COMPARAÇÃO NUMÉRICA DE TRÊS ESTIMADORES DE COMPONENTES DE VARIÂNCIA EM ALGUNS MODELOS GENÉTICO-ESTATÍSTICOS DE CRUZAMENTOS

JOSÉ CARLOS SERAPHIN
Engenheiro-Agrônomo

Orientador : Prof. Dr. DÉCIO BARBIN

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

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
Outubro, 1984

*Ao que de mais importante
aconteceu na minha vida:*

minha esposa,

Eliane,

e meu filho,

Angelo,

D E D I C O.

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimentos,

- ao Prof. Dr. Décio Barbin, Prof. Titular do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ/USP, pela orientação e confiança depositada durante o Curso;
- ao Dr. Francisco José P. Zimmermann e Ms. José Ruy Porto de Carvalho, pesquisadores do CNPAF/EMBRAPA, pela co-orientação dispensada durante a realização deste trabalho;
- ã Profª Ms. Maria Silvia R. Monteiro, Profª do Departamento de Biologia Geral da UFG, pelo incentivo e apoio recebidos;
- aos Professores e Funcionários do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ/USP, pelo convívio e amizade;
- aos meus amigos pelo incentivo e apoio constantes;
- aos meus pais e familiares pelo apoio dedicado;
- ã minha esposa Eliane Stacciarini Seraphin pelo incentivo, apoio e compreensão nas horas alegres e nas horas difíceis;

- ã Universidade Federal de Goiás e ã CAPES, pelo auxílio financeiro;
- ao Centro Nacional de Pesquisa de Arroz e Feijão (CNPAF-EMBRAPA), pela oportunidade de realizar este trabalho em suas dependências;
- a todos que, direta ou indiretamente, colaboraram para a realização deste trabalho;
- a Deus, pela saúde e força para superar os momentos difíceis.

	Pág.
3.2.4 - Comparação entre os métodos de estimacão	43
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	47
4.1 - Modelo I (Classificação Hierárquica, Aleatório)	47
4.2 - Modelo II (Fatorial Misto, Com Interação)	54
4.3 - Considerações Conjuntas sobre os Modelos I e II	61
5. CONCLUSÕES	63
6. LITERATURA CITADA	65
7. APÊNDICE	71

COMPARAÇÃO NUMÉRICA DE TRÊS ESTIMADORES DE COMPONENTES DE
DE VARIÂNCIA EM ALGUNS MODELOS GENÉTICO—ESTATÍSTICOS DE
CRUZAMENTOS

Autor: José Carlos Seraphin
Orientador: Dr. Décio Barbin

R E S U M O

A literatura estatística em geral, embora apresente muitos estudos e discussões sobre os estimadores de componentes de variância, pouco, ou quase nada, traz sobre as comparações destes.

Neste trabalho fez-se a comparação numérica de três estimadores de componentes de variância em dois modelos lineares genéticos-estatísticos de cruzamentos, usando como medida de eficiência, de cada estimador, o erro quadrático médio, além do tempo gasto em CPU (Unidade Central de Processamento) e outras características, tais como: estimativas médias para cada componente de variância, com o valor mínimo e o máximo encontrado, número de estimativas negativas e experimentos cujo processo numéri

co de estimação não convergiu.

Os estimadores estudados foram: ajuste de constantes ou método 3 de Henderson, estimadores de máxima verossimilhança e os estimadores quadráticos não tendenciosos de mínima variância - MIVQUE, enquanto que os modelos foram os de: classificação hierárquica, aleatório (Modelo I) e o fatorial, misto, com interação (Modelo II), referenciados em HALLAUER e MIRANDA FILHO (1981) como "Design I" e "Design III", respectivamente.

Os dados foram simulados a partir da distribuição normal, para cada modelo estudado, considerando-se duas relações de variâncias, σ_i^2/σ^2 , onde σ_i^2 é a variância do efeito aleatório, exceção do erro, e σ^2 variância do erro, tomando-se para cada uma os casos balanceados e não balanceados, com 5% de parcelas ou "células" vazias.

Uniformemente nenhum dos métodos, ajuste de constantes e MIVQUE, é melhor do que o outro para os modelos estudados, embora deve-se preferir o método MIVQUE caso os recursos computacionais sejam de fácil acesso, dada sua rapidez e eficiência como estimador. Caso contrário, deve-se preferir o método de ajuste de constantes, tão eficiente como o anterior e de cálculo relativamente fácil para os modelos estudados. Já o método de máxima verossimilhança, baseado somente nos dados de eficiência, foi mais

eficiente que os dois apenas no modelo II, podendo, portanto, ser empregado para esse modelo, desde que não se considere de fundamental importância a tendenciosidade e os problemas de convergência e tempo.

NUMERICAL COMPARISON OF THREE VARIANCE COMPONENTS
ESTIMATORS IN SOME STATISTICAL-GENETICS MODELS
OF CROSSES

Author: José Carlos Seraphin
Adviser: Prof. Dr. Décio Barbin

S U M M A R Y

The statistics literature in general, although presenting many studies and discussions on the variance component estimators, present little or almost nothing about the comparisons among them.

In this work a numerical comparison among three variance components estimators in two statistical-genetic models of crosses was made, using as a measure of the efficiency of each estimator, the mean squared error besides the time spent in Central Processing Unit (CPU) and other characteristics such as: the mean estimative for each variance component with the maximum and the minimum value determined, the number of negative estimates and the number of experiments whose numerical process of estimation did not converge.

The studied estimators were: the constant adjustments or method 3 of Henderson, maximum likelihood estimator and the minimum variance quadratic unbiased estimator - MIVQUE. The models were the random hierarchic classification (Model I) and the mixed factorial with interaction (Model II), referred by HALLAUER and MIRANDA FILHO (1981) as Design I and Design III, respectively.

Data were simulated from the normal distribution for each model studied, considering two variance ratios σ_i^2/σ^2 , where σ_i^2 is the variance of random effects except for the error variance and σ^2 is the error variance, taking for each one the balanced and unbalanced cases, with 5% empty plots.

Between the constant adjustment and MIVQUE none is better than the other for the studied models although MIVQUE should be preferred when computer resources are readily available, given its speed and efficiency as estimator. Otherwise, the constant adjustment procedure should be preferred because it is as efficient as the former and is relatively easy to calculate for the studied models. Based only on efficiency data, the maximum likelihood method was the most efficient of the three, for model II. Thus it can be used for this model when the presence of bias and problems of time and convergence are not considered of fundamental importance.

1. INTRODUÇÃO

Ao se fazer uma análise de variância, além da obtenção da estatística F, ou seja, testar a significância de efeitos de tratamentos, pode-se também estimar os componentes de variância.

Os componentes de variância, que são variâncias associadas aos efeitos aleatórios de um modelo matemático, têm grande importância e aplicação tanto no melhoramento vegetal quanto animal, na obtenção dos índices de repetibilidade, coeficiente de herdabilidade, etc., como se pode observar em FALCONER (1964) e HALLAUER e MIRANDA FILHO (1981), bem como em outras áreas, tal como a médica e a industrial. Devido a essa importância e aplicação, existe uma preocupação crescente no sentido de melhor

estimá-los, obtendo, desta forma, estimativas mais precisas e representativas de uma população.

A existência de vários métodos de estimação de componentes de variância permite ao pesquisador uma opção de escolha, embora a eficiência desses métodos seja ainda bastante discutida. Dentre os métodos disponíveis, o mais usado, da análise de variância, produz estimadores não tendenciosos e de variância mínima, e às vezes fornece estimativas negativas dos componentes de variância, ainda que por definição estes sejam positivos, sendo muitas vezes utilizados em situações inadequadas, onde sua eficiência é reduzida.

Segundo SEARLE (1971a, 1971b), a presença de uma estimativa negativa é claramente embaraçosa, e uma das várias alternativas existentes do que pode ser feito quando isto ocorre é interpretar a estimativa negativa como um problema do método que a produziu, e usar algum outro método que não forneça estimativas negativas. Existem duas opções: a primeira usar o procedimento de Bayes e a segunda os estimadores de máxima verossimilhança.

Muitos trabalhos sobre estimadores de componentes de variância têm sido realizados, mas na sua maioria se dedicam aos estudos deles isoladamente, sem a preocupação de fazer um estudo comparativo dos mesmos. Isto

talvez, devido às dificuldades envolvidas nas comparações.

É objetivo deste trabalho observar o comportamento de três métodos de estimação de componentes de variância, em dois modelos lineares genéticos-estatísticos de cruzamentos, para dados balanceados e não balanceados em duas relações de variâncias, fazendo um estudo comparativo em termos numérico, usando critérios estatísticos, entre eles o erro quadrático médio.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1 - Métodos e Modelos

2.1.1 - Métodos

Como é sabido, a dificuldade em mostrar que um método é melhor que outro é muito grande, dadas as características e propriedades peculiares inerentes a cada método, dependendo do modelo considerado.

O método da análise de variância (ANOVA), talvez o mais usado e estudado, quando empregado em dados balanceados (todas as combinações de fatores do modelo têm o mesmo número de observações), seja o modelo aleatório ou misto, ou em dados não balanceados (número desigual de observações para cada combinação de fatores) no modelo aleatório, produz estimadores não tendenciosos, de variância

mínima entre uma classe de estimadores quadráticos não tendenciosos. Este método pode produzir estimativas negativas, e quando aplicado a dados não balanceados é equivalente ao Método 1 de Henderson. Se os dados são não balanceados e o modelo é misto, os estimadores por ele obtidos são tendenciosos (SEARLE, 1971a; 1971b).

Outros métodos foram desenvolvidos, visando eliminar as deficiências inicialmente encontradas, tais como: Métodos 1, 2 e 3 de Henderson, máxima verossimilhança (MV), máxima verossimilhança restrita (MVR), estimadores quadráticos não tendenciosos de mínima norma (Minimum Norm Quadratic Unbiased Estimator - MINQUE), estimadores quadráticos não tendenciosos de mínima variância (Minimum Variance Quadratic Unbiased Estimator - MIVQUE), etc.

O Método 3 de Henderson, também chamado de ajuste de constantes, desenvolvido por HENDERSON (1953), apropriado para modelos mistos, produz estimativas que são não tendenciosas. Ele solucionou os problemas da tendenciosidade encontrada no método de ANOVA quando o modelo é misto e não balanceado, uma vez que produz estimativas não tendenciosas, e a limitação do Método 2 de Henderson (HENDERSON, 1953) quando o modelo contém interação entre efeito fixo e aleatório.

Para dados balanceados é idêntico ao método de ANOVA (SEARLE, 1968), possuindo como inconveniente o

fato de não ser unicamente definido.

Os estimadores de máxima verossimilhança, usados, talvez, pela primeira vez por HERBACH (1959) para modelos aleatórios simples em dados balanceados, são não negativos, embora sejam truncados. Não levam em considera-ção a perda dos graus de liberdade, devido à estimação dos efeitos fixos, e na maior parte das vezes são tendenciosos.

Neste procedimento, se os dados são balanceados, as soluções das equações de máxima verossimilhança nos modelos mistos e aleatórios, para componentes de va-riância, são quase as mesmas dos estimadores de componen-tes da análise de variância, diferindo nos divisores de certos quadrados médios, resultantes de algumas soluções serem tendenciosas (SEARLE, 1971a). Segundo Miller (1973) citado por CORBEIL e SEARLE (1976b), não existe forma ex-plícita para os estimadores em todos os casos de dados balanceados, por exemplo: modelo fatorial aleatório com dois fatores e interação, mas que uma expressão geral para suas variâncias pode ser obtida.

PATTERSON e THOMPSON (1971) gerenalizaram, para qualquer modelo de análise de variância balanceado, os estimadores de máxima verossimilhança restrita, inicialmente desenvolvido por RUSSELL e BRADLEY (1958), para alguns modelos específicos, balanceados. A idéia básica foi

obter os estimadores de máxima verossimilhança para os componentes de variância, não levando em consideração os efeitos fixos, visando eliminar as deficiências encontradas no método de máxima verossimilhança. Eles dividiram a função de verossimilhança, sob condições de normalidade, em duas partes, de modo que a maximização da parte livre dos efeitos fixos fornecesse os estimadores de máxima verossimilhança para os componentes de variância e, a outra fornecesse os estimadores para os efeitos fixos.

