja uma função linear das observações $L'y$, conhecida como o preditor e que pode ser expressa como uma função linear de $N'\beta + M'u$ conhecido como o preditante, ou seja

$$L'y = N'\beta + M'u,$$

busca-se obter uma estimativa do preditor, tal que seja mínimo o erro de predição, então procura-se minimizar a variância do erro de predição.

Pelo fato de que

$$E[L'y] = L'X\beta = N'\beta$$

onde $N' = L'X$ é estimável, então conforme IEMMA (1987) minimiza-se a variância do erro de predição a qual é dada por

$$\begin{aligned} \text{Var} [N'\beta + M'u - L'y] &= \text{Var} (N'\beta + M'u - L'y) \\ &= M'DM + L'VL - M'DZL - L'ZDM \end{aligned}$$

$$\text{sujeita a condição} \quad N' = L'X \quad [3.22]$$

Levando-se em consideração [3.22], obtém-se a função lagrangeana:

$$Q = M'DM + L'VL - M'DZL - L'ZDM + (L'X - N')\lambda \quad [3.23]$$

diferenciando-a em relação aos parâmetros desconhecidos (L, λ) , chega-se ao sistema

$$\begin{bmatrix} V & X \\ X' & \Theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L \\ \Theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ZDM \\ N \end{bmatrix} \quad [3.24]$$

onde

$$\Theta = \frac{1}{2} \lambda \quad e \quad V = ZDZ' + R$$

Nota-se que

$$VL + X\Theta = ZDM$$

$$\Leftrightarrow (ZDZ' + R) L + X\Theta - ZDM = 0$$

$$\Leftrightarrow ZD(Z' L - M) + RL + X\Theta = 0 \quad [3.25]$$

$$\text{ao fazer } D(Z' L - M) = A \Rightarrow M = Z' L - D^{-1}A \quad [3.26]$$

Ao substituir-se [3.25] e [3.26] em [3.24]

tem-se o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} R & Z & X \\ Z' & -D^{-1} & 0 \\ X' & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L \\ A \\ \Theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ M \\ N \end{bmatrix} \quad [3.27]$$

Da primeira equação do sistema [3.27] tem-se

$$L = -R^{-1}[ZA + X\Theta] = -R^{-1}[Z ; X] \begin{bmatrix} A \\ \Theta \end{bmatrix} \quad [3.28]$$

que ao substituir-se nas equações [2] e [3] do mesmo sistema

[3.28], obtendo-se

$$- \begin{bmatrix} Z' R^{-1} Z + D^{-1} & Z' R^{-1} X \\ X' R^{-1} Z & X' R^{-1} X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ \Theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M \\ N \end{bmatrix} \quad [3.29]$$

$$\text{Tem-se } -S \begin{bmatrix} A \\ \Theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M \\ N \end{bmatrix}; \text{ donde } \begin{bmatrix} A \\ \Theta \end{bmatrix} = S^{-1} \begin{bmatrix} -M \\ -N \end{bmatrix} \quad [3.30]$$

De [3.30] e [3.28] obtém-se que

$$L = -R^{-1} [Z, X] S^{-1} \begin{bmatrix} -M \\ -N \end{bmatrix} \quad [3.31]$$

e

$$L' = [M', N'] S^{-1} \begin{bmatrix} Z' \\ X' \end{bmatrix} R^{-1}$$

e claramente

$$L' y = [M', N'] \begin{bmatrix} Z' R^{-1} Z + D^{-1} & Z' R^{-1} X \\ X' R^{-1} Z & X' R^{-1} X \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} Z' R^{-1} y \\ X' R^{-1} y \end{bmatrix}$$

e da solução do sistema [3.8] tem-se que

$$\hat{L' y} = (M', N') \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{\beta}^o \end{bmatrix} = M' \hat{u} + N' \hat{\beta}^o \quad [3.32]$$

Nota-se então que o preditor linear das observações depende linearmente das estimativas de $\hat{\beta}^o$ e de $\hat{u}$.

Supondo agora a relação linear

$$\hat{H} = L' y + b \quad [3.33]$$

onde b é uma constante, combinação linear dos elementos de y , com

$\hat{H} = \hat{L}' y + \hat{b}$, onde $\hat{u}$ e $\hat{b}$ são obtidos ao minimizar-se o erro

$$\begin{aligned} E[\hat{H} - H]^2 &= E[L' y + b - H]^2 \\ &= E[(L' y + b - H)' (L' y + b - H)] \\ &= E[(L' y)^2 + b^2 + H^2 + 2E(L' y b) + 2L' y H - 2bH] \\ &= L' E(y^2) L + E(b^2) + E(H^2) + 2L' E(y) b - \\ &\quad - 2L' E(yH) - 2bE(H) \end{aligned} \quad [3.34]$$

Por outro lado já é conhecido que:

$$i) \quad \text{Var}(y) = V \Rightarrow E(y^2) = V + (X\beta)(X\beta)' = V + \alpha\alpha'$$

$$ii) \quad \text{Se assumir } E(H) = \theta \Rightarrow E(H)^2 = \text{var}(H) + \theta^2$$

$$iii) \quad \text{cov}(y, H) = C \Rightarrow E(yH) = C + X\beta\theta = C + \alpha\theta$$

Ao substituir i, ii, iii em [3.34] tem-se a função a minimizar:

$$Q = L'VL + L'\alpha\alpha'L + b^2 + \epsilon^2 + \text{var}(H) + 2L'\alpha b - 2L'c - 2L'\alpha\epsilon - 2b\epsilon \quad [3.35]$$

Ao obter as derivadas:

$$i) \quad \frac{\partial Q}{\partial L} = 0$$

$$ii) \quad \frac{\partial Q}{\partial b} = 0$$

gera-se o sistema de equações:

$$1) \quad LV + L\alpha\alpha' + \alpha b = C + \alpha\epsilon$$

$$2) \quad b + L'\alpha = \epsilon$$

com as soluções

$$L = V^{-1}C \quad \text{e} \quad b = \epsilon - \alpha'V^{-1}C$$

portanto

$$\begin{aligned} \hat{H} &= L'y + b = \epsilon + C'V^{-1}(y - \alpha) \\ &= E(H) + C'V^{-1}(y - X\beta) \end{aligned} \quad [3.36]$$

Este resultado é conhecido como o melhor preditor linear em termos dos elementos de y (BLUP). Nota-se que é melhor preditor no sentido de que tem mínima variância.

Observação: Se conjuntamente y e H se têm distribuição multinormal, ou seja

$$\begin{bmatrix} y \\ H \end{bmatrix} \sim N \left[\begin{bmatrix} X\beta \\ \epsilon \end{bmatrix}; \begin{bmatrix} V & C \\ C' & \text{var}(H) \end{bmatrix} \right] \quad [3.37]$$

então a distribuição condicional de H dado y é tal que

$$H|y \sim N[\theta + C' V^{-1}(y - X\beta) ; \text{var}(H)] \quad [3.38]$$

Desse modo

$$E(H|y) = \theta + C' V^{-1}(y - X\beta) = \hat{H}$$

da equação [3.36]

Fato: Sob normalidade [3.20] e [3.36] coincidem.

Observação: Qualquer que seja a distribuição em [3.20] e [3.36] sempre é possível encontrar os momentos finitos de primeira e segunda ordem.

Pode-se observar que tanto o BLUE de

$$X\beta^0 = X(X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} y,$$

como o

$$\text{BLUP}(\hat{u}) = C' V^{-1} (y - X\beta^0)$$

ou mesmo

$$\text{BLUP}(\hat{H}) = \theta + C' V^{-1}(y - X\beta^0)$$

dependem da matriz de variâncias e covariâncias V , através de V^{-1} , sendo assim considera-se importante apresentar neste trabalho algumas formas explícitas para sua obtenção. A forma apresentada permite estruturar em forma imediata a matriz V e portanto também V^{-1} .

3.5. Sobre a Obtenção de V^{-1}

O cálculo da matriz V^{-1} pode complicar-se, se na notação de [3.41], a estrutura de R for de natureza complexa, mas neste trabalho isto não acontece, pelo fato de que $R = \sigma_{\bullet}^2 I_N$.

Inicialmente apresenta-se uma adaptação do trabalho de SEARLE & HENDERSON (1979) na obtenção de V^{-1} para o caso dos modelos superparametrizados e estrutura de dados balanceados quando $V = \sum \sigma_i^2 Z_i Z_i'$, então cada matriz $Z_i Z_i'$, pode ser escrita como o produto Kronecker de matrizes I_s e J_s onde:

i) I_s : matriz identidade de ordem s .

ii) J_s : matriz quadrada de ordem s , com elementos todos iguais a um.

iii) $I_{s1} \otimes I_{s2} \otimes I_{s3} = I_{s1s2s3}$

iv) $J_{s1} \otimes J_{s2} = J_{s1s2}$

v) $(J_s)^0 = I_s$

Ao obter-se o modelo com a variável resposta,

$y_{ijkl\dots t}$; $i = 1, \dots, I$; $j = 1, \dots, J, \dots, t = 1, \dots, T$

e se P representa o número total de sub-índices associados a variável resposta, então pode-se obter 2^P possíveis partições de produtos de Kronecker com matrizes J_s, I_s , como em IEMMA(1985):

$$\Delta = [I_I \otimes I_J \otimes \dots \otimes I_T; I_I \otimes I_J \otimes \dots \otimes J_T; \dots; J_I \otimes J_J \otimes \dots \otimes J_T]$$

[3.39]

onde cada elemento do vetor, pode ser expresso nos termos das

variáveis binárias:

$$\delta = \begin{cases} 1 & \text{se ocorrer } J_s \\ 0 & \text{se ocorrer } I_s \end{cases}$$

então [3.39] é equivalente a

$$\Delta_1 = (00 \dots 0; 00 \dots 1; \dots; 11 \dots 1) \quad [3.40]$$

e com a notação apresentada em [3.40], pode-se construir o vetor de componentes de variância estabelecendo-se uma relação um a um entre os sub-índices do componente aleatório do modelo e o zero (0) na igualdade [3.40], e considerando zero como caso contrário. Obtem-se assim o vetor $\Theta_{1 \times 2}^P$. Então

$$V = \Delta \Theta' \quad [3.41]$$

A seguir considera-se o seguinte produto de Kronecker

$$T_P = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & I \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & J \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & K \end{bmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & T \end{bmatrix}$$

Pelo fato de que

$$T_P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & I \end{bmatrix}^{-1} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & J \end{bmatrix}^{-1} \otimes \dots \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & T \end{bmatrix}^{-1}$$

e se $\lambda_P = T_P \Theta_P$ então

$$V^{-1} = T_P^{-1} \lambda_P^{-1} \Delta' \quad [3.42]$$

observação: em muitos casos, é necessário que se faça permutações no Δ e no Θ para se obter V

Como uma aplicação:

