**Superdispersão em dados
binomiais hierárquicos**

Lílian Nati

TESE APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
DOUTOR EM CIÊNCIAS

Área de Concentração: Estatística

Orientador: Prof. Dr. Dalton Francisco de Andrade

São Paulo, março de 2008

Superdispersão em dados binomiais hierárquicos

Este exemplar corresponde à redação
final da tese devidamente corrigida
e defendida por Lillian Nati
e aprovada pela Comissão Julgadora.

Banca Examinadora:

- Prof. Dalton Francisco de Andrade (orientador) - UFSC
- Prof. Dr. Dr. Julio da Motta Singer - IME-USP
- Profa. Dra. Clarice Garcia Borges Demétrio - ESALQ-USP
- Prof. Dr. Helio dos Santos Migon - UFRJ
- Prof. Dr. Gauss Moutinho Cordeiro - UFRPE

A Pedra

“ O distraído nela tropeçou.

O bruto a usou como projétil.

O empreendedor, usando-a, construiu.

O camponês, cansado da lida, dela fez assento.

Para meninos, foi brinquedo.

Drummond a poetizou.

Já David matou Golias e Michelangelo extraiu-lhe a mais bela escultura.

E em todos esses casos, a diferença não esteve na pedra, mas no homem! ”

(autor desconhecido)

*Aos meus pais Sérgio e Alcione,
a minha irmã Élen,
e ao meu marido Frederico.*

Agradecimentos

É com imensa satisfação que declaro a todos que me acompanharam nesta longa trajetória: MISSÃO CUMPRIDA!

Agradeço primeiramente a Deus, por sempre ter iluminado meu caminho com saúde, vivacidade e pessoas de grande valor, que me ofereceram seu apoio com entusiasmo, inspiração, generosidade e competência.

Aos meus pais Sérgio e Alcione, sempre muito conscientes da importância dos estudos, meu eterno muito obrigada pela família estruturada que me proporcionaram, cheia de amor, carinho e dedicação. Vocês são 100% responsáveis por eu ter chegado tão longe!

Agradeço a minha irmã Élen, que com seu espírito de luta e capacidade de enfrentar desafios, estimulou-me a vencer minhas apreensões.

Ao meu orientador Prof. Dalton Andrade, que com paciência esperou pela conclusão deste trabalho, sou grata pelo apoio, confiança e compreensão, em especial nos momentos difíceis.

Ao Prof. Julio Singer, que com imensa boa vontade esteve sempre pronto a me receber, contribuindo com orientações, sugestões, correções e, também, com sua amizade. Seu incentivo foi fundamental para a evolução desta tese.

Obrigada ao Prof. Gauss Cordeiro, à Profa. Clarice Demétrio e ao Prof. Helio Migon que, juntamente com o Prof. Julio Singer e o Prof. Dalton Andrade, concederam-me a honra de ter em minha banca examinadora profissionais tão competentes e respeitáveis, que muito acrescentaram

com suas idéias e sugestões.

Não posso deixar de agradecer aos funcionários do Serviço de Alunos de Pós-Graduação do IME, em especial a Sebastião Pinho, Rose Lima e Alessandra Bernardo, que sempre me atenderam prontamente, com muita paciência e simpatia.

Agradeço ao meu querido amigo David Pires pelo inestimável auxílio, espontâneo e voluntário. É admirável a sua capacidade de fazer o bem, de estender a sua mão até mesmo a um desconhecido (para quem não sabe, nosso primeiro contato ocorreu por e-mail). Foi preciosa a sua colaboração com o meu gigante trabalho computacional, concluído em tempo recorde.

Ao Sr. Francisco Ribacionka, da equipe do Laboratório de Computação Científica Avançada (LCCA), agradeço imensamente pela atenção e ajuda com o uso do Cluster Linux Alcatéia. Além de excelente profissional, foi de extrema gentileza e fez tudo que esteve ao seu alcance para que eu concluísse a parte computacional de minha tese.

Agradeço ao Prof. Siang Wun Song, que muito gentilmente permitiu o meu acesso ao Cluster IBM, concedido pela FAPESP (Proc. No. 04/08928-3) ao seu grupo de estudo no Departamento de Ciência da Computação do IME. Sem essa poderosa máquina teria sido impossível terminar esse trabalho.

É com muito prazer que compartilho essa vitória com estas mulheres competentes que tanto me incentivaram: Luciana Jensen, Evelyn Cremonese e Helena Toscano. Sem vocês eu não estaria aqui escrevendo esta página!

Dedico esta conquista em especial ao meu admirável marido, Frederico Poletto, que acompanhou ativamente o desenvolvimento deste trabalho, ajudando-me incansavelmente, principalmente no gerenciamento das minhas intermináveis simulações! Obrigada por todo o suporte afetivo e profissional, que me encorajou, impulsionou-me e não me deixou desistir de realizar esse sonho. Você é uma inspiração, um exemplo de determinação e competência e um ser humano ímpar!

Aos meus sogros, Sérgio e Dagmar, sou muito grata pela forma carinhosa como me acolheram, sempre me encorajando e torcendo por mim.

A D. Aurora, minha avó Nilcéa e D. Zezinha, manifesto o meu apreço por todas as vibrações

positivas e preces. Obrigada a minha madrinha e avó Maria, que com certeza deve olhar por mim de onde ela está.

Agradeço aos meus amigos de longa data, que sabem bem ou sentiram na pele o que é fazer um doutorado no IME: Carine Savalli, Fernando Redígolo, André Samartini, Liliam Lima, Mariana Cúri, Ângela Paes, Maria Paula Chicarino, Raquel Valle e Luís Gustavo Esteves. É extraordinário o quanto servimos de apoio uns aos outros durante essa jornada insana e, também, o quanto esta fortaleceu nossos laços de amizade e companheirismo!

Obrigada aos meus demais amigos, Alexandra Calabrez, Ricardo Raitz, Soraia Teijeiro, Kátia Fontana, Helio Arizono, Paulo de Tarso Rosa, Cesar Franco, Rodrigo Tavares, Ricardo Fernandes, Rovane Machado, Cintia Burket e Rejane Figueiredo (perdão se deixei de citar alguém no calor deste momento), que juntamente com os amigos anteriormente mencionados, sempre tornaram minha vida mais agradável e divertida. Temos tantas histórias boas e engraçadas pra contar! E o melhor é que continuamos a fazer histórias, com cada vez mais participantes (filhinhos)...

Obrigada ao meu amigo Prof. José Oscar Bustillos, pelos conselhos e sábias palavras de incentivo, pela convivência tão agradável e pela alegria que transmite a todos ao seu redor.

E pra quem conseguiu ler até aqui e já deve estar dizendo: “ela só faltou agradecer aos seus cachorrinhos”, é verdade! Obrigada ao meu cãozinho querido Pitty e minhas cachorrinhas Meg e a Uly, por todos os afagos, amor e diversão! Faltou mencionar o gatinho que mais parece um cachorro: valeu Milk!

Agora sim, posso comemorar meu título de doutora tão suado! Fiquem com Deus.

Resumo

Para analisar dados binários oriundos de uma estrutura hierárquica com dois níveis (por exemplo, aluno e escola), uma alternativa bastante utilizada é a suposição da distribuição binomial para as unidades experimentais do primeiro nível (aluno) condicionalmente a um efeito aleatório proveniente de uma distribuição normal para as unidades do segundo nível (escola). Neste trabalho, propõe-se a adição de um efeito aleatório normal no primeiro nível de um modelo linear generalizado hierárquico binomial para contemplar uma possível variabilidade extra-binomial decorrente da dependência entre os ensaios de Bernoulli de um mesmo indivíduo. Obtém-se o processo de estimação por máxima verossimilhança para este modelo a partir da verossimilhança marginal dos dados, após uma dupla aplicação do método de quadratura de Gauss-Hermite adaptativa como aproximação para as integrais dos efeitos aleatórios. Realiza-se um estudo de simulação para contrastar propriedades inferenciais do modelo aspirante com o modelo linear generalizado binomial, um modelo de quase-verossimilhança e o tradicional modelo linear generalizado hierárquico em dois níveis.

Palavras-chave: modelos hierárquicos, modelos multiníveis, modelos lineares generalizados mistos, dados binomiais, superdispersão.

Abstract

A common alternative when analyzing binary data originated from a two-level hierarchical structure (for instance, student and school) is to assume a binomial distribution for the experimental units of the first level (student) conditionally to a normal random effect for the second level units (school). In this work, we propose the inclusion of a second normal random effect in the first level to contemplate a possible extra-binomial variability due to the dependence among the Bernoulli trials in the same individual. We obtain the maximum likelihood estimation process for this hierarchical model starting from the marginal likelihood of the data, after a double application of the adaptive Gauss-Hermite quadrature as an approximation of the integrals of the random effects. We conduct a simulation study to compare the inferential properties of the advocated model with the generalized linear (binomial) model, a quasi-likelihood model and the usual two-level hierarchical generalized linear model.

Keywords: hierarchical models, multilevel models, generalized linear mixed models, binomial data, overdispersion.

Sumário

Resumo	xi
Abstract	xiii
Lista de abreviaturas	xvii
1 Aspectos gerais e motivação	1
2 Descrição do estudo de simulação	13
2.1 Geração de dados	13
2.2 Delineamento do estudo de simulação	14
2.3 Método de quadratura de Gauss-Hermite adaptativa	17
2.4 Implementação no R	20
3 Resultados	23
3.1 Vieses dos estimadores dos componentes de variância (τ_0 e σ)	24

3.1.1	τ_0 e σ nulos	24
3.1.2	Somente τ_0 não nulo	24
3.1.3	Somente σ não nulo	25
3.1.4	τ_0 e σ não nulos	26
3.2	Resultados para γ_{00}	27
3.2.1	Avaliação do estimador $\hat{\gamma}_{00}$	27
3.2.2	Avaliação da taxa de rejeição para γ_{00}	31
4	Aplicação	35
5	Conclusões	41
A	Esperanças e covariâncias marginais	45
A.1	Cálculo de $E[p_{ij}]$, $\text{Var}[p_{ij}]$ e $\text{Cov}[p_{ij}, p_{i'j}]$	46
A.2	Cálculo de $E[Y_{ij}]$, $\text{Var}[Y_{ij}]$ e $\text{Cov}[Y_{ij}, Y_{i'j}]$	48
B	Tabelas	49
C	Gráficos referentes a τ_0 e σ	61
D	Gráficos referentes a γ_{00}	71
	Referências Bibliográficas	85

Lista de abreviaturas

a.a.	amostra aleatória
DE	diretoria de ensino
DP	desvio padrão
EP	erro padrão
f.d.p.	função densidade de probabilidade
GL	grau(s) de liberdade
IC	intervalo de confiança
i.i.d.	independentes e identicamente distribuídos
MV	máxima verossimilhança
MCMC	<i>Markov Chain Monte Carlo</i>
MLG	modelo linear generalizado
MLH	modelo linear hierárquico
MLGH	modelo linear generalizado hierárquico
MLGM	modelo linear generalizado misto
QV	quase-verossimilhança
QVP	quase-verossimilhança penalizada
QGHA	quadratura de Gauss-Hermite adaptativa
QGR	ajuste do modelo 2, usando a QGHA disponível no pacote <code>glmmML</code> do R
QG2	ajuste do modelo 2, usando a QGHA implementada no programa desenvolvido no R
QG3	ajuste do modelo 3, usando a QGHA implementada no programa desenvolvido no R

Capítulo 1

Aspectos gerais e motivação

Estruturas hierárquicas de dados, encontradas com frequência em diversos estudos, são caracterizadas pela presença de unidades de observação que constituem um agrupamento de outras unidades de diferente natureza. Estas últimas podem, também, compor agrupamentos de outras unidades de interesse, estabelecendo-se diferentes níveis de hierarquia de unidades amostrais. Os modelos que descrevem este tipo de estrutura são conhecidos como modelos hierárquicos ou modelos multiníveis.

Figura 1.1: Estrutura hierárquica em 3 níveis

Quando se assume que a variável resposta em um modelo multinível tem distribuição normal, pode-se utilizar a teoria dos *modelos lineares hierárquicos* (MLHs) ou *modelos lineares multiníveis* (veja Raudenbush e Bryk (2002), Natis (2000) ou Goldstein (2003), por exemplo). Incluindo-se variáveis explicativas naturalmente associadas a cada nível de hierarquia, busca-se explicar a variabilidade apresentada entre as unidades do nível em questão. Caso não seja possível explicá-la

totalmente, os MLHs permitem a incorporação de efeitos aleatórios, supostos normalmente distribuídos.

Na formulação geral do MLH em 2 níveis descrita em Raudenbush e Bryk (2002) tem-se:

$$\text{modelo de nível 1 : } Y_{ij} = \beta_{0j} + \beta_{1j}X_{1ij} + \beta_{2j}X_{2ij} + \cdots + \beta_{Qj}X_{Qij} + r_{ij} \quad (1.1)$$

e

$$\text{modelo de nível 2 : } \beta_{qj} = \gamma_{q0} + \sum_{s=1}^{S_q} \gamma_{qs}W_{qsj} + \varepsilon_{qj} , \quad (1.2)$$

em que $i = 1, 2, \dots, n_j$ e $j = 1, 2, \dots, J$ identificam as unidades dos níveis 1 e 2 respectivamente e X_{qij} são as variáveis explicativas do nível 1, com $q = 0, 1, 2, \dots, Q$ e $X_{0ij} = 1$. Os erros aleatórios r_{ij} (erros do nível 1) são independentes e normalmente distribuídos com média zero e variância ϕ . Caso as unidades do nível 2 não apresentem o mesmo coeficiente β_{qj} , busca-se explicar tais diferenças pela inclusão das variáveis W_{qsj} , $s = 1, 2, \dots, S_q$. Se ainda houver variabilidade remanescente, pode-se acomodá-la pela introdução dos efeitos aleatórios ε_{qj} , chamados de erros aleatórios do nível 2, sendo $\varepsilon_{qj} \sim N(0, \tau_q^2)$ independentes $\forall j \neq j'$ e $\text{Cov}[\varepsilon_{qj}, \varepsilon_{q'j}] = \tau_{qq'}$. Essa formulação em níveis de hierarquia, motivada pela própria natureza dos dados, proporciona maior facilidade na descrição, interpretação e análise das diferentes fontes de variação.

Pode-se subdividir os modelos de regressão em hierárquicos (multiníveis) e não hierárquicos e, adicionalmente, em gaussianos e não gaussianos. O termo *hierárquico* aparece na literatura em outros contextos, por isso é importante salientar que neste trabalho esta palavra designará apenas modelos multiníveis, entre os quais serão avaliados alguns modelos não gaussianos.

Quando a variável resposta assume alguma distribuição da família exponencial diferente da gaussiana, a variância depende do valor esperado. Neste caso, sem a homocedasticidade requerida pelos MLHs, recorre-se então aos chamados *modelos lineares generalizados hierárquicos* (MLGHs), que estabelecem uma relação funcional entre a média da variável resposta e um preditor linear e, assim como os MLHs, podem incluir variáveis explicativas e efeitos aleatórios de acordo com o nível de hierarquia a que eles correspondem.

Quando se supõe que os efeitos aleatórios associados aos níveis mais altos da hierarquia (maiores que 1) são normalmente distribuídos, os MLGHs se enquadram na classe dos *modelos lineares*

generalizados mistos (MLGMs) (veja Molenberghs e Verbeke (2005)). A literatura apresenta outras propostas em que os efeitos aleatórios podem assumir outras distribuições, como em Lee e Nelder (1996), que propõem distribuições beta e gama para dados binários e de contagem, respectivamente. Para facilitar a identificação do modelo abordado, a sigla MLGH por vezes é acrescida de uma palavra composta referente à distribuição condicional da resposta e à distribuição dos efeitos aleatórios. Por exemplo: a abreviação MLGH binomial-normal corresponde a um MLGH com resposta binomial e efeitos aleatórios normais.

Na formulação geral do MLGH em 2 níveis descrita em Raudenbush e Bryk (2002), os erros aleatórios r_{ij} não figuram na equação do nível 1, já que eles são avaliados por meio dos componentes da função de desviância.

Exemplo 1.1 Considere um estudo em que os dados foram obtidos em uma amostra aleatória (a.a.) de diretorias de ensino (DEs) do Estado de São Paulo, a que estão subordinadas escolas com a 8ª série do ensino fundamental. Dentre as diretorias amostradas, selecionou-se uma amostra dessas escolas e em cada uma delas foi selecionada uma amostra de alunos da 8ª série. Os alunos, as escolas e as DEs correspondem às unidades de observação dos níveis de hierarquia 1, 2 e 3, respectivamente. Os alunos realizaram uma prova de Língua Portuguesa composta de 20 itens de múltipla escolha, todos com conteúdos desconexos e 4 alternativas. As respostas a cada item da prova foram registradas com o objetivo de avaliar quais características de cada aluno, escola ou DE podem ter influenciado o desempenho, medido pelo número de respostas corretas. As características de cada aluno foram obtidas por meio de um questionário, a partir do qual foram geradas as variáveis independentes do nível 1, como sexo, aspiração principal, número de repetências, tipos de leitura que costuma fazer e auto-avaliação como leitor. Características das escolas também foram coletadas; entre elas destacam-se perfil da postura dos professores, classificação segundo as séries oferecidas, condição dos espaços pedagógicos e adequação do espaço físico. A maioria dessas características foi obtida a partir de um questionário aplicado à direção da escola, dando origem às variáveis independentes do nível 2. Com relação às DEs, a sua localização (capital ou interior) foi utilizada como variável independente do nível 3. ■

No Exemplo 1.1, a resposta de cada aluno em cada item da prova pode ser considerada como um ensaio de Bernoulli em que o acerto configura o evento de interesse. O número de acertos (escore) de cada aluno pode ser visto como uma medida de seu desempenho na prova. Suponha que

o escore do aluno (variável resposta) siga uma distribuição binomial com uma certa probabilidade de acerto. A variabilidade do escore talvez seja parcialmente explicada por algumas das variáveis independentes, mas ainda pode restar uma parcela não explicada, seja pela influência de fatores desconhecidos ou que não podem ser controlados ou simplesmente porque existe uma variabilidade de natureza aleatória entre alunos, entre escolas e entre DEs, o que sugere a incorporação de efeitos aleatórios de acordo com os níveis de hierarquia, contemplando a possível correlação entre alunos que estudam na mesma escola e entre escolas que pertencem à mesma DE. Num MLGH com resposta binomial todas estas particularidades podem ser levadas em conta. No entanto, a distribuição do escore, condicionalmente aos efeitos aleatórios e às variáveis explicativas, pode não apresentar a variabilidade natural de um modelo binomial, devido à possível dependência entre as respostas de um mesmo aluno e, também, a possíveis diferenças entre as probabilidades de acerto dos itens. Trata-se de um provável caso de superdispersão¹, que inspira propor uma forma adequada de explicá-la.

A seguir, serão ilustrados diferentes modelos, para ajustar a dados de uma estrutura hierárquica em apenas 2 níveis, aluno e escola, de modo a facilitar a explanação do que será desenvolvido neste trabalho.