Um desenvolvimento apresentado para dados não balanceados, considerando dados balanceados como um caso especial, é dado por CORBEIL e SEARLE (1976a).

Para dados balanceados, os estimadores de máxima verossimilhança restrita são idênticos aos estimadores de análise de variância, mas se os dados são não balanceados, estes não são os mesmos, segundo CORBEIL e SEARLE (1976a, 1976b), em casos que investigaram.

Mais recentemente, RAO (1970, 1971a, 1971b, 1972) desenvolveu dois métodos de estimação denominados estimadores quadráticos não tendenciosos de mínima norma (Minimum Norm Quadratic Unbiased Estimator - MINQUE) e estimadores quadráticos não tendenciosos de mínima variância (Minimum Variance Quadratic Unbiased Estimator - MIVQUE), que satisfazem a algumas propriedades, tais como: inva-

riância quanto à translação dos efeitos fixos, não tendem a ser mínimas, a menor variância, a menor norma da diferença entre um estimador e seu verdadeiro valor, e a menor variância do estimador, sendo estas duas últimas propriedades que os tornam distintos.

Estes métodos também podem produzir estimativas negativas, e em certas situações são equivalentes, como mostrado pelo autor e por HARVILLE (1977), quando aplicado a dados normalmente distribuídos, uma vez que estes têm coeficiente de curtose zero. HARVILLE (1977), ainda argumenta que o método MIVQUE, considerando-se certos aspectos, é idêntico aos estimadores de máxima verossimilhança restrita.

Algoritmos para resolução numérica destes métodos de estimação são dados em CIOL (1982).

2.1.2 - Modelos

Recentemente muita atenção e esforço têm sido direcionados ao problema da estimação de componentes de variância, principalmente nos modelos de blocos incompletos, como pode, por exemplo, ser observado em KAPADIA e WEEKS (1963), LOW (1969), BASSON (1970), PATTERSON e THOMPSON (1971) e HOCKING e KUTNER (1975).

Os modelos genéticos-estatísticos de cruzamentos, denominado por nós de modelos I e II, proposto por COMSTOCK e ROBINSON (1948, 1952), referenciados em HALLAUER e MIRANDA FILHO (1981) como "Design I" e "Design III", são exatamente os modelos: classificação hierárquica, aleatório, e fatorial misto com interação, respectivamente, apresentado em CORBEIL e SEARLE (1976b).

Segundo HALLAUER e MIRANDA FILHO (1981), o modelo I (classificação hierárquica) é apropriado para estimação de componentes de variância genético para uma população em equilíbrio de ligação, onde os cruzamentos são aleatórios, que é admitida como população de referência. Nesta, plantas escolhidas aleatoriamente são denominadas como macho e cruzadas com grupos de plantas também escolhidas aleatoriamente, denominadas como fêmea, onde as fêmeas são diferentes para os machos, e cada macho é cruzado com diferentes grupos de fêmeas.

Já o modelo II (fatorial misto, com interação), tem sido usado em populações F_2 para determinar o efeito de ligação sobre as estimativas de σ_A^2 (variância aditiva), σ_D^2 (variância dominante) e nível médio de dominância. É também apropriado para a estimação de σ_A^2 e σ_D^2 para F_2 , admitindo-se que não há ligação e epistasia. Neste, a população de referência é a população F_2 e as progênies

avaliadas são resultados de retrocruzamentos individuais de plantas escolhidas aleatoriamente de F_2 , consideradas como macho, com ambos os pais, onde os pais são duas linhagens endogamas usadas para produzir a população F_2 .

Em ambos os modelos, as estimativas de herdabilidade são válidas, uma vez que, as populações são válidas como população de referência, ressalvadas as restrições já mencionadas anteriormente.

2.2 - Alguns Estudos sobre os Métodos

A comparação de vários estimadores de componentes de variância tem sido feita usando como medida de "performance" o erro quadrático médio (EQM). KLOTZ *et alii* (1969) estudaram o erro quadrático médio de vários estimadores no modelo inteiramente ao acaso, balanceado.

LOW (1969), utilizando o modelo de blocos incompletos balanceados, partindo do princípio que quando a distribuição não é completa os métodos usuais para obtenção de estimadores de variância mínima não tendenciosa não são seguros, fez um estudo do problema e mostrou que as suficiências estatísticas são alcançáveis através de tabelas de análise de variâncias comuns. Mostrou, também, a transformação de seis suficiências estatísticas para estimadores não tendenciosos de quatro parâmetros e mais dois

estimadores não tendenciosos para zero, e construiu outros estimadores, obtendo e comparando variâncias, estudando ainda a admissibilidade e inadmissibilidade dos estimadores.

BASSON (1970) descreveu um método de obtenção de variâncias das estimativas dos métodos 1 e 3 de Henderson num BIB com efeitos aleatórios, quando a normalidade é admitida, concluindo que nenhum desses métodos é uniformemente melhor que o outro. Diz, ainda, que o método 1 parece ser melhor estimador se σ^2 excede σ_B^2 e σ_T^2 . Quando cada um σ_B^2 ou σ_T^2 , ou ambos, excedem σ^2 , o método 3 tem a mesma ou pequena variância para um grande componente, e pequena, algumas vezes substancialmente pequena variância, para um pequeno componente. Pode-se usar o método 3 como primeiro estimador para σ_T^2 e σ_B^2 e revisar as estimativas destes pelo método 1 se a estimativa de σ^2 exceder a ambos σ_B^2 e σ_T^2 .

HOCKING e KUTNER (1975), fazendo comparações numéricas entre os métodos de estimação de componentes de variância de máxima verossimilhança, máxima verossimilhança restrita, MINQUE e método 1 de Henderson, no modelo de BIB, aleatório, concluíram que os estimadores de máxima verossimilhança, apesar de sua tendenciosidade bastante evidente, possuem menores variâncias e erro quadrático me

dio, e que se a tendenciosidade não for de fundamental importância esse procedimento se sobressai em relação aos outros.

SILVA e HALLAUER (1975), objetivando estimar e avaliar a importância da variância epistática na produção em uma população de milho "Iowa Stiff Stalk Synthetic Maize (BSSS)", utilizaram os procedimentos de estimação de quadrados mínimos ordinários, quadrados mínimos ponderados e máxima verossimilhança, na obtenção dos componentes de variância genética (aditiva, dominante e epistática) e componentes de variância devidos à interação dos componentes de variância genética com ambientes. Encontraram estimativas negativas para a variância epistática e para a variância devida à interação da dominância com ambientes nos procedimentos de máxima verossimilhança e quadrados mínimos ordinários, respectivamente. Consideraram o método dos quadrados mínimos ponderados, como um procedimento de estimação adequado e que, devido à sua simplicidade em relação ao de máxima verossimilhança, deveria ser considerado quando se usam quadrados médios para estimar componentes de variância.

Uma abordagem sobre o problema de estimativas negativas de componentes de variância foi feita por BEZERRA (1976), onde o autor busca soluções a partir da inferência Bayesiana, através da qual estima os componentes.

CORBEIL e SEARLE (1976b), usando como critério de comparação o erro quadrático médio, apresentaram comparações entre os estimadores de máxima verossimilhança e máxima verossimilhança restrita para quatro modelos balanceados (inteiramente ao acaso, aleatório; classificação hierárquica, aleatório; classificação cruzada sem interação, misto; classificação cruzada com interação, misto) e entre os estimadores de máxima verossimilhança, máxima verossimilhança restrita, método 2 e 3 de Henderson e um método iterativo, no modelo misto de classificação cruzada sem interação, com dados não balanceados.

Segundo os autores, os resultados mostraram ser mais eficientes os estimadores de máxima verossimilhança, tanto para dados balanceados quanto para não balanceados. Quando a razão $\sigma_{\beta}^2/\sigma^2$ ou o número de repetições era muito pequeno, em dados balanceados, os estimadores de máxima verossimilhança restrita mostraram-se mais eficientes.

CIOL (1982) apresenta, sem o objetivo de comparação, um estudo sobre os seguintes métodos de estimação de componentes de variância: momentos ou da análise de variância, MINQUE, MIVQUE, máxima verossimilhança e máxima verossimilhança restrita em modelos mistos, cada um acompanhado de um algoritmo para resolução numérica do pro

blema de estimação.

Um estudo, também sem o propósito de comparação, apenas elucidando aspectos teóricos sobre os métodos de Henderson, para dados não balanceados, visando facilitar suas aplicações práticas, foi realizado por VALÉRIO FILHO (1983).

3. MATERIAL E MÉTODOS

3.1 - Material

Os dados utilizados foram gerados por simulação, usando a produção média de um ensaio de feijão, do Programa Nacional de Feijão - Projeto Desenvolvimento de Germoplasma de Feijão, realizado em Bodoquena, MS, em março de 1983, sob a coordenação do Centro Nacional de Pesquisa de Arroz e Feijão - CNPAF - EMBRAPA, em Goiânia, Goiás, como o valor do parâmetro μ dos modelos.

A simulação e análise dos métodos de estimação de componentes de variância foram realizadas em um computador IBM 4341, com 4 mb., usando-se os procedimentos do SAS (Statistical Analysis System), utilizando recursos do

Centro Nacional de Pesquisa de Arroz e Feijão - CNPAF - EM BRAPA.

No SAS usou-se o procedimento PROC VARCOMP, com as opções TYPE 1, MIVQUE e ML, equivalentes aos métodos de estimação: ajuste de constantes, MIVQUE e máxima verossimilhança (MV), respectivamente.

3.2 - Métodos

3.2.1 - Modelos

O modelo linear geral, misto, usado pode ser representado na forma matricial, segundo CORBEIL e SEARLE (1976b), por

$$\tilde{Y} = X\tilde{\alpha} + \sum_{i=1}^{C+1} Z_i \tilde{\beta}_i, \quad (1)$$

onde,

$\tilde{Y}$ = vetor de observações, de dimensões $n \times 1$;

X = matriz de constantes conhecidas, de dimensões $n \times p$;

$\tilde{\alpha}$ = vetor de efeitos fixos, de dimensões $p \times 1$;

Z_i = matriz de delineamentos de zero e uns, de dimensões $n \times q_i$;

$\tilde{\beta}_i$ = vetor de efeitos aleatórios, de dimensões $q_i \times 1$;

Z_{c+1} = matriz identidade, de dimensões $n \times n$; c é o número de componentes de variância excluindo a variância do erro;

β_{c+1} = vetor de erros aleatórios, de dimensões $n \times 1$.

Assume-se distribuição normal multivariada, dada a existência do método da máxima verossimilhança.

Os β_i 's são mutuamente independentes, tendo distribuição normal multivariada, com média zero e variância $\sigma_i^2 I_{q_i}$ para $i=1,2,\dots,c+1$, ou seja:

$$E(\beta_i \beta_j') = \phi, \quad \text{se } i \neq j,$$

$$E(\beta_i) = \phi,$$

$$E(\beta_i \beta_j') = \sigma_i^2 I_{q_i}, \quad \text{se } i=j, \text{ para } i=j=1,2,\dots,c+1,$$

onde,

ϕ = matriz nula, de dimensões compatíveis com a expressão;

σ_i^2 = variância do efeito aleatório i , para $i=1,2,\dots,c+1$;

I_{q_i} = matriz identidade de ordem q_i .

X tem "rank" completo p , e $n \geq p + c + 1$.