Seja o modelo

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + \varepsilon_{ijk} \quad [3.43]$$

$$i = 1, \dots, I; j = 1, \dots, J; k = 1, \dots, K$$

Note que se, por exemplo $p = 3$ então $2^3 = 8$ partições

$$\Delta = [J_I \otimes J_J \otimes J_K; J_I \otimes J_J \otimes I_K; \dots; I_I \otimes I_J \otimes I_K]$$

se em [3.43] apenas μ for fixo, então a relação entre os sub-índices das componentes aleatórias do modelo e as variáveis binárias ficam

$$\Delta_1 = \begin{matrix} & \beta_j & \alpha_i & & \gamma_{ij} & \varepsilon_{ijk} \\ (111, 110, 101, 011, 100, 010, 001, 000) \end{matrix}$$

$$\Rightarrow \Theta = (0, 0, \sigma_{\beta}^2, \sigma_{\alpha}^2, 0, 0, \sigma_{\gamma}^2, \sigma_{\varepsilon}^2) \quad [3.44]$$

$$T_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & I \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & J \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & K \end{bmatrix}$$

e

Ao permutar Δ , na forma

$$\Delta = [I_I \otimes I_J \otimes I_K; \dots; J_I \otimes J_J \otimes J_K]$$

$$e \quad \Theta = (\sigma_{\varepsilon}^2, \sigma_{\gamma}^2; 0, 0; \alpha_{\alpha}^2; \sigma_{\beta}^2, 0, 0), \text{ então}$$

$$\lambda_{\mathfrak{g}} = T_{\mathfrak{g}} \Theta' = \begin{bmatrix} \sigma_e^2 = \lambda_0 \\ \sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 = \lambda_{\alpha\beta} \\ \sigma_e^2 \\ \sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + JK \sigma_\alpha^2 = \lambda_\alpha \\ \sigma_e^2 \\ \sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + IK \sigma_\beta^2 = \lambda_\beta \\ \sigma_e^2 \\ \sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + JK \sigma_\alpha^2 + IK \sigma_\beta^2 = \lambda_\mu \end{bmatrix} \quad [3.44']$$

e então de [3.41], chega-se

$$V_{\mathfrak{g}} = \Delta \Theta' = I_{IJK} \sigma_e^2 + I_{IJ} \otimes J_K \sigma_\gamma^2 + I_I \otimes J_{JK} \sigma_\alpha^2 + J_I \otimes I_J \otimes J_K \sigma_\beta^2$$

e ao aplicar [3.42] tem-se então que

$$\begin{aligned} V_{\mathfrak{g}}^{-1} &= \frac{1}{\sigma_e^2} I_{IJK} - \frac{\sigma_\gamma^2}{\sigma_e^2 (\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2)} \cdot (I_{IJ} \otimes J_K) - \\ &- \frac{\sigma_\alpha^2}{[(\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2) (\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + JK \sigma_\alpha^2)]} \cdot (I_I \otimes J_{JK}) - \quad [3.45] \\ &- \frac{\sigma_\beta^2}{[(\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2) (\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + IK \sigma_\beta^2)]} \cdot (J_I \otimes I_J \otimes J_K) + \\ &+ \frac{K \sigma_\alpha^2 \sigma_\beta^2 \{ (\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2) + (\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + JK \sigma_\alpha^2 + IK \sigma_\beta^2) \}}{(\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + IK \sigma_\beta^2) (\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2) (\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + JK \sigma_\alpha^2) (\sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + JK \sigma_\alpha^2 + IK \sigma_\beta^2)} \cdot J_{IJK} \end{aligned}$$

Observação: se $k = 1$ e $\gamma = 0$, então, tanto em [3.44] como em

[3.45] é fácil identificar o modelo com dois fatores sem interação

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

quando apenas μ é fixo.

No caso em que a estrutura dos dados for não balanceada, o desenvolvimento formal na inversão de V depende do fato de que as componentes do modelo sejam cruzadas ou hierárquicas.

Assim por exemplo se no modelo

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij},$$

$$i = 1, \dots, a; \quad j = 1, \dots, n_{ij}; \quad N = \sum_{i=1}^a n_{ij}.$$

então

$$V = \sigma_e^2 I_N + \sigma_\alpha^2 I_a \otimes J_{n_i} = \{ \sigma_e^2 I_{n_i} + \sigma_\alpha^2 J_{n_i} \};$$

nota-se que esta matriz pode ser escrita:

$$V = \bigoplus_{i=1}^a (\sigma_e^2 I_{n_i} + \sigma_\alpha^2 \mathbf{1}_{n_i} \mathbf{1}_{(a)}' \mathbf{1}_{n_i}') \quad [3.46]$$

$$= \bigoplus_{i=1}^a V_i, \text{ onde } \mathbf{1}_{n_i} \text{ é o vetor unitário} \quad [3.47]$$

Ao aplicar-se [3.10] no processo da inversão em

$$[3.46], \quad A = \sigma_e^2 I_{n_i}; \quad \dot{V}BV = \mathbf{1}_{n_i} \mathbf{1}_{(a)}' \mathbf{1}_{n_i}' \text{ tem-se}$$

que

$$V^{-1} = \bigoplus_{i=1}^a \frac{1}{\sigma_e^2 (\sigma_e^2 + n_i \sigma_\alpha^2)} \left[\sigma_e^2 I_{n_i} + D(n_i \sigma_\alpha^2) - \sigma_\alpha^2 J_{n_i} \right] \quad [3.48]$$

onde $D(a)$: matriz diagonal de elementos iguais a a .

Agora para o modelo hierárquico

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

$$i = 1, \dots, a; \quad j = 1, \dots, b; \quad k = 1, \dots, n_{ij}$$

tem-se que para o i -ésimo nível do fator α_i , a matriz de variâncias e covariâncias é dada por

$$V_i^* = \sigma_e^2 I_{n_{ij}} + \sigma_\alpha^2 J_{n_{ij}} + \sigma_\beta^2 D(J_{n_{ij}})$$

mas

$$J_{n_{ij}} = (1_{n_{ij}} \quad I_{(a)} \quad 1'_{n_{ij}})$$

e

$$V = \bigoplus_{i=1}^a (V_i^*) = \bigoplus_{i=1}^a [\sigma_e^2 I_{n_{ij}} + \sigma_\alpha^2 J_{n_{ij}} + \sigma_\beta^2 (1_{n_{ij}} \quad I_{(a)} \quad 1'_{n_{ij}})]$$

e por [3.47] tem-se que

$$V = \bigoplus_{i=1}^a [V_i + \sigma_\beta^2 (1_{n_{ij}} \quad I_{(a)} \quad 1'_{n_{ij}})] \quad [3.49]$$

onde $V_i = \sigma_e^2 I_{n_{ij}} + \sigma_\alpha^2 J_{n_{ij}}$.

e ao aplicar-se novamente [3.10] obtém-se a inversa da matriz V . De forma semelhante pode-se estender para o caso de modelos multihierárquicos.

Observação: No caso de modelos com fatores cruzados este procedimento não é válido. Deve-se então considerar casos específicos de inversão levando-se em consideração o número de componentes do modelo.

3.6. Formas Explícitas do BLUE e do BLUP nos Modelos com Um ou Dois Critérios de Classificação

Nesta seção, apresentam-se algumas soluções particulares dos estimadores e preditores lineares nos modelos com um e dois critérios de classificação, nos casos de estruturas de dados balanceados e desbalanceados. O objetivo é facilitar o uso destes resultados através do conhecimento de sua forma explícita.

Seja o modelo

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij} \quad [3.50]$$

$$i = 1, \dots, a; \quad j = 1, \dots, b;$$

onde apenas μ é fixo, por [3.41] tem-se que

$$V = \sigma_e^2 I_n + \sigma_\alpha^2 I_a \otimes J_b = \sigma_e^2 I_n + \sigma_\alpha^2 D_a(J_b)$$

onde

$$I_n = I_a \bullet I_b; \quad n = ab$$

e por [3.42], então

$$V^{-1} = \frac{1}{\sigma_e^2} \left[I_n - \frac{\sigma_\alpha^2}{\sigma_e^2 + b\sigma_\alpha^2} \bigoplus_{i=1}^a J_b \right]$$

e assim por [3.11] e por [3.16] com $X = 1'_n = 1'$

$$\hat{\mu} = (1' V^{-1} 1)^{-1} 1' V^{-1} y = (1' 1)^{-1} 1' y = \bar{y}_{..} \quad [3.51]$$

Agora para obter a forma explícita do BLUP, neste caso para α , então por [3.18] quando $V(\alpha) = \sigma_\alpha^2 I_a$ tem-se que

$$BLUP(\hat{\alpha}) = D \left[\frac{\sigma_\alpha^2}{\sigma_e^2 + b\sigma_\alpha^2} (y_{i.} - b\hat{\mu}) \right]$$

$$= \frac{\sigma_{\alpha}^2}{\sigma_e^2 + b\sigma_{\alpha}^2} \begin{bmatrix} (y_{1.} - b\hat{\mu}) & 0 & 0 \\ 0 & (y_{2.} - b\hat{\mu}) & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & & (y_{a.} - b\hat{\mu}) \end{bmatrix}$$

Para um valor particular tem-se

$$\text{BLUP}(\alpha_i) = \frac{\sigma_{\alpha}^2}{\sigma_e^2 + b\sigma_{\alpha}^2} (y_{i.} - b\hat{\mu})$$

Agora se em [3.50] tem-se uma estrutura de dados não balanceados, ou seja quando $J = 1, 2, \dots, n_i$ então de [3.11] e [3.48] obtém-se

$$\hat{\mu} = \text{BLUE}(\mu) = \sum_i \frac{n_i \bar{y}_{i.}}{\sigma_e^2 + n_i \sigma_{\alpha}^2} \bigg/ \sum_{i=1}^a \frac{n_i}{\sigma_e^2 + n_i \sigma_{\alpha}^2}$$

Assim, de [3.18] e [3.48] tem-se que

$$\text{BLUP}(\alpha_i) = \frac{\sigma_{\alpha}^2}{\sigma_e^2 + n_i \sigma_{\alpha}^2} (y_{i.} - n_i \hat{\mu})$$

Supondo agora que tem-se o modelo caracterizado por

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + e_{ijk} \quad [3.52]$$

$$i = 1, \dots, a; \quad j = 1, \dots, b; \quad k = 1$$

Este modelo caracteriza os blocos completos ao acaso, onde o efeito dos blocos é aleatório, e além disso se na matriz associada aos efeitos considerar-se uma reparametrização, de tal forma que X , seja de posto coluna completo, tem-se então que na obtenção explícita do BLUE e do BLUP, considerando [3.41] e [3.42] tem-se

$$V^{-1} = \frac{1}{\sigma_e^2} I_{ab} - \frac{\sigma_\beta^2}{\sigma_e^2 (\sigma_e^2 + a\sigma_\beta^2)} J_a \otimes I_b$$

considerando $X = D_a(1_b)$, obtém-se

$$(X' V^{-1} X) = \left[D_a(b) - \frac{b\sigma_\beta^2}{\sigma_e^2 + a\sigma_\beta^2} J_a \right] \quad [3.53]$$

e aplicando-se os resultados apresentados em HENDERSON & SEARLE (1981) e SEARLE (1982) na inversão de [3.53], isto é:

$$(A + buV')^{-1} = A^{-1} - \frac{b}{1 + bV' A^{-1} u} A^{-1} u V' A^{-1}$$

obté-m-se que

$$(X' V^{-1} X)^{-1} = \left[D_a^{-1}(b) + \frac{t}{1 + t1' D_a^{-1}(b)1} D_a^{-1}(b)11' D_a^{-1}(b) \right] \quad [3.54]$$

onde

$$t = \frac{b\sigma_\beta^2}{\sigma_e^2 + a\sigma_\beta^2}$$

e de [3.11] obtém-se que o

$$\text{BLUE}(\alpha_i) = \bar{y}_i.$$

que é obtido também das equações normais:

$$X' X \alpha = X' y \quad [3.55]$$

Assim, observa-se que

$$\text{var}(\text{BLUE}(\alpha_i)) = \text{var}(\bar{y}_i) = \frac{1}{b} (\sigma_e^2 + \sigma_\beta^2)$$

e como em [3.12] foi obtida a expressão geral da variância do BLUE, verifica-se que

$$\text{var}(\text{BLUE}(\alpha)) = \frac{1}{b} \begin{bmatrix} \sigma_e^2 + \sigma_\beta^2 & \sigma_\beta^2 & \sigma_\beta^2 \\ \sigma_\beta^2 & \sigma_e^2 + \sigma_\beta^2 & \sigma_\beta^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_\beta^2 & \sigma_\beta^2 & \sigma_e^2 + \sigma_\beta^2 \end{bmatrix} \quad [3.56]$$

resultado este, muito conhecido nas áreas da estatística experimental e dos componentes de variância.