Considere uma a.a. de J escolas em cada uma das quais n_j alunos foram selecionados. Seja Y_{ij} o escore que o i -ésimo aluno da j -ésima escola obteve em uma prova com K itens, em cada um dos quais a probabilidade de acerto é assumida como

$$p_{ij} = \text{Prob}[\text{acerto} \mid \text{aluno } i, \text{ escola } j] \quad \forall k ,$$

em que $i = 1, 2, \dots, n_j$, $j = 1, 2, \dots, J$ e $k = 1, 2, \dots, K$.

Seja $g(p_{ij})$ uma função de ligação, a ser modelada por um preditor linear η_{ij} . A ligação canônica para a distribuição binomial é

$$\eta_{ij} = \log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) . \quad (1.3)$$

¹Como a subdispersão é um fenômeno menos comum na prática segundo McCullagh e Nelder (1989) e a inclusão de efeitos aleatórios em modelos hierárquicos só admite o aumento da variabilidade, será usado apenas o termo superdispersão.

Será apresentada a seguir uma seqüência de modelos que, por simplicidade, não incluirão variáveis explicativas. Considere em todos os modelos que

$$Y_{ij}|p_{ij} \sim \text{binomial}(K, p_{ij}) , \text{ condicionalmente independentes } \forall i \text{ e } \forall j . \quad (1.4)$$

Proponha-se agora o seguinte modelo:

Modelo 1.

$$\text{Nível 1:} \quad \log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) = \beta_{0j} \quad (1.5)$$

e

$$\text{Nível 2:} \quad \beta_{0j} = \gamma_{00} , \gamma_{00} \text{ fixo} . \quad (1.6)$$

Este modelo poderia ser ajustado de acordo com a teoria usual para os MLGs (veja McCullagh e Nelder (1989)).

Como p_{ij} é constante, a esperança e a variância condicionais de Y_{ij} coincidem com as respectivas esperança e variância marginais:

$$E[Y_{ij}|p_{ij}] = Kp_{ij} = K (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-1} = E[Y_{ij}] \quad (1.7)$$

e

$$\text{Var}[Y_{ij}|p_{ij}] = Kp_{ij}(1 - p_{ij}) = Ke^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} = \text{Var}[Y_{ij}] . \quad (1.8)$$

Esse modelo pode não ser apropriado, pois

- 1a.** a probabilidade de acerto num determinado item pode não ser a mesma para todos os alunos;
- 1b.** pode haver dependência entre as respostas de alunos da mesma escola;
- 1c.** os ensaios de Bernoulli associados ao mesmo aluno podem não ser independentes;
- 1d.** os ensaios de Bernoulli associados ao mesmo aluno talvez não sejam identicamente distribuídos, já que os itens podem ter diferentes probabilidades de acerto.

A inclusão de covariáveis no primeiro nível do modelo poderia ajudar a explicar as diferenças entre as probabilidades de acerto para alunos da mesma escola. A inclusão de covariáveis no segundo nível do modelo poderia ajudar a explicar as diferenças entre alunos de diferentes escolas, ainda que estes apresentassem os mesmos valores nas covariáveis de nível 1. Mesmo assim poderia haver superdispersão, pois apenas o problema 1a estaria contemplado.

A superdispersão poderia ser detectada por testes de adequação do modelo ou técnicas de diagnóstico para MLGs (veja Paula (2004), por exemplo). Uma das práticas mais utilizadas para tentar acomodar a superdispersão seria supor que a variância continua a ter uma relação com a média como a existente no caso binomial, porém inflacionada por uma constante multiplicativa ϕ , de modo que as expressões (1.5) a (1.7) permanecem válidas, mas a variância condicional de Y_{ij} passa a ser:

$$\text{Var}[Y_{ij}|p_{ij}] = \phi K p_{ij}(1 - p_{ij}) = \phi K e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} = \text{Var}[Y_{ij}] . \quad (1.9)$$

Aqui $\phi > 0$ representa o parâmetro de superdispersão, para o qual existem vários estimadores propostos na literatura (veja Paula (2004), por exemplo). Nota-se que se $\phi = 1$, (1.8) e (1.9) são iguais.

Para tentar explicar a variação extra-binomial, considere o seguinte modelo:

Modelo 2.

$$\text{Nível 1 :} \quad \log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) = \beta_{0j} , \quad (1.10)$$

e

$$\text{Nível 2 :} \quad \beta_{0j} = \gamma_{00} + \varepsilon_{0j} , \quad (1.11)$$

$$\gamma_{00} \text{ fixo e } \varepsilon_{0j} \sim N(0, \tau_0^2) \text{ i.i.d.}$$

As expressões da esperança e variância condicionais de Y_{ij} são

$$E[Y_{ij}|p_{ij}] = K p_{ij}$$

e

$$\text{Var}[Y_{ij}|p_{ij}] = Kp_{ij}(1 - p_{ij}) .$$

A média e variância de p_{ij} são expressas, respectivamente, por

$$\text{E}[p_{ij}] \cong (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-1} \quad (1.12)$$

e

$$\text{Var}[p_{ij}] \cong \left[\tau_0 e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right]^2 . \quad (1.13)$$

Assim, a esperança e a variância marginais de Y_{ij} são

$$\text{E}[Y_{ij}] \cong K (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-1} \quad (1.14)$$

e

$$\text{Var}[Y_{ij}] \cong K e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \left[1 + \tau_0^2 (K - 1) e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right] . \quad (1.15)$$

Com a inclusão do efeito aleatório ε_{0j} no Modelo 2, leva-se em conta a possível dependência entre as respostas de alunos da mesma escola, explicando-se ao menos parte da suposta superdispersão presente no Modelo 1. A covariância e a correlação marginais para os escores de alunos de uma mesma escola são dadas, respectivamente, por

$$\text{Cov}[Y_{ij}, Y_{i'j}] \cong \left[K \tau_0 e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right]^2 \quad (1.16)$$

e

$$\text{Corr}[Y_{ij}, Y_{i'j}] \cong K \tau_0^2 \left\{ \left[e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right]^{-1} + \tau_0^2 (K - 1) \right\}^{-1} . \quad (1.17)$$

A correlação em (1.17), conhecida como correlação intra-classe, será sempre positiva. Esta pode ser interpretada como o grau de dependência ou de similaridade entre as respostas de alunos da mesma escola.

As expressões das esperanças, variâncias, covariâncias e correlações marginais de p_{ij} e de Y_{ij} , apresentadas de (1.12) a (1.17), podem ser obtidas a partir do Apêndice A. Neste apêndice, um vetor de funções $\mathbf{G}_j(\mathbf{b}_j)$ é aproximado, por meio de uma expansão de Taylor de primeira ordem

em torno da média de $\mathbf{b}_j$, que é o vetor de efeitos aleatórios da escola j e de seus n_j alunos. Vale ressaltar que as expressões do Apêndice A são mais amplas do que as apresentadas ao longo deste capítulo, pois admitem efeitos aleatórios não gaussianos, bem como a inclusão de covariáveis cujos efeitos sejam fixos.

Os parâmetros do Modelo 2 podem ser estimados por técnicas apropriadas para o ajuste de um MLGH binomial-normal (veja Raudenbush e Bryk (2002), por exemplo), ou equivalentemente por técnicas de um MLGM binomial (veja Molenberghs e Verbeke (2005), por exemplo). Note que o Modelo 1 é retomado se $\tau_0^2 = 0$.

Mesmo com a inclusão do efeito aleatório ε_{0j} , ainda pode haver uma variabilidade extra causada pelos problemas 1c e 1d, supondo que não haja covariáveis que dêem conta desta variabilidade adicional. Introduzindo um parâmetro de superdispersão ϕ , tem-se $\text{Var}[Y_{ij}|p_{ij}] = \phi K p_{ij}(1 - p_{ij})$, de modo que a esperança e a covariância marginais permanecem iguais a (1.14) e (1.16), respectivamente, mas a variância e a correlação marginais de Y_{ij} ficam então expressas por

$$\text{Var}[Y_{ij}] \cong K e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} [\phi + \tau_0^2 (K - \phi) e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2}] \quad (1.18)$$

e

$$\text{Corr}[Y_{ij}, Y_{i'j}] \cong K \tau_0^2 \left\{ \phi [e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2}]^{-1} + \tau_0^2 (K - \phi) \right\}^{-1}. \quad (1.19)$$

Em vez de tentar corrigir a superdispersão ainda existente com o parâmetro de superdispersão ϕ , será atribuído um efeito aleatório para cada aluno. Então, propõe-se o Modelo 3:

Modelo 3.

$$\text{Nível 1 :} \quad \log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) = \beta_{0j} + a_{ij}, \quad (1.20)$$

$$a_{ij} \sim N(0, \sigma^2) \text{ i.i.d.,}$$

e

$$\text{Nível 2 :} \quad \beta_{0j} = \gamma_{00} + \varepsilon_{0j}, \quad (1.21)$$

$$\gamma_{00} \text{ fixo, } \varepsilon_{0j} \sim N(0, \tau_0^2) \text{ i.i.d., } \varepsilon_{0j} \text{ e } a_{ij} \text{ independentes.}$$

Sob este modelo

$$E[Y_{ij}|p_{ij}] = Kp_{ij} , \quad (1.22)$$

$$\text{Var}[Y_{ij}|p_{ij}] = Kp_{ij}(1 - p_{ij}) , \quad (1.23)$$

$$E[p_{ij}] \cong (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-1} \quad (1.24)$$

e

$$\text{Var}[p_{ij}] \cong (\tau_0^2 + \sigma^2) \left[e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right]^2 . \quad (1.25)$$

Assim, a esperança e a variância de Y_{ij} são

$$E[Y_{ij}] \cong K (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-1} \quad (1.26)$$

e

$$\text{Var}[Y_{ij}] \cong K e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \left[1 + (\tau_0^2 + \sigma^2)(K - 1) e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right] . \quad (1.27)$$

Nesse caso a covariância e a correlação marginais para os escores de alunos de uma mesma escola são

$$\text{Cov}[Y_{ij}, Y_{i'j}] \cong \left[K \tau_0 e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right]^2 \quad (1.28)$$

e

$$\text{Corr}[Y_{ij}, Y_{i'j}] \cong K \tau_0^2 \left\{ \left[e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right]^{-1} + (\tau_0^2 + \sigma^2)(K - 1) \right\}^{-1} . \quad (1.29)$$

As deduções de (1.24) a (1.29) foram obtidas como casos particulares das expressões do Apêndice A.

Observe que a expressão da covariância marginal (1.28) é igual a de (1.16), mas o cálculo da variância marginal por (1.27) leva a valores superiores aos obtidos por (1.15). Conseqüentemente, a correlação marginal calculada por (1.29) é inferior à obtida por (1.17), o que significa que a introdução dos efeitos aleatórios a_{ij} reduz a correlação intra-classe.

Analogamente ao Modelo 2, em que os efeitos aleatórios ε_{0j} induzem uma correlação entre as respostas dos alunos da mesma escola, os efeitos aleatórios a_{ij} no Modelo 3 induzem uma dependência entre as respostas aos K itens dadas pelo mesmo aluno, de modo a contemplar o problema 1c, que será avaliado neste trabalho.

Caso ainda haja variação extra-binomial após a inclusão de efeitos aleatórios em ambos os níveis do modelo, esta possivelmente é causada pelo problema 1d. Para acomodar esta variabilidade remanescente, pode-se novamente utilizar como abordagem um fator ϕ multiplicando a variância condicional da resposta Y_{ij} no Modelo 3, que não altera as respectivas expressões da esperança e da covariância em (1.26) e em (1.28), mas modifica as expressões da variância e da correlação marginais para escores de alunos da mesma escola, dadas por

$$\text{Var}[Y_{ij}] \cong Ke^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \left[\phi + (\tau_0^2 + \sigma^2)(K - \phi)e^{-\gamma_{00}} (1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2} \right] \quad (1.30)$$

e

$$\text{Corr}[Y_{ij}, Y_{i'j}] \cong K\tau_0^2 \left\{ \phi [e^{-\gamma_{00}}(1 + e^{-\gamma_{00}})^{-2}]^{-1} + (\tau_0^2 + \sigma^2)(K - \phi) \right\}^{-1}. \quad (1.31)$$

A estimação do parâmetro de superdispersão ϕ neste último caso não será alvo de investigação deste trabalho e ficará como estudo futuro.

Embora haja uma vasta discussão sobre as vantagens e desvantagens de diferentes propostas de estimação e implementações computacionais, poucos trabalhos da literatura tratam especificamente da superdispersão em MLGHs. A superdispersão é mais comumente tratada sob o enfoque de MLGMs, não necessariamente para dados de natureza hierárquica. Muitos trabalhos utilizam a introdução de efeitos aleatórios como forma de acomodar a superdispersão (veja, por exemplo, Molenberghs e Verbeke (2005)). Uma outra alternativa é o uso de modelos beta-binomiais (veja Hinde e Demétrio (1998), por exemplo). As causas mais freqüentes de superdispersão em MLGHs citadas na literatura são a heterogeneidade de variâncias, a correlação entre respostas, níveis insuficientes de modelagem e omissão de preditores importantes. No caso de MLGHs, a própria natureza dos dados justifica o uso de efeitos aleatórios e mesmo após se levar em conta a dependência entre unidades pertencentes ao mesmo grupo, ainda pode ocorrer superdispersão, pelos motivos já citados.

Efron (1986) introduz o uso de famílias exponenciais duplas para modelar simultaneamente a média e a variação extra-binomial por meio de variáveis explicativas. Lee e Nelder (2006) e Lee, Nelder e Pawitan (2006), propõem uma extensão destes modelos com os chamados MLGHs duplos, que permitem até mesmo o uso de efeitos aleatórios no parâmetro de dispersão, porém são utilizados apenas efeitos aleatórios associados a grupos de unidades experimentais (nível 2, por exemplo).

Quanto aos processos de estimação para os MLGHs, a literatura discute diferentes métodos,

com maior enfoque nos MLGMs em que se supõem efeitos aleatórios normalmente distribuídos. Goldstein (1991), Wolfinger e O’Connell (1993) e Breslow e Clayton (1993), utilizam o método de quase-verossimilhança penalizada (QVP), muito criticado pelos estimadores enviesados e inconsistentes que produz (veja Molenberghs e Verbeke (2005), por exemplo). Diante das desvantagens deste método, Breslow e Lin (1995), Lin e Breslow (1996) e Raudenbush, Yang e Yosef (2000) sugerem o uso de aproximação de Laplace para obter melhores propriedades. Lee e Nelder (1996) estendem os MLGHs com o uso de efeitos aleatórios com distribuição na família exponencial, por eles denominada de “distribuição conjugada” (em relação à distribuição marginal da resposta considerada), referindo-se à situação em que se obtém uma função de verossimilhança com expressão analítica conhecida, dispensando o uso de métodos de aproximação. Anderson e Aitkin (1985), Hedeker e Gibbons (1994) e Davidian e Giltinan (1995) aplicam o método de quadratura de Gauss-Hermite. Pinheiro e Bates (1995) destacam a eficiência computacional do método de quadratura gaussiana adaptativa para aproximar a função de verossimilhança, em relação àqueles em que se assumem efeitos aleatórios normalmente distribuídos. No entanto, o seu uso torna-se mais complicado à medida em que se aumenta o número de efeitos aleatórios. A literatura apresenta como alternativa alguns métodos computacionalmente intensos, como o método MCMC (*Markov Chain Monte Carlo*) com amostradores de *Gibbs* ou *Metropolis Hastings* (veja por exemplo Zeger e Karim (1991) e Goldstein (2003)).

A maioria dos trabalhos em MLGHs que falam em variação extra-binomial apenas sugerem acomodá-la com a inclusão de um parâmetro de superdispersão (veja Goldstein (2003) e Jacob (2000), por exemplo). A literatura de MLGs não apresenta nenhum trabalho em que o efeito aleatório associado ao nível 1 tenha sido incorporado aditivamente ao preditor linear da média e ao mesmo tempo que um efeito aleatório oriundo de outro nível da hierarquia.

O objetivo deste trabalho é avaliar se o Modelo 3 proposto é superior aos Modelos 1 e 2, produzindo estimadores menos enviesados para os parâmetros comuns, erros padrões que contemplam mais apropriadamente a variabilidade dos dados e, níveis de significância empíricos mais adequados para testes de hipótese do parâmetro γ_{00} . Para tanto foi desenvolvido um programa computacional que estima os parâmetros de um MLGH sob o Modelo 3 e foi conduzido um estudo de simulação no *software* R de modo a comparar os resultados sob os Modelos 1, 2 e 3, supondo que os efeitos aleatórios ε_{0j} e a_{ij} sejam normalmente distribuídos e independentes.

As simulações foram feitas de modo que todas as amostras geradas sejam avaliadas sob o

Modelo 1 (equações (1.5) e (1.6)) por máxima verossimilhança (MV) e por quase-verossimilhança (QV) e, em seguida, sob os Modelos 2 (equações (1.10) e (1.11)) e 3 (equações (1.20) e (1.21)), por MV associada ao uso do método de quadratura de Gauss-Hermite adaptativa (QGHA), que é o método de quadratura de Gauss-Hermite com uma modificação na escolha dos pontos de quadratura (veja Liu e Pierce (1994), por exemplo).

O Capítulo 2 descreve a estratégia de simulação, a teoria do método de QGHA e as ferramentas de maximização. O Capítulo 3 apresenta os resultados do estudo de simulação. O Capítulo 4 mostra uma análise de dados reais na área de educação e no Capítulo 5 são feitas as conclusões deste trabalho.

Capítulo 2

Descrição do estudo de simulação

2.1 Geração de dados

De acordo com o Modelo 3 tem-se

$$\text{Nível 1 :} \quad \log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) = \beta_{0j} + a_{ij}$$

e

$$\text{Nível 2 :} \quad \beta_{0j} = \gamma_{00} + \varepsilon_{0j} , \quad (2.1)$$

em que a_{ij} e ε_{0j} são independentes e normalmente distribuídos, com esperanças nulas e variâncias iguais a σ^2 e τ_0^2 , respectivamente, $i = 1, 2, \dots, n_j$ e $j = 1, 2, \dots, J$.

Considere as variáveis $z_{a_{ij}}$ e $z_{\varepsilon_{0j}}$, de modo que $a_{ij} = \sigma z_{a_{ij}}$ e $\varepsilon_{0j} = \tau_0 z_{\varepsilon_{0j}}$.

Combinando os dois níveis do modelo e substituindo a_{ij} e ε_{0j} por suas versões padronizadas, os desvios padrões (DPs) dos efeitos aleatórios tornam-se parâmetros explícitos no preditor linear:

$$\log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) = \gamma_{00} + \tau_0 z_{\varepsilon_{0j}} + \sigma z_{a_{ij}} . \quad (2.2)$$

Suponha que em uma prova composta de K itens, o total de acertos Y_{ij} que o i -ésimo aluno

da j -ésima escola obtém tenha uma distribuição binomial com parâmetros K e p_{ij} . Para gerar Y_{ij} , são executados os seguintes passos:

1. fixam-se valores para os parâmetros populacionais, ou seja, $\boldsymbol{\theta} = (\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)^T$;
2. gera-se uma a.a. de tamanho J da variável $z_{\varepsilon_{0j}} \sim N(0, 1)$;
3. para cada $z_{\varepsilon_{0j}}$ obtido, gera-se uma a.a. de tamanho n_j da variável $z_{a_{ij}} \sim N(0, 1)$, supondo que $z_{\varepsilon_{0j}}$ e $z_{a_{ij}}$ são independentes;
4. substituem-se os valores obtidos nos passos anteriores em (2.2) e calcula-se p_{ij} ;
5. para cada p_{ij} , gera-se um valor da variável $Y_{ij} \sim \text{Bin}(K, p_{ij})$.