Y tem distribuição normal multivariada,

$(X\alpha, \sigma^2 H)$, onde,

$$H = \sum_{i=1}^{c+1} \gamma_i Z_i Z_i', \quad \text{para } \gamma_i = \sigma_i^2 / \sigma^2 \text{ e } i=1,2,\dots,c+1 \quad (2)$$

ou, ainda:

$$E(\underline{Y}) = X\underline{\alpha}$$

$$D(\underline{Y}) = \sigma^2 H = \sigma_1^2 V_1 + \sigma_2^2 V_2 + \dots + \sigma_{c+1}^2 V_{c+1} \quad (3)$$

onde,

$$\sigma^2 = \sigma_{c+1}^2 = \text{variância do erro};$$

$$V_i = Z_i Z_i' \text{ para } i=1,2,\dots,c+1.$$

Como todo modelo pode ser escrito na forma proposta em (1), os modelos nos quais foram feitas as comparações são: os genéticos-estatísticos de cruzamentos, modelos I e II (por nós denominados e já mencionados), propostos por COMSTOCK e ROBINSON (1948, 1952), dados a seguir:

3.2.1.1 - Modelo I

Modelo de classificação hierárquica, aleatório, expresso por:

$$y_{ijk} = \mu + m_i + f_{ij} + e_{ijk} \quad , \text{ para } \begin{array}{l} i=1,\dots,I \\ j=1,\dots,J \\ k=1,\dots,K \end{array} \quad (4)$$

onde,

y_{ijk} = k-ésima observação no cruzamento do i-ésimo macho com a j-ésima fêmea;

μ = média geral;

m_i = efeito do i-ésimo macho; m_i é normal e independentemente distribuído com média zero e varriância σ_m^2 , isto é: $m_i \sim \text{NID}(0, \sigma_m^2)$;

f_{ij} = efeito da j-ésima fêmea dentro do i-ésimo macho, $f_{ij} \sim \text{NID}(0, \sigma_{f/m}^2)$;

e_{ijk} = efeito do erro residual ou desvio da k-ésima observação do cruzamento do i-ésimo macho com a j-ésima fêmea, $e_{ijk} \sim \text{NID}(0, \sigma^2)$.

Em termos do modelo linear geral, temos: $p=1$, $c=2$, $q_1=I$, $q_2=IJ$ e $q_3=IJK$.

3.2.1.2 - Modelo II

Modelo fatorial misto, expresso por:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + m_j + (\alpha m)_{ij} + e_{ijk}, \text{ para } i=1,2 \quad (5)$$

$$j=1, \dots, J$$

$$k=1, \dots, K$$

onde,

y_{ijk} = k-ésima observação do retrocruzamento da i-ésima linhagem com o j-ésimo macho;

μ = média geral;

ℓ_i = efeito da i -ésima linhagem, fixo;

m_j = efeito do j -ésimo macho, da geração F_2 ,

$$m_j \sim \text{NID}(0, \sigma_m^2);$$

$(\ell m)_{ij}$ = efeito da interação da i -ésima linhagem com o j -ésimo macho, $(\ell m)_{ij} \sim \text{NID}(0, \sigma_{\ell m}^2)$;

e_{ijk} = efeito do erro residual ou desvio da k -ésima observação do retrocruzamento da i -ésima linhagem com o j -ésimo macho, $e_{ijk} \sim \text{NID}(0, \sigma^2)$.

Em termos do modelo linear geral temos: $p=2$, $c=2$, $q_1=J$, $q_2=2J$ e $q_3=2JK$.

3.2.2 - Métodos de simulação

Para simulação dos dados e posterior análise e comparação dos métodos de estimação de componentes de variância, foram definidas duas relações de variâncias, σ_i^2/σ^2 , onde, σ_i^2 é a variância dos efeitos aleatórios com exceção do erro e, σ^2 , variância do erro. Em cada relação de variâncias foram tomados dados balanceados e não balanceados nos modelos adotados, definidos em (4) e (5).

As relações de variâncias adotadas foram 1/4 e 4, o erro considerado com variância um, e o nível de não

balanceamento tomado foi de 5% das observações, equivalente a 10 parcelas vazias.

Considerou-se, para o modelo I, dado em (4), 10 machos e 5 fêmeas para cada macho, e para o modelo II dado em (5), 25 machos e 50 interações pai x macho. Cada um com quatro repetições e, conseqüentemente, com 200 observações.

Foram simulados 120 experimentos de 200 observações, para cada combinação modelo, relação de variâncias e condição de balanceamento ou não balanceamento, de acordo com as especificações acima. Para a simulação dos experimentos foram usadas as funções NORMAL e RANNOR do SAS, quando considerados os modelos I e II, respectivamente.

A função NORMAL produz uma variável pseudo aleatória, normalmente distribuída com média μ e variância σ^2 , usando uma aproximação do teorema do limite central:

$$x = (\sum_i \mu_i - n/2) / (\sqrt{n/12}) ,$$

onde μ_i é uniformemente distribuído no intervalo (0, 1) e n é definido como 12 no procedimento SAS, e expressa por:

$$\mu + \sigma * \text{NORMAL} ("semente") ,$$

enquanto a função RANNOR gera uma variável aleatória normalmente distribuída com média μ e variância σ^2 , usando a transformação de BOX e MULLER (1958):

$$x_i = [-2 \ln (\mu_i)]^{1/2} \sin (2\pi \mu_j)$$

$$x_j = [-2 \ln (\mu_i)]^{1/2} \cos (2\pi \mu_j) ,$$

onde μ_i e μ_j são independentes e uniformemente distribuídos no intervalo (0, 1), e expressa por:

$$\mu + \sigma * \text{RANNOR} ("semente") .$$

Para cada experimento consideraram-se os efeitos aleatórios com média zero e variâncias dadas nas relações de variâncias, modificando-se as "sementes" (marco para iniciação da geração) na geração de cada efeito. Portanto as "sementes" eram diferentes para os efeitos dentro de cada experimento, e constantes de experimento para experimento, desde que, estivéssemos gerando para o mesmo modelo. Logo, cada observação era então composta pela soma de uma parte fixa, média geral e/ou efeito fixo, mais os efeitos aleatórios, inclusive o erro, gerados com média zero e variância de acordo com a relação de variâncias.

Os experimentos não balanceados eram gerados em três grupos, 40 experimentos cada, onde as parcelas vazias eram obtidas aleatoriamente a partir da distribuição

uniforme, através da função UNIFORM do SAS, dada pela expressão:

INT (200 * UNIFORM ("semente")),

diferente para cada grupo. As "sementes" eram diferentes de grupo para grupo, mas, em cada grupo, sempre mantidas constantes.

As "sementes" usadas foram números inteiros, ímpares, de 5, 6 ou 7 dígitos.

3.2.3 - Métodos de estimação

O estudo comparativo foi feito entre os métodos de ajuste de constantes, máxima verossimilhança e MIVQUE. Os métodos de ajuste de constantes e MIVQUE são não tendenciosos, enquanto o método de máxima verossimilhança é tendencioso.

3.2.3.1 - Método de ajuste de constantes (Método 3 de Henderson)

Este método usa as reduções nas somas de quadrados devido ao ajuste de diferentes sub-modelos do modelo completo, aleatório ou misto, para estimar os componentes de variância, igualando o valor de cada redução à sua esperança sob o modelo completo.

Escrevendo o modelo linear geral dado em (1) como:

$$\underline{Y} = \underline{U}\underline{\theta} + \underline{\varepsilon} , \quad (6)$$

segundo SEARLE (1968) podemos reescrevê-lo como

$$\underline{Y} = \underline{U}_1\underline{\theta}_1 + \underline{U}_2\underline{\theta}_2 + \underline{\varepsilon} , \quad (7)$$

através da partição da matriz $\underline{U}$ em $[\underline{U}_1 \underline{U}_2]$ e do vetor $\underline{\theta}'$ em $[\underline{\theta}'_1 \underline{\theta}'_2]$ de acordo com $\underline{U}$, sem qualquer suposição sobre a partição de $\underline{U}$ e $\underline{\theta}$, no tocante a efeitos fixos ou aleatórios.

Definindo, então, $R(\underline{\theta}_1, \underline{\theta}_2)$ como a redução na soma de quadrado devida ao ajuste do modelo completo (7) e $R(\underline{\theta}_1)$ a redução devida ao ajuste do sub-modelo

$$\underline{Y} = \underline{U}_1\underline{\theta}_1 + \underline{\varepsilon} , \quad (8)$$

temos que:

$$R(\underline{\theta}_2/\underline{\theta}_1) = R(\underline{\theta}_1, \underline{\theta}_2) - R(\underline{\theta}_1) . \quad (9)$$

Esta é a diferença entre as reduções nas somas de quadrados devidas ao ajuste de dois modelos diferentes, ou seja, redução do ajuste de $\underline{\theta}_2$ após $\underline{\theta}_1$. Logo,

$$E[R(\underline{\theta}_2/\underline{\theta}_1)] = E[R(\underline{\theta}_1, \underline{\theta}_2)] - E[R(\underline{\theta}_1)] ,$$

sob o modelo completo (7), envolve somente

$$E(\underline{\theta}_2 \underline{\theta}_2') = \text{var}(\underline{\theta}_2) + E(\underline{\theta}_2) E(\underline{\theta}_2')$$

e σ^2 , não dependendo do vetor de efeitos $\underline{\theta}_1$, sejam eles aleatórios ou fixos, como pode ser visto adiante.

Como

$$R(\underline{\theta}_1, \underline{\theta}_2) = \hat{\underline{\theta}}' \underline{U}' \underline{Y} = \underline{Y}' \underline{U} (\underline{U}' \underline{U})^{-1} \underline{U}' \underline{Y} ,$$

$$R(\underline{\theta}_1) = \underline{Y}' \underline{U}_1 (\underline{U}_1' \underline{U}_1)^{-1} \underline{U}_1' \underline{Y} ,$$

ambas formas quadráticas de $\underline{Y}$, e sabendo-se que

$$E(\underline{Y}' Q \underline{Y}) = E(\underline{Y}') Q E(\underline{Y}) + \text{tr}[Q \text{var}(\underline{Y})] , \quad (10)$$

onde "tr" representa o traço da matriz quadrada, temos:

$$\begin{aligned} E[R(\underline{\theta}_1, \underline{\theta}_2)] &= E[\underline{Y}' \underline{U} (\underline{U}' \underline{U})^{-1} \underline{U}' \underline{Y}] \\ &= E(\underline{Y}') \underline{U} (\underline{U}' \underline{U})^{-1} \underline{U}' E(\underline{Y}) + \\ &\quad + \text{tr}[\underline{U} (\underline{U}' \underline{U})^{-1} \underline{U}' \text{var}(\underline{Y})] , \end{aligned}$$

mas,

$$E(\underline{Y}) = E(\underline{U} \underline{\theta} + \underline{\varepsilon}) = \underline{U} E(\underline{\theta}) , \quad (11)$$

$$\text{Var}(\underline{Y}) = \text{var}(\underline{U} \underline{\theta} + \underline{\varepsilon}) = \underline{U} \text{var}(\underline{\theta}) \underline{U}' + \sigma^2 \underline{I} , \quad (12)$$

então,

$$\begin{aligned}
E[R(\underline{\theta}_1, \underline{\theta}_2)] &= E(\underline{\theta}') U' U (U' U)^{-1} U' U E(\underline{\theta}) + \text{tr} \begin{bmatrix} U(U' U)^{-1} U' U \text{var}(\underline{\theta}) U' + \\ + U(U' U)^{-1} U' \sigma^2 I \end{bmatrix} \\
&= \text{tr}[E(\underline{\theta}') U' U E(\underline{\theta})] + \text{tr}\{U' U [E(\underline{\theta} \underline{\theta}') - E(\underline{\theta}) E(\underline{\theta}')] \} + \\
&\quad + \sigma^2 \text{tr}[U(U' U)^{-1} U'] \\
&= \text{tr}[U' U E(\underline{\theta} \underline{\theta}')] + \sigma^2 r(U) .
\end{aligned}$$

$$\therefore E[R(\underline{\theta}_1, \underline{\theta}_2)] = \text{tr} \left\langle \begin{bmatrix} U_1' U_1 & U_1' U_2 \\ U_2' U_1 & U_2' U_2 \end{bmatrix} E \begin{bmatrix} \underline{\theta}_1 \underline{\theta}_1' & \underline{\theta}_1 \underline{\theta}_2' \\ \underline{\theta}_2 \underline{\theta}_1' & \underline{\theta}_2 \underline{\theta}_2' \end{bmatrix} \right\rangle + \sigma^2 r(U) , \quad (13)$$

onde $r(U)$ é o "rank" ou posto da matriz U .