Agora por [3.18] encontra-se que

$$\text{BLUP}(\beta_j) = \frac{1}{\sigma_e^2 + a\sigma_\beta^2} (\bar{y}_{.j} - \bar{y}_{..}) \quad [3.57]$$

Ao supor que em [3.52] a estrutura dos dados é não balanceada, isto é, $k = 1, 2, \dots, n_{ij}$ e sem considerar-se o termo constante (ou ao fazer uma reparametrização na matriz associada aos efeitos fixos), tem-se que a matriz inversa dos componentes de variância é semelhante à forma dada em [3.48], mas com fatores cruzados, assim considerando $X = D(1_{n_i})$, e substituindo-se em [3.11] tem-se que

$$(X'V^{-1}X)^{-1} = \left[D(n_{i.}) - \sum_{j=1}^b \frac{\sigma_\beta^2}{\sigma_e^2 + n_{.j}\sigma_\beta^2} (n_{1j}, \dots, n_{aj})(n_{1j}, \dots, n_{aj}) \right] \quad [3.58]$$

onde $n_{i.} = \sum_j n_{ij}$ e $n_{.j} = \sum_i n_{ij}$

$$\text{e} \quad X'V^{-1}y = \left[y_{i..} - \sum_{j=1}^b \frac{\sigma_\beta^2 n_{ij} y_{.j.}}{\sigma_e^2 + n_{.j}\sigma_\beta^2} \right] \quad [3.59]$$

Obtendo-se

$$\text{BLUE}(\alpha) = (X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} y \neq (X' X)^{-1} X' y$$

obtido de [3.58] e [3.59], note que também neste caso a estimativa de α no modelo superparametrizado é equivalente aquela obtida no modelo de médias, conforme IEMMA(1991).

Observação: É importante considerar que no caso de estruturas de dados balanceados, se a matriz associada aos efeitos fixos for de posto coluna completo, então o Blue não dependerá dos componentes aleatórios, como pode ser observado, por exemplo em [3.51] e [3.55], que como já foi dito é uma consequência de [3.16]. Esta é porém uma afirmação válida em toda estrutura de dados que satisfazem a essas características.

4. ESTIMACÃO DOS COMPONENTES DE VARIÂNCIA

4.1. Introdução

Dada a grande importância dos componentes de variância no estudo dos BLUE e do BLUP, é conveniente que sejam apresentados alguns métodos para obtenção de suas estimativas, embora existam muitos procedimentos. Neste trabalho, são estudados somente aqueles baseados na teoria da distribuição normal. Ademais são considerados procedimentos específicos no caso de estruturas de dados balanceados e não balanceados.

4.2. Método da Máxima Verossimilhança

Seja o modelo [3.1] o qual pode ser escrito mais explicitamente na forma

$$y = X\beta + Z_1 u_1 + \dots + Z_s u_s + e \quad [4.1]$$

onde é imposta a restrição de normalidade, ou seja

$$e \sim N(0, \sigma^2 I) \quad u_i \sim N(0, \sigma_i^2)$$

$$i = 1, \dots, s$$

u_i : é o vetor dos efeitos aleatórios do i -ésimo fator

e

$$y \in N(X\beta, V)$$

onde a matriz de variâncias e covariâncias V pode ser reescrita na forma.

$$V = \sigma^2 I + \sigma_1^2 Z_1 Z_1' + \dots + \sigma_s^2 Z_s Z_s' \quad [4.2]$$

ou também

$$\begin{aligned} \frac{V}{\sigma^2} &= \left[I + \frac{\sigma_1^2}{\sigma^2} Z_1 Z_1' + \dots + \frac{\sigma_s^2}{\sigma^2} Z_s Z_s' \right] \\ &= [I + \gamma_1 Z_1 Z_1' + \dots + \gamma_s Z_s Z_s'] \end{aligned} \quad [4.3]$$

onde

$$\begin{aligned} \gamma_i &= \sigma_i^2 / \sigma^2 \\ i &= 1, 2, \dots, s \end{aligned}$$

Pelo fato da normalidade, então a função de verossimilhança é neste caso :

$$\begin{aligned} L(y, X\beta, \sigma_i^2) &= \\ &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} |V|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} (y-X\beta)' V^{-1} (y-X\beta) \right] \end{aligned} \quad [4.4]$$

e o logaritmo da função de verossimilhança fica

$$\begin{aligned} \lambda &= -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{2} \ln |V| - \\ &\quad - \frac{1}{2\sigma^2} (y-X\beta)' V^{-1} (y-X\beta) \end{aligned} \quad [4.5]$$

e então

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \beta} = -\frac{1}{2\sigma^2} [-2X' V^{-1} y + 2(X' V^{-1} X)\beta] = 0 \quad [4.6]$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} (y-X\beta)' V^{-1} (y-X\beta) = 0 \quad [4.7]$$

e

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \gamma_i} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial \gamma_i} \ln |V| - \frac{1}{2\sigma^2} (y-X\beta)' \frac{\partial V^{-1}}{\partial \gamma_i} (y-X\beta) \quad [4.8]$$

mas note-se que

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_i} \ln |V| = \frac{1}{|V|} \frac{\partial |V|}{\partial \gamma_i} \quad [4.9]$$

e lembrando que

i) $|V|$ é o determinante da matriz V

ii) $V^{-1} = \frac{\text{Adj}(V)}{|V|} = \frac{1}{|V|} \frac{\partial |V|}{\partial V}$, onde $\text{Adj}(V)$ é a matriz adjunta de V , ao substituir em [4.9] tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \gamma_i} \ln |V| &= \frac{1}{|V|} \sum_j \sum_k \frac{\partial |V|}{\partial V_{jk}} \cdot \frac{\partial V_{jk}}{\partial \gamma_i} \\ &= \sum_j \sum_k \left(\frac{1}{|V|} \frac{\partial |V|}{\partial V_{jk}} \right) \frac{\partial V_{jk}}{\partial \gamma_i} \\ &= \sum_i \sum_j V^{-1}_{ji} \frac{\partial V_{ji}}{\partial \gamma_i} ; \text{ veja-se SEARLE 1982} \end{aligned}$$

Por outro lado, da definição do traço de uma matriz nota-se que

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_i} \ln |V| = \text{Tr} \left[V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \gamma_i} \right]$$

e assim ao substituir em [4.8] tem-se

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \gamma_i} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left[V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \gamma_i} \right] - \frac{1}{2\sigma^2} (y-X\beta)' \frac{\partial V^{-1}}{\partial \gamma_i} (y-X\beta) \quad [4.10]$$

De [4.3] tem-se que:

$$\frac{\partial V}{\partial \gamma_i} = Z_i Z_i' \quad e \quad \frac{\partial V^{-1}}{\partial \gamma_i} = - V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \gamma_i} V^{-1}$$

portanto

$$\frac{\partial V}{\partial \gamma_i} = - \frac{1}{2} \text{Tr} (V^{-1} Z_i Z_i') + \frac{1}{2\sigma^2} (y - X\beta)' V^{-1} Z_i Z_i' V^{-1} (y - X\beta) \quad [4.11]$$

De [4.6] e [4.7] pode-se observar que tanto β como σ^2 dependem linearmente de γ^{-1} , ou seja

$$\hat{\beta}(\gamma_i) = (X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} y \quad [4.12]$$

$$n \hat{\sigma}^2(\gamma_i) = y' V^{-1} y - y' V^{-1} X (X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1} y \quad [4.13]$$

A solução de [4.11] não é imediata, é necessário o uso de métodos numéricos na sua obtenção

Uma forma de se contornar o problema na estimação, em [4.11], é reescrevendo V de [3.41] em função dos λ_P . Pelo fato de que $\lambda_P = T_P \Theta_P$ e, como T_P é não singular então

$$V = \Delta T_P^{-1} \lambda_P \quad [4.14]$$

dessa forma a matriz dos componentes de variância será obtida pela soma dos componentes ortogonais, com o qual facilita-se a estimação dos componentes. Esta é a forma de obtenção de V sugerida por HOCKING (1985). Neste trabalho apresenta-se uma forma mais simples na obtenção dessas partições ortogonais com o qual facilita-se a sua estimação.

