UMA EXTENSÃO DA TÉCNICA AID
EM MODELOS LINEARES GENERALIZADOS

MARIA CECILIA MENDES BARRETO
Estatístico

Orientadora: Profa. Dra. CLARICE GARCIA BORGES DEMÉTRIO

Tese apresentada à Escola Superior
de Agricultura "Luiz de Queiroz", da
Universidade de São Paulo, para ob-
tenção do título de Doutor em Agro-
nomia, Área de Concentração: Esta-
tística e Experimentação Agronômica.

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
maio de 1993

Barreto, Maria Cecilia Mendes

B273e Uma extensão da técnica AID em modelos lineares
generalizados. Piracicaba, 1993.

200p.

Tese - ESALQ

Bibliografia.

1. Estatística matemática 2. Modelo matemático
3. Técnica AID I. Escola Superior de Agricultura
Luiz de Queiroz, Piracicaba.

CDD 518.8

519.5

UMA EXTENSÃO DA TÉCNICA AID
EM MODELOS LINEARES GENERALIZADOS

MARIA CECILIA MENDES BARRETO

Aprovada em: 18.08.1993

Comissão julgadora:

Profa. Dra. Clarice Garcia Borges Demétrio	ESALQ/USP
Prof. Dr. Carlos Roberto Padovani	IB/UNESP
Prof. Dr. Euclides Braga Malheiros	FCA/UNESP
Prof. Dr. Décio Barbin	ESALQ/USP
Prof. Dr. Hilton Thadeu Zarete do Couto	ESALQ/USP

Profa. Dra. CLARICE GARCIA BORGES DEMÉTRIO
Orientadora

Aos queridos
Flávio Cesar, ~~me~~
Guilherme, Heitor, ~~me~~
Hermínio e Aparecida.

Agradeço:

- À Profa. Dra. Clarice Garcia Borges Demétrio pela orientação, dedicação e estímulo;
- e a todos aqueles que de alguma forma colaboraram para que este trabalho pudesse ser concluído.

SUMÁRIO

	Página
RESUMO	vii
SUMMARY	ix
1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Motivação	1
1.2. Objetivos	2
1.3. A organização deste trabalho	3
2. ALGUNS ALGORITMOS DE DIVISÃO DICOTÔMICA	
HIERÁRQUICA	5
2.1. Introdução	5
2.2. Partição dicotômica	6
2.3. Critérios de partição e regras de parada .	11
2.4. O método de agrupamento divisivo hierárquico	
.....	18
2.5. Critérios para a escolha do próximo grupo	22
2.5.1. Agrupamento para homogeneidade	
máxima	22
2.5.2. Técnica AID	23
2.5.3. Agrupamento de casos e variáveis ...	24
2.5.4. Teste de máxima verossimilhança ...	26
3. UMA INTRODUÇÃO AOS MODELOS LINEARES GENERALIZADOS	
.....	31
3.1. O ajuste de um modelo	31
3.2. Os componentes de um modelo linear	
generalizado	35
3.3. Inferências sobre o modelo linear	
generalizado	37

3.4. O algoritmo de estimação	43
4. UMA MEDIDA MAIS GERAL DE HOMOGENEIDADE DE GRUPOS E ALGUMAS CONSEQUÊNCIAS	45
4.1. Introdução	45
4.2. Uma extensão natural para a medida de homogeneidade de grupos	45
4.3. O caso normal	50
4.4. O caso Poisson	52
4.5. O caso binomial	54
4.6. A escolha da divisão mais promissora	63
5. UMA DEFINIÇÃO MAIS GERAL DAS ESTATÍSTICAS E UMA ADAPTAÇÃO AO ALGORITMO DE AGRUPAMENTO DIVISIVO HIERÁRQUICO	70
5.1. Introdução	70
5.2. A estatística R^2 generalizada	70
5.2.1. O caso normal	74
5.2.2. O caso Poisson	76
5.2.3. O caso binomial	78
5.3. O algoritmo de agrupamento hierárquico divisivo	83
5.4. Uma generalização do teste de SCOTT & KNOTT (1974)	85
6. ALGUNS RESULTADOS SOBRE A DISTRIBUIÇÃO DO MÁXIMO DA ESTATÍSTICA $\Delta(\hat{\mu}_d)$ NO CASO NORMAL	89
6.1. Introdução	89
6.2. O critério B sob a regra de divisão monotônica e mesmo número de observações por casela	89
6.2.1. Uma transformação conveniente	90
6.2.2. A distribuição de B_K	95
6.2.3. Aproximação por uma distribuição qui-quadrado	97

6.3. O critério B sob a regra de divisão monotônica e número diferente de observações por casela	98
6.3.1. A distribuição de B_K	100
6.3.2. Limites inferiores para a distribuição de B_K usando desigualdades	102
6.3.3. Limites para a distribuição de B_K usando a distribuição qui-quadrado	105
6.3.4. Algumas conclusões	107
6.4. O critério B sob a regra de divisão livre e mesmo número de observações por casela ...	108
6.4.1. A distribuição de B_K	109
6.4.2. Desigualdades que limitam a distribuição de B_K	111
6.4.3. A distribuição de qui-quadrado como uma aproximação da distribuição de B_K	112
6.5. O critério B sob a regra de divisão livre e número diferente de observações por casela	114
6.5.1. A função distribuição acumulada de B_K	116
6.5.2. Distribuições que limitam a distribuição de B_K	117
6.6. Resumo das aproximações	118
7. UM ESTUDO SOBRE O COMPORTAMENTO DA DISTRIBUIÇÃO DO MÁXIMO DA ESTATÍSTICA $\Delta(\hat{\pi}_d)$ NO CASO BINOMIAL	120
7.1. Introdução	120
7.2. Descrição do programa de simulação	121
7.3. A distribuição simulada de $\Delta(\hat{\pi}_d)$	122
7.3.1. O caso de 10 tratamentos	124
8.3.2. O caso de 6 tratamentos	126

8.3.3. O caso de 3 tratamentos	127
7.4. Conclusões	129
8. O algoritmo AID	136
8.1. Descrição do algoritmo AID	136
8.2. Algumas alternativas sobre critérios de seleção e regras de parada	140
8.3. Um procedimento para valores pequenos de B	142
8.4. Procedimentos para valores grandes do critério B	145
8.5. Uma boa aproximação para a distribuição de B_K	147
8.6. Uma modificação do algoritmo AID para dados da família exponencial	148
9. A UTILIZAÇÃO DO ALGORITMO AID EM DADOS BINOMIAIS	151
9.1. Uma análise de um experimento com fungicidas	152
9.2. Resultados da aplicação do algoritmo AID .	154
10. CONCLUSÕES	159
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	161
APÊNDICE 1: O PROGRAMA DE SIMULAÇÃO	166
APÊNDICE 2: RESULTADO DE UMA DAS SIMULAÇÕES	171
APÊNDICE 3: LISTAGENS DO PROGRAMA E DA EXECUÇÃO DO PROGRAMA DE ANÁLISE DE AGRUPAMENTOS EM LINGUAGEM GLIM	182

UMA EXTENSÃO DA TÉCNICA AID
EM MODELOS LINEARES GENERALIZADOS

Autora: MARIA CECILIA MENDES BARRETO

Orientadora: PROFA. DRA. CLARICE GARCIA BORGES DEMÉTRIO

RESUMO

Como as técnicas de agrupamentos de médias podem ser inadequadas na aplicação em dados com distribuição diferente da gaussiana, o algoritmo 'Automatic Interaction Detection' (AID) é estendido adotando-se como medida de homogeneidade de grupos uma estatística baseada na função desvio.

Esta última pode ser utilizada em uma grande classe de modelos, conhecida como modelos lineares generalizados, que abrange modelos do tipo regressão, análise de variância, modelos logito e probito, modelos log-lineares, entre outros.

Considerando um ensaio completamente ao acaso com K tratamentos e n_k repetições por tratamento, o máximo da medida de homogeneidade de grupos e uma extensão do coeficiente de determinação são obtidos em uma forma geral supondo que os dados tenham uma distribuição que pertença à família exponencial, e também no caso particular de distribuição normal, binomial e Poisson.

Supondo que os dados tenham distribuição binomial, a distribuição assintótica do máximo da medida

de homogeneidade de grupos é obtida como sendo proporcional a uma distribuição qui-quadrado.

Esses resultados são, também, uma extensão do procedimento de SCOTT & KNOTT (1974), para agrupamento de médias.

AN EXTENSION OF THE AID TECHNIQUE
IN GENERALIZED LINEAR MODELS

Author: MARIA CECILIA MENDES BARRETO

Adviser: PROFA. DRA. CLARICE GARCIA BORGES DEMÉTRIO

SUMMARY

Since Clustering techniques for means can be inadequate for proportions with non-Gaussian data, the AID (Automatic Interaction Detection) algorithm is extended considering as measure of homogeneity of groups a statistics based on the deviance function.

This can be used in a large class of models known as generalized linear models. These models have, as particular case, among others, standard regression and analysis of variance models, logit and probit models, log-linear models for contingency tables, etc.

Considering a completely random design with K treatments and n_k replicates per treatment, the maximum of the groups homogeneity measure is obtained. Also, it is obtained an extension of the " determination coefficient " in a general form, supposing a distribution for the data in the exponential family; in particular the normal, binomial and Poisson cases are considered.

Supposing a binomial distribution for the data, the asymptotic distribution for the maximum of the group homogeneity measure is obtained, it is shown that

it is proportional to a chi-square distribution. These results are also, an extension of the procedures proposed by SCOTT & KNOTT (1974) for clustering means.

1. INTRODUÇÃO.

1.1. Motivação

Uma das situações mais frequentes encontradas por pesquisadores de diversas áreas do conhecimento é formar grupos de indivíduos que sejam, de alguma maneira, similares.

A análise de agrupamentos é um conjunto de técnicas e algoritmos cujo objetivo é encontrar e separar indivíduos em grupos similares a partir do conhecimento de p variáveis que os definem.

Entretanto, algumas vezes, além de se ter um conjunto de p variáveis preditoras, tem-se também uma variável resposta definida para cada indivíduo. Um dos procedimentos existentes para a busca de grupos similares nessa situação, é a técnica AID ("Automatic Interaction Detection") que foi inicialmente proposta por MORGAN & SONQUIST (1963).

O método de agrupamento de médias de SCOTT & KNOTT (1974) é um caso particular da técnica AID, e usa o método de análise de agrupamento divisivo hierárquico dicotômico para separar as médias amostrais de tratamentos em grupos razoavelmente homogêneos no caso de delineamentos balanceados, quando o resultado de um teste

F na análise de variância é significativo.

COX & SPJØTVOLL (1982) usam como procedimento o teste das hipóteses de que os dados estão, primeiramente, em dois grupos homogêneos, e caso não haja nenhuma partição satisfatória, em um segundo passo são testadas todas as partições em três grupos e assim por diante. A estatística utilizada é baseada no teste F tradicional.

CARMER & LIN (1983) fazem um estudo do erro do tipo 1 para métodos de agrupamento divisivo de médias de grupos, que formam conjuntos disjuntos de tratamentos.

Considerando um ensaio inteiramente ao acaso do comportamento de fungicidas sobre a porcentagem de germinação de sementes de milho, não é adequado se utilizarem esses métodos na análise de variância usual para a transformação arco seno da raiz quadrada da proporção de sementes germinadas, uma vez que o interesse do pesquisador está em um agrupamento na variável original.

Nessa situação é indicada a análise de modelo probito ou logito, seguida de uma técnica de agrupamento que se adapte à variável resposta binária.

1.2. Objetivos.

A medida de homogeneidade entre grupos usada, por exemplo, por SCOTT & KNOTT (1974), corresponde à soma de quadrados entre dois grupos, em um delineamento completamente ao acaso. Um dos primeiros autores a

definir homogeneidade entre grupos foi FISHER (1958) propondo a soma de quadrados ponderada.

Entretanto, a partir do desenvolvimento de modelos lineares generalizados (MGL) por NELDER & WEDDERBURN (1972) um grande número de métodos estatísticos, tais como modelos de regressão, modelos probito e logito, modelo de médias, modelos log-lineares, modelos de regressão de Cox, dentre outros, pode ser escrito de uma maneira unificada, possibilitando, também, que a função desvio seja usada como medida de qualidade de ajuste do modelo em questão.

Esses conceitos permitem estender o algoritmo AID para uma classe mais ampla de situações onde se faz necessária a aplicação de métodos divisivos hierárquicos.

1.3. A organização deste trabalho.

Com o objetivo de se propor uma modificação na técnica AID para que se possa utilizar um método de divisão dicotômica hierárquica em análise de agrupamentos para um grande número de modelos estatísticos, este trabalho estuda, em particular, o caso de resposta binária, onde os modelos logito e probito são casos típicos, bem como o caso de resposta categorizada, onde os modelos log-lineares são utilizados para a análise.

O Capítulo 2 trata de algoritmos de divisão dicotômica hierárquica, onde se faz referência ao procedimento de SCOTT & KNOTT (1974) e ao algoritmo AID.

Uma breve introdução aos modelos lineares generalizados, que é apresentada no Capítulo 3, permite estender o conceito de homogeneidade entre grupos para dados da família exponencial (Capítulo 4). Desse modo, uma definição mais geral das estatísticas usadas no algoritmo AID são estendidas para a família exponencial no Capítulo 5.

Um resumo dos resultados a respeito da distribuição do máximo da medida de homogeneidade entre grupos no caso de distribuição normal, está no Capítulo 6 e no caso de distribuição binomial, no Capítulo 7.

Uma descrição mais detalhada do algoritmo AID e algumas modificações em seus passos estão no Capítulo 8.

Uma das possíveis versões do algoritmo AID, usando a medida de homogeneidade entre grupos no caso binomial, é discutida em um modelo logito no Capítulo 9.

O Capítulo 10 apresenta as conclusões deste trabalho.

Uma cópia do programa utilizado para se obterem os resultados da simulação está no Apêndice 1, uma das situações estudadas, no Apêndice 2. O programa para aplicação do algoritmo AID estendido está no Apêndice 3.

2. ALGUNS ALGORITMOS DE DIVISÃO DICOTÔMICA HIERÁRQUICA

2.1. Introdução

Na comparação de médias de tratamentos, por exemplo em análise de variância, algumas vezes é de interesse apresentá-las agrupadas, de tal modo que os tratamentos do mesmo grupo possam ser considerados como tendo a mesma média.

Quando o número de níveis do fator ou o número de variáveis preditoras é muito grande, a escolha de um modelo adequado e sua subsequente avaliação podem se tornar trabalhosas e na maioria dos casos de difícil interpretação. Técnicas alternativas baseadas em análise de agrupamentos podem ser usadas, pois, além de serem conceitualmente mais intuitivas, em geral, produzem resultados mais simples de se interpretarem.

O método AID ("Automatic Interaction Detection") proposto por MORGAN & SONQUIST (1963) como uma das técnicas de análise de agrupamentos, consiste em dividir o conjunto de dados sucessivamente em grupos, combinando ou não as classes das variáveis preditoras ou níveis dos fatores, de modo a produzir grupos que se diferenciem ao máximo em relação à média da variável resposta. O processo de subdivisão é aplicado enquanto as

divisões obtidas contribuem para explicar a variação dos dados e ao final tem-se um conjunto de grupos que podem ser identificados por alguns níveis dos fatores ou variáveis preditoras e suas interações mais importantes.

2.2. Partição dicotômica

Para se dividir um conjunto de dados em grupos homogêneos, uma solução seria examinar todas as partições possíveis do referido conjunto e escolher aquela que é ótima segundo algum critério. Entretanto, conforme observou FISHER (1958), - por conhecimento anterior, teoria ou conveniência, algumas partições são eliminadas como sendo soluções possíveis. Um caso típico é quando as observações são tomadas sucessivamente durante alguns anos, e deseja-se agrupar os dados em ordem cronológica. Esse fato em si elimina um grande número de partições possíveis, desde que se busquem apenas grupos formados por elementos consecutivos.

Como em cada problema tem-se um conjunto de regras que determinam as partições possíveis, diz-se que uma regra γ pode ser classificada como livre se nenhuma condição é imposta às partições, ou então como restrita, caso certas condições sejam levadas em consideração. Dentre as restritas, se os grupos formados tiverem elementos consecutivos com relação a alguma ordem fixada no conjunto $\{1, 2, \dots, K\}$ de índices das observações, a regra é monotônica. Se, por outro lado, os grupos são formados por outro tipo de restrição, então a regra é complexa. Indica-se γ_L uma regra livre e γ_M uma

regra monotônica. Mostra-se que quando da aplicação de regra γ_L , tem-se $2^{K-1}-1$ partições possíveis, e quando da regra γ_M , $K-1$ partições possíveis.

No exemplo onde os grupos são formados em ordem cronológica tem-se uma regra γ monotônica. O algoritmo de HARTIGAN (1972), que apresenta um modelo e uma técnica para agrupar simultaneamente casos e variáveis, é um exemplo de regra complexa. O trabalho de BUSSAB (1976) apresenta em detalhes todo o desenvolvimento de regras de agrupamentos, em particular da regra γ .

Sem perda da generalidade, considere-se o conjunto de observações dispostas em K caselas, que serão agrupadas e o conjunto de índices

$$I = \{1, 2, \dots, K\} \quad (2.1)$$

de tal maneira que quando se fizer uma partição das caselas, escrever-se-á uma partição do conjunto I .

Ao se aplicar uma regra γ a um conjunto de índices, I , tem-se uma partição dicotômica, se esta última é constituída de dois grupos. Seja $\Psi(I, \gamma)$ o conjunto de todas as partições dicotômicas possíveis γ do conjunto I . Qualquer elemento d de $\Psi(I, \gamma)$ é formado por dois subconjuntos $J(d)$ e $L(d)$, que são complementares em I , ou seja

$$J(d) \cap L(d) = \emptyset \quad \text{e} \quad J(d) \cup L(d) = I \quad (2.2)$$

Por exemplo, para $I = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, tem-se que:

• Aplicando a regra livre γ_L , o conjunto $\Psi(I, \gamma_L)$ contém 31 elementos.

• Considerando a regra monotônica γ_M , onde a ordem fixada é a natural, $\Psi(I, \gamma_M)$ contém 5 elementos, d_i , que estão na Tabela 1. Convém notar que se a ordenação não fosse a natural, os elementos do conjunto $\Psi(I, \gamma_M)$ seriam completamente diferentes daqueles encontrados.

Tabela 1 - Elementos do conjunto $\Psi(I, \gamma_M)$ onde $I = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e a ordem monotônica é a natural.

d	$J(d)$	$L(d)$
d_1	$\{1\}$	$\{2, 3, 4, 5, 6\}$
d_2	$\{1, 2\}$	$\{3, 4, 5, 6\}$
d_3	$\{1, 2, 3\}$	$\{4, 5, 6\}$
d_4	$\{1, 2, 3, 4\}$	$\{5, 6\}$
d_5	$\{1, 2, 3, 4, 5\}$	$\{6\}$

• Se o conjunto I corresponde a caselas em uma classificação dupla, sendo um fator com 2 níveis e o outro com 3, ele terá 6 elementos que podem ser representados através de

Fator 1 \ Fator 2	Fator 2		
	1	2	3
1	1	2	3
2	4	5	6

Então o conjunto de índices das caselas tem a seguinte correspondência com o conjunto de índices I :

$$\{(1,1), (1,2), (1,3), (2,1), (2,2), (2,3)\} = \{1,2,3,4,5,6\} \quad (2.3)$$

Considerando que a regra γ permite partições baseadas em agrupamentos marginais apenas com partições monotônicas para o fator 2, tem-se que $\Psi(I, \gamma)$ contém 3 elementos, d_3, d_6, d_7 , que estão na tabela 2.

Tabela 2 - Elementos do conjunto $\Psi(I, \gamma)$, onde $I = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e a regra γ permite agrupamentos marginais com partições monotônicas para o Fator 2.

d	$J(d)$	$L(d)$
d_3	$\{1, 2, 3\}$	$\{4, 5, 6\}$
d_6	$\{1, 4\}$	$\{2, 3, 5, 6\}$
d_7	$\{1, 2, 4, 5\}$	$\{3, 6\}$

Se d é um elemento de $\Psi(I, \gamma)$, então d é formado por dois subconjuntos de I , $J(d)$ e $L(d)$. Por outro lado, se for considerada a classe $\Psi(L(d), \gamma)$, cada um de seus elementos d' formará novamente dois subconjuntos de $L(d)$, $J(d')$ e $L(d')$. Assim o conjunto $\{J(d), J(d'), L(d')\}$ é formado por uma tripartição do conjunto I , obtida por duas divisões dicotômicas γ sucessivas. Define-se então a tripartição de I formada deste modo como o resultado de um produto especial

$$J(d) * (L(d), \gamma) = \{ [J(d), J(d'), L(d')] : d' \in \Psi(L(d), \gamma) \} \quad (2.4)$$

Pode-se, então, construir a classe $\Pi(3)$ de todas as possíveis tripartições de I obtidas por duas partições dicotômicas γ sucessivas, que é dada por :

$$\Pi(3) =$$

$$\bigcup_{d \in \Psi(I, \gamma)} \{ [\Psi(J(d), \gamma) * L(d)] \cup [J(d) * \Psi(L(d), \gamma)] \} \quad (2.5)$$

Através de uma partição de $\Pi(3)$ constrói-se a classe $\Pi(4)$ de todas as possíveis tetrapartições de I , obtidas por três divisões dicotômicas γ , de maneira análoga à obtenção da classe $\Pi(3)$.

As multipartições subseqüentes podem ser obtidas até se atingir a partição onde cada subconjunto tem apenas um elemento, ou seja

$$\Pi(K) = \{ [\{1\}, \{2\}, \dots, \{K\}] \} \quad (2.6)$$

A classe de todas as possíveis partições do conjunto I , obtidas pela aplicação sucessiva de partição dicotômica γ é indicada por $T(I, \gamma)$.

Fazendo $\Pi(1) = \{I\}$ e $\Pi(2) = \Psi(I, \gamma)$, tem-se que

$$T(I, \gamma) = \bigcup_{j=1}^K \Pi(j) \quad (2.7)$$

Esses conceitos e o modo hierárquico de construção da classe $T(I, \gamma)$ permitem uma analogia com um grafo terminal de dois, na teoria dos grafos, uma vez que um grafo consiste de um conjunto de nós e um conjunto de arcos. No presente caso, as partições correspondem aos nós, $i \in T(I, \gamma)$. Quanto aos arcos, diz-se que duas partições (nós) i e i' de $T(I, \gamma)$ são adjacentes (arcos conectados) se uma pode ser obtida da outra por uma partição dicotômica simples γ de um dos seus subconjuntos.

2.3. Critérios de partição e regras de parada

Uma vez estabelecido o objetivo de se obterem grupos homogêneos internamente, é de interesse imediato saber que partições levam ao agrupamento mais homogêneo.

Pode-se dizer que o problema é semelhante à classificação cruzada múltipla em análise de variância, uma vez que a técnica aglomerativa tenta agrupar caselas

que têm médias muito próximas. Como cada casela é determinada de maneira única pelos níveis dos fatores, os grupos são estabelecidos através das relações entre a variável resposta e os fatores. Em BUSSAB (1976) existe uma discussão detalhada de um modelo apresentado em SONQUIST¹ que, a seguir, é apresentado resumidamente.

O conjunto de N observações é formado por vetores na forma $(y, x_1, x_2, \dots, x_p)$ onde y corresponde à variável dependente Y e $x_1, x_2, \dots, x_p$ a um conjunto de fatores ou preditores $X_1, X_2, \dots, X_p$. Os preditores são classificações, cada uma das quais com k_p classes (ou níveis), para $1 \leq p \leq P$.

Considerando todas as combinações possíveis dos níveis dos preditores em uma classificação total, sejam K delas não vazias, com n_k elementos, $1 \leq k \leq K$. Cada índice k corresponde a uma única combinação dos níveis, podendo ser considerado, então, como um tratamento. Sendo cada um dos N valores observados de y um número de uma dessas caselas, então eles podem ser indicados por y_{kj} , representando o j -ésimo elemento da k -ésima casela, com $1 \leq k \leq K$ e $1 \leq j \leq n_k$. Para simplificar a notação, seja y_k a média da k -ésima casela ou tratamento, então

$$y_k = \frac{1}{n_k} \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \quad (2.8)$$

1 SONQUIST, J. N. *Multivariate Model Building*. Ann Harbor, Institute for Social Research, University of Michigan, 1970.

Uma medida de homogeneidade quando as N observações estão em um único grupo é dada por

$$SQT(total) = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - \bar{y})^2 \quad (2.9)$$

onde $\bar{y}$ é a média geral. A quantidade $SQT(total)$ pode ser considerada, também, como uma medida de dispersão, uma vez que representa a variabilidade de todas as observações em relação à média geral $\bar{y}$. A expressão (2.9) pode ser decomposta em duas somas de quadrados, $SQE(total)$ e $SQD(total)$ que são denominadas, respectivamente, variação entre caselas e variação dentro de caselas. Assim

$$SQT(total) = SQE(total) + SQD(total)$$

$$= \sum_{k=1}^K n_k (y_k - \bar{y})^2 + \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - y_k)^2. \quad (2.10)$$

A função perda quadrática $SQT(total)$ pode ser considerada como a perda de informação que resulta de tratar todos os N elementos como tendo a mesma média geral $\bar{y}$. Já a quantidade $SQD(total)$ é a perda de informação por tratar cada observação como a média da casela k , y_k . Já a quantidade $SQE(total)$ é a perda de informação por tratar cada média de casela como a média geral ponderada pelo número de elementos em cada casela.

Com o objetivo de agrupar as K caselas em, por exemplo, 6 grupos, definem-se as seguintes expressões

onde $\sum_{k \in g}$ indica a soma dentre os tratamentos alocados ao g -ésimo grupo:

- $N_g = \sum_{k \in g} n_k$: número de elementos no g -ésimo grupo.

- $\bar{y}_g = \sum_{k \in g} n_k y_k / N_g$: média do g -ésimo grupo.

- $SQT_g(\text{grupo}) = \sum_{k \in g} \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - \bar{y}_g)^2$: soma de quadrados total no g -ésimo grupo.

- $SQE_g(\text{grupo}) = \sum_{k \in g} n_k (y_k - \bar{y}_g)^2$: soma de quadrados entre caselas no g -ésimo grupo.

- $SQD_g(\text{grupo}) = \sum_{k \in g} \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - y_k)^2$: soma de quadrados dentro de caselas no g -ésimo grupo.

- $SQR(G) = \sum_{g=1}^G SQE_g(\text{grupo}) = \sum_{g=1}^G \sum_{k \in g} n_k (y_k - \bar{y}_g)^2$: soma de quadrados residual devida aos G grupos.

- $SQX(G) = \sum_{g=1}^G N_g (\bar{y}_g - \bar{y})^2$: soma de quadrados devida aos G grupos.

De acordo com WARD (1963), $SQT_g(\text{grupo})$ é a perda de informação devido ao g -ésimo grupo e a perda de informação do modelo de G grupos é a soma das perdas de cada grupo, isto é,

$$\sum_{g=1}^G SQT_g(\text{grupo}).$$

Mostra-se facilmente que

$$\begin{aligned} SQT_g(\text{grupo}) &= \sum_{k \in g} \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - \bar{y}_g)^2 = \\ &= \sum_{k \in g} \sum_{j=1}^{n_k} [(y_{kj} - y_k) + (y_k - \bar{y}_g)]^2 = \\ &= \sum_{k \in g} \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - y_k)^2 + \sum_{k \in g} n_k (y_k - \bar{y}_g)^2 = \\ &= SQE_g(\text{grupo}) + SQD_g(\text{grupo}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

e também

$$\begin{aligned} \sum_{g=1}^G SQD_g(\text{grupo}) &= \sum_{g=1}^G \sum_{k \in g} \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - y_k)^2 = \\ &= \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - y_k)^2 = SQD(\text{total}). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Em consequência, tem-se que a perda de informação no modelo de G grupos é composta por duas parcelas: a soma de quadrados residual devido aos G grupos e a perda de informação por tratar cada observação como a média da casela k , y_k , ou seja

$$\begin{aligned}\sum_{g=1}^G SQT_g(\text{grupo}) &= \sum_{g=1}^G SQE_g(\text{grupo}) + \sum_{g=1}^G SQD_g(\text{grupo}) \\ &= SQR(G) + SQD(\text{total}) .\end{aligned}\quad (2.13)$$

Como para um conjunto de dados $SQD(\text{total})$ é fixado, a perda de informação no modelo de G grupos depende apenas de $SQR(G)$, isto é, da maneira pela qual as K caselas são partidas em G grupos. Pode-se mostrar também que

$$\begin{aligned}SQT(\text{total}) &= \sum_{g=1}^G \sum_{k \in g} \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - \bar{y}_g)^2 + \sum_{g=1}^G N_g (\bar{y}_g - \bar{y})^2 \\ &= \sum_{g=1}^G SQT_g(\text{grupo}) + \sum_{g=1}^G N_g (\bar{y}_g - \bar{y})^2 \\ &= SQR(G) + SQD(\text{total}) + SQX(G)\end{aligned}\quad (2.14)$$

Comparando (2.14) com (2.10) obtém-se

$$SQE(\text{total}) = SQR(G) + SQX(G) \quad (2.15)$$

Assim ao se tentar minimizar a perda $SQR(G)$, maximiza-se $SQX(G)$ uma vez que $SQE(\text{total})$ é fixo.

Como não se pode construir uma partição mais fina aceitável das N observações do que aquela definida para cada casela ou tratamento formando um grupo, a expressão (2.13) diz que qualquer conjunto de grupos de caselas dá uma perda entre $SQD(\text{total})$ e $SQT(\text{total})$, correspondendo, respectivamente à partição mais fina com K grupos e a mais rudimentar com um único

grupo. Esta corresponde à "perda reduzida" $SQR(G)$ variando entre zero e $SQE(total)$.

Levando em conta essas premissas, o problema de análise da perda de informação considerando todos os elementos no g -ésimo grupo como tendo o mesmo valor $\bar{y}_g$, é equivalente àquele da análise da perda de informação considerando todas as k_g médias de caselas no g -ésimo grupo tendo a mesma média $\bar{y}_g$.

Considere a expressão $SQR(G)$ como a perda da informação no modelo com G grupos, e $SQX(G)$ como a soma de quadrados explicada pelo modelo. Uma medida usada para dar informação sobre o modelo é a estatística R^2 , que expressa a proporção da soma de quadrados explicada pelo modelo em relação à soma de quadrados total. No presente caso pode-se colocá-la como

$$R^2(G) = SQX(G) / SQT(total). \quad (2.16)$$

Demonstra-se que

$$0 = R^2(1) \leq R^2(G) \leq R^2(K) < 1 \quad (2.17)$$

onde, $R^2(K)$ corresponde ao coeficiente de determinação de um modelo com K tratamentos. Uma forma reduzida no intervalo $[0,1]$ é dada por

$$R_{*}^2(G) = \frac{SQX(G)}{SQE(total)} = \frac{R^2(G)}{R^2(K)}. \quad (2.18)$$

Esta última pode ser interpretada como a proporção da soma de quadrados explicada na constituição de tais

modelos. Entretanto a aplicação desse conceito específico em cada partição torna-se trabalhosa devido ao grande número de elementos de $T(I, \gamma)$.

Um procedimento melhor para agrupar as médias em grupos homogêneos pode ser encontrar uma partição das caselas tal que :

- caso 1 : a partição tenha a menor $SQR(G)$, para um número fixado G .
- caso 2 : a partição tenha o menor número de grupos G para um nível fixado de $SQR(G)$.

As técnicas de agrupamento têm sido aplicadas tanto no primeiro caso como no segundo, sendo que neste último surge a questão da escolha do valor mínimo desejado de perda de informação.

2.4. O método de agrupamento divisivo hierárquico

Deseja-se encontrar uma partição ótima de caselas tal que a função perda quadrática SQR seja minimizada sob certas restrições. Como o número de partições possíveis das caselas é finito, pode-se encontrar uma partição calculando a função perda para cada partição e então escolhendo uma que satisfaça às condições impostas. Esse procedimento é factível para G fixado desde que os valores de K sejam pequenos.

No caso em que G não é conhecido, é prudente restringir as técnicas de análise de

agrupamentos àquela que atue hierarquicamente, de modo que em cada estágio possa ser verificado se a perda mínima é atingida ou outra regra de parada é alcançada.

O método de agrupamento hierárquico divisivo é um procedimento simples e fácil, composto pelos seguintes passos :

- No início todas as caselas estão em um único agrupamento. Por algum procedimento ótimo, esse grupo pode ser dividido em dois.

- Outro critério de seleção escolhe um (ou os dois) dos grupos resultantes e se faz uma nova divisão.

- O passo anterior é repetido até que o número total de grupos finais é atingido ou alguma regra de parada é satisfeita.

Considerando que se tenha atingido uma partição d , com G grupos, o método divisivo hierárquico pode ser colocado matematicamente, como dividindo o g -ésimo grupo em dois novos, g_1 e g_2 . Verifica-se então que

$$N_g = N_{g_1} + N_{g_2} \quad \text{e} \quad N_g \bar{y}_g = N_{g_1} \bar{y}_{g_1} + N_{g_2} \bar{y}_{g_2} \quad (2.19)$$

e que a perda de informação sofre uma redução $SQE(d)$ definida por

$$SQE(d) = SQR(G) - SQR(G+1)$$

$$\begin{aligned}
&= SQE_g(\text{grupo}) - SQR_{g_1}(\text{grupo}) - SQR_{g_2}(\text{grupo}) \\
&= SQX(G+1) - SQX(G) \\
&= N_{g_1}(\bar{y}_{g_1} - \bar{y})^2 + N_{g_2}(\bar{y}_{g_2} - \bar{y})^2 - N_g(\bar{y}_g - \bar{y})^2. \quad (2.20)
\end{aligned}$$

Donde se obtém

$$SQE(d) = N_{g_1} \bar{y}_{g_1}^2 + N_{g_2} \bar{y}_{g_2}^2 - N_g \bar{y}_g^2. \quad (2.21)$$

No contexto de análise de variância, a expressão (2.21) é a soma de quadrados entre tratamentos de dois grupos resultante de uma partição dicotômica do grupo ancestral bem como o montante de explicação ganho pela divisão.

A redução $SQE(d)$, que muitas vezes é chamada apenas por redução SQE , tem sido usada como base para o critério do método divisivo hierárquico.

Dessa maneira, dado que o método de agrupamento divisivo hierárquico foi aplicado, conseguiu-se uma partição formada por G grupos de I , isto é

$$I = \bigcup_{g=1}^G I_g. \quad (2.22)$$

Cada partição d de $\Psi(I_g, \gamma)$ tem associada a redução $SQE(d)$ que é obtida, por exemplo, pela expressão (2.21). Seja $B(I_g, \gamma)$ o máximo entre as somas de quadrados entre grupos, isto é,

$$B(I_g, \gamma) = \max \{ \text{SQE}(d) : d \in \Psi(I_g, \gamma) \}. \quad (2.23)$$

A partição d_0 tal que

$$\text{SQE}(d_0) = B(I_g, \gamma) \quad (2.24)$$

pode ser considerada a melhor divisão dicotômica.

Diversos autores, entre eles FISHER (1958) e SCOTT & KNOTT (1974), para o caso de única classificação, HARTIGAN (1972) para o caso de classificação cruzada e Sonquist & Morgan² além de Sonquist et alii³ citados por BUSSAB (1976) para o caso de classificação múltipla cruzada propuseram diferentes maneiras de escolher o próximo grupo G que será dividido, bem como parar o processo de divisão caso o número total de conjuntos na partição não seja especificado "a priori". De uma maneira geral, pode-se dizer que para a próxima divisão é escolhido o conjunto I_g que conduz ao valor máximo de $B(I_g, \gamma)$ e como regra de parada do processo é verificado se a estatística $B(I_g, \gamma)$ é significativa a um nível pré-fixado.

2 SONQUIST, J. N. & MORGAN, J. A. The Detection of Interaction Effects. Monografia no. 35, Survey Research Center, Institute for Social Research, University of Michigan, 1964.

3 SONQUIST, J. H.; BAKER, E. L.; MORGAN, J. A. Searching for Structure. Institute for Social Research, University of Michigan, 1971.

2.5. Critérios para a escolha do próximo grupo

A literatura sobre técnicas divisivas de agrupamentos é muito extensa, mas poucos artigos tratam o problema específico de agrupamento de médias em uma classificação múltipla como mencionado na seção anterior. Quatro deles são apresentados a seguir.

2.5.1. Agrupamento para homogeneidade máxima

As técnicas de agrupamento propostas por FISHER (1958) têm por objetivo formar grupos homogêneos para uma única variável. Seus resultados são importantes para esta discussão, apesar dele não ter usado o método de partição dicotômica hierárquica.

Nesse artigo é abordado o agrupamento com e sem restrições nas partições. Como exemplo do primeiro caso, tem-se a formação de grupos homogêneos em uma série temporal onde a ordem cronológica deve ser respeitada. Para o agrupamento sem restrições, tem-se como ilustração a criação de estratos homogêneos em amostragem.

Também é colocado que no caso da regra γ_L e o conjunto I ter K elementos, a classe $\Psi(I, \gamma_L)$ terá $2^{K-1} - 1$ partições. Neste caso para se encontrar a partição $d_0 \in \Psi(I, \gamma_L)$ com a maior redução haverá um trabalho computacional muito grande. Entretanto, no artigo em questão é demonstrado que a solução está no subconjunto $\Psi(I_M, \gamma_M)$ onde γ_M é a regra monotônica e I_M é o conjunto

ordenado pelos valores das médias das caselas ou tratamentos.