Tem-se agora para cada uma das J escolas, uma amostra do total de acertos para n_j alunos.

2.2 Delineamento do estudo de simulação

Os parâmetros foram estimados em cada amostra segundo cinco diferentes ajustes. Os dois primeiros foram ajustes do Modelo 1, um sob MV e outro sob QV. O terceiro e o quarto foram ajustes do Modelo 2 e o último foi um ajuste do Modelo 3, todos estes sob MV e com o uso de QGHA. Mais detalhes sobre a QGHA e sobre os ajustes estão nas Seções 2.3 e 2.4 respectivamente.

As simulações foram realizadas considerando 18 diferentes populações, caracterizadas por diferentes combinações de valores dos parâmetros γ_{00} , τ_0 e σ . O efeito fixo γ_{00} foi avaliado apenas nos valores 0 e 1, que correspondem a $p_{ij} = 0.5$ e $p_{ij} \cong 0.73$ respectivamente. Em virtude da enorme demanda computacional, não foi possível avaliar p_{ij} para outros valores de γ_{00} . Pelo mesmo motivo, os componentes de variância τ_0 e σ foram avaliados apenas nos valores 0, 0.5 e 1. Estes valores foram escolhidos de modo que fossem contemplados casos em que $(\tau_0 = 0, \sigma = 0)$, $(\tau_0 = 0, \sigma > 0)$, $(\tau_0 > 0, \sigma = 0)$ e $(\tau_0 > 0, \sigma > 0)$ e que resultassem em distribuições variadas mas razoáveis para p_{ij} numa aplicação real. Note que

$$\log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) \sim N(\gamma_{00}, \tau_0^2 + \sigma^2),$$

resultando na distribuição logística-normal para a escala das probabilidades, cuja função densidade de probabilidade (f.d.p.) é

$$f(p_{ij}|\gamma_{00}, \tau_0, \sigma) = \frac{[p_{ij}(1-p_{ij})]^{-1}}{\sqrt{2\pi(\tau_0^2 + \sigma^2)}} \exp \left\{ -\frac{1}{2(\tau_0^2 + \sigma^2)} \left[\log \left(\frac{p_{ij}}{1-p_{ij}} \right) - \gamma_{00} \right]^2 \right\}.$$

Foram calculadas a esperança e a variância de p_{ij} aproximadas de acordo com as expressões (1.24) e (1.25), respectivamente. Estas medidas foram aproximadas também, considerando probabilidades atribuídas no intervalo de 0.0001 a 0.9999, a cada 0.0001 unidade, ponderadas pela f.d.p. logística-normal. Estas aproximações, que serão identificadas por *Aprox-B*, foram contrastadas com as obtidas pelas respectivas expressões (1.24) e (1.25), identificadas por *Aprox-A*. A comparação dos resultados obtidos encontra-se na Tabela 2.1, em que as aproximações em *Aprox-A* distanciam-se das obtidas em *Aprox-B*, com o aumento de $\tau_0^2 + \sigma^2$, conforme comentado no Apêndice A.1, principalmente nos casos em que $\tau_0^2 + \sigma^2 > 0.5$. As densidades de p_{ij} em que $\tau_0^2 + \sigma^2 > 0$ são ilustradas na Figura 2.1, uma vez que $\tau_0 = \sigma = 0$ resulta numa distribuição degenerada.

Tabela 2.1: Medidas resumo das distribuições de p_{ij}

$(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$	$\tau_0^2 + \sigma^2$	E(p_{ij})		DP(p_{ij})		Intervalo de 90% de densidade máxima
		<i>Aprox-B</i>	<i>Aprox-A</i>	<i>Aprox-B</i>	<i>Aprox-A</i>	
(0,0,0)	0	0.500	0.500	0.000	0.000	
(0,0,0.5) ou (0,0.5,0)	0.25	0.500	0.500	0.118	0.125	[0.305 ; 0.695]
(0,0.5,0.5)	0.5	0.500	0.500	0.159	0.177	[0.238 ; 0.768]
(0,0,1) ou (0,1,0)	1	0.500	0.500	0.208	0.250	[0.162 ; 0.838]
(0,0.5,1) ou (0,1,0.5)	1.25	0.500	0.500	0.225	0.280	[0.137 ; 0.863]
(0,1,1)	2	0.500	0.500	0.262	0.354	[0.089 ; 0.911]
(1,0,0)	0	0.731	0.731	0.000	0.000	
(1,0,0.5) ou (1,0.5,0)	0.25	0.721	0.731	0.097	0.098	[0.568 ; 0.878]
(1,0.5,0.5)	0.5	0.712	0.731	0.135	0.139	[0.505 ; 0.924]
(1,0,1) ou (1,1,0)	1	0.697	0.731	0.183	0.197	[0.419 ; 0.969]
(1,0.5,1) ou (1,1,0.5)	1.25	0.690	0.731	0.200	0.220	[0.386 ; 0.980]
(1,1,1)	2	0.675	0.731	0.239	0.278	[0.305 ; 0.995]

Aprox-A: refere-se aos resultados oriundos da esperança (1.24) e variância (1.25).

Aprox-B: identifica os resultados obtidos por meio de uma distribuição logística-normal.

Para cada uma das 18 populações considerou-se o número de grupos $J = 20, 50$ combinado com o número de unidades no j -ésimo grupo $n_j = 20, 50$, $j = 1, \dots, J$, totalizando 72 diferentes configurações de valores de parâmetros com tamanhos de amostra. Os valores atribuídos para J e

Figura 2.1: Densidade de p_{ij} sob diferentes valores de γ_{00} e de $\tau_0^2 + \sigma^2$

n_j foram escolhidos levando-se em conta: 1) o que seria razoável em uma aplicação real, como por exemplo alunos agrupados em suas escolas, 2) o crescimento da demanda computacional à medida que J e n_j aumentam (a quadratura Gaussiana adaptativa, por exemplo, será empregada J vezes e $J + \sum_{j=1}^J n_j$ vezes nos modelos 2 e 3, respectivamente) e 3) o interesse em avaliar mudanças nos resultados com o aumento no número de escolas e/ou no número de alunos.

A partir de cada uma das 72 configurações, foram geradas pelo menos 1000 amostras¹ (ou réplicas). A principal dificuldade em diversificar os valores dos parâmetros, tamanhos de J e n_j e em aumentar o número de réplicas, consistiu no grande número de horas gastas no trabalho computacional. Para viabilizar o estudo, as simulações foram divididas em dezenas de processadores, conforme eles eram disponibilizados para uso. O trabalho computacional ficou distribuído da seguinte maneira: 42% num *Cluster* IBM com 112 nós com 4 CPUs (PowerPC 970) de 2.5GHz cada, um supercomputador pertencente ao projeto FAPESP No. 04/08928-3; 47% num *Cluster* Intel Dual Xeon com 32 nós de 2.4GHz cada, pertencente ao LCCA-USP (Laboratório de Computação Científica Avançada-USP); 11% em computadores do IME-USP e em *notebooks* de uso pessoal, com configurações próximas às de um Intel Core Duo 1.66GHz.

Para avaliar as réplicas geradas de cada uma das 18 populações, o tempo de processamento variou de 8 a 29 dias para $J = n_j = 20$, 16 a 92 dias para $J = 20$ e $n_j = 50$, 16 a 90 dias para $J = 50$ e $n_j = 20$ e 40 a 122 dias para $J = n_j = 50$, ou seja, à medida que o tamanho da amostra aumentou, o processamento ficou mais demorado, como era esperado. As simulações para as 72 configurações estabelecidas totalizaram 3392 dias ($\cong 9.3$ anos) de trabalho computacional, somando-se todas as horas gastas em todos os processadores.

2.3 Método de quadratura de Gauss-Hermite adaptativa

Para a avaliação do Modelo 3 foi utilizado o método de quadratura de Gauss-Hermite adaptativa (QGHA). Por meio dele foi possível aproximar as integrais requeridas nos dois níveis do modelo (aluno e escola) para obtenção da verossimilhança marginal das respostas. No caso do Modelo 2, o emprego da QGHA se dá apenas no segundo nível (escola) e constitui um caso particular do que

¹Valores maiores que 1000 ocorreram devido à divisão da simulação de uma mesma configuração em dois ou mais processadores. Os valores 1015, 1074, 1344 e 1841 correspondem ao 1º quartil, mediana, 3º quartil e máximo para o número de réplicas, respectivamente.

será descrito a seguir.

A f.d.p. de Y_{ij} condicional à p_{ij} é dada por:

$$f(y_{ij}|p_{ij}) \propto \exp \left[y_{ij} \log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) + K \log(1 - p_{ij}) \right] . \quad (2.3)$$

Utilizando (2.2) em (2.3) tem-se:

$$f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}, z_{a_{ij}}, \boldsymbol{\theta}) \propto \exp \left[y_{ij} \left(\gamma_{00} + \tau_0 z_{\varepsilon_{0j}} + \sigma z_{a_{ij}} \right) - K \log \left(1 + e^{\gamma_{00} + \tau_0 z_{\varepsilon_{0j}} + \sigma z_{a_{ij}}} \right) \right] . \quad (2.4)$$

O logaritmo da função de verossimilhança marginal de $\mathbf{Y}$ é dada por

$$\log L(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{Y}) = \sum_{j=1}^J \log \left\{ \int_{z_{\varepsilon_{0j}}} \left[\prod_{i=1}^{n_j} \int_{z_{a_{ij}}} f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}, z_{a_{ij}}, \boldsymbol{\theta}) f(z_{a_{ij}}) dz_{a_{ij}} \right] f(z_{\varepsilon_{0j}}) dz_{\varepsilon_{0j}} \right\} . \quad (2.5)$$

A integral da função $f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}, z_{a_{ij}}, \boldsymbol{\theta}) f(z_{a_{ij}})$ na variável $z_{a_{ij}}$ pode ser aproximada pelo método de quadratura de Gauss-Hermite (veja Liu e Pierce (1994), por exemplo), de modo que:

$$\int_{z_{a_{ij}}} f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}, z_{a_{ij}}, \boldsymbol{\theta}) f(z_{a_{ij}}) dz_{a_{ij}} \cong \sum_{q=1}^{Q_a} w^*(z_{a_{ij}}^{(q)}) f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}, z_{a_{ij}}^{(q)}, \boldsymbol{\theta}) f(z_{a_{ij}}^{(q)}) , \quad (2.6)$$

em que Q_a corresponde ao número de pontos de quadratura utilizados nesta aproximação, ou seja, ao grau do polinômio de Hermite. Cada raiz $z_{a_{ij}}^{(q)}$ do polinômio de Hermite, $q = 1, \dots, Q_a$, será avaliada na função $w^*(z) = w(z) \exp(z^2)$, sendo $w(z)$ uma função ortogonal ao polinômio de Hermite.

Analogamente aproxima-se a integral em $z_{\varepsilon_{0j}}$

$$\begin{aligned}
& \int_{z_{\varepsilon_{0j}}} \left[\prod_{i=1}^{n_j} \int_{z_{a_{ij}}} f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}, z_{a_{ij}}, \boldsymbol{\theta}) f(z_{a_{ij}}) dz_{a_{ij}} \right] f(z_{\varepsilon_{0j}}) dz_{\varepsilon_{0j}} \\
& \cong \int_{z_{\varepsilon_{0j}}} \left[\prod_{i=1}^{n_j} \left(\sum_{q=1}^{Q_a} w^*(z_{a_{ij}}^{(q)}) f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}, z_{a_{ij}}^{(q)}, \boldsymbol{\theta}) f(z_{a_{ij}}^{(q)}) \right) \right] f(z_{\varepsilon_{0j}}) dz_{\varepsilon_{0j}} \\
& \cong \sum_{q'=1}^{Q_\varepsilon} w^*(z_{\varepsilon_{0j}}^{(q')}) \left[\prod_{i=1}^{n_j} \left(\sum_{q=1}^{Q_a} w^*(z_{a_{ij}}^{(q)}) f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}^{(q')}, z_{a_{ij}}^{(q)}, \boldsymbol{\theta}) f(z_{a_{ij}}^{(q)}) \right) \right] f(z_{\varepsilon_{0j}}^{(q')}) \quad (2.7)
\end{aligned}$$

em que $z_{\varepsilon_{0j}}(q')$, $q' = 1, \dots, Q_\varepsilon$ constituem as raízes do polinômio de Hermite de grau Q_ε , avaliadas em $w^*(z) = w(z) \exp(z^2)$, de modo que

$$\log L(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{Y}) \cong \sum_{j=1}^J \log \left\{ \sum_{q'=1}^{Q_\varepsilon} w^*(z_{\varepsilon_{0j}}^{(q')}) \left[\prod_{i=1}^{n_j} \left(\sum_{q=1}^{Q_a} w^*(z_{a_{ij}}^{(q)}) f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}^{(q')}, z_{a_{ij}}^{(q)}, \boldsymbol{\theta}) f(z_{a_{ij}}^{(q)}) \right) \right] f(z_{\varepsilon_{0j}}^{(q')}) \right\}. \quad (2.8)$$

Como os pontos de quadratura são escolhidos independentemente da função que se deseja integrar, estes podem estar em regiões que pouco contribuem no resultado da integração desta função. Para melhorar a aproximação, é conveniente promover uma mudança de localização e escala nos pontos de quadratura de forma a deslocá-los para regiões que promovam maior contribuição. Esta modificação resulta no método de QGHA. Segundo Liu e Pierce (1994), os pontos de quadratura da QGHA são reposicionados em torno de $\hat{\mu}$, a moda estimada da função $h(z)$ a ser integrada, utilizando-se como parâmetro de escala

$$\hat{\nu} = \left[- \frac{\partial^2 \log h(z)}{\partial z^2} \Big|_{z=\hat{\mu}} \right]^{-1/2}. \quad (2.9)$$

Desta forma a função $h(z)$ pode ser aproximada por

$$\int h(z) dz \cong \sqrt{2\hat{\nu}} \sum_{q=1}^Q w^*(z^{(q)}) h(\hat{\mu} + \sqrt{2\hat{\nu}} z^{(q)}) \quad (2.10)$$

em que $w^*(z) = w(z) \exp(z^2)$.

2.4 Implementação no R

Para tornar a implementação computacional deste trabalho acessível a todos os interessados em utilizá-la, optou-se pelo uso do *software* livre R, disponível em *The R Project for Statistical Computing*, no sítio <http://www.r-project.org>.

Dois ajustes do Modelo 1 foram feitos pela rotina `glm` do *software* R, utilizando a opção `family=quasibinomial`, que disponibiliza tanto os erros padrões (EPs) do ajuste de um MLG quanto os EPs corrigidos pelo parâmetro de superdispersão estimado. Os ajustes do Modelo 1 sob MV e sob QV serão identificados pelas respectivas siglas MLG e QV.

O ajuste do Modelo 2 foi feito por meio da rotina `glmmML` do R e será identificado pela sigla QGR. Neste caso as estimativas dos EPs são obtidas por meio da matriz de informação observada analítica. Utilizou-se a opção `method='ghq'`, em que a rotina faz uso da QGHA na estimação por MV. Outro ajuste do Modelo 2 sob MV e com o uso da QGHA, que será identificado por QG2, foi obtido por meio de um programa feito no R. Este último ajuste utiliza uma forma reduzida do programa que a autora desenvolveu no R, para o ajuste do Modelo 3, que será identificado pela sigla QG3, tendo como objetivo intermediar os resultados de QGR e QG3, avaliando assim a adequação do algoritmo implementado em QG3. Todas as aplicações de QGHA envolveram 10 pontos de quadratura ($Q_a = Q_\varepsilon = 10$). Tanto em QG2 como em QG3 as estimativas dos EPs foram obtidas por meio da matriz de informação observada numérica. Tomou-se esta decisão com o objetivo de evitar o aumento do tempo computacional, visto que um estudo piloto não apontou diferenças expressivas entre os resultados obtidos com a aproximação numérica e seus correspondentes com a expressão analítica.

A QGHA em QG3 foi implementada em duas etapas, aproximando as integrais das funções de $z_{a_{ij}}$ e, posteriormente, das funções de $z_{\varepsilon_{0j}}$. Para a primeira etapa, a QGHA teve os pontos de quadratura selecionados em torno da estimativa da moda μ , calculada para a função integrada utilizando a rotina de otimização unidimensional `optimize`, mais rápida do que a rotina `optim`, já que havia $\sum_{j=1}^J n_j$ integrais a serem aproximadas. A estimativa do parâmetro de escala ν da equação (2.9) foi obtida, posteriormente, com o emprego de μ na expressão analítica da hessiana obtida pela rotina `deriv3`. Já para a segunda etapa, que requer a aproximação de J integrais, as estimativas de μ e de ν para a função integrada foram obtidas pela rotina `optim`, que disponibiliza

a matriz hessiana numérica. Em alguns poucos casos foi preciso utilizar outra rotina de otimização denominada `nlm`, que utiliza um algoritmo tipo-Newton. Veja mais detalhes das rotinas do *software* R no sítio <http://www.r-project.org>.

A rotina `optim` permite especificar diferentes métodos de otimização, entre os quais tem-se: 1) **Nelder-Mead**, *default* da rotina, método simplex proposto em Nelder e Mead (1965); 2) **BFGS**, um método quasi-Newton; 3) **L-BFGS-B**, uma adaptação de BFGS em que cada parâmetro pode ficar restrito a um intervalo especificado; 4) **CG**, um método de gradientes conjugados que, segundo o manual do R, é mais frágil do que o método BFGS mas pode ter mais êxito em problemas de otimização maiores. Detalhes sobre estes últimos métodos podem ser encontrados, por exemplo, em Nocedal e Wright (1999).

Uma vez feitas as aproximações das integrais pela QGHA, tanto em QG2 quanto em QG3, cada amostra teve sua função de verossimilhança maximizada pela rotina `optim` com a opção **Nelder-Mead**. Em caso de problemas de convergência ou de obtenção de estimativas negativas para a variância dos estimadores, optou-se pelos métodos L-BFGS-B ou BFGS, nesta ordem.

Pela Tabela 2.2, vê-se que em todas as situações, mais de 95% das amostras tiveram sua função de verossimilhança avaliada pelo mesmo método de otimização (**Nelder-Mead**). Na obtenção da moda da função a ser integrada em $z_{\varepsilon_{0j}}$ (veja equação (2.7)), novamente em mais de 95% das amostras os resultados foram originados pelo mesmo método de otimização (**CG**). Os outros métodos foram empregados nos casos em que ocorreram problemas de convergência, de forma que os algoritmos fossem finalizados e não se desprezasse nenhuma das amostras. Apenas 0.09% das amostras tiveram estimativas em QG2 ou QG3 desprezadas por apresentarem estimativas negativas de componentes de variância.