Analogamente,

$$\begin{aligned}
E[R(\underline{\theta}_1)] &= E[\underline{Y}' U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1' \underline{Y}] \\
&= E(\underline{Y}') U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1' E(\underline{Y}) + \text{tr} [U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1' \text{var}(\underline{Y})] ,
\end{aligned}$$

usando (11) e (12) temos:

$$\begin{aligned}
E[R(\underline{\theta}_1)] &= E(\underline{\theta}') U' U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1' U E(\underline{\theta}) + \text{tr} \begin{bmatrix} U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1' U \text{var}(\underline{\theta}) U' + \\ + U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1' \sigma^2 I \end{bmatrix} \\
&= \text{tr} [E(\underline{\theta}') U' U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1' U E(\underline{\theta})] + \\
&\quad + \text{tr} \{U' U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1' U [E(\underline{\theta} \underline{\theta}') - E(\underline{\theta}) E(\underline{\theta}')] \} + \\
&\quad + \sigma^2 \text{tr} [U_1 (U_1' U_1)^{-1} U_1']
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E[R(\underline{\theta}_1)] &= \text{tr} [U'U_1(U_1'U_1)^{-1} U_1'U E(\underline{\theta}\underline{\theta}')] + \sigma^2 r(U_1) \\
&= \text{tr} \left\{ \begin{bmatrix} U_1'U_1 \\ U_2'U_1 \end{bmatrix} (U_1'U_1)^{-1} \begin{bmatrix} U_1'U_1 & U_1'U_2 \end{bmatrix} E(\underline{\theta}\underline{\theta}') \right\} + \sigma^2 r(U_1) \\
\therefore E[R(\underline{\theta}_1)] &= \text{tr} \left\{ \begin{bmatrix} U_1'U_1 & U_1'U_2 \\ U_2'U_1 & U_2'U_1(U_1'U_1)^{-1} U_1'U_2 \end{bmatrix} E \begin{bmatrix} \underline{\theta}_1\underline{\theta}_1' & \underline{\theta}_1\underline{\theta}_2' \\ \underline{\theta}_2\underline{\theta}_1' & \underline{\theta}_2\underline{\theta}_2' \end{bmatrix} \right\} + \sigma^2 r(U_1). \quad (14)
\end{aligned}$$

Da diferença entre (13) e (14) encontramos que:

$$\begin{aligned}
E[R(\underline{\theta}_2/\underline{\theta}_1)] &= \text{tr} \left\{ \begin{bmatrix} \phi & \phi \\ \phi & U_2'[I - U_1(U_1'U_1)^{-1} U_1'] U_2 \end{bmatrix} E \begin{bmatrix} \underline{\theta}_1\underline{\theta}_1' & \underline{\theta}_1\underline{\theta}_2' \\ \underline{\theta}_2\underline{\theta}_1' & \underline{\theta}_2\underline{\theta}_2' \end{bmatrix} \right\} + \\
&\quad + [r(U) - r(U_1)] \sigma^2 \\
\therefore E[R(\underline{\theta}_2/\underline{\theta}_1)] &= \text{tr} \{ U_2'[I - U_1(U_1'U_1)^{-1} U_1'] U_2 E(\underline{\theta}_2\underline{\theta}_2') \} + \\
&\quad + [r(U) - r(U_1)] \sigma^2. \quad (15)
\end{aligned}$$

Como dissemos, o valor esperado de $R(\underline{\theta}_2/\underline{\theta}_1)$ envolve somente $E(\underline{\theta}_2\underline{\theta}_2')$ e σ^2 , sendo livre de $E(\underline{\theta}_1\underline{\theta}_1')$ e $E(\underline{\theta}_1\underline{\theta}_2')$. Assim, os estimadores de componentes de variância são obtidos a partir das diferenças entre as reduções do modelo completo e sub-modelos, igualadas as suas respectivas esperanças, através da resolução do sistema de equações resultante.

Especificamente para os modelos definidos em (4) e (5), os estimadores de componentes de variância foram obtidos a partir do conjunto de equações abaixo, para cada modelo.

Para o modelo dado em (4), reescrito matricialmente de acordo com o modelo linear geral dado em (1) como

$$\underline{Y} = X\underline{\alpha} + Z_1\underline{\beta}_1 + Z_2\underline{\beta}_2 + Z_3\underline{\beta}_3 ,$$

sendo $\underline{\beta}_1$, $\underline{\beta}_2$ e $\underline{\beta}_3$ equivalentes aos vetores $\underline{m}$, $\underline{f}$ e $\underline{e}$, respectivamente, onde $\underline{\alpha} = \mu$ é uma constante, $\underline{\beta}_1$ e $\underline{\beta}_2$ vetores de efeitos aleatórios, escreveu-se U como $[X \ Z_1 \ Z_2]$. As reduções calculadas foram:

$$\begin{aligned} R(\underline{\alpha}) &= \underline{Y}'U_1(U_1'U_1)^{-1}U_1'\underline{Y} , \quad \text{para } U_1 = [X] \quad \text{e } r(U_1) = 1 \\ R(\underline{\alpha}, \underline{\beta}_1) &= \underline{Y}'U_1(U_1'U_1)^{-1}U_1'\underline{Y} , \quad \text{para } U_1 = [X \ Z_1] \text{ e } r(U_1) = I \\ R(\underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2) &= \underline{Y}'U(U'U)^{-1}U'\underline{Y} , \quad r(U) = IJ \\ \Sigma y^2 &= \underline{Y}'I_n\underline{Y} , \quad r(I_n) = n . \end{aligned}$$

Posteriormente obteve-se:

Diferença entre Reduções	Esperança da Diferença
$R(\underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2 / \underline{\alpha}) = R(\underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2) - R(\underline{\alpha})$	$(IJ-1) \sigma^2 + K_1 \sigma_{f/m}^2 + K_2 \sigma_m^2$
$R(\underline{\beta}_2 / \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1) = R(\underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2) - R(\underline{\alpha}, \underline{\beta}_1)$	$I(J-1) \sigma^2 + K_3 \sigma_{f/m}^2$
$SQ \text{ Erro} = \underline{Y}'I_n\underline{Y} - R(\underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2)$	$(n-IJ) \sigma^2$

Determinados K_1 , K_2 e K_3 a partir de (15), estimam-se σ^2 , $\sigma_{f/m}^2$ e σ_m^2 através do sistema de equações anteriores.

De modo semelhante, para o modelo dado em (5) reescrito matricialmente como:

$$\underline{Y} = \mu \underline{1} + X\underline{\alpha} + Z_1\underline{\beta}_1 + Z_2\underline{\beta}_2 + Z_3\underline{\beta}_3,$$

sendo $\underline{\alpha}$, $\underline{\beta}_1$, $\underline{\beta}_2$ e $\underline{\beta}_3$ equivalentes aos vetores $\underline{\ell}$, $\underline{m}$, $\underline{\ell m}$ e $\underline{e}$, respectivamente, onde μ é uma constante, $\underline{\alpha}$ vetor de efeitos fixos, $\underline{\beta}_1$ e $\underline{\beta}_2$ vetores de efeitos aleatórios, escreveu-se U como $[\underline{1} \ X \ Z_1 \ Z_2]$.

Calcularam-se as seguintes reduções:

$$\begin{aligned} R(\mu) &= \underline{Y}'U_1(U_1'U_1)^{-1}U_1'\underline{Y}, \quad \text{para } U_1 = [\underline{1}] \quad \text{e } r(U_1) = 1 \\ R(\mu, \underline{\alpha}) &= \underline{Y}'U_1(U_1'U_1)^{-1}U_1'\underline{Y}, \quad \text{para } U_1 = [\underline{1} \ X] \quad \text{e } r(U_1) = I \\ R(\mu, \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1) &= \underline{Y}'U_1(U_1'U_1)^{-1}U_1'\underline{Y}, \quad \text{para } U_1 = [\underline{1} \ X \ Z_1] \quad \text{e } r(U_1) = I+J-1 \\ R(\mu, \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2) &= \underline{Y}'U(U'U)^{-1}U'\underline{Y}, \quad r(U) = IJ \\ \Sigma Y^2 &= \underline{Y}'I_n\underline{Y}, \quad r(I_n) = n \end{aligned}$$

Obteve-se a seguir:

Diferença entre Reduções	Esperança da diferença
$R(\underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2/\mu) = R(\mu, \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2) - R(\mu)$	$(IJ-1)\sigma^2 + K_1 \sigma_{\ell m}^2 + K_2 \sigma_m^2 + K_3 \sigma_{\ell}^2$
$R(\underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2/\mu, \underline{\alpha}) = R(\mu, \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2) - R(\mu, \underline{\alpha})$	$I(J-1)\sigma^2 + K_4 \sigma_{\ell m}^2 + K_5 \sigma_m^2$
$R(\underline{\beta}_2/\mu, \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1) = R(\mu, \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2) - R(\mu, \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1)$	$(I-1)(J-1)\sigma^2 + K_6 \sigma_{\ell m}^2$
$SQ \text{ Erro} = \underline{Y}'I_n\underline{Y} - R(\mu, \underline{\alpha}, \underline{\beta}_1, \underline{\beta}_2)$	$(n-IJ)\sigma^2$

Uma vez obtidos K_1, K_2, K_3, K_4, K_5 e K_6 pelo uso de (15), calcularam-se $\hat{\sigma}^2$, $\hat{\sigma}_{\ell m}^2$ e $\hat{\sigma}_m^2$ através do sistema de equações anterior.

A primeira equação não foi usada para estimar os componentes de variância, uma vez que α é fixo. A função Ω_ℓ está substituindo σ_ℓ^2 , para indicar que neste caso α é fixo.

O procedimento numérico usado para obtenção dos coeficientes dos componentes de variância, foi o mostrado por GAYLOR *et alii* (1970).

3.2.3.2 - Método da máxima verossimilhança

Como todo modelo linear pode ser considerado um modelo misto, uma vez que estes contem uma média geral μ , considerada fixa, e um termo de erros e , considerado aleatório, o método de máxima verossimilhança é aplicável a qualquer modelo linear. Neste, os estimadores de máxima verossimilhança são os valores que maximizam a função de verossimilhança.

Considerando o modelo linear geral dado em (1) com as suposições iniciais, o vetor $\underline{Y}$, de observações, tem distribuição normal multivariada, com média $X\underline{\alpha}$ e matriz de variância-covariância $D(\underline{Y}) = \sigma^2 H$, onde H é definido como em (2).

Portanto, a função de verossimilhança é dada por:

$$L(\underline{\alpha}, \sigma^2, \underline{\gamma}; \underline{Y}) = (2\pi)^{-n/2} \sigma^{-n} |H|^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y}-X\underline{\alpha})' H^{-1} (\underline{Y}-X\underline{\alpha})\right],$$

onde, $|H|$ = determinante da matriz H ;

σ^2 = variância do erro;

$\underline{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{c+1})$ para $\gamma_i = \sigma_i^2/\sigma^2$.