2.5.2. Técnica AID ("Automatic Interaction Detection")

O algoritmo AID ("Automatic Interaction Detection") tem por propósito agrupar as caselas usando partição dicotômica nas médias marginais dos preditores em problemas de classificação múltipla cruzada na análise de variância e foi desenvolvida por Sonquist e Morgan⁴, de acordo com BUSSAB (1976).

O ganho ótimo $B(d, X_p)$ de um preditor X_p é obtido através de suas médias marginais e utilizando a regra γ_p associada a ele. O algoritmo escolhe como partição ótima aquela que produz o maior valor de $B(d, X_p)$, $1 \leq p \leq P$.

A regra de parada principal é baseada no conceito de ganho proporcional de uma nova divisão que é dado por

$$\begin{aligned} R^2[d(G+1)] &= R^2[d(G)] + \frac{SQE[d(G+1)]}{SQT(total)} \\ &= \frac{SQX[d(G+1)]}{SQT(total)} \end{aligned} \quad (2.25)$$

4 SONQUIST, J. N. & MORGAN, J. A. The detection of Interaction Effects. Monograph no. 35, Survey Research Center, Institute for Social Research. University of Michigan, 1964.

onde $SQX[d(G+1)]$ é a soma de quadrados devida aos grupos da nova partição $d(G+1)$. Sua significância é baseada em resultados empíricos e, em geral, fixa-se o valor arbitrário 0,006, de acordo com SONQUIST & MORGAN, citados por BUSSAB (1976), isto é, se o ganho relativo $SQE(d, X_p) / SQT(total)$ é menor que 0,006 o processo pára.

Posteriormente, novas versões do algoritmo foram sugeridas, considerando algumas opções e diferentes alternativas de análise, mas a essência do algoritmo é a mesma, segundo BUSSAB (1976).

2.5.3. Agrupamento de casos e variáveis

O algoritmo proposto por HARTIGAN (1972) para agrupar casos e variáveis corresponde na realidade a uma classificação dupla com uma resposta por casela. A essência desse algoritmo é a mesma da técnica AID.

Diz-se que uma família de grupos é uma árvore se dois grupos quaisquer não se sobrepõem. Esses dois grupos são também disjuntos ou um inclui o outro. O agrupamento de Hartigan é feito de tal modo que a estrutura de árvore é alcançada não só nas caselas bem como nas médias marginais. Tem-se, então, uma regra complexa γ .

O processo se resume em encontrar um elemento de $T(I, \gamma)$ através da técnica de agrupamento divisivo hierárquico que reduz a soma de quadrados a um valor razoável. Em cada passo tal estatística é calculada e o processo pára quando seu valor esperado é maior que o

obtido. Aqui também o conhecimento da distribuição da variável $B(I, \gamma)$ é fundamental, apesar de, em geral, ela ser desconhecida.

Considerando um conjunto de variáveis aleatórias independentes, $y_1, y_2, \dots, y_K$, e $I = \{1, 2, \dots, K\}$ um conjunto de índices, bem como γ_L uma regra livre de partições, a expressão (2.23) pode ser reescrita como

$$B(I, \gamma_L) = \max_p \left\{ \frac{y_{(1)} + \dots + y_{(p)}}{p} - \frac{y_{(p+1)} + \dots + y_{(K)}}{K-p} \right\} \frac{p(K-p)}{K} \quad (2.26)$$

onde $y_{(k)}$ é a k -ésima média ordenada. Sob a hipótese nula y_k , $1 \leq k \leq K$, tem uma distribuição $N(\mu, \sigma^2)$. FISHER (1958) usou o resultado de que para K grande a partição ótima sempre ocorre ao redor de $p = 0,5$, isto é,

$$|p_0 - 0,5| = o(K^{-0,5}) \quad (2.27)$$

onde p_0 é o ponto onde ocorre a divisão. Com essa informação o autor provou que assintoticamente

$$B(I, \gamma_L) \sim 2 \sigma^2 \chi_{(K/\pi)}^2 \quad (2.28)$$

onde, $\chi_{(K/\pi)}^2$ significa uma variável aleatória qui-quadrado com K/π graus de liberdade.

Nesse artigo existem expressões assintóticas para a média e a variância de $B(I, \gamma_L)$. BUSSAB

(1976) obteve, entretanto resultados diferentes usando o mesmo método.

2.5.4. Teste de máxima verossimilhança

O método de agrupamento divisivo hierárquico foi usado por SCOTT & KNOTT (1974) para agrupar médias de tratamentos quando um teste F na análise de variância rejeita a hipótese de que elas são iguais, ou seja, para o caso de uma classificação com número igual de elementos por casela e com a regra γ livre para divisão dicotômica.

Uma estatística λ da razão de máxima verossimilhança é construída para testar a igualdade de todas as médias contra a alternativa de que elas podem ser divididas em dois grupos desconhecidos. Para cada amostra esse grupo é dado pela partição $d_o \in \Psi(I, \gamma_L)$ tal que $SQE(d_o) = B(I, \gamma_L)$. Aplicando a estatística de teste λ tem-se a regra de parada do procedimento divisivo.

Posteriormente BUSSAB (1976) deduziu o teste da razão de máxima verossimilhança para o caso de qualquer tipo de regra γ , e caselas com diferentes números de elementos.

De uma maneira geral, têm-se as seguintes suposições:

- As K médias de caselas $y_1, y_2, \dots, y_K$ são variáveis aleatórias independentes com $y_k \sim N(\mu_k, \sigma^2/n_k)$, para $k=1, 2, \dots, K$.

• s^2 é uma estimativa independente de σ^2 com $vs^2/\sigma^2 \sim \chi^2_\nu$.

• Uma regra γ é fixada para a obtenção da divisão dicotômica.

• O resultado do teste estatístico da análise de variância rejeita a hipótese de igualdade de médias das caselas e existem evidências de que elas possam ser divididas em dois grupos homogêneos distintos.

Então para $I = \{1, 2, \dots, k\}$, qualquer partição $d \in \Psi(I, \gamma)$ implicará que a média dos tratamentos é dada por

$$\mu_k = \begin{cases} m_J & \text{se } k \in J(d) \\ m_L & \text{se } k \in L(d) \end{cases} \quad (2.29)$$

no espaço de parâmetros $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k)$. Assim o espaço de parâmetros desse vetor de médias é determinado unicamente por

$$\psi(I, \gamma) \cup \{d_*\} \quad (2.30)$$

onde, d_* é a partição $\{I, \emptyset\}$ que corresponde ao caso onde todas as médias são iguais.

Então sob a hipótese nula

$$H_0: \mu_k = m, \quad k \in I \text{ (correspondendo a } d_*), \quad (2.31)$$

o logaritmo da função de verossimilhança

$$L(m, \sigma) = - (K+v) \log \sigma - \frac{1}{2\sigma^2} \left\{ \nu s^2 + \sum_{k \in I} n_k (y_k - m)^2 \right\} \quad (2.32)$$

assume seu valor máximo em

$$L(\bar{y}, \sigma_0) = cte - \left[\frac{K+v}{2} \right] \left\{ 1 + \log \sigma_0^2 \right\} \quad (2.33)$$

quando

$$N = \sum_{k \in I} n_k, \quad \bar{y} = \sum_{k \in I} n_k y_k / N \quad \text{e} \quad (2.34)$$

$$\sigma_0^2 = \frac{1}{K+v} \left\{ \nu s^2 + \sum_{k \in I} n_k (y_k - \bar{y})^2 \right\}.$$

Sob a hipótese alternativa

$$H_1: \mu_k = \begin{cases} m_J & \text{se } k \in J(d), \\ m_L & \text{se } k \in L(d), \end{cases} \quad (2.35)$$

para algum $d \in \Psi(I, \gamma)$ onde m_J e m_L são as médias desconhecidas de dois grupos, o valor máximo do logaritmo da função de verossimilhança

$$L(\bar{y}_J, \bar{y}_L, \sigma_1) = cte - \frac{K+v}{2} \left\{ 1 + \log \sigma_1^2 \right\} \quad (2.36)$$

é atingido para

$$\sigma_1^2 = \frac{1}{K+\nu} \left\{ \nu s^2 + \sum_{k \in J(d_0)} n_k (y_k - \bar{y}_J)^2 + \sum_{k \in L(d_0)} n_k (y_k - \bar{y}_L)^2 \right\} \quad (2.37)$$

onde

$$N_J = \sum_{J(d_0)} n_k, \quad N_L = \sum_{L(d_0)} n_k, \quad (2.38)$$

$$\bar{y}_J = \sum_{J(d_0)} n_k y_k / N_J, \quad \bar{y}_L = \sum_{L(d_0)} n_k y_k / N_L,$$

sendo $\sum_{J(d_0)}$ a soma para todo $k \in J(d_0)$, $\sum_{L(d_0)}$ a soma para todo $k \in L(d_0)$ e d_0 é o elemento de $\Psi(I, \gamma)$ que minimiza (2.37).

Para se obter a estatística do teste da razão de verossimilhança de H_0 vs H_1 basta calcular a diferença entre (2.36) e (2.33), isto é,

$$- \frac{K+\nu}{2} \log (\sigma_1^2 / \sigma_0^2) \quad (2.39)$$

e rejeita-se H_0 para valores grandes dessa expressão. Mostra-se que esse procedimento é equivalente a rejeitar H_0 para valores grandes de

$$1 - \frac{\sigma_1^2}{\sigma_0^2} = \frac{N_J \bar{y}_J^2 + N_L \bar{y}_L^2 - N \bar{y}^2}{\nu s^2 + \sum_{k \in I} n_k (y_k - \bar{y})^2} \quad (2.40)$$

ou então

$$1 - \frac{\sigma_1^2}{\sigma_0^2} = \frac{B(I, \gamma)}{\nu s^2 + \sum_{k \in I} n_k (y_k - \bar{y})^2} \quad (2.41)$$

O resultado (2.41) corresponde à estatística para se testarem as mesmas hipóteses, obtida por SCOTT & KNOTT (1974) no caso de mesmo número de observações por casela, ou seja $n_k = N/K$, $\forall k \in I$, e $\gamma = \gamma_L$. Usando o resultado de HARTIGAN (1972) da expressão (2.28), eles mostraram que a variável

$$\lambda = \frac{\pi}{2(\pi-2)} \times \frac{B(I, \gamma_L)}{\sigma_0^2} \quad (2.42)$$

é assintoticamente equivalente a uma variável qui-quadrado com $K/(\pi-2)$ graus de liberdade. Usando simulação, foi mostrado que qui-quadrado é uma boa aproximação para valores pequenos ou moderados de ν/K , mas não para valores grandes.

No caso em que a variância σ^2 é conhecida ou $\nu \rightarrow \infty$, (2.41) torna-se

$$\frac{B(I, \gamma)}{\sigma^2} \quad (2.43)$$

que é usada tanto para o teste com grandes amostras como quando a variância é conhecida.

No próximo capítulo será apresentada uma breve introdução aos modelos lineares generalizados para que posteriormente alguns resultados aqui apresentados possam ser estendidos.

3. UMA INTRODUÇÃO AOS MODELOS LINEARES GENERALIZADOS

Um grande número de métodos estatísticos tais como modelos de regressão, modelos log-lineares, dentre outros, podem ser considerados como casos particulares de uma classe mais ampla de modelos que foi introduzida por NELDER & WEDDERBURN (1972) e é conhecida como modelos lineares generalizados (GLM). O texto clássico para o estudo de tais modelos, McCULLAGH & NELDER (1989), serviu de base para este capítulo que faz uma breve introdução aos modelos lineares generalizados para poder ser definida uma medida mais geral de grupos homogêneos.

3.1. O ajuste de um modelo

Ao se considerar uma relação linear entre duas variáveis, por exemplo, y e x , o ajuste de uma reta do tipo $y = a + bx$, pressupõe a escolha de um par específico (a, b) de um conjunto de todos os pares possíveis de valores de parâmetros que tornam o conjunto de valores preditos, $\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_n$, o mais próximo possível dos valores observados. A fim de tornar o conceito de proximidade mais objetivo, é importante definir uma medida de distância ou discrepância entre os valores

observados e os valores ajustados. Tanto a norma L_1 , dada por

$$S_1(y, \hat{y}) = \sum_i |y_i - \hat{y}_i| \quad (3.1)$$

como a norma L_∞ , dada por

$$S_\infty(y, \hat{y}) = \max_i |y_i - \hat{y}_i| \quad (3.2)$$

são exemplos de funções de discrepância. No ajuste de mínimos quadrados, a medida de discrepância usada é a norma L_2 ou a soma de quadrados dos desvios, que é dada por

$$S_2(y, \hat{y}) = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.3)$$

Essa abordagem de discrepância tem duas consequências. A primeira refere-se à soma direta dos desvios individuais, tanto em $|y_i - \hat{y}_i|$ como em $(y_i - \hat{y}_i)^2$, onde, cada um desses desvios depende apenas de uma observação, implicando que as observações são todas feitas na mesma escala física e sugere que as observações são independentes ou, pelo menos, que elas sejam de algum modo permutáveis, justificando então um manuseio dos componentes. A segunda está relacionada com o fato de que o uso das diferenças aritméticas $y_i - \hat{y}_i$ implica em que todos os desvios têm pesos iguais independente do valor $\hat{y}$. Na terminologia estatística, a utilidade da norma L_p como medida de discrepância depende da independência estocástica bem como da suposição de que a variância de

cada observação é independente do seu valor médio. Tais suposições, embora comuns e frequentes na prática, não têm sentido em aplicações mais gerais.

Outra função que pode ser adotada como medida de discrepância tem por base estimativas obtidas pela maximização da função de verossimilhança. Seja $f(y; \theta)$ a função densidade de probabilidade para uma distribuição de parâmetro θ . O logaritmo da função de verossimilhança expresso como uma função do parâmetro $\mu = E(Y)$ é dado por

$$l(\mu; y) = \ln f(y; \theta) \quad (3.4)$$

e no caso de um conjunto de n observações independentes $Y_1, \dots, Y_n$ é a soma das contribuições individuais,

$$l(\mu, y) = \sum_{i=1}^n \ln f_i(y_i; \theta_i) \quad (3.5)$$

onde $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n)$.

A medida de discrepância utilizada no ajuste de um modelo linear generalizado é a função desvio ("scaled deviance") que é dada por

$$D^*(y; \mu) = 2 [l(y; y) - l(\mu; y)] \quad (3.6)$$

onde, $l(y; y)$ é o logaritmo da função de verossimilhança calculado no ponto onde os valores ajustados são iguais às observações e $l(\mu; y)$ como em (3.5).

Para modelos de regressão linear da teoria em que os erros têm distribuição normal com variância

conhecida σ^2 , tem-se, para uma única observação, a função densidade

$$f(y; \mu) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp [-(y-\mu)^2 / (2\sigma^2)], \quad (3.7)$$

e o logaritmo da função de verossimilhança,

$$l(\mu; y) = -\frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}. \quad (3.8)$$

Para $\mu=y$ obtém-se o valor máximo do logaritmo da função de verossimilhança resultando

$$l(y; y) = -\frac{\ln(2\pi\sigma^2)}{2}. \quad (3.9)$$

Obtém-se então a função desvio que é dada por

$$D^*(y; \mu) = 2 \{ l(y; y) - l(\mu; y) \} = \frac{(y-\mu)^2}{\sigma^2} \quad (3.10)$$

Esta expressão é idêntica à soma de quadrados dos resíduos, a menos da constante conhecida σ^2 . Aqui desvio mínimo é sinónimo de mínimos quadrados.

Os modelos lineares generalizados são uma extensão dos modelos lineares clássicos, e seu ajuste é feito pelo método de máxima verossimilhança.

3.2. Os componentes de um modelo linear generalizado

Seja uma amostra aleatória $\underline{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)'$ com média $\underline{\mu} = (\mu_1, \dots, \mu_n)'$ cujos elementos têm uma distribuição que pertence à família exponencial de distribuições, ou seja,

$$f(y; \theta, \phi) = \exp \left\{ \frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y, \phi) \right\} \quad (3.11)$$

onde $E(Y) = \mu = b'(\theta)$ e $Var(Y) = a(\phi)V$ com $V = b''(\theta) = d\mu/d\theta$ denominada função de variância, é expressa em termos da média μ . O parâmetro natural, $\theta = \int V^{-1} d\mu$, é uma função de μ , isto é, $\theta = q(\mu)$ e caracteriza a distribuição. Geralmente $a(\phi) = \phi/w$, sendo ϕ interpretado como um parâmetro de dispersão, e w como peso "a priori". A família exponencial pode ser de dois parâmetros se ϕ for desconhecido.

Entre as médias das observações e a estrutura linear do modelo, existe uma função de ligação $g(\cdot)$ de tal modo que $g(\mu) = \eta = X\beta$, onde $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_n)'$ chamado preditor linear, é uma função linear dos k parâmetros desconhecidos $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_k)'$ e $g(\cdot)$, suposta conhecida, é diferenciável. Em geral $g(\cdot)$ não é linear e X é uma matriz do modelo conhecida. A caracterização de um modelo linear generalizado é feita, então, através da especificação de três componentes. O primeiro refere-se ao componente aleatório, que é determinado pela indicação de $E(Y) = \mu$ e da $Var(Y)$. O segundo refere-se ao componente sistemático que produz o preditor linear η . O terceiro componente é a especificação da função de ligação $g(\cdot)$,

que relaciona o componente aleatório ao componente sistemático.

Todas as vezes em que $\theta = \eta$, onde θ é a função $q(\mu)$, diz-se que a ligação utilizada é a canônica.

No modelo linear clássico a média, μ , e o preditor linear, η , são idênticos. A função de ligação é a identidade, que nesse caso coincide com a canônica.

Em modelos log-lineares para contagens baseados na independência de dados de classificação cruzada a função de ligação utilizada é a logarítmica, que nesse caso é a canônica.

Para a distribuição binomial, tem-se que $0 < \mu < 1$ e a ligação devem satisfazer a condição de levar o intervalo $(0,1)$ à reta real. As funções mais utilizadas são :

- Logística

$$\eta = \ln(\mu/(1-\mu)) \quad (3.12)$$

que é a ligação canônica para o modelo de erro binomial.

- Probit

$$\eta = \Phi^{-1}(\mu) \quad (3.13)$$

onde $\Phi(\cdot)$ é a função de distribuição acumulada normal.

- Complemento log-log

$$\eta = \ln [-\ln(1-\mu)] \quad (3.14)$$

A família potência de funções de ligação também é muito utilizada e pode ser especificada de duas maneiras. A primeira através de

$$\eta = \begin{cases} (\mu^\lambda - 1)/\lambda & \text{para } \lambda \neq 0 \\ \ln \mu & \text{quando } \lambda = 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

e a segunda por

$$\eta = \begin{cases} \mu^\lambda & \text{se } \lambda \neq 0 \\ \ln \mu & \text{se } \lambda = 0 \end{cases} \quad (3.16)$$

Em McCULLAGH & NELDER (1989, p. 30) existe uma tabela que resume as principais características de distribuições univariadas da família exponencial. A função de ligação apresentada é a ligação canônica para a qual existe uma estatística suficiente dada por $X'Y$, com dimensão igual à dimensão de β , no preditor linear $\eta = X\beta$.

As ligações canônicas conduzem a propriedades estatísticas desejáveis no modelo, principalmente em amostras pequenas. Entretanto não existe, em geral, uma razão "a priori" no modelo que exija isso. Em cada caso a função de ligação também deve ser estudada na adequabilidade do modelo.

3.3 Inferências sobre o modelo linear generalizado

Ao se ajustar um modelo a um conjunto de dados, é de interesse saber quão discrepantes estão os

valores observados, y , em relação aos valores ajustados, $\hat{\mu}$, obtidos a partir de um modelo que, em geral, envolve um número p pequeno de parâmetros. Como mencionado na Seção 3.1., a medida de discrepância ou ajuste de um modelo pode ser obtida de acordo com vários critérios, entre eles o de máxima verossimilhança, que corresponde a duas vezes o logaritmo de uma razão de verossimilhanças, a qual foi chamada de função desvio em (3.6).

Com relação ao número de parâmetros, diversos modelos podem ser ajustados a um conjunto de observações. O mais simples, o modelo nulo, tem apenas um parâmetro, representando a mesma média para todas as observações; pode-se dizer que esse modelo contém toda a variação dos Y 's devido ao componente aleatório. No outro extremo o modelo completo tem n parâmetros, um por observação, e os μ 's correspondem a cada uma das observações, ficando toda a variação dos Y 's para o componente sistemático.

Apesar desses dois modelos serem ou muito simples ou não informativos, eles servem de base para se medir a discrepância em um modelo intermediário com p parâmetros.

Sejam $l(\hat{\mu}, \phi; y)$ o logaritmo da função de verossimilhança maximizado sobre β para um valor fixado do parâmetro de dispersão, ϕ , e $l(y, \phi; y)$ o logaritmo da função de verossimilhança maximizado em um modelo completo com n parâmetros. A discrepância de um ajuste é proporcional a duas vezes a diferença entre o logaritmo da verossimilhança maximizada em um modelo completo com n parâmetros e o logaritmo da função de verossimilhança maximizado sobre β para um valor fixado do parâmetro de

dispersão, ϕ , no modelo sob pesquisa. Se $\hat{\theta} = \theta(\hat{\mu})$ e $\tilde{\theta} = \theta(\underline{y})$ são as estimativas dos parâmetros canônicos sob os dois modelos, a discrepância, assumindo $\alpha_i(\phi) = \phi/\omega_i$ pode ser escrita por

$$\begin{aligned}
 D^*(\underline{y}; \hat{\mu}) &= 2[l(\underline{y}; \underline{y}) - l(\hat{\mu}; \underline{y})] = \\
 &= 2 \sum_{i=1}^n \left\{ \left[(y_i \tilde{\theta}_i - b(\tilde{\theta}_i)) / \alpha_i(\phi) + c(y_i, \phi) \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \left[(y_i \hat{\theta}_i - b(\hat{\theta}_i)) / \alpha_i(\phi) + c(y_i, \phi) \right] \right\} \\
 &= \sum_{i=1}^n 2\omega_i \left\{ y_i(\tilde{\theta}_i - \hat{\theta}_i) - \left[b(\tilde{\theta}_i) - b(\hat{\theta}_i) \right] \right\} / \phi \\
 &= D(\underline{y}; \hat{\mu}) / \phi \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

onde, $D(\underline{y}; \hat{\mu})$, chamado de desvio ("deviance") para o modelo sob estudo, é uma função apenas dos dados. Vale reforçar, também, que a função desvio $D^*(\underline{y}; \hat{\mu})$, definida em (3.6) é o desvio dividido pelo parâmetro de dispersão, ϕ .

Os graus de liberdade associados ao desvio são definidos por $\nu = n - p$, onde n é o número de observações e p é o número de parâmetros linearmente independentes no modelo.

Para o caso de distribuição normal, o desvio coincide com a soma de quadrados do resíduo, enquanto que para a distribuição de Poisson, ele é a estatística G^2 mencionada por BISHOP et alii (1975).

Outra importante medida de discrepância é

uma generalização da estatística de Pearson que é dada por

$$X^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}_i)^2 / V(\hat{\mu}_i) \quad (3.18)$$

onde, $V(\hat{\mu}_i)$ é a função de variância estimada para a distribuição sob estudo. Para a distribuição normal, X^2 também coincide com a soma de quadrados dos resíduos, enquanto que para as distribuições de Poisson e binomial obtém-se a estatística X^2 de Pearson original.

Tanto o desvio como a estatística de Pearson X^2 generalizada têm distribuição proporcional a uma distribuição de qui-quadrado no caso de erros com distribuição normal, desde que o modelo assumido seja verdadeiro. A vantagem do desvio sobre X^2 como medida de discrepância é que ele é aditivo para conjuntos de modelos hierárquicos se as estimativas de máxima verossimilhança são usadas, enquanto que X^2 , em geral, não o é. Entretanto é mais fácil interpretar X^2 do que o desvio.

Saindo da teoria de modelos lineares com distribuição normal para os erros, a distribuição do desvio ainda não foi estabelecida. Para as distribuições exponencial e normal inversa, resultados exatos já foram obtidos, quando as observações provêm de um delineamento simples.

Uma maneira de se testar o modelo sob estudo é através de uma estatística expressa pelo quociente

$$R = \frac{(D_1 - D_p) / (p-1)}{D_p / (n-p)} \quad (3.19)$$

onde D_1 é o desvio de um modelo com um parâmetro e D_p é o desvio do modelo de interesse com p parâmetros. Essa estatística pode ser aproximada por uma distribuição F com $(p-1)$ e $(n-p)$ graus de liberdade, de acordo com JØRGENSEN (1983).

Tabela 3 - Quadro de análise do desvio para um modelo fatorial completo com dois fatores principais.

modelo	g.l.	desvio	difer. sucessivas		termo
			desvio	g.l.	
1	N-1	D_1			
			$D_1 - D_{(a)}$	a-1	A ignorando B
1+A	N-a	$D_{(a)}$			
			$D_{(a)} - D_{(b)}$	b-1	B eliminando A
1+A+B	N-a-b+1	$D_{(b)}$			
			$D_{(b)} - D_{(c)}$	(a-1)(b-1)	AB eliminando A e B
1+A+B+AB	N-ab	$D_{(c)}$			

Nota : (a)=1+A, (b)=1+A+B, (c)=1+A+B+AB

De uma maneira análoga à feita em análise de variância pode-se construir uma tabela de análise de desvio. As diferenças de desvios e correspondentes graus de liberdade fornecem a redução no desvio com a adição de cada termo sucessivo e generaliza a análise de variância

sequencial para modelos lineares. Por exemplo, para um modelo fatorial com dois fatores, uma tabela de análise do desvio com 3 termos A, B e a interação AB está na Tabela 3. Se os dados provêm de uma distribuição normal, o desvio corresponde à soma de quadrados dos respectivos modelos. As diferenças sucessivas de desvios e graus de liberdade fornecem elementos para compor os numeradores de quocientes do tipo da expressão (3.19) que são usadas para testar os respectivos termos.

Os resíduos são também definidos para modelos lineares generalizados, obtendo-se, segundo o critério de definição geral dos resíduos, os de Pearson, os de Anscombe e os componentes do desvio.

A verificação da adequabilidade do modelo ("model checking") constitui uma área da estatística que ultimamente teve seu desenvolvimento acelerado devido, principalmente, às facilidades computacionais existentes no mercado. Um texto básico para a verificação da adequabilidade do modelo é o de ATKINSON (1985) e uma resenha mais recente desse assunto pode ser encontrada em, por exemplo, ATKINSON et alii (1989).

Diversos trabalhos tratam da extensão de técnicas de diagnóstico para o caso de MLG ou modelos de regressão generalizados. Entre eles estão os trabalhos de PIERCE & SCHAFER (1986), WILLIAMS (1987), WANG (1987), LEE (1988) e DAVISON (1989a). Devido a certas peculiaridades da distribuição binomial, os trabalhos de PREGIBON (1981), FOWLKES (1987) e DAVISON (1989b) tratam de técnicas de diagnósticos para dados binários.

Para a verificação da adequabilidade da função de ligação têm-se, por exemplo, os trabalhos de

PREGIBON (1980) e ATKINSON (1982).

3.4. O algoritmo de estimação

O algoritmo proposto por NELDER & WEDDERBURN (1972) para ajuste de modelos lineares generalizados corresponde à obtenção de estimativas de máxima verossimilhança dos parâmetros β no preditor linear η por mínimos quadrados ponderados iterativos.

Seja $\hat{\eta}^{(0)}$ a estimativa inicial do preditor linear que corresponde ao valor ajustado $\hat{\mu}^{(0)}$ obtido a partir da função de ligação $\eta=g(\mu)$. Seja $\tilde{z}^{(0)}$ a variável dependente ajustada definida por

$$z_i^{(0)} = \hat{\eta}_i^{(0)} + (y_i - \hat{\mu}_i^{(0)}) \left[\frac{d\eta}{d\mu} \right]^{(0)} \quad (3.20)$$

onde a derivada da função de ligação é calculada em $\hat{\mu}^{(0)}$. Seja, também, o peso quadrático definido por

$$\left[W_i^{(0)} \right]^{-1} = \left\{ \left[\frac{d\eta_i}{d\mu_i} \right]^{(0)} \right\}^2 V_i^{(0)} \quad (3.21)$$

onde $V_i^{(0)}$ é a função de variância calculada em $\hat{\mu}_i^{(0)}$. Agora faz-se a regressão de $\tilde{z}^{(0)}$ sobre as covariáveis $x_1, x_2, \dots, x_p$ com peso $W^{(0)}$ para se obterem as novas estimativas $\hat{\beta}^{(1)}$ dos parâmetros; dessa forma obtém-se uma nova estimativa de $\hat{\eta}^{(1)}$, do preditor linear. Repete-se o

processo até que as mudanças sejam mínimas.

A variável z é uma forma linearizada da função de ligação aplicada aos dados, ou seja,

$$g(y) \simeq g(\mu) + (y - \mu)g'(\mu). \quad (3.22)$$

Como ponto de partida recomenda-se o valor $\hat{\mu}^{(0)} = y$, que, em geral, faz com que a convergência do algoritmo seja mais rápida.

O algoritmo de ajuste utilizado é uma variante do método de Newton-Raphson, conhecido como método de escore.

Devido às suas características especiais, um sistema de ajuste iterativo de modelos lineares generalizados conhecido como GLIM ("Generalised Linear Interactive Modelling System") foi desenvolvido na Inglaterra pelo grupo NAG ("Numerical Algorithms Group Ltd"). A edição aqui utilizada é a 3.77 (PAYNE, 1986).

4. UMA MEDIDA MAIS GERAL DE HOMOGENEIDADE DE GRUPOS E ALGUMAS CONSEQUÊNCIAS

4.1. Introdução

Para a classe da família exponencial, uma estatística baseada no desvio é proposta como medida de homogeneidade de grupos.

Além do desvio mínimo para o modelo de grupos, uma generalização de estatísticas do tipo R^2 é deduzida para auxiliar na adaptação do algoritmo de agrupamento divisivo hierárquico nos casos das distribuições normal, Poisson e binomial.

O desenvolvimento de um teste da razão de verossimilhança para o caso geral é apresentado com o objetivo de generalização do procedimento de SCOTT & KNOTT (1974).

4.2. Uma extensão natural para a medida de homogeneidade de grupos

Para a classe de modelos que pertence à família exponencial na forma (3.11), pode-se utilizar como medida de discrepância no seu ajuste

$$D(y; \hat{\mu}) = \phi D^*(y; \hat{\mu}) =$$

$$= \sum_{i=1}^n 2 w_i [y_i (\tilde{\theta}_i - \hat{\theta}_i) - b(\tilde{\theta}_i) + b(\hat{\theta}_i)] \quad (4.1)$$

obtida a partir de (3.17) para $\alpha_i(\phi) = \phi/w_i$, e que corresponde à soma de quadrados de resíduos no modelo normal equiponderado. Quanto menor o desvio, a discrepância ou o resíduo, mais bem ajustado está o modelo.

Na situação específica de comparações de caselas pode-se dizer que quanto maior o desvio, mais heterogêneas são as caselas. Se o objetivo é encontrar uma medida de homogeneidade de grupos de caselas, o desvio entre dois grupos de caselas pode, então, ser usado.

Considere o modelo de um ensaio completamente ao acaso de K caselas ou tratamentos com n_k repetições por casela. O desvio do modelo associado, $D(y; \hat{\mu}_{1+K})$, pode ser expresso por

$$\begin{aligned} D(y; \hat{\mu}_{1+K}) &= \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} 2 w_{kj} \left[y_{kj} (\tilde{\theta}_{kj} - \hat{\theta}_k) - b(\tilde{\theta}_{kj}) + b(\hat{\theta}_k) \right] \\ &= 2 \left\{ \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - \sum_{k=1}^K \hat{\theta}_k \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} b(\tilde{\theta}_{kj}) - \sum_{k=1}^K b(\hat{\theta}_k) \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} \quad (4.2) \end{aligned}$$

onde, $\tilde{\theta}_{kj} = \theta(y_{kj})$ e $\hat{\theta}_k = \theta(\hat{\mu}_{kj})$. O número de graus de liberdade associado a (4.2) é $n-K$, com $n = \sum_{k=1}^K n_k$. O desvio do mesmo ensaio considerando todas as médias iguais entre si, $D(y; \hat{\mu}_1)$, tem $n-1$ graus de liberdade e pode ser expresso por

$$D(y; \hat{\mu}_1) = 2 \left\{ \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - \hat{\theta} \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \right] - \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} b(\tilde{\theta}_{kj}) - b(\hat{\theta}) \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} \quad (4.3)$$

onde, $\tilde{\theta}_{kj} = \theta(y_{kj})$ e $\hat{\theta} = \theta(\hat{\mu})$.

Pela expressão (3.19), a razão

$$R = \frac{\left[D(y; \hat{\mu}_1) - D(y; \hat{\mu}_{1+K}) \right] / (K-1)}{D(y; \hat{\mu}_{1+K}) / (n-K)} \quad (4.4)$$

pode ser usada para se testar a igualdade de médias das caselas uma vez que possui, assintoticamente, distribuição $F(K-1, n-K)$ sob H_0 , segundo JØRGENSEN (1983).

Considerando o caso específico de partição dicotômica do conjunto de índices $I = \{1, 2, \dots, K\}$, segundo a regra γ , cada partição d forma dois conjuntos de índices de caselas constituídos por $J(d)$ e $L(d)$. Seja, então, $D(y; \hat{\mu}_d)$ o desvio do modelo de dois grupos definidos pela partição d . A razão

$$\frac{D(y; \hat{\mu}_1) - D(y; \hat{\mu}_d)}{D(y; \hat{\mu}_d) / (n-2)} \quad (4.5)$$

pode ser usada para se testar a hipótese de igualdade de médias de dois grupos pré-fixados, quando comparada com uma distribuição F com 1 e $n-2$ graus de liberdade, tendo por base, também, a expressão (3.19).

A diferença no numerador de (4.5) é uma medida de homogeneidade de dois grupos, uma vez que $D(y; \hat{\mu}_d)$ é uma medida de discrepância do modelo de dois grupos.

Usando a expressão (4.1), sendo $\hat{\theta}_i = \theta(\hat{\mu}_d)$, tal que $\theta(\hat{\mu}_d) = \hat{\theta}_{J(d)}$ quando a i -ésima casela pertence ao conjunto $J(d)$ e $\theta(\hat{\mu}_d) = \hat{\theta}_{L(d)}$ quando ao conjunto $L(d)$, o desvio $D(y; \hat{\mu}_d)$ pode ser expresso por:

$$\begin{aligned} D(y; \hat{\mu}_d) &= 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \\ &\quad - \left[\sum_{J(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \hat{\theta}_{J(d)} - b(\hat{\theta}_{J(d)}) \right] + \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{L(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \hat{\theta}_{L(d)} - b(\hat{\theta}_{L(d)}) \right] \right] \right\} \\ &= 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - \left[\hat{\theta}_{J(d)} \sum_{J(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \hat{\theta}_{L(d)} \sum_{L(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \right] - \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} b(\tilde{\theta}_{kj}) - \right. \right. \end{aligned}$$

$$- \left[b(\hat{\theta}_{J(d)}) \sum_{J(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} + b(\hat{\theta}_{L(d)}) \sum_{L(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \Bigg] \Bigg\} \quad (4.6)$$

onde, $\sum_{J(d)}$ refere-se à soma das caselas que pertencem a $J(d)$ e $\sum_{L(d)}$, à soma das caselas que estão no conjunto $L(d)$.

Quanto menor o desvio $D(y; \hat{\mu}_d)$ mais heterogêneos serão os dois grupos formados pela partição d . Assim para se obter a partição que produz os dois grupos mais heterogeneos entre si, basta encontrar aquela que produz o menor desvio. Como $D(y; \hat{\mu}_1)$ é fixo para qualquer partição d , uma vez que representa o desvio de um modelo com apenas uma média para todas as caselas, a diferença

$$\Delta(\hat{\mu}_d) = D(y; \hat{\mu}_1) - D(y; \hat{\mu}_d) \quad (4.7)$$

pode ser utilizada, também, como medida de homogeneidade de dois grupos de caselas, e nesse caso quanto maior a diferença (4.7) mais heterogêneos serão os dois grupos.

A partir das expressões (4.3) e (4.6), a medida de homogeneidade dos dois grupos de caselas definida em (4.7) pode ser reescrita por:

$$\begin{aligned} \Delta(\hat{\mu}_d) &= D(y; \hat{\mu}_1) - D(y; \hat{\mu}_d) = \\ &= 2 \left\{ \left[\hat{\theta}_{J(d)} \sum_{J(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} + \hat{\theta}_{L(d)} \sum_{L(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \hat{\theta} \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \Big] - \Big[b(\hat{\theta}_{J(d)}) \sum_{J(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} + \\
& + b(\hat{\theta}_{L(d)}) \sum_{L(d)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \Big] \Big\} \quad (4.8)
\end{aligned}$$

A diferença $\Delta(\hat{\mu}_d)$ usada como uma medida de homogeneidade de dois grupos formados pela partição das K caselas, possui formas diferentes para cada distribuição, conforme será exposto nas próximas seções.