Tabela 2.2: Percentual dos métodos de otimização usados em QG2 e QG3, na maximização da função de verossimilhança e da função $h(z_{\varepsilon_{0j}})$ na QGHA.

Método de Otimização	F. de verossimilhança		Método de Otimização	$h(z_{\varepsilon_{0j}})$	
	por QG2	por QG3		por QG2	por QG3
Nelder-Mead	99.99	95.98	CG	96.95	96.95
LBGS-B	0.01	3.51	BFGS	3.05	1.25
BFGS		0.51	NLM		1.80
Total	100.00	100.00	Total	100.00	100.00

Para garantir que as estimativas de τ_0 e de σ sejam positivas, a função $f(y_{ij}|z_{\varepsilon_{0j}}, z_{a_{ij}}, \boldsymbol{\theta})$ em (2.4) foi reescrita de modo a incorporar esta restrição. Promoveu-se uma reparametrização, tal que $\tau_0 = \exp(\lambda_{\tau_0})$ e $\sigma = \exp(\lambda_{\sigma})$ e, posteriormente, as estimativas de τ_0 e de σ foram obtidas aplicando a função logarítmica, com base na propriedade de invariância dos estimadores de MV.

Capítulo 3

Resultados da simulação

Neste capítulo serão discutidos os resultados dos ajustes realizados na simulação (identificados pelas siglas MLG, QV, QGR, QG2 e QG3, conforme descrito na Seção 2.4), considerando os casos em que:

- ambos os componentes de variância τ_0 e σ são nulos, de modo que os ajustes sob o Modelo 1 (MLG e QV), o Modelo 2 (QGR e QG2) e o Modelo 3 (QG3), supostamente, apresentariam resultados próximos;
- apenas τ_0 é não nulo, caso em que apenas os ajustes sob o Modelo 1 não contemplam este componente;
- apenas σ é não nulo, caso em que um dos ajustes sob o Modelo 1 (MLG) e os ajustes sob o Modelo 2 não incorporam este componente;
- tanto τ_0 quanto σ são não nulos, casos em que apenas o ajuste sob o Modelo 3 contempla ambos os componentes.

3.1 Vieses dos estimadores dos componentes de variância (τ_0 e σ)

Os resultados discutidos nesta seção encontram-se nas Tabelas B.1 e B.2, que contêm as médias das estimativas de τ_0 e de σ obtidas na simulação. Estas médias constituem estimativas do valor esperado de $\hat{\tau}_0$ e de $\hat{\sigma}$, respectivamente, pelos quais foram analisados os vieses dos referidos estimadores.

Daqui por diante, sempre que for dito que um estimador foi menos enviesado ou teve menor viés do que outro, deve-se interpretar que o estimador foi aquele que em módulo apresentou o menor valor esperado.

3.1.1 τ_0 e σ nulos

Quando τ_0 e σ são nulos, as Tabelas B.1 e B.2 mostram que as médias das estimativas de τ_0 foram similares entre os ajustes QGR, QG2 e QG3, para o mesmo número de escolas (J) e de alunos (n_j). Para o mesmo J , estas médias ficaram mais próximas de zero com o aumento em n_j e a Figura C.1 mostra, também, que as distribuições das estimativas ficaram mais concentradas. Já para o mesmo n_j , as médias pouco variaram com o aumento de J , assim como as distribuições das estimativas pouco se alteraram, exceto quando $\gamma_{00} = 1$ no caso $n_j=20$, em que houve decréscimos de maior magnitude nas médias das estimativas de $J = 20$ para $J = 50$ e as distribuições apresentaram uma redução no 3º quartil mais acentuada do que em $n_j = 50$.

Pela Figura C.10, observa-se que houve redução dos valores do 3º quartil das distribuições das estimativas de σ , tanto com o aumento em n_j fixado J quanto com o aumento em J fixado n_j , o que corrobora o fato das médias das estimativas de σ , retratadas nas Tabelas B.1 e B.2, terem ficado cada vez mais próximas de zero com o aumento do tamanho da amostra.

3.1.2 Somente τ_0 não nulo

Quando $\tau_0 \neq 0$ e σ é nulo, QGR e QG2 apresentaram os mesmos resultados quanto às médias das estimativas de τ_0 , conforme mostram as Tabelas B.1 e B.2. Com o aumento em J , estas médias

ficaram mais próximas de τ_0 e, conforme ilustram as Figuras C.2 e C.3, as estimativas de τ_0 ficaram mais concentradas, o que é razoável já que um maior número de grupos contribui para melhorar a estimativa de um componente de variância relativo a grupo.

Para $\tau_0 = 1$, o estimador de τ_0 em QG3 apresentou sempre o menor viés em relação a QGR e QG2 (73% da magnitude do viés de QGR, para $J = n_j = 50$). Houve redução do viés de $\hat{\tau}_0$ e de $\hat{\sigma}$ em QG3, tanto com o aumento em J fixado n_j quanto com o aumento em n_j fixado J .

Quando $\tau_0 = 0.5$, o viés do estimador $\hat{\tau}_0$ em QG3 foi, de modo geral, maior do que em QGR e QG2. Somente QG3 apresentou médias das estimativas de τ_0 superiores ao parâmetro (entre 4 e 34%).

As Figuras C.11 e C.12 mostram que a distribuição das estimativas de σ tornou-se mais concentrada com o aumento em J e/ou em n_j . De $\tau_0 = 0.5$ para $\tau_0 = 1$, as médias das estimativas de σ em um mesmo ajuste, em geral, ficaram mais próximas de zero, assim como a mediana das estimativas de σ .

3.1.3 Somente σ não nulo

Quando τ_0 é nulo e $\sigma \neq 0$, pelas Tabelas B.1 e B.2 observa-se que, para os mesmos valores de J e n_j , as médias das estimativas de τ_0 em QGR e QG2 foram similares, porém atingiram pelo menos o triplo dos valores das correspondentes médias em QG3, cujo estimador $\hat{\tau}_0$ apresentou o menor viés (25 a 33% em relação à magnitude do viés obtido por QGR/QG2). As Figuras C.4 e C.5 mostram que QGR e QG2, ao contrário de QG3, não apresentaram estimativas adequadas de τ_0 , pois estas ficaram bem acima do valor zero. Note que o 1º quartil em QGR e QG2 é sempre superior ao 3º quartil em QG3.

Fixado J , com o aumento de n_j em QG3, tanto $\hat{\tau}_0$ quanto $\hat{\sigma}$ apresentaram redução em seus vieses e tenderam aos reais valores dos parâmetros. Com o aumento em J para n_j fixado, QG3 apresentou redução no viés de $\hat{\tau}_0$ (e também de $\hat{\sigma}$), enquanto que o oposto ocorreu em QGR e QG2. Quando $n_j = 50$, os vieses em QGR e QG2 são menores do que quando $n_j = 20$. Portanto, a melhora das médias das estimativas de τ_0 em QGR e QG2 foi determinada pelo aumento em n_j e não pelo aumento em J . Como QGR e QG2 não contemplam a variabilidade imposta por

σ , esta parece ter sido confundida com a variabilidade entre grupos e ter feito com que τ_0 fosse inflacionado.

As Figuras C.13 e C.14 apresentam estimativas de σ distribuídas de forma aproximadamente simétrica, em torno do seu real valor. Além disso, elas ficam cada vez mais concentradas com o aumento do tamanho da amostra.

3.1.4 τ_0 e σ não nulos

Considerando somente os casos em que tanto τ_0 quanto σ não são nulos, nota-se pelas Figuras C.6 a C.9 que embora os ajustes que utilizam QGHA, avaliados sob os mesmos J e n_j , tenham apresentado *boxplots* com intervalos interquartis e amplitudes semelhantes para as estimativas de τ_0 , os valores do 1º e do 3º quartis em QG3 são superiores em relação a QGR e QG2. Embora as distribuições tenham se mostrado aproximadamente simétricas nos três ajustes, esta simetria não se deu em torno de τ_0 em nenhum deles. Quando $\sigma = 0.5$, observa-se que o valor de τ_0 ficou sempre entre a mediana e o 3º quartil nos ajustes QGR e QG2, sendo que em QG3 a mediana ficou mais próxima de τ_0 do que nos outros dois ajustes na maioria dos casos. Quando $\sigma = 1$, QGR e QG2 apresentaram o 3º quartil sempre abaixo de τ_0 , enquanto QG3 tem suas estimativas de τ_0 distribuídas de modo que τ_0 ficou sempre mais próximo da mediana do que 3º quartil.

As Tabelas B.1 e B.2 mostram que para $\tau_0 = 1$, sob os mesmos valores de σ , J e n_j , QGR e QG2 exibiram praticamente as mesmas estimativas do valor esperado de $\hat{\tau}_0$. Estas foram sempre inferiores ao valor de τ_0 , assim como as correspondentes estimativas em QG3. No entanto, neste último, $\hat{\tau}_0$ mostrou vieses de menor magnitude em relação a QGR/QG2 (9 a 27% quando $\sigma = 0.5$ e 24 a 54% quando $\sigma = 1$), especialmente quando $J = 50$. . Fixando-se n_j , o estimador $\hat{\tau}_0$ apresentou redução de seu viés com o aumento de J , nos três ajustes. Em QGR e QG2, quando σ passou de 0.5 para 1 unidade, as médias das estimativas de τ_0 ficaram mais distantes do valor 1 em relação às respectivas médias em QG3, já que QGR e QG2 não contemplam σ . Além disso, para o mesmo valor de J , com o aumento em n_j , as médias das estimativas também ficaram mais longe de 1 e isto, de modo geral, foi mais acentuado quando σ passou de 0.5 para 1. Ou seja, predominantemente, quanto maior foi o valor de σ , mais distantes de τ_0 ficaram as médias de suas estimativas obtidas em QGR e QG2 e isto se agravou com o aumento em n_j .

Para $\tau_0 = 0.5$, QGR e QG2 novamente produziram as mesmas estimativas do valor esperado de $\hat{\tau}_0$, sob os mesmos valores de J e n_j , as quais também foram inferiores ao valor de τ_0 . Em QG3 $\hat{\tau}_0$ só não apresentou menor viés em relação a QGR e QG2 para $\sigma = 0.5$ e $J = n_j = 50$, caso em que o valor esperado do estimador superou o valor do parâmetro. Novamente, quanto maior foi o valor de σ , mais prejudicadas ficaram as médias das estimativas de τ_0 obtidas em QGR e QG2 e isto se agravou com o aumento de n_j .

As Tabelas B.1 e B.2 mostram que o viés do estimador de σ tendeu a zero sempre que τ_0 e σ são ambos não nulos. As Figuras C.15 a C.18 mostram que a distribuição das estimativas de σ foi aproximadamente simétrica em torno do seu real valor. Além disso elas ficaram cada vez mais concentradas com o aumento do tamanho da amostra.

3.2 Resultados para γ_{00}

3.2.1 Avaliação do estimador $\hat{\gamma}_{00}$

As Tabelas B.3 e B.4 trazem as estimativas do valor esperado de $\hat{\gamma}_{00}$ sob cada ajuste, ou seja, as estimativas do viés de $\hat{\gamma}_{00}$, fixados os valores de γ_{00} , τ_0 e σ . As Figuras D.1 a D.10 ilustram os *boxplots* das estimativas de γ_{00} .

As Tabelas B.5 e B.6 trazem as médias das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ sob cada ajuste e as Figuras D.11 a D.19 trazem os *boxplots*. O EP foi estimado para cada réplica da simulação, por meio da matriz de informação observada, conforme descrito na Seção 2.4. As Tabelas B.7 e B.8 trazem os DPs para as estimativas de γ_{00} sob cada ajuste.

O valor da média das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ apresentada nas Tabelas B.5 e B.6, fixados os mesmos parâmetros e tamanhos de amostra J e n_j , foi similar ao valor do DP das estimativas de γ_{00} das respectivas Tabelas B.7 e B.8 para QGR, QG2 e QG3. Quando $\tau_0 = \sigma = 0$, MLG e QV apresentaram DPs próximos aos respectivos EPs. Para τ_0 ou σ não nulo, MLG mostrou sempre DPs bem superiores aos EPs, enquanto QV apresentou EPs e DPs semelhantes somente nos casos em que apenas o desvio padrão σ era não nulo.

Quando $\gamma_{00} = 0$, os vieses estimados para $\hat{\gamma}_{00}$ de modo geral tenderam a zero em todos os ajustes (veja Tabela B.3).

Quando $\gamma_{00} = 1$ e $\tau_0 = \sigma = 0$ (veja Tabela B.4), os vieses estimados para $\hat{\gamma}_{00}$ tenderam a zero. No entanto, sob os mesmos valores de J e n_j , os vieses em QG3 excederam ligeiramente (entre 0.00058 e 0.00144 unidade) os correspondentes valores em QGR e QG2.

Vê-se pelas Figuras D.1 e D.2 que as estimativas de γ_{00} também se distribuíram de forma similar entre os ajustes e que elas ficaram mais concentradas em torno do valor de γ_{00} à medida que J e n_j aumentaram.

Quando $\gamma_{00} = 0$, $\tau_0 \neq 0$ e $\sigma = 0$, a magnitude do viés (Tabela B.3) e a distribuição das estimativas (Figura D.3) foram similares entre os ajustes, sob os mesmos valores de τ_0 , J e n_j . As estimativas de γ_{00} ficaram menos dispersas quando $\tau_0 = 0.5$, em relação a $\tau_0 = 1$ e, também, perante um maior número de grupos ($J = 50$).

Quando $\gamma_{00} = 1$, $\tau_0 \neq 0$ e $\sigma = 0$, o estimador mais enviesado ocorreu no MLG/QV (Tabela B.4), cujas estimativas estão concentradas abaixo do valor 1 (veja Figura D.4), diferentemente dos demais ajustes, em que elas concentraram-se em torno de 1. Vê-se, também, que as estimativas de γ_{00} quando $J = 50$ ficaram mais concentradas, em todos os ajustes. QGR e QG2 apresentaram os menores vieses para $\hat{\gamma}_{00}$. Os vieses estimados de $\hat{\gamma}_{00}$ em QG3 quase se equipararam aos respectivos vieses obtidos em QGR e QG2 com o aumento em τ_0 de 0.5 para 1, enquanto o viés de $\hat{\gamma}_{00}$ se acentuou no MLG/QV.

Quando $\gamma_{00} = 0$, $\tau_0 = 0$ e $\sigma \neq 0$, a magnitude do viés foi similar entre os ajustes, para os mesmos valores fixados de τ_0 , J e n_j (veja Tabela B.4). A Figura D.5 ilustra estimativas de γ_{00} mais concentradas quando houve um maior número de grupos ($J = 50$) e um maior número de unidades por grupo ($n_j = 50$). Além disso, quando $\sigma = 0.5$ todos os ajustes para os mesmos J e n_j resultaram em estimativas com distribuições similares. Já em $\sigma = 1$, além das distribuições terem ficado mais dispersas do que em $\sigma = 0.5$, QG3 teve estimativas mais espalhadas do que nos demais ajustes avaliados nas mesmas condições.

Quando $\gamma_{00} = 1$, $\tau_0 = 0$ e $\sigma \neq 0$, o viés do estimador $\hat{\gamma}_{00}$ tendeu a zero somente em QG3 (veja Tabela B.4). Os demais ajustes apresentaram vieses de magnitudes similares para os mesmos

J e n_j , que se acentuaram com o aumento de σ . Desta forma QG3 foi o único ajuste a apresentar estimativas de γ_{00} em torno do valor 1 (veja Figura D.6).

Quando $\tau_0 = 0$ e $\sigma \neq 0$, as Figuras D.14 e D.15 mostraram que os EPs estimados de $\hat{\gamma}_{00}$ em QG3 foram em geral maiores do que nos demais ajustes, porém tiveram menor variabilidade do que QGR e QG2. Além disso, embora os vieses tenham apresentado comportamentos diferentes quando $\gamma_{00} = 0$ e quando $\gamma_{00} = 1$, não houve diferença com relação ao quadro de distribuição dos EPs de $\hat{\gamma}_{00}$.

Quando $\gamma_{00} = 0$, $\tau_0 = 0.5$ e $\sigma \neq 0$, a magnitude do viés (B.3) e a distribuição das estimativas de γ_{00} (veja Figura D.7) foram similares entre os ajustes, para os mesmos valores fixados de σ , J e n_j . A distribuição das estimativas em um mesmo ajuste pouco se alterou quando σ aumentou para 1, com exceção de QG3, que apresentou estimativas um pouco mais dispersas do que no caso em que $\sigma = 0.5$. A Figura D.7 mostrou também distribuições mais concentradas em torno de 0 quando $J = 50$.

Quando $\gamma_{00} = 0$, $\tau_0 = 1$ e $\sigma \neq 0$, a magnitude do viés foi similar entre os ajustes, para os mesmos valores fixados de σ , J e n_j (veja Tabela B.3). A distribuição das estimativas variou mais do MLG/QV para QGR/QG2 e destes para QG3, como mostra a Figura D.9, em que o 1º e o 3º quartis, em todos os ajustes, estão inseridos no intervalo interquartil obtido em QG3, sob os mesmos valores de J e n_j .

Quando $\gamma_{00} = 1$, $\tau_0 \neq 0$ e $\sigma \neq 0$ (veja Tabela B.4), sob os mesmos valores de τ_0 , σ , J e n_j , o viés do estimador $\hat{\gamma}_{00}$ tendeu a zero somente em QG3, os ajustes QGR e QG2 apresentaram vieses de magnitudes similares e MLG/QV teve o maior viés. O aumento de σ de 0.5 para 1, sob os mesmos valores de τ_0 , J e n_j , implicou no aumento dos vieses e, também, no deslocamento das estimativas, afastando-se do valor 1 (veja Figuras D.8 e D.10), exceto em QG3. Desta forma, QG3 foi o único ajuste a apresentar estimativas apropriadas de γ_{00} , concentradas em torno do valor 1.

As Figuras D.16 a D.19, em que $\tau_0 \neq 0$ e $\sigma \neq 0$, mostram que as estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ em QG3, quando σ passa de 0.5 para 1, concentraram-se ainda mais acima das estimativas dos demais ajustes. Os boxplots dos EPs estimados de $\hat{\gamma}_{00}$ não diferiram entre os casos $\gamma_{00} = 0$ e $\gamma_{00} = 1$, embora estes tenham apresentado vieses com comportamentos diferentes.

É importante ressaltar que o parâmetro γ_{00} tem diferentes interpretações nos Modelos 1, 2 e 3. O Modelo 1 é chamado de marginal ou *population-average*. Já os Modelos 2 e 3 são chamados de condicionais, *subject-specific* ou *unit-specific*, ou ainda, *cluster-specific*.