Para esclarecer esta forma de V , seja o modelo apresentado em [3.43], onde por [3.41] vimos que

$$V = \sigma_e^2 I_{IJK} + \sigma_\gamma^2 I_{IJ} \otimes J_K + \sigma_\alpha^2 I_I \otimes J_{JK} + \sigma_\beta^2 J_I \otimes I_J \otimes J_K, \quad ,$$

e de [3.44] tem-se que

$$\lambda_o = \sigma_e^2 \Rightarrow \sigma_e^2 = \lambda_o$$

$$\lambda_{\alpha\beta} = \sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 \Rightarrow \sigma_\gamma^2 = \frac{1}{K} [\lambda_{\alpha\beta} - \lambda_o]$$

$$\lambda_\alpha = \sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + JK \sigma_\alpha^2 \Rightarrow \sigma_\alpha^2 = \frac{1}{JK} [\lambda_\alpha - \lambda_{\alpha\beta}]$$

$$\lambda_\beta = \sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + IK \sigma_\beta^2 \Rightarrow \sigma_\beta^2 = \frac{1}{IK} [\lambda_\beta - \lambda_{\alpha\beta}]$$

$$\lambda_\mu = \sigma_e^2 + K \sigma_\gamma^2 + JK \sigma_\alpha^2 + IK \sigma_\beta^2 = [\lambda_\alpha + \lambda_\beta - \lambda_{\alpha\beta}]$$

ou ainda; considerando:

$$\begin{bmatrix} \lambda_o \\ \lambda_{\alpha\beta} \\ \lambda_\alpha \\ \lambda_\beta \\ \lambda_\mu \end{bmatrix} = \lambda_P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & K & 0 & 0 \\ 1 & K & JK & 0 \\ 1 & K & 0 & IK \\ 1 & K & JK & IK \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_e^2 \\ \sigma_\gamma^2 \\ \sigma_\alpha^2 \\ \sigma_\beta^2 \end{bmatrix}$$

e fazendo-se

$$\dot{T}_P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & K & 0 & 0 \\ 1 & K & JK & 0 \\ 1 & K & 0 & IK \end{bmatrix}$$

De onde $\Theta = \dot{T}_P^{-1} \hat{\lambda}_P$; onde $I_{IJK} = I_N$; $J_{IJK} = J_N$

Observa-se de [4.141]

$$V = \lambda_o I_N + \frac{1}{JK} \lambda_\alpha I_I \otimes J_{JK} + \frac{1}{IK} \lambda_\beta J_I \otimes I_J \otimes J_K +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{K} \lambda_{\alpha\beta} [I_{IJ} \otimes J_K - \frac{1}{J} I_I \otimes J_{JK} - \frac{1}{I} J_I \otimes I_J \otimes J_K] - \\
& - \frac{1}{K} \lambda_o I_{IJ} \otimes J_K
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Adicionando-se à expressão anterior as parcelas:

$$\pm \lambda_{\alpha} \frac{1}{N} J_N; \pm \lambda_{\beta} \frac{1}{N} J_N; \lambda_{\alpha\beta} \frac{1}{N} J_N$$

obtem-se que

$$\begin{aligned}
V = & \lambda_o \underbrace{\left[I_N - \frac{1}{K} I_{IJ} \otimes J_K \right]}_{A_o} + \lambda_{\alpha} \underbrace{\left[\frac{1}{JK} I_I \otimes J_{JK} - \frac{1}{N} J_N \right]}_{A_1} + \\
& + \lambda_{\beta} \underbrace{\left[\frac{1}{IK} J_I \otimes I_J \otimes J_K - \frac{1}{N} J_N \right]}_{A_2} + \\
& + \lambda_{\alpha\beta} \underbrace{\left[\frac{1}{K} I_{IJ} \otimes J_K - \frac{1}{JK} I_I \otimes J_{JK} - \frac{1}{IK} J_I \otimes I_J \otimes J_K + \frac{1}{N} J_N \right]}_{A_3} \\
& + (\lambda_{\alpha} + \lambda_{\beta} - \lambda_{\alpha\beta}) \underbrace{\frac{1}{N} J_N}_{A_{\mu}}
\end{aligned}$$

$$V = \lambda_o A_o + \lambda_{\alpha} A_1 + \lambda_{\beta} A_2 + \lambda_{\alpha\beta} A_3 + \lambda_{\mu} A_{\mu} \tag{4.16}$$

Satisfazendo as seguintes condições

$$i) \quad A_t A_{t'} = \begin{cases} 0 & \text{se } t \neq t' \\ A_t & \text{se } t = t' \end{cases} \quad t, t' = 0, 1, 2, 3$$

e além disso $A_t A_{\mu} = 0, \forall_t$

$$\text{ii)} \quad A_t = A'_t$$

iii) $A_t = A_t^{-1}$ ou seja são matrizes ortogonais e desse modo a matriz inversa em [4.16] é imediata, ou seja

$$V^{-1} = \frac{1}{\lambda_o} A_o + \frac{1}{\lambda_\alpha} A_1 + \frac{1}{\lambda_\beta} A_2 + \frac{1}{\lambda_{\alpha\beta}} A_3 + \frac{1}{\lambda_\mu} A_\mu \quad [4.17]$$

Observação:

Como

$$\begin{aligned} y_{ijk} = & \left[y_{ijk} - \frac{1}{K} y_{ij.} \right] + \left[\frac{1}{JK} y_{i..} - \frac{1}{N} y_{...} \right] \\ & + \left[\frac{1}{IK} y_{.j.} - \frac{1}{N} y_{...} \right] + \left[\frac{1}{K} y_{ij.} - \frac{1}{JK} y_{i..} - \frac{1}{IK} y_{.j.} + \frac{1}{N} y_{...} \right] \\ & + \frac{1}{N} y_{...} \end{aligned} \quad [4.18]$$

ou seja y_{ijk} é reescrito nos termos das partições ortogonais do modelo, então é fácil estabelecer uma relação direta entre estas partições ortogonais e as matrizes A_t e A_μ em [4.16]. Note-se que a relação é imediata se são feitos os produtos de Kronecker segundo as seguintes variáveis indicadoras.

$$\delta = \begin{cases} 1 & \text{cada vez que um sub-índice aparece na resposta} \\ J & \text{caso contrário} \end{cases}$$

assim por exemplo

$$\begin{aligned} \frac{1}{JK} y_{i..} - \frac{1}{N} y_{...} & \Rightarrow \frac{1}{JK} I_I \otimes J_J \otimes J_K - \frac{1}{N} J_I \otimes J_J \otimes J_K \\ & = \frac{1}{JK} I_I \otimes J_{JK} - \frac{1}{N} J_N = A_1 \end{aligned}$$

com esta observação, pode-se estabelecer de forma simples a estrutura de V dada em [4.16].

A grande utilidade de escrever V na forma de [4.16] consiste no fato de que a função de verossimilhança [4.4] é amplamente simplificada, ela fica

$$L(y, \mu, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} |V|^{-1/2} \exp \left[\left(-\frac{1}{2} \right) \left[\frac{N(\bar{y} - \mu)^2}{\lambda_\mu} + \sum_{t=0}^q \frac{y' A_t y}{\lambda_t} \right] \right] \quad [4.19]$$

e o logaritmo da função é

$$\mathcal{L}_n(L) = -\frac{N}{2} \ln 2\pi - \frac{1}{2} \ln |V| - \frac{1}{2} \left[\frac{N(\bar{y} - \mu)^2}{\lambda_\mu} + \sum_{t=0}^q \frac{y' A_t y}{\lambda_t} \right] \quad [4.20]$$

de maneira que

$$\frac{\partial \mathcal{L}_n(L)}{\partial \lambda_t} = \frac{y' A_t y}{2\lambda_t^2} - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \lambda_t} \right] \quad [4.21]$$

mas neste caso

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \lambda_t} \right] &= \text{Tr} \left[\left(\frac{1}{\lambda_0} A_0 + \frac{1}{\lambda_1} A_1 + \dots + \frac{1}{\lambda_t} A_t + \dots + \frac{1}{\lambda_q} A_q \right) A_t \right] \\ &= \text{Tr} \left[\frac{1}{\lambda_t} A_t \right] = \frac{1}{\lambda_t} \text{Tr} (A_t) \end{aligned}$$

e pelas propriedades de A_t , então tem-se

$$\text{Tr} (A_t) = r(A_t) = r_t \quad ,$$

assim,

$$\text{Tr} \left[V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \lambda_t} \right] = \frac{1}{\lambda_t} r_t$$

onde r_t é o posto da matriz A_t .

De [4.21] igualando a zero, obtém-se

$$y' A_t y = \lambda_t r_t \Rightarrow \hat{\lambda}_t = \frac{y' A_t y}{r_t}$$

a• fazer que $Q_t = y' A_t y$ então

$$\hat{\lambda}_t = Q_t / r_t \quad [4.22]$$

pela invariância dos estimadores de máxima verossimilhança, as estimativas dos componentes de variância são obtidos.

Assim continuando com o exemplo

$$\hat{\sigma}_e^2 = \hat{\lambda}_0 = \frac{y' A_0 y}{r_0} ; r_0 = \text{rank} (A_0)$$

$$\hat{\sigma}_\gamma^2 = \frac{1}{K} \left[\hat{\lambda}_{\alpha\beta} - \hat{\lambda}_0 \right]$$

$$\hat{\sigma}_\alpha^2 = \frac{1}{JK} \left[\hat{\lambda}_\alpha - \hat{\lambda}_{\alpha\beta} \right]$$

$$\hat{\sigma}_\beta^2 = \frac{1}{IK} \left[\hat{\lambda}_\beta - \hat{\lambda}_{\alpha\beta} \right]$$

Das propriedades de distribuições de formas quadráticas demonstra-se que

$$\frac{Q_t}{\lambda_t} \cap \chi^2(r_t) \Leftrightarrow Q_t \cap \lambda_t \chi^2(r_t)$$

E então

$$\text{Var}(Q_t) = \lambda_t^2 \text{Var}(\chi^2(r_t))$$

$$= 2\lambda_t^2 / r_t \quad .$$

$$\text{e} \quad \text{Var}(Q_t/r_t) = 2\lambda_t^2/r_t \quad , \quad [4.23]$$

ou seja

$$\text{Var}(\hat{\lambda}_t) = 2\lambda_t^2/r_t \quad .$$

e como

$$\hat{\lambda}_P = \hat{T}_P \hat{\Theta}_P \Rightarrow \hat{\Theta}_P = \hat{T}_P^{-1} \hat{\lambda}_P$$

então

$$\text{Var}(\hat{\Theta}_P) = \hat{T}_P^{-1} \text{Diag} (2\lambda_t^2/r_t) \hat{T}_P^{-1} \quad [4.24]$$

desse modo:

$$\begin{aligned} E[\hat{\lambda}_t] &= E[Q_t/r_t] \\ &= \frac{1}{r_t} E[Q_t] = \frac{1}{r_t} [\text{Tr} (A_t V) + \mu' A_t \mu] \\ &= \frac{1}{r_t} \left[(\text{VEC } A_t')' \text{VEC } V + \mu' A_t \mu \right] = \lambda_t \end{aligned}$$

onde VEC é um operador definido de tal forma que se

$$x = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \Rightarrow \text{VEC } x = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix}$$

o qual pode ser amplamente estudado em HENDERSON & SEARLE (1979), entre outros.