4.3. O caso normal

A expressão (4.1) representa o desvio para qualquer membro da família exponencial. Na distribuição normal o parâmetro de dispersão é $\phi = \sigma^2$, $b(\theta) = \theta^2/2$ e a função de ligação canônica é a identidade. Considerando que $w_{kj} = 1$, o desvio para um ensaio completamente casualizado com K tratamentos ou caselas e n_k repetições por casela, dado em (4.2), torna-se

$$\begin{aligned}
D(y; \hat{\mu}_{1+K}) &= 2 \left\{ \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj}^2 - \sum_{k=1}^K \bar{y}_k \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj}^2/2) - \sum_{k=1}^K \left[n_k (\bar{y}_k^2/2) \right] \right] \right\} \\
&= \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - \bar{y}_k)^2 \quad (4.9)
\end{aligned}$$

que corresponde à soma de quadrados do resíduo do referido modelo, uma vez que $\tilde{\theta}_{kj} = \tilde{\mu}_{kj} = y_{kj}$ e $\hat{\theta}_k = \hat{\mu}_k = \bar{y}_k$.

De maneira análoga, o desvio de um modelo de um ensaio completamente casualizado com K caselas e n_k observações por casela sob a hipótese de que todas as médias de caselas são iguais, dada em (4.3), torna-se a soma de quadrados total. Assim a expressão (4.4) no caso normal, representa a razão utilizada para se testar o efeito de média de caselas no modelo de um ensaio completamente ao acaso, que sob a hipótese nula tem distribuição $F(K-1, n-K)$.

Com relação ao desvio (4.6), que é uma medida de discrepância obtida pela partição d , tem-se que

$$D(y; \hat{\mu}_d) = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj}^2 - n_{J(d)} \bar{y}_{J(d)}^2 - n_{L(d)} \bar{y}_{L(d)}^2 \quad (4.10)$$

uma vez que

- $\tilde{\theta}_{kj} = \tilde{\mu}_{kj} = y_{kj}$,
- $\hat{\theta}_{J(d)} = \hat{\mu}_{J(d)} = \bar{y}_{J(d)} = \sum_{J(d)} n_k \bar{y}_k / n_{J(d)}$,
- $\hat{\theta}_{L(d)} = \hat{\mu}_{L(d)} = \bar{y}_{L(d)} = \sum_{L(d)} n_k \bar{y}_k / n_{L(d)}$,
- $\bar{y}_k = \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} / n_k$,
- $n_{J(d)} = \sum_{J(d)} n_k$,
- $n_{L(d)} = \sum_{L(d)} n_k$.

A expressão (4.10) corresponde à soma de quadrados de resíduos de um modelo com K caselas de n_k observações cada uma, que pela partição d nos índices produziu duas médias para cada grupo de caselas.

Quanto à diferença de desvios (4.8), no modelo com distribuição normal obtém-se

$$\Delta(\hat{\mu}_d) = n_{J(d)} \bar{y}_{J(d)}^{-2} + n_{L(d)} \bar{y}_{L(d)}^{-2} - n \bar{y}^{-2} \quad (4.11)$$

A expressão (4.11) corresponde à soma de quadrados entre dois grupos formados pela partição d de K caselas. Comparando (2.21) e (4.11), verifica-se que a diferença $\Delta(\hat{\mu}_d)$ reduz-se a $SQE(d)$, quando o grupo ancestral g tem como média $\bar{y}$.

7.4. O caso Poisson

Na distribuição de Poisson têm-se $\phi=1$ e $b(\theta)=\exp(\theta)$. No caso de um ensaio completamente ao acaso com K caselas e n_k repetições por casela, peso "a priori" $w_{kj}=1$, o desvio, considerando a função de ligação a natural, isto é, a logarítmica, torna-se

$$D(y; \hat{\mu}_{1+K}) = 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \ln(y_{kj}) - \sum_{k=1}^K n_k \bar{y}_k \ln(\bar{y}_k) \right\} \quad (4.12)$$

onde,

$$\bullet \hat{\theta}_{kj} = \ln(\hat{\mu}_{kj}) = \ln(y_{kj}) \text{ e}$$

$$\bullet \hat{\theta}_k = \ln(\hat{\mu}_k) = \ln(\bar{y}_k) .$$

De maneira análoga, $D(y; \hat{\mu}_1)$ representa o desvio do ensaio completamente ao acaso, sob a hipótese de que todas as médias de caselas são iguais. Com a distribuição de Poisson, ele pode ser escrito por

$$D(y; \hat{\mu}_1) = 2 \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \ln(y_{kj}) - n\bar{y} \ln(\bar{y}) \right] \quad (4.13)$$

onde,

$$\bullet \hat{\theta}_{kj} = \ln(\hat{\mu}_{kj}) = \ln(y_{kj}) \text{ e}$$

$$\bullet \hat{\theta} = \ln(\hat{\mu}) = \ln(\bar{y}).$$

Assim a expressão (4.4) no caso Poisson representa a razão

$$R = \left\{ \left[\sum_{k=1}^K n_k \bar{y}_k \ln(\bar{y}_k) - n\bar{y} \ln(\bar{y}) \right] / (K-1) \right\} / \left\{ \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \ln(y_{kj}) - \sum_{k=1}^K n_k \bar{y}_k \ln(\bar{y}_k) \right] / (n-K) \right\} \quad (4.14)$$

que tem distribuição assintótica $F(K-1, n-K)$ sob a hipótese de igualdade de médias de caselas.

Com relação ao desvio (4.6), que é uma

medida de discrepância obtida pela partição d , tem-se que

$$D(\bar{y}; \hat{\mu}_d) = 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \ln(y_{kj}) - \right. \\ \left. - n_{J(d)} \bar{y}_{J(d)} \ln(\bar{y}_{J(d)}) - n_{L(d)} \bar{y}_{L(d)} \ln(\bar{y}_{L(d)}) \right\} \quad (4.15)$$

onde,

$$\bullet \hat{\theta}_{J(d)} = \ln(\hat{\mu}_{J(d)}) = \ln(\bar{y}_{J(d)}) \text{ e}$$

$$\bullet \hat{\theta}_{L(d)} = \ln(\hat{\mu}_{L(d)}) = \ln(\bar{y}_{L(d)}) .$$

A expressão (4.15) é, então, a discrepância medida em termos do desvio de um modelo de um ensaio completamente ao acaso onde as médias das caselas formam dois grupos definidos pela partição d , no caso da distribuição de Poisson.

Quanto à diferença de desvios, $\Delta(\hat{\mu}_d)$, definida em (4.8), tem-se

$$\Delta(\hat{\mu}_d) = 2 \left[n_{J(d)} \bar{y}_{J(d)} \ln(\bar{y}_{J(d)}) + \right. \\ \left. + n_{L(d)} \bar{y}_{L(d)} \ln(\bar{y}_{L(d)}) - n \bar{y} \ln(\bar{y}) \right] \quad (4.16)$$

4.2.3. O caso binomial

Grande parte do desenvolvimento teórico

sobre dados binários, mesmo em McCULLAGH & NELDER (1989), considera a variável Y como o número de sucessos.

Assim, sendo $y_1, \dots, y_n$ os valores observados de variáveis aleatórias $Y_1, \dots, Y_n$, onde Y_i tem distribuição binomial de índice m_i e parâmetro π_i , o logaritmo da função de verossimilhança pode ser escrito por

$$\begin{aligned} l(\tilde{\pi}; y) &\propto \sum_{i=1}^n \left[y_i \ln(\pi_i / (1 - \pi_i)) + m_i \ln(1 - \pi_i) \right] \\ &= \sum_{i=1}^n \left[y_i \ln \pi_i + (m_i - y_i) \ln(1 - \pi_i) \right] \end{aligned} \quad (4.17)$$

A função desvio, que na distribuição binomial tem a mesma notação do desvio, é dada por

$$\begin{aligned} D(y; \hat{\pi}) &= 2 \left[l(\tilde{\pi}; y) - l(\hat{\pi}; y) \right] \\ &= 2 \sum_{i=1}^n \left\{ y_i \ln(y_i / \hat{\mu}_i) + (m_i - y_i) \ln((m_i - y_i) / (m_i - \hat{\mu}_i)) \right\} \end{aligned} \quad (4.18)$$

onde, $\hat{\mu}_i$ é o valor predito no modelo em questão.

Em um ensaio completamente ao acaso com K caselas e n_k repetições, seja y_{kj} o número de sucessos da j -ésima repetição da k -ésima casela, que possui distribuição binomial com índice m_{kj} e parâmetro π_{kj} . O logaritmo da função de verossimilhança é dado por

$$l(\tilde{\pi}; y) = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln \pi_{kj} + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (1 - \pi_{kj}) \right] \quad (4.19)$$

que atinge seu máximo quando $\tilde{\pi}_{kj} = y_{kj} / m_{kj}$, obtendo-se então

$$l(\hat{\pi}; y) = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln y_{kj} + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (m_{kj} - y_{kj}) - m_{kj} \ln m_{kj} \right] \quad (4.20)$$

Sob a hipótese de que o parâmetro π_{kj} é o mesmo para todas as repetições da mesma casela, obtém-se, de (4.19)

$$l(\pi_{\sim K+1}; y) = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln \pi_k + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (1 - \pi_k) \right] \quad (4.21)$$

que atinge seu máximo, considerando a função logito, em

$$\hat{\pi}_k = \bar{y}_k = (y_{k.} / m_{k.}) = \left[\sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \right] / \left[\sum_{j=1}^{n_k} m_{kj} \right] \quad (4.22)$$

e como valor esperado para cada observação

$$\hat{\mu}_{kj} = m_{kj} \bar{y}_k \quad (4.23)$$

Assim a expressão (4.21) calculada no seu ponto de máximo

é dada por

$$l(\hat{\pi}_{K+1}; y) = \sum_{k=1}^K \left[y_{k.} \ln \bar{y}_k + (m_{k.} - y_{k.}) \ln(1 - \bar{y}_k) \right]. \quad (4.24)$$

Dessa maneira, para o modelo de um ensaio completamente ao acaso com K caselas e n_k observações por casela, sendo y_{kj} o número de sucessos na j -ésima observação da k -ésima casela uma variável aleatória com distribuição binomial de índice m_{kj} e parâmetro π_k , a função desvio dada em (4.18) torna-se

$$\begin{aligned} D(y; \hat{\pi}_{1+K}) = & 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln y_{kj} + \right. \right. \\ & \left. \left. + (m_{kj} - y_{kj}) \ln(m_{kj} - y_{kj}) - m_{kj} \ln m_{kj} \right] - \right. \\ & \left. - \left[\sum_{k=1}^K \left[y_{k.} \ln \bar{y}_k + (m_{k.} - y_{k.}) \ln(1 - \bar{y}_k) \right] \right] \right\} \quad (4.25) \end{aligned}$$

Já para o modelo em que todas as caselas possuem o mesmo parâmetro π , o logaritmo da função de verossimilhança dado em (4.19), torna-se

$$\begin{aligned} l(\hat{\pi}_1; y) &= \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln \pi + (m_{kj} - y_{kj}) \ln(1 - \pi) \right] \\ &= y_{..} \ln \pi + (m_{..} - y_{..}) \ln(1 - \pi) \quad (4.26) \end{aligned}$$

onde, $y_{..} = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj}$ e $m_{..} = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} m_{kj}$. Seu máximo é atingido para

$$\hat{\pi} = \bar{y}_{..} = y_{..} / m_{..} \quad (4.27)$$

quando a função de ligação é a logito, e o valor esperado para cada observação é dado por

$$\hat{\mu}_{kj} = m_{kj} \bar{y}_{..} \quad (4.28)$$

Assim a função desvio do modelo completamente casualizado, sob a hipótese de que todas as médias de caselas são iguais é dada por

$$D(y; \hat{\pi}_1) = 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln y_{kj} + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (m_{kj} - y_{kj}) - m_{kj} \ln m_{kj} \right] - \left[y_{..} \ln \bar{y}_{..} + (m_{..} - y_{..}) \ln (1 - \bar{y}_{..}) \right] \right\} \quad (4.29)$$

Considerando o modelo completamente casualizado sob a hipótese de que as K médias de caselas formam dois grupos $J(d)$ e $L(d)$, definidos pela partição d do conjunto de índices $I = \{1, 2, \dots, K\}$, o logaritmo da função de verossimilhança é dado por

$$l(\pi_d, y) = \sum_{J(d)} \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln \pi_{L(d)} + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (1 - \pi_{J(d)}) \right] +$$

$$+ \sum_{L(d)} \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln \pi_{L(d)} + (m_{kj} - y_{kj}) \ln(1 - \pi_{L(d)}) \right] \quad (4.30)$$

Seu máximo é atingido quando

$$\hat{\pi}_{J(d)} = \sum_{J(d)} y_{k.} / \sum_{J(d)} m_{k.} = \bar{y}_{J(d)} \quad e$$

$$\hat{\pi}_{L(d)} = \sum_{L(d)} y_{k.} / \sum_{L(d)} m_{k.} = \bar{y}_{L(d)} \quad (4.31)$$

obtendo-se então

$$\begin{aligned} l(\hat{\pi}_d; y) &= \\ &= \left[\ln \bar{y}_{J(d)} \sum_{J(d)} y_{k.} + \left[\sum_{J(d)} (m_{k.} - y_{k.}) \right] \ln(1 - \bar{y}_{J(d)}) \right] + \\ &\quad + \left[\ln \bar{y}_{L(d)} \sum_{L(d)} y_{k.} + \left[\sum_{L(d)} (m_{k.} - y_{k.}) \right] \ln(1 - \bar{y}_{L(d)}) \right] \end{aligned} \quad (4.32)$$

O valor esperado de cada observação é, então, dado por

$$\hat{\mu}_{kj} = m_{kj} \bar{y}_{J(d)}, \text{ se } k \in J(d) \text{ e } \hat{\mu}_{kj} = m_{kj} \bar{y}_{L(d)}, \text{ se } k \in L(d). \quad (4.33)$$

A função desvio do modelo definido pela partição d é dada por

$$D(y; \hat{\pi}_d) =$$

$$\begin{aligned}
= 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln y_{kj} - (m_{kj} - y_{kj}) \ln (m_{kj} - y_{kj}) - \right. \right. \\
\left. \left. - m_{kj} \ln m_{kj} \right] - \left[\ln \bar{y}_{J(d)} \sum_{J(d)} y_{k.} + \right. \right. \\
\left. \left. + \ln (1 - \bar{y}_{J(d)}) \sum_{J(d)} (m_{k.} - y_{k.}) + \ln \bar{y}_{L(d)} \sum_{L(d)} y_{k.} + \right. \right. \\
\left. \left. + \ln (1 - \bar{y}_{L(d)}) \sum_{L(d)} (m_{k.} - y_{k.}) \right] \right\} \quad (4.34)
\end{aligned}$$

A função desvio (4.18) e suas decorrentes, têm o mesmo significado que a soma de quadrados de resíduos em modelos lineares ordinários. A adição de mais covariáveis no modelo tem o efeito de reduzir a função desvio.

Em diversas situações, a variável aleatória definida em (4.18) pode ser considerada distribuída assintoticamente como uma variável qui-quadrado com $n - \rho$ graus de liberdade, onde ρ é o número de parâmetros independentes sob H_0 .

Para se justificar tal fato usam-se duas suposições cuja relevância em qualquer aplicação deve ser verificada. A primeira delas refere-se à independência entre as observações da distribuição binomial, descartando a possibilidade de existir super dispersão. A segunda suposição diz respeito à aproximação que se faz em uma operação limite na qual $\dim(Y) = n$ é fixada, $m_i \rightarrow \infty$ para cada i , e no fato de que $m_i \pi_i (1 - \pi_i) \rightarrow \infty$.

Nesta última, a função desvio é aproximadamente independente dos parâmetros estimados $\hat{\beta}$ e

por essa razão aproximadamente independente das probabilidades ajustadas $\hat{\pi}$. Independência aproximada é essencial à função desvio considerada como uma estatística de ajuste do modelo, mas essa propriedade sozinha não garante um bom poder.

Se n é grande e $n_i \pi_i (1 - \pi_i)$ permanece limitada, toda essa teoria falha em dois aspectos: a aproximação de qui-quadrado limitante não mais acontece; e, o que é mais importante, a função desvio não é independente de $\hat{\pi}$ mesmo aproximadamente. Como consequência, um valor grande da função desvio pode ser obtido pela escolha de β e π . Em outras palavras um valor grande da função desvio pode não ser necessariamente considerado como uma evidência de um ajuste pobre. Em situações onde existe escassez ("sparseness", p_i pequeno) esse efeito surge com grande frequência.

Por essas razões a função desvio não é utilizada diretamente como uma medida absoluta do ajuste do modelo, mas sim, para comparar dois modelos encaixados. Sendo H_0 o modelo sob teste e H_a o modelo estendido que contém uma covariável adicional, a redução na função desvio

$$D(y; \hat{\mu}_0) - D(y; \hat{\mu}_a) = 2 \left[l(\hat{\mu}_a; y) - l(\hat{\mu}_0; y) \right] \quad (4.35)$$

é idêntica à estatística do teste da razão de verossimilhança para testar H_0 contra H_a . Essa estatística é distribuída assintoticamente como uma variável qui-quadrado com um grau de liberdade e independente de $\hat{\mu}$ sob a primeira suposição anteriormente

citada desde que n seja suficientemente grande ou que a segunda suposição esteja satisfeita. Em particular, $DC(Y; \hat{\mu}_0)$ não precisa ter distribuição aproximadamente qui-quadrado e nem precisa ser distribuída independentemente de $\hat{\mu}_0$.

Por essas razões, em vez de se construir uma estatística semelhante a (4.4), para a hipótese de igualdade de médias, deve-se preferir a diferença

$$\begin{aligned}
 DC(Y; \hat{\pi}_1) - DC(Y; \hat{\pi}_{1+K}) = \\
 = 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \left[y_{k.} \ln \bar{y}_k + (m_{k.} - y_{k.}) \ln(1 - \bar{y}_k) \right] - \right. \\
 \left. - \left[y_{..} \ln \bar{y}_{..} + (m_{..} - y_{..}) \ln(1 - \bar{y}_{..}) \right] \right\} \quad (4.36)
 \end{aligned}$$

que tem distribuição assintótica qui-quadrado com $(K-1)$ graus de liberdade.

Para uma partição particular d , a diferença $\Delta(\hat{\mu}_d)$ definida em (4.7) pode ser traduzida como uma medida de homogeneidade dos dois grupos formados pelos índices de caselas. Quanto maior essa diferença, mais homogêneos serão os dois grupos internamente e heterogêneos entre si. Neste caso,

$$\begin{aligned}
 \Delta(\hat{\pi}_d) = \\
 = 2 \left\{ \left[\ln \bar{y}_{J(d)} \sum_{J(d)} y_{k.} + \ln(1 - \bar{y}_{J(d)}) \sum_{J(d)} (m_{k.} - y_{k.}) \right] + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \ln \bar{y}_{L(d)} \sum_{L(d)} y_{k.} + \ln(1 - \bar{y}_{L(d)}) \sum_{L(d)} (m_{k.} - \bar{y}_{k.}) \Big] - \\
& - \left[y_{..} \ln \bar{y}_{..} + (m_{..} - y_{..}) \ln(1 - \bar{y}_{..}) \right] \Big\} \quad (4.37)
\end{aligned}$$

tem distribuição assintótica qui-quadrado com um grau de liberdade sob a hipótese de que as médias dos dois grupos de caselas definidos pela partição d são iguais.

4.6. A escolha da divisão mais promissora

A partição mais fina aceitável das observações é aquela definida para cada casela ou tratamento formando um grupo e, a mais elementar, é aquela que corresponde a um único grupo. Um caso intermediário é aquele em que os K tratamentos estão divididos em G grupos.

Supondo que já ocorreram $G-1$ partições dicotômicas aplicadas sucessivamente ao conjunto de índices $I = \{1, 2, \dots, K\}$, sejam $\Pi(1), \Pi(2), \dots, \Pi(G)$, os G subconjuntos formados de tal modo que

$$\begin{aligned}
& \cdot \Pi(i) \cap \Pi(j) = \emptyset, \quad \forall i \neq j, \quad i, j = 1, 2, \dots, G \text{ e } \bigcup_{i=1}^G \Pi(i) = I \\
& \hspace{25em} (4.38)
\end{aligned}$$

Considerando que em cada subconjunto $\Pi(i)$, $i = 1, \dots, G$, as médias das caselas são iguais, seja $D(y; \hat{\mu}_{1+G})$ o desvio de

um modelo com K caselas divididas em G grupos de índices formados por $\Pi(1), \dots, \Pi(G)$.

Usando as expressões (4.1), (4.2) e (4.6) pode-se escrever

$$\begin{aligned}
 D(y; \hat{\mu}_{1+G}) &= 2 \left\{ \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \hat{\theta}_i - b(\hat{\theta}_i) \right] \right\} = \\
 &= 2 \left\{ \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \left[\sum_{i=1}^G \hat{\theta}_i \left[\sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \right] - \sum_{i=1}^G b(\hat{\theta}_i) \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} \quad (4.39)
 \end{aligned}$$

onde, $\tilde{\theta}_{kj} = \theta(y_{kj})$ é o estimador de máxima verossimilhança no modelo com n parâmetros e $\hat{\theta}_i = \theta(\hat{\mu}_i)$, $i=1,2,\dots,G$, é o estimador de máxima verossimilhança no modelo de G grupos. O número de graus de liberdade associado a (4.39) é $n-G$, com $n = \sum_{k=1}^K n_k$.

De modo análogo, o desvio do mesmo modelo considerando todas as G médias de grupos iguais entre si, $D(y; \hat{\mu}_1)$, tem $n-1$ graus de liberdade e pode ser expresso por

$$D(y; \hat{\mu}_1) = 2 \left\{ \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right.$$

$$- \left[\hat{\theta} \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \} \quad (4.40)$$

onde, $\hat{\theta} = \theta(\hat{\mu}_1)$.

Mostra-se, facilmente, que o desvio do modelo de G grupos varia entre o desvio do modelo que corresponde à partição mais fina com K grupos, e o desvio do modelo que corresponde à partição mais rudimentar com um único grupo.

Supondo, sem perda de generalidade, que a próxima divisão ocorre no G -ésimo grupo, o conjunto de índices I está partido em $G+1$ subconjuntos disjuntos formados de tal modo que

$$\bullet \Pi(i) \cap \Pi(j) = \emptyset, \quad \forall i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, G-1, G_1, G_2 \quad \text{e}$$

$$\bullet \left[\bigcup_{i=1}^{G-1} \Pi(i) \right] \cup \left[\Pi(G_1) \right] \cup \left[\Pi(G_2) \right] = I \quad (4.41)$$

Considerando que em cada subconjunto $\Pi(i)$, $i=1, \dots, G-1, G_1, G_2$, as médias das caselas são iguais, seja $D(y; \hat{\mu}_{1+(G+1)})$ o desvio de um modelo com K caselas divididas em $(G+1)$ grupos de índices formados por $\Pi(1), \dots, \Pi(G-1), \Pi(G_1), \Pi(G_2)$, que pode ser reescrito por

$$D(y; \hat{\mu}_{1+(G+1)}) = 2 \left\{ \left[\sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] \right] - \right.$$

$$\begin{aligned}
& - \left[\sum_{i=1}^{G-1} \hat{\theta}_i \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \sum_{i=1}^{G-1} b(\hat{\theta}_i) \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] + \\
& + \left[\sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \\
& \left. - \left[\sum_l \hat{\theta}_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \sum_l b(\hat{\theta}_l) \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right] \Bigg\} \quad (4.42)
\end{aligned}$$

onde,

- $\sum_l$ é a forma abreviada para $\sum_{l \in \{G_1, G_2\}}$,
- $\tilde{\theta}_{kj} = \theta(y_{kj})$,
- $\hat{\theta}_i = \theta(\hat{\mu}_i)$, $i=1, \dots, G-1$
- $\hat{\theta}_l = \theta(\hat{\mu}_l)$, $l=G_1, G_2$.

O número de graus de liberdade associado a (4.42) é $n-(G+1)$.

De modo análogo, o desvio do mesmo modelo considerando todas as $(G+1)$ médias de dois grupos iguais entre si, $D(y; \hat{\mu}_1)$ em (4.40) pode ser reescrito por

$$D(y; \hat{\mu}_1) = 2 \left\{ \left[\sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& - \left[\hat{\theta} \sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] + \\
& + \left[\sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \\
& \left. - \left[\hat{\theta} \sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right] \Bigg\} \\
& \quad (4.43)
\end{aligned}$$

onde, $\hat{\theta} = \theta(\hat{\mu}_1)$.

A diferença dos desvios (4.39) e (4.42) pode ser expressa por

$$\begin{aligned}
\Delta(\hat{\mu}_{G+1}) &= \\
&= D(\mathcal{Y}; \hat{\mu}_{1+G}) - D(\mathcal{Y}; \hat{\mu}_{1+(G+1)}) = \\
&= 2 \left\{ \left[\sum_l \hat{\theta}_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \sum_l b(\hat{\theta}_l) \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \left[\hat{\theta}_G \sum_{k \in \Pi(G)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}_G) \sum_{k \in \Pi(G)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} \\
&\quad (4.44)
\end{aligned}$$

onde,

• $\hat{\theta}_l = \theta(\hat{\mu}_l)$, para $l = G_1, G_2$ e

• $\hat{\theta}_G = \theta(\hat{\mu}_G)$.

A expressão (4.44) é útil no cálculo da proporção explicada do desvio na aplicação do método de agrupamento hierárquico divisivo e representa a contribuição que a G -ésima divisão pode dar para o cálculo de $R^2(G+1)$.

Supondo que o método de agrupamento divisivo hierárquico foi aplicado obtendo-se uma partição formada por G grupos de I de tal modo que

$$I = \bigcup_{g=1}^G I_g \quad (4.45)$$

cada partição d de $\Psi(I_g, \gamma)$ tem associada a redução $\Delta(\hat{\mu}_d)$ que é obtida, por exemplo, pela expressão (4.44). Seja $B(I_g, \gamma)$ o máximo entre as reduções $\Delta(\hat{\mu}_d)$, isto é

$$B(I_g, \gamma) = \max \left\{ \Delta(\hat{\mu}_d) : d \in \Psi(I_g, \gamma) \right\} \quad (4.46)$$

A partição d_0 tal que

$$\Delta(\hat{\mu}_{d_0}) = B(I_g, \gamma) \quad (4.47)$$

pode ser considerada como a divisão dicotômica mais promissora.

Nos próximos capítulos a estatística $\Delta(\hat{\mu}_{d_0})$ é estudada quanto a sua distribuição, uma vez que sua significância pode ser considerada como uma das regras de parada no algoritmo de divisão dicotômica

hierárquica.

5. UMA DEFINIÇÃO MAIS GERAL DAS ESTATÍSTICAS E UMA ADAPTAÇÃO AO ALGORITMO DE AGRUPAMENTO DIVISIVO HIERÁRQUICO.

5.1. Introdução

A partir da medida de homogeneidade de grupos $\Delta(\hat{\mu}_{g+1})$, definida em (4.44), é possível generalizar a estatística R^2 , que no caso de distribuição normal é conhecida como coeficiente de determinação. Essas duas formas são utilizadas na adaptação do algoritmo de agrupamento divisivo hierárquico. O teste da razão de máxima verossimilhança também é deduzido como uma extensão do teste de SCOTT & KNOTT (1974) para um modelo linear generalizado.

5.2. A estatística R^2 generalizada

A medida da informação contida no modelo pode ser expressa pela estatística R^2 generalizada, que corresponde à proporção do desvio explicada pelo modelo de G grupos em relação ao modelo mais rudimentar.

Utilizando as expressões (4.39) e (4.40) a proporção do desvio pode ser obtida por

$$R^2(G) = 1 - D(y; \hat{\mu}_{1+G}) / D(y; \hat{\mu}_1) \quad (5.1)$$

Demonstra-se que

$$0 = R^2(1) \leq R^2(G) \leq R^2(K) \leq 1 \quad (5.2)$$

Outra forma reduzida no intervalo $[0,1]$ é dada por

$$R^2_*(G) = \frac{D(y; \hat{\mu}_1) - D(y; \hat{\mu}_{1+G})}{D(y; \hat{\mu}_1) - D(y; \hat{\mu}_{1+K})} = \frac{R^2(G)}{R^2(K)} \quad (5.3)$$

que pode ser interpretada como a proporção padronizada do desvio explicada na formação de tais modelos.

Utilizando as expressões (4.39) e (4.40), obtém-se

$$\begin{aligned} R^2(G) = & \left\{ \left[\sum_{i=1}^G \hat{\theta}_i \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \sum_{i=1}^G b(\hat{\theta}_i) \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] - \right. \\ & \left. - \left[\hat{\theta} \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} / \\ & / \left\{ \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \end{aligned}$$

$$- \left[\hat{\theta} \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \} \quad (5.4)$$

e

$$\begin{aligned} R_{*}^2(G) = & \left\{ \left[\sum_{i=1}^G \hat{\theta}_i \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \sum_{i=1}^G b(\hat{\theta}_i) \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] - \left[\hat{\theta} \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \right. \right. \\ & \left. \left. - b(\hat{\theta}) \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} / \left\{ \left[\sum_{k=1}^K \hat{\theta}_k \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \sum_{k=1}^K b(\hat{\theta}_k) \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] - \right. \\ & \left. \left[\hat{\theta} \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} \quad (5.5) \end{aligned}$$

sendo que nesta última a expressão (4.2) também foi utilizada.

Supondo, sem perda de generalidade, que a próxima divisão ocorre no G -ésimo grupo, a proporção do desvio explicada na formação de um modelo de K caselas divididas em $(G+1)$ grupos pode ser escrita por

$$\begin{aligned} R^2(G+1) = & \left\{ \left[\sum_{i=1}^{G-1} \hat{\theta}_i \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - \sum_{i=1}^{G-1} b(\hat{\theta}_i) \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] - \right. \\ & \left. \left[\hat{\theta} \sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left[\hat{\theta} \sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] + \\
& + \left[\left[\sum_l \hat{\theta}_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} \right] - \sum_l b(\hat{\theta}_l) \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] - \\
& - \left[\hat{\theta} \sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \Bigg] \Bigg\} / \\
& / \left\{ \left[\sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \right. \\
& - \left[\hat{\theta} \sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{i=1}^{G-1} \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \Bigg] + \\
& + \left[\sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \left[y_{kj} \tilde{\theta}_{kj} - b(\tilde{\theta}_{kj}) \right] - \right. \\
& - \left. \left[\hat{\theta} \sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_l \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right] \Bigg\} \\
& \quad (5.6)
\end{aligned}$$

quando se utilizam as expressões (4.42) e (4.43).

Comparando as expressões (5.4) e (5.6), de $R^2(G)$ e $R^2(G+1)$, respectivamente, percebe-se que o denominador tem a mesma forma, e o numerador difere apenas na notação da $(G+1)$ -ésima partição do grupo G , para a notação da G -ésima partição que dividiu o grupo G em G_1 e G_2 . O denominador da diferença entre as proporções explicadas do desvio na $(G+1)$ -ésima partição e na G -ésima partição corresponde à diferença $\Delta(\hat{\mu}_{G+1})$,

definida em (4.44).

Logo para se calcular $R^2(G+1)$, recursivamente, basta ter o valor de $R^2(G)$ e $\Delta(\hat{\mu}_{G+1})$, onde este último corresponde à medida de homogeneidade entre dois grupos, G_1 e G_2 , a partir do grupo ancestral G . Desse modo, pode-se redefinir (5.6) como

$$R^2(G+1) = R^2(G) + \Delta(\hat{\mu}_{G+1}) / D(\hat{y}; \hat{\mu}_1) \quad (5.7)$$

Para otimizar a formação de grupos homogêneos pode-se encontrar a partição d_0 tal que $\Delta(\hat{\mu}_d)$ seja máxima, para um número fixado G , ou então encontrar a partição de caselas tal que tenha o menor número de grupos G para um nível fixado $D(\hat{y}; \hat{\mu}_{1+G})$.

Tanto na primeira como na segunda situação a busca da partição ótima será feita através da aplicação de método de agrupamento divisivo hierárquico.

5.2.1. O caso normal

Quando o parâmetro de dispersão é $\phi = \sigma^2$, $b(\theta) = \theta^2/2$, a expressão (3.11) torna-se a função densidade da distribuição normal. Dessa maneira, a proporção do desvio explicada na formação de um modelo de um ensaio completamente ao acaso com K caselas e n_k observações por casela, agrupadas em G grupos dada em (5.4), torna-se

$$R^2(G) = \left[\sum_{i=1}^G n_i \bar{y}_i^2 - n \bar{y}^2 \right] / \left[\sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj}^2 - n \bar{y}^2 \right] \quad (5.8)$$

onde,

$$\bullet \hat{\theta}_i = \theta(\hat{\mu}_i) = \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} / n_i = \bar{y}_i, \quad i=1,2,\dots,G,$$

$$\bullet n_i = \sum_{k \in \Pi(i)} n_k,$$

• a função de ligação é a canônica e

$$\bullet w_{kj} = 1.$$

O numerador da expressão (5.8) corresponde à soma de quadrados de um modelo de K caselas que possui G médias distintas. O denominador de (5.8) corresponde à soma de quadrados total. Assim a expressão (5.8) equivale ao coeficiente de determinação, em geral indicado por r^2 (HOFFMANN & VIEIRA, 1987), de um modelo de regressão formado por K médias onde G delas são distintas.

Quanto à proporção do desvio explicada padronizada, (5.5), tem-se

$$R_*^2(G) = \left[\sum_{i=1}^G n_i \bar{y}_i^2 - n \bar{y}^2 \right] / \left[\sum_{k=1}^K n_k \bar{y}_k^2 - n \bar{y}^2 \right] \quad (5.9)$$

que corresponde à razão entre a soma de quadrados entre grupos e a soma de quadrados entre caselas.

Para cada nova divisão, a expressão (4.44), no caso da distribuição normal, é calculada por

$$\Delta(\hat{\mu}_{G+1}^2) = n_{g_1} \bar{y}_{g_1}^2 + n_{g_2} \bar{y}_{g_2}^2 - n_g \bar{y}_g^2 \quad (5.10)$$

onde,

$$\bar{y}_l = \sum_{k \in \Pi(l)} \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} / n_l \text{ e}$$

$$n_l = \sum_{k \in \Pi(l)} n_k, \text{ para } l = G, G_1, G_2.$$

Comparando as expressões (2.21), (4.11) e (5.10) pode-se dizer que elas representam a soma de quadrados entre dois grupos em relação ao seu ancestral e servem para calcular o novo valor da estatística R^2 após essa nova divisão. Desse modo a expressão (5.7) torna-se

$$R^2(G+1) = R^2(G) + \left[n_{G_1} \bar{y}_{G_1}^{-2} + n_{G_2} \bar{y}_{G_2}^{-2} - n_G \bar{y}_G^{-2} \right] /$$

$$/ \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj}^2 - n \bar{y}^{-2} \right] \quad (5.11)$$

5.2.2. O caso Poisson

Quando a variável aleatória tem distribuição de Poisson a proporção do desvio explicada na formação de um modelo de um ensaio completamente ao acaso com K caselas, n_k observações por casela, agrupadas em G grupos, dado em (5.4), torna-se, considerando a ligação logarítmica que é a natural, e $w_{kj} = 1$,

$$R^2(G) = \left[\sum_{i=1}^G n_i \bar{y}_i \ln \bar{y}_i - n\bar{y} \ln \bar{y} \right] /$$

$$/ \left[\sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \ln y_{kj} - n\bar{y} \ln \bar{y} \right] \quad (5.12)$$

onde, $\hat{\theta}_i = \theta(\hat{\mu}_i) = \ln \bar{y}_i$, $i=1, \dots, G$.

O numerador da expressão (5.12) corresponde à diferença de desvios de um modelo completamente ao acaso quando todas as médias são consideradas iguais entre si e quando as K caselas possuem G médias distintas.

Quanto à proporção explicada do desvio padronizada (5.5), obtém-se

$$R_*^2(G) = \left[\sum_{i=1}^G n_i \bar{y}_i \ln \bar{y}_i - n\bar{y} \ln \bar{y} \right] /$$

$$/ \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} n_k \bar{y}_k \ln \bar{y}_k - n\bar{y} \ln \bar{y} \right] \quad (5.13)$$

que corresponde à razão entre a diferença de desvios do modelo com G médias e uma média, e a diferença de desvios do modelo com K médias e uma média.

Para cada divisão a expressão (4.44) é calculada. No caso Poisson, ela é da forma

$$\Delta(\hat{\mu}_{G+1}) =$$

$$= 2 \left[n_{g_1} \bar{y}_{g_1} \ln \bar{y}_{g_1} + n_{g_2} \bar{y}_{g_2} \ln \bar{y}_{g_2} - n_g \bar{y}_g \ln \bar{y}_g \right] \quad (5.14)$$

onde,

$$\bar{y}_l = \sum_{k \in \Pi(l)} \frac{\sum_{j=1}^{n_k} y_{kj}}{n_l} \text{ e}$$

$$n_l = \sum_{k \in \Pi(l)} n_k, \text{ para } l = G, G_1, G_2.$$

Comparando (4.16) com (5.14), pode-se dizer que elas representam a diferença de desvios entre dois grupos em relação ao seu ancestral, e a expressão (5.7) pode ser obtida por

$$R^2(G+1) = R^2(G) + \left[n_{G_1} \bar{y}_{G_1} \ln \bar{y}_{G_1} + n_{G_2} \bar{y}_{G_2} \ln \bar{y}_{G_2} - n_{G_1} \bar{y}_G \ln \bar{y}_G \right] / \left[\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} - n \bar{y} \ln \bar{y} \right] \quad (5.15)$$

uma vez que (5.14) já foi calculada quando da divisão do conjunto de índices G em G_1 e G_2 .