É conveniente designar, neste momento, o parâmetro γ_{00} nos Modelos 1, 2 e 3 por $\gamma_{00}^{(1)}$, $\gamma_{00}^{(2)}$ e $\gamma_{00}^{(3)}$, respectivamente. No Modelo 1 foi suposto que a resposta de cada aluno de cada escola segue uma distribuição binomial, em que $\log\left(\frac{p_{ij}}{1-p_{ij}}\right)$ foi assumido constante para todos os indivíduos ($= \gamma_{00}^{(1)}$). Logo, $\left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(1)}}\right)^{-1}$ é a probabilidade média de acerto para todos os alunos, de todas as escolas. Já no Modelo 2, admitiu-se que, condicionalmente ao efeito aleatório ε_{0j} , a resposta de cada aluno dentro desta escola tem uma distribuição binomial, em que $\log\left(\frac{p_{ij}}{1-p_{ij}}\right)$ foi considerado constante para todos os indivíduos da mesma escola ($= \gamma_{00}^{(2)} + \varepsilon_{0j}$). Portanto, $\left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(2)}}\right)^{-1}$ é a probabilidade de acerto para todos os alunos, de uma escola mediana ou “típica” (*i.e.*, que $\varepsilon_{0j} = 0$). Analogamente, no Modelo 3, foi assumido que a resposta de cada aluno, condicionalmente a ε_{0j} e a_{ij} , possui uma distribuição binomial, em que $\log\left(\frac{p_{ij}}{1-p_{ij}}\right)$ varia conforme a escola e o aluno ($= \gamma_{00}^{(3)} + \varepsilon_{0j} + a_{ij}$). Desta forma, $\left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(3)}}\right)^{-1}$ é a probabilidade de acerto para um aluno mediano, de uma escola “típica” (*i.e.*, que $\varepsilon_{0j} = a_{ij} = 0$).

Para $\tau_0 = \sigma = 0$, tem-se que $\gamma_{00}^{(1)} = \gamma_{00}^{(2)} = \gamma_{00}^{(3)}$. Quando somente $\tau_0 = 0$, $\gamma_{00}^{(1)} = \gamma_{00}^{(2)}$. Quando somente $\sigma = 0$, $\gamma_{00}^{(2)} = \gamma_{00}^{(3)}$. A discrepância entre $\gamma_{00}^{(1)}$ e $\gamma_{00}^{(2)}$ aumenta com τ_0 . Já entre $\gamma_{00}^{(2)}$ e $\gamma_{00}^{(3)}$, a diferença cresce com σ .

Quando γ_{00} assume o valor 0, a f.d.p. de p_{ij} é simétrica em torno de 0.5, como mostra a Figura 2.1. Já para $\gamma_{00} = 1$, a f.d.p. de p_{ij} é assimétrica. De modo geral, a assimetria da curva logística-normal acentua-se à medida que γ_{00} afasta-se do valor 0 e, também, com o aumento de $\tau_0^2 + \sigma^2$.

Quando $\gamma_{00} = 0$, em decorrência da simetria da curva logística-normal, a probabilidade de acerto de um aluno de uma escola mediana e a probabilidade de acerto de um aluno mediano de uma escola mediana, coincidem com a probabilidade média de acerto na população de alunos em geral. Isto explica a proximidade dos vieses estimados para $\hat{\gamma}_{00}$ em todos os ajustes feitos sob a mesma combinação dos parâmetros, conforme mostra a Tabela B.3.

Por outro lado, quando $\gamma_{00} \neq 0$, a assimetria da f.d.p. de p_{ij} faz com que os parâmetros

$\gamma_{00}^{(1)}$, $\gamma_{00}^{(2)}$ e $\gamma_{00}^{(3)}$ tenham as diferentes interpretações anteriormente colocadas, pois

$$E_{a_{ij}} \left[\left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(3)} - \varepsilon_{0j} - a_{ij}} \right)^{-1} \right] = \left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(2)} - \varepsilon_{0j}} \right)^{-1} \neq \left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(3)} - \varepsilon_{0j}} \right)^{-1}$$

e

$$E_{\varepsilon_{0j}} \left[\left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(2)} - \varepsilon_{0j}} \right)^{-1} \right] = \left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(1)}} \right)^{-1} \neq \left(1 + e^{-\gamma_{00}^{(2)}} \right)^{-1}.$$

Neste caso os vieses referem-se a diferentes estimadores, salvo as exceções anteriormente mencionadas em que a nulidade de τ_0 e/ou de σ promove a coincidência de γ_{00} entre alguns modelos.

Por exemplo, quando $\tau_0 = 0$ e $\sigma = 1$, tem-se que $\gamma_{00}^{(1)} = \gamma_{00}^{(2)} \neq \gamma_{00}^{(3)}$. Pela Tabela 2.1, $E(p_{ij}) \cong 0.697$, de modo que $\log \left(\frac{0.697}{1-0.697} \right) = 0.832$, explicando o motivo dos vieses em MLG/QV, QGR e QG2 estarem próximos de -0.168 na Tabela B.4.

As diferenças entre $\gamma_{00}^{(1)}$, $\gamma_{00}^{(2)}$ e $\gamma_{00}^{(3)}$ continuam a existir para outras funções de ligação não-lineares, embora com outras magnitudes, mas desaparecem ao utilizar a função de ligação identidade. Veja mais sobre o assunto em Raudenbush e Bryk (2002), Diggle, Heagerty, Liang e Zeger (2002) e Molenberghs e Verbeke (2005).

Quando $\gamma_{00} = 0$, nota-se ao contrastar dois conjuntos de valores para os componentes de variância, $(\tau^{(1)}, \sigma^{(1)})$ e $(\tau_0^{(2)}, \sigma^{(2)})$, em que $\tau_0^{(1)} = \sigma^{(2)}$ e $\tau_0^{(2)} = \sigma^{(1)}$, que o conjunto em que $\tau_0 > \sigma$ apresenta estimativas para γ_{00} muito mais dispersas em torno de zero do que o conjunto em que $\tau_0 < \sigma$. Embora a variância induzida em p_{ij} seja a mesma nas duas situações (veja Tabela 2.1), a dependência entre os alunos que estudam na mesma escola é maior no caso em que $\tau_0 > \sigma$, o que explica porque os EPs estimados de $\hat{\gamma}_{00}$ foram maiores do que quando $\tau_0 < \sigma$.

3.2.2 Avaliação da taxa de rejeição para γ_{00}

A partir das estimativas de γ_{00} e do EP estimado para $\hat{\gamma}_{00}$ em cada amostra, foram construídos intervalos de 95% de confiança para γ_{00} . Avaliou-se quantas amostras sob a mesma configuração não continham o valor previamente estabelecido para γ_{00} no intervalo de confiança construído, estabelecendo-se a taxa de rejeição estimada do teste de hipóteses $H_0 : \gamma_{00} = \gamma_{00}^*$ vs $H_a : \gamma_{00} \neq \gamma_{00}^*$ pela estatística de Wald, em que $\gamma_{00}^* = 0, 1$ (veja Tabelas B.9 e B.10). Caso o estimador

$\hat{\gamma}_{00}$ satisfaça certas condições de regularidade e os tamanhos de amostra sejam suficientemente grandes, espera-se que, aproximadamente, 5% das amostras simuladas sob a mesma configuração não contenham o verdadeiro valor de γ_{00} .

As taxas de rejeição estimadas podem ser encontradas nas Tabelas B.9 e B.10, para $\gamma_{00} = 0$ e $\gamma_{00} = 1$, respectivamente.

As taxas de rejeição empíricas nos casos em que $\tau_0 = \sigma = 0$ ficaram todas em torno de 5% (entre 3.1% e 6.1%), uma vez que na ausência dos componentes τ_0 e σ , o ajuste de um MLG equivale a uma forma reduzida dos ajustes QV, QGR, QG2 e QG3.

Quando $\tau_0 \neq 0$ e $\sigma = 0$, somente QGR, QG2 e QG3 mostraram taxas não muito distantes de 5%. As taxas produzidas no MLG e em QV foram todas superiores a 56%. QGR apresentou taxas melhores (mais perto de 5%) que em QG2 e QG3. Todas as taxas em QG2 foram maiores ou iguais às de QGR e metade delas menores ou iguais às de QG3. Observa-se que com exceção de quando $\gamma_{00} = 1$ e $\tau_0 = 0.5$, os ajustes que envolvem a QGHA apresentaram as taxas mais próximas de 5% quando se utilizou um maior número de grupos ($J = 50$).

Para $\tau_0 = 0$ e $\sigma \neq 0$ quando $\gamma_{00} = 0$, o único ajuste que não apresentou taxas em torno de 5% foi o MLG. Já quando $\gamma_{00} = 1$, as taxas obtidas em QG3 foram as únicas que se aproximaram de 5%.

Para $\tau_0 \neq 0$ e $\sigma \neq 0$ quando $\gamma_{00} = 0$, somente os ajustes QGR, QG2 e QG3 apresentaram taxas estimadas em torno de 5% e que pouco variaram entre estes ajustes. Quando $\gamma_{00} = 1$ e $\tau_0 = \sigma = 0.5$, QG3 apresentou melhores taxas estimadas que QGR e QG2, em especial para $J = 50$. Com o aumento em σ de 0.5 para 1, apenas QG3 mostrou taxas de rejeição empíricas apropriadas. Para $\tau_0 = 1$ e $\sigma = 0.5$, QG3 apresentou as menores taxas estimadas, exceto em $J = n_j = 20$. Novamente observa-se que com o aumento em σ de 0.5 para 1, QG3 tornou-se o único ajuste que apresentou estimativas apropriadas das taxas de rejeição.

De acordo com comentários da seção anterior, as médias das estimativas dos EPs de $\hat{\gamma}_{00}$ foram sempre próximas dos desvios padrões das estimativas de γ_{00} tanto para $\gamma_{00} = 0$ quanto para $\gamma_{00} = 1$ nos ajustes QGR, QG2 e QG3. Mas as taxas de rejeição empíricas de QGR e QG2 ficaram próximas às de QG3 em $\gamma_{00} = 0$, enquanto que em $\gamma_{00} = 1$ em geral isto não ocorreu quando $\sigma \neq 0$,

que é justamente a única situação em que γ_{00} representa diferentes entidades nos Modelos 2 e 3.

Capítulo 4

Aplicação

Este capítulo traz uma aplicação na área de educação, realizada em Londrina-PR (veja Poli (2000)). Alunos da 1ª série do ensino fundamental de 8 diferentes escolas ($J = 8$) foram submetidos a uma avaliação composta por 20 itens ($K = 20$). Utilizando como variável resposta o número de acertos de cada aluno, avaliou-se este escore como uma medida de desempenho. O número de alunos por escola, n_j , foi no mínimo 43 e no máximo 101, resultando em $\sum_{j=1}^J n_j = 568$ alunos. Os dados foram avaliados pelos ajustes MLG, QV, QGR, QG2 e QG3 e os resultados estão na Tabela 4.1.

A Tabela 4.1 mostra que as estimativas pontuais de γ_{00} foram similares, porém quando se passou do ajuste do MLG para QV, de QV para QGR/QG2 e destes últimos para QG3 houve um aumento da variância do estimador $\hat{\gamma}_{00}$, resultando em intervalos de confiança (ICs) de 95% para $(1 + e^{-\gamma_{00}})^{-1}$ com amplitudes maiores, como já era esperado. É importante ressaltar as diferentes interpretações da quantidade $(1 + e^{-\gamma_{00}})^{-1}$ nos diferentes ajustes. No MLG e em QV, $(1 + e^{-\gamma_{00}})^{-1}$ representa a probabilidade média de acerto na população de alunos em geral. Já em QGR/QG2, retrata a probabilidade de acerto de um aluno de uma escola mediana (dado $\varepsilon_{0j} = 0$) e em QG3 corresponde à probabilidade de acerto de um aluno mediano de uma escola mediana (dados $\varepsilon_{0j} = a_{ij} = 0$).

O ajuste QG3 mostrou menor correlação intraclassa em relação a QGR/QG2, sendo que a estimativa do componente σ apresentou maior magnitude do que a de τ_0 , ou seja, a dependência

Tabela 4.1: Resultados da aplicação.

Quantidades	MLG	QV	QGR	QG2	QG3
$(1 + e^{-\hat{\gamma}_{00}})^{-1}$	0.5216	0.5216	0.5180	0.5177	0.5216
IC de 95%	[0.5124; 0.5307]	[0.5027; 0.5404]	[0.4364; 0.5986]	[0.4395; 0.5951]	[0.4316; 0.6101]
$\hat{\gamma}_{00}(\text{EP} [\hat{\gamma}_{00}])$	0.0863(0.0188)	0.0863(0.0386)	0.0719(0.1671)	0.0710(0.1602)	0.0863(0.1845)
$\hat{\tau}_0(\text{EP} [\hat{\tau}_0])$			0.4492(0.1212)	0.4497(0.1142)	0.5079(0.1332)
$\hat{\sigma}(\text{EP} [\hat{\sigma}])$					0.8330(0.0371)
$\hat{\phi}$		4.2270			
Corr $[\hat{\gamma}_{00}, \hat{\tau}_0]$			-0.2957	-0.0018	-0.0023
Corr $[\hat{\gamma}_{00}, \hat{\sigma}]$					0.0042
Corr $[\hat{\tau}_0, \hat{\sigma}]$					0.0183
Corr. intraclasse			0.5148	0.5154	0.2399
Desviância	2689.37		2125.42	2125.42	1388.73
GL	567		566	566	565
Log-verossim. *	-2241.11		-1959.14	-1959.14	-1590.79

*O valor para o modelo saturado é -896.43

entre alunos da mesma escola é menor do que entre as respostas aos itens dadas pelo mesmo aluno. As desviâncias apresentaram magnitudes bem superiores aos graus de liberdade (GL), indicando que mesmo que a distribuição qui-quadrado não seja apropriada, parece haver superdispersão no MLG, que se mantém em QGR, QG2 e QG3, embora neste último ela tenha sido a menor.

Com o objetivo de avaliar a qualidade do ajuste dos modelos 1, 2 e 3, foram construídos envelopes simulados sob os respectivos ajustes MLG, QG2 e QG3. Para o MLG, a construção do envelope simulado seguiu a abordagem usual (veja Paula (2004), por exemplo). Para o MLGH binomial-normal descrito pelos modelos 2 e 3, a definição de seus resíduos condicionais foi inspirada em Nobre (2004), que discutiu o uso de resíduos condicionais para modelos lineares mistos. Os resíduos condicionais obtidos sob os ajustes QG2 e QG3 foram então avaliados por meio dos componentes da função de desviância e também pelo resíduo de Pearson, cujas estimativas foram obtidas respectivamente por

$$\hat{r}_{D_{ij}} = \frac{\text{sinal} \left\{ y_{ij} - E \left[Y_{ij} \mid \hat{\varepsilon}_{0j}, \hat{a}_{ij}, \hat{\theta} \right] \right\}}{\left\{ 2 \log f \left(y_{ij} \mid p_{ij} = \frac{y_{ij}}{K} \right) - \log f \left(y_{ij} \mid p_{ij} = E \left[p_{ij} \mid \hat{\varepsilon}_{0j}, \hat{a}_{ij}, \hat{\theta} \right] \right) \right\}^{1/2}} \quad (4.1)$$

$$\hat{r}_{P_{ij}} = \frac{y_{ij} - E[Y_{ij} | \hat{\varepsilon}_{0j}, \hat{a}_{ij}, \hat{\boldsymbol{\theta}}]}{\left\{ \text{Var}[Y_{ij} | \hat{\varepsilon}_{0j}, \hat{a}_{ij}, \hat{\boldsymbol{\theta}}] \right\}^{1/2}}, \quad (4.2)$$

em que $\hat{\varepsilon}_{0j}$ e $\hat{a}_{ij}$ representam as modas *a posteriori* dos efeitos aleatórios e $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ são os estimadores de MV de $\boldsymbol{\theta} = (\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$. A utilização das modas *a posteriori* dos efeitos aleatórios em vez de suas médias *a posteriori*, como sugere por exemplo Fahrmeir e Tutz (2001), é vantajosa por não requerer integração e por elas serem facilmente obtidas maximizando uma quantidade que envolve apenas a distribuição condicional de Y_{ij} e as distribuições marginais de ε_{0j} e a_{ij} , ou seja:

$$\hat{\varepsilon}_{0j} = \arg \max_{\varepsilon_{0j}} \prod_{i=1}^{n_j} f(y_{ij} | \varepsilon_{0j}, \hat{\boldsymbol{\theta}}) f(\varepsilon_{0j} | \hat{\tau}_0) \quad (4.3)$$

e

$$(\hat{\varepsilon}_{0j}, \hat{a}_{1j}, \dots, \hat{a}_{n_jj}) = \arg \max_{(\varepsilon_{0j}, a_{1j}, \dots, a_{n_jj})} \prod_{i=1}^{n_j} f(y_{ij} | \varepsilon_{0j}, a_{ij}, \hat{\boldsymbol{\theta}}) f(a_{ij} | \hat{\sigma}) f(\varepsilon_{0j} | \hat{\tau}_0) \quad (4.4)$$

sob os ajustes QG2 e QG3 respectivamente.

Na construção dos envelopes para os ajustes QG2 e QG3, foram geradas 1367 amostras de 568 observações sob $\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}$. A partir de cada amostra foram estimados os efeitos aleatórios e obtidos os resíduos condicionais estimados tanto por (4.1) quanto por (4.2). Ordenaram-se os resíduos dentro de cada amostra e determinaram-se os quantis 0.005 e 0.995 para as estimativas de suas estatísticas de ordem, formando uma banda de confiança de 99%.

As Figuras 4.1, 4.2 e 4.3 apresentam os envelopes para os ajustes MLG, QG2 e QG3 respectivamente, indicando que apenas em QG3 não há indícios de que o modelo não esteja adequadamente ajustado. A Figura 4.4-(a) traz os *boxplots* das probabilidades observadas para cada escola. Já a Figura 4.4-(b) mostra os *boxplots* das probabilidades estimadas para cada escola pelo ajuste QG3, juntamente com as estimativas para cada escola sob o ajuste QG2, representadas pelo símbolo $\square$, e a estimativa sob o ajuste do MLG, dada pela linha tracejada. Observa-se que as medianas das probabilidades observadas ficaram bem próximas das medianas das probabilidades estimadas por QG3 enquanto que QG2 apresentou estimativas um pouco mais afastadas.

Figura 4.1: Envelopes para o ajuste do MLG com 99 % de confiança

Figura 4.2: Envelopes para o ajuste de QG2 com 99 % de confiança

Figura 4.3: Envelopes para o ajuste de QG3 com 99 % de confiança

Figura 4.4: *Boxplots* das probabilidades de acerto (a) observadas e (b) estimadas.

Capítulo 5

Conclusões

Este trabalho avaliou a introdução de um efeito aleatório no preditor linear do primeiro nível de um modelo linear generalizado hierárquico (MLGH) binomial-normal em dois níveis, de modo a contemplar a dependência entre respostas binárias de uma mesma unidade experimental do nível 1, uma das possíveis fontes de superdispersão. Uma aplicação para esta situação é a avaliação do desempenho de alunos em uma prova por meio do número de acertos (score), em que alunos e escolas representam as unidades do nível 1 e do nível 2, respectivamente.

Foram comparados 3 diferentes modelos com resposta binomial: o primeiro (Modelo 1) ajustado por meio da teoria usual de modelos lineares generalizados (MLGs), tanto por máxima verossimilhança (MV) quanto por quase-verossimilhança (QV); o segundo (Modelo 2) ajustado por meio da teoria de MLGHs em 2 níveis, fazendo uso de dois ajustes sob MV, utilizando a quadratura de Gauss-Hermite adaptativa (QGHA) e, por fim, o terceiro modelo (Modelo 3), em que se propõe adicionar um efeito aleatório ao nível 1 do MLGH binomial-normal e estimá-lo sob MV, também fazendo uso da QGHA.