Logo, os estimadores de máxima verossimilhança de $\underline{\alpha}$, σ^2 e $\underline{\gamma}$ são tais que satisfaçam:

- i) $\sigma^2 \geq 0$;
- ii) $\gamma_i \geq 0$, $i=1,2,\dots,c+1$;
- iii) $L(\hat{\underline{\alpha}}, \hat{\sigma}^2, \hat{\underline{\gamma}}; \underline{Y}) = \sup_{\{(\underline{\alpha}, \sigma^2, \underline{\gamma}) : \gamma_i \geq 0 \text{ e } \sigma^2 \geq 0\}} L(\underline{\alpha}, \sigma^2, \underline{\gamma}; \underline{Y})$

Tomando o logaritmo da função de verossimilhança, dado que $L(\underline{\alpha}, \sigma^2, \underline{\gamma}; \underline{Y}) > 0$, pois $L(\underline{\alpha}, \sigma^2, \underline{\gamma}; \underline{Y})$ e $\ln L(\underline{\alpha}, \sigma^2, \underline{\gamma}; \underline{Y})$ tem supremo no mesmo ponto, teremos:

$$\lambda = \ln L(\underline{\alpha}, \sigma^2, \underline{\gamma}; \underline{Y}) = -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{2} \ln |H| - \frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y}-X\underline{\alpha})' H^{-1} (\underline{Y}-X\underline{\alpha})$$

Os estimadores de máxima verossimilhança de $\underline{\alpha}$, σ^2 e γ_i , $i=1,2,\dots,c+1$, são obtidos igualando-se a zero as derivadas parciais de primeira ordem de λ em relação a cada parâmetro, como se segue:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \lambda}{\partial \underline{\alpha}} &= \frac{\partial}{\partial \underline{\alpha}} \left[-\frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\alpha})' \underline{H}^{-1} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\alpha}) \right] \\
&= \frac{\partial}{\partial \underline{\alpha}} \left[\frac{1}{2\sigma^2} (2\underline{\alpha}' \underline{X}' \underline{H}^{-1} \underline{Y} - \underline{\alpha}' \underline{X}' \underline{H}^{-1} \underline{X}\underline{\alpha}) \right] \\
&= \frac{1}{\sigma^2} (\underline{X}' \underline{H}^{-1} \underline{Y} - \underline{X}' \underline{H}^{-1} \underline{X}\underline{\alpha})
\end{aligned}$$

$$\underline{X}' \underline{H}^{-1} \underline{Y} - \underline{X}' \underline{H}^{-1} \underline{X}\underline{\hat{\alpha}} = \phi$$

$$\therefore \quad \underline{\hat{\alpha}} = (\underline{X}' \underline{H}^{-1} \underline{X})^{-1} \underline{X}' \underline{H}^{-1} \underline{Y} \quad (16)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \lambda}{\partial \sigma^2} &= \frac{\partial}{\partial \sigma^2} \left[-\frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}})' \underline{H}^{-1} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}}) \right] \\
&= -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}})' \underline{H}^{-1} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}}) \\
-n + \frac{1}{\sigma^2} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}})' \underline{H}^{-1} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}}) &= \phi
\end{aligned}$$

$$\therefore \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}})' \underline{H}^{-1} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}}) \quad (17)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \lambda}{\partial \gamma_i} &= \frac{\partial}{\partial \gamma_i} \left[-\frac{1}{2} \ln |\underline{H}| - \frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}})' \underline{H}^{-1} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}}) \right] \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\partial \ln |\underline{H}|}{\partial \gamma_i} - \frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}})' \frac{\partial \underline{H}^{-1}}{\partial \gamma_i} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}}) \\
&= -\frac{1}{2} \text{tr} \left[\underline{H}^{-1} \frac{\partial \underline{H}}{\partial \gamma_i} \right] - \frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}})' \left[-\underline{H}^{-1} \frac{\partial \underline{H}}{\partial \gamma_i} \underline{H}^{-1} \right] (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\hat{\alpha}})
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \gamma_i} = -\frac{1}{2} \text{tr} [H^{-1} Z_i Z_i'] + \frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y} - X\alpha)' H^{-1} Z_i Z_i' H^{-1} (\underline{Y} - X\alpha)$$

$$- \text{tr} [Z_i' H^{-1} Z_i] + \frac{1}{\sigma^2} (\underline{Y} - X\hat{\alpha})' H^{-1} Z_i Z_i' H^{-1} (\underline{Y} - X\hat{\alpha}) = \phi$$

$$\therefore \text{tr}[Z_i' H^{-1} Z_i] = \frac{1}{\sigma^2} (\underline{Y} - X\hat{\alpha})' H^{-1} Z_i Z_i' H^{-1} (\underline{Y} - X\hat{\alpha}) \quad (18)$$

As derivadas $\frac{\partial \ln |H|}{\partial \gamma_i}$ e $\frac{\partial H^{-1}}{\partial \gamma_i}$ foram obtidas baseadas em propriedades que podem ser encontradas, por exemplo, em GRAYBILL (1969, p. 266-268) e PRESS (1982, p. 42-43).

Como foi mostrado, as estimativas dos componentes de variância são obtidas pelas expressões (17) e (18), e dos efeitos fixos pela expressão (16).

Formas explícitas dos estimadores dos componentes de variância para os modelos específicos definidos em (4) e (5), em dados balanceados, podem ser encontrados em CORBEIL e SEARLE (1976b).

O método numérico usado para calcular os estimadores de máxima verossimilhança de componentes de variância foi o da transformação W, desenvolvido por HEMMERLE e HARTLEY (1973).

3.2.3.3 - Método MIVQUE

Os estimadores MIVQUE são formas quadráticas das observações, invariantes com relação aos efeitos fixos, não tendenciosos e de mínima variância.

Considerando o modelo (1), escrito como:

$$\underline{Y} = X\underline{\alpha} + Z\underline{\beta} \quad , \quad (19)$$

onde, $Z = [Z_1 \ Z_2 \ \dots \ Z_C \ Z_{C+1}]$ e $\underline{\beta}' = [\underline{\beta}'_1 \ \underline{\beta}'_2 \ \dots \ \underline{\beta}'_C \ \underline{\beta}'_{C+1}]$ com as suposições iniciais do modelo, o vetor $\underline{Y}$, de observações, tem matriz de variância-covariância como dado em (3), isto é:

$$D(\underline{Y}) = V = \sigma_1^2 V_1 + \sigma_2^2 V_2 + \dots + \sigma_C^2 V_C + \sigma_{C+1}^2 V_{C+1} \quad , \quad (20)$$

onde, $V_i = Z_i Z_i'$, $i=1,2,\dots,C+1$.

Como os estimadores MIVQUE de uma função linear, $\sum_{i=1}^{C+1} p_i \sigma_i^2$, de componentes de variância é uma função quadrática das observações, podem ser expressos como $\underline{Y}' A \underline{Y}$ para uma dada matriz A. Esta deve ser tal que satisfaça:

- i) Invariância do estimador quanto à translação do vetor de efeitos fixos, $\underline{\alpha}$.

Tomando-se $\underline{\alpha} = \underline{\alpha}_0$ ao invés de $\underline{\alpha}$, o modelo (19) fica:

$$\underline{Y} - X\underline{\alpha}_0 = X(\underline{\alpha} - \underline{\alpha}_0) + Z\underline{\beta}.$$

Assim, o estimador de $\sum_{i=1}^{C+1} p_i \sigma_i^2$ é

$$\begin{aligned}\underline{Y}'A\underline{Y} &= (\underline{Y} - X\underline{\alpha}_0)' A (\underline{Y} - X\underline{\alpha}_0) \\ &= \underline{Y}'A\underline{Y} - 2\underline{Y}'AX\underline{\alpha}_0 + \underline{\alpha}_0' X'AX\underline{\alpha}_0.\end{aligned}$$

Portanto, sob

$$AX = \phi, \quad (21)$$

tem-se a invariância desejada.

ii) Não tendenciosidade do estimador,

$$E(\underline{Y}'A\underline{Y}) = \sum_{i=1}^{C+1} p_i \sigma_i^2. \quad (22)$$

A partir de (10); usando o modelo (19) e a expressão (20), tem-se:

$$\begin{aligned}E(\underline{Y}'A\underline{Y}) &= \underline{\alpha}'X'AX\underline{\alpha} + \text{tr} [AV] \\ &= \underline{\alpha}'X'AX\underline{\alpha} + \sum_{i=1}^{C+1} \sigma_i^2 \text{tr} [AV_i]\end{aligned}$$

Pela restrição (21) encontra-se:

$$E(\underline{Y}'A\underline{Y}) = \sum_{i=1}^{C+1} \sigma_i^2 \text{tr} [AV_i]. \quad (23)$$

Igualando (22) e (23) obtem-se:

$$\sum_{i=1}^{c+1} \sigma_i^2 \operatorname{tr} [AV_i] = \sum_{i=1}^{c+1} p_i \sigma_i^2 ,$$

$$\therefore \operatorname{tr} [AV_i] = p_i , \quad i=1,2,\dots,c+1 \quad (24)$$

é uma exigência para que o estimador seja não tendencioso, sob a condição de invariância.

iii) Mínima variância do estimador:

Dadas as condições (i) e (ii), a matriz A deve ser aquela que minimiza a $\operatorname{var}(\underline{Y}'A\underline{Y})$ sujeita às condições (21) e (24), isto é, $A\underline{X} = \phi$ e $\operatorname{tr}[AV_i] = p_i$, $i=1,2,\dots,c+1$.

Conforme mostra RAO (1973, p. 317-318) e CIOL (1982, p. 119), a variância de $\underline{Y}'A\underline{Y}$ é mínima quando, para qualquer matriz N, tal que $E(\underline{Y}'N\underline{Y}) = 0$, tem-se:

$$\operatorname{COV}(\underline{Y}'A\underline{Y}, \underline{Y}'N\underline{Y}) = 0 .$$

Como escrito em RAO (1971b),

$$\operatorname{COV}(\underline{Y}'A\underline{Y}, \underline{Y}'N\underline{Y}) = 2 \operatorname{tr}[B\Delta_1 F\Delta_1] + \operatorname{tr}[\tilde{B}\Delta_2 \tilde{F}] \quad (25)$$

onde,

$$B = Z'AZ ;$$

$$F = Z'NZ ;$$

$$\tilde{B} = \operatorname{diag} \{ (Z'AZ)_{ii} \} ;$$

$$\tilde{F} = \operatorname{diag} \{ (Z'NZ)_{ii} \} ;$$

$$\Delta_1 = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 I_{q_1} & & & \phi \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ \phi & & & \sigma_{C+1}^2 I_{q_{C+1}} \end{bmatrix}$$

e

$$\Delta_2 = \begin{bmatrix} \sigma_1^4 \gamma_1 I_{q_1} & & & \phi \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ \phi & & & \sigma_{C+1}^4 \gamma_{C+1} I_{q_{C+1}} \end{bmatrix},$$

sendo γ_i curtose do efeito aleatório $\underline{\beta}_i$, definido como

$$\gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^{q_i} (y_{ij} - \mu_i)^4}{q_i \sigma_i^4} - 3.$$

Pelos lemas 1 e 2, do Apêndice, dadas as condições (21) e $NX = \phi$, pode-se escrever:

$$A = GCG' \quad (26)$$

$$N = GDG' \quad (27)$$

onde G satisfaz

$$GX = \phi \quad \text{e} \quad G'VG = G'Z\Delta_1 Z'G = I_n. \quad (28)$$

Assim, usando (26) e (27) em (25) tem-se:

$$\text{COV}(\underline{Y}'\underline{A}\underline{Y}, \underline{Y}'\underline{N}\underline{Y}) = 2 \text{tr}[\underline{Z}'\underline{G}\underline{C}\underline{G}'\underline{Z}\Delta_1\underline{Z}'\underline{G}\underline{D}\underline{G}'\underline{Z}\Delta_1] + \\ + \text{tr}[\text{diag}\{(\underline{Z}'\underline{G}\underline{C}\underline{G}'\underline{Z})_{ii}\} \Delta_2 \text{diag}\{(\underline{Z}'\underline{G}\underline{D}\underline{G}'\underline{Z})_{ii}\}] ,$$

que por (28) resulta em:

$$\text{COV}(\underline{Y}'\underline{A}\underline{Y}, \underline{Y}'\underline{N}\underline{Y}) = 2 \text{tr}[\underline{D}\underline{C}] + \text{tr}[\text{diag}\{(\underline{Z}'\underline{G}\underline{C}\underline{G}'\underline{Z})_{ii}\} \Delta_2 \text{diag}\{(\underline{Z}'\underline{G}\underline{D}\underline{G}'\underline{Z})_{ii}\}] .$$

Definindo,

$$\eta_i = i\text{-ésima coluna de } \underline{G}'\underline{Z}, i=1,2,\dots,q, \text{ onde } q = \sum_{i=1}^{C+1} q_i ;$$

$$\delta_i = i\text{-ésimo elemento da diagonal de } \Delta_2, i=1,2,\dots,q;$$

tem-se:

$$\begin{aligned} \text{COV}(\underline{Y}'\underline{A}\underline{Y}, \underline{Y}'\underline{N}\underline{Y}) &= 2 \text{tr} [\underline{D}\underline{C}] + \text{tr} \left[\sum_{i=1}^q \eta_i' \underline{C} \eta_i \delta_i \eta_i' \underline{D} \eta_i \right] \\ &= 2 \text{tr} [\underline{D}\underline{C}] + \text{tr} \left[\underline{D} \sum_{i=1}^q \delta_i \eta_i \eta_i' \underline{C} \eta_i \eta_i' \right] \\ &= \text{tr} \left[\underline{D} (2\underline{C} + \sum_{i=1}^q \delta_i \eta_i \eta_i' \underline{C} \eta_i \eta_i') \right] \quad (29) \end{aligned}$$

Como

$$E(\underline{Y}'\underline{N}\underline{Y}) = 0$$

$$= E(\underline{Y}'\underline{G}\underline{D}\underline{G}'\underline{Y})$$

$$= E(\underline{\beta}'\underline{Z}'\underline{G}\underline{D}\underline{G}'\underline{Z}\underline{\beta})$$

$$= \text{tr} [\underline{D}\underline{G}'\underline{Z} E(\underline{\beta}\underline{\beta}')\underline{Z}'\underline{G}] ,$$

mas, $E(\beta\beta') = \Lambda$, onde:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 I_{q_1} & & \phi \\ & \ddots & \\ \phi & & \lambda_{c+1} I_{q_{c+1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 & & \\ & \ddots & \\ & & v_q \end{bmatrix}$$

e λ_i , $i=1,2,\dots,c+1$ é arbitrário, tem-se portanto, que:

$$\text{tr}[D G' Z \Lambda Z' G] = \sum_{i=1}^q v_i \eta_i \eta_i' = 0. \quad (30)$$

Como (29) deve ser zero para toda matriz D , satisfazendo (30), isso leva a:

$$2C + \sum_{i=1}^q \delta_i \eta_i \eta_i' C \eta_i \eta_i' = \sum_{i=1}^q v_i \eta_i \eta_i',$$

ou ainda,

$$2C + \sum_{i=1}^q \delta_i \theta_i \eta_i \eta_i' = \sum_{i=1}^q v_i \eta_i \eta_i', \quad (31)$$

para θ_i definido como: $\theta_i = \eta_i' C \eta_i$, $i=1,2,\dots,q$.