Se todos os quadrados médios obtidos a partir de [4.22], são escritos na forma linear, tem-se

$$S \hat{\lambda}_P = S_0 \hat{\lambda}_0 + S_1 \hat{\lambda}_1 + \dots + S_q \hat{\lambda}_q + S_u \hat{\lambda}_u,$$

então pelo fato de que $E(\hat{\lambda}_t) = \lambda_t$, ou seja estimador ser não viesado

$$i) \quad \text{Var}(\text{Var}(\hat{\lambda}_t)) = \frac{2[y' A_t y]^2}{r_t^2 (r_t + 2)} = \frac{2\hat{\lambda}_t^2}{(r_t + 2)}$$

tem-se que na sua estrutura geral

$$\bigwedge \text{Var}(\text{Var}(\hat{\Theta}_P)) = \dot{T}_P^{-1} \text{Diag} \left[\frac{2\hat{\lambda}_t^2}{r_t + 2} \right] \dot{T}_P^{-1},$$

nota-se também que

$$\begin{aligned} ii) \quad E[\bigwedge \text{Var}(\text{Var}(\hat{\lambda}_t))] &= E \left[\frac{2\hat{\lambda}_t^2}{r_t + 2} \right] = \frac{2}{r_t + 2} [\text{Var}(\hat{\lambda}_t) + (E(\hat{\lambda}_t))^2] \\ &= \frac{2\hat{\lambda}_t^2}{r_t} \end{aligned}$$

Este resultado é estendido na sua forma geral ou seja

$$E \left[\text{Diag} \left(\frac{2\hat{\lambda}_t^2}{r_t + 2} \right) \right] = \text{Diag} \left[2 \frac{\lambda_t^2}{r_t} \right]$$

Dos resultados i) e ii) verifica-se que

$$E \left[\hat{\lambda}_P \hat{\lambda}_P' - \text{Diag} \left(2 \frac{\lambda_t^2}{r_t} \right) \right] = \lambda_P \lambda_P'$$

No contexto do modelo [3.43], levando-se em consideração

que

$$\dot{T}_P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/K & 1/K & 0 & 0 \\ 0 & -1/JK & 1/JK & 0 \\ 0 & -1/IK & 0 & 1/IK \end{bmatrix}$$

obtem-se que

$$\wedge \text{Var}(\hat{\Theta}_P) = \dot{T}_P^{-1} \text{Diag} \left[\frac{2\hat{\lambda}_i^2}{r_i + 2} \right] \dot{T}_P^{-1} =$$

$$\begin{bmatrix} \frac{2\hat{\lambda}_0^2}{r_0+2} - \frac{2\hat{\lambda}_0^2}{K(r_0+2)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{K^2} \left[\frac{\hat{\lambda}_0^2}{r_0+2} + \frac{\hat{\lambda}_{\alpha\beta}^2}{r_1+2} \right] - \frac{2\hat{\lambda}_{\alpha\beta}^2}{JK^2(r_1+2)} - \frac{2\hat{\lambda}_{\alpha\beta}^2}{IK^2(r_1+2)} & & & \\ \text{Simétrica} & \frac{2}{(JK)^2} \left[\frac{\hat{\lambda}_{\alpha\beta}^2}{r_1+2} + \frac{\hat{\lambda}_\alpha^2}{r_2+2} \right] - \frac{2\hat{\lambda}_{\alpha\beta}^2}{K^2 IJ(r_1+2)} & & \\ & & \frac{2}{(IK)^2} \left[\frac{\hat{\lambda}_{\alpha\beta}^2}{r_1+2} + \frac{\hat{\lambda}_\beta^2}{r_3+2} \right] & \end{bmatrix}$$

onde r_0 , r_1 , r_2 e r_3 são os graus de liberdade associados aos efeitos e são equivalentes aos postos das matrizes associadas às partições ortogonais do modelo.

Outra vantagem existente em se escrever a matriz de variâncias e covariâncias da forma [4.16], está no fato de que além de obter-se as estimativas em [4.22], dada a suposição de normalidade pode-se obter o r -ésimo momento, usando-se o resultado apresentado por SEARLE (1971) do r -ésimo cumulante.

$$K_r[X'AX] = 2^{r-1} (r-1)! [\text{Tr}(AV)^r + r\mu' A(VA)^{r-1}\mu] \quad 14.251$$

Chega-se em

$$\begin{aligned} \text{Var}[y'(A_t + A_{t'})y] &= \text{Var}[y'A_t y] + \text{Var}(y'A_{t'} y) \\ &\quad - 2\text{Cov}[y'A_t y; y'A_{t'} y] \end{aligned}$$

Ao usar-se o resultado de 14.251 tem-se que

$$\text{Cov}(y'A_t y; y'A_{t'} y) = 2 \text{Tr}(A_t V A_{t'} V) + 4\mu' A_t V A_{t'} \mu \quad 14.261$$

mas pelo fato de que

$$\text{Tr}(AZ' BZ(C)) = (\text{VEC } Z)' (A' C' \otimes B) \text{VEC } Z \quad 14.271$$

e ao substituir-se 14.271 em 14.261 com $C = I$ obtém-se que

$$\begin{aligned} \text{Cov}(y'A_t y; y'A_{t'} y) &= 2(\text{VEC } V)' (A_t \otimes A_{t'}) \text{VEC } V + \\ &\quad + 4\mu' A_t V A_{t'} \mu \end{aligned} \quad 14.281$$

e pelo fato de que

$$A_t V = A_t [\lambda_0 A_0 + \lambda_1 A_1 + \dots + \lambda_t A_t + \lambda_u A_u] = \lambda_t A_t$$

tem-se finalmente que

$$\text{Cov}(y'A_t y; y'A_{t'} y) = 2(\text{VEC } V)' (A_t \otimes A_{t'}) \text{VEC } V + 4\mu' \lambda_t A_t \mu$$

no entanto

$$E(y'A_t y; y'A_{t'} y) = (\text{Tr } A_t V)(\text{Tr } A_{t'} V) + 2\text{Tr } A_t V A_{t'} V.$$

A vantagem de se usar o operador VEC em vez do traço é a facilidade resultante nos cálculos computacionais.

Seja agora o modelo 13.431, neste caso considerado não

balanceado, ou seja $k = 1, 2, \dots, n_{ij}$, então a decomposição de [4.18] fica:

$$\begin{aligned}
 y_{ijk} = & \left[y_{ijk} - \frac{1}{n_{i.j}} y_{ij.} \right] + \left[\frac{1}{n_{i.}} y_{i..} - \frac{1}{N} y_{...} \right] + \\
 & + \left[\frac{1}{n_{.j}} y_{.j.} - \frac{1}{N} y_{...} \right] + \left[\frac{1}{n_{i.j}} y_{ij.} - \frac{1}{n_{i.}} y_{i..} - \right. \\
 & \left. - \frac{1}{n_{.j}} y_{.j.} + \frac{1}{N} y_{...} \right] + \frac{1}{N} y_{...}
 \end{aligned} \quad [4.29]$$

onde

$$n_{i.} = \sum_j n_{ij} \quad n_{.j} = \sum_i n_{ij}$$

$$N = \sum_i n_{i.} = \sum_j n_{.j} = \sum_{ij} n_{ij}$$

Neste caso pela mesma relação apresentada na observação [4.1], nota-se por exemplo, que A_1 é obtida partindo-se do fato

$$\frac{1}{n_{i.}} y_{i..} - \frac{1}{N} y_{...}$$

tem-se que

$$A_1 = \bigoplus_{i=1}^I \frac{1}{n_{i.}} J_{n_{i.}} - \frac{1}{N} J_N$$

ou explicitamente

$$A_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{n_{1.}} J_{n_{1.}} & \phi & \phi \\ & \frac{1}{n_{2.}} J_{n_{2.}} & \phi \\ & & \vdots \\ & & \frac{1}{n_{I.}} J_{n_{I.}} \end{bmatrix} - \frac{1}{N} \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}_N$$

onde

$$J_{n_{i.}} = \frac{1}{n_{i.}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 1 & & 1 \end{bmatrix}_{n_{i.}}$$

escrevendo-se assim V na forma expressa em [4.16], como neste caso a estrutura de dados é não balanceado tem-se

$$E(y' A_0 y) = E(Q_0) = (N - S) \sigma_e^2 \quad [4.30]$$

$$\begin{aligned} E(y' A_1 y) = E(Q_1) &= (N - K_1) \sigma_\alpha^2 + (K_3 - K_2) \sigma_\beta^2 + \\ &+ (K_3 - K_{23}) \sigma_{\alpha\beta}^2 + (I - 1) \sigma_e^2 \end{aligned} \quad [4.31]$$

$$\begin{aligned} E(y' A_2 y) = E(Q_2) &= (K_4 - K_1) \sigma_\alpha^2 + (N - K_2) \sigma_\beta^2 + \\ &+ (K_4 - K_{23}) \sigma_{\alpha\beta}^2 + (J - 1) \sigma_e^2 \end{aligned} \quad [4.32]$$

$$\begin{aligned} E(y' A_3 y) = E(Q_3) &= (K_1 - K_4) \sigma_\alpha^2 + (K_2 - K_3) \sigma_\beta^2 + \\ &+ (N + K_{23} - K_3 - K_4) \sigma_{\alpha\beta}^2 + (S - I - J + 1) \sigma_e^2 \end{aligned} \quad [4.33]$$

$$E[y' A_\mu y] = E(Q_\mu) = N\mu^2 + K_1 \sigma_\alpha^2 + K_2 \sigma_\beta^2 + K_{23} \sigma_{\alpha\beta}^2 + \sigma_e^2 \quad [4.34]$$

onde

$$K_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^I n_{i.}^2; \quad K_2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^J n_{.j}^2;$$

$$K_3 = \sum_i \left[\sum_j n_{ij}^2 / n_{i.} \right]; \quad K_4 = \sum_j \left[\sum_i n_{ij}^2 / n_{.j} \right]$$

S: número de caselas não vazias.

De onde são obtidas as estimativas das componentes da variância:

$$\hat{\sigma}_e^2 = \hat{\lambda}_0$$

onde

$$\hat{\lambda}_0 = \frac{y' A_0 y}{r_0} = \frac{y' A_0 y}{N - S}$$

Entretanto as estimativas dos outros componentes são:

$$\hat{\Theta}_P = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_\alpha^2 \\ \hat{\sigma}_\beta^2 \\ \hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 \end{bmatrix} = T_P^{-1} \hat{\lambda}_P$$

$$= \begin{bmatrix} N-K_1 & K_3-K_2 & K_3-K_{23} \\ K_4-K_1 & N-K_2 & K_4-K_{23} \\ K_1-K_4 & K_2-K_3 & N-K_3-K_4+K_{23} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} y' \left[A_1 - \frac{I-1}{N-S} A_0 \right] y \\ y' \left[A_2 - \frac{J-1}{N-S} A_0 \right] y \\ y' \left[A_3 - \frac{S-I-J+1}{N-S} A_0 \right] y \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

4.3. Cálculo Assintótico dos Componentes da Variância

No caso de ter-se a estrutura de dados obtidos a partir do tamanho da amostra "grande" ou, ainda quando não for possível a

decomposição linear de V da forma [4.16], torna-se necessário o uso de processos iterativos na estimação dos parâmetros de interesse. Muitos procedimentos têm sido desenvolvidos para se obter estes resultados. Entre os algoritmos mais conhecidos estão:

- i) O de Newton-Raphson, que é utilizado na obtenção de pontos de máximo de uma função na iteração $(i + 1)$;
- ii) o algoritmo a partir dos Scores de Fisher, que está baseado nas esperanças das primeiras derivadas. Este algoritmo tem melhor comportamento que o de Newton-Raphson nos pontos mais distantes das estimativas procuradas, no entanto, o algoritmo de Newton-Raphson tende-se a comportar melhor nas vizinhanças do ponto de máximo;
- iii) Outro algoritmo usado amplamente nas estimativas de máxima verossimilhança quando o conjunto de dados é incompleto ou não observável é o algoritmo EM, esse algoritmo consiste basicamente em dois passos ou passo E (esperança) e passo M (maximização).