Segundo os resultados de um estudo de simulação, foram discutidos os seguintes aspectos: 1) viés do estimador do componente de variância do nível 1 e do nível 2 (σ e τ_0 respectivamente); 2) viés do estimador de γ_{00} , que é a constante no preditor linear; 3) erro padrão (EP) de $\hat{\gamma}_{00}$; 4) taxa de rejeição empírica do teste de hipóteses $H_0 : \gamma_{00} = \gamma_{00}^*$ vs $H_a : \gamma_{00} \neq \gamma_{00}^*$, em que γ_{00}^* corresponde ao valor real do parâmetro, previamente fixado.

Houve grande dificuldade em empregar o método de QGHA para aproximar integrais em efeitos aleatórios de diferentes níveis, visto que o aumento, principalmente, no número de unidades do nível 1 aumentou consideravelmente o tempo computacional para a obtenção das estimativas. Este tempo tornou-se ainda maior com o emprego de métodos de otimização para selecionar pontos de quadratura em regiões que promovessem maior contribuição para a aproximação das integrais requeridas. O mapeamento do tempo e recursos computacionais utilizados podem ser de grande valor para pesquisas futuras.

Diante das dificuldades operacionais para ampliar os valores fixados para os parâmetros no estudo de simulação, as conclusões devem ser avaliadas como um estudo preliminar.

Para τ_0 e σ nulos, as estimativas de τ_0 , em média, foram similares entre os três modelos. Na presença do componente de variância τ_0 , em geral, o Modelo 3 apresentou menor viés para seu estimador do que o Modelo 2, principalmente na presença do componente de variância σ . Estes resultados indicam que o Modelo 3 é relativamente flexível com relação a reproduzir adequadamente os ajustes de seus submodelos.

Na presença apenas do componente σ , o Modelo 3 produziu, em média, estimativas de τ_0 muito mais próximas de zero do que o Modelo 2. O viés do estimador de τ_0 apresentou magnitude de 25 a 33% em relação ao viés obtido com o Modelo 2.

As taxas de rejeição empíricas de QGR e QG2 ficaram próximas às de QG3 em $\gamma_{00} = 0$, enquanto que em $\gamma_{00} = 1$ em geral isto não ocorreu quando $\sigma \neq 0$, ou seja, quando γ_{00} representa diferentes entidades nos Modelos 2 e 3.

Na presença de um efeito aleatório no nível 2, induzindo dependência entre alunos da mesma escola, o aumento no número de alunos (n_j) não contribuiu tanto quanto o aumento no número de escolas (J) para aumentar a precisão e diminuir o viés na estimação dos parâmetros. Especula-se que, analogamente, o aumento do número de respostas oriundas do mesmo aluno não contribua tanto quanto o aumento do número de alunos e/ou de escolas quando há um efeito aleatório no nível 1, uma vez que este efeito induz dependência entre as respostas de um mesmo indivíduo deste nível. Assim, sugere-se ampliar o estudo de simulação para outros conjuntos de parâmetros e tamanhos de amostra maiores, avaliando também diferentes números de respostas para um mesmo indivíduo. É desejável aumentar o número de réplicas das simulações para cada combinação dos

parâmetros populacionais e tamanhos de amostra, a fim de se aumentar a precisão das estimativas dos valores esperados, eliminando possíveis flutuações ao acaso presentes nos resultados. Outro ponto importante a ser investigado é a inclusão de covariáveis no modelo, de modo a contemplar qualquer variabilidade originada por fatores determinísticos, quase sempre presente em dados reais. É conveniente desenvolver ferramentas para testar a significância dos componentes de variância, hipóteses nulas $\tau_0 = 0$ e/ou $\sigma = 0$, que por serem testes na fronteira do espaço paramétrico inviabilizam a utilização da teoria assintótica convencional uma vez que as condições de regularidades usuais não estão satisfeitas.

Apêndice A

Esperanças e covariâncias marginais

Suponha que

$$Y_{ij}|p_{ij} \sim \text{binomial}(K, p_{ij}) , \text{ condicionalmente independentes } \forall i \text{ e } \forall j , \quad (\text{A.1})$$

em que $i = 1, 2, \dots, n_j$ é a identificação do aluno e $j = 1, 2, \dots, J$ é a identificação da escola.

Considere o MLGH a seguir.

Nível 1 : $\log \left(\frac{p_{ij}}{1 - p_{ij}} \right) = \beta_{0j} + \beta_{1j}X_{1ij} + \beta_{2j}X_{2ij} + \dots + \beta_{Qj}X_{Qij} + a_{ij} ,$

e

Nível 2 : $\beta_{0j} = \gamma_{00} + \sum_{s=1}^{S_0} \gamma_{0s}W_{0sj} + \varepsilon_{0j} ,$

$$\beta_{qj} = \gamma_{q0} + \sum_{s=1}^{S_q} \gamma_{qs}W_{qsj} , \quad (\text{A.2})$$

em que i e j correspondem às unidades dos níveis 1 e 2, respectivamente. Cada variável explicativa X_{qij} está associada à i -ésima unidade do nível 1 pertencente à j -ésima unidade do nível 2, com $q = 0, 1, 2, \dots, Q$ e $X_{0ij} = 1$. Já W_{qsj} representa uma variável independente associada ao j -ésimo grupo, $s = 1, 2, \dots, S_q$. No nível 1 tem-se os efeitos aleatórios a_{ij} , independentes $\forall i$ e $\forall j$, com $E[a_{ij}] = 0$ e $\text{Var}[a_{ij}] = \sigma^2$. No nível 2 apenas o coeficiente β_{0j} apresenta um componente aleatório,

dado pelos erros ε_{0j} , independentes $\forall j$, sendo $E[\varepsilon_{0j}] = 0$ e $\text{Var}[\varepsilon_{0j}] = \tau_0^2$. Considere também que ε_{0j} e a_{ij} são independentes.

Observa-se que a fusão dos dois níveis do modelo resulta numa combinação linear de efeitos fixos somada aos erros aleatórios a_{ij} e ε_{0j} . Para simplificar a notação, esta combinação linear será indicada como uma constante c_{ij} .

A.1 Cálculo de $E[p_{ij}]$, $\text{Var}[p_{ij}]$ e $\text{Cov}[p_{ij}, p_{i'j}]$

Sejam $\mathbf{b}_j$ um vetor de erros aleatórios com dimensão $(n_j + 1)$ e $\mathbf{G}_j(\mathbf{b}_j) = [g_i(\mathbf{b}_j)]_{i=1}^{n_j}$ um vetor de funções diferenciáveis.

Sob o Modelo A.2, p_{ij} pode ser escrita como

$$p_{ij} = \left(1 + e^{-c_{ij} - \mathbf{A}_{ij}^T \mathbf{b}_j}\right)^{-1} = g_i(\mathbf{b}_j), \quad (\text{A.3})$$

em que c_{ij} é uma combinação linear de efeitos fixos, $\mathbf{b}_j = [\varepsilon_{0j}, a_{1j}, a_{2j}, \dots, a_{n_j j}]$, $E[\mathbf{b}_j] = \mathbf{0}$, $\text{Cov}[\mathbf{b}_j] = \mathbf{\Sigma}$ e $\mathbf{A}_{ij} = [1, I_{1j}, I_{2j}, \dots, I_{n_j j}]^T$, com $I_{tj} = 1$ se $t = i$ e $I_{tj} = 0$ caso contrário.

Ainda sob o Modelo A.2,

$$\frac{\partial g_i(\mathbf{b}_j)}{\partial \varepsilon_{0j}} = e^{-c_{ij} - \mathbf{A}_{ij}^T \mathbf{b}_j} \left(1 + e^{-c_{ij} - \mathbf{A}_{ij}^T \mathbf{b}_j}\right)^{-2} \quad (\text{A.4})$$

e

$$\frac{\partial g_i(\mathbf{b}_j)}{\partial a_{tj}} = \begin{cases} \frac{\partial g_i(\mathbf{b}_j)}{\partial \varepsilon_{0j}} & \text{se } t = i, \quad t = 1, 2, \dots, n_j, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

de modo que

$$\mathbf{G}'_j(\mathbf{b}_j) = \text{diag} \left[\frac{\partial g_1(\mathbf{b}_j)}{\partial \varepsilon_{0j}}, \frac{\partial g_2(\mathbf{b}_j)}{\partial \varepsilon_{0j}}, \dots, \frac{\partial g_{n_j}(\mathbf{b}_j)}{\partial \varepsilon_{0j}} \right] [\mathbf{A}_{1j}^T, \mathbf{A}_{2j}^T, \dots, \mathbf{A}_{n_j j}^T]^T. \quad (\text{A.6})$$

Aproximando o vetor $\mathbf{G}_j(\mathbf{b}_j)$ por meio de uma expansão de Taylor de primeira ordem em

torno de $E[\mathbf{b}_j] = \mathbf{0}$, tem-se

$$\mathbf{G}_j(\mathbf{b}_j) \cong \mathbf{G}_j(E[\mathbf{b}_j]) + \mathbf{G}'_j(E[\mathbf{b}_j])(\mathbf{b}_j - E[\mathbf{b}_j]) \quad (\text{A.7})$$

de modo que

$$E[\mathbf{G}_j(\mathbf{b}_j)] \cong \mathbf{G}_j(E[\mathbf{b}_j]) + \mathbf{G}'_j(E[\mathbf{b}_j])(E[\mathbf{b}_j] - E[\mathbf{b}_j]) = \mathbf{G}_j(E[\mathbf{b}_j]) = \mathbf{G}_j(\mathbf{0}) \quad (\text{A.8})$$

e

$$\text{Cov}[\mathbf{G}_j(\mathbf{b}_j)] \cong \mathbf{G}'_j(E[\mathbf{b}_j])\text{Var}[\mathbf{b}_j]\mathbf{G}'_j(E[\mathbf{b}_j])^T = \mathbf{G}'_j(\mathbf{0})\mathbf{\Sigma}\mathbf{G}'_j(\mathbf{0})^T. \quad (\text{A.9})$$

Considere $i = 1, 2$ e $\mathbf{b}_j = [\varepsilon_{0j}, a_{1j}, a_{2j}]^T$, com $E[\mathbf{b}_j] = \mathbf{0}$ e $\mathbf{\Sigma} = \text{diag}[\tau_0^2, \sigma^2, \sigma^2]$. Nesse caso $\mathbf{G}_j(\mathbf{b}_j) = [g_1(\mathbf{b}_j), g_2(\mathbf{b}_j)]^T$ e $\mathbf{A}_{ij} = [1, I_{1j}, I_{2j}]^T$ e

$$\frac{\partial g_i(\mathbf{b}_j)}{\partial \varepsilon_{0j}} = \frac{\partial g_i(\mathbf{b}_j)}{\partial a_{ij}} = e^{-c_{ij}-\varepsilon_{0j}-a_{ij}} [1 + e^{-c_{ij}-\varepsilon_{0j}-a_{ij}}]^{-2}, \quad (\text{A.10})$$

de modo que a equação (A.9) fica expressa por

$$\begin{aligned} \text{Cov}[\mathbf{G}_j(\mathbf{b}_j)] &\cong \begin{bmatrix} \tau_0^2 \left(\frac{\partial g_1(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \right)^2 + \sigma^2 \left(\frac{\partial g_1(\mathbf{0})}{\partial a_{1j}} \right)^2 & \tau_0^2 \frac{\partial g_1(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \frac{\partial g_2(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \\ \tau_0^2 \frac{\partial g_1(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \frac{\partial g_2(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} & \tau_0^2 \left(\frac{\partial g_2(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \right)^2 + \sigma^2 \left(\frac{\partial g_2(\mathbf{0})}{\partial a_{2j}} \right)^2 \end{bmatrix} \\ &\cong \begin{bmatrix} (\tau_0^2 + \sigma^2) \left(\frac{\partial g_1(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \right)^2 & \tau_0^2 \frac{\partial g_1(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \frac{\partial g_2(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \\ \tau_0^2 \frac{\partial g_1(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \frac{\partial g_2(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} & (\tau_0^2 + \sigma^2) \left(\frac{\partial g_2(\mathbf{0})}{\partial \varepsilon_{0j}} \right)^2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Supondo que o vetor $\mathbf{b}_j$ tenha uma pequena variação em torno de $E[\mathbf{b}_j] = \mathbf{0}$, conclui-se então que

$$E[p_{ij}] \cong (1 + e^{-c_{ij}})^{-1}, \quad (\text{A.12})$$

$$\text{Var}[p_{ij}] \cong (\tau_0^2 + \sigma^2) [e^{-c_{ij}}(1 + e^{-c_{ij}})^{-2}]^2, \quad (\text{A.13})$$

$$\text{Cov}[p_{ij}, p_{i'j}] \cong \tau_0^2 e^{-c_{1j}-c_{2j}} [(1 + e^{-c_{1j}})(1 + e^{-c_{2j}})]^{-2} \quad (\text{A.14})$$

e

$$\text{Corr}[p_{ij}, p_{i'j}] \cong \tau_0^2 (\tau_0^2 + \sigma^2)^{-1}. \quad (\text{A.15})$$

A.2 Cálculo de $E[Y_{ij}]$, $\text{Var}[Y_{ij}]$ e $\text{Cov}[Y_{ij}, Y_{i'j}]$

$$E[Y_{ij}] = E\{E[Y_{ij}|p_{ij}]\} = KE[p_{ij}] \cong K(1 + e^{-c_{ij}})^{-1}, \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} \text{Var}[Y_{ij}] &= E\{\text{Var}[Y_{ij}|p_{ij}]\} + \text{Var}\{E[Y_{ij}|p_{ij}]\} \\ &= E[\phi K p_{ij}(1 - p_{ij})] + \text{Var}[K p_{ij}] \\ &= \phi K (E[p_{ij}] - E[p_{ij}^2]) + K^2 \text{Var}[p_{ij}] \\ &= \phi K (E[p_{ij}] - E^2[p_{ij}] - \text{Var}[p_{ij}]) + K^2 \text{Var}[p_{ij}] \\ &= \phi K E[p_{ij}] (1 - E[p_{ij}]) + K(K - \phi) \text{Var}[p_{ij}] \\ &\cong \phi K e^{-c_{ij}} (1 + e^{-c_{ij}})^{-2} + K(K - \phi)(\tau_0^2 + \sigma^2) [e^{-c_{ij}} (1 + e^{-c_{ij}})^{-2}]^2 \\ &\cong K e^{-c_{ij}} (1 + e^{-c_{ij}})^{-2} [\phi + (\tau_0^2 + \sigma^2)(K - \phi) e^{-c_{ij}} (1 + e^{-c_{ij}})^{-2}]^2, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} \text{Cov}[Y_{ij}, Y_{i'j}] &= E[Y_{ij} Y_{i'j}] - E[Y_{ij}] E[Y_{i'j}] \\ &= E\{E[Y_{ij} Y_{i'j} | p_{ij}, p_{i'j}]\} - E\{E[Y_{ij} | p_{ij}]\} E\{E[Y_{i'j} | p_{i'j}]\} \\ &= E\{E[Y_{ij} | p_{ij}] E[Y_{i'j} | p_{i'j}]\} - K^2 E[p_{ij}] E[p_{i'j}] \\ &= K^2 E[p_{ij} p_{i'j}] - K^2 E[p_{ij}] E[p_{i'j}] \\ &= K^2 \text{Cov}[p_{ij}, p_{i'j}] \\ &\cong K^2 \tau_0^2 e^{-c_{ij} - c_{i'j}} [(1 + e^{-c_{ij}})(1 + e^{-c_{i'j}})]^{-2} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

e

$$\begin{aligned} \text{Corr}[Y_{ij}, Y_{i'j}] &= \frac{\text{Cov}[Y_{ij}, Y_{i'j}]}{\{\text{Var}[Y_{ij}] \text{Var}[Y_{i'j}]\}^{1/2}} \\ &\cong \prod_{t \in (i, i')} \frac{K^2 \tau_0^2 e^{-c_{tj}} (1 + e^{-c_{tj}})^{-2}}{\{K e^{-c_{tj}} (1 + e^{-c_{tj}})^{-2} [\phi + (K - \phi)(\tau_0^2 + \sigma^2) e^{-c_{tj}} (1 + e^{-c_{tj}})^{-2}]\}^{1/2}} \\ &\cong K \tau_0^2 \prod_{t \in (i, i')} \left[\frac{e^{-c_{tj}} (1 + e^{-c_{tj}})^{-2}}{\phi + (K - \phi)(\tau_0^2 + \sigma^2) e^{-c_{tj}} (1 + e^{-c_{tj}})^{-2}} \right]^{1/2} \\ &\cong K \tau_0^2 \prod_{t \in (i, i')} \left\{ \phi [e^{-c_{tj}} (1 + e^{-c_{tj}})^{-2}]^{-1} + (\tau_0^2 + \sigma^2)(K - \phi) \right\}^{-1/2} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Apêndice B

Tabelas

Tabela B.1: Média das estimativas de τ_0 sob QGR, QG2 e QG3 e de σ sob QG3, quando $\gamma_{00} = 0$.

Valores fixados				Média das estimativas de τ_0			% relativa a QG3		Média das estimativas de σ
τ_0	σ	J	n_j	QGR	QG2	QG3	QGR	QG2	
0	0	20	20	0.0178	0.0181	0.0174	102	104	0.0433
0	0	20	50	0.0108	0.0111	0.0111	98	100	0.0357
0	0	50	20	0.0174	0.0178	0.0170	103	105	0.0351
0	0	50	50	0.0100	0.0105	0.0103	98	102	0.0296
0.5	0	20	20	0.4794	0.4794	0.5047	95	95	0.0535
0.5	0	20	50	0.4794	0.4794	0.6358	75	75	0.0478
0.5	0	50	20	0.4899	0.4899	0.5252	93	93	0.0451
0.5	0	50	50	0.4925	0.4925	0.6701	73	73	0.0413
1	0	20	20	0.9571	0.9571	0.9600	100	100	0.0564
1	0	20	50	0.9656	0.9656	0.9737	99	99	0.0436
1	0	50	20	0.9884	0.9884	0.9895	100	100	0.0413
1	0	50	50	0.9859	0.9858	0.9897	100	100	0.0348
0	0.5	20	20	0.0934	0.0934	0.0294	318	318	0.4953
0	0.5	20	50	0.0580	0.0580	0.0192	302	302	0.4973
0	0.5	50	20	0.0985	0.0985	0.0242	408	408	0.4979
0	0.5	50	50	0.0626	0.0626	0.0161	389	389	0.4989
0	1	20	20	0.1716	0.1716	0.0460	373	373	0.9949
0	1	20	50	0.1094	0.1094	0.0307	357	357	0.9980
0	1	50	20	0.1794	0.1794	0.0417	431	431	0.9956
0	1	50	50	0.1126	0.1126	0.0259	436	436	0.9983
0.5	0.5	20	20	0.4636	0.4636	0.4764	97	97	0.4992
0.5	0.5	20	50	0.4587	0.4587	0.5149	89	89	0.5001
0.5	0.5	50	20	0.4768	0.4768	0.4914	97	97	0.4995
0.5	0.5	50	50	0.4679	0.4679	0.5374	87	87	0.5010
0.5	1	20	20	0.4345	0.4345	0.4677	93	93	1.0012
0.5	1	20	50	0.4148	0.4149	0.4778	87	87	0.9989
0.5	1	50	20	0.4498	0.4498	0.4889	92	92	0.9995
0.5	1	50	50	0.4252	0.4252	0.4917	86	86	1.0006
1	0.5	20	20	0.9265	0.9265	0.9643	96	96	0.5007
1	0.5	20	50	0.9124	0.9124	0.9553	96	96	0.5001
1	0.5	50	20	0.9480	0.9480	0.9874	96	96	0.4987
1	0.5	50	50	0.9419	0.9419	0.9862	96	96	0.5000
1	1	20	20	0.8425	0.8425	0.9682	87	87	0.9997
1	1	20	50	0.8166	0.8166	0.9574	85	85	0.9987
1	1	50	20	0.8535	0.8535	0.9818	87	87	1.0008
1	1	50	50	0.8394	0.8395	0.9849	85	85	0.9996

Tabela B.2: Média das estimativas de τ_0 sob QGR, QG2 e QG3 e de σ sob QG3, quando $\gamma_{00} = 1$.