Pré-multiplicando por η_j' e pós-multiplicando por η_j , $j=1,2,\dots,q$, a expressão (31) obtém-se:

$$2\eta_j' C \eta_j + \sum_{i=1}^q \delta_i \theta_i \eta_j' \eta_i \eta_i' \eta_j = \sum_{i=1}^q v_i \eta_j' \eta_i \eta_i' \eta_j.$$

Fazendo $m_{ij} = \eta_i' \eta_j$ e $M = [m_{ij}^2]$ (matriz cujo elemento ij é m_{ij}^2), encontra-se:

$$2\theta_j + \sum_{i=1}^q \delta_i \theta_i m_{ij}^2 = \sum_{i=1}^q v_i m_{ij}^2 ,$$

ou matricialmente:

$$2\underline{\theta} + M\Delta_2 \underline{\theta} = M\underline{v}$$

$$(2I + M\Delta_2) \underline{\theta} = M\underline{v} \quad , \quad (33)$$

onde $\underline{\theta}' = [\theta_1 \quad \theta_2 \quad \dots \quad \theta_q]$ e $\underline{v}' = [v_1 \quad v_2 \quad \dots \quad v_q]$.

Uma vez que $\underline{v}$ tem somente $c+1$ componentes distintos, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{c+1}$, existe uma matriz S , que é obtida pela soma apropriada sobre as colunas de M , tal que:

$$M\underline{v} = S\underline{\lambda} \quad .$$

Portanto, reescrevendo (33), tem-se:

$$(2I + M\Delta_2) \underline{\theta} = S\underline{\lambda} \quad . \quad (34)$$

Impondo a condição (24) de não tendenciosidade do estimador, isto é:

$$\text{tr}[AV_i] = \text{tr}[Z_i' GCG' Z_i] = p_i \quad , \quad i=1,2,\dots,c+1 ,$$

sabendo-se que:

$$Z_i' GCG' Z_i = \begin{bmatrix} Z_{i1}' GCG' Z_{i1} & \dots & Z_{i1}' GCG' Z_{iq_i} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ Z_{iq_i}' GCG' Z_{i1} & \dots & Z_{iq_i}' GCG' Z_{iq_i} \end{bmatrix},$$

onde Z_{ij} é a j -ésima coluna de Z_i , e ainda tomando

$$G' Z_{ij} = \eta_\ell, \quad \ell = \sum_{s=0}^{i-1} q_s + j \quad (35)$$

tem-se:

$$\begin{aligned} \text{tr}[Z_i' GCG' Z_i] &= \sum_{j=1}^{q_i} Z_{ij}' GCG' Z_{ij} \\ &= \sum_{j=1}^{q_i} \eta_\ell' C \eta_\ell \\ &= \sum_{j=1}^{q_i} \theta_\ell \end{aligned}$$

$\therefore \sum_{j=1}^{q_i} \theta_\ell = p_i$, $i=1,2,\dots,c+1$, e ℓ dado por (35), ou seja:

$$H\theta = p, \quad (36)$$

para θ já definido, $p' = [p_1 \ p_2 \ \dots \ p_{c+1}]$

$$H = \begin{bmatrix} \mathbf{1}'_{q_1} & & \phi \\ & \ddots & \\ \phi & & \mathbf{1}'_{q_{c+1}} \end{bmatrix}$$

Das expressões (34) e (36), tem-se duas equações:

$$\left. \begin{aligned} (2I + M\Delta_2)\underline{\theta} - S\underline{\lambda} &= \phi \\ H\underline{\theta} &= p \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

que fornece os valores de $\underline{\theta}$ e $\underline{\lambda}$.

Retornando à expressão (31), e reescrevendo-a na forma matricial, tem-se;

$$2C + G'Z\Delta_2\Theta Z'G = G'Z\Lambda Z'G ,$$

de onde tira-se que:

$$C = G'Z\left(\frac{1}{2}\Lambda - \frac{1}{2}\Delta_2\Theta\right)Z'G , \quad (38)$$

onde Θ é uma matriz diagonal, cujos componentes são os de $\underline{\theta}$.

Portanto, a expressão (38) dá a forma da matriz C , em função de Λ e Θ , conforme teorema 1, em RAO (1971b), que satisfaz as condições de invariância, não tendenciosidade e mínima variância do estimador.

Os componentes $\underline{\lambda}$ e $\underline{\theta}$ que determinam Λ e Θ , respectivamente, são obtidos a partir do sistema de equações dado em (37).

Uma vez especificado C , especifica-se a forma quadrática $\underline{Y}'GCG'\underline{Y}$, que é MIVQUE de $\sum_{i=1}^{c+1} p_i \sigma_i^2$, $i=1,2,\dots,c+1$.

O algoritmo usado para estimação dos componentes de variância foi o baseado na técnica sugerida por HARTLEY *et alii* (1978).

3.2.4 - Comparação entre os métodos de estimação

O critério de comparação usado foi a magnitude do erro quadrático médio (EQM), estudado por KLOTZ *et alii* (1969), e expresso conforme MOOD *et alii* (1974, p. 291-293) como:

$$\begin{aligned} \text{EQM}_t(\theta) &= E[T - \tau(\theta)]^2 \\ &= E\{[T - E(T)] - [\tau(\theta) - E(T)]\}^2 \\ &= E[T - E(T)]^2 - 2[\tau(\theta) - E(T)] E[T - E(T)] + [\tau(\theta) - E(T)]^2 \\ \therefore \text{EQM}_t(\theta) &= \text{var}(T) + [\tau(\theta) - E(T)]^2, \end{aligned}$$

onde T é um estimador de $\tau(\theta)$ e o termo $\tau(\theta) - E(T)$ é a tendência do estimador T . Este critério é um indicativo da eficiência do estimador, sendo que esta eficiência é maior quanto menor for o EQM.

Os 120 experimentos simulados em cada combinação modelo, relação de variâncias e condição de balanceamento ou não balanceamento, foram subdivididos em três grupos, de 40 experimentos cada, para o cálculo dos erros quadráticos médios. Como em cada combinação foram estimados três componentes de variância, de acordo com o modelo para cada experimento, o erro quadrático médio da k -ésima estimativa foi calculado a partir da expressão:

$$EQM(\hat{\sigma}_{kij}^2) = (\hat{\sigma}_{kij}^2 - \sigma_k^2)^2,$$

onde $k=1,2,3$, representa o componente de variância, conforme o modelo;

$i=1,2,3$, representa o grupo dentro de cada combinação;

$j=1,2,\dots,40$, representa o experimento dentro de cada grupo.

A medida de eficiência de cada método de estimação, para cada experimento, foi calculada por:

$$\sum_{k=1}^3 EQM(\hat{\sigma}_{kij}^2) = \sum_{k=1}^3 (\hat{\sigma}_{kij}^2 - \sigma_k^2)^2.$$

Consequentemente, a eficiência média em cada grupo foi dada através de:

$$\frac{1}{40} \sum_{j=1}^{40} \sum_{k=1}^3 EQM(\hat{\sigma}_{kij}^2) = \frac{1}{40} \sum_{j=1}^{40} \sum_{k=1}^3 (\hat{\sigma}_{kij}^2 - \sigma_k^2)^2. \quad (39)$$

Assim, considerou-se a média dos três grupos, ou seja, a média dos 120 experimentos, calculada como:

$$\frac{1}{120} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^{40} \sum_{k=1}^3 EQM(\hat{\sigma}_{kij}^2) = \frac{1}{120} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^{40} \sum_{k=1}^3 (\hat{\sigma}_{kij}^2 - \sigma_k^2)^2. \quad (40)$$

Porém, quando o processo numérico para encontrar os estimadores de máxima verossimilhança não convergia para algum experimento, este era descartado e as expressões (39) e (40) eram alteradas, respectivamente, para:

$$\frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \sum_{k=1}^3 EQM(\hat{\sigma}_{kij}^2) = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \sum_{k=1}^3 (\hat{\sigma}_{kij}^2 - \sigma_k^2)^2 \quad (41)$$

e

$$\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \sum_{k=1}^3 EQM(\hat{\sigma}_{kij}^2) \right] = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \sum_{k=1}^3 (\hat{\sigma}_{kij}^2 - \sigma_k^2)^2 \right], \quad (42)$$

onde n_i representa o número de experimentos no grupo i .

Considerando-se cada grupo como um bloco, sobre os valores das eficiências médias calculadas através de (39) e ou (41) e sobre suas ordens dentro de cada bloco, foram feitas análises de variância e comparações de mē-

dias, pelo teste de Tukey a 5% de probabilidade, de acordo com um fatorial, para cada modelo em particular e em conjunto. De acordo com CONOVER (1980, p. 337), considerou-se válida a análise sobre as ordens ("rank") das eficiências médias, embora as tabelas apresentadas mostrem os dados de eficiência e não de ordens.

Além do erro quadrático médio, considerou-se também o tempo gasto de CPU (Unidade Central de Processamento) para cada método em cada grupo, analisando-os da mesma forma que as eficiências, considerando-se válida a análise sobre as ordens. Ainda foram consideradas as estimativas médias para cada componente de variância, com o valor mínimo e o máximo encontrado para cada método em cada combinação, as estimativas negativas e os experimentos cujo processo numérico não convergiu, para os métodos de ajuste de constantes e MIVQUE, e máxima verossimilhança, respectivamente.

Deve-se também salientar que o tempo de CPU é variável de acordo com o número de usuários, usando o computador ao mesmo tempo, embora a magnitude dessa variação não seja tão grande a ponto de mascarar os resultados obtidos.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O estudo comparativo entre os métodos de estimação, baseado principalmente na eficiência de cada método, a partir dos erros quadráticos médios, e outras características, é apresentado a seguir, para cada modelo estudado. Nas tabelas onde aparecem eficiências e tempo, as comparações baseiam-se na análise de variância das ordens.

4.1 - Modelo I (Classificação Hierárquica, Aleatório)

Os resultados constantes da Tabela 1 mostram que, em todas as situações estudadas, o método da máxima verossimilhança foi o que apresentou menor eficiência. Os métodos de ajuste de constantes e MIVQUE são estatisticamen-

te iguais, embora o primeiro tenha apresentado maior eficiência, dada a menor magnitude do seu valor. Nota-se ainda que, independente da relação de variâncias considerada, quando os dados são balanceados eles são exatamente iguais, o que indiretamente é confirmado em HARVILLE (1977).

Em cada relação de variância estudada a eficiência dos métodos diminuiu ao passar-se de balanceado para não balanceado, o mesmo ocorrendo quando mudou-se da menor para a maior relação de variâncias, o que pode também ser confirmado da Tabela 3.