5.2.3. O caso binomial

A função desvio (3.6) é utilizada quando a variável de interesse tem distribuição binomial, tendo, porém, a mesma notação do desvio.

Sendo um ensaio completamente ao acaso com K caselas e n_k observações por casela, sob a hipótese de

que o conjunto de índices de caselas, I , está subdividido em G subconjuntos disjuntos, $\Pi(i)$, $i = 1, 2, \dots, G$, de tal modo que sua união dá o próprio conjunto I , o parâmetro π_{kj} é da forma $\pi_{kj} = \pi_i$ se $k \in \Pi(i)$, $\forall i, j, k$. Logo o logaritmo da função de verossimilhança é dado, então, por

$$\begin{aligned} l(\pi_{1+G}; y) &= \\ &= \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln \pi_i + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (1 - \pi_i) \right] \end{aligned} \quad (5.16)$$

que atinge seu máximo, considerando a função de ligação canônica, em

$$\begin{aligned} \hat{\pi}_i = \bar{y}_i &= \left[\sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} y_{kj} \right] / \left[\sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} m_{kj} \right] = \\ &= \left[\sum_{k \in \Pi(i)} y_{k.} \right] / \left[\sum_{k \in \Pi(i)} m_{k.} \right] = y_i / m_i \end{aligned} \quad (5.17)$$

e como valor predito de cada observação

$$\hat{\mu}_{kj} = m_{kj} \bar{y}_i, \text{ se } k \in \Pi(i) \quad (5.18)$$

Assim a expressão (5.16) calculada no seu ponto de máximo é dada por

$$l(\hat{\pi}_{1+G}; y) =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^G \sum_{k \in \Pi(i)} \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln \bar{y}_i + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (1 - \bar{y}_i) \right] \\
&= \sum_{i=1}^G \left[y_i \ln \bar{y}_i + (m_i - y_i) \ln (1 - \bar{y}_i) \right] \quad (5.19)
\end{aligned}$$

Utilizam-se as expressões (4.20) e (5.19) para se obter a função desvio

$$\begin{aligned}
D(y; \hat{\pi}_{1+G}) &= \\
&= 2 \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln y_{kj} + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (m_{kj} - y_{kj}) - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - m_{kj} \ln m_{kj} \right] - \sum_{i=1}^G \left[y_i \ln \bar{y}_i + (m_i - y_i) \ln (1 - \bar{y}_i) \right] \right\} \quad (5.20)
\end{aligned}$$

A estatística $R^2(G)$, que corresponde à proporção do desvio explicada pelo modelo de G grupos em relação ao modelo mais elementar, pode ser obtida usando as expressões (4.29) e (5.19).

$$\begin{aligned}
R^2(G) &= \left\{ \sum_{i=1}^G \left[y_i \ln \bar{y}_i + (m_i - y_i) \ln (1 - \bar{y}_i) \right] - \right. \\
&\quad \left. - \left[y_{..} \ln \bar{y} + (m_{..} - y_{..}) \ln (1 - \bar{y}) \right] \right\} / \\
&\quad / \left\{ \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} \left[y_{kj} \ln y_{kj} + (m_{kj} - y_{kj}) \ln (m_{kj} - y_{kj}) - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - m_{kj} \ln m_{kj} \right] - \left[y_{..} \ln \bar{y} + (m_{..} - y_{..}) \ln (1 - \bar{y}) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$- m_{kj} \ln m_{kj} \Big] - \left[y_{..} \ln \bar{y} + (m_{..} - y_{..}) \ln (1 - \bar{y}) \right] \Big\} \quad (5.21)$$

A proporção padronizada do desvio explicada na formação de modelos de G grupos pode ser obtida por

$$\begin{aligned} R_{*}^2(G) = & \left\{ \sum_{i=1}^G \left[y_i \ln \bar{y}_i + (m_i - y_i) \ln (1 - \bar{y}_i) \right] - \right. \\ & \left. - \left[y_{..} \ln \bar{y} + (m_{..} - y_{..}) \ln (1 - \bar{y}) \right] \right\} / \\ & / \left\{ \sum_{k=1}^K \left[y_k \ln \bar{y}_k + (m_k - y_k) \ln (1 - \bar{y}_k) \right] - \right. \\ & \left. - \left[y_{..} \ln \bar{y} + (m_{..} - y_{..}) \ln (1 - \bar{y}) \right] \right\} \quad (5.22) \end{aligned}$$

Supondo, sem perda de generalidade que a G -ésima divisão ocorre no subconjunto $\Pi(\alpha)$, então o conjunto de índices I está partido em $G+1$ subconjuntos disjuntos, $\Pi(i)$, $i=1, \dots, G-1, G_1, G_2$, seguindo as expressões (4.41).

Assim, para um modelo de K caselas divididas em $G+1$ grupos, a função desvio pode ser escrita por

$$D(y; \hat{\pi}_{1+(G+1)}) =$$

$$= 2 \left\{ l(\tilde{\pi}; y) - \left[\sum_{i=1}^{G-1} \left[y_i \ln \bar{y}_i + (m_i - y_i) \ln (1 - \bar{y}_i) \right] + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_l \left[y_{\alpha_l} \ln \bar{y}_{\alpha_l} + (m_{\alpha_l} - y_{\alpha_l}) \ln (1 - \bar{y}_{\alpha_l}) \right] \right] \right\} \quad (5.23)$$

E portanto o numerador da proporção da função desvio explicada na formação do modelo de $G+1$ grupos é da forma

$$D(y; \tilde{\pi}_1) - D(y; \tilde{\pi}_{1+(G+1)}) = 2 \left[l(\hat{\pi}_{1+(G+1)}; y) - l(\hat{\pi}_1; y) \right] = \\ = 2 \left\{ \left[\sum_{i=1}^{G-1} \left[y_i \ln \bar{y}_i + (m_i - y_i) \ln (1 - \bar{y}_i) \right] + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_l \left[y_{\alpha_l} \ln \bar{y}_{\alpha_l} + (m_{\alpha_l} - y_{\alpha_l}) \ln (1 - \bar{y}_{\alpha_l}) \right] - \right. \right. \\ \left. \left. - \left[y_{..} \ln \bar{y} + (m_{..} - y_{..}) \ln (1 - \bar{y}) \right] \right\} \quad (5.24)$$

A expressão (5.24) quando comparada com o numerador da expressão (5.21) é quase que a mesma, a não ser a contribuição do G -ésimo grupo, nesta última, e a contribuição dos grupos descendentes G_1 e G_2 , na primeira. Então para estudar a diferença $R^2(G+1) - R^2(G)$, basta examinar a diferença dos numeradores, $\Delta(\hat{\pi}_{G+1})$, uma vez que os denominadores são iguais.

$$\Delta(\hat{\pi}_{G+1}) = 2 \left\{ \left[y_{G_1} \ln \bar{y}_{G_1} + (m_{G_1} - y_{G_1}) \ln (1 - \bar{y}_{G_1}) \right] + \right.$$

$$+ \left[y_{G_2} \ln \bar{y}_{G_2} + (m_{G_2} - y_{G_2}) \ln (1 - \bar{y}_{G_2}) \right] -$$

$$- \left[y_G \ln \bar{y}_G + (m_G - y_G) \ln (1 - \bar{y}_G) \right] \} \quad (5.25)$$

Com esses resultados, para calcular $R^2(G+1)$, basta ter o valor de $R^2(G)$ e $\Delta(\hat{\pi}_{G+1})$, que corresponde à medida de homogeneidade entre dois grupos, G_1 e G_2 , a partir do grupo ancestral G , de acordo com a forma (4.34). Assim (5.21) pode ser definida recursivamente por

$$R^2(G+1) = R^2(G) + \Delta(\hat{\pi}_{G+1}) / D(y; \hat{\pi}_1) \quad (5.26)$$

5.3. O algoritmo de agrupamento hierárquico divisivo

Conforme apresentado no Capítulo 2, o método de agrupamento hierárquico divisivo é um procedimento simples, composto de três passos:

1. No início todas as caselas estão em um único agrupamento. Por algum procedimento ótimo esse grupo pode ser dividido em dois.

2. Outro critério de seleção escolhe um (ou os dois) dos grupos resultantes e divide-os novamente.

3. O passo anterior é repetido até que o número total de grupos final é atingido ou alguma regra de parada é satisfeita.

No primeiro passo, o agrupamento homogêneo para uma única variável preditora, com ou sem restrições nas partições, usado nas técnicas propostas por FISHER (1958), pode ser visto como formador do conjunto de partições donde será escolhida a partição ótima.

No caso de se usar uma regra com restrição, o conjunto de partições dicotômicas é formado naturalmente pelas condições impostas. No caso de ser sem restrição nas partições dicotômicas, a busca pode se restringir ao subconjunto das partições formadas a partir da regra monotônica, que em última instância forma os grupos dicotômicos ordenando as observações de acordo com o valor médio estimado para cada casela.

Como critério de seleção do grupo a ser formado, pode-se utilizar :

- o grupo cuja partição apresente o menor desvio, ou função desvio no caso binomial, sobre todas as partições dicotômicas analisadas, que corresponde ao máximo da estatística $\Delta(\hat{\mu}_d)$;

- ou o grupo cuja partição apresente a estatística $\Delta(\hat{\mu}_d)$ mais significativa, sobre todos os possíveis grupos.

No que diz respeito à regra de parada, pode-se utilizar:

- um número G de grupos, pré-estabelecido;

• ou uma estatística baseada no desvio, que de alguma maneira deve ser julgada. Tanto a estatística R^2 , como a estatística R_*^2 podem ser usadas, bem como a significância do máximo da estatística $\Delta(\hat{\mu}_d)$.

■

Em algumas alternativas apresentadas, o julgamento de uma estatística se faz necessário. No caso de estatísticas do tipo R^2 um ganho relativo mínimo pode ser aplicado empiricamente, como na Subseção 2.5.2. Já para o julgamento do máximo da estatística $\Delta(\hat{\mu}_d)$, torna-se necessário conhecer sua distribuição.

5.4. Uma generalização do teste de SCOTT & KNOTT (1974)

Usando a dedução de um teste da razão de máxima verossimilhança pretende-se estender o teste de SCOTT & KNOTT (1974) para um modelo linear generalizado, no caso específico do preditor linear representar a média de caselas, em um ensaio completamente ao acaso com K tratamentos e n_k observações por casela.

Todas as observações pertencem ao mesmo membro da família exponencial, cuja densidade é da forma (3.11), diferindo apenas, em termos da esperança de cada casela, μ_k .

Uma regra γ é definida para a obtenção da divisão dicotômica. Na análise do desvio rejeitou-se a hipótese de igualdade de médias das caselas e existem fortes evidências de que elas possam ser divididas em

dois grupos homogêneos distintos.

Dessa maneira parece razoável testar a hipótese de igualdade de média de caselas contra a alternativa de que o conjunto de médias assume apenas dois valores.

Assim para o conjunto de índices $I=\{1, \dots, K\}$, qualquer partição $d \in \mathcal{K}(I, \gamma)$ implicará que a média das caselas é dada por $\mu_k = m_J$ se $k \in J(d)$ ou $\mu_k = m_L$ se $k \in L(d)$, no espaço de parâmetros $(\mu_1, \dots, \mu_K)$.

Seja $l(\hat{\mu}_1; y)$ o logaritmo da função de verossimilhança maximizado sobre β para um valor da hipótese nula tal que

$$H_0: \mu_k = m, \quad k \in I, \quad (5.27)$$

que pode ser expresso por

$$l(\hat{\mu}_1; y) = \left\{ \hat{\theta} \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right\} / \phi_0 + \\ + \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} c(y_{kj}, \phi_0) \quad (5.28)$$

onde, $\hat{\theta} = \theta(\hat{\mu}_1)$ é o estimador de máxima verossimilhança e $a_{kj}(\phi_0) = \phi_0 / w_{kj}$. Considere, também, $l(\hat{\mu}_d; y)$ o logaritmo da verossimilhança maximizado sobre β para um valor da hipótese alternativa

$$H_a: \mu_k = \begin{cases} m_J & \text{se } k \in J(d) \\ m_L & \text{se } k \in L(d) \end{cases} \quad (5.29)$$

para algum $d \in \Psi(I, \gamma)$ onde m_J e m_L são as médias desconhecidas de dois grupos. O logaritmo da função de verossimilhança calculado no ponto de máximo sob a hipótese alternativa é dado por

$$\begin{aligned}
 l(\hat{\mu}_{d_0}; y) = & \\
 = & \left\{ \left[\hat{\theta}_{J(d_0)} \sum_{J(d_0)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}_{J(d_0)}) \sum_{J(d_0)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] + \right. \\
 & + \left. \left[\hat{\theta}_{L(d_0)} \sum_{L(d_0)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}_{L(d_0)}) \sum_{L(d_0)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \right\} / \phi_0 + \\
 & + \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} c(y_{kj}, \phi_0) \quad (5.30)
 \end{aligned}$$

onde, $\hat{\theta}_{J(d_0)} = \theta(\hat{\mu}_{J(d_0)})$ se $k \in J(d_0)$ e $\hat{\theta}_{L(d_0)} = \theta(\hat{\mu}_{L(d_0)})$ se $k \in L(d_0)$ são os estimadores de máxima verossimilhança, d_0 é o elemento de $\Psi(I, \gamma)$ que minimiza (5.30) e $a_{kj}(\phi_0) = \phi_0 / w_{kj}$.

Para se obter a estatística do teste da razão de verossimilhança de H_0 vs H_a , basta calcular a diferença entre (5.28) e (5.30), isto é

$$\begin{aligned}
 l(\hat{\mu}_1; y) - l(\hat{\mu}_{d_0}; y) = & \\
 = & \left\{ \left[\hat{\theta} \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}) \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] - \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left[\hat{\theta}_{J(d_o)} \sum_{J(d_o)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}_{J(d_o)}) \sum_{J(d_o)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] - \\
& - \left[\hat{\theta}_{L(d_o)} \sum_{L(d_o)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} y_{kj} - b(\hat{\theta}_{L(d_o)}) \sum_{L(d_o)} \sum_{j=1}^{n_k} w_{kj} \right] \} / \phi_o
\end{aligned}
\tag{5.31}$$

Ao comparar a expressão (4.6) com a expressão (5.31), percebe-se que a primeira é proporcional à segunda. Logo, o máximo da medida de homogeneidade entre grupos, $\Delta(\hat{\mu}_d)$, é também a estatística usada no teste da razão de verossimilhança.

No próximo capítulo alguns resultados sobre a sua distribuição são mostrados, quando os dados vêm de uma normal, e nos seguintes, estudos para o caso binomial são feitos por simulação.

6. ALGUNS RESULTADOS SOBRE A DISTRIBUIÇÃO DO MÁXIMO DA ESTATÍSTICA $\Delta(\hat{\mu}_d)$ NO CASO NORMAL

6.1. Introdução.

A estatística $B(I_g, \gamma)$, definida como o máximo entre as reduções $\Delta(\hat{\mu}_d)$ em (4.46) para um ensaio completamente ao acaso cuja variável aleatória pertença à família exponencial, pode ser considerada como elemento relevante na escolha da divisão dicotômica mais promissora, em cada nó da árvore produzida por algoritmos de partição hierárquica dicotômica em grandes amostras.

Quando a distribuição de interesse é a normal, BUSSAB (1976) fez um estudo sobre a distribuição dessa estatística para diversas situações e a seguir são mostrados alguns casos.

6.2. O critério B sob a regra de divisão monotônica e mesmo número de observações por casela

Considerando que a variável aleatória é a normal, a estatística B , que é a redução máxima na soma de quadrados entre grupos, tem uma distribuição que é uma combinação de qui-quadrados não independentes. Tanto o número de tratamentos como o número de repetições por

tratamento influenciam na determinação de sua distribuição.

Usando uma transformação conveniente e trabalhando com a distribuição normal multivariada, BUSSAB (1976) conseguiu obter expressões exatas para a distribuição de B , que no entanto, pedem a construção de tabelas apropriadas por envolverem integração numérica. Além do mais, para propósitos mais práticos, o autor conseguiu uma aproximação conveniente para a cauda superior da distribuição usando uma aproximação da distribuição de qui-quadrado pela distribuição normal.

6.2.1. Uma transformação conveniente

Sob a hipótese de que todos os tratamentos são iguais e usando uma transformação de escala conveniente, as K médias independentes, $y_1, y_2, \dots, y_K$, têm a mesma distribuição normal, ou seja

$$\tilde{Y}' = (y_1, y_2, \dots, y_K) \sim N(0, I) \quad (6.1)$$

Sem perda de generalidade, o conjunto I_M ordenado associado à regra γ_M pode ser escrito como

$$I_M = \{1, 2, \dots, K\} \quad (6.2)$$

e também, cada partição $\Psi(I_M, \gamma_M)$ que é formada por dois grupos $J(d)$ e $L(d)$, onde

$$J(d) = \{1, 2, \dots, p\} \text{ e } L(d) = \{p+1, p+2, \dots, K\} \quad (6.3)$$

Como nesse caso a partição d é determinada pelo número p , este último pode ser usado para rotulá-la e então para cada p dado que $1 \leq p \leq K-1$, definem-se as estatísticas:

$$\bar{y} = \sum_{k=1}^K y_k / K, \quad \bar{y}(p) = \sum_{k=1}^p y_k / p \quad \text{e} \quad \bar{x}(p) = \sum_{k=p+1}^K y_k / (K-p) \quad (6.4)$$

Dessa maneira a redução na soma de quadrados entre grupos como definida em (2.21) torna-se

$$\begin{aligned} SQE(p) &= p [\bar{y}(p) - \bar{y}]^2 + (K-p) [\bar{x}(p) - \bar{y}]^2 \\ &= \left(1/p + 1/(K-p) \right)^{-1} [\bar{y}(p) - \bar{x}(p)]^2 \end{aligned}$$

A variável raiz quadrada de SQE , denotada por Z , é definida por

$$\begin{aligned} Z_p &= [1/p + 1/(K-p)]^{-1/2} [\bar{y}(p) - \bar{x}(p)] \\ &= \sum_{k=1}^K \alpha(k, p) y_k \end{aligned} \quad (6.5)$$

onde

$$\alpha(k, p) = \begin{cases} K^{-1/2} / g_p & \text{se } 1 \leq k \leq p \\ K^{-1/2} g_p & \text{se } p \leq k \leq K \end{cases} \quad \text{e } g_p = [p/(K-p)]^{1/2}$$

Indicando o vetor de coeficientes $\alpha(k, p)$ por $A(p)$, tem-se que

$$\underline{Z}_p = \underline{A}'(p) \underline{Y} \quad (6.6)$$

Pode-se mostrar que

$$\underline{A}'(p) \underline{1} = 0 \quad \text{e} \quad \underline{A}'(p) \underline{A}(p) = 1 \quad (6.7)$$

e portanto $\underline{Z}_p$ tem distribuição normal padrão e $SQE(p)$ tem distribuição de qui-quadrado com um grau de liberdade. Já o vetor aleatório $\underline{Z}$ de comprimento $K-1$ tem distribuição normal $(K-1)$ -variada com vetor média nulo e matriz de correlação R cujos elementos são da forma

$$r_{pq} = g_p / g_q \quad (6.8)$$

onde p e q são quaisquer inteiros tais que $1 \leq p \leq q \leq K$.

Algumas vezes pode ser necessário ressaltar de qual matriz o elemento genérico provém, e então pode-se usar o símbolo $r_{pq}(K)$ para indicar o elemento da matriz $R(K-1)$, bem como $g_r(K)$ em vez de g_r .

Esses resultados e os de propriedade do valor máximo de estatísticas de ordem, permitem mostrar que a função distribuição acumulada da estatística B é dada por

$$\begin{aligned} F(b; I_M, \gamma_M) &= P[B(I_M, \gamma_M) \leq b] = \\ &= P[SQE(p) \leq b : 1 \leq p < K] = \\ &= P[|\underline{Z}_p| \leq \sqrt{b} : 1 \leq p < K] = \end{aligned}$$

$$= \int_{-\sqrt{b}}^{\sqrt{b}} \dots \int_{-\sqrt{b}}^{\sqrt{b}} \Phi_{K-1} [z_1, \dots, z_{K-1} | 0; R(K-1)] \times \prod_{p=1}^{K-1} dz_p \quad (6.9)$$

onde Φ_{K-1} é a função densidade acumulada da distribuição normal multivariada de um vetor de tamanho $K-1$ com média zero e matriz de covariância $R(K-1)$, ou seja,

$$\begin{aligned} \Phi_{K-1} [\tilde{Z} ; \tilde{0} , R(K-1)] &= \\ &= (2\pi)^{-(K-1)/2} |R(K-1)|^{-1/2} \times \exp[-\tilde{Z}' R(K-1) \tilde{Z} / 2] \end{aligned} \quad (6.10)$$

Na etapa seguinte, com o objetivo de se encontrar uma expressão adequada para a redução máxima na soma de quadrados entre grupos, quando se utiliza a regra monotônica e se tem o mesmo número de elementos por casela, BUSSAB (1976) procurou uma transformação linear para Z que de fato conduz a uma expressão mais operacional para a integral da expressão (6.10).

Para um m fixo, $1 \leq m < K$, sejam

$$x_m = Z_m \quad \text{e} \quad x_p = (Z_p - r_{pm}) / (1 - r_{pm}^2)^{1/2} \quad (6.11)$$

com $1 \leq p < K$, $p \neq m$, onde r_{pm} é o elemento de $R(K-1)$ na p -ésima linha e m -ésima coluna. Indicando por $C_m(p)$ o vetor de coeficientes com elementos não nulos apenas nas posições p e m , isto é,

$$C_m'(p) = (0, \dots, (1 - r_{pm}^2)^{-1/2}, 0, \dots, -r_{pm} (1 - r_{pm}^2)^{-1/2}, \dots, 0)$$

$$\text{e} \quad C_m'(m) = (0, \dots, 1, \dots, 0) \quad (6.12)$$

tem-se que

$$x_p = C_m'(p) \tilde{z} \quad (6.13)$$

O vetor $\tilde{X}$ pode ser obtido por

$$\tilde{X} = C \tilde{Z} \quad (6.14)$$

considerando C_m a matriz cujas linhas são os vetores definidos em (6.12). Quanto à sua caracterização na forma distribuicional, mostra-se que

$$\tilde{X} \sim N_{K-1} \left(0 ; D(K-1, m) \right) \quad (6.15)$$

onde a matriz de covariância é

$$D(K-1, m) = C_m R(K-1) C_m' \quad (6.16)$$

e o determinante de C_m é não nulo e igual a

$$|C_m| = \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq m}}^{K-1} (1 - r_{pm}^2)^{-1/2} \quad (6.17)$$

A estrutura da matriz de covariâncias é tal que em vez de fazer o produto das matrizes, é mais fácil calcular seus elementos através das variâncias e covariâncias de $\tilde{X}$. BUSSAB (1976) mostrou que a matriz de covariância definida em (6.16) é da forma

$$D(K-1, m) = \begin{bmatrix} R(m-1) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & R(K-m-1) \end{bmatrix} \quad (6.18)$$

6.2.2. A distribuição de B_K

O cálculo de probabilidade de uma variável aleatória como (6.15) em um retângulo multidimensional, S_{K-1} , pode ser feito através da aplicação de integração numérica sucessivas vezes. Definindo S_{K-1} como

$$\begin{aligned} S_{K-1}(a_k, b_k; R(K-1)) &= P\{a_k < Z_k \leq b_k, k=1, \dots, K-1 : R(K-1)\} = \\ &= \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_{K-1}}^{b_{K-1}} \Phi_{K-1}\{z_1, z_2, \dots, z_{K-1} : R(K-1)\} \times \prod_{i=1}^{K-1} dz_i \end{aligned} \quad (6.19)$$

pode-se mostrar que, para qualquer m fixado, $1 \leq m < K$,

$$\begin{aligned} S_{K-1}(a_k, b_k; R(K-1)) &= \\ &= \int_{a_m}^{b_m} \left\{ S_{m-1}\{a'_k, b'_k, k=1, \dots, m-1 : R(m-1)\} \times \right. \\ &\times S_{K-m-1}\{a'_j, b'_j, j=m+1, \dots, K-1 : R(K-m-1)\} \left. \right\} \times \Phi(y) dy \end{aligned} \quad (6.20)$$

onde,

$$\alpha_l' = (\alpha_l - r_{lm} y) / (1 - r_{lm}^2)^{1/2} \text{ e } b_l' = (b_l - r_{lm} y) / (1 - r_{lm}^2)^{1/2} \quad (6.21)$$

Esse resultado permite uma forma iterativa de calcular S_{K-1} , desde que a mesma relação pode ser aplicada novamente nos dois primeiros termos do produto do integrando. Em cada passo a dimensão do espaço retangular diminui, e o processo pára quando

$$S_1(\alpha, b) = \Phi(b) - \Phi(\alpha) \quad (6.22)$$

onde Φ é a função distribuição acumulada normal padrão univariada.

Uma consequência imediata desses resultados é uma expressão que facilita o cálculo da função distribuição acumulada de B_K , que é dada por

$$P [B_K \leq b] =$$

$$= \int_{-\sqrt{b}}^{\sqrt{b}} S_{m-1}[\alpha_k, b_k, k=1, \dots, m; R(m-1)] \times \\ \times S_{K-m-1}[\alpha_j, b_j, j=m+1, \dots, K-1; R(K-m-1)] \times \Phi(y) dy \quad (6.23)$$

para qualquer inteiro m , tal que $1 \leq m < K$, onde,

$$\alpha_l = (-\sqrt{b} - r_{lm} y) / (1 - r_{lm}^2)^{1/2} \\ \text{e} \\ b_l = (\sqrt{b} - r_{lm} y) / (1 - r_{lm}^2)^{1/2} \quad (6.24)$$

BUSSAB (1976) encontrou expressões mais simples se o elemento m é escolhido de maneira apropriada.

De posse desses conceitos, foram tabelados os valores de b satisfazendo à expressão

$$P [B_K \leq b(\alpha, K)] = 1 - \alpha \quad (6.25)$$

para K variando de 2 até 10 e $\alpha = 0,50; 0,25; 0,10; 0,05; 0,01$.

6.2.3. Aproximação por uma distribuição qui-quadrado

Uma das maneiras de se verificar a aproximação adotada para uma distribuição é usar gráficos probabilísticos. Na presente situação BUSSAB (1976) usou o resultado de que

$$(\chi_\nu^2 / (\lambda \nu))^{1/3} \sim N \left[1 - \frac{2}{9\nu} ; \frac{2}{9\nu} \right] \quad (6.26)$$

mostrado por WILSON & HILFERTY (1931), e também citado mais recentemente por DACHS (1988).

Simulando a distribuição de B foram feitos gráficos dos valores de $b^{1/3}$ contra $\Phi^{-1}(F(b))$, obtendo-se quase linhas retas, principalmente para valores tais que $F(b)$ são maiores que 0,50. Logo a variável $B^{1/3}$ tem distribuição aproximadamente normal ou B tem distribuição aproximadamente $\lambda \chi_\nu^2$. Usando, ainda, a expressão (6.26) λ e ν foram obtidos das equações

$$(\lambda\nu)^{1/3} \left[1 - \frac{2}{9\nu} \right] = \mu \quad \text{e} \quad (\lambda\nu)^{1/3} \left[\frac{2}{9\nu} \right]^{1/2} = \sigma \quad (6.27)$$

tais que $(2/9\nu)^{1/2}$ é a raiz positiva de $x^2 + (\mu/\sigma)x - 1 = 0$ e $\lambda = (\sigma/x)^3/\nu$.

Uma tabela foi construída para valores de $K = 3, 6, 10$, a partir de retas ajustadas por mínimos quadrados nos pontos entre 0,50 e 0,99 produzindo equações do tipo

$$\Phi^{-1}(F(b)) = N + M b^{1/3} \quad (6.28)$$

onde as correlações eram sempre próximas de 1,00.

Para propósitos práticos pode-se usar a linha reta para calcular as probabilidades de B_K na cauda superior.

6.3. O critério B sob a regra de divisão monotônica e número diferente de elementos por casela

Na situação de número de observações diferente por casela, os resultados anteriormente apresentados continuam válidos, sendo que o cálculo da integral se torna mais trabalhoso.

Por essa razão o problema foi abordado por BUSSAB (1976) examinando desigualdades em vez de se calcularem os verdadeiros pontos de porcentagem da distribuição do máximo da soma de quadrados entre grupos.

Supõe-se que a amostra aleatória de

médias, $y_1, \dots, y_K$, independentes, de tamanhos $n_1, \dots, n_K$, provém de uma população normal padrão,

$$\tilde{Y}' = (y_1, \dots, y_K) \sim N_K(0; D) \quad (6.29)$$

onde D é uma matriz diagonal, com $d_k = 1/n_k$.

Levando em conta o conjunto de índices associados como em (6.2), a partição d pertencente ao conjunto $\Psi(I_M, \gamma_M)$ formada pelos grupos $J(d)$ e $L(d)$ definidos em (6.3), e que cada partição depende somente de p tem-se:

• os tamanhos de amostras

$$n = \sum_{k=1}^K n_k, \quad n(p) = \sum_{k=1}^p n_k, \quad m(p) = \sum_{k=p+1}^K n_k \quad (6.30)$$

• os totais

$$S = \sum_{k=1}^K n_k y_k, \quad S(p) = \sum_{k=1}^p n_k y_k, \quad T(p) = \sum_{k=p+1}^K n_k y_k \quad (6.31)$$

• as médias amostrais

$$\bar{y} = S/n, \quad \bar{y}(p) = S(p)/n(p), \quad \bar{x}(p) = T(p)/m(p) \quad (6.32)$$

• os pesos

$$w_i = n_i/n, \quad i \in I_M; \quad w(p) = \sum_{i=1}^p w_i; \quad W = \{w_i: i \in I_M\} \quad (6.33)$$

Dessa maneira a redução na soma de quadrados entre grupos definida em (2.21) torna-se

$$\begin{aligned} SQE(p) &= n(p) [\bar{y}(p) - \bar{y}]^2 + m(p) [\bar{x}(p) - \bar{y}]^2 \\ &= \left[n \times n(p) / m(p) \right] \times \left[\bar{y}(p) - \bar{y} \right]^2 \quad (6.34) \end{aligned}$$

cuja raiz quadrada é uma variável aleatória normal padrão Z_p , tal que

$$Z_p = \left[n \times n(p) / m(p) \right]^{1/2} \times \left[\bar{y}(p) - \bar{y} \right] \quad (6.35)$$

Para cada inteiro p , $1 \leq p \leq K$, pode-se também definir

$$g_p = \left[n(p)/m(p) \right]^{1/2} = \left[w(p) / \left[1-w(p) \right] \right]^{1/2} \quad (6.36)$$

Assim usando os totais (6.31) na variável aleatória normal padrão (6.35) obtém-se a expressão

$$Z_p = \left(\sqrt{n} g_p \right)^{-1} \left[S(p) - g_p^2 T(p) \right] \quad (6.37)$$

6.3.1. A distribuição de B_K

Considerando as $(K-1)$ partições dicotômicas pertencentes a $\Psi(I_M, \gamma_M)$, a distribuição conjunta das $(K-1)$ variáveis definidas em (6.35) é dada por

$$\underline{Z}' = (Z_1, \dots, Z_{K-1}) \sim N_{K-1}(\underline{0}, R(K-1)) \quad (6.38)$$

onde $R(K-1)$ é a matriz de correlação de elementos

$$r_{pq} = g_p / g_q \quad (6.39)$$

para p e q tais que $1 \leq p \leq q < K$ e $g_r = (w(r)/[1-w(r)])^{1/2}$.

Esses resultados mostram que a matriz $R(K-1)$ depende apenas da estrutura do conjunto W e não do tamanho n . Pode-se, então, usar $R(W)$ para indicar tal matriz, ou então $R(K, W)$ se for necessário o número de elementos em W .

Assim a distribuição acumulada de B_K , pode ser calculada por

$$\begin{aligned} F(b; \gamma_M, K, W) &= P[B_K \leq b] = \\ &= \int_{-\sqrt{b}}^{\sqrt{b}} \dots \int_{-\sqrt{b}}^{\sqrt{b}} \Phi(z_1, \dots, z_{K-1}; R(W)) \prod_{i=1}^{K-1} dz_i \quad (6.40) \end{aligned}$$

onde a matriz $R(W)$ tem elementos da forma (6.39) conforme demonstrado em BUSSAB (1976).

A utilização de tabelas abrange uma variedade de pesos e sua construção implica num processo iterativo para calcular a integral múltipla de (6.40) que exige um grande esforço computacional. Esse problema foi contornado quando BUSSAB (1976) utilizou desigualdades que calculam de uma maneira aproximada os pontos de porcentagem de B_K para algumas combinações diferentes de pesos.

6.3.2. Limites inferiores para a distribuição de B_K usando desigualdades

Considerando que $(A_p : p=1, \dots, K-1)$ é um conjunto de eventos, a desigualdade de Bonferroni, que é uma expressão para a probabilidades de eventos, é dada por

$$P \left[\bigcup_{p=1}^{K-1} A_p \right] \geq 1 - \sum_{p=1}^{K-1} P \left[A_p^c \right] \quad (6.41)$$

onde A_p^c é o conjunto complementar de A_p .

Com esse conceito BUSSAB (1976) mostrou que a distribuição acumulada da redução máxima na soma de quadrados entre grupos, quando se usa a regra monotônica de divisão dicotômica e o número de elementos por casela é diferente satisfaz à expressão

$$P [B_K \leq b] \geq 1 - 2 (K-1) [1 - \Phi(\sqrt{b})] \quad (6.42)$$

ou então, igualando o lado direito da desigualdade a $1-\alpha$, obtém-se

$$b = \left[\Phi^{-1} \{1 - \alpha / [2(K-1)]\} \right]^2 \quad (6.43)$$

Outro resultado obtido para a distribuição acumulada usa uma das desigualdades de Sidak. Esta se refere a um vetor multinormal com média zero e matriz de correlação arbitrária, inscrito em um espaço retangular n -dimensional, ou seja,

$$P \left(|X_i| \leq c_i : 1 \leq i \leq n \right) \geq \prod_{i=1}^n P \left(|X_i| \leq c_i \right) \quad (6.44)$$

A variável aleatória B_K satisfaz, então, a

$$P \left[B_K \leq b \right] \leq \left[2 \Phi(\sqrt{b}) - 1 \right]^{K-1} \quad (6.45)$$

Para comparar as desigualdades de Bonferroni (6.42) e a de Sidak (6.45) foi usado o fato de que para qualquer inteiro positivo n e para $x \leq 1$, tem-se

$$(1-x)^n \geq 1-nx \quad (6.46)$$

e para qualquer valor de b tal que $\Phi(\sqrt{b}) \geq 0,50$ tem-se

$$\Phi(\sqrt{b}) \geq 0,5 \Rightarrow 1 - \Phi(\sqrt{b}) \leq 0,5 \Rightarrow 2 [1 - \Phi(\sqrt{b})] \leq 1$$

Assim rearranjando a expressão (6.45) obtém-se

$$\begin{aligned} P \left[B_K \leq b \right] &\geq \left[2\Phi(\sqrt{b}) - 1 \right]^{K-1} = \\ &= \left(1 - \left[2(1 - \Phi(\sqrt{b})) \right] \right)^{K-1} = \\ &\geq 1 - 2(K-1) \left[1 - \Phi(\sqrt{b}) \right] \end{aligned} \quad (6.47)$$

ou seja, os limites inferiores baseados na desigualdade de Sidak são menores do que ou iguais aos limites inferiores baseados na desigualdade de Bonferroni. Por essa razão os resultados produzidos pela desigualdade de Sidak são melhores que os produzidos pela desigualdade de Bonferroni.

Para analisar o comportamento de (6.47),

BUSSAB (1976) comparou o valor da desigualdade com o valor exato (ou simulado), para um nível K fixado, a uma probabilidade α e para uma matriz de estrutura R .

Como no caso equiponderado, a matriz R depende apenas de K , sua análise pode ser feita através da variação de α e K . Fixando alguns valores de K , a razão entre o valor aproximado e o valor exato (ou simulado) tende a 1. Entretanto para valores de α fixados, a razão aumenta à medida que K aumenta.

Para W não uniforme, BUSSAB (1976) observou que fixado α e K , a razão diminui conforme W apresenta valores mínimos mais próximos de zero.

Como o vetor W não está explicitado na desigualdade (6.45), a desigualdade empírica de Sidak, que trata do caso em que a matriz de correlação, $T_{K-1}(r)$, tem todos os elementos fora da diagonal principal iguais, também foi estudada por BUSSAB (1976). A comparação dos resultados da simulação de (6.43) com valores tabelados de uma integral semelhante a (6.40) com uma matriz uniforme sugeriu a desigualdade

$$P [B_K \leq b] \geq P [|Z_i| \leq \sqrt{b}, i=1, \dots, K-1 : T_{K-1}(r_{\min})] \quad (6.48)$$

onde

$$r_{\min} = \min \{ r_{ij}, i \neq j, i, j=1, \dots, K-1 \} \quad (6.49)$$

Após algumas considerações tem-se que

$$\begin{aligned} P [B_K \leq b] &\geq P [|Z_i| \leq \sqrt{b}, i=1, \dots, K-1 : T_{K-1}(r_{\min})] \\ &\geq [2\Phi(\sqrt{b}) - 1]^{K-1} \end{aligned} \quad (6.50)$$

ou seja, o resultado (6.48), obtido da desigualdade empírica de Sidak produz limites inferiores melhores que o resultado (6.47), obtido através da desigualdade de Sidak.