Valores fixados				Média das estimativas de τ_0			% relativa a QG3		Média das estimativas de σ
τ_0	σ	J	n_j	QGR	QG2	QG3	QGR	QG2	
0	0	20	20	0.0210	0.0212	0.0197	107	108	0.0489
0	0	20	50	0.0123	0.0126	0.0118	105	108	0.0406
0	0	50	20	0.0184	0.0189	0.0175	106	108	0.0404
0	0	50	50	0.0118	0.0123	0.0113	105	109	0.0321
0.5	0	20	20	0.4802	0.4802	0.4968	97	97	0.0590
0.5	0	20	50	0.4834	0.4834	0.6109	79	79	0.0511
0.5	0	50	20	0.4941	0.4941	0.5202	95	95	0.0480
0.5	0	50	50	0.4919	0.4919	0.6494	76	76	0.0424
1	0	20	20	0.9608	0.9608	0.9613	100	100	0.0641
1	0	20	50	0.9604	0.9604	0.9671	99	99	0.0484
1	0	50	20	0.9848	0.9848	0.9859	100	100	0.0482
1	0	50	50	0.9826	0.9826	0.9874	100	100	0.0370
0	0.5	20	20	0.0925	0.0926	0.0306	302	302	0.4961
0	0.5	20	50	0.0585	0.0586	0.0195	300	300	0.4978
0	0.5	50	20	0.1000	0.1001	0.0258	388	388	0.4966
0	0.5	50	50	0.0634	0.0634	0.0164	387	387	0.4984
0	1	20	20	0.1768	0.1768	0.0432	410	410	0.9961
0	1	20	50	0.1125	0.1125	0.0295	381	381	0.9986
0	1	50	20	0.1858	0.1858	0.0425	437	437	0.9971
0	1	50	50	0.1169	0.1170	0.0271	431	431	0.9984
0.5	0.5	20	20	0.4722	0.4722	0.4813	98	98	0.4994
0.5	0.5	20	50	0.4679	0.4679	0.5154	91	91	0.5003
0.5	0.5	50	20	0.4840	0.4840	0.4949	98	98	0.4997
0.5	0.5	50	50	0.4751	0.4751	0.5359	89	89	0.5020
0.5	1	20	20	0.4492	0.4492	0.4753	95	95	0.9993
0.5	1	20	50	0.4196	0.4196	0.4744	88	88	0.9996
0.5	1	50	20	0.4598	0.4598	0.4896	94	94	0.9998
0.5	1	50	50	0.4343	0.4343	0.4930	88	88	0.9998
1	0.5	20	20	0.9258	0.9258	0.9568	97	97	0.5000
1	0.5	20	50	0.9311	0.9311	0.9663	96	96	0.4995
1	0.5	50	20	0.9515	0.9515	0.9856	97	97	0.4993
1	0.5	50	50	0.9459	0.9460	0.9858	96	96	0.5002
1	1	20	20	0.8481	0.8481	0.9597	88	88	0.9996
1	1	20	50	0.8312	0.8312	0.9582	87	87	0.9992
1	1	50	20	0.8688	0.8688	0.9846	88	88	0.9996
1	1	50	50	0.8478	0.8478	0.9804	86	86	0.9993

Tabela B.3: Viés estimado de $\hat{\gamma}_{00}$ sob cada ajuste, quando $\gamma_{00} = 0$.

Valores fixados				Viés				% relativa a QG3**		
τ_0	σ	J	n_j	MLG*	QGR	QG2	QG3	MLG*	QGR	QG2
0	0	20	20	-0.00056	-0.00056	-0.00056	-0.00057	99.9	99.7	99.6
0	0	20	50	-0.00014	-0.00014	-0.00013	-0.00014	98.9	98.9	94.6
0	0	50	20	-0.00001	-0.00001	-0.00001	-0.00001	105.4	107.1	158.1
0	0	50	50	-0.00025	-0.00025	-0.00025	-0.00025	99.9	100.1	100.0
0.5	0	20	20	-0.00300	-0.00315	-0.00314	-0.00269	111.6	117.1	117.0
0.5	0	20	50	0.00174	0.00166	0.00166	0.00154	112.9	107.7	107.4
0.5	0	50	20	0.00189	0.00214	0.00215	0.00250	75.8	85.6	85.9
0.5	0	50	50	0.00079	0.00081	0.00079	0.00051	153.0	158.6	154.8
1	0	20	20	0.00458	0.00690	0.00692	0.00702	65.3	98.3	98.5
1	0	20	50	-0.00553	-0.00696	-0.00697	-0.00671	82.4	103.8	103.9
1	0	50	20	0.00038	0.00075	0.00074	0.00075	50.6	98.9	98.4
1	0	50	50	0.00180	0.00199	0.00192	0.00194	92.5	102.5	98.6
0	0.5	20	20	-0.00101	-0.00101	-0.00102	-0.00106	95.4	95.6	95.9
0	0.5	20	50	0.00015	0.00015	0.00015	0.00017	89.8	89.8	91.3
0	0.5	50	20	0.00017	0.00017	0.00017	0.00018	96.9	96.2	96.1
0	0.5	50	50	0.00037	0.00037	0.00037	0.00039	93.6	93.8	94.9
0	1	20	20	0.00233	0.00234	0.00235	0.00281	82.9	83.3	83.5
0	1	20	50	0.00055	0.00056	0.00056	0.00081	68.5	68.7	69.2
0	1	50	20	0.00047	0.00047	0.00047	0.00044	107.4	107.9	107.1
0	1	50	50	0.00038	0.00038	0.00039	0.00041	93.3	93.7	94.2
0.5	0.5	20	20	-0.00144	-0.00130	-0.00130	-0.00127	113.5	102.3	102.3
0.5	0.5	20	50	-0.00238	-0.00242	-0.00243	-0.00242	98.4	100.0	100.5
0.5	0.5	50	20	0.00273	0.00289	0.00289	0.00300	91.1	96.4	96.5
0.5	0.5	50	50	-0.00030	-0.00033	-0.00035	-0.00037	79.9	87.7	93.2
0.5	1	20	20	0.00003	0.00018	0.00018	0.00023	13.8	79.0	77.1
0.5	1	20	50	-0.00649	-0.00694	-0.00691	-0.00835	77.8	83.2	82.8
0.5	1	50	20	-0.00021	-0.00025	-0.00026	-0.00031	68.4	80.7	83.8
0.5	1	50	50	0.00086	0.00094	0.00092	0.00119	71.9	78.7	77.1
1	0.5	20	20	-0.00071	-0.00118	-0.00119	-0.00102	69.0	115.9	116.6
1	0.5	20	50	0.00231	0.00351	0.00353	0.00413	55.9	85.1	85.5
1	0.5	50	20	0.00291	0.00304	0.00303	0.00325	89.6	93.6	93.3
1	0.5	50	50	0.00294	0.00353	0.00348	0.00378	77.7	93.3	92.1
1	1	20	20	0.00299	0.00308	0.00307	0.00400	74.9	76.9	76.8
1	1	20	50	0.00717	0.00790	0.00792	0.00959	74.8	82.4	82.6
1	1	50	20	0.00069	0.00061	0.00059	0.00060	115.2	101.9	98.3
1	1	50	50	0.00476	0.00582	0.00581	0.00695	68.5	83.8	83.6

* Idem para QV;

** valores negativos correspondem a vieses com sentidos opostos

Tabela B.4: Viés estimado de $\hat{\gamma}_{00}$ sob cada ajuste, quando $\gamma_{00} = 1$.

Valores fixados				Viés				% relativa a QG3**		
τ_0	σ	J	n_j	MLG*	QGR	QG2	QG3	MLG*	QGR	QG2
0	0	20	20	0.00062	0.00092	0.00092	0.00237	26.2	39.0	38.9
0	0	20	50	0.00006	0.00017	0.00018	0.00112	5.5	15.6	15.8
0	0	50	20	0.00004	0.00026	0.00026	0.00120	3.4	21.6	21.6
0	0	50	50	0.00038	0.00046	0.00047	0.00104	36.1	44.6	45.4
0.5	0	20	20	-0.05071	-0.00067	-0.00067	-0.00532	953.4	12.6	12.6
0.5	0	20	50	-0.04986	0.00083	0.00084	-0.03015	165.4	-2.8	-2.8
0.5	0	50	20	-0.05520	-0.00337	-0.00339	-0.01321	417.9	25.5	25.7
0.5	0	50	50	-0.04986	0.00170	0.00167	-0.03893	128.1	-4.4	-4.3
1	0	20	20	-0.17047	-0.01145	-0.01142	-0.01106	1541.4	103.5	103.2
1	0	20	50	-0.15814	0.00220	0.00218	-0.00083	18974.8	-263.8	-262.1
1	0	50	20	-0.16931	-0.00499	-0.00500	-0.00411	4121.0	121.6	121.8
1	0	50	50	-0.17439	-0.01117	-0.01114	-0.01142	1526.9	97.8	97.5
0	0.5	20	20	-0.05437	-0.05212	-0.05212	-0.00179	3040.6	2915.0	2915.0
0	0.5	20	50	-0.05181	-0.05091	-0.05092	0.00077	-6771.0	-6653.9	-6654.3
0	0.5	50	20	-0.05315	-0.05082	-0.05082	-0.00073	7276.7	6958.4	6957.9
0	0.5	50	50	-0.05297	-0.05204	-0.05204	-0.00047	11256.0	11057.2	11056.7
0	1	20	20	-0.16672	-0.16027	-0.16027	0.00175	-9524.7	-9156.6	-9156.5
0	1	20	50	-0.16794	-0.16533	-0.16533	0.00036	-46074.3	-45356.7	-45356.0
0	1	50	20	-0.16893	-0.16205	-0.16206	-0.00096	17560.3	16845.2	16845.6
0	1	50	50	-0.16840	-0.16567	-0.16567	-0.00052	32078.4	31557.8	31558.2
0.5	0.5	20	20	-0.09493	-0.04838	-0.04839	-0.00011	85619.9	43636.1	43649.3
0.5	0.5	20	50	-0.09909	-0.05352	-0.05352	-0.01170	846.9	457.5	457.4
0.5	0.5	50	20	-0.09532	-0.04728	-0.04729	0.00071	-13437.0	-6665.1	-6666.9
0.5	0.5	50	50	-0.09412	-0.04779	-0.04780	-0.01000	941.1	477.8	477.9
0.5	1	20	20	-0.19759	-0.15950	-0.15949	-0.00223	8849.4	7143.6	7143.1
0.5	1	20	50	-0.19391	-0.16041	-0.16041	0.00171	-11339.7	-9380.3	-9380.3
0.5	1	50	20	-0.19492	-0.15553	-0.15553	0.00231	-8430.1	-6726.7	-6726.6
0.5	1	50	50	-0.19661	-0.16143	-0.16143	0.00032	-61804.7	-50746.8	-50746.2
1	0.5	20	20	-0.18469	-0.03702	-0.03699	0.00703	-2626.3	-526.4	-526.0
1	0.5	20	50	-0.19261	-0.04537	-0.04537	-0.00187	10272.8	2419.7	2419.6
1	0.5	50	20	-0.20071	-0.05124	-0.05124	-0.00746	2689.4	686.6	686.6
1	0.5	50	50	-0.19721	-0.04850	-0.04847	-0.00338	5839.4	1436.0	1435.3
1	1	20	20	-0.27292	-0.15831	-0.15829	-0.01247	2188.9	1269.7	1269.5
1	1	20	50	-0.26258	-0.14970	-0.14972	0.00184	-14249.7	-8124.0	-8124.8
1	1	50	20	-0.26780	-0.14897	-0.14892	-0.00129	20751.2	11543.0	11539.7
1	1	50	50	-0.26515	-0.15080	-0.15080	0.00131	-20176.2	-11474.9	-11475.4

* Idem para QV; ** valores negativos correspondem a vieses com sentidos opostos

Tabela B.5: Média dos EPs estimados de $\hat{\gamma}_{00}$ sob cada ajuste, quando $\gamma_{00} = 0$.

Valores fixados				Média dos EPs					% relativa a QG3			
τ_0	σ	J	n_j	MLG	QV	QGR	QG2	QG3	MLG	QV	QGR	QG2
0	0	20	20	0.0224	0.0223	0.0227	0.0234	0.0235	95	95	97	99
0	0	20	50	0.0141	0.0141	0.0144	0.0148	0.0149	95	95	97	99
0	0	50	20	0.0141	0.0141	0.0145	0.0147	0.0148	96	96	98	99
0	0	50	50	0.0089	0.0089	0.0091	0.0093	0.0093	96	96	98	100
0.5	0	20	20	0.0224	0.0316	0.1125	0.1097	0.1079	21	29	104	102
0.5	0	20	50	0.0142	0.0200	0.1115	0.1082	0.1112	13	18	100	97
0.5	0	50	20	0.0142	0.0201	0.0721	0.0708	0.0702	20	29	103	101
0.5	0	50	50	0.0090	0.0128	0.0716	0.0703	0.0763	12	17	94	92
1	0	20	20	0.0225	0.0455	0.2254	0.2156	0.2158	10	21	104	100
1	0	20	50	0.0142	0.0289	0.2257	0.2165	0.2163	7	13	104	100
1	0	50	20	0.0142	0.0292	0.1452	0.1407	0.1409	10	21	103	100
1	0	50	50	0.0090	0.0184	0.1435	0.1398	0.1401	6	13	102	100
0	0.5	20	20	0.0224	0.0321	0.0313	0.0312	0.0355	63	90	88	88
0	0.5	20	50	0.0141	0.0203	0.0196	0.0196	0.0225	63	90	87	87
0	0.5	50	20	0.0141	0.0203	0.0200	0.0200	0.0222	64	92	90	90
0	0.5	50	50	0.0089	0.0128	0.0127	0.0127	0.0141	64	91	90	90
0	1	20	20	0.0224	0.0464	0.0450	0.0447	0.0584	38	79	77	77
0	1	20	50	0.0141	0.0293	0.0285	0.0284	0.0370	38	79	77	77
0	1	50	20	0.0141	0.0293	0.0293	0.0291	0.0365	39	80	80	80
0	1	50	50	0.0089	0.0185	0.0184	0.0183	0.0231	39	80	79	79
0.5	0.5	20	20	0.0224	0.0380	0.1091	0.1063	0.1119	20	34	97	95
0.5	0.5	20	50	0.0142	0.0240	0.1068	0.1036	0.1075	13	22	99	96
0.5	0.5	50	20	0.0142	0.0241	0.0702	0.0690	0.0727	19	33	97	95
0.5	0.5	50	50	0.0089	0.0152	0.0679	0.0668	0.0702	13	22	97	95
0.5	1	20	20	0.0224	0.0491	0.1025	0.0999	0.1194	19	41	86	84
0.5	1	20	50	0.0142	0.0311	0.0965	0.0939	0.1126	13	28	86	83
0.5	1	50	20	0.0141	0.0311	0.0664	0.0653	0.0779	18	40	85	84
0.5	1	50	50	0.0089	0.0197	0.0618	0.0608	0.0729	12	27	85	83
1	0.5	20	20	0.0225	0.0488	0.2179	0.2088	0.2186	10	22	100	96
1	0.5	20	50	0.0142	0.0308	0.2135	0.2047	0.2140	7	14	100	96
1	0.5	50	20	0.0142	0.0310	0.1394	0.1350	0.1415	10	22	99	95
1	0.5	50	50	0.0090	0.0196	0.1370	0.1336	0.1401	6	14	98	95
1	1	20	20	0.0224	0.0556	0.1979	0.1901	0.2241	10	25	88	85
1	1	20	50	0.0142	0.0350	0.1907	0.1833	0.2171	7	16	88	84
1	1	50	20	0.0142	0.0351	0.1254	0.1217	0.1436	10	24	87	85
1	1	50	50	0.0090	0.0222	0.1223	0.1191	0.1412	6	16	87	84

Tabela B.6: Média dos EPs estimados de $\hat{\gamma}_{00}$ sob cada ajuste, quando $\gamma_{00} = 1$.