O tempo gasto em CPU (Tabela 2) é estatisticamente diferente para os três métodos comparados. O método mais rápido foi o MIVQUE e o mais lento o da máxima verossimilhança, sendo aproximadamente 174 vezes mais demorado que o primeiro.

Enquanto o tempo aumenta da menor para a maior relação de variâncias, para os métodos de ajuste de constantes e MIVQUE, para o método da máxima verossimilhança ele se processa de modo inverso, isto devido à lentidão na convergência do procedimento iterativo para a pequena relação de variâncias (HOCKING e KUTNER, 1975), onde também ocorreu maior número de experimentos cujas estimativas dos componentes de variância não convergiram (Tabela 4).

Através das Tabelas 3 e 4 verifica-se que, em bora não ocorrendo nenhuma estimativa negativa nos métodos ajuste de constantes e MIVQUE, obteve-se estimativas bem próximas de zero quando a relação de variâncias é pequena.

Na Tabela 3, contendo as estimativas de cada componente de variância, observa-se que as estimativas dos componentes $\sigma^2_{f/m}$ e σ^2 , obtidas pelo método da máxima verossimilhança, diferem positiva ou negativamente quando comparadas com os outros dois métodos, para dados balanceados, quando deveriam ser iguais, uma vez que para esses dois componentes esses métodos são equivalentes, dando estimativas que são não tendenciosas. Este fato talvez ocorra devido à não convergência de algumas estimativas no processo iterativo, que não são levadas em consideração.

Para o componente σ^2_m as estimativas obtidas pelo método da máxima verossimilhança, as quais são tendenciosas, em todas as situações estudadas são abaixo das estimativas dadas pelos outros dois métodos, fato também mencionado em HARVILLE (1977).

Tabela 1 - Medida de eficiência de diferentes métodos de estimação, baseada nas expressões (40) e (42), para o modelo I.

MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO	RELAÇÃO DE VARIÂNCIAS.VALORES DE $\sigma_m^2 = \sigma_f^2/m$ ($\sigma^2 = 1$)				MÉDIA
	1/4		4		
	Balanceado	Não Balanceado*	Balanceado	Não Balanceado*	
Ajuste de Constantes	0,0281 b	0,0328 b	0,6035 b	0,7472 b	0,3529 b
Máxima Verossimilhança	0,0303 a	0,0349 a	1,3031 a	1,3255 a	0,6735 a
MIVQUE	0,0281 b	0,0331 b	0,6035 b	0,7522 b	0,3542 b

Os valores seguidos da mesma letra não são significativamente diferentes ao nível de 5% de probabilidade, pelo teste de Tukey-

* 5% de parcelas vazias.

Tabela 2 - Tempo médio, em segundos por 40 experimentos, gasto de CPU para estimação de componentes de variância em diferentes métodos de estimação, no modelo I.

MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO	RELAÇÃO DE VARIÂNCIAS. VALORES DE $\sigma_m^2 = \sigma_f^2/m$ ($\sigma^2 = 1$)				MÉDIA
	1/4		4		
	Balanceado	Não Balanceado*	Balanceado	Não Balanceado*	
Ajuste de Constantes	5,85 b	4,63 b	6,10 b	4,86 b	5,36 b
Máxima Verossimilhança	723,98 a	631,90 a	472,71 a	586,68 a	603,82 a
MIVQUE	4,15 c	2,67 c	4,29 c	2,76 c	3,47 c

Os valores seguidos da mesma letra não são significativamente diferentes ao nível de 5% de probabilidade, pelo teste de Tukey.

* 5% de parcelas vazias.

Tabela 3 - Estimativas, mínima, média e máxima para cada componente de variância, sobre 120 experimentos, a partir de diferentes métodos de estimação, no modelo I.

RELAÇÃO DE VARIÂNCIAS. VALORES DE $\sigma_m^2 = \sigma_f^2 / m$ ($\sigma^2 = 1$)	CONDIÇÃO DE BALANÇO DE CEMENTO	MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO	F A T O R					
			σ_m^2			σ_f^2 / m		
			Mínima	Média	Máxima	Mínima	Média	Máxima
1/4	Balanc.	Aj.de Const.	0,0368	0,2054	0,4637	0,0341	0,2481	0,5797
		Máx.Veros.	0,0240	0,1762	0,4076	0,0341	0,2470	0,5797
		MIVQUE	0,0368	0,2054	0,4637	0,0341	0,2481	0,5797
	Não Bal.*	Aj.de Const.	0,0233	0,1997	0,5091	0,0434	0,2580	0,6123
		Máx.Veros.	0,0155	0,1727	0,4496	0,0449	0,2579	0,6051
		MIVQUE	0,0238	0,2010	0,5156	0,0532	0,2566	0,6163
4	Balanc.	Aj.de Const.	2,5397	3,3623	4,2621	3,1781	3,9317	4,8628
		Máx.Veros.	2,1993	2,9408	3,7527	3,1781	3,9319	4,8627
		MIVQUE	2,5393	3,3623	4,2621	3,1781	3,9317	4,8628
	Não Bal.*	Aj.de Const.	2,4396	3,2686	4,3292	3,2211	4,0310	4,9745
		Máx.Veros.	2,0824	2,9380	3,9106	3,1567	3,9521	4,8573
		MIVQUE	2,3872	3,2881	4,3935	2,9650	4,0142	5,0960

Para o método da máxima verossimilhança não estão incluídos os experimentos cujas estimativas não convergiram.

* 5% de parcelas vazias.

Tabela 4 - Número total, de estimativas negativas nos métodos ajuste de constantes e MIVQUE, e de experimentos cujas estimativas dos componentes de variância não convergiram no método da máxima verossimilhança, em 120 experimentos, no modelo I.

MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO	RELAÇÃO DE VARIÂNCIAS.VALORES DE $\sigma_m^2 = \sigma_f^2/m$ ($\sigma^2 = 1$)				TOTAL
	1/4		4		
	Balanceado	Não Balanceado*	Balanceado	Não Balanceado*	
	Balanceado	Não Balanceado*	Balanceado	Não Balanceado*	
Ajuste de Constantes	0	0	0	0	0
Máxima Verossimilhança	2	2	1	0	5
MIVQUE	0	0	0	0	0

* 5% de parcelas vazias.

4.2 - Modelo II (Fatorial Misto, Com Interação)

Em termos globais, os métodos de ajuste de constantes e MIVQUE foram estatisticamente iguais, e o método da máxima verossimilhança o mais eficiente (Tabela 5), embora aparentemente, em termos médios, tenha maior erro quadrático médio, provavelmente influenciado apenas por uma situação discrepante estudada. Esta influência não foi detectada na análise das ordens, onde apresentou menor ordem, justificando, assim, sua maior eficiência. Este fato observado, maior eficiência, também o foi em CORBEIL e SEARLE (1976b) e HOCKING e KUTNER (1975).

Nas situações estudadas, com exceção do caso não balanceado na maior relação de variâncias, onde os métodos estudados são estatisticamente iguais, o método da máxima verossimilhança mostrou ter sempre maior eficiência (menor erro quadrático médio), o que é comprovado pela expressão (11e) para (11f) dada em CORBEIL e SEARLE (1976b). Ainda por essa mesma expressão, quando se tem $a=2$ (níveis do efeito fixo), o caso presente, variando-se b (efeito aleatório) e n (número de repetições) sempre ter-se-ão os estimadores de máxima verossimilhança mais eficientes, para dados balanceados, em relação aos outros dois métodos.

Aqui, como no modelo I, a eficiência dos métodos diminui ao passar-se de balanceado para não balanceado em cada relação de variâncias, e também da menor para a maior relação.

Os resultados de tempo, mostrados na Tabela 6, evidenciam a rapidez do método MIVQUE em detrimento à lentidão do método da máxima verossimilhança, aproximadamente 425 vezes mais vagaroso.

Ao passar-se da menor para a maior relação de variâncias, o tempo gasto em CPU reduziu-se em todos os métodos. Esta foi mais evidente no método da máxima verossimilhança, com o menor tempo registrado em dados não balanceados, onde o procedimento iterativo convergiu muito rapidamente, como comprovado por HOCKING e KUTNER (1975), mas levando a superestimativas, como se vê na Tabela 5, pela magnitude da medida de eficiência (9,3167), e na Tabela 7.

A Tabela 7 mostra que, também neste modelo, o método da máxima verossimilhança dá sub-estimativas em relação aos outros métodos para as estimativas dos componentes que são tendenciosos, σ_m^2 e $\sigma_{\ell m}^2$. Exceção deve ser feita ao caso não balanceado na maior relação de variâncias, onde ocorreram superestimativas, talvez por influência de um grupo de experimentos onde a convergência se deu mui

to rapidamente, resultando em estimativas muito discrepantes, podendo-se dizer que aqui a posição das parcelas vazias tiveram bastante peso no resultado final das estimativas, posições estas também referenciadas em BUSH e ANDERSON (1963).

As estimativas negativas e os experimentos cujas estimativas não convergiram estão apresentadas na Tabela 8. Observa-se que as estimativas negativas ocorreram na menor relação de variâncias, o que também aconteceu em HOCKING e KUTNER (1975) e em CORBEIL e SEARLE (1976b).

Os experimentos cujas estimativas não convergiram são mais frequentes, também, na menor relação de variâncias, diminuindo nesta ao passar-se do balanceado para o não balanceado, e aumentando na maior relação de variâncias ao mudar-se do balanceado para o não balanceado. Este fato confirma o que foi dito anteriormente, em termos de relação de variâncias que, onde o processo de convergência é mais lento, gasta-se mais tempo e, consequentemente, obtêm-se maior número de experimentos cujas estimativas não convergem.

Tabela 5 - Medida de eficiência de diferentes métodos de estimação, baseada nas expressões (40) e (42), para o modelo II.

MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO	RELAÇÃO DE VARIÂNCIAS.VALORES DE $\sigma_m^2 = \sigma_{\ell m}^2$ ($\sigma^2 = 1$)				MÉDIA
	1/4		4		
	Balanceado	Não Balanceado*	Balanceado	Não Balanceado*	
Ajuste de Constantes	0,0509 a	0,0553 a	1,2146 a	1,5333 a	0,7135 a
Máxima Verossimilhança	0,0459 b	0,0468 b	0,8880 b	9,3167 a	2,5744 b
MIVQUE	0,0509 a	0,0589 a	1,2146 a	1,9387 a	0,8158 a

Os valores seguidos da mesma letra não são significativamente diferentes ao nível de 5% de probabilidade, pelo teste de Tukey.

* 5% de parcelas vazias.

Tabela 6 - Tempo médio, em segundos por 40 experimentos, gastos de CPU para estimação de componentes de variância, em diferentes métodos de estimação, no modelo II.

MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO	RELAÇÃO DE VARIÂNCIAS.VALORES DE $\sigma_m^2 = \sigma_{\theta m}^2$ ($\sigma^2 = 1$)				MÉDIA
	1/4		4		
	Balanceado	Não Balanceado*	Balanceado	Não Balanceado*	
Ajuste de Constantes	6,63 b	5,60 b	6,74 b	5,49 b	6,12 b
Máxima Verossimilhança	1905,43 a	1774,91 a	1454,51 a	1062,02 a	1549,22 a
MIVQUE	4,47 c	2,86 c	4,42 c	2,81 c	3,64 c

Os valores seguidos de mesma letra não são significativamente diferentes ao nível de 5% de probabilidade, pelo teste de Tukey.

* 5% de parcelas vazias.

Tabela 7 - Estimativas, mínima, média e máxima para cada componente de variância, sobre 120 experimentos, a partir de diferentes métodos de estimação, no modelo II.