Neste trabalho são apresentados apenas os dois primeiros algoritmos, os quais estão baseados nas estimativas de máxima verossimilhança.

Seja o logaritmo da função de verossimilhança apresentado em [4.5] onde

$$\underline{\beta} = [\beta_1, \dots, \beta_k] \quad \text{e} \quad \underline{\sigma^2} = [\sigma_1^2, \dots, \sigma_s^2, \sigma_e^2]$$

já foram obtidas na seção 4.2 os seguintes resultados

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \beta} = - \frac{1}{2\sigma^2} \left[-2X' V^{-1} y + 2X' V^{-1} X \beta \right] = s_{\beta}$$

então

$$\frac{\partial^2 \lambda}{\partial^2 \beta} = - (X' V^{-1} X) = [H_{\beta\beta}] \quad [4.36]$$

e o seu valor esperado

$$E[H_{\beta\beta}] = - (X' V^{-1} X)$$

assim

$$I_{\beta\beta} = - E[H_{\beta\beta}] = (X' V^{-1} X) \quad [4.37]$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda}{\partial \sigma_i^2} &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[V^{-1} V V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} \right] + \\ &+ \frac{1}{2} \text{Tr} \left[V^{-1} (y - X\beta)(y - X\beta)' V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[V^{-1} (y - X\beta)(y - X\beta)' V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} \right] \end{aligned}$$

e dos resultados obtidos em SEARLE (1982), JENRICH & SCHLUCHT (1986) e, HARTLEY & VAUGHN (1972), segue-se que

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \sigma_i^2} = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[V^{-1} (y - X\beta)(y - X\beta)' V^{-1} Z_i Z_i' \right] = S\sigma^2 \quad [4.38]$$

no entanto a segunda derivada e o seu valor esperado ficam

$$\begin{aligned} [H_{\sigma\sigma}] &= \frac{\partial^2 \lambda}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\left[V^{-1} (y - X\beta)(y - X\beta)' - V \right] V^{-1} \frac{\partial^2 V}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} \right] - \\ &- \frac{1}{2} \text{Tr} \left[V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} V^{-1} 2(y - X\beta)(y - X\beta)' - V \right] V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_j^2} \end{aligned} \quad [4.39]$$

$$\begin{aligned}
 E[H_{\sigma\sigma}] &= -\frac{1}{2} \text{Tr } V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_j^2} \\
 &= -\frac{1}{2} \text{Tr } V^{-1} Z_i Z_i' V^{-1} Z_j Z_j'
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

$$I_{\sigma\sigma} = -E[H_{\sigma\sigma}] = \frac{1}{2} \text{Tr } V^{-1} Z_i Z_i' V^{-1} Z_j Z_j' \tag{4.41}$$

agora

$$\begin{aligned}
 [H_{\beta\sigma}] &= \frac{\partial^2 \lambda}{\partial \beta_j \partial \sigma_i^2} = X' V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \sigma_i^2} V^{-1} (y - X\beta) \\
 &= -X \frac{\partial V^{-1}}{\partial \sigma_j^2} (y - X\beta)
 \end{aligned} \tag{4.42}$$

$$E[H_{\beta\sigma}] = 0,$$

observa-se, então que a matriz Hessiana,

$$H = \begin{bmatrix} H_{\beta\beta} & H_{\beta\sigma} \\ H_{\sigma\beta} & H_{\sigma\sigma} \end{bmatrix}$$

é no caso em questão, positiva definida.

Expandindo-a a seguir, através da série de Taylor a função Logverossimilhança

$$\lambda(y, \beta, \sigma) = \lambda(y, \delta) =$$

$$= \lambda(\delta^{(n)}) + s(\delta^{(n)})' (\delta - \delta^{(n)}) +$$

$$+ \frac{1}{2} (\delta - \delta^{(n)})' H(\delta^{(n)}) (\delta - \delta^{(n)}) +$$

$$+ O \left[||\delta - \delta^{(n)}|| \right] \tag{4.43}$$

onde $\delta = \begin{bmatrix} \beta \\ \sigma \end{bmatrix}$ e $\bullet$ é a ordem de convergência da forma $a_n = O(p_n)$

se

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{p_n} = 0 \quad (a_n \text{ é o "pequena" de } p_n)$$

Nota-se que em 14.431 se fez uma expansão de Taylor até a segunda ordem. Como se está interessado na solução de δ até a $(i + 1)$ iteração, então em 14.431 tem-se que

$$\delta^{(i+1)} = \delta^{(i)} - H^{-1}(\delta^{(i)}) s(\delta^{(i)}) \quad 14.441$$

ou de forma equivalente

$$\begin{bmatrix} \beta^{(i+1)} \\ \sigma^{2(i+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta^{(i)} \\ \sigma^{2(i)} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} H_{\beta\beta}^{(i)} & H_{\beta\sigma}^{(i)} \\ H_{\sigma\beta}^{(i)} & H_{\sigma\sigma}^{(i)} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} S_{\beta}^{(i)} \\ S_{\sigma^2}^{(i)} \end{bmatrix} \quad 14.451$$

onde H^{-1} pode ser obtida a partir dos resultados de HENDERSON & SEARLE (1981), levando-se em consideração o seguinte fato:

$$A = \begin{bmatrix} E & F \\ G & T \end{bmatrix}$$

então

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} E^{-1} + E^{-1} F S^{-1} G E^{-1} & -E^{-1} F S^{-1} \\ -S^{-1} G E^{-1} & S^{-1} \end{bmatrix}$$

onde

$$S = T - G E^{-1} F$$

O resultado obtido em 14.451 fornece a solução dos estimadores pelo método de Newton-Raphson.

No entanto quando se trabalha com os resultados obtidos

em [4.37] e [4.41] então

$$\begin{bmatrix} \beta^{(i+1)} \\ \sigma^{2(i+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta^{(i)} + I_{\beta\beta}^{-1(i)} s_{\beta}^{(i)} \\ \sigma^{2(i)} + I_{\sigma\sigma}^{-1(i)} s_{\sigma}^{(i)} \end{bmatrix} \quad [4.46]$$

Resultado conhecido como "scores" de Fisher. O critério para se iniciar o procedimento é por exemplo estimar β considerando que $\hat{V} = QMR$ Resíduo para o qual se usam os mínimos quadrados ordinários, e prosseguir o procedimento até que

- i) $||\delta^{(i+1)} - \delta^{(i)}|| < E$
- ii) $||\lambda(\delta^{(i+1)}) - \lambda(\delta^{(i)})|| < E$ com $\lambda = \lambda_n(b)$

onde E é a precisão desejada.

Uma vez obtidas as estimativas dos componentes de variância, elas podem ser usadas sem perda de generalidade, na determinação dos BLUE e BLUP como na forma estudada no capítulo 3.

Observação: Uma condição necessária para que tanto o algoritmo de Newton-Raphson como o "scoring" converjam é que as matrizes H e $-I$ em cada uma das iterações, sejam não singulares e positivas não definidas. Nestas condições os dois processos convergem rapidamente para as estimativas procuradas.

5. UM EXEMPLO ILUSTRATIVO

Com o propósito de ilustrar alguns dos resultados desenvolvidos nas seções anteriores, neste capítulo apresenta-se um exemplo de um modelo misto com dois fatores sem interação

Seja o seguinte arranjo:

		Fator β		
		β_1	β_2	Total
Fator α	α_1	.	.	$n_{1.} = 5$
		.	.	
			.	
	α_2	.	.	$n_{2.} = 4$
			.	
			.	
Total		$n_{.1} = 3$	$n_{.2} = 6$	$N = 9$

é claro que
$$N = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 n_{ij} = 9$$

o modelo que caracteriza o arranjo anterior sem levar em consideração a média geral é

$$y_{ijk} = \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk} \quad (5.11)$$

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

com α aleatório e β fixo satisfazendo:

$$i) \quad E(\alpha_i) = 0 ; E(\alpha_i^2) = \sigma_\alpha^2 \quad i = 1, 2$$

$$ii) \quad E(\varepsilon_{ijk}) = 0 ; E(\varepsilon_{ijk}^2) = \sigma^2$$

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

Observa-se então que o modelo (5.11) pode se escrever na forma (3.11) fazendo

$${}_1Y'_\phi = [y_{111}; y_{112}; y_{121}; y_{122}; y_{123}; y_{211}; y_{221}; y_{222}; y_{223}]$$

$${}_2X'_\phi = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$${}_1\beta'_2 = [\beta_1; \beta_2]$$

$${}_2Z'_\phi = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$${}_1U'_2 = [\alpha_1; \alpha_2]$$

De acordo com os resultados obtidos em (3.41) e (3.46) tem-se que

$$\text{Var } (y) = \sum_{i=0}^1 Z_i Z_i' \sigma_i^2 = Z_0 Z_0' \sigma_0^2 + Z_1 Z_1' \sigma_1^2 = V \quad (5.2)$$

onde $\sigma_0^2 = \sigma^2$; $\sigma_1^2 = \sigma_\alpha^2$

$$Z_0 Z_0' = I_\alpha \quad \text{e} \quad Z_1 Z_1' = \sum_{j=1}^2 \Phi J_{n_{i_j}}$$

e por [3.41] a estrutura de V obtida em [5.2] pode ser escrita na forma

$$V = \sigma^2 I_\rho + \sigma_\alpha^2 \sum_{i=1}^2 \Phi J_{n_{i_j}}$$

com a qual, e, ainda considerando o resultado obtido em [3.48], segue-se que

$$V^{-1} = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{\sigma^2 (\sigma^2 + n_{i_j} \sigma_\alpha^2)} (\sigma^2 I_{n_{i_j}} + D(n_{i_j} \sigma_\alpha^2) - \sigma_\alpha^2 J_{n_{i_j}}) \quad (5.3)$$

fazendo-se em [5.3]

$$k_1 = \sigma^2 (\sigma^2 + n_{1.} \sigma_\alpha^2) = \sigma^2 (\sigma^2 + 5 \sigma_\alpha^2)$$

e $k_2 = \sigma^2 (\sigma^2 + n_{2.} \sigma_\alpha^2) = \sigma^2 (\sigma^2 + 4 \sigma_\alpha^2)$

então [5.3] pode ser escrito em forma explícita como

$$V^{-1} = \begin{bmatrix} V_1^{-1} & 0 \\ 0 & V_2^{-1} \end{bmatrix}$$

onde

$$V_1^{-1} = \frac{1}{k_1} \begin{bmatrix} \sigma^2 + 4\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 \\ & \sigma^2 + 4\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 \\ & & \sigma^2 + 4\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 \\ & & & \sigma^2 + 4\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 \\ & & & & \sigma^2 + 4\sigma_\alpha^2 \end{bmatrix}$$

SIMÉTRICA

e

$$V_2^{-1} = \frac{1}{k_2} \begin{bmatrix} \sigma^2 + 3\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 \\ & \sigma^2 + 3\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 \\ & & \sigma^2 + 3\sigma_\alpha^2 & -\sigma_\alpha^2 \\ & & & \sigma^2 + 3\sigma_\alpha^2 \end{bmatrix}$$