No caso equiponderado, as análises dos resultados da simulação usando a desigualdade empírica com os valores exatos de B_K mostram que, de fato, o primeiro se aproxima do segundo conforme $r_{\min}$ tende a zero e K aumenta.

No caso geral, as análises de BUSSAB (1976) também corroboram com a proposição de que (6.48) produz limites inferiores melhores, principalmente para valores grandes de $r_{\min}$ e pequenos de K .

6.3.3. Limites para a distribuição de B_K usando a distribuição qui-quadrado

Explorando as desigualdades já mencionadas através da integração da região sobre o elipsóide

$$E(c; K, W) = \{ \underline{Z}: \underline{Z}' R^{-1}(W) \underline{Z} \leq c^2 \} \quad (6.51)$$

BUSSAB (1976) mostrou que a variável resultante tem uma distribuição qui-quadrado.

Se os volumes do elipsóide e do hipercubo são iguais, a função distribuição acumulada de B_K é limitada superiormente por

$$P[B_K \leq b] = P[\chi_{K-1}^2 \leq \nu(W)b] \quad (6.52)$$

onde

$$\nu(W) = (4/\pi) \times \left(\Gamma^2[(K+1)/2] / |R(W)| \right)^{1/(K-1)} \quad (6.53)$$

e

$$|R(W)| = w_K \prod_{k=1}^{K-1} \left[w_k / (w(k) [1-w(k)]) \right] \quad (6.54)$$

sendo

$$w_k = n_k/n, \quad 1 \leq k \leq K \quad \text{e} \quad w(l) = \sum_{i=1}^l w_i, \quad 1 \leq l \leq K-1$$

Por outro lado, um limite inferior para a redução máxima na soma de quadrados entre grupos no caso do uso da regra de partição monotônica e caselas com número de observações diferente, é dado por

$$P [B_K \leq b] \geq P [\chi_{K-1}^2 \leq b] \quad (6.55)$$

A partir das expressões (6.52) e (6.55), BUSSAB (1976) construiu o intervalo

$$P [\chi_{K-1}^2 \leq b] \leq P [B_K \leq b] \leq P [\chi_{K-1}^2 \leq \nu(W)b] \quad (6.56)$$

e aproximou a distribuição de B_K por uma distribuição de qui-quadrado usando o gráfico probabilístico baseado no resultado (6.26). A partir da função distribuição acumulada de B simulada, $F(b)$, uma reta $\Phi^{-1}[F(b)] = M(W)b^{1/3} + N(W)$ foi ajustada por mínimos quadrados nos pontos onde $0.51 \leq F(b) \leq 0.99$. Mais uma vez a aproximação se mostrou adequada nos diversos casos estudados

apresentando coeficiente de correlação igual ou superior a 0,998.

6.3.4. Algumas conclusões

Quando as K médias dos tratamentos, y_k , têm distribuição normal com variância $1/n_k$ e são independentes, a redução máxima na soma de quadrados entre grupos quando se usa a regra γ monotônica, B_K , pode ser aproximada por diversas maneiras, uma vez que seu valor exato é pouco operacional.

A desigualdade de Sidak, como limite superior, pode ser usada pela sua facilidade de cálculo e pela sua independência do valor particular do conjunto de pesos. Apesar dessas vantagens, para valores grandes de $r_{\min}$, definido em (6.49) o limite superior produzido é bem maior do que os valores exatos.

A desigualdade empírica, apesar de ser melhor, exige a consulta de tabelas muito específicas, e quando $r_{\min}$ está próximo de zero ela está bem próxima da desigualdade de Sidak.

Usando o resultado (6.26) a distribuição de B_K pode ser aproximada por uma distribuição proporcional a uma qui-quadrado, que depende em grande parte do valor de K e $r_{\min}$.

Essas conclusões são válidas para valores de K relativamente pequenos, pois os limites perdem sua utilidade para valores muito maiores do que 10.

6.4. O critério B sob a regra de divisão livre e mesmo número de observações por casela

No caso em que a regra de divisão dicotômica é a livre, as suposições iniciais a respeito das médias das caselas feitas em (6.1) podem ser utilizadas. A variável aleatória B representa o máximo da soma de quadrados entre grupos sobre a classe $\psi(I, \gamma_L)$ de partições dicotômicas. Se d é uma partição qualquer definida pela regra livre, então d é formada por dois subconjuntos

$$J(d) = \{j_1(d), \dots, j_p(d)\} \text{ e } L(d) = \{j_{p+1}(d), \dots, j_K(d)\} \quad (6.57)$$

para algum $p=1, 2, \dots, K-1$. Sem perda de generalidade assume-se que a variável B está sempre no conjunto principal $J(d)$, ou seja, $j_1(d)=1$. Desse modo o número total $N(\psi)$ de partições d é o mesmo que o número de subconjuntos principais $J(d)$. Para um número fixado p , constrói-se $\binom{K-1}{p-1}$ subconjuntos diferentes $\{1, J_2(d), J_3(d), \dots, J_p(d)\}$, para $p=1, 2, \dots, K-1$, implicando que

$$N(\psi) = \binom{K-1}{0} + \binom{K-1}{1} + \dots + \binom{K-1}{K-2} = 2^{K-1} - 1 \quad (6.58)$$

Cada partição d , com p elementos no conjunto principal $J(d)$, produz

- os totais em cada subconjunto da partição

$$S(d) = y_{j_1(d)} + y_{j_2(d)} + \dots + y_{j_p(d)} = \sum_{i \in J(d)} y_i$$

e

$$T(d) = y_{j_{p+1}(d)} + y_{j_{p+2}(d)} + \dots + y_{j_k(d)} = \sum_{i \in L(d)} y_i \quad (6.59)$$

• as médias em cada subconjunto da partição

$$\bar{y} = \sum_{i \in I} y_i / k, \quad \bar{y}(d) = S(d) / p \quad \text{e} \quad \bar{x}(d) = T(d) / (k-p) \quad (6.60)$$

Dessa maneira a soma de quadrados entre grupos pode ser reescrita, no presente caso, como

$$SQE(d) = [kp / (k-p)] [\bar{y}(d) - \bar{y}]^2. \quad (6.61)$$

Sua raiz quadrada, novamente, torna-se uma transformação conveniente, da forma

$$z_d = [kp / (k-p)]^{1/2} [\bar{y}(d) - \bar{y}]. \quad (6.62)$$

Com esses elementos pode-se obter a distribuição da estatística de interesse.

6.4.1. A distribuição de B_K

Lembrando que o objetivo é encontrar a distribuição do máximo da soma de quadrados entre grupos, quando da utilização da regra γ_L sabe-se que sua função distribuição acumulada é dada por

$$F(b; k, \gamma_L) = P [B_K \leq b] = P [SQE(d) \leq b : d \in \psi(I, \gamma_L)] \quad (6.63)$$

Como cada $SQE(d)$ tem distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade, (6.63) pode ser reescrita por

$$P [B_K \leq b] = P [|z_d| \leq \sqrt{b} : d \in \psi(I, \gamma_L)] \quad (6.64)$$

onde cada z_d tem uma distribuição normal, uma vez que é uma combinação linear de $Y' = (y_1, \dots, y_K) \sim N(0, I)$.

O cálculo de (6.64) pode ser feito de duas maneiras. A primeira, encontrando a probabilidade do vetor

$$\underline{Z}' = (z_1, z_2, \dots, z_{N(\psi)}) \sim N_{N(\psi)}(0, \Sigma)$$

sobre o hipercubo $[\underline{Z} : |z_d| \leq \sqrt{b}]$ para todo $d \in \psi(I, \gamma_L)$.

A segunda maneira é encontrando a probabilidade de Y sobre a região

$$H_K = \{ \underline{Y} : |z_d| \leq \sqrt{b} \text{ para todo } d \in \psi(I, \gamma_L) \}$$

Nesta última, tem-se o cálculo de uma variável normal padrão K -variada sobre uma região bem complexa de integração. Na primeira, tem-se uma variável multinormal degenerada de alta dimensão sobre uma região bem simples.

BUSSAB (1976) optou pela segunda maneira, chegando a conclusão de que o prisma infinito H_K possui:

- $K!$ vértices, uma em cada uma das regiões ordenadas definidas pelos $\binom{K}{2}$ hiperplanos $y_i = y_j, i \neq j$;

- todos os vértices paralelos a linha $\overline{01}$;
- cada face perpendicular a um plano correspondente a $y_i = y_j, i \neq j$.

Uma simplificação para o cálculo da função distribuição acumulada de B_K quando a regra de divisão é a livre e tem-se o mesmo número de observações por casela é que por causa do efeito prisma infinito, pode-se obter a distribuição marginal no subespaço $K-1$ dimensional através da origem, perpendicular a linha $\overline{01}$. Mostra-se que a função distribuição acumulada de B_K é

$$P[B_K \leq b] = \int_{S_{K-1}} \dots \int \prod_{i=1}^{K-1} \Phi(y_i) dy_i \quad (6.65)$$

onde,

$$S_{K-1} = H_K \cap (1'Y=0) \quad (6.66)$$

Apesar da região S_{K-1} acima ser bem caracterizada, a integral (6.65) é muito difícil de ser achada analiticamente. Uma alternativa é se obterem desigualdades baseadas nas propriedades geométricas de S_{K-1} .

6.4.2. Desigualdades que limitam a distribuição de B_K

Devido a sua simetria, os vértices de S_{K-1} , são eqüidistantes da origem. Seja o quadrado dessa distância definido por $d^2(K) \times b$. Como o volume da esfera $K-1$ dimensional de raio $d^2(K) \times b$ é maior que o volume de S_{K-1} , a probabilidade de Y na hiperesfera será maior que

a probabilidade de y em S_{K-1} .

Tem-se, então, que a função distribuição acumulada de B_K satisfaz a

$$P [B_K \leq b] \leq P [\chi_{K-1}^2 \leq d^2(K) \times b] \quad (6.67)$$

onde, $d^2(K)$ é dado por

$$d^2(K) = 1 + \sum_{p=1}^{K-2} \left[\frac{(1-r_{p,p+1})}{(1+r_{p,p+1})} \right]$$

e

$$r_{p,p+1} = \left(\frac{p(K-p-1)}{(K-p)(p+1)} \right)^{1/2}$$

O estudo realizado por BUSSAB (1976) indica que esse limite é muito pobre. Por exemplo para $K=10$ e $\alpha=0,05$ o limite é 40% menor que o verdadeiro valor.

Por argumentos similares usados no limite superior, mostra-se que

$$P [B_K \leq b] \geq P [\chi_{K-1}^2 \leq b]. \quad (6.68)$$

Tal desigualdade, entretanto, não produz também bons limites inferiores, e perde sua proximidade quando K aumenta, de acordo com resultados obtidos por simulação da distribuição de B_K em BUSSAB (1976).

6.4.3. A distribuição de qui-quadrado como uma aproximação da distribuição de B_K

Percebendo que de fato a estatística B_K ,

sob a regra de divisão livre e mesmo número de observações por casela, possui distribuição qui-quadrado, BUSSAB (1976) usou novamente a aproximação (6.26) e obteve bons resultados. Para propósitos práticos os pontos de porcentagem de B_K podem ser encontrados por tal aproximação.

Os resultados de que B_K tem distribuição qui-quadrado que é limitada superiormente por uma distribuição χ_{K-1}^2 e inferiormente, por uma constante vezes a distribuição χ_{K-1}^2 , e a específica forma do sólido S_{K-1} , sugerem que deve existir uma constante $l(K)$ tal que

$$B_K = \chi_{K-1}^2 / l(K) \quad (6.69)$$

e que satisfaz a

$$E(B_K) = (K-1)/l(K) \quad \text{e} \quad \text{Var}(B_K) = 2(K-1)/l^2(K) \quad (6.70)$$

ou seja, $l(K)$ é tal que

$$l(K) = 2 \times E(B_K) / \text{Var}(B_K) \quad (6.71)$$

Com esses resultados BUSSAB (1976) fez simulações para diversos valores de K e α e construiu tabelas que servem de limites superiores para os pontos de porcentagem. Esses limites melhoram para valores pequenos de K e α , sendo este último dado por um menos a probabilidade acumulada.

Quanto aos resultados assintóticos, BUSSAB (1976), assim como SCOTT & KNOTT (1974), obtiveram as

seguintes expressões para a média e variância de B_K :

$$E(B_K/K) \rightarrow 2/\pi \quad \text{e} \quad \text{Var}(B_K/\sqrt{K}) \rightarrow 8(1-2/\pi)/\pi \quad (6.72)$$

que diferem um pouco das expressões obtidas por HARTIGAN (1972).

Com a análise dos resultados obtidos por BUSSAB (1976) e SCOTT & KNOTT (1974), pode-se, então dizer que a constante de proporcionalidade da distribuição de qui-quadrado definida em (6.69) converge para 1,3760, isto é,

$$B_K \sim 0,7267 \times \chi^2_{K-1} \quad (6.73)$$

e a distribuição assintótica de B_K é dada por

$$\left(2(\pi-2)/\pi \right) \times \chi^2_{(K/(\pi-2))} \quad (6.74)$$

Esta última deve ser usada para valores de $K > 10$. Por outro lado, para valores de $K \leq 10$ os resultados assintóticos também produzem limites inferiores melhores que os aqui apresentados anteriormente.

6.5. O critério B sob a regra de divisão livre e número diferente de observações por casela

Considerando um preditor com K níveis, $I = \{1, 2, \dots, K\}$, a regra associada livre, γ_L , o número de observações independentes na k -ésima casela como n_k , $k=1, 2, \dots, K$, cada observação da variável dependente como

sendo uma variável normal padrão, pode-se dizer que as K médias de caselas $y_1, y_2, \dots, y_K$ têm uma distribuição normal K -variada,

$$\tilde{Y} \sim N_K(0, D(1/n_1, \dots, 1/n_K)) \quad (6.75)$$

onde D é uma matriz diagonal com $d_k = 1/n_k$.

Cada partição dicotômica $d \in \psi(I, \gamma_L)$, $I = \{1, 2, \dots, K\}$ é formada por dois conjuntos disjuntos da mesma forma que em (6.57). Para cada partição d , tem-se a correspondente redução SQE que é dada por

$$SQE(d) = n^{-1} \left[[g(d)]^{-1} \sum_{i \in J(d)} n_i y_i - g(d) \sum_{i \in L(d)} n_i y_i \right]^2 \quad (6.76)$$

e a correspondente variável z_d ,

$$z_d = n^{1/2} \left[[g(d)]^{-1} \sum_{i \in J(d)} w_i y_i - g(d) \sum_{i \in L(d)} w_i y_i \right] \quad (6.77)$$

onde,

$$n = \sum_{i=1}^K n_i, \quad W = [w_i = n_i/n : i \in I], \quad w(d) = \sum_{i \in J(d)} w_i$$

$$\text{e } g(d) = (w(d)/[1-w(d)])^{1/2}$$

Matricialmente tem-se que

$$z_d = A'(d) \tilde{Y} \quad (6.78)$$

onde,

$$\tilde{A}'(d) = n^{1/2} [a_1(d)w_1, a_2(d)w_2, \dots, a_k(d)w_k]$$

e

$$a_j(d) = \begin{cases} [g(d)]^{-1} & \text{se } j \in J(d) \\ -g(d) & \text{se } j \in L(d) \end{cases} \quad (6.79)$$

Como anteriormente, cada $SQE(d)$ tem distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade e z_d distribuição normal.

6.5.1. A função distribuição acumulada de B_k

O máximo da soma de quadrados entre grupos tem como função distribuição acumulada a expressão

$$\begin{aligned} F(b; \gamma_L, W) &= P [B_k \leq b] = \\ &= P [SQE(d) \leq b : d \in \psi(I, \gamma_L)] \\ &= P [|z_d| \leq \sqrt{b} : d \in \psi(I, \gamma_L)] \end{aligned} \quad (6.80)$$

As restrições $|z_d| \leq \sqrt{b}$ geram o sólido H_k ,

$$H_k = \{ \tilde{Y} \in \mathbb{R}^k : -\sqrt{b} \leq \tilde{A}'(d) \tilde{Y} \leq \sqrt{b}, d \in \psi(I, \gamma_L) \} \quad (6.81)$$

Usando o fato de que

$$\tilde{Y} \sim N(0; D(1/n_1, 1/n_2, \dots, 1/n_k)) \quad (6.82)$$

a função distribuição acumulada de B_k é dada por

$$P [B_K \leq b] = P [Y \in H_K] \quad (6.83)$$

Em seu estudo sobre a função acumulada do máximo da soma de quadrados entre grupos quando se utiliza a regra de divisão livre e se tem número diferente de observações por casela, BUSSAB (1976) usou uma outra expressão para a função distribuição de B_K entretanto não possui, por exemplo, as propriedades de simetria do sólido da região de integração no caso equiponderado.

6.5.2. Distribuições que limitam a distribuição de B_K

Usando o fato de que a soma de quadrados entre tratamentos é igual a soma de quadrados dentro dos grupos finais após a divisão ótima mais o máximo da soma de quadrados entre grupos, B_K , obtém-se que

$$P [B_K \leq b] \geq P [\chi_{K-1}^2 \leq b]. \quad (6.84)$$

Uma outra expressão que pode ser usada como limite para a função distribuição acumulada do máximo da soma de quadrados entre grupos quando se utiliza a regra livre de divisão dicotômica com número diferente de observações por casela é dada por

$$P [B_K \leq b : \gamma_L, K, W] \leq P [B_K \leq b : \gamma_M, K, W] \quad (6.85)$$

Este resultado foi mostrado para o caso em que $K=3$.

Percebendo que o conjunto de pesos é um fator importante, o mesmo autor fez ainda uma série de simulações usando diferentes conjuntos de W .

Um primeiro resultado é que

$$P [B_K \leq b : \gamma_L, K, W_0] \leq P [B_K \leq b : \gamma_L, K, W] \quad (6.86)$$

onde, W_0 corresponde a amostras de mesmo tamanho, ou seja, qualquer ponto de quantil de B_K no caso equiponderado W_0 deve ter um limite superior para o correspondente ponto de quantil em qualquer outro conjunto W .

Outro resultado interessante é que também nesta situação, onde o número de observações por casela é diferente, a distribuição de B_K tem um comportamento semelhante a uma variável proporcional a uma distribuição de qui-quadrado com ν graus de liberdade.

Com esses dois resultados, BUSSAB (1976) construiu tabelas da função distribuição acumulada de B_K para a situação de regra livre de divisão dicotômica e número diferente de observações por casela.

6.6. Resumo das aproximações.

Quando não é possível se utilizarem as tabelas elaboradas por BUSSAB (1976), podem-se utilizar as aproximações assintóticas. Assim considerando a regra de divisão monotônica, obteve os seguintes limites

$$P [\chi_{K-1}^2 \leq b] \leq P [B_K \leq b] \leq P [\chi_{K-1}^2 \leq \nu(W)b] \quad (6.56)$$

onde, $\nu(W)$ é dado em (6.53).

Quando se utiliza a regra γ_L

$$B_K \sim \left(2(\pi-2)/\pi \right) \times \chi_{(K/(\pi-2))}^2 \quad (6.74)$$

no caso equiponderado e

$$P [B_K \leq b] \geq P [\chi_{K-1}^2 \leq b] \quad (6.84)$$

quando se tem número diferente de observações por casela.

Outro resultado muito importante é quando

$$P [B_K \leq b : \gamma_L, K, W] \leq P [B_K \leq b : \gamma_M, K, W] \quad (6.85)$$

bem como

$$P [B_K \leq b : \gamma_L, K, W_0] \leq P [B_K \leq b : \gamma_L, K, W] \quad (6.86)$$

onde, W_0 corresponde a amostras de mesmo tamanho.

7. UM ESTUDO SOBRE O COMPORTAMENTO DA DISTRIBUIÇÃO DO MÁXIMO DA ESTATÍSTICA $\Delta(\hat{\pi}_{\tilde{d}})$ NO CASO BINOMIAL

7.1 Introdução

A escolha da divisão mais promissora, d_0 , quando da aplicação do método de agrupamento divisivo hierárquico utilizando a regra γ , entre aquelas formadas por G grupos, pressupõe que a redução $\Delta(\hat{\mu}_{\tilde{d}})$ seja a maior possível. Considerando $B(I_g, \gamma)$ o máximo entre as reduções $\Delta(\hat{\mu}_{\tilde{d}})$, a partição mais promissora, d_0 , é aquela que satisfaz a (4.47).

No caso específico de distribuição binomial, quando se estuda um modelo de ensaio completamente ao acaso com n_k repetições em cada uma das K caselas, o máximo da redução $\Delta(\hat{\pi}_{\tilde{d}})$ definida em (4.37) é utilizado para escolher a partição d_0 tal que

$$\Delta(\hat{\pi}_{\tilde{d}_0}) = B(I_g, \gamma) = \max \left\{ \Delta(\hat{\pi}_{\tilde{d}}) : d \in \Psi(I_g, \gamma) \right\} \quad (7.1)$$

O estudo no caso da distribuição normal indica que por métodos analíticos a distribuição da estatística $\Delta(\hat{\pi}_{\tilde{d}_0})$ deve ser muito complicada. Por esse motivo optou-se por seu estudo através de métodos de

simulação.

Como a qualidade da aproximação à distribuição binomial pela normal depende do produto $m_{kj} \times \pi_k$, esses dois parâmetros foram levados em consideração além do valor do número de tratamentos envolvidos, K .

7.2. Descrição do programa de simulação

Usando GLIM 3.77 (PAYNE, 1986), o programa de simulação da distribuição da estatística $\Delta(\hat{\pi}_{d0})$ foi elaborado e no Apêndice 1 está uma listagem para uma das situações estudadas.

Um conjunto de instruções de interesse que pode ser usado sempre que solicitado em um programa é chamado "macro" em GLIM. As principais "macros" que formam o programa de simulação da distribuição da estatística $\Delta(\hat{\pi}_{d0})$ são :

- MACRO SITA - Monta a tabela de dados binomiais gerados a partir da MACRO SIMULA, tendo como entrada o número de tratamentos no ensaio completamente ao acaso, o número de repetições de cada tratamento, o índice da binomial, a probabilidade da binomial,
- MACRO SIMULA - Gera uma amostra de uma distribuição binomial a partir da soma de gerações de uma uniforme (0,1), onde o número de sucessos, é o número de vezes em que o número gerado é maior que a probabilidade da binomial,

- MACRO SCKN - Calcula $\Delta(\hat{\pi}_{d_0})$, escolhida entre todas as divisões dos tratamentos, segundo a regra livre,
- MACRO ANALISE - Ajusta o modelo de análise de variância de um ensaio completamente ao acaso,
- MACRO CHIP - Calcula a probabilidade da cauda superior de uma distribuição de qui-quadrado usando a aproximação de WILSON & HILFERTY (1931) à distribuição normal, (6.26).

As demais "macros" servem de suporte para as acima citadas.

Para a geração de diversas distribuições, foram escolhidos os valores 3, 6 e 10, para o número de tratamentos; 10, 20 e 50, para o índice da binomial; 0,5, 0,3 e 0,1, para a probabilidade da binomial. Em cada uma das situações foram geradas 1000 tabelas de dados.

7.3. A distribuição simulada de $\Delta(\hat{\pi}_{d_0})$

Considerando a regra de divisão livre e mesmo número de observações por casela, $n_k = r$, $\forall k$, a distribuição simulada do máximo entre as reduções $\Delta(\hat{\pi}_{d_0})$ foi comparada com a distribuição qui-quadrado, uma vez que no caso normal essa estatística tem assintoticamente esse comportamento. Por questão de simplicidade de notação, seja Δ_0 a variável $\Delta(\hat{\pi}_{d_0})$ definida em (7.1).

Uma das maneiras de se verificar a distribuição de uma variável aleatória é através de uma análise em gráficos probabilísticos. Para a distribuição qui-quadrado utilizou-se o resultado mostrado por WILSON & HILFERTY (1931) em (6.26) recomendada para valores da distribuição acumulada superiores a 0,5.

A expressão (6.26) implica que a variável $(\Delta_o)^{1/3}$ deve ter distribuição aproximadamente normal ou Δ_o tem distribuição aproximadamente $\lambda \chi_\nu^2$.

Sendo μ e σ^2 a média e a variância de $(\Delta_o)^{1/3}$, respectivamente, os valores de λ e ν podem ser obtidos das equações (6.27).

A quantificação da análise de gráficos probabilísticos se deu através do ajuste de retas de mínimos quadrados nos pontos entre 0,5 e 0,99 de equações do tipo

$$\Phi^{-1} \left(F(\Delta_o) \right) = a + b (\Delta_o)^{1/3} \quad (7.2)$$

onde Φ^{-1} é a distribuição acumulada normal padrão e $F(\Delta_o)$ é a distribuição acumulada empírica da variável Δ_o obtida na simulação.

Uma outra maneira de se achar o coeficiente de proporcionalidade e o número de graus de liberdade é supondo que a variável de interesse tenha distribuição proporcional a uma qui-quadrado, ou seja,

$$\Delta_o \sim \lambda \chi_\nu^2 \quad (7.3)$$

Então

$$E(\Delta_o) = \lambda \nu \quad \text{e} \quad \text{Var}(\Delta_o) = \lambda^2 \times 2\nu \quad (7.4)$$

Logo

$$\lambda = \text{Var}(\Delta_o) / \{ 2E(\Delta_o) \} \quad \text{e} \quad \nu = E(\Delta_o) / \lambda \quad (7.5)$$

No Apêndice 2 estão os resultados de uma das situações estudadas por simulação.

7.3.1. O caso de 10 tratamentos

Para um conjunto com 10 tratamentos e 4 repetições por tratamento foram gerados 1000 ensaios considerando m igual a 50, 20 e 10 e Π igual a 0,50, 0,30 e 0,10. Na Tabela 4 estão os resultados da simulação para a variável $\Delta_o^{1/3}$. Os coeficientes de determinação das retas ajustadas do tipo (7.2) nunca foram inferiores a 0,994. Isso implica que realmente a variável dada em (7.1) tem distribuição aproximadamente qui-quadrado.

Como as médias das distribuições simuladas de $(\Delta_o)^{1/3}$ são praticamente iguais, o mesmo ocorrendo com as variâncias, para os valores estudados de Π_{10} e m_{10} , pode-se dizer que no caso de 10 tratamentos esses parâmetros não produzem alteração na distribuição de $\Delta(\hat{\pi}_d)_o$.

Essa afirmação é reforçada quando se comparam os coeficientes das retas ajustadas, uma vez que são praticamente iguais.

O coeficiente de proporcionalidade λ está bem próximo de $2(\pi-2)/\pi = 0,7268$ e o número de graus de

liberdade ν parece ser um pouco superior a $K/(\pi-2) = 8,76$.

Dessa maneira parece ser conveniente usar o resultado (6.84) do caso normal em que a distribuição acumulada do máximo da soma de quadrados entre grupos é limitada superiormente pela distribuição qui-quadrado com $K-1$ graus de liberdade.

Ao se examinar a Tabela 5 que trata da distribuição simulada de Δ_0 , esses resultados são reforçados. O parâmetro de proporcionalidade e o número de graus de liberdade obtidos por (7.5) são praticamente invariantes para os valores estudados de Π_{10} e m_{10} . Pode-se dizer também que o parâmetro de proporcionalidade se aproxima de $2(\pi-2)/\pi$ e o número de graus de liberdade de $K/(\pi-2)$.

Na Tabela 6 tem-se a comparação entre as distribuições acumuladas de:

- *ID* - distribuição empírica simulada de Δ_0/λ , onde $\lambda = 2(\pi-2)/\pi$,
- *QUID* - distribuição acumulada de qui-quadrado com $\nu = K/(\pi-2) = 8,76$ graus de liberdade,
- *QI* - distribuição acumulada de qui-quadrado com $\nu = K-1 = 9$ graus de liberdade.

para os percentis 0,80; 0,85; 0,90; 0,95; 0,975; 0,995.

Nota-se que para valores superiores a 0,90 as aproximações tornam-se cada vez melhores, sendo que a aproximação representada por *QUID* tem desempenho melhor

que QI .

Pode-se dizer que

$$\Delta_0/\lambda \sim \chi^2_{\nu} \quad (7.6)$$

para $K=10$.

7.3.2. O caso de 6 tratamentos

Considerando um conjunto com 6 tratamentos e 4 repetições por tratamento foram gerados 1000 ensaios de uma distribuição binomial com índice m igual a 50, 20 e 10 e Π igual a 0,50, 0,30 e 0,10. Na Tabela 7 estão os resultados da simulação para a variável $\Delta_0^{-1/3}$. Os coeficientes de determinação das retas ajustadas do tipo (7.2) nunca foram inferiores a 0,9894. Isso indica que para $K=6$ a variável (7.1) tem distribuição aproximadamente qui-quadrado.

Como as médias das distribuições simuladas de $(\Delta_0)^{1/3}$ são praticamente iguais, o mesmo ocorrendo com as variâncias, para os valores estudados de Π_0 e m_0 , pode-se dizer que no caso de 6 tratamentos esses parâmetros produzem uma pequena alteração na distribuição de $\Delta(\hat{\pi}_{d_0})$, quando comparado com os resultados do caso de 10 tratamentos.

Essa afirmação é reforçada quando se comparam os coeficientes das retas ajustadas, uma vez que existe uma variação maior do que no caso de 10 tratamentos.

O coeficiente de proporcionalidade λ está bem próximo de $2(\pi-2)/\pi = 0,7268$ e o número de graus de liberdade ν é sempre inferior a $K/(\pi-2) = 5,26$ na maioria dos casos.

Ao se examinar a Tabela 8 que trata da distribuição simulada de Δ_0 , esses resultados são novamente reforçados. O parâmetro de proporcionalidade e o número de graus de liberdade obtidos por (7.5) são praticamente invariantes para os valores estudados de Π_0 e m_0 . Pode-se dizer também que o parâmetro de proporcionalidade se aproxima de $2(\pi-2)/\pi$ e o número de graus de liberdade de $K/(\pi-2)$ apresenta, entretanto, uma variabilidade maior do que no caso de 10 tratamentos.

Na Tabela 9 tem-se a comparação entre as distribuições acumuladas de *ID*, *QUID* e *QI*. Nota-se que para valores superiores a 0,90 de *ID* a aproximação torna-se cada vez melhor. A aproximação representada por *QUID* tem desempenho melhor que *QI*. Entretanto, quando comparados com os resultados obtidos no caso de 10 tratamentos as aproximações *QI* e *QUID* não tem um desempenho tão bom como no caso de 10 tratamentos.

Mesmo assim a aproximação (7.6) pode ser usada com certo cuidado para $K=6$.

7.3.3. O caso de 3 tratamentos

Para um conjunto com 3 tratamentos e 4 repetições por tratamento também foram gerados 1000 ensaios considerando m igual a 50, 20 e 10 e Π igual a

0,50 , 0,30 e 0,10. Os resultados da simulação para a variável $\Delta_o^{1/3}$ estão na Tabela 10. Os coeficientes de determinação das retas ajustadas do tipo (7.2) nunca foram inferiores a 0,9901. Isso implica que novamente a variável dada em (7.1) tem distribuição aproximadamente qui-quadrado. Para um conjunto com 3 tratamentos, a Tabela 13 mostra que os coeficientes de determinação das retas ajustadas do tipo (7.2) nunca foram inferiores a 0,9901. Isso implica que novamente a variável (7.1) tem distribuição aproximadamente qui-quadrado.

Como as médias das distribuições simuladas de $(\Delta_o)^{1/3}$ são também praticamente iguais, o mesmo ocorrendo com as variâncias, para os valores estudados de Π_g e m_g , pode-se dizer que no caso de 3 tratamentos esses parâmetros produzem alguma alteração na distribuição de $\Delta(\hat{\pi}_d)_o$, quando comparados com os resultados das situações anteriores.

Essa afirmação é reforçada quando se comparam os coeficientes das retas ajustadas, uma vez que são praticamente iguais.

O coeficiente de proporcionalidade λ é sempre superior ao valor $2(\pi-2)/\pi = 0,7268$ e o número de graus de liberdade ν é sempre inferior $K/(\pi-2) = 2,635$, trazendo, então, a suspeita de que, nessa situação, a aproximação já não é tão boa.

Ao se examinar a Tabela 11 que trata da distribuição simulada de Δ_o , esses resultados são reforçados. O parâmetro de proporcionalidade e o número de graus de liberdade obtidos por (7.5) são praticamente invariantes para os valores estudados de Π_g e m_g . Aqui não se pode afirmar que o parâmetro de proporcionalidade

se aproxima de $2(\pi-2)/\pi$ e o número de graus de liberdade de $K/(\pi-2)$ como nas situações anteriores.

Na Tabela 12 tem-se a comparação entre as distribuições acumuladas de *ID*, *QUID* e *QI*. Nota-se que de fato a aproximação (7.6) não pode ser usada com segurança, pois já existe uma diferença muito grande entre a distribuição acumulada empírica e a distribuição aproximada.

7.4. Conclusões.

Quando a escolha de partição d_o mais promissora em uma aplicação do método de agrupamento divisivo hierárquico utilizando a regra γ_L , envolve a distribuição da estatística $\Delta(\hat{\pi}_{d_o})$ no caso de um ensaio binomial completamente ao acaso com n_k repetições em cada uma das K caselas, pode-se utilizar uma aproximação semelhante àquela usada por SCOTT & KNOTT (1974).

A distribuição da estatística Δ_o/λ pode ser aproximada por uma distribuição de qui-quadrado com $\nu = K/(\pi-2)$ graus de liberdade.

Essa aproximação é recomendada para qualquer valor dos vetores Π_k e m_k uniformes. A qualidade da aproximação depende do valor de K , o número de tratamentos: quanto maior seu valor, melhor sua aproximação.

Dentro dos propósitos deste trabalho, pode-se dizer que a utilização da estatística Δ_o/λ segue os mesmos resultados obtidos por SCOTT & KNOTT (1974) e BUSSAB (1976).