RELAÇÃO DE VARIÂNCIAS. VALORES DE $\sigma_m^2 = \sigma_f^2 / m$ ($\sigma^2 = 1$)	CONDIÇÃO DE BALAN CEAMENTO	MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO	F A T O R					
			σ_m^2			$\sigma_{q,m}^2$		
			Mínima	Média	Máxima	Mínima	Média	Máxima
1/4	Balanc.	Aj.de Const.	-0,1319	0,2498	0,6406	0,0307	0,3111	0,9120
		Max.Veros.	0,0000	0,2421	0,6150	0,0195	0,2912	0,7401
		MIVQUE	-0,1319	0,2498	0,6406	0,0307	0,3111	0,9120
	Não Bal.*	Aj.de Const.	-0,1774	0,2519	0,6633	0,0252	0,3147	0,9455
		Max.Veros.	0,0000	0,2475	0,6189	0,0022	0,2850	0,7251
		MIVQUE	-0,1953	0,2596	0,6946	0,0153	0,3173	0,9707
4	Balanc.	Aj.de Const.	2,8133	3,9455	5,2485	3,8658	4,9057	6,4312
		Max.Veros.	2,7008	3,7875	5,0386	3,7012	4,6939	6,1652
		MIVQUE	2,8133	3,9455	5,2485	3,8658	4,9057	6,4312
	Não Bal.*	Aj.de Const.	2,4216	3,9811	5,5094	3,8642	5,0100	6,6443
		Max.Veros.	2,7196	4,8591	9,3500	3,6805	5,8461	10,2751
		MIVQUE	2,2300	4,0919	5,8084	3,9016	5,0634	6,6366

Para o método da máxima verossimilhança não estão incluídos os experimentos cujas estimativas não convergiram.

* 5% de parcelas vazias.

Tabela 8 - Número total, de estimativas negativas nos métodos de ajuste de constantes e MIV-QUE, e de experimentos cujas estimativas dos componentes de variância não convergiram no método da máxima verossimilhança, em 120 experimentos, no modelo II.

MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO	RELAÇÃO DE VARIÂNCIAS.VALORES DE $\sigma_m^2 = \sigma_{lm}^2$ ($\sigma^2 = 1$)				TOTAL
	1/4		4		
	Balanceado	Não Balanceado*	Balanceado	Não Balanceado*	
Ajuste de Constantes	1	1	0	0	2
Máxima Verossimilhança	11	7	2	9	29
MIVQUE	1	1	0	0	2

* 5% de parcelas vazias.

4.3 - Considerações Conjuntas sobre os Modelos I e II

Nenhum dos métodos, ajuste de constantes ou MIVQUE, é uniformemente melhor do que o outro para os modelos estudados, o que nada impede de preferir-se o primeiro, como BUSH e ANDERSON (1963), HARVILLE (1969) e BASSON (1970) o preferiram entre os métodos por eles considerados. Já o método da máxima verossimilhança, baseado somente nos dados de eficiência, é mais eficiente que os dois, apenas no modelo II, revelando ser problemático quanto ao fator tempo e convergência das estimativas, enquanto as estimativas negativas não se constituíram em problema propriamente dito para os outros métodos, dada sua baixa frequência.

Baseado na identidade entre os métodos de ajuste de constantes e MIVQUE, por nós observada, nos dados balanceados, talvez pudesse ser dito que estes também são idênticos aos métodos de ANOVA, máxima verossimilhança restrita e MINQUE, na mesma condição, para dados balanceados, usando como suporte as discussões de: SEARLE (1968), que afirma ser o método ajuste de constantes idêntico ao de ANOVA; CORBEIL e SEARLE (1976a), onde dizem que o método da máxima verossimilhança restrita é idêntico ao de ANOVA; HARVILLE (1977), que mostra ser o método da máxima veros-

semelhança restrita idêntico ao MIVQUE e também ao de ajuste de constantes; e RAO (1971b), onde o autor mostra que o método MINQUE é o mesmo MIVQUE sob condição de normalidade.

5. CONCLUSÕES

Dos resultados obtidos e discutidos, pode-se concluir que:

- 1) Os métodos de ajuste de constantes e MIVQUE levam a resultados idênticos para dados balanceados.
- 2) Se os recursos computacionais forem de fácil acesso deve-se preferir o método MIVQUE, dada a sua rapidez e eficiência como estimador de componentes de variância, para os modelos estudados.
- 3) Caso esses recursos não estejam prontamente disponíveis, deve-se preferir o método de ajuste de constantes, tão eficiente quanto o MIVQUE e de cálculo relativamente fácil para os modelos estudados.

- 4) O método da máxima verossimilhança também pode ser usado, para o modelo II (fatorial misto, com interação), desde que não se considere de fundamental importância a tendenciosidade e os problemas de convergência e tempo.
- 5) Os métodos estudados, de modo geral, revelaram-se mais eficientes quando a relação de variâncias é menor e também quando os dados são balanceados.

6. LITERATURA CITADA

- BASSON, R.P., 1970. A comparison of variances of some estimators in the balanced incomplete block (BIB) variance components model. Biometrics. Richmond, 26:657-669.
- BEZERRA, R.C.F., 1976. Componentes de variância - O problema de estimativas negativas. São Paulo, IME/USP, 68 p. [Dissertação de Mestrado].
- BOX, G.E.P. e M.E. MULLER, 1958. A note on the generation of random normal deviates. Annals Mathematical Statistics. Ann Arbor, 29: 610-611.
- BUSH, N. e R.L. ANDERSON, 1963. A comparison of three different procedures for estimating variance components. Technometrics. Richmond, 5:421-440.

- CIOL, M.A., 1982. Métodos de estimação de componentes de variância em modelos mistos. Campinas, UNICAMP, 126 p. [Dissertação de Mestrado].
- COMSTOCK, R.E. e H.F. ROBINSON, 1948. The components of genetic variance in populations of biparental progenies and their use in estimating the average degree of dominance. Biometrics. Richmond, 4:254-266.
- COMSTOCK, R.E. e H.F. ROBINSON, 1952. Estimation of average dominance of genes. In: J.W. GOWEN, ed., Heterosis. Iowa State Univ. Press, Ames, p. 494-516.
- CONOVER, W.J., 1980. Practical Nonparametric Statistics. 2nd ed. New York, John Wiley & Sons. 493 p.
- CORBEIL, R.R. e S.R. SEARLE, 1976a. Restricted maximum likelihood (REML) estimation of variance components in the mixed model. Technometrics. Richmond, 18:31-38.
- CORBEIL, R.R. e S.R. SEARLE, 1976b. A comparison of variance component estimators. Biometrics. Richmond, 32: 779-791.
- FALCONER, D.S., 1964. Introduction to Quantitative Genetics. New York, The Ronald Press Co. 365 p.
- GAYLOR, D.W.; H.L. LUCAS e R.L. ANDERSON, 1970. Calculation of expected mean squares by the abbreviated doo-little and square root methods. Biometrics. Richmond, 26:641-655.
- GRAYBILL, F.A., 1969. Introduction to Matrices With Applications in Statistics. California, Wadsworth Publishing Co. 372 p.
- HALLAUER, A.R. e J.B. MIRANDA FILHO, 1981. Quantitative Genetics in Maize Breeding. Iowa, Iowa State University Press. 468 p.

- HARTLEY, H.O.; J.N.K. RAO e L.R. LAMOTTE, 1978. A simple "synthesis" - based method of variance component estimation. Biometrics. Richmond, 34:233-242.
- HARVILLE, D.A., 1969. Variances of variance-component estimators for the unbalanced 2-way cross classification with application to balanced incomplet block designs. Annals of Mathematical Statistics. Ann Arbor, 40:408-416.
- HARVILLE, D.A., 1977. Maximum likelihood approaches to variance component estimation and to related problems. Journal of the American Statistical Association. Boston, 72:320-340.
- HEMMERLE, W.J. e H.O. HARTLEY, 1973. Computing maximum likelihood estimates for the mixed A.O.V. model using the w-transformation. Technometrics. Richmond, 15:819-831.
- HENDERSON, C.R., 1953. Estimation of variance and covariance components. Biometrics. Richmond, 9:226-252.
- HERBACH, L.H., 1959. Properties of model II - type analysis of variance tests, a: optimum nature of the F-test for model II in the balanced case. Annals of Mathematical Statistics. Ann Arbor, 30:939-959.
- HOCKING, R.R. e M.H. KUTNER, 1975. Some analytical and numerical comparisons of estimations for the mixed A.O.V. model. Biometrics. Richmond, 31:19-27.

- KAPADIA, C.H. e D.L. WEEKS, 1963. Variance components in two-way classification models with interaction. Biometrika. Cambridge, 50:327-334.
- KLOTZ, J.H.; R.C. MILTON e S. ZACKS, 1969. Mean square efficiency of estimators of variance components. Journal of the American Statistical Association. Boston, 64:1383-1402.
- LOW, L.Y., 1969. Estimators of variance components in the balanced incomplete block design. Journal of the American Statistical Association. Boston, 64:1014-1030.
- MILLER, J.J., 1973. Asymptotic properties and computation of maximum likelihood estimates in the mixed model of the analysis of variance. Technical Report. Stanford University, 12.
- MOOD, A.M.; F.A. GRAYBILL e D.C. BOES, 1974. Introduction to the Theory of Statistics. 3rd ed. Tokyo, McGraw-Hill Kogakusha. 564 p.
- PATTERSON, H.D. e R. THOMPSON, 1971. Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. Biometrika. Cambridge, 58:545-554.
- PRESS, S.J., 1982. Applied Multivariate Analysis: Using Bayesian and Frequentist Methods of Inference. 2nd ed. Florida, Robert E. Krieger Publishing Co. 600 p.

- RAO, C.R., 1970. Estimation of heteroscedastic variances in linear models. Journal of the American Statistical Association. Boston, 65:161-172.
- RAO, C.R., 1971a. Estimation of variance and covariance components - MINQUE theory. Journal of Multivariate Analysis. New York, 1:257-275.
- RAO, C.R., 1971b. Minimum variance quadratic unbiased estimation of variance components. Journal of Multivariate Analysis. New York, 1:445-456.
- RAO, C.R., 1972. Estimation of variance and covariance components in linear models. Journal of the American Statistical Association. Boston, 67:112-115.
- RAO, C.R., 1973. Linear Statistical Inference and Its Applications. 2nd ed. New York, John Wiley e Sons. 625 p.
- RUSSELL, T.S. e R.A. BRADLEY, 1958. One-way variances in a two-way classification. Biometrika. Cambridge, 45: 111-129.
- SEARLE, S.R., 1968. Another look at Henderson's methods of estimating variance components. Biometrics. Richmond, 24:749-787.
- SEARLE, S.R., 1971a. Linear Models. New York, John Wiley e Sons. 532 p.

SEARLE, S.R., 1971b. Topics in variance component estimation (invited paper). Biometrics. Richmond, 27:1-76.

SILVA, J.C. e A.R. HALLAUER, 1975. Estimation of epistatic variance in Iowa Stiff Stalk Synthetic Maize. Journal of Heredity. Washington, 66:290-296.

VALÉRIO FILHO, W.V., 1983. Métodos de Henderson para componentes da variância de dados não balanceados. Piracicaba, ESALQ/USP, 137 p. [Dissertação de Mestrado].

7. A P Ê N D I C E

7.1 - L E M A 1 (RAO, 1971b)

Dado que X é uma matriz de dimensões $n \times p$, de "rank" ou posto coluna completo p , e V matriz de variância e covariância de $\underline{Y}$, de ordem n , pode-se, então, encontrar uma matriz G de dimensões $n \times (n-p)$, de "rank" $(n-p)$, tal que,

$$GG' = V^{-1} (I - P_V) ,$$

para qualquer matriz G satisfazendo

$$G'X = \phi \quad \text{e} \quad G'VG = I ,$$

onde $P_V = X(X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}$ é a projeção no espaço gerado pelas colunas de X , segundo a norma $X'V^{-1}Y$.

7.2 - L E M A 2 (CIOL, 1982)

Seja o espaço gerado pelas colunas de A representado por $C(A)$. Se $AX = \phi$, então $C(A)$ está no ortocomplemento de $C(X)$ e, uma vez que G tem "rank" completo, $C(A) \subset C(G)$. Logo, existe uma matriz T , tal que,

$$A = GT ,$$

e,

$$A' = GT \quad \text{ou} \quad A = T'G' ,$$

devido à simetria de A .

Assim, tem-se a igualdade:

$$T'G' = GT .$$

Escrevendo $T = CG'$ para alguma matriz C , simétrica, a partir da igualdade anterior tem-se que:

$$A = GCG' .$$

Analogamente, sob a condição $NX = \phi$, pode-se escrever que:

$$N = GDG' ,$$

para alguma matriz D , simétrica.