SIMÉTRICA

Como o interesse inicial neste trabalho foi a estimação no modelo

[3.11] de β e μ ; então agora no contexto do modelo [5.1] tem-se de

[3.11] que

$$\beta^0 = (X'V^{-1}X)^{-1} X'V^{-1}y$$

neste caso

$$X'V^{-1}X = \frac{1}{k_1 k_2} \begin{bmatrix} (\sigma^2 + 3\sigma_\alpha^2)(2k_2 + k_1) & -3\sigma_\alpha^2(2k_2 + k_1) \\ -3\sigma_\alpha^2(2k_2 + k_1) & 3\sigma_\alpha^2(k_2 + k_1) + 3\sigma_\alpha^2(2k_2 + k_1) \end{bmatrix}$$

$$XV^{-1}y = \begin{bmatrix} (\sigma^2 + 3\sigma_\alpha^2) \left(\frac{y_{11.}}{k_1} + \frac{y_{21.}}{k_2} \right) & -\sigma_\alpha^2 \left(\frac{2y_{12.}}{k_1} + \frac{y_{22.}}{k_2} \right) \\ \frac{\sigma^2 + 2\sigma_\alpha^2}{k_1} y_{12.} + \frac{\sigma^2 + 4\sigma_\alpha^2}{k_2} y_{22.} & -3\sigma_\alpha^2 \left(\frac{y_{11.}}{k_1} + \frac{y_{21.}}{k_2} \right) \end{bmatrix} \quad [5.4]$$

$$\text{e, o, } |X'V^{-1}X| = \frac{k_1 k_2}{3\sigma^2(2k_2+k_1) \{ \sigma^2(k_1+k_2) + \sigma_\alpha^2(5k_2+4k_1) \}}$$

(onde $| \quad |$ é o determinante)

Deste modo

$$(X'V^{-1}X)^{-1} = \frac{1}{|X'V^{-1}X|} \begin{bmatrix} 3\sigma^2(k_2+k_1)+3\sigma_\alpha^2(2k_2+k_1) & 3\sigma_\alpha^2(2k_2+k_1) \\ 3\sigma_\alpha^2(2k_2+k_1) & (\sigma^2+3\sigma_\alpha^2)(2k_2+k_1) \end{bmatrix} \quad [5.5]$$

Do produto das matrizes [5.5] e [5.4] obtém-se a estimativa para β , ou seja,

$$\hat{\beta}' = [\hat{\beta}'_1 ; \hat{\beta}'_2]$$

Para se obter a estimativa de U, na estrutura do modelo [3.11], tem-se de [3.18] que

$$K'V^{-1} = \bigoplus_{i=1}^2 D \left[\frac{\sigma_\alpha^2}{\sigma^2 + n_i \sigma_\alpha^2} \right] \quad [5.6]$$

e então

$$\hat{\mu} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_\alpha^2}{\sigma^2 + 4\sigma_\alpha^2} (y_{.1.} - X \beta^0) \\ \frac{\sigma_\alpha^2}{\sigma^2 + 4\sigma_\alpha^2} (y_{.2.} - X \beta^0) \end{bmatrix} \quad [5.7]$$

É claro, neste desenvolvimento, que tanto $\hat{\beta}$ como $\hat{\mu}$ dependem linearmente dos componentes aleatórios das variâncias σ^2 e σ_α^2 , daí a necessidade de se obter a estimação delas. Assim, pela decomposição ortogonal

$$y_{ijk} = \left[\frac{1}{n_{i.}} y_{i..} - \frac{1}{n_{ij}} y_{ij.} \right] + \left[\frac{1}{n_{.j.}} - \frac{1}{n_{ij}} y_{ij.} \right] + \\ + \left[y_{ijk} - \frac{1}{n_{i.}} y_{i..} - \frac{1}{n_{.j.}} y_{.j.} + \frac{1}{n_{ij}} y_{ij.} \right] + \frac{1}{n_{ijk}} y_{ijk}$$

onde $n_{i.} = \sum_{j=1}^2 n_{ij}$; $n_{.j.} = \sum_i n_{ij}$

e $N = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 n_{ij}$

dos resultados obtidos em [3.39], [3.40], [3.42], [3.44], [4.15] e [4.16] para dados não balanceados,

$$V = \lambda_0 A_0 + \lambda_1 A_1$$

onde para se obter as matrizes A_0 e A_1 , levando em consideração a decomposição ortogonal:

$$\frac{1}{n_{i.}} y_{i.} \Rightarrow \begin{bmatrix} \frac{1}{5} J_5 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} J_4 \end{bmatrix} = K$$

$$\frac{1}{n_{ij}} y_{ij} \Rightarrow \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} J_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} J_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{3} J_3 \end{bmatrix} = G$$

ou na sua forma explícita

$$\frac{1}{n_{ij}} y_{ij} \Rightarrow \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \end{bmatrix} = H$$

de tal modo que

$$A_0 = [I_n - F - H + G]$$

$$e \quad A_1 = \sum_{i=1}^z \Phi \frac{1}{n_i} J_{n_i} - \frac{1}{9} J_p$$

ou na sua forma explícita

$$A_1 = \begin{bmatrix} \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & \frac{4}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} & \frac{5}{36} \end{bmatrix}$$

E dos resultados obtidos em [4.22] e [4.31] segue-se que:

$$\hat{\lambda}_o = \frac{y' A_o y}{\text{ran}(A_o)}$$

onde

$$\begin{aligned} y' A_o y &= \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^{n_{ij}} y_{ijk}^2 + \sum_i \sum_j \frac{1}{n_{ij}} y_{ij.}^2 - \\ &- \left[\frac{1}{3} y_{.1.}^2 + \frac{1}{6} y_{.2.}^2 \right] - \left[\frac{1}{5} y_{1..}^2 + \frac{1}{4} y_{2..}^2 \right] \end{aligned}$$

e $\text{ran}(A_o)$, é o rank da matriz A_o ou também $\text{ran}(A_o) = N - S$, com S : número de caselas não vazias.

Desse modo, e pelo fato do resultado obtido em [4.30]

onde

$$E(y' A_o y) = (N - S) \sigma^2$$

segue-se que

$$\hat{\lambda}_o = \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{5} \left[\sum_i^2 \sum_j^2 \sum_k^{n_{ij}} y_{ijk}^2 + \sum_i^2 \sum_j^2 \frac{1}{n_{ij}} y_{ij.}^2 - \right. \\ \left. - \left[\frac{1}{3} y_{.1.}^2 + \frac{1}{6} y_{.2.}^2 \right] - \left[\frac{1}{5} y_{1..}^2 + \frac{1}{4} y_{2..}^2 \right] \right]$$

de forma semelhante

$$y'A_1 y = \frac{n_{2.}}{N n_{1.}} y_{1..}^2 + \frac{n_{1.}}{N n_{2.}} y_{2..}^2 \\ = \frac{4}{45} y_{1..}^2 + \frac{5}{36} y_{2..}^2$$

e por [4.31]

$$E(y'A_1 y) = (N - k_1) \sigma_\alpha^2 + \sigma^2$$

$$\text{com } k_1 = \frac{1}{N} \sum_i n_{i.}^2 = \frac{41}{9}$$

e assim

$$E(y'A_1 y) = \frac{40}{9} \sigma_\alpha^2 + \sigma^2$$

e por [4.35] segue-se que

$$\hat{\sigma}_\alpha^2 = \frac{9}{40} [\hat{\lambda}_1 - \hat{\lambda}_o]$$

onde

$$\hat{\lambda}_1 = \frac{y' A_1 y}{r(A_1)} = \frac{1}{2} \left[\frac{4}{45} y_{1..}^2 + \frac{5}{36} y_{2..}^2 \right]$$

desse modo

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_\alpha^2 = & \frac{9}{40} \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{4}{45} y_{1..}^2 + \frac{5}{36} y_{2..}^2 \right] - \right. \\ & - \frac{1}{5} \left[\sum_i^2 \sum_j^2 \sum_k^{n_{ij}} y_{ijk}^2 + \sum_i \sum_j \frac{1}{n_{ij.}} y_{ij.}^2 \right] \\ & \left. - \left[\frac{1}{5} y_{1..}^2 + \frac{1}{4} y_{2..}^2 \right] - \left[\frac{1}{3} y_{.1.}^2 + \frac{1}{6} y_{.2.}^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

Uma vez obtidas as estimativas dos componentes, pode-se obter combinações lineares como em [3.33] ; essas combinações dependem da natureza do problema e do interesse do pesquisador.

6. CONCLUSÕES

Nos modelos de efeitos mistos, o uso dos mínimos quadrados ponderados facilitou a estimação dos preditores e das funções lineares associadas aos efeitos aleatórios e fixos do modelo.

O uso da função de Lagrange, na equação [3.23] sujeita às condições [3.22] facilitou a caracterização dos preditores os quais como observa-se em [3.32], dependem da forma linear da estimação dos efeitos fixos e aleatórios do modelo.

O método apresentado para estruturar a matriz dos componentes de variância, assim como o cálculo da sua inversa, fornece uma ferramenta simples na obtenção dos preditores lineares.

Observou-se que quando a estrutura dos dados for balanceada, e a matriz associada aos efeitos fixos for de posto coluna completo, então o BLUE não vai depender do componente aleatório do modelo.

Ao estabelecer uma relação entre os sub-índices do modelo e as partições ortogonais em termos dos produtos de Kronecker de matrizes identidades de ordem s (I_s) quadradas, de elementos unitários de ordem s (J_s), simplificou-se a construção das formas quadráticas, e com isto, a construção das funções de

verossimilhança para se obter, desse modo, a estimação dos componentes de variância.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDERSON, R. L. & EANCROFT, T. A. Statistical theory in research, McGraw Hill, New York, 1952. 420 pp.
- CORBELL, R. R. & SEARLE, S. R. Restricted maximum likelihood (REML) estimation of variance components in the mixed model. *Technometrics*. 1 vol. 18, n° 1, 435-440. 1976.
- DODGE, Y. *Analysis of Experiments with Missing Data*. John Wiley, New York. 1985.
- GOLDSTEIN, H. Multilives mixed linear model analysis using iterative generalized least squares. *Biometrika*. 44: 350-365. 1986.
- GOODNIGHT, J. H. & SPEED, F. M. Computing expected mean squares. *Biometrics*, 36: 123-125. 1980.
- HARTLEY, H. O. Expectation, Variances and cavariances of ANOVA mean square by syntesis *Biometrics*. 23: 103-114. 1967.