Tabela 4 - Alguns resultados da distribuição simulada de $\Delta_0^{1/3}$ para diversos valores de Π_{10} e m_{10} e $K=10$

Π_{10}	m_{10}	Parâmetros de $\Delta_0^{1/3}$						
		média	variância	a^1	b^1	R^2^1	λ^2	ν^2
0,50	50	1,864	0,0843	-6,371	3,421	0,9964	0,7245	9,600
	20	1,883	0,0819	-6,046	3,243	0,9981	0,7100	10,060
	10	1,884	0,0840	-6,304	3,354	0,9971	0,7295	9,830
0,30	50	1,864	0,0825	-6,033	3,263	0,9971	0,7090	9,823
	20	1,860	0,0891	-6,054	3,265	0,9945	0,7645	9,067
	10	1,844	0,0907	-5,997	3,263	0,9958	0,7722	8,770
0,10	50	1,842	0,0857	-6,260	3,400	0,9986	0,7279	9,237
	20	1,871	0,0887	-6,352	3,392	0,9962	0,7653	9,209
	10	1,924	0,0907	-6,154	3,214	0,9967	0,8041	9,510

1 Valores estimados no ajuste da reta : $\Phi^{-1}(F(\Delta)) = a + b \Delta^{1/3}$

2 Valores estimados pelas equações (6.27)

Tabela 5 - Alguns resultados da distribuição simulada de Δ_0 para diversos valores de Π_{10} e m_{10} e $K=10$

Π_{10}	m_{10}	Parâmetros de Δ_0				
		média	variância	razão	λ^1	ν^1
0,50	50	6,944	10,21	1,471	0,7355	9,441
	20	7,147	10,76	1,506	0,7530	9,491
	10	7,163	10,70	1,494	0,7470	9,589
0,30	50	6,943	10,26	1,477	0,7385	9,401
	20	6,931	10,93	1,577	0,7885	8,790
	10	6,796	10,62	1,569	0,7845	8,663
0,10	50	6,720	9,90	1,473	0,7365	9,124
	20	7,052	10,81	1,533	0,7665	9,200
	10	7,646	12,59	1,646	0,8230	9,290

¹ Valores estimados a partir de $\lambda = \sigma^2/(2\mu)$ e $\nu = \mu/\lambda$

Tabela 6 - Distribuição acumulada da simulação de $\Delta_0/(2(n-2)/\pi)$ (ID), distribuição acumulada de uma qui-quadrado com $K/(n-2)$ g.l. (QUID) e distribuição acumulada de uma qui-quadrado com $K-1$ g.l. (QI) no caso de 10 tratamentos.

m_{10}	ID	Π_{10}					
		0,50		0,30		0,10	
		QI	QUID	QI	QUID	QI	QUID
50	0,8000	0,8276	0,8414	0,8287	0,8424	0,8168	0,8312
	0,8500	0,8639	0,8755	0,8749	0,8858	0,8536	0,8659
	0,9000	0,9168	0,9247	0,9210	0,9286	0,9091	0,9176
	0,9500	0,9605	0,9645	0,9622	0,9663	0,9569	0,9614
	0,9750	0,9837	0,9856	0,9847	0,9865	0,9754	0,9782
	0,9950	0,9978	0,9981	0,9970	0,9974	0,9945	0,9952
20	0,8000	0,8441	0,8569	0,8269	0,8407	0,8422	0,8551
	0,8500	0,8841	0,8943	0,8843	0,8946	0,8834	0,8937
	0,9000	0,9338	0,9403	0,9266	0,9337	0,9199	0,9276
	0,9500	0,9500	0,9716	0,9622	0,9663	0,9673	0,9709
	0,9750	0,9681	0,9888	0,9861	0,9877	0,9863	0,9879
	0,9950	0,9972	0,9981	0,9985	0,9988	0,9960	0,9966
10	0,8000	0,8510	0,8634	0,8235	0,8376	0,8767	0,8875
	0,8500	0,8838	0,8941	0,8619	0,8736	0,9123	0,9205
	0,9000	0,9323	0,9390	0,9043	0,9132	0,9553	0,9600
	0,9500	0,9722	0,9753	0,9621	0,9662	0,9808	0,9830
	0,9750	0,9849	0,9867	0,9776	0,9802	0,9897	0,9910
	0,9950	0,9976	0,9979	0,9982	0,9985	0,9992	0,9993

Tabela 7 - Alguns resultados da distribuição simulada de $\Delta_o^{1/3}$ para diversos valores de Π_o e m_o e $K=6$

Π_o	m_o	Parâmetros de $\Delta_o^{1/3}$						
		média	variância	a^1	b^1	R^2^1	λ^2	ν^2
0,50	50	1,530	0,1058	-4,664	3,051	0,9966	0,7600	5,352
	20	1,525	0,1123	-4,437	2,914	0,9965	0,8062	5,037
	10	1,538	0,1066	-	-	-	0,7515	5,116
0,30	50	1,517	0,1065	-4,014	2,716	0,9963	0,7592	5,237
	20	1,516	0,1105	-4,632	3,043	0,9990	0,7884	5,057
	10	-	-	-	-	-	-	-
0,10	50	1,508	0,1124	-4,553	3,009	0,9894	0,7987	4,930
	20	1,523	0,1119	-4,373	2,890	0,9957	0,8023	5,041
	10	1,508	0,1124	-	-	-	0,7987	4,930

1 Valores estimados no ajuste da reta : $\Phi^{-1}(F(\Delta_o)) = a + b \Delta_o^{1/3}$

2 Valores estimados pelas equações (6.27)

- Valores perdidos devido a problemas internos do pacote

Tabela 8 - Alguns resultados da distribuição simulada de Δ_o para diversos valores de Π_o e m_o e $K=6$

Π_o	m_o	Parâmetros de Δ_o				
		média	variância	razão	λ^1	ν^1
0,50	50	4,069	6,305	1,550	0,775	5,25
	20	4,066	6,942	1,707	0,854	4,76
	10	4,132	6,612	1,600	0,800	5,16
0,30	50	3,982	6,744	1,694	0,8470	4,70
	20	3,991	6,333	1,587	0,7935	5,03
	10	-	-	-	-	-
0,10	50	3,937	6,146	1,561	0,7805	5,044
	20	4,048	6,711	1,658	0,8290	4,883
	10	5,174	8,194	1,584	0,7920	6,533

¹ Valores estimados a partir de $\lambda = \sigma^2/(2\mu)$ e $\nu = \mu/\lambda$

- Valores perdidos devido a problemas internos do pacote.

Tabela 9 - Distribuição acumulada da simulação de $\Delta_0 / (2(\pi-2)/\pi)$ (ID), distribuição acumulada de uma qui-quadrado com $K/(\pi-2)$ g.l. (QUID) e distribuição acumulada de uma qui-quadrado com $K-1$ g.l. (QI) no caso de 6 tratamentos.

m_6	π_6						
	ID	0,50		0,30		0,10	
		QI	QUID	QI	QUID	QI	QUID
50	0,8000	0,8520	0,8331	0,8322	0,8116	0,8432	0,8235
	0,8500	0,8877	0,8723	0,8866	0,8711	0,8942	0,8795
	0,9000	0,9257	0,9145	0,9298	0,9191	0,9372	0,9275
	0,9500	0,9686	0,9632	0,9760	0,9717	0,9720	0,9672
	0,9750	0,9842	0,9812	0,9863	0,9837	0,9811	0,9776
	0,9950	0,9978	0,9973	0,9987	0,9984	0,9896	0,9879
20	0,8000	0,8481	0,8289	0,8430	0,8233	0,8593	0,8411
	0,8500	0,8978	0,8835	0,8875	0,8721	0,8996	0,8855
	0,9000	0,9300	0,9194	0,9258	0,9147	0,9343	0,9242
	0,9500	0,9703	0,9651	0,9653	0,9594	0,9728	0,9680
	0,9750	0,9853	0,9825	0,9844	0,9815	0,9885	0,9863
	0,9950	0,9983	0,9980	0,9965	0,9958	0,9971	0,9965
10	0,8000	-	-	-	-	-	-
	0,8500	-	-	-	-	-	-
	0,9000	-	-	-	-	-	-
	0,9500	-	-	-	-	-	-
	0,9750	-	-	-	-	-	-
	0,9950	-	-	-	-	-	-

- Valores perdidos devido a problemas internos do pacote

Tabela 10 - Alguns resultados da distribuição simulada de $\Delta_0^{1/3}$ para diversos valores de Π_g e m_g e $K=3$

Parâmetros de $\Delta_0^{1/3}$								
Π_g	m_g	média	variância	a^1	b^1	R^2^1	λ^2	ν^2
0,50	50	1,104	0,1551	-2,786	2,521	0,9972	0,8585	2,170
	20	1,108	0,1625	-2,525	2,323	0,9939	0,9061	2,100
	10	1,111	0,1478	-2,759	2,504	0,9930	0,8199	2,279
0,30	50	1,113	0,1601	-2,543	2,330	0,9985	0,8947	2,141
	20	1,116	0,1595	-2,815	2,510	0,9970	0,8930	2,157
	10	1,114	0,1651	-2,646	2,392	0,9962	0,9261	2,091
0,10	50	1,098	0,1508	-2,851	2,566	0,9901	0,8766	2,106
	20	1,118	0,1637	-2,557	2,328	0,9951	0,9201	2,118
	10	1,153	0,1803	-2,617	2,293	0,9925	1,0490	2,059

1 Valores estimados no ajuste da reta : $\Phi^{-1}(F(\Delta)) = a + b \Delta^{1/3}$

2 Valores estimados pelas equações (6.27)

Tabela 11 - Alguns resultados da distribuição simulada de Δ_0 para diversos valores de Π_g e m_g e $K=3$

Parâmetros de Δ_0						
Π_g	m_g	média	variância	razão	λ^1	ν^1
0,50	50	1,865	3,310	1,774	0,8870	2,105
	20	1,911	3,760	1,968	0,9840	1,942
	10	1,872	3,219	1,720	0,8600	2,177
0,30	50	1,930	3,952	2,048	1,0243	1,885
	20	1,931	3,478	1,801	0,9015	2,144
	10	1,944	3,756	1,932	0,9667	2,012
0,10	50	1,850	3,113	1,683	0,8415	2,198
	20	1,958	3,943	2,014	1,0075	1,944
	10	2,161	4,702	2,175	1,0875	1,987

¹ Valores estimados a partir de $\lambda = \sigma^2/(2\mu)$ e $\nu = \mu/\lambda$

Tabela 12 - Distribuição acumulada da simulação de $\Delta_0/(2(n-2)/n)$ (ID), distribuição acumulada de uma qui-quadrado com $K/(n-2)$ g.l. (QUID) e distribuição acumulada de uma qui-quadrado com $K-1$ g.l. (QI) no caso de 3 tratamentos.

m_3	Π_3						
	0,50		0,30		0,10		
	ID	QI	QUID	QI	QUID	QI	QUID
50	0,8000	0,8739	0,8033	0,8754	0,8055	0,8752	0,8052
	0,8500	0,9180	0,8673	0,9141	0,8615	0,9149	0,8627
	0,9000	0,9411	0,9022	0,9480	0,9128	0,9452	0,9084
	0,9500	0,9747	0,9553	0,9819	0,9672	0,9793	0,9629
	0,9750	0,9884	0,9782	0,9925	0,9854	0,9901	0,9813
	0,9950	0,9991	0,9978	0,9996	0,9989	0,9966	0,9930
20	0,8000	0,8747	0,8045	0,8859	0,8205	0,8907	0,8273
	0,8500	0,9208	0,8715	0,9197	0,8699	0,9238	0,8760
	0,9000	0,9525	0,9198	0,9510	0,9175	0,9530	0,9206
	0,9500	0,9851	0,9726	0,9768	0,9587	0,9834	0,9697
	0,9750	0,9945	0,9890	0,9922	0,9850	0,9924	0,9854
	0,9950	0,9992	0,9980	0,9983	0,9963	0,9996	0,9990
10	0,8000	0,8665	0,7930	0,8864	0,8211	0,8939	0,8321
	0,8500	0,8983	0,8384	0,9237	0,8758	0,9314	0,8874
	0,9000	0,9481	0,9130	0,9544	0,9228	0,9598	0,9312
	0,9500	0,9774	0,9596	0,9795	0,9631	0,9905	0,9812
	0,9750	0,9906	0,9820	0,9922	0,9850	0,9972	0,9942
	0,9950	0,9981	0,9958	0,9992	0,9982	0,9996	0,9989

8. O ALGORITMO AID

8.1. Descrição do algoritmo AID

As soluções do algoritmo AID podem ser identificadas através do conjunto $T(I, \gamma)$, uma vez que o algoritmo é um caso particular do procedimento de divisão dicotômica hierárquica descrito no Capítulo 2.

De uma maneira geral tem-se N observações da $(p+1)$ -upla $(y, x_1, x_2, \dots, x_p)$, que correspondem aos valores da variável dependente Y e um conjunto de preditores categorizados $X_1, X_2, \dots, X_p$, bem como o conjunto $I = \{1, 2, \dots, K\}$ de caselas não vazias resultantes da tabulação cruzada total das observações. Quanto à regra de divisão, o algoritmo AID associa a cada variável X_p , uma regra γ_p , $p=1, \dots, P$, que pode ser tanto a regra monotônica como a livre.

O algoritmo se desenvolve através de divisões dicotômicas nas caselas marginais. Seja $I(X_p) = \{1, 2, \dots, K\}$ o conjunto de índices marginais criados pelo preditor X_p sobre todo o conjunto I . Então, $\Psi(I(X_p), \gamma_p)$ é o conjunto de todas as possíveis partições dicotômicas de $I(X_p)$ com relação a γ_p . Como $I(X_p)$ é uma particular partição do conjunto I , então $\Psi(I(X_p), \gamma_p)$ também corresponde a todas as partições dicotômicas do conjunto I com a regra marginal γ_p . Logo a classe de todas as

partições dicotômicas possíveis do conjunto I no algoritmo AID é dada por

$$\Psi(I, \gamma) = \bigcup_{p=1}^P \Psi(I(X_p), \gamma_p) \quad (8.1)$$

Ao conjunto I está associado um conjunto de pesos $W = \{w_i = n_i/N : i \in I\}$, onde w_i é a proporção de elementos em cada casela $i \in I$. Para o conjunto $I(X_p)$, tem-se associado um conjunto $W(X_p)$, que corresponde à proporção de elementos em cada casela marginal do preditor X_p .

Se i um elemento de $T(I, \gamma)$ tem-se que

$$i = (I_1(i), I_2(i), \dots, I_G(i)) \quad (8.2)$$

e portanto de (2.15) tem-se que

$$\begin{aligned} SQT(total) &= \sum_{g=1}^G SQT_g(grupo) + \sum_{g=1}^G N_g (\bar{y}_g - \bar{y})^2 \\ &= \sum_{g=1}^G SQT_g(grupo) + SQX(G) \end{aligned} \quad (8.3)$$

O algoritmo prossegue fazendo a divisão tal que:

O Critério de seleção: Dos G grupos candidatos seleciona-se aquele que tem maior $SQT(grupo)$. Sem perda de generalidade assume-se que

$$SQT_1(grupo) \leq SQT_2(grupo) \leq \dots \leq SQT_G(grupo)$$

ii) Divisão ótima: Para cada preditor X_p encontra-se a partição de $\Psi(I_G(X_p), \gamma_p)$ que conduz à redução máxima SQE, isto é,

$$\begin{aligned} B[\gamma_p, I_G(X_p), W_G(X_p)] &= \\ &= \max \{ SQE[d, \gamma_p, I_G(X_p), W_G(X_p)] : d \in \Psi(I_G(X_p), \gamma_p) \} \end{aligned} \quad (8.4)$$

onde $SQE[d, \gamma_p, I_G(X_p), W_G(X_p)]$ significa a redução SQE na partição d , por uma divisão dicotômica do grupo G com o conjunto de índices $I_G(X_p)$ do preditor X_p , usando a regra γ_p , tendo como conjunto associado de pesos $W_G(X_p)$.

Seja X_0 o preditor tal que

$$\begin{aligned} B[\gamma_0, I_G(X_0), W_G(X_0)] &= \\ &= \max \{ SQE[\gamma_p, I_G(X_p), W_G(X_p)] : 1 \leq p \leq P \} \end{aligned} \quad (8.5)$$

Então, existe uma partição $d_0 \in \Psi(I_G(X_0), \gamma_0)$ tal que

$$B[\gamma_0, I_G(X_0), W_G(X_0)] = SQE[d_0, \gamma_0, I_G(X_0), W_G(X_0)] \quad (8.6)$$

Essa partição define a divisão ótima neste estágio.

iii) As regras de parada: A divisão ocorre efetivamente se as seguintes condições forem preservadas:

- $B[\gamma_0, I_G(X_0), W_G(X_0)]$ é maior que algum valor pré determinado expresso como uma fração de $SQT(total)$.

- o número de elementos nos grupos

resultantes é maior que algum número fixado, em geral 25.

• o número total de divisões não alcança um certo máximo, por exemplo 6<30.

■

Considerando que a partição final produzida pelo algoritmo AID tem G grupos, isto é, houve $G-1$ divisões, mostra-se que

$$SQX(G) = \sum_{g=1}^{G-1} B(g) = SQX(G-1) + B(G-1) \quad (8.7)$$

isto é, a soma de quadrados explicada pelo modelo de G grupos é a soma da redução SQE nas $G-1$ divisões dicotômicas que ocorrem para formar a partição.

A primeira regra de parada diz que a redução máxima nessa divisão deve ser maior que uma fração de $SQT(total)$. Assim usando a expressão (8.7), tem-se a estatística

$$\begin{aligned} R^2(G) &= SQX(G) / SQT(total) \\ &= R^2(G-1) + B(G-1) / SQT(total) \end{aligned} \quad (8.8)$$

que pode ser útil para tal fim, uma vez que se uma nova divisão aumenta um pouco a explicação do modelo então essa divisão não deve ocorrer. Esse valor é escolhido de maneira empírica tendo em mente alguns cuidados. Se ele é fixado muito baixo, podem-se obter divisões devidas unicamente à aleatoriedade dos dados. Se muito alto, pode-se terminar sem ter sido feita qualquer divisão, e não se sabe se isso é devido a estrutura dos dados ou

devido ao valor crítico escolhido. Por outro lado, um limite inferior único não é razoável para todos os tipos de problemas.

A segunda regra de parada tenta evitar influências de valores extremos no critério. Já a terceira é apenas uma medida de segurança para evitar um grande número final de grupos, quando o objetivo primeiro de agrupar pode estar seriamente comprometido.

A procura da partição d_0 em (8.8) não leva em conta a regra γ associada ao preditor e nem o número de classes ou mesmo a distribuição dos tamanhos das caselas. Sabe-se atualmente que esses fatores são importantes na determinação do comportamento de B , uma vez que as divisões tendem a ocorrer nos fatores com o maior número de classes e com a regra de divisão livre, em vez da monotônica.

8.2. Algumas alternativas sobre critérios de seleção e regras de parada

Como o algoritmo AID possui alguns pontos que podem torná-lo pouco atrativo na sua aplicação em determinados casos, BUSSAB (1976) sugeriu algumas modificações que podem ser utilizadas para melhorar o seu desempenho. O critério de seleção e as regras de paradas influem de fato na obtenção da árvore de divisão. Em muitas situações é recomendado que se apresente a análise com as diversas combinações de critério de seleção e regras de parada para que o pesquisador escolha a árvore que possa melhor explicar o agrupamento, de acordo com a

teoria específica do assunto em questão.

No algoritmo AID, o critério de seleção elege como o grupo a ser dividido aquele onde se dá a maior redução da soma de quadrados entre grupos SQE . Entretanto isto implica que o candidato é aquele grupo que possui a maior soma de quadrados total que pode ser expressa por

$$SQT_g(\text{grupo}) = \sum_{k \in g} \sum_{j=1}^{n_k} (y_{kj} - \bar{y}_g)^2 = \sum_{i=1}^{N_g} (y_{ig} - \bar{y}_g)^2 \quad (8.9)$$

Um rápido exame nessa expressão mostra que ela aumenta com o número de elementos no g -ésimo grupo, N_g . Assim um grupo grande pode produzir uma $SQT(\text{grupo})$ maior que outro grupo que possui grande diferença entre as médias de caselas.

Uma abordagem alternativa proposta por BUSSAB (1976) é usar uma divisão do passo seguinte para seleccionar o grupo que realmente produz a maior redução SQE . Assim em cada conjunto $I_g(d)$ da partição d encontra-se o correspondente valor do critério BCI_g , e o grupo candidato será aquele, g_0 , tal que

$$B[I_{g_0}(d)] = \max \{ BCI_g(d) : 1 \leq g \leq G \} \quad (8.10)$$

Outro critério de seleção de partição ótima é aquele que escolhe a partição que apresenta o menor nível descritivo da estatística B . Quando, entretanto, esta última não tem distribuição conhecida, pode-se usar o critério alternativo (BUSSAB, 1976) que algumas vezes é também chamado de critério empírico

(HO, 1987), o qual através do coeficiente de explicação R^2 definido no Capítulo 2, busca a partição que possui o maior R^2 , ou seja a partição mais significativa. A relação entre os critérios de seleção que se utilizam da estatística B , e do coeficiente de explicação R^2 ou mesmo R_*^2 parece muito grande, uma vez que quase sempre levam ao mesmo resultado.

A proposta de KASS (1980), escolhe a partição que apresenta o menor nível de significância de Bonferroni. Este último, definido a partir da desigualdade de Bonferroni, considera que se o valor da estatística B for maior que o valor crítico a um nível α/D , então a divisão deve ser feita, onde D é igual a $K-1$ se a regra de partição for a monotônica, e igual a $2^{K-1}-1$ se a regra de partição for a livre, e α é um nível de significância padrão pré-fixado.

Tanto no critério do menor nível de significância de Bonferroni, como no critério de menor nível descritivo, o conhecimento da distribuição da estatística B é muito importante e na maioria das vezes se utiliza sua distribuição assintótica.

8.3. Um procedimento para valores pequenos de B

A estatística do teste da razão de máxima verossimilhança para testar a hipótese nula de que todas as médias são as mesmas contra a alternativa de que elas podem ser divididas em dois grupos é dada por B/σ^2 , para σ^2 conhecido, como foi visto no Capítulo 2. A rejeição da hipótese nula e o valor observado da estatística são

elementos suficientes para mostrar como os grupos podem ser divididos. Levando também em consideração, conforme mostrado por BUSSAB (1976), que para valores menores que 30, a aproximação à distribuição de qui-quadrado pode ser muito útil e prática para se obterem os valores da probabilidade de B/σ^2 , o algoritmo AID pode então ser redefinido usando um procedimento de teste hierárquico.

Vale a pena lembrar que o teste da razão de máxima verossimilhança acima mencionado foi obtido para grandes amostras ou onde a variância σ^2 é conhecida. Assim poderia ser usada a estatística $s^2 = SQD(total)/v$ como estimador de σ^2 para problemas onde se tem um grande número de graus de liberdade do resíduo.

Outro fato, visto anteriormente, é que a aproximação (6.26) para um dado conjunto de parâmetros (γ, K, W) tem associada a linha reta

$$\Phi^{-1}[F(b; \gamma, K, W)] = M(\gamma, K, W)b^{1/3} + N(\gamma, K, W) \quad (6.28)$$

que torna possível a comparação de valores para diferentes conjuntos de parâmetros. O valor mais significativo é aquele com o maior valor de Φ^{-1} . A quantidade b aqui mostrada é o valor observado de B/σ^2 .

Um terceiro ponto se refere ao uso da desigualdade de Bonferroni. Para uma sequência de T testes de hipóteses cada um com nível de significância menor ou igual a α , o nível geral de significância é da ordem de $\alpha' = \alpha/T$. Como no procedimento aqui descrito não se sabe "a priori" quantos testes serão feitos durante o processo, então recomenda-se, em cada passo, mudar o nível de significância para testar cada suposição em

particular.

Dessa maneira os passos do algoritmo AID podem ser redefinidos. Após $G-1$ divisões sucessivas, o processo produz uma partição i com G grupos.

$$i = \{I_1(i), I_2(i), \dots, I_G(i)\} \quad (8.11)$$

e os passos do algoritmo AID tornam-se:

i) Critério de seleção: Dos G conjuntos da partição i , seleciona-se como grupo aquele que produz o valor mais significante quando dividido. Sem perda de generalidade seja $I_G(i)$ tal grupo.

ii) Divisão ótima: Para cada preditor X_p , encontrar a partição de $\Psi(I_G(X_p), \gamma_p)$ que leva a redução máxima SQE,

$$\begin{aligned} B[\gamma_p, I_G(X_p), W_G(X_p)] &= \\ &= \max \{ SQE[d, \gamma_p, I_G(X_p), W_G(X_p)] : d \in \Psi(I_G(X_p), \gamma_p) \} \end{aligned} \quad (8.12)$$

Sendo X_p o preditor que produz o valor mais significante, isto é,

$$\begin{aligned} \Phi^{-1}[F(b; \gamma_o, I_G(X_o), W_G(X_o))] &= \\ &= \max(\Phi[F(b; \gamma_p, I_G(X_p), W_G(X_p))]: 1 \leq p \leq P) \end{aligned} \quad (8.13)$$

e $B(S_o)$, a redução SQE na G -ésima divisão, então existe uma partição $d_o \in \Psi(I_G(X_o), \gamma_o)$ tal que

$$B(S_g) = SQE [d_o, \gamma_o, I_g(X_o), W_g(X_o)]. \quad (8.14)$$

Essa partição dicotômica d_o é a divisão ótima nesse estágio.

iii) A regra de parada: A divisão dicotômica ocorre se todos os valores observados de $B(S_g)$, para $1 \leq g \leq G$, são significantivos ao nível α/G , com α fixado "a priori".

As tabelas construídas por BUSSAB (1976) podem ser utilizadas pois trazem os pontos críticos de $\Phi^{-1}(F)$ com valores crescentes de G , usando a aproximação (6.26) para a distribuição de qui-quadrado tendo um nível de significância geral de 5%.

8.4. Procedimentos para valores grandes do critério B

As sugestões da seção anterior não são aplicáveis quando os valores de B/s^2 são grandes e em geral isso pode ocorrer para amostras grandes e um número grande de preditores.

Como a aproximação (6.26) para a distribuição de qui-quadrado não é boa para valores extremos na cauda superior da distribuição, é conveniente se utilizarem outros critérios nessa situação.

Para a regra de parada, por exemplo, uma nova divisão ocorre se sua contribuição, a explicação R^2 do modelo, dada por $SQE/SQT(total)$ é significativa, tendo sido fixada uma proporção mínima arbitrária $Pr[min]$ da soma de quadrados total que cada divisão pode explicar.

Como não é razoável se fixar "a priori" um número sem levar em conta a natureza e estrutura dos dados, parece razoável se utilizar essa medida padronizada. Assim pode-se julgar a significância de uma divisão pela estatística (5.3) que neste caso corresponde a

$$R_{*}^2(G) = SQX(G) / SQE(total)$$

$$= R_{*}^2(G-1) + B(G-1) / SQE(total) \quad (8.15)$$

Como até o momento parecem não existir evidências suficientes para valores empíricos razoáveis em problemas práticos, existe a sugestão de escolher um limite inferior, baseado na ocorrência de divisões devidas apenas a aleatoriedade dos dados.

A variável aleatória $B(\gamma_L, W_0)$ obtida quando da aplicação da regra de divisão dicotômica livre e igual número de observações por casela produz uma função distribuição acumulada que pode ser considerada como um limite inferior dos demais casos, conforme mostrado anteriormente. Usando essa propriedade da variável $B(\gamma_L, W_0)$, além da desigualdade de Bonferroni para a obtenção do nível de significância geral da sequência de T testes de hipóteses do processo de divisão, BUSSAB (1976) construiu uma tabela para a quantidade $b_0(\alpha, T)$, denotada por $\hat{b}_0^1(\alpha, T)$, obtida a partir da expressão

$$P\{BC(\gamma_L, W_0) \leq b_0(\alpha, T)\} = 1 - \alpha/T \quad (8.16)$$

para o caso em que o número máximo de caselas por preditor é 10 e o nível de significância geral é 0,05.

A ligação entre o valor observado de $b_0(\alpha, T)$ e a proporção mínima $Pr(min)$ ou $Pr_*(min)$ pode ser feita julgando a significância de $\hat{b}_0(\alpha, T)\sigma^2$.

Como o teste da razão de verossimilhança foi obtido para σ^2 conhecido ou para valores grandes de ν quando σ^2 é estimado por $s^2 = SQDC(total)/\nu$, a proporção mínima da soma de quadrados total no critério AID é escolhida de tal modo que

$$\begin{aligned} Pr(min) = B / SQT(total) &\geq b_0(\alpha, T) s^2 / SQT(total) \\ &= (b_0(\alpha, T) / \nu) \times (SQDC(total) / SQT(total)) \end{aligned} \quad (8.17)$$

sendo garantido que toda divisão produz um modelo com uma significância geral menor que α .

8.5. Uma boa aproximação para a distribuição de B_K

Para o caso em que a regra de divisão é a livre, uma boa aproximação para a distribuição da estatística B quando da aplicação da técnica AID, foi

obtida por SCOTT & KNOTT (1976), baseada em resultados de BUSSAB (1976) e KASS (1975).

Este último considerou a distribuição de permutação da estatística B para a técnica AID e tabulou diversos pontos de porcentagem da distribuição limite quando $n \rightarrow \infty$ no caso particular em que o número de observações por casela, n_i , é o mesmo.

A aproximação de SCOTT & KNOTT (1976) estende o resultado para o caso em que o número de observações por casela é diferente.

Supondo que K/n permanece fixo quando $K \rightarrow \infty$ e $w = 2 + \alpha K/n$, onde $\alpha = \left(\sum_{i=1}^K \sqrt{w_i/K} \right)^2$ e $w_i = n_i/n$, de tal modo que $\max w_i \rightarrow 0$ e nenhuma categoria está vazia, a variável B tem aproximadamente distribuição qui-quadrado com ν_0 graus de liberdade e coeficiente de proporcionalidade igual a $2(1-w/n)$ e com $\nu_0 = \alpha K/(n-w) + 1/2$.

No estudo da precisão dessa aproximação, SCOTT & KNOTT (1976) verificaram que ela é muito boa, sendo que na proximidade do quantil 95% ela é melhor, e esses resultados também são válidos para K pequeno.

8.6. Uma modificação do algoritmo AID para dados da família exponencial.

Considerando a estatística $\Delta(\hat{\mu}_d)$ como medida de homogeneidade entre grupos, o algoritmo AID pode ser aplicado a diferentes tipos de variáveis aleatórias, atendendo, pelo menos, às distribuições que

pertençam à família exponencial. Desse modo o algoritmo pode ser redefinido por:

Passo 1: Critérios de seleção:

Como critério de seleção pode-se utilizar um dos seguintes:

- i) escolher como grupo a ser dividido aquele onde se dá a maior redução $\Delta(\hat{\mu}_d)$.
- ii) escolher como grupo a ser dividido aquele que produz no passo seguinte a maior redução $\Delta(\hat{\mu}_d)$.

Passo 2: Critérios de partição ótima.

Como critérios de partição ótima têm-se :

- i) escolher como divisão ótima aquela que produz a maior redução $\Delta(\hat{\mu}_d)$.
- ii) escolher como divisão ótima aquela que produz a redução $\Delta(\hat{\mu}_d)$ com o menor nível descritivo.

Passo 3: Regras de parada.

Como critérios de parada têm-se:

- i) o valor de R^2 (5.4) ou de R_*^2 (5.5) se alterou menos que um valor pré-fixado com relação à divisão imediatamente anterior.
- ii) o número de elementos nos grupos resultantes é menor que algum número pré-fixado.
- iii) o número total de divisões não alcança um certo máximo.
- iv) o nível descritivo do máximo da redução $\Delta(\hat{\mu}_d)$

não é maior que um valor pré-fixado.

■

9. A UTILIZAÇÃO DO ALGORITMO AID EM DADOS BINOMIAIS

A combinação entre os diversos critérios de seleção, os diversos tipos de partição ótima e as diversas regras de parada, em geral, levam a diferentes árvores de agrupamento. Cabe ao pesquisador escolher a árvore que melhor possa explicar o agrupamento.

A aplicação das alternativas onde se faz necessário o conhecimento da distribuição do máximo da estatística $\Delta(\hat{\mu}_d)$ pode tornar o algoritmo pouco viável.

Para o caso normal, fez-se um breve apanhado no Capítulo 6 e o Capítulo 7 apresentou um estudo por simulação da estatística $\Delta(\hat{\pi}_{d0})$ para o caso binomial.

Apresenta-se, a seguir, a análise do experimento sobre o efeito de 12 fungicidas em porcentagem de germinação de sementes de milho, citado no Capítulo 1, considerando o modelo logito, bem como a aplicação de técnicas de agrupamentos.

9.1. Uma análise de um experimento com fungicidas.

Na Tabela 13 estão os resultados de um ensaio, inteiramente ao acaso, sobre o comportamento de 12 fungicidas em porcentagem de germinação de sementes de milho, com 4 repetições, realizado no Departamento de Agricultura da ESALQ/USP.

Tabela 14 - Porcentagem de germinação de sementes de milho em um ensaio completamente ao acaso sobre o comportamento de 12 fungicidas com 4 repetições.

FUNGICIDAS \	REPETIÇÕES			
	1	2	3	4
1	88	94	88	88
2	95	97	86	89
3	91	90	94	92
4	95	86	96	94
5	94	92	93	89
6	85	80	85	83
7	80	82	74	83
8	64	84	72	76
9	90	83	90	91
10	95	95	96	95
11	96	99	92	95
12	94	91	89	95

Fonte: Departamento de Agricultura / ESALQ - USP.

O programa, bem como sua saída, para a análise estatística utilizando-se o modelo, em que se supõe distribuição binomial para a variável resposta,

número de sementes germinadas, e a transformação logística para o valor esperado, encontram-se no Apêndice 3.

A análise do desvio correspondente (Tabela 14) indica que existem diferenças entre fungicidas, pois a razão dos desvios médios quando comparada com uma distribuição F com 11 e 36 graus de liberdade tem um nível descritivo inferior a 1%.

Tabela 14 - Quadro de análise do desvio para o número de sementes germinadas em um ensaio completamente ao acaso sobre o comportamento de 12 fungicidas com 4 repetições.

FONTE DE VARIAÇÃO	GL	DESVIO	DESVIO MÉDIO	RAZÃO
FUNGICIDAS	11	173,87	15,81	10,47
RESÍDUO	36	54,34	1,51	

Os gráficos de resíduos não indicaram qualquer violação contra o modelo adotado, quer seja com relação à função de ligação, quer seja com relação à função de variância. Pode-se dizer que o modelo usado está bem ajustado aos dados.

No Gráfico 1 estão os valores observados de porcentagem de sementes germinadas e os respectivos valores ajustados para os 12 fungicidas.

Gráfico 1 - Porcentagem de germinação de sementes de milho observada e ajustada pelo modelo com ligação logística por fungicida.

Também foi ajustado o modelo com ligação 'probit', que apresentou resultados bem próximos aos do modelo com ligação logística. Entretanto, este último é de mais fácil interpretação.

9.2. Resultados da aplicação do algoritmo AID

Na Tabela 15 estão os principais elementos para a construção de árvores de divisão dicotômica. A combinação dos diferentes critérios de seleção, critérios de partição ótima e regras de parada pode produzir

agrupamentos diferentes.

Tabela 15 - Quadro resumo dos resultados do algoritmo de divisão dicotômica hierárquica.

nó	Δ_o	$\lambda \times \Delta_o$	ν	$\hat{\alpha}$	grupos
1	139,6	192,1	10,51	$\ll 0,1\%$	$\langle 8,7,6 \rangle$ e $\langle 9,1,2,3,5,12,4,10,11 \rangle$
2	8,825	12,14	2,628	0,49%	$\langle 8 \rangle$ e $\langle 7,6 \rangle$
3	16,62	22,86	7,884	0,34%	$\langle 9,1,2,3,5,12,4 \rangle$ e $\langle 10,11 \rangle$
4	6,585	9,060	6,132	17,87%	$\langle 9,1 \rangle$ e $\langle 2,3,5,12,4 \rangle$
5	0,028	0,039	1,752	95,17%	$\langle 10 \rangle$ e $\langle 11 \rangle$
6	1,627	2,239	1,752	27,58%	$\langle 7 \rangle$ e $\langle 6 \rangle$

Considerando como critério de seleção a maior redução $\Delta(\hat{\pi}_d)$, como partição ótima o ramo que no passo seguinte apresenta o menor nível descritivo e como regra de parada, a partição ótima com um nível descritivo superior a um valor pré-fixado, obteve-se a árvore de divisão dicotômica do Gráfico 2.

A formação da árvore começou pelo nó (1) com o cálculo da estatística $\lambda \times \Delta_o$ cujo valor foi de 192,1 e o número de graus de liberdade associado é de $\nu=10,51$ e o nível descritivo é $\hat{\alpha} \ll 0,1\%$. Para a escolha da próxima partição dicotômica, calculou-se o valor da estatística $\lambda \times \Delta_o$ no passo seguinte: para o nó (2) seu valor foi de 12,14 com $\nu=2,628$ e nível descritivo de $\hat{\alpha} \approx 0,49\%$ e para o nó (3), $\lambda \times \Delta_o = 22,86$ com $\nu=7,884$ e $\hat{\alpha} \approx 0,34\%$. Desse modo a segunda divisão escolhida deve ser feita no nó (3). Como o nível descritivo é inferior a 1%, examinam-se as partições no passo seguinte: para o nó (4), $\lambda \times \Delta_o = 9,060$

com $\nu=6,132$ e o nível descritivo de $\hat{\alpha}\approx 17,87\%$ e para o nó (5), $\lambda \times \Delta_0 = 0,039$ com $\nu=1,732$ e o nível descritivo de 95,1%. Com esses resultados chegou-se à conclusão que esse nó não deve ser dividido. Ao se examinar o nó (2), deve-se aceitar sua divisão em dois grupos e passa-se a examinar o nó (6). O valor de $\lambda \times \Delta_0$ é de 2,239 com 1,752 graus de liberdade e o nível descritivo de 27,58%. Portanto o nó (6) não deve ser dividido.

Gráfico 2 - Árvore de divisão dicotômica considerando como partição ótima o menor nível descritivo no passo seguinte.

Ao final do algoritmo obtiveram-se os grupos: $\{8\}$, $\{6,7\}$, $\{9,1,3,5,2,12,4\}$, $\{10,11\}$. Pode-se dizer que adotando-se o nível de significância individual de 1%, o nível geral é de $1-(1-0,01)^5=4,9\%$.

O Gráfico 3 foi montado considerando como critério de seleção o grupo onde se dá a maior redução, como critério de partição ótima a que produz a maior redução e como regra de parada a obtenção de 5 grupos finais, o algoritmo começa no nó (1) da Tabela 15. A seguir, examinando os nós (2) e (3), este último é escolhido. Até este passo têm-se 3 grupos. O algoritmo prossegue examinando o nó (2). A seguir viria o nó (4). Os grupos formados são: $\{8\}$, $\{7,6\}$, $\{9,1\}$, $\{2,3,5,12,4\}$, $\{10,11\}$.

Na primeira aplicação do algoritmo, a estatística R^2 é da ordem de $(139,6 + 8,825 + 16,62) / 228,21 = 72,32\%$. Na segunda aplicação a estatística R^2 é de $(139,8 + 8,825 + 16,62 + 6,585) / 228,21 = 75,21\%$.

Com relação à estatística R_*^2 , na primeira aplicação seu valor foi de $(139,6 + 8,825 + 16,62) / 173,87 = 94,92\%$ e na segunda aplicação $(139,6 + 8,825 + 16,62 + 6,585) / 173,87 = 98,71\%$.

Essas duas combinações de critérios usados no algoritmo AID ilustram diferentes maneiras de se construir árvore de divisão dicotômica hierárquica, sendo que a última dispensa totalmente o uso da distribuição da estatística $\Delta(\hat{\pi}_{d_o}^{\wedge})$.