- HARTLEY, H. O. & RAO, J. N. K. Maximum likelihood estimation for the mixed analyses of variance model. *Biometrika*. 54: 93-108. 1967.
- HARTLEY, H. O. & VAUGHN, W. K. A. A computer program for the mixed analysis of variance model based on maximum likelihood. Ames of Iowa. pp. 129-144. 1972.
- HARVEY, W. R. Computing procedures for a generalized least-squares analysis. Program colorado state university. pp. 50. 1964.
- HARVEY, W. R. Estimation of variance and covariances components in the mixed models. *Biometrics*. 1970. 32: 445-460.
- HARVEY, W. R. Least squares analysis of data. United states department of agricultural; *Agricultural research*. 90 pp. 1979.
- HEMMERLE, W. J. & HARTLEY, H. O. Computing maximum likelihood estimate for the mixed A.O.V. Model using the W. Transformation. *Technometrics*. 4:15, n° 4, 819-831. 1973.
- HENDERSON, C. R. Estimation of variance and covariance components. *Biometrics*. 49: 226-257. 1953.

- HENDERSON, C. R. Simulation to examine distributions of estimators of variances and ratios of variances. *J. Dairy Sci.* 61: 267-273. 1977.
- HENDERSON, C. R. J.r. Analysis of covariance in the mixed model high-level non-homogeneous, and random regressions. *Biometrics*, 38: 623-649. 1982.
- HENDERSON, C. R. Applications of linear models in animal breeding. University of Guelph. 1984a.
- HENDERSON, C. R. Estimation of variances and covariances under multiple trait models. *J. Dairy Sci.*, 67: 1581-1589. 1984b.
- HENDERSON, H. V. & SEARLE, S. R. Vec and Vech operators for matrices, with some uses in jacobians and multivariate Statistics. *Can. J. Stat.*, 7: 65-81. 1979.
- HENDERSON, H. V. & SEARLE, S. R. On deriving the inverse of a some of matrices. *Siam Review*, 53-60. 1981.
- HENDERSON, C. R.; SEARLE, S. R. & SCHOEFFER, L. R. The invariance and calculation of method 2 for estimating variance components. *Biometrics*, 30: 583-588. 1974.
- HOCKING, R. R. The analysis of linear models. Brooks/Cole publishing company. 1985.

- IEMMA, A. F. Modelos lineares - uma introdução para profissionais na pesquisa agropecuária. 2º seagro e 32^a RBRAS. Biometria, 1987.
- IEMMA, A. F. Algebra de Matrizes, um texto para profissionais de ciências aplicadas ESAIQ/USP. 1985.
- IEMMA, A. F. Testes de Hipóteses nos Delineamentos Desbalanceados F.S.A. Gembloux Belgique. 1991.
- IEMMA, A. F. Matrices Inversas Généralisées et applications Aux Modèles Linéaires. Notes stat Inform. Gembloux Belgique. 1992.
- JENRICH, R. I. & SCHLUCHTER, M. D. Unbalanced repeated measures models with structured covariance matrices. Biometrics, 42: 805-820. 1986.
- LA MOTTE, L. R. Quadratic estimation of variance components. Biometrics. 29: 311-330. 1973.
- MENDEZ, I. Estudio de los modelos mixtos. Comunicaciones Técnicas UNAM, México. 1978.
- PATTERSON, H. D. & THOMPSON, R. Recovery of interblock information when block sizes are unequal. Biometrika, 36: 538-545. 1971.

RAO, C. R. Estimation of variance and covariance components.
Journal of Multivariate Analysis, 42: 257-275. 1971.

RAO, C. R. Estimation of variance and covariance components in
 linear models. **JASA**, 69: 112-115. 1972.

SCHEFFÉ, H. **The analysis of variance**, John Wiley, New York. 1959.

SEARLE, S. R. **Linear Models**, John Wiley, New York. 1971.

SEARLE, S. R. **Matrix Algebra Useful for Statistics**, John Wiley,
 New York. 1982.

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

SEARLE, S. R. Mixed models and unbalanced data. Were from where
 at and where to? **Commun. Statist. Theory Meth**, 17(4): 935-968.
 1980.

SEARLE, S. R. & HENDERSON, H. V. Dispersion Matrices for
 variance components models. **JASA**, 34: 465-470. 1979.

SPEED, F. M. & HOCKING, R. R. Computation of expectations,
 variances and covariances of Anova mean square. **Biometrics**.
30: 157-160. 1974.

SAS user's Guide: Statistics, 1982. Edition, SAS Institute Inc.
Box 800, Cary, North Carolina, 27511.

APÊNDICE

PROGRAMA EM MATRIX/IML DO SAS

/* No seguinte programa exemplifica-se a partir do modelo
[3.43] e a extensão é imediata.*/

```

001 STATRT DISE;
002 RESET FW=5 ;
003 NC=NCOL(X1); /* numero de colunas da parte fixa do
                  modelo*/
004 NF=NROW(X1); /* numero de linhas da parte fixa do
                  modelo*/
005 K={n}; /* numero de observações por casela*/
006 N=NF*NC*K; /* Total de unidades experimentais */
007 IN=I(N);
008 JN=J(N);
009 II=I(NC);
010 IJ=I(NF); /*Nas instruções 7-14 obtém-se as matrizes
                idênticas e quadradas de orden um*/
011 IK=I(K);
012 JI=J(NC);
013 JJ=J(NF);
014 JK=J(K);
015 IIJ=II@IJ@JK;
016 IJI=II@JJ@IK;
017 JII=JI@IJ@IK;

```

```

018 IJJ=II@JJ@JK;
019 JIJ=JI@IJ@JK;
020 JJI=JI@JJ@IK;
021 AM=JN/N;
022 AN=IJJ/(NF*K);
023 AP=JIJ/(NC*K);
024 AQ=IIJ/K;
025 FREE=II IJ IK JI JJ JK;
026 /* DE1=IN || IIJ || IIJ || JII;
027 FREE IJI JII;
028 DE2=IJJ || JIJ;
029 DE3=JJI || JN;
030 FREE JJI JN;
031 DELTA= DE1 || DE2 || DE3; /*Com este resultado obtem-se
                                a equação 3.39*/

032 FREE DE1 DE2 DE3 ;
033 AO= IN-AQ;
034 A1= AN-AM;
035 A2= AP-AM; /*Partições ortogonais apresen-
036 A3= AQ-AN-AP+AM; tadas na equação 4.15*/
037 /* A3P= AQ-AN-A2; */
038 TAO=ROOT(AO);
039 TA1=ROOT(A1); /*Calcula os traços das equa-
040 TA2=ROOT(A2); ções 4.20 e 4.21*/
041 TA3=ROOT(A3);
042 /* A11=A1-TA1*TA1; */
043 DAO=TAO[LOC(VECDIAG(TAO)>0),];
044 FREE TAO;
045 DA1=TA1[LOC(VECDIAG(TA1)>0),];
046 FREE TA1;
047 DA2=TA2[LOC(VECDIAG(TA2)>0),];
048 FREE TA2;
049 DA3=TA3[LOC(VECDIAG(TA3)>0),];
050 FREE TA3;
051 RAO= NROW(DAO);

```

```

052 RA1= NROW(DA1);      /* Calcula os postos das matrizes
053 RA2= NROW(DA2);      apresentadas na equação 4.16*/
054 RA3= NROW(DA3);
055 FREE DA0 DA1 DA2 DA3;
056 TI= {1 0, 1 0};      /* Neste caso supõe-se que n=2*/
057 /*TI(2,2)=NC ;*/
058 TI[{2},{2}]=NC;
059 TJ={1 0, 1 1};
060 TJ[{2},{2}]=NF;
061 /*TJ(2,2)=NF ;8/
062 TK={1 0, 1 0};
063 TK[{2},{2}]=K;
064 TP=TI@TJ@TK;          /*Calcula a matriz Tp */
065 ITP=INV(TP);           /*Calcula a inversa de Tp */
066 PRINT TP ITP;
067 FREE TI TJ TK;
068 /* EA0= EIGVAL(A0);
069 EA1= EIGVAL(A1);
070 EA2= EIGVAL(A2);
071 EA3= EIGVAL(A3);
072 CALL EIGEN(E0,M0,A0);
073 CALL EIGEN(E1,M1,A1);
074 CALL EIGEN(E2,M2,A2);
075 CALL EIGEN(E3,M3,A3); */
076 LO=(Y'*A0*Y)/RA0;
077 L1=(Y'*A1*Y)/RA1;      /*Resultados para obter-se as es-
078 L2=(Y'*A2*Y)/RA2;      timativas da equação 4.22 */
079 L3=(Y'*A3*Y)/RA3;
080 PRINT LO,L1,L2,L3;
081 FREE A0,A1,A2;
082 SCE=L0;
083 SCR=(L3-L0)/K;          /*Obtem-se as estimativas de
084 SC1=(L1-L3)/(NF*K);     componentes da variância*/
085 SC2=(L2-L3)/(NC*K);
086 PRINT SCE,SCR,SC1,SC2;
087 FREE LO L1 L2 L3;

```

```

088 IF SCR[{1},{1}]<0 THEN SCR={0};
089 IF SC1[{1},{1}]<0 THEN SC1={0};
090 IF SC2[{1},{1}]<0 THEN SC2={0};
091 CER={0};
092 TETA=SCE //SCR// CER// CER// CER// SC2//SC1//CER;
093 PRINT TETA;
094 /* TET*=CER//CER//SC2//CER//SC1//CER//SCR//SCE;*/
095 /* TETA P=TETA;*/
096 /* V=DELTA`*TETA;*/ /*Resultado da equação 3.41*/
097 /* DELTA= IN || IIJ || IJI || JII || IJJ || JIJ || JJI || JN;
099 PRINT DELTA; */
100 V=SCE#IN + SCR#IIJ + SC2#JIJ + SC1#IJJ;
101 PRINT V;
102 /*FREE DELTA; */
103 FREE IIJ IJJ JIJ;
104 FREE IJI JII JJI JN;
105 IV=INV(V); /*Calcula a matriz da equação 3.42*/
106 PRINT IV ;
107 LP=TP*TETA; /*Combinações lineares da equação 3.44*/
108 FREE TP TETA;
109 ILP=1/(LP);
110 IVV= ITP*ILP;
111 PRINT IVV,LP,ILP;
112 FREE LP, ILP,ITP;
113 /* IV=ITP*ILP*DELTA`;*/
114 R=SCE#IN;
115 D1=SC1#I(NC);
116 D2=SC2#I(NF);
117 D3=SCR#I(NF#NC);
118 D=BLOCK(D1,D2,D3);
119 FREE D1D2D3;
120 Z1={1 0 1 0 ,1 0 1 0, 1 0 0 1, 1 0 0 1, 0 1 1 0,
      0 1 1 0,0 1 0 1,0 1 0 1};
121 Z2=Z1[,1]#Z1[,3];
122 Z3=Z1[,1]#Z1[,4];

```

```

123 Z4=Z1[,2]#Z1[,3];
124 Z5=Z1[,2]#Z1[,4];
125 Z=Z1 || Z2 || Z3 || Z4 || Z5;
126 FREE Z1 Z2 Z3 Z4 Z5 ;
127 KZD=Z*D;
128 PRINT R Z D KZD;

129 B0=INF(X'*IV*X)*X'*IV*Y; /*Estimação de  $\beta$  na equação
                               3.11 */
130 PRINT B0;
131 U=KZD'*V'*(Y-X#B0);
132 FINISH;
133 RUN DISE;`

```