Gráfico 3 - Árvore de divisão dicotômica considerando como partição ótima a maior redução e como regra de parada a obtenção de 6 grupos

10. CONCLUSÕES.

Para problemas em que não é conveniente assumir que os dados venham de uma distribuição normal, a aplicação direta do algoritmo AID pode tornar-se pouco atrativa. Usando, então, a função desvio definida em (3.6) pôde-se generalizar o conceito de medida de homogeneidade entre grupos utilizando a estatística $\Delta(\hat{\mu}_d)$, sempre que os dados sejam de uma distribuição que pertence à família exponencial.

As expressões para $\Delta(\hat{\mu}_d)$ foram obtidas considerando as funções de ligações naturais, peso "a priori" unitário e as distribuições de erro binomial, Poisson e normal. Para esta última os resultados coincidem com os obtidos por SCOTT & KNOTT (1974) e BUSSAB (1976). Com relação à proporção explicada do desvio, R^2 , dada em (5.4), bem como para a proporção explicada do desvio padronizada, dada em (5.5), também foram obtidas as expressões, sob as mesmas condições. Novamente os resultados coincidiram com os obtidos por BUSSAB (1976) no caso de distribuição normal.

Por simulação, verificou-se que o máximo da redução $\Delta(\hat{\mu}_d)$, que corresponde a dados com distribuição binomial, também apresenta distribuição aproximadamente proporcional a uma distribuição qui-quadrado com $K/(\pi-2)$ graus de liberdade e parâmetro

de proporcionalidade igual a $\pi/[2(\pi-2)]$.

Esses resultados foram verificados para K variando de 3 a 10, sendo que a qualidade da aproximação é maior conforme K aumenta.

Também foi elaborado um programa em GLIM que fornece os elementos básicos para a obtenção de árvores de divisão dicotômica hierárquica.

No caso específico de dados com distribuição binomial este tipo de análise é preferível àquele que utiliza, por exemplo, a transformação arco seno da raiz quadrada, uma vez que um agrupamento na variável transformada pode não fazer sentido para o pesquisador que está interessado em um agrupamento na variável original.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ATKINSON, A.C. Regression diagnostics, transformations and constructed variables. *Journal of the Royal Statistical Society B*, Londres, 44(1): 1-36, 1982.

ATKINSON, A.C. *Plots, transformations, and regression*. Oxford, Clarendon Press, 1985. 282p.

ATKINSON, A.C.; DAVISON, A.C.; NELDER, J.A.; O'BRIEN, C.M. *Model checking*. Londres, Skeleton notes, Department of Mathematics, Imperial College, 1989. 115p.

BISHOP, Y.M.M.; FIENBERG, S.E.; HOLLAND, P.W. *Discrete multivariate analysis: theory and practice*. Cambridge, MA., MIT Press, 1975. 557p.

BUSSAB, W.O. Hierarchical dichotomous partitions in cluster analysis. Londres, 1976. 236p. (Ph.D. - L.S.E. University of London).

COX, D.R. & SPJØTVOLL, E. On partitioning means into groups. *Scand J. Statist*, Noruega, 9: 147-152, 1982.

DACHS, J.N.W. *Estatística Computacional*. Rio de Janeiro,

Livros Técnicos e Científicos Ltda, 1988. 236p.

DAVISON, A.C. Model checking 1: general regression models. Conferência apresentada na 1a. *Escola de Modelos Lineares*, São Paulo, Instituto de Matemática e Estatística - USP, 1989a.

DAVISON, A.C. Model checking 2: binary data. Conferência apresentada na 1a. *Escola de modelos lineares*, São Paulo, Instituto de Matemática e Estatística - USP, 1989b.

FISHER, W.D. On grouping for maximum Homogeneity. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 53: 789-798, 1958.

FOWLKES, E.B. Some diagnostics for binary logistic regression via smoothing. *Biometrika*, Londres, 74(3): 507-15, 1987.

HARTIGAN, J.A. Direct clustering of a data matrix. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 67: 123-129, 1972.

HO, L.L. Alguns aspectos da técnica AID para variável resposta categorizada. São Paulo, 1987. 135p. (Mestrado - Instituto de Matemática e Estatística - USP).

HOFFMANN, R. & VIEIRA, S. *Análise de regressão: uma introdução à econometria*. 2a. ed., São Paulo,

Hucitec, 1987. 379p.

JØRGENSEN, B. Maximum likelihood estimation and large-sample inference for generalized linear and nonlinear regression models. *Biometrika*, Londres, 70: 19-28, 1983.

KASS, G.V. Significance testing in automatic interaction detection (AID). *Applied Statistics*, Londres, 24: 178-89, 1975.

KASS, G.V. An exploratory technique for investigating large quantities for categorical data. *Applied Statistics*, Londres, 29(2): 119-27, 1980.

LEE, A.H. Assessing partial inference in generalized linear models. *Biometrics*, Alexandria, VA, 44: 71-7, 1988.

McCULLAGH, P. & NELDER, J.A. *Generalized linear models*. 2a. ed., Londres, Chapman and Hall, 1989. 511p.

MORGAN, J.N. & SONQUIST, J.A. Problems in the analysis of survey data. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 58: 415-434, 1963.

NELDER, J.A. & WEDDERBURN, R.W.M. Generalized linear models. *Journal of the Royal Statistical Association A*, Londres, 135: 370-84, 1972.

PAYNE, C.D. (ed.) *The GLIM System - release 3.77*.

Oxford, Numerical Algorithms Groups Ltd, 1986. 305p.

PIERCE, D.A. & SCHAFER, D.W. Residuals in generalized linear models. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 81: 977-86, 1986.

PREGIBON, D. Goodness of link tests for generalized linear models. *Applied Statistics*, Londres, 29(1): 15-24, 1980.

PREGIBON, D. Logistic Regression Diagnostics. *Annals of Statistics*, Hayward, CA, 9(4): 705-24, 1981.

SCOTT, A.J. & KNOTT, M. A cluster analysis method for grouping means in the analysis of variance. *Biometrics*, Alexandria, 30: 507-512, 1974.

SCOTT, A.J. & KNOTT, M. An approximate test for use with AID. *Applied Statistics*, Londres, 25: 103-6, 1976.

WANG, P.C. Residual plots for detecting nonlinearity in generalized linear models. *Technometrics*, Washington, 29(4): 435-8, 1987.

WARD Jr., J.H. Hierarchical grouping to optimize an objective function. *Journal of the American Statistical Association*, Washington, 58: 236-244, 1963.

WILLIAMS, D.A. Generalized linear model diagnostics using the deviance and single case deletions.

Applied Statistical, Londres, 36(2): 181-91, 1987.

WILSON, E.B. & HILFERTY, M.M. The distribution of chi-square. *Preceedings of the National Academy of Sciences*, Washington, 17: 684-8, 1931.

APENDICE 1

O PROGRAMA DE SIMULAÇÃO

Para o estudo da estatística $\Delta(\hat{\pi}_{d_0})$ foi elaborado um programa de simulação escrito em linguagem GLIM 3.77 (PAYNE, 1986).

Considerando 10 tratamentos, 0,5 como o vetor de probabilidade e 20 como o numerador da binomial, a listagem a seguir é um exemplo de uma das 27 situações estudadas.

```

\glim\bsim\d9-10.
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
*****
!*
!*      Simulacao com                               *!
!*      K= 10 tratamentos,                          *!
!*      V= 4 repeticoes por tratamento,              *!
!*      N= 20 numerador da binomial,                *!
!*      P= 0,5 ( 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 )   vetor de probabilidade *!
!*      Z= 1000 simulacoes                         *!
!*                                                  *!
*****
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
*****
!
! MACRO SITA simula a tabela de dados binomiais com
!       N=%N,
!       K=%K tratamentos,
!       V=%V repeticoes por tratamento
!       P= vetor de probabilidade de comprimento K.
!
$MACRO SITA $DEL %J Y N $UNITS %X $CALC %J=%K $WHILE %J M1 $$E!
$MACRO M1 $CALC %R=%V $WHILE %R SIMULA $CALC %J=%J-1 $$E!
*****
!
! A MACRO SIMULA gera uma amostra de uma distribuicao
! binomial com N=%N E P=%P
!
$MACRO SIMULA $DEL G K %U $VAR %N K G $CALC %I=%N $WHILE %I BIN $!
$CALC K=%CU(G) : %U=(%J-1)*%V+%R : Y(%U)=K(%N) : %R=%R-1 $$E!
$MACRO BIN $CALC G(%I)=%GT(P(%J),%SR(0)) : %I=%I-1 $$E!
*****
!
! A MACRO SCKN fornece a analise de agrupamentos para K grupos
!
$MACRO SCKN !
$DEL A B DV R T $VAR %K DV A B $VAR %X T $YVAR YV $ERROR B N $!
$CALC %T=(%C+%F*S)/(%K+%F) $! sigma2 0
$CALC T=2 : DV(1)=%B : %M=0 : %O=%K $WHILE %O AJU1 $!
$TABULATE THE DV SMALLEST INTO R $CALC %E=R $CALC %R=100*(%B-%E)/%B!
$CALC B=%EQ(DV,%E) $CALC B=%CU(B) : %E=%B-%E $!
$CALC %L=%PI/(2*(%PI-2))*%E/%T : %M=%PI/(2*(%PI-2))*%E/%S !
: %O=%TR(%K/((%PI-2))) : A=1-B $CALC A=A*TR : B=B*TR $!
$ARG CHIP %L %O $CAL %Q=#CHIP $!
$CALC DELTA(%W)=%E : LAMB(%W)=%L : LAMM(%W)=%M : PHI(%W)=%A !
: IND(%W)=%W : %W=%W-1$!
!PRINT : 'DELTA PI = ' %E ' SQT = ' %B ' GRAUS DE LIBERDADE = ' %O
! ' SIGMA2 0 = '%T' LAMBDA = '%L' NIVEL DESCRITIVO = '%Q:' R2 = '
! '%R' POR CENTO': ' DIVISAO EM : ': *2 A ' / '*2 B ::$!
$TRANS $$E!
*****
$MACRO AJU1 $CALC %L=%V $WHILE %L AJU2 $!
$FAC T 2 $FIT T $CALC DV(%M+2)=%DV $CALC %M=%M+1 : %O=%K-%M-1 $!
$E!
$MACRO AJU2 $CALC T(%L+%M*%V)=1 : %L=%L-1 $$$!
*****

```

```

!
$MACRO ANALISE !
$CALC N=%N $ERROR B N $YVAR Y $TRANS $!
$FIT $CAL %B=%DV : %C=%DF $FAC TRAT %K $FIT TRAT $!
$CAL %R=(%B-%DV)*%DF/(%DV*(%C-%DF)) : %D=%C-%DF : %A=%X2/%DF :!
%S=%DV/%DF : %C=%B-%DV : %F=%DF $!
!$PRINT : ' RAZAO DE DEVIANCES MEDIAS = ' %R ' COM '*2 %D' E '!'
! *2 %DF ' G.L.' : ' DEVIANCE = ' %DV :!
! ' X2 = ' %X2 ' COM '*2 %DF' G.L.'!
! ' PARAMETRO DE DISPERSAO = ' %A : ' DEVIANCE MEDIA RESIDUAL = ' %S :!
$TAB THE %FV MEAN FOR TRAT INTO MED $VAR %K TR $!
$CA TR=%CU(1) $SORT TR TR MED : MED !
!$PRINT : ' GERMINACAO MEDIA POR TRATAMENTO'$LOOK TR MED $PR :!
$SORT TRAT TRAT %FV : YV Y %FV $TRANS$!
$USE SCKN $TRANS$!
$$E$
!
!*****
$MACRO GERA $TRANS!
$PRINT : ' GERACAO NUMERO = ' * 4 %W $!
$USE SITA %N %K %V P $!
$PRINT Y $!
$USE ANALISE $$E$
!
!*****
!
! Author: R. A. Reese, Hull University, U. K.
! Version 1.0 GLIM 3.77 December 1984
! Main macros:
!   CHIP returns upper-tail chi-squared probability of %1 with %2 df.
!   Formal arguments:
!       %1 The value of the chi-squared variate
!       %2 The number of degrees of freedom
!   Macro arguments:
!       None
!   Example of use:
!       $arg chip %dv %dfs
!       $cal #chip$
!
!-----
!
$MAC CHIP !
%EQ(%2,1)*((2-2*%NP(%SQR(%1)))) + !SPECIAL CASE, 1 DF.
%EQ(%2,2)*(%EXP(-%1/2)) + !SPECIAL CASE, 2 DF.
%GT(%2,2)*((1 -%NP( ((%1/%2)**(1/3) - 1 + 2/(9*%2))/%SQR(2/(9*%2)) ) ) )!
$ENDMAC
!
!*****
!
!*****
!
$CALC %N=20 : %K=10 : %V=4 : %Z=1000 $!
$ASSIGN P=0.5,0.5,0.5,0.5,0.5,0.5,0.5,0.5 $!
$CALC %X=%K*%V $UNITS %X $!
$VAR %Z LAMB LAMM DELTA D3 PHI IND IDE IDD SUF $!
$TRANS$!
$CALC TRAT=%GL(%K,%V) : REP=%GL(%V,1)$!
$CALC %W=%Z $WHILE %W GERA $!
$TRANS W H O F $!
!
$PRINT : ' ***** delta *****' : $!
$SORT DELTA $!
$TABULATE THE DELTA MEAN INTO MD : THE DELTA VARIANCE INTO VD $!
$CALC %R = VD/MD $AC 4$!
$PRINT : ' MEDIA DE DELTA = 'MD'; VARIANCIA DE DELTA = 'VD :
: ' ; RAZAO = 'R:$!
$HIST DELTA '*' $PRINT ' HISTOGRAMA DE DELTA' : $!

```

```

$CALC D3=DELTA**(1/3) $!
$TABULATE THE D3 MEAN INTO MD3 : THE D3 VARIANCE INTO VD3 $!
$CALC %R = VD3/MD3 $AC 4$!
$PRINT : ' MEDIA DE DELTA**(1/3) = 'MD3'; VARIANCIA DE DELTA**(1/3) = 'VD3 : !
      ; RAZAO = '%R:$!
$HIST D3 '*' $PRINT ' HISTOGRAMA DE DELTA**(1/3)' :$!
$CALC IDD=%EQ(%GL(5,1),5) : IND=%CU(1) : IDE=IND/%Z :!
  IDD=IDD*%GT(IDE,0.5) : SUF=IDD*%CU(IDD) : %Y=%CU(IDD) $!
$VAR %Y ID RES QI PHD DT R3D QUID $!
$CALC ID(SUF)=IDE(IND)-0.0005 : PHD=%ND(ID) $!
$CALC DT(SUF)=DELTA(IND) : R3D=DT**(1/3) $!
$UNITS %Y $YVAR PHD $ERROR N $FIT $CALC %D=%DV $FIT R3D $EXTRACT %PE $!
$CALC RES=%YV-%FV $CALC %F=(%D-%DV)/%D $PLOT PHD R3D '*' $!
$PRINT ' NORMAL INVERSA DA DIST. AC. EMPIRICA VS RAZ CUBICA DE DELTA':!!
      ' COEFICIENTE DE DETERMINACAO = '%F' PARA A RETA :':!
      PHD = '%PE' R3D':$!
$PLOT RES ID '*' $PRINT ' RESIDUO DO AJUSTE' :$!
!
$PRINT : ' ***** delta modificado *****' :$!
$DEL DT R3D RES $VAR %Y DT R3D $CALC DELTA =DELTA*%PI/(2*(%PI-2)) $!
$CALC DT(SUF)=DELTA(IND) : R3D=DT**(1/3) $!
$UNITS %Y $YVAR PHD $ERROR N $FIT $CALC %D=%DV $FIT R3D $EXTRACT %PE $!
$CALC RES=%YV-%FV $CALC %F=(%D-%DV)/%D $PLOT PHD R3D '*' $!
$PRINT ' NORMAL INVERSA DA DIST. AC. EMPIRICA VS' :
      ' RAZ CUBICA DE LAMB*DELTA':!!
      ' COEFICIENTE DE DETERMINACAO = '%F' PARA A RETA :':!
      PHD = '%PE' R3D':$!
$PLOT RES ID '*' $PRINT ' RESIDUO DO AJUSTE' :$!
$CALC %O=%K/(%PI-2) $ARG CHIP DT %O $CALC QUID=1.-(#CHIP) $!
$CALC %O=%K-1 $ARG CHIP DT %O $CALC QI=1.-(#CHIP) $!
$PLOT QUID ID '*' $PRINT ' QUID VS ID':$!
$UNITS %Y $YVAR QUID $ERROR N $FIT $CALC %D=%DV $FIT ID $EXTRACT %PE $!
$CALC RES=%YV-%FV $CALC %F=(%D-%DV)/%D $!
$PRINT ' COEFICIENTE DE DETERMINACAO = '%F' PARA A RETA :':!
      QUID = '%PE' ID':$!
$PLOT RES ID '*' $PRINT ' RESIDUO DO AJUSTE' :$!
$PLOT QI ID '*' $PRINT ' QI VS ID':$!
$UNITS %Y $YVAR QI $ERROR N $FIT $CALC %D=%DV $FIT ID $EXTRACT %PE $!
$CALC RES=%YV-%FV $CALC %F=(%D-%DV)/%D $!
$PRINT ' COEFICIENTE DE DETERMINACAO = '%F' PARA A RETA :':!
      QI = '%PE' ID':$!
$PLOT RES ID '*' $PRINT ' RESIDUO DO AJUSTE' :$!
$PRINT : ' DISTRIBUICAO ACUMULADA DE LAMB*DELTA = DT':!
      ID = distribuicao acumulada empirica':!
      QUID = considerando qui-quadrado com K/(PI-2) graus de liberdade':!
      QI = limite inferior como qui-quadrado com K-1 graus de liberdade':$!
$ACCURACY 4 $!
$LOOK DT QI ID QUID $!
$STOP!

```

APÊNDICE 2

RESULTADO DE UMA DAS SIMULAÇÕES

O programa de simulação exibido no Apêndice 1 foi rodado em 27 situações considerando as variações do número de tratamentos (3, 6, 10), as variações do numerador da binomial (10, 20, 50) e as variações da probabilidade da binomial (0,10; 0,30; 0,50).

O equipamento utilizado foi um PC AT 486-DX de 50 Mhz com 4 Mb de memória RAM que executou o programa de simulação em 9 tempos médios diferentes, uma vez que a mudança da probabilidade da binomial não produz nenhuma alteração no tempo de execução (Tabela A2.1).

Tabela A2.1 - Tempo médio de execução do programa de simulação considerando diferentes valores de K e N.

$N \setminus K$	3	6	10
10	00:09:25	00:18:25	00:31:22
20	00:13:17	00:25:38	00:44:00
50	00:24:53	00:48:45	01:22:00

A seguir está o resultado da simulação, obtido considerando-se 10 tratamentos, denominador da binomial igual à 50 e a probabilidade igual à 0,1, executado em aproximadamente em 1 h e 22 min.

```
[o] GLIM 3.77 update 1 (copyright)1985 Royal Statistical Society, London
[i] ? $in 11$
[i] File name? \glim\bsim\teste9
[i] !
[i] !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
[i] !*****$glim$bsim$d9-10.
[i] !*****!
[i] !*
[i] !* Simulacao com *!
[i] !* K= 10 tratamentos, *!
[i] !* V= 4 repeticoes por tratamento, *!
[i] !* N= 50 numerador da binomial, *!
[i] !* P= 0,1 ( 1 1 1 1 1 1 1 1 ) vetor de probabilidade *!
[i] !* Z= 1000 simulacoes *!
[i] !* *!
[i] !*****!
[i] !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
[i] !
[i] !*****!
[i] ! MACRO SITA simula a tabela de dados binomiais com
[i] ! N=%N,
[i] ! K=%K tratamentos,
[i] ! V=%V repeticoes por tratamento
[i] ! P= vetor de probabilidade de comprimento K.
[i] !
[i] $MACRO SITA $DEL %J Y N $UNITS %X $CALC %J=%K $WHILE %J M1 $$E!
[i] !
[i] $MACRO M1 $CALC %R=%V $WHILE %R SIMULA $CALC %J=%J-1 $$E!
[i] !
[i] !*****!
[i] ! A MACRO SIMULA gera uma amostra de uma distribuicao
[i] ! binomial com N=%N E P=%P
[i] !
[i] $MACRO SIMULA $DEL G K %U $VAR %N K G $CALC %I=%N $WHILE %I BIN $!
[i] $CALC K=%CU(G) : %U=(%J-1)*%V+%R : Y(%U)=K(%N) : %R=%R-1 $$E!
[i] !
[i] $MACRO BIN $CALC G(%I)=%GT(P(%J),%SR(0)) : %I=%I-1 $$E!
[i] !
[i] !*****!
[i] ! A MACRO SCKN fornece a analise de agrupamentos para K grupos
[i] !
[i] $MACRO SCKN !
[i] $DEL A B DV R T $VAR %K DV A B $VAR %X T $YVAR YV $ERROR B N $!
[i] $CALC %T=(%C+%F*$S)/(%K+%F) $! sigma2 0
[i] $CALC T=2 : DV(1)=%B : %M=0 : %O=%K $WHILE %O AJU1 $!
[i] $TABULATE THE DV SMALLEST INTO R $CALC %E=R $CALC %R=100*(%B-%E)/%B!
[i] $CALC B=%EQ(DV,%E) $CALC B=%CU(B) : %E=%B-%E $!
[i] $CALC %L=%PI/(2*(%PI-2))*%E/%T : %M=%PI/(2*(%PI-2))*%E/$S !
[i] : %O=%TR(%K/(%PI-2)) : A=1-B $CALC A=A*TR : B=B*TR $!
[i] $ARG CHIP %L %O $CALC %Q=#CHIP $!
[i] $CALC DELTA(%W)=%E : LAMB(%W)=%L : LAMM(%W)=%M : PHI(%W)=%A !
[i] : IND(%W)=%W : %W=%W-1$!
[i] !$PRINT : 'DELTA PI = ' %E ' SQT = ' %B ' GRAUS DE LIBERDADE = ' %O : !
[i] !$SIGMA2 0 = '%T' LAMBDA = '%L' NIVEL DESCRITIVO = '%Q:' R2 = '%!
[i] !$R' POR CENTO': ' DIVISAO EM : ': *2 A ' / '*2 B ::$!
[i] $TRANS $$E!
[i] !
[i] !*****!
[i] !
[i] $MACRO AJU1 $CALC %L=%V $WHILE %L AJU2 $!
[i] $FAC T 2 $FIT T $CALC DV(%M+2)=%DV $CALC %M=%M+1 : %O=%K-%M-1 $!
[i] $E!
```

```

[i] !
[i] $MACRO AJU2 $CALC T(%L+%M*%V)=1 : %L=%L-1 $$E$!
[i] !
[i] !*****
[i] !
[i] $MACRO ANALISE !
[i] $CALC N=%N $ERROR B N $YVAR Y $TRANS $!
[i] $FIT $CAL %B=%DV : %C=%DF $FAC TRAT %K $FIT TRAT $!
[i] $CAL %R=(%B-%DV)*%DF/(%DV*(%C-%DF)) : %D=%C-%DF : %A=%X2/%DF :!
[i] %S=%DV/%DF : %C=%B-%DV : %F=%DF $!
[i] !$PRINT : ' RAZAO DE DEVIANCES MEDIAS = ' %R ' COM '*2 %D ' E '!
[i] ! *2 %DF ' G.L.' : ' DEVIANCE = ' %DV :!
[i] ! ' X2 = ' %X2 ' COM '*2 %DF ' G.L.' !
[i] ! : ' PARAMETRO DE DISPERSAO = ' %A : ' DEVIANCE MEDIA RESIDUAL = ' %S :!
[i] $TAB THE %FV MEAN FOR TRAT INTO MED $VAR %K TR $!
[i] $CA TR=%CU(1) $SORT TR TR MED : MED !
[i] !$PRINT :: 'GERMINACAO MEDIA POR TRATAMENTO'$LOOK TR MED $PR :!
[i] $SORT TRAT TRAT %FV : YV Y %FV $TRANS$!
[i] $USE SCKN $TRANS$!
[i] $$E$
[i] !
[i] !*****
[i] $MACRO GERA $TRANS!
[i] $PRINT : ' GERACAO NUMERO = ' * 4 %W $!
[i] $USE SITA %N %K %V P $!
[i] $PRINT Y $!
[i] $USE ANALISE $$E$!
[i] !
[i] !-----
[i] ! Author: R. A. Reese, Hull University, U. K.
[i] ! Version 1.0 GLIM 3.77 December 1984
[i] ! Main macros:
[i] ! CHIP returns upper-tail chi-squared probability of %1 with %2 df.
[i] ! Formal arguments:
[i] ! %1 The value of the chi-squared variate
[i] ! %2 The number of degrees of freedom
[i] ! Macro arguments:
[i] ! None
[i] ! Example of use:
[i] ! $arg chip %dv %df$
[i] ! $cal #chip$
[i] ! -----
[i] !
[i] $MAC CHIP !
[i] %EQ(%2,1)*(2-2*%NP(%SQR(%1))) + !SPECIAL CASE, 1 DF.
[i] %EQ(%2,2)*(%EXP(-%1/2)) + !SPECIAL CASE, 2 DF.
[i] %GT(%2,2)*(1-%NP(-( (%1/%2)**(1/3) - 1 + 2/(9*%2))/%SQR(2/(9*%2))) ) !
[i] $ENDMAC
[i] !*****
[i] !
[i] !*****
[i] !
[i] $CALC %N=50 : %K=10 : %V=4 : %Z=1000 $!
[i] $ASSIGN P=0.1,0.1,0.1,0.1,0.1,0.1,0.1,0.1,0.1,0.1 $!
[i] $CALC %X=%K*%V $UNITS %X $!
[i] $VAR %Z LAMB LAMB DELTA D3 PHI IND IDE IDD SUF $!
[i] $TRANS$!
[o]
[o]
[o] ***** delta *****
[o]
[o]
[o] MEDIA DE DELTA = 6.720; VARIANCIA DE DELTA = 9.901
[o] ; RAZAO = 1.473

```

```

[o]
[o] [ 0.0, 1.2) 2 *
[o] [ 1.2, 2.4) 38 *****
[o] [ 2.4, 3.6) 108 *****
[o] [ 3.6, 4.8) 159 *****
[o] [ 4.8, 6.0) 155 *****
[o] [ 6.0, 7.2) 156 *****
[o] [ 7.2, 8.4) 120 *****
[o] [ 8.4, 9.6) 98 *****
[o] [ 9.6,10.8) 57 *****
[o] [10.8,12.0) 41 *****
[o] [12.0,13.2) 31 *****
[o] [13.2,14.4) 15 *****
[o] [14.4,15.6) 6 **
[o] [15.6,16.8) 8 ***
[o] [16.8,18.0) 1
[o] [18.0,19.2) 1
[o] [19.2,20.4) 2 *
[o] [20.4,21.6) 1
[o] [21.6,22.8) 0
[o] [22.8,24.0) 1
[o] [24.0,25.2) 0
[o] [25.2,26.4) 0
[o] [26.4,27.6) 0
[o] HISTOGRAMA DE DELTA
[o]
[o]
[o] MEDIA DE DELTA**(1/3) = 1.842; VARIANCIA DE DELTA**(1/3) = 0.0857
[o] ; RAZAO = 0.0465
[o]
[o] [0.80,0.90) 1
[o] [0.90,1.00) 1
[o] [1.00,1.10) 1
[o] [1.10,1.20) 8 ***
[o] [1.20,1.30) 14 *****
[o] [1.30,1.40) 41 *****
[o] [1.40,1.50) 62 *****
[o] [1.50,1.60) 86 *****
[o] [1.60,1.70) 108 *****
[o] [1.70,1.80) 118 *****
[o] [1.80,1.90) 134 *****
[o] [1.90,2.00) 127 *****
[o] [2.00,2.10) 110 *****
[o] [2.10,2.20) 76 *****
[o] [2.20,2.30) 52 *****
[o] [2.30,2.40) 35 *****
[o] [2.40,2.50) 12 ****
[o] [2.50,2.60) 9 ***
[o] [2.60,2.70) 1
[o] [2.70,2.80) 3 *
[o] [2.80,2.90) 1
[o] [2.90,3.00) 0
[o] [3.00,3.10) 0
[o] HISTOGRAMA DE DELTA**(1/3)
[o]
[w] -- model re-initialised
[o] deviance = 39.108
[o] d.f. = 99
[o]
[o] deviance = 0.056532
[o] d.f. = 98
[o]
[o] 4.000 |
[o] 3.800 |
[o] 3.600 |

```

```

[o] 3.400
[o] 3.200
[o] 3.000
[o] 2.800
[o] 2.600
[o] 2.400
[o] 2.200
[o] 2.000
[o] 1.800
[o] 1.600
[o] 1.400
[o] 1.200
[o] 1.000
[o] 0.800
[o] 0.600
[o] 0.400
[o] 0.200
[o] 0.000

```

```

[o] 1.750 2.000 2.250 2.500 2.750 3.000 3.250
[o] NORMAL INVERSA DA DIST. AC. EMPIRICA VS RAIZ CUBICA DE DELTA
[o] COEFICIENTE DE DETERMINACAO = 0.9986 PARA A RETA :
[o] PHD = -6.260 3.400 R3D

```

```

[o] 0.0720
[o] 0.0600
[o] 0.0480
[o] 0.0360
[o] 0.0240
[o] 0.0120
[o] 0.0000
[o] -0.0120
[o] -0.0240
[o] -0.0360
[o] -0.0480
[o] -0.0600
[o] -0.0720
[o] -0.0840
[o] -0.0960
[o] -0.1080
[o] -0.1200
[o] -0.1320
[o] -0.1440
[o] -0.1560
[o] -0.1680

```

```

[o] 0.500 0.600 0.700 0.800 0.900 1.000 1.100
[o] RESIDUO DO AJUSTE

```

```

[o] ***** delta modificado *****
[w] -- deletion affects model
[w] -- model re-initialised
[o] deviance = 39.108
[o] d.f. = 99
[o] deviance = 0.056533
[o] d.f. = 98
[o] 4.000
[o] 3.800
[o] 3.600
[o] 3.400

```

NORMAL INVERSA DA DIST. AC. EMPIRICA VS
RAIZ CUBICA DE LAMB*DELTA

COEFICIENTE DE DETERMINACAO = 0.9986 PARA A RETA :
PHD = -6.260 3.057 R3D

```

[o] 0.6500 | 222
[o] 0.6250 | *22
[o] 0.6000 | 2*
[o] 0.5750 | *22
[o] 0.5500 | *2*
[o] 0.5250 |
[o] -----
[o] 0.500 0.600 0.700 0.800 0.900 1.000 1.100
[o] QUID VS ID
[o]
[w] -- model re-initialised
[o] deviance = 1.7027
[o] d.f. = 99
[o]
[o] deviance = 0.0027071
[o] d.f. = 98
[o]
[o] COEFICIENTE DE DETERMINACAO = 0.9984 PARA A RETA :
[o] QUID = 0.1045 0.9034 ID
[o]
[o] 0.01080 |
[o] 0.00960 |
[o] 0.00840 | * * * *
[o] 0.00720 | 2 **
[o] 0.00600 | *** * * ***
[o] 0.00480 | 2** 2*****
[o] 0.00360 | * *
[o] 0.00240 | * * * 2 * *
[o] 0.00120 | * 2 *2
[o] 0.00000 | ** * *
[o] -0.00120 | *2 *2 *
[o] -0.00240 | * * 2** 2
[o] -0.00360 | 2 *
[o] -0.00480 | *
[o] -0.00600 | *
[o] -0.00720 | **
[o] -0.00840 | ***2 *
[o] -0.00960 |
[o] -0.01080 | * *
[o] -0.01200 | **
[o] -0.01320 |
[o] -----
[o] 0.500 0.600 0.700 0.800 0.900 1.000 1.100
[o] RESIDUO DO AJUSTE
[o]
[o] 1.0250 |
[o] 1.0000 |
[o] 0.9750 | 2*
[o] 0.9500 | 222
[o] 0.9250 | *22
[o] 0.9000 | *22*
[o] 0.8750 | 22*
[o] 0.8500 | 22
[o] 0.8250 | 222
[o] 0.8000 | 222
[o] 0.7750 | 222
[o] 0.7500 | 22
[o] 0.7250 | 222
[o] 0.7000 | 22
[o] 0.6750 | 222
[o] 0.6500 | *22
[o] 0.6250 | *22*
[o] 0.6000 | *2*
[o] 0.5750 | 2*

```

```

[o] 0.5500 | 222
[o] 0.5250 *2
[o] -----
[o] 0.500 0.600 0.700 0.800 0.900 1.000 1.100
[o]      QI VS ID

```

```

[o]
[o] -- model re-initialised
[o] deviance = 1.8782
[o] d.f. = 99
[o]
[o] deviance = 0.0018306
[o] d.f. = 98

```

```

[o] COEFICIENTE DE DETERMINACAO = 0.9990 PARA A RETA :
[o]      QI = 0.0549 0.9491 ID

```

```

[o] DISTRIBUICAO ACUMULADA DE LAMB*DELTA = DT
[o] ID = distribuicao acumulada empirica
[o] QUID = considerando qui-quadrado com K/(PI-2) graus de liberdade
[o] QI = limite inferior como qui-quadrado com K-1 graus de liberdade

```

	DT	QI	ID	QUID
[o] 1	8.637	0.5280	0.5045	0.5516
[o] 2	8.713	0.5354	0.5095	0.5589
[o] 3	8.734	0.5373	0.5145	0.5608
[o] 4	8.751	0.5390	0.5195	0.5625
[o] 5	8.826	0.5461	0.5245	0.5695
[o] 6	8.882	0.5514	0.5295	0.5747
[o] 7	8.925	0.5554	0.5345	0.5787
[o] 8	8.952	0.5579	0.5395	0.5811
[o] 9	8.984	0.5609	0.5445	0.5841
[o] 10	9.034	0.5656	0.5495	0.5887
[o] 11	9.122	0.5737	0.5545	0.5967
[o] 12	9.217	0.5824	0.5595	0.6052
[o] 13	9.321	0.5917	0.5645	0.6143
[o] 14	9.367	0.5958	0.5695	0.6184
[o] 15	9.450	0.6032	0.5745	0.6256

[o]	16	9.491	0.6067	0.5795	0.6290
[o]	17	9.570	0.6137	0.5845	0.6358
[o]	18	9.608	0.6169	0.5895	0.6390
[o]	19	9.640	0.6197	0.5945	0.6417
[o]	20	9.700	0.6248	0.5995	0.6467
[o]	21	9.759	0.6298	0.6045	0.6515
[o]	22	9.779	0.6315	0.6095	0.6532
[o]	23	9.853	0.6377	0.6145	0.6592
[o]	24	9.931	0.6441	0.6195	0.6655
[o]	25	9.997	0.6495	0.6245	0.6707
[o]	26	10.040	0.6530	0.6295	0.6741
[o]	27	10.095	0.6574	0.6345	0.6784
[o]	28	10.167	0.6632	0.6395	0.6840
[o]	29	10.233	0.6684	0.6445	0.6891
[o]	30	10.342	0.6768	0.6495	0.6973
[o]	31	10.428	0.6834	0.6545	0.7036
[o]	32	10.470	0.6866	0.6595	0.7067
[o]	33	10.473	0.6869	0.6645	0.7070
[o]	34	10.615	0.6974	0.6695	0.7171
[o]	35	10.647	0.6998	0.6745	0.7195
[o]	36	10.676	0.7019	0.6795	0.7215
[o]	37	10.733	0.7061	0.6845	0.7255
[o]	38	10.887	0.7170	0.6895	0.7361
[o]	39	10.921	0.7194	0.6945	0.7383
[o]	40	10.998	0.7247	0.6995	0.7435
[o]	41	11.077	0.7301	0.7045	0.7486
[o]	42	11.101	0.7317	0.7095	0.7502
[o]	43	11.166	0.7361	0.7145	0.7544
[o]	44	11.251	0.7418	0.7195	0.7598
[o]	45	11.329	0.7468	0.7245	0.7646
[o]	46	11.425	0.7530	0.7295	0.7705
[o]	47	11.461	0.7553	0.7345	0.7727
[o]	48	11.598	0.7638	0.7395	0.7808
[o]	49	11.665	0.7679	0.7445	0.7848
[o]	50	11.689	0.7693	0.7495	0.7861
[o]	51	11.768	0.7740	0.7545	0.7906
[o]	52	11.855	0.7791	0.7595	0.7955
[o]	53	11.963	0.7854	0.7645	0.8014
[o]	54	12.031	0.7892	0.7695	0.8051
[o]	55	12.103	0.7932	0.7745	0.8089
[o]	56	12.196	0.7983	0.7795	0.8137
[o]	57	12.306	0.8042	0.7845	0.8192
[o]	58	12.376	0.8079	0.7895	0.8228
[o]	59	12.439	0.8111	0.7945	0.8258
[o]	60	12.551	0.8168	0.7995	0.8312
[o]	61	12.628	0.8206	0.8045	0.8348
[o]	62	12.687	0.8235	0.8095	0.8375
[o]	63	12.773	0.8276	0.8145	0.8414
[o]	64	12.809	0.8293	0.8195	0.8430
[o]	65	12.940	0.8355	0.8245	0.8488
[o]	66	13.047	0.8403	0.8295	0.8534
[o]	67	13.175	0.8459	0.8345	0.8587
[o]	68	13.232	0.8484	0.8395	0.8610
[o]	69	13.337	0.8528	0.8445	0.8651
[o]	70	13.356	0.8536	0.8495	0.8659
[o]	71	13.454	0.8576	0.8545	0.8697
[o]	72	13.604	0.8636	0.8595	0.8752
[o]	73	13.781	0.8704	0.8645	0.8816
[o]	74	13.980	0.8777	0.8695	0.8884
[o]	75	14.170	0.8843	0.8745	0.8945
[o]	76	14.299	0.8886	0.8795	0.8985
[o]	77	14.461	0.8938	0.8845	0.9034
[o]	78	14.702	0.9011	0.8895	0.9102
[o]	79	14.903	0.9070	0.8945	0.9156
[o]	80	14.982	0.9091	0.8995	0.9176

[o]	81	15.185	0.9145	0.9045	0.9226
[o]	82	15.291	0.9173	0.9095	0.9251
[o]	83	15.472	0.9217	0.9145	0.9292
[o]	84	15.609	0.9250	0.9195	0.9322
[o]	85	15.927	0.9320	0.9245	0.9387
[o]	86	16.160	0.9368	0.9295	0.9431
[o]	87	16.556	0.9442	0.9345	0.9499
[o]	88	16.854	0.9492	0.9395	0.9545
[o]	89	16.946	0.9507	0.9445	0.9558
[o]	90	17.361	0.9569	0.9495	0.9614
[o]	91	17.669	0.9610	0.9545	0.9651
[o]	92	17.881	0.9636	0.9595	0.9675
[o]	93	18.133	0.9664	0.9645	0.9701
[o]	94	18.608	0.9713	0.9695	0.9745
[o]	95	19.070	0.9754	0.9745	0.9782
[o]	96	19.719	0.9802	0.9795	0.9825
[o]	97	20.831	0.9865	0.9845	0.9881
[o]	98	21.912	0.9907	0.9895	0.9919
[o]	99	23.372	0.9945	0.9945	0.9952
[o]	100	32.110	0.9998	0.9995	0.9998

APÉNDICE 3

LISTAGENS DO PROGRAMA E DA EXECUÇÃO DO PROGRAMA DE ANÁLISE DE AGRUPAMENTOS EM LINGUAGEM GLIM

A seguir encontram-se as listagens do programa de análise de agrupamento e de sua execução considerando três tipos de modelo: logito, probito e transformação arco seno da raiz quadrada da proporção.

As MACROS usadas são basicamente as mesmas do Apêndice 1. Optou-se pelo cálculo de todos os ramos possíveis para a construção da árvore de divisão dicotômica.

```

\glim\cluster\prog6.
*****
*
* ANALISE DE AGRUPAMENTO DE TRATAMENTOS
*
*****
*****
$TRANS O $!
*****
*** a macro sckb fornece a primeira divisao na
analise de agrupamentos para K grupos
considerando erro binomial

%F = numero de graus de liberdade do residuo
%S = deviance media residual
TR = codigo dos tratamentos ja ordenados pela media
YV = vetor de observacoes ja ordenado pela media
%A = parametro de dispersao

$MACRO SCKB !
$TRANS
$DEL M A B DV R T $VAR %K DV A B $YVAR YV $!
$CALC T=2 :DV(1)=%B : %M=0 : %O=%K : %W=%K $!
$WHILE %O AJU1 $!
$STABULATE THE DV SMALLEST INTO R $!
$CALC %E=R : %R=100*(%B-%E)/%B ! calcula r2 dessa divisao
$CALC B=%EQ(DV,%E) $CALC B=%CU(B) : %E=%B-%E $! %E = delta
$CALC %L=%PI/(2*(%PI-2))*%E : %O=%K/(%PI-2) : A=1-B $! %L=lamb vs delta
$ARG CHIP %L %O $CALC %Q=#CHIP $!
$CALC A=A*TR : B=B*TR $TRANS O $!
$PRINT : ' DELTA O = ' %E ' DV(1) = ' %B' GRAUS DE LIBERDADE = ' %O !
: ' LAMBDA * DELTA O = ' %L ' NIVEL DESCRITIVO = ' %Q : ' R2 = ' %R !
' POR CENTO : ' : ' DIVISAO EM : ' : *2 A : ' E ' : *2 B : ' : $!
$E!
*****
*** a macro skb2 fornece a segunda divisao na analise de
agrupamentos, considerando erro binomial

ENTRADA : %1 = codigo dos tratamentos ja ordenados pela media
%2 = vetor de observacoes dos tratamentos de interesse
ja ordenado pela media
%3 = numero de grupos

$MACRO SKB2 !
$TRANS
$DEL M A B DV R T $CALC %W=%3 : %X=%V*%W $UNITS %X $!
$CALC M=100 $YVAR %2 $VAR %W DV A B $ERROR B M !
$FIT $CALC %G=%DV ! soma de quadrados total dentro do grupo
$CALC T=2 :DV(1)=%G : %M=0 : %O=%W $!
$WHILE %O AJU1 $!
$STABULATE THE DV SMALLEST INTO R $CALC %E=R $!
$CALC %R=100*(%G-%E)/%B ! calcula r2 dessa divisao
$CALC B=%EQ(DV,%E) $CALC B=%CU(B) : %E=%G-%E $!
$CALC %L=%PI/(2*(%PI-2))*%E : %O=%W/(%PI-2) : A=1-B $!
$ARG CHIP %L %O $CALC %Q=#CHIP $!
$CALC A=A*%1 : B=B*%1 $TRANS O $!
$PRINT : ' DELTA O = ' %E ' DV(1) = ' %B' GRAUS DE LIBERDADE = ' %O !
: ' LAMBDA * DELTA O = ' %L ' NIVEL DESCRITIVO = ' %Q : ' R2 = ' %R !

```

```

' POR CENTO ':' DIVISAO EM : ': *2 A : ' E ' : *2 B :: $!
$E!
!
! *****
!
! *** a macro sckn fornece a primeira divisao na
! analise de agrupamentos para K grupos
! considerando erro normal
!
! %F = numero de graus de liberdade do residuo
! %S = deviance media residual
! TR = codigo dos tratamentos ja ordenados pela media
! YV = vetor de observacoes ja ordenado pela media
! %A = parametro de dispersao
!
$MACRO SCKN !
$TRANS $DEL M A B DV R T $VAR %K DV A B $YVAR YV $!
$CALC %T=(%C+%F*%S)/(%K+%F) : T=2 : DV(1)=%B : %M=0 : %O=%K : %W=%K $!
$WHILE %O AJU1 $!
$TABULATE THE DV SMALLEST INTO R $!
$CALC %E=R : %R=100*(%B-%E)/%B ! calcula r2 dessa divisao
$CALC B=%EQ(DV,%E) $CALC B=%CU(B) : %E=%B-%E $! %E = delta
$CALC %L=%PI/(2*(%PI-2))*%E/%T : %O=%K/(%PI-2) : A=1-B $! %L=lamb vs delta
$ARG CHIP %L %O $CALC %Q=#CHIP $!
$CALC A=A*TR : B=B*TR $TRANS O $!
$PRINT : ' B 0 = ' %E ' SQT = ' %B' GRAUS DE LIBERDADE = ' %O !
: ' SIGMA2 0 = ' %T' LAMBDA = ' %L ' NIVEL DESCRITIVO = ' %Q !
: ' R2 = ' %R' POR CENTO ':' DIVISAO EM : ': *2 A !
: ' E ' : *2 B :: $!
$E!

```

```

! *****
!
! *** a macro skn2 fornece a segunda divisao na analise de
! agrupamentos, considerando erro normal
!
! ENTRADA : %1 = codigo dos tratamentos ja ordenados pela media
! %2 = vetor de observacoes dos tratamentos de interesse
! ja ordenado pela media
! %3 = numero de grupos
!
$MACRO SKN2 !
$TRANS $DEL M A B DV R T $CALC %W=%3 : %X=%V*%W $UNITS %X $!
$YVAR %2 $VAR %W DV A B $!
$FIT $CALC %G=%DV ! soma de quadrados total dentro do grupo
$CALC T=2 : DV(1)=%G : %M=0 : %O=%W $!
$WHILE %O AJU1 $!
$TABULATE THE DV SMALLEST INTO R $CALC %E=R!
$CALC %R=100*(%G-%E)/%B ! calcula r2 dessa divisao
$CALC B=%EQ(DV,%E) $CALC B=%CU(B) : %E=%G-%E $!
$CALC %L=%PI/(2*(%PI-2))*%E/%T : %O=%W/(%PI-2) : A=1-B $!
$ARG CHIP %L %O $CALC %Q=#CHIP $!
$CALC A=A*%1 : B=B*%1 $TRANS O $!
$PRINT : ' B 0 = ' %E ' SQT = ' %B' GRAUS DE LIBERDADE = ' %O !
: ' SIGMA2 0 = ' %T' LAMBDA = ' %L ' NIVEL DESCRITIVO = ' %Q !
: ' R2 = ' %R' POR CENTO ':' DIVISAO EM : ': *2 A !
: ' E ' : *2 B :: $!
$E!
!
! *****

```

```

! *
! -----

```

```

! Author: R. A. Reese, Hull University, U. K.
! Version 1.0 GLIM 3.77 December 1984
! Main macros:
!   CHIP returns upper-tail chi-squared probability of %1 with %2 df.
!   Formal arguments:
!       %1      The value of the chi-squared variate
!       %2      The number of degrees of freedom
!   Macro arguments:
!       None
!   Example of use:
!       $arg chip %dv %df$
!       $cal #chip$

```

```

!$MAC CHIP !
!%LT(%2,2)*%EQ(%2,1)*(2-2*%NP(%SQR(%1))) + !SPECIAL CASE, 1 DF.
!%LT%EQ(%2,2)*(%EXP(-%1/2)) + !SPECIAL CASE, 2 DF.
!%GT(%2,2)*(1 -%NP( ((%1/%2)**(1/3) - 1 + 2/(9*%2))/%SQR(2/(9*%2)) ) ) !
!$ENDMAC

```

```

!*****
!
!   *** a macro CHI1 calcula a distribuicao acumulada de
!   uma variavel qui-quadrado %X com %0 graus de liberdade,
!   usando a aproximacao de Wilson e Hilferty (1931), (ver
!   Dachs, 1988, pg 143) - P[ X2 (%2) =< %1 ]
!

```

```

$MACRO CHIP !
%P = 1-%NP(((%1/%2)**(1/3)-1+2/(9*%2))*%SQRT(9*%2/2)) !
$E!

```

```

!*****
!
!   *** a macro aju1 calcula as funcoes desvio para todas
!   as particoes dicotomicas de medias ordenadas
!

```

```

$MACRO AJU1 !
$CALC %L=%V $WHILE %L AJU2 $FAC T 2 $FIT T $!
$CALC DV(%M+2)=%DV $CALC %M=%M+1 :%O=%W-%M-1 $!
$E!

```

```

!*****
!
!   *** a macro aju2 calcula os vetores T para a macro aju1!
!
$MACRO AJU2 $CALC T(%L+%M*%V)=1 : %L=%L-1 $!
$$E!

```

```

!*****
!
!   *** a macro tame ordena as medias dos tratamentos
!

```

```

$MACRO TAME !
$TABULATE THE %FV MEAN FOR TRAT INTO MED $!
$VARIATE %K TR $CALC TR =%CU(1) $SORT TR TR MED $SORT MED $!
$PRINT : 'MEDIAS ORDENADAS DE TRATAMENTOS '$LOOK TR MED $PRINT :$!
$SORT TRAT TRAT %FV : YV Y %FV $!
$$E!

```

```

!*****
!
!   *** a macro analise calcula os elementos necessarios
!   para a analise de variancia
!
$MACRO ANALISE $!

```

```

$FIT $CAL %B=%DV : %C=%DF $FIT TRAT $DIS ME $!
$CALC %R=(%B-%DV)*%DF/(%DV*(%C-%DF)) : %D=%C-%DF $!
$CALC %A=%X2/%DF : %S=%DV/%DF : %C=%B-%DV : %F=%DF $!
$PRINT ' RAZAO DE DEVIANCES MEDIAS = ' %R ' COM '*2 %D ' E ' !
      '*2 %DF ' G.L.' : ' DEVIANCE = ' %DV : !
      X2 = ' %X2 ' COM ' '*2 %DF ' G.L.' : !
' PARAMETRO DE DISPERSAO = ' %A : ' DEVIANCE MEDIA RESIDUAL = ' %S : $!
$$E!
!
! *****
!
! *** a macro rbin calcula os residuos para o ajuste binomial
!
$MACRO RBIN $EXTR %VL $!
$CAL VA=%FV*(N-%FV)/N : RP=(%YV-%FV)/%SQRT(%A*VA*(1-%WT*%VL)) : !
LVA=%LOG(VA) : RA=%SQRT((%YV-%FV)*(%YV-%FV)) $!
$PRINT : $PLOT RP %LP '*' $!
$PRINT ' RESIDUOS DE PEARSON (RP) VS PREDITOR LINEAR (LP)' : !
      ' (MC CULLAGH & NELDER, 1989 pag. 331 ) ' : $!
$PLOT RP LVA '*' $!
$PRINT ' RESIDUOS DE PEARSON (RP) VS LOG DA FUNCAO DE VARIANCIA(LVA)'!
      ' (MC CULLAGH & NELDER, 1989 pag. 331 ) ' : $!
$PLOT RA %FV '*' $!
$PRINT ' RESIDUOS ABSOLUTOS (RA) VS VALORES AJUSTADOS (FV)'!
      ' (MC CULLAGH & NELDER, 1989 pag. 400 ) ' : $!
$$E!
!
! *****
!
! *** a macro rnor calcula os residuos para o modelo normal
!
$MACRO RNOR $EXTR %VL $!
$CAL RE=(%YV-%FV)/%SQRT(%A*(1-%WT*%VL)) $PRINT : $PLOT RE %FV '*' $!
$PRINT ' RESIDUOS ESTUDANTIZADOS (RE) VS VALORES AJUSTADOS (FV)' $!
$$E!
!
! *****
!
! *** a macro prep calcula os vetores de tratamento e de observacoes
! para divisoes a partir da segunda divisao
! entrada : %1 = vetor indicativo dos tratamentos (A ou B)
!          %2 = vetor das observacoes desses tratamentos
!
$MACRO PREP $!
$DEL C IND SUF1 SUFF TRA $!
$CALC C=%1 : %H=%CU(%NE(%1,0))+%CU(%EQ(%1,0)) : %C=%H*%V $UNITS %H $!
$CALC IND=%CU(1) : SUF1=%NE(C,0) : SUFF=%CU(SUF1)*SUF1 : %Z=%CU(SUF1) $!
$VAR %Z TRA $CALC TRA(SUFF)=C(IND) : %J=%Z*%V $!
$DEL IND SUF2 SUF3 $DEL YVA $UNITS %C $VAR %J YVA$!
$CALC IND=%CU(1) : %O=%H : %M=0 $WHILE %O ASUF $!
$CALC SUF3=%CU(SUF2)*SUF2 $CALC YVA(SUF3)=%2(IND) $!
$$E!
!
! *****
!
! *** a macro asuf ajuda a calcular o vetor indice (suffix) para
! a nova variavel de observacoes particionada
!
$MACRO ASUF $!
$CALC %L=%V $WHILE %L PRE1 $CALC %M=%M+1 : %O=%H-%M $!
$$E!
!
! *****
!
$MACRO PRE1 $!

```



```

$CALC SUF2(%L+%M*%V)=SUF1(%M+1) : %L=%L-1 $!
$$E!
!*****
!
!
$PRINT : '      DADOS REFERENTES A : TRATAMENTO FUNGICIDA EM MILHO' : !
!
!      VARIAVEL : GERMINACAO':$!
!
$CALC %K=12 :%V=4 $CALC %N=%K*%V $!
$UNITS %N $!
$FAC TRAT %K : REP %V $!
$CAL N=100 : TRAT=%GL(%K,%V) : REP=%GL(%V,1) $!
$DATA Y $READ !
  88    94    88    88 !      1
  95    97    86    89 !      2
  91    90    94    92 !      3
  95    86    96    94 !      4
  94    92    93    89 !      5
  85    80    85    83 !      6
  80    82    74    83 !      7
  64    84    72    76 !      8
  90    83    90    91 !      9
  95    95    96    95 !     10
  96    99    92    95 !     11
  94    91    89    95 !     12
$!
$TPRINT (S=1) Y TRAT ; REP $!
$PRINT :: $PLOT Y TRAT '*' $!
$PRINT '      GRAFICO DO VALOR OBSERVADO CONTRA TRATAMENTO':!
: '      *****': '      ANALISE DE LOGITO'!
: '      *****':$!
$ERROR B N $YVAR Y$!
$USE ANALISE $USE RBIN $USE TAME $!
!
$PRINT : '      *** PRIMEIRA DIVISAO *** ':$!
!
$USE SCKB $!
!
$PRINT : '      *** SEGUNDA DIVISAO *** ':$!
!
$USE PREP A YV $!
$CALC YV2=YVA : TR2=TRA : %Y=%Z $!
$USE PREP B YV $!
$CALC YV3=YVA : TR3=TRA : %D=%Z $!
$USE SKB2 TR2 YV2 %Y $!
$USE PREP B YV2 $!
$CALC YV4=YVA : TR4=TRA : %A=%Z $!
$USE SKB2 TR3 YV3 %D $!
!
$PRINT : '      *** TERCEIRA DIVISAO *** ':$!
!
$USE PREP A YV3 $!
$CALC YV5=YVA : TR5=TRA : %D=%Z $!
$USE PREP B YV3 $!
$CALC YV6=YVA : TR6=TRA $
$USE SKB2 TR4 YV4 %A $!
$USE SKB2 TR5 YV5 %D $!
$USE SKB2 TR6 YV6 %Z $!
!
$PRINT '      *****'
: '      ANALISE DE PROBITO'!
: '      *****':$!

```

```

$UNITS %N $!
$FAC TRAT %K : REP %V $!
$CAL N=100 : TRAT=%GL(%K,%V) : REP=%GL(%V,1) $!
$ERROR B N $LINK P $YVAR Y $!
$USE ANALISE $USE RBIN $USE TAME $!
!
$PRINT : '      *** PRIMEIRA DIVISAO *** ' : $!
!
$USE SCKB $!
!
$PRINT : '      *** SEGUNDA DIVISAO *** ' : $!
!
$USE PREP A YV $!
$CALC YV2=YVA : TR2=TRA : %Y=%Z $!
$USE PREP B YV $!
$CALC YV3=YVA : TR3=TRA
$USE SKB2 TR2 YV2 %Y $!
$USE SKB2 TR3 YV3 %Z $!
!
$PRINT :: ' *****'
: ' ANALISE USANDO A TRANSFORMACAO ARCO SENOS DA RAIZ QUADRADA'
: ' *****' : $!
!
$UNITS %N $!
$FAC TRAT %K : REP %V $!
$CAL N=100 : TRAT=%GL(%K,%V) : REP=%GL(%V,1) $!
$CALC Y=%ANG(Y/100) $!
$PRINT :: $PLOT Y TRAT '*' $!
$PRINT ' GRAFICO DO VALOR OBSERVADO TRANSFORMADO CONTRA TRATAMENTO' : $!
$TPRINT (S=1) Y TRAT ; REP !
$ERROR N $YVAR Y $!
$USE ANALISE $USE RNOR $USE TAME $!
!
$PRINT : '      *** PRIMEIRA DIVISAO *** ' : $!
!
$USE SCKN $!
!
$PRINT : '      *** SEGUNDA DIVISAO *** ' : $!
!
$USE PREP A YV $!
$CALC YV2=YVA : TR2=TRA : %Y=%Z $!
$USE PREP B YV $!
$CALC YV3=YVA : TR3=TRA
$USE SKN2 TR2 YV2 %Y $!
$USE SKN2 TR3 YV3 %Z $!
$STOP!

```

```
[o] GLIM 3.77 update 1 (copyright)1985 Royal Statistical Society, London
[i] ? $IN 11$
[i] File name? \GLIM\CLUSTER\PROG6
[i] !
[i] !*****$glim$cluster$prog6.
[i] !*****!
[i] !*
[i] !* ANALISE DE AGRUPAMENTO DE TRATAMENTOS *
[i] !*
[i] !*****!
[i] !*****!
[i] !
[i] !
[i] $TRANS O $!
[o]
[o] DADOS REFERENTES A : TRATAMENTO FUNGICIDA EM MILHO
[o] VARIABEL : GERMINACAO
[o]
[o] +-----+
[o] REP      1      2      3      4
[o] TRAT
[o] +-----+
[o] 1      88.00   94.00   88.00   88.00
[o] 2      95.00   97.00   86.00   89.00
[o] 3      91.00   90.00   94.00   92.00
[o] 4      95.00   86.00   96.00   94.00
[o] 5      94.00   92.00   93.00   89.00
[o] 6      85.00   80.00   85.00   83.00
[o] 7      80.00   82.00   74.00   83.00
[o] 8      64.00   84.00   72.00   76.00
[o] 9      90.00   83.00   90.00   91.00
[o] 10     95.00   95.00   96.00   95.00
[o] 11     96.00   99.00   92.00   95.00
[o] 12     94.00   91.00   89.00   95.00
[o] +-----+
[o]
[o]
[o]
[o] 102.00 |
[o] 100.00 |
[o] 98.00  | *
[o] 96.00  | *          2          4    2    *
[o] 94.00  | *          *    *    2          *
[o] 92.00  |          2          *          *    *
[o] 90.00  | *          *          *          2    *
[o] 88.00  | 3
[o] 86.00  | *          *          2
[o] 84.00  |          *    *    *    *
[o] 82.00  |          *    *
[o] 80.00  |          *    *
[o] 78.00  |
[o] 76.00  |          *
[o] 74.00  |          *
[o] 72.00  |          *
[o] 70.00  |
[o] 68.00  |
[o] 66.00  |
[o] 64.00  |          *
[o] 62.00  |
[o] -----|-----
[o] 0.00   2.50   5.00   7.50   10.00   12.50   15.00
[o] GRAFICO DO VALOR OBSERVADO CONTRA. TRATAMENTO
```

```

[o] *****
[o] ANALISE DE LOGITO
[o] *****
[o]
[o] scaled deviance = 228.21 at cycle 4
[o] d.f. = 47
[o]
[o] scaled deviance = 54.337 at cycle 4
[o] d.f. = 36
[o]
[o] Current model:
[o]
[o] number of units is 48
[o]
[o] y-variate Y
[o] weight *
[o] offset *
[o]
[o] probability distribution is BINOMIAL
[o] with binomial denominator N
[o] link function is LOGIT
[o] scale parameter is 1.000
[o]
[o] terms = 1 + TRAT
[o]
[o] estimate s.e. parameter
[o] 1 2.143 0.1631 1
[o] 2 0.2660 0.2442 TRAT(2)
[o] 3 0.2660 0.2442 TRAT(3)
[o] 4 0.4060 0.2525 TRAT(4)
[o] 5 0.2995 0.2461 TRAT(5)
[o] 6 -0.5394 0.2110 TRAT(6)
[o] 7 -0.7721 0.2051 TRAT(7)
[o] 8 -1.097 0.1990 TRAT(8)
[o] 9 -0.1022 0.2262 TRAT(9)
[o] 10 0.8555 0.2861 TRAT(10)
[o] 11 0.9122 0.2911 TRAT(11)
[o] 12 0.3339 0.2481 TRAT(12)
[o] scale parameter taken as 1.000
[o]
[o] RAZAO DE DEVIANCES MEDIAS = 10.47 COM 11. E 36. G.L.
[o] DEVIANCE = 54.34
[o] X2 = 53.88 COM 36. G.L.
[o] PARAMETRO DE DISPERSAO = 1.497
[o] DEVIANCE MEDIA RESIDUAL = 1.509
[o]
[o]
[o]
[o] 2.250 | *
[o] 2.000 |
[o] 1.750 |
[o] 1.500 | *
[o] 1.250 |
[o] 1.000 | *
[o] 0.750 | * *
[o] 0.500 | * * 2 2 *
[o] 0.250 | * *
[o] 0.000 | * * 3
[o] -0.250 | *
[o] -0.500 | * 3 *
[o] -0.750 | *
[o] -1.000 | *
[o] -1.250 | *
[o] -1.500 | *

```

[o] -1.750 *
[o] -2.000 *
[o] -2.250 *
[o] -2.500 *
[o] -2.750

[o] 1.000 1.500 2.000 2.500 3.000 3.500 4.000
[o] RESIDUOS DE PEARSON (RP) VS PREDITOR LINEAR (LP)
[o] (MC CULLAGH & NELDER, 1989 pag. 331)

[o] 2.250 *
[o] 2.000
[o] 1.750 *
[o] 1.500 *
[o] 1.250 *
[o] 1.000 **
[o] 0.750 * 2 *
[o] 0.500 * * 2 2 * *
[o] 0.250 ** *
[o] 0.000 3 2 * *
[o] -0.250 * *
[o] -0.500 ** 3 *
[o] -0.750 *
[o] -1.000 2 *
[o] -1.250 *
[o] -1.500 *
[o] -1.750 *
[o] -2.000 *
[o] -2.250 *
[o] -2.500 *
[o] -2.750

[o] 1.350 1.650 1.950 2.250 2.550 2.850 3.150
[o] RESIDUOS DE PEARSON (RP) VS LOG DA FUNCAO DE VARIANCA(LVA)
[o] (MC CULLAGH & NELDER, 1989 pag. 331)

[o] 10.000 2
[o] 9.500
[o] 9.000
[o] 8.500
[o] 8.000
[o] 7.500
[o] 7.000 *
[o] 6.500
[o] 6.000 *
[o] 5.500 * *
[o] 5.000
[o] 4.500 *
[o] 4.000
[o] 3.500 * * *** 2
[o] 3.000 2*
[o] 2.500 * * *
[o] 2.000 2 2 2*
[o] 1.500 2 3 **
[o] 1.000 2 *
[o] 0.500 * * * 5
[o] 0.000 *

[o] 70.00 75.00 80.00 85.00 90.00 95.00 100.00
[o] RESIDUOS ABSOLUTOS (RA) VS VALORES AJUSTADOS (FV)
[o] (MC CULLAGH & NELDER, 1989 pag. 400)

[o] MEDIAS ORDENADAS DE TRATAMENTOS

	TR	MED
1	8.000	74.00
2	7.000	79.75
3	6.000	83.25
4	9.000	88.50
5	1.000	89.50
6	2.000	91.75
7	3.000	91.75
8	5.000	92.00
9	12.000	92.25
10	4.000	92.75
11	10.000	95.25
12	11.000	95.50

*** PRIMEIRA DIVISAO ***

DELTA 0 = 139.6 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 10.51
 LAMBDA * DELTA 0 = 192.1 NIVEL DESCRITIVO = 0.
 R2 = 61.17 POR CENTO

DIVISAO EM :

8.0	7.0	6.0	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
E											
0.	0.	0.	9.0	1.0	2.0	3.0	5.0	12.	4.0	10.	11.

*** SEGUNDA DIVISAO ***

DELTA 0 = 8.825 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 2.628
 LAMBDA * DELTA 0 = 12.14 NIVEL DESCRITIVO = 0.0049
 R2 = 3.867 POR CENTO

DIVISAO EM :

8.0	0.	0.
E		
0.	7.0	6.0

DELTA 0 = 16.62 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 7.884
 LAMBDA * DELTA 0 = 22.86 NIVEL DESCRITIVO = 0.0034
 R2 = 7.281 POR CENTO

DIVISAO EM :

9.0	1.0	2.0	3.0	5.0	12.	4.0	0.	0.
E								
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	10. 11. 11.

*** TERCEIRA DIVISAO ***

DELTA 0 = 1.627 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 1.752
 LAMBDA * DELTA 0 = 2.239 NIVEL DESCRITIVO = 0.2758
 R2 = 0.7129 POR CENTO

```

[o] DIVISAO EM :
[o] 7.0 0.
[o]      E
[o] 0.    6.0
[o]
[o]
[o]
[o] DELTA 0 = 6.585 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 6.132
[o] LAMBDA * DELTA 0 = 9.060 NIVEL DESCRITIVO = 0.1787
[o] R2 = 2.885 POR CENTO
[o]
[o] DIVISAO EM :
[o] 9.0 1.0 0. 0. 0. 0.
[o]      E
[o] 0. 0. 2.0 3.0 5.0 12. 4.0
[o]
[o]
[o]
[o] DELTA 0 = 0.0283 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 1.752
[o] LAMBDA * DELTA 0 = 0.0390 NIVEL DESCRITIVO = 0.9517
[o] R2 = 0.0124 POR CENTO
[o]
[o] DIVISAO EM :
[o] 10. 0.
[o]      E
[o] 0. 11.
[o]
[o]
[o]
[o] *****
[o] ANALISE DE PROBITO
[o] *****
[o]
[o] scaled deviance = 228.21 at cycle 4
[o] d.f. = 47
[o]
[o] scaled deviance = 54.337 at cycle 4
[o] d.f. = 36
[o]
[o] Current model:
[o]
[o] number of units is 48
[o]
[o] y-variate Y
[o] weight *
[o] offset *
[o]
[o] probability distribution is BINOMIAL
[o] with binomial denominator N
[o] link function is PROBIT
[o] scale parameter is 1.000
[o]
[o] terms = 1 + TRAT
[o]
[o]
[o] estimate s.e. parameter
[o] 1 1.254 0.08429 1
[o] 2 0.1349 0.1236 TRAT(2)
[o] 3 0.1349 0.1236 TRAT(3)
[o] 4 0.2039 0.1263 TRAT(4)
[o] 5 0.1515 0.1242 TRAT(5)
[o] 6 -0.2895 0.1125 TRAT(6)
[o] 7 -0.4208 0.1104 TRAT(7)

```


[o] (MC CULLAGH & NELDER, 1989 pag. 331)

[o] MEDIAS ORDENADAS DE TRATAMENTOS

	TR	MED
[o] 1	8.000	74.00
[o] 2	7.000	79.75
[o] 3	6.000	83.25
[o] 4	9.000	88.50
[o] 5	1.000	89.50
[o] 6	2.000	91.75
[o] 7	3.000	91.75
[o] 8	5.000	92.00
[o] 9	12.000	92.25
[o] 10	4.000	92.75
[o] 11	10.000	95.25
[o] 12	11.000	95.50

[o] *** PRIMEIRA DIVISAO ***

[o] DELTA 0 = 139.6 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 10.51

[o] LAMBDA * DELTA 0 = 192.1 NIVEL DESCRITIVO = 0.

[o] R2 = 61.17 POR CENTO

[o] DIVISAO EM :

[o] 8.0 7.0 6.0 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.

[o] E

[o] 0. 0. 0. 9.0 1.0 2.0 3.0 5.0 12. 4.0 10. 11.

[o] *** SEGUNDA DIVISAO ***

[o] DELTA 0 = 8.825 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 2.628

[o] LAMBDA * DELTA 0 = 12.14 NIVEL DESCRITIVO = 0.0049
[o] R2 = 3.867 POR CENTO
[o]

[o] DIVISAO EM :
[o] 8.0 0. 0.
[o] E
[o] 0. 7.0 6.0
[o]

[o] DELTA 0 = 16.62 DV(1) = 228.2 GRAUS DE LIBERDADE = 7.884
[o] LAMBDA * DELTA 0 = 22.86 NIVEL DESCRITIVO = 0.0034
[o] R2 = 7.281 POR CENTO
[o]

[o] DIVISAO EM :
[o] 9.0 1.0 2.0 3.0 5.0 12. 4.0 0. 0.
[o] E
[o] 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 10. 11.
[o]

[o] *****
[o] ANALISE USANDO A TRANSFORMACAO ARCO SENOS DA RAIZ QUADRADA
[o] *****
[o]

[o] 0.00 2.50 5.00 7.50 10.00 12.50 15.00
[o] GRAFICO DO VALOR OBSERVADO TRANSFORMADO CONTRA TRATAMENTO
[o]

REP	1	2	3	4
TRAT				
1	1.2171	1.3233	1.2171	1.2171
2	1.3453	1.3967	1.1873	1.2327

[o]	3	1.2661	1.2490	1.3233	1.2840
[o]	4	1.3453	1.1873	1.3694	1.3233
[o]	5	1.3233	1.2840	1.3030	1.2327
[o]	6	1.1731	1.1071	1.1731	1.1458
[o]	7	1.1071	1.1326	1.0357	1.1458
[o]	8	0.9273	1.1593	1.0132	1.0588
[o]	9	1.2490	1.1458	1.2490	1.2661
[o]	10	1.3453	1.3453	1.3694	1.3453
[o]	11	1.3694	1.4706	1.2840	1.3453
[o]	12	1.3233	1.2661	1.2327	1.3453

```
[o] deviance = 0.57119
```

[o] d.f. = 47

```
[o] deviance = 0.13805
```

[o] d.f. = 36

[o] Current model:

```
[o] number of units is 48
```

[o] y-variate Y

[0] weight *

```
[0] offset *
```

```
[o] probability distribution is NORMAL
```

```
[o] link function is IDENTITY
```

```
[o] scale parameter is to be estimated by the mean deviance
```

```
[o] terms = 1 + TRAT
```

[o]	estimate	s.e.	parameter
-----	----------	------	-----------

[o]	1	1.244	0.03096	1
-----	---	-------	---------	---

[o]	2	0.04688	0.04379	TRAT(2)
-----	---	---------	---------	---------

[o]	3	0.03701	0.04379	TRAT(3)
-----	---	---------	---------	---------

[o]	4	0.06271	0.04379	TRAT(4)
-----	---	---------	---------	---------

```
[o]      5      0.04216      0.04379      TRAT(5)
```

[o] 6 -0.09384 0.04379 TRAT(6)

```
[o] 7 -0.1383 0.04379 TRAT(7)
```

```
[o]      8      -0.2040      0.04379      TRAT(8)
```

```
[o]      9      -0.01612      0.04379      TRAT(9)
```

```
[o] 10 0.1077 0.04379 TRAT(10)
```

```
[o]      11      0.1237      0.04379      TRAT(11)
```

```
[o]      12      0.04824      0.04379      TRAT(12)
```

[o] scale parameter taken as 0.003835

[o] RAZAO DE DEVIANCES MEDIAS = 10.27 COM 11. E 36. G.L.

[0] DEVIANCE = 0.1381

[o] X2 = 0.1381 COM 36. G.L.

[o] PARAMETRO DE DISPERSAO = 0.0038

[o] DEVIANCE MEDIA RESIDUAL = 0.0038

[o]

[o] 2.000 *

[o]	1.800		*
-----	-------	--	---

[o]	1.600		*
-----	-------	--	---

[O] 1.400

[o]	1.200	*
-----	-------	---

[o]	1.000	*
-----	-------	---

[o]	0.800	2
-----	-------	---

[o] 0.600 * * *2 *

[o]	0.400	*	*	2	2
-----	-------	---	---	---	---

[o] 0.200 | * * *

[o] 0.000 * * ** 3 *

[o]	-0.200				*		
[o]	-0.400	*			3	*	*
[o]	-0.600		*			*	
[o]	-0.800					*	
[o]	-1.000					2	
[o]	-1.200		*				
[o]	-1.400			*			*
[o]	-1.600					*	
[o]	-1.800	*					
[o]	-2.000					*	

[o] -----
[o] 1.0000 1.0800 1.1600 1.2400 1.3200 1.4000 1.4800
[o] RESIDUOS ESTUDANTIZADOS (RE) VS VALORES AJUSTADOS (FV)
[o]

[o] MEDIAS ORDENADAS DE TRATAMENTOS

[o]		TR	MED
[o]	1	8.000	1.040
[o]	2	7.000	1.105
[o]	3	6.000	1.150
[o]	4	9.000	1.228
[o]	5	1.000	1.244
[o]	6	3.000	1.281
[o]	7	5.000	1.286
[o]	8	2.000	1.291
[o]	9	12.000	1.292
[o]	10	4.000	1.306
[o]	11	10.000	1.351
[o]	12	11.000	1.367

[o]

[o]

[o]

[o] *** PRIMEIRA DIVISAO ***

[o]

[o]

[o] B 0 = 0.3444 SQT = 0.5712 GRAUS DE LIBERDADE = 10.51
[o] SIGMA2 0 = 0.0119 LAMBDA = 39.82 NIVEL DESCRITIVO = 0.0000
[o] R2 = 60.30 POR CENTO

[o]

[o] DIVISAO EM :

[o] 8.0 7.0 6.0 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
[o] E
[o] 0. 0. 0. 9.0 1.0 3.0 5.0 2.0 12. 4.0 10. 11.

[o]

[o]

[o]

[o]

[o] *** SEGUNDA DIVISAO ***

[o]

[o]

[o] B 0 = 0.0206 SQT = 0.5712 GRAUS DE LIBERDADE = 2.628
[o] SIGMA2 0 = 0.0119 LAMBDA = 2.383 NIVEL DESCRITIVO = 0.4284
[o] R2 = 3.608 POR CENTO

[o]

[o] DIVISAO EM :

[o] 8.0 0. 0.
[o] E
[o] 0. 7.0 6.0

[o]

[o]

[o]

[o]

[o] B 0 = 0.0441 SQT = 0.5712 GRAUS DE LIBERDADE = 7.884
[o] SIGMA2 0 = 0.0119 LAMBDA = 5.096 NIVEL DESCRITIVO = 0.7384
[o] R2 = 7.715 POR CENTO

[o]

[o]	DIVISAO EM :									
[o]	9.0	1.0	3.0	5.0	2.0	12.	4.0	0.	0.	
[o]	E									
[o]	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	10.	11.	
[o]										
[o]										
[o]										