Valores fixados				Média dos EPs					% relativa a QG3			
τ_0	σ	J	n_j	MLG	QV	QGR	QG2	QG3	MLG	QV	QGR	QG2
0	0	20	20	0.0252	0.0252	0.0258	0.0264	0.0268	94	94	96	99
0	0	20	50	0.0159	0.0159	0.0162	0.0167	0.0168	95	95	96	99
0	0	50	20	0.0159	0.0159	0.0162	0.0165	0.0167	96	96	97	99
0	0	50	50	0.0101	0.0101	0.0103	0.0105	0.0105	96	96	98	99
0.5	0	20	20	0.0250	0.0338	0.1135	0.1106	0.1104	23	31	103	100
0.5	0	20	50	0.0158	0.0214	0.1124	0.1094	0.1134	14	19	99	96
0.5	0	50	20	0.0158	0.0215	0.0732	0.0718	0.0723	22	30	101	99
0.5	0	50	50	0.0100	0.0136	0.0716	0.0704	0.0788	13	17	91	89
1	0	20	20	0.0244	0.0476	0.2267	0.2169	0.2167	11	22	105	100
1	0	20	50	0.0155	0.0301	0.2246	0.2156	0.2163	7	14	104	100
1	0	50	20	0.0154	0.0305	0.1454	0.1405	0.1407	11	22	103	100
1	0	50	50	0.0097	0.0193	0.1433	0.1395	0.1400	7	14	102	100
0	0.5	20	20	0.0249	0.0342	0.0333	0.0333	0.0380	65	90	88	87
0	0.5	20	50	0.0158	0.0216	0.0210	0.0210	0.0241	65	90	87	87
0	0.5	50	20	0.0158	0.0216	0.0214	0.0214	0.0237	67	91	90	90
0	0.5	50	50	0.0100	0.0137	0.0135	0.0135	0.0150	66	91	90	90
0	1	20	20	0.0243	0.0487	0.0470	0.0468	0.0602	40	81	78	78
0	1	20	50	0.0154	0.0308	0.0298	0.0297	0.0382	40	81	78	78
0	1	50	20	0.0154	0.0308	0.0307	0.0306	0.0378	41	81	81	81
0	1	50	50	0.0097	0.0195	0.0193	0.0192	0.0239	41	81	81	81
0.5	0.5	20	20	0.0247	0.0401	0.1117	0.1088	0.1139	22	35	98	96
0.5	0.5	20	50	0.0156	0.0254	0.1089	0.1059	0.1097	14	23	99	97
0.5	0.5	50	20	0.0156	0.0255	0.0717	0.0704	0.0737	21	35	97	96
0.5	0.5	50	50	0.0099	0.0161	0.0692	0.0680	0.0715	14	23	97	95
0.5	1	20	20	0.0242	0.0515	0.1062	0.1036	0.1217	20	42	87	85
0.5	1	20	50	0.0153	0.0325	0.0978	0.0952	0.1122	14	29	87	85
0.5	1	50	20	0.0153	0.0326	0.0682	0.0670	0.0786	19	42	87	85
0.5	1	50	50	0.0097	0.0206	0.0633	0.0622	0.0732	13	28	86	85
1	0.5	20	20	0.0244	0.0508	0.2186	0.2091	0.2176	11	23	100	96
1	0.5	20	50	0.0154	0.0323	0.2180	0.2090	0.2171	7	15	100	96
1	0.5	50	20	0.0153	0.0325	0.1404	0.1358	0.1416	11	23	99	96
1	0.5	50	50	0.0097	0.0205	0.1380	0.1343	0.1402	7	15	98	96
1	1	20	20	0.0239	0.0578	0.1999	0.1917	0.2230	11	26	90	86
1	1	20	50	0.0152	0.0366	0.1948	0.1867	0.2173	7	17	90	86
1	1	50	20	0.0151	0.0367	0.1283	0.1241	0.1444	10	25	89	86
1	1	50	50	0.0096	0.0232	0.1237	0.1204	0.1407	7	16	88	86

Tabela B.7: DP das estimativas de γ_{00} sob cada ajuste, quando $\gamma_{00} = 0$.

Valores fixados				DPs				% relativa a QG3		
τ_0	σ	J	n_j	MLG*	QGR	QG2	QG3	MLG	QGR	QG2
0	0	20	20	0.02253	0.02253	0.02254	0.02256	99.9	99.9	99.9
0	0	20	50	0.01398	0.01398	0.01397	0.01399	99.9	99.9	99.9
0	0	50	20	0.01414	0.01415	0.01414	0.01416	99.9	99.9	99.9
0	0	50	50	0.00886	0.00886	0.00885	0.00887	99.9	99.9	99.8
0.5	0	20	20	0.10717	0.11314	0.11314	0.11309	94.8	100.1	100.0
0.5	0	20	50	0.10763	0.11376	0.11379	0.11761	91.5	96.7	96.7
0.5	0	50	20	0.06805	0.07177	0.07178	0.07070	96.2	101.5	101.5
0.5	0	50	50	0.06865	0.07272	0.07272	0.07540	91.0	96.4	96.4
1	0	20	20	0.19218	0.22818	0.22816	0.22815	84.2	100.0	100.0
1	0	20	50	0.19262	0.22795	0.22795	0.22619	85.2	100.8	100.8
1	0	50	20	0.11858	0.14157	0.14159	0.14166	83.7	99.9	99.9
1	0	50	50	0.11675	0.13966	0.13968	0.13961	83.6	100.0	100.0
0	0.5	20	20	0.03125	0.03132	0.03132	0.03307	94.5	94.7	94.7
0	0.5	20	50	0.02001	0.02002	0.02003	0.02118	94.5	94.5	94.6
0	0.5	50	20	0.02050	0.02055	0.02056	0.02172	94.4	94.6	94.6
0	0.5	50	50	0.01298	0.01299	0.01299	0.01377	94.3	94.4	94.4
0	1	20	20	0.04470	0.04502	0.04502	0.05431	82.3	82.9	82.9
0	1	20	50	0.02956	0.02965	0.02965	0.03578	82.6	82.9	82.9
0	1	50	20	0.02931	0.02955	0.02955	0.03537	82.9	83.5	83.5
0	1	50	50	0.01845	0.01851	0.01852	0.02226	82.9	83.2	83.2
0.5	0.5	20	20	0.10446	0.10970	0.10970	0.11562	90.4	94.9	94.9
0.5	0.5	20	50	0.10466	0.11002	0.11004	0.11667	89.7	94.3	94.3
0.5	0.5	50	20	0.06544	0.06902	0.06902	0.07268	90.0	95.0	95.0
0.5	0.5	50	50	0.06760	0.07098	0.07099	0.07438	90.9	95.4	95.4
0.5	1	20	20	0.09944	0.10422	0.10422	0.12449	79.9	83.7	83.7
0.5	1	20	50	0.09592	0.09997	0.09998	0.11982	80.1	83.4	83.4
0.5	1	50	20	0.06292	0.06597	0.06598	0.07854	80.1	84.0	84.0
0.5	1	50	50	0.05722	0.05977	0.05978	0.07175	79.7	83.3	83.3
1	0.5	20	20	0.18170	0.21479	0.21481	0.22503	80.7	95.5	95.5
1	0.5	20	50	0.18544	0.21784	0.21790	0.22805	81.3	95.5	95.5
1	0.5	50	20	0.11404	0.13523	0.13525	0.14169	80.5	95.4	95.5
1	0.5	50	50	0.11536	0.13639	0.13646	0.14305	80.6	95.3	95.4
1	1	20	20	0.16872	0.19557	0.19562	0.23070	73.1	84.8	84.8
1	1	20	50	0.16104	0.18460	0.18460	0.21793	73.9	84.7	84.7
1	1	50	20	0.10778	0.12500	0.12503	0.14723	73.2	84.9	84.9
1	1	50	50	0.10114	0.11618	0.11620	0.13788	73.4	84.3	84.3

* Idem para QV

Tabela B.8: DP das estimativas de γ_{00} sob cada ajuste, quando $\gamma_{00} = 1$.

Valores fixados				DPs				% relativa a QG3		
τ_0	σ	J	n_j	MLG*	QGR	QG2	QG3	MLG	QGR	QG2
0	0	20	20	0.02563	0.02566	0.02566	0.02581	99.3	99.4	99.4
0	0	20	50	0.01546	0.01546	0.01547	0.01554	99.5	99.5	99.5
0	0	50	20	0.01567	0.01568	0.01568	0.01586	98.9	98.9	98.9
0	0	50	50	0.01008	0.01008	0.01008	0.01015	99.3	99.3	99.2
0.5	0	20	20	0.11040	0.11409	0.11409	0.11508	95.9	99.1	99.1
0.5	0	20	50	0.10853	0.11256	0.11256	0.11727	92.5	96.0	96.0
0.5	0	50	20	0.06977	0.07242	0.07243	0.07380	94.5	98.1	98.1
0.5	0	50	50	0.06957	0.07228	0.07229	0.07524	92.5	96.1	96.1
1	0	20	20	0.19432	0.22382	0.22380	0.22421	86.7	99.8	99.8
1	0	20	50	0.20108	0.23063	0.23060	0.23124	87.0	99.7	99.7
1	0	50	20	0.12383	0.14330	0.14329	0.14352	86.3	99.8	99.8
1	0	50	50	0.11916	0.13715	0.13712	0.13710	86.9	100.0	100.0
0	0.5	20	20	0.03379	0.03387	0.03387	0.03588	94.2	94.4	94.4
0	0.5	20	50	0.02208	0.02208	0.02208	0.02353	93.8	93.8	93.8
0	0.5	50	20	0.02113	0.02122	0.02122	0.02261	93.5	93.9	93.9
0	0.5	50	50	0.01392	0.01393	0.01394	0.01487	93.6	93.7	93.8
0	1	20	20	0.04661	0.04710	0.04711	0.05581	83.5	84.4	84.4
0	1	20	50	0.03104	0.03116	0.03117	0.03682	84.3	84.6	84.6
0	1	50	20	0.03037	0.03065	0.03066	0.03608	84.2	85.0	85.0
0	1	50	50	0.01968	0.01973	0.01974	0.02320	84.9	85.1	85.1
0.5	0.5	20	20	0.10746	0.11104	0.11104	0.11622	92.5	95.5	95.5
0.5	0.5	20	50	0.10180	0.10582	0.10582	0.11264	90.4	93.9	93.9
0.5	0.5	50	20	0.06972	0.07265	0.07265	0.07599	91.7	95.6	95.6
0.5	0.5	50	50	0.06887	0.07151	0.07149	0.07687	89.6	93.0	93.0
0.5	1	20	20	0.10035	0.10438	0.10440	0.12244	82.0	85.3	85.3
0.5	1	20	50	0.09655	0.09973	0.09974	0.11786	81.9	84.6	84.6
0.5	1	50	20	0.06598	0.06913	0.06914	0.08097	81.5	85.4	85.4
0.5	1	50	50	0.06133	0.06389	0.06391	0.07560	81.1	84.5	84.5
1	0.5	20	20	0.18974	0.21744	0.21746	0.22674	83.7	95.9	95.9
1	0.5	20	50	0.18122	0.20619	0.20622	0.21558	84.1	95.6	95.7
1	0.5	50	20	0.12026	0.13868	0.13869	0.14464	83.1	95.9	95.9
1	0.5	50	50	0.11680	0.13444	0.13443	0.14033	83.2	95.8	95.8
1	1	20	20	0.17369	0.19890	0.19889	0.23025	75.4	86.4	86.4
1	1	20	50	0.17594	0.20043	0.20050	0.23382	75.2	85.7	85.8
1	1	50	20	0.10774	0.12362	0.12358	0.14358	75.0	86.1	86.1
1	1	50	50	0.10665	0.12194	0.12195	0.14254	74.8	85.5	85.6

* Idem para QV

Tabela B.9: Taxa de rejeição (%) estimada para $H_0 : \gamma_{00} = 0$ vs $H_a : \gamma_{00} \neq 0$.

Valores fixados				Taxa de rejeição (%) estimada				
τ_0	σ	J	n_j	MLG	QV	QGR	QG2	QG3
0	0	20	20	5.0	4.9	5.4	4.6	4.3
0	0	20	50	4.4	4.4	4.7	4.2	4.3
0	0	50	20	4.5	4.5	4.3	4.0	4.0
0	0	50	50	4.4	4.6	4.4	3.9	3.8
0.5	0	20	20	69.0	56.4	6.9	7.5	7.4
0.5	0	20	50	78.4	70.1	7.4	8.2	9.1
0.5	0	50	20	68.0	56.2	4.5	5.4	5.4
0.5	0	50	50	80.0	70.9	4.9	5.3	5.7
1	0	20	20	82.1	63.3	7.1	8.5	8.4
1	0	20	50	87.2	75.7	6.4	7.1	6.6
1	0	50	20	82.0	63.3	5.1	5.5	5.4
1	0	50	50	88.5	76.1	4.9	5.5	5.3
0	0.5	20	20	16.2	4.6	5.8	6.2	4.0
0	0.5	20	50	16.2	4.8	6.5	6.6	3.7
0	0.5	50	20	18.1	5.1	6.3	6.4	4.6
0	0.5	50	50	17.8	5.9	7.1	6.9	5.4
0	1	20	20	33.4	4.1	6.8	6.9	3.9
0	1	20	50	35.3	5.2	6.4	6.4	4.6
0	1	50	20	32.8	5.5	6.4	6.5	5.1
0	1	50	50	35.0	4.4	5.7	5.9	3.8
0.5	0.5	20	20	68.0	48.3	6.0	6.3	6.3
0.5	0.5	20	50	78.8	63.8	7.1	7.6	8.6
0.5	0.5	50	20	67.8	47.5	4.7	5.2	5.2
0.5	0.5	50	50	79.0	64.7	6.9	7.6	7.6
0.5	1	20	20	65.6	33.8	7.0	7.1	7.1
0.5	1	20	50	76.6	52.3	8.0	8.7	8.8
0.5	1	50	20	66.0	33.6	5.1	5.8	5.4
0.5	1	50	50	75.7	49.9	3.8	4.2	4.0
1	0.5	20	20	78.7	58.6	5.9	6.3	6.3
1	0.5	20	50	88.1	74.4	6.5	7.8	7.7
1	0.5	50	20	80.6	59.6	5.6	6.2	6.2
1	0.5	50	50	86.5	72.4	5.5	6.4	6.4
1	1	20	20	81.7	53.6	5.8	6.8	6.9
1	1	20	50	87.4	68.4	5.7	6.5	6.4
1	1	50	20	81.0	53.3	5.9	6.4	6.4
1	1	50	50	85.5	67.3	4.4	5.1	5.2

Tabela B.10: Taxa de rejeição (%) estimada para $H_0 : \gamma_{00} = 1$ vs $H_a : \gamma_{00} \neq 1$.

Valores fixados				Taxa de rejeição (%) estimada				
τ_0	σ	J	n_j	MLG	QV	QGR	QG2	QG3
0	0	20	20	5.8	6.1	5.6	4.6	4.6
0	0	20	50	4.0	3.9	3.7	3.3	3.3
0	0	50	20	3.9	4.0	3.8	3.6	3.7
0	0	50	50	4.6	4.7	4.7	4.5	4.0
0.5	0	20	20	68.9	58.7	6.1	6.4	6.4
0.5	0	20	50	77.3	72.4	6.2	6.5	10.1
0.5	0	50	20	75.4	65.8	5.3	5.3	6.2
0.5	0	50	50	82.3	77.5	6.6	7.1	8.3
1	0	20	20	86.2	73.2	5.6	6.3	6.4
1	0	20	50	89.9	84.4	7.0	7.9	7.2
1	0	50	20	92.4	85.3	5.3	6.0	5.9
1	0	50	50	95.4	92.1	5.3	5.5	5.3
0	0.5	20	20	57.0	35.3	36.0	36.0	4.1
0	0.5	20	50	82.5	67.3	66.5	66.2	4.5
0	0.5	50	20	84.5	70.8	67.3	67.3	3.5
0	0.5	50	50	99.0	97.1	96.9	97.0	5.0
0	1	20	20	99.4	93.4	90.4	90.9	3.2
0	1	20	50	100.0	100.0	99.8	99.8	4.1
0	1	50	20	100.0	100.0	99.9	99.9	3.7
0	1	50	50	100.0	100.0	100.0	100.0	4.7
0.5	0.5	20	20	76.0	61.9	7.9	8.4	7.1
0.5	0.5	20	50	84.0	74.8	9.0	9.8	7.8
0.5	0.5	50	20	86.9	77.1	11.1	11.8	6.3
0.5	0.5	50	50	89.6	84.1	13.0	13.8	7.0
0.5	1	20	20	94.4	83.6	33.7	35.6	6.4
0.5	1	20	50	95.9	91.7	37.7	39.0	8.3
0.5	1	50	20	99.4	97.1	62.2	63.6	6.3
0.5	1	50	50	99.9	99.6	71.8	72.7	6.2
1	0.5	20	20	87.4	75.0	6.2	7.7	7.1
1	0.5	20	50	92.5	84.7	5.9	6.5	5.8
1	0.5	50	20	94.3	89.0	6.3	7.2	6.0
1	0.5	50	50	97.2	93.6	6.2	7.3	5.1
1	1	20	20	93.1	82.1	13.8	15.3	7.2
1	1	20	50	95.5	88.9	14.6	15.7	8.2
1	1	50	20	98.4	95.8	21.2	22.8	5.4
1	1	50	50	99.2	98.1	24.1	25.3	6.1

Apêndice C

Gráficos referentes a τ_0 e σ

Figura C.1: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 0, 0)$; (b) $(1, 0, 0)$

Figura C.2: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 0.5, 0)$; (b) $(0, 1, 0)$

Figura C.3: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(1, 0.5, 0)$; (b) $(1, 1, 0)$

Figura C.4: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 0, 0.5)$; (b) $(0, 0, 1)$

Figura C.5: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(1, 0, 0.5)$; (b) $(1, 0, 1)$

Figura C.6: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) (0, 0.5, 0.5); (b) (0, 0.5, 1)

Figura C.7: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) (1, 0.5, 0.5); (b) (1, 0.5, 1)

Figura C.8: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 1, 0.5)$; (b) $(0, 1, 1)$

Figura C.9: *Boxplots* das estimativas de τ_0 quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(1, 1, 0.5)$; (b) $(1, 1, 1)$

Figura C.10: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(0, 0, 0)$; (b) $(1, 0, 0)$

Figura C.11: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(0, 0.5, 0)$; (b) $(0, 1, 0)$

Figura C.12: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(1, 0.5, 0)$; (b) $(1, 1, 0)$

Figura C.13: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 0, 0.5)$; (b) $(0, 0, 1)$

Figura C.14: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(1, 0, 0.5)$; (b) $(1, 0, 1)$

Figura C.15: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(0, 0.5, 0.5)$; (b) $(0, 0.5, 1)$

Figura C.16: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(1, 0.5, 0.5)$; (b) $(1, 0.5, 1)$

Figura C.17: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 1, 0.5)$; (b) $(0, 1, 1)$

Figura C.18: *Boxplots* das estimativas de σ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(1, 1, 0.5)$; (b) $(1, 1, 1)$

Apêndice D

Gráficos referentes a γ_{00}

Figura D.1: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma) = (0, 0, 0)$

Figura D.2: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma) = (1, 0, 0)$

Figura D.3: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 0.5, 0)$; (b) $(0, 1, 0)$

Figura D.4: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(1, 0.5, 0)$; (b) $(1, 1, 0)$

Figura D.5: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 0, 0.5)$; (b) $(0, 0, 1)$

Figura D.6: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(1, 0, 0.5)$; (b) $(1, 0, 1)$

Figura D.7: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(0, 0.5, 0.5)$; (b) $(0, 0.5, 1)$

Figura D.8: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(1, 0.5, 0.5)$; (b) $(1, 0.5, 1)$

Figura D.9: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) (0, 1, 0.5); (b) (0, 1, 1)

Figura D.10: *Boxplots* das estimativas de γ_{00} quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) (1, 1, 0.5); (b) (1, 1, 1)

Figura D.11: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(0, 0, 0)$; (b) $(1, 0, 0)$

Figura D.12: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(0, 0.5, 0)$; (b) $(0, 1, 0)$

Figura D.13: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) $(1, 0.5, 0)$; (b) $(1, 1, 0)$

Figura D.14: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a (a) $(0, 0, 0.5)$; (b) $(0, 0, 1)$

Figura D.15: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a (a) $(1, 0, 0.5)$; (b) $(1, 0, 1)$

Figura D.16: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(0, 0.5, 0.5)$; (b) $(0, 0.5, 1)$

Figura D.17: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
 (a) $(1, 0.5, 0.5)$; (b) $(1, 0.5, 1)$

Figura D.18: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) (0, 1, 0.5); (b) (0, 1, 1)

Figura D.19: *Boxplots* das estimativas do EP de $\hat{\gamma}_{00}$ quando $(\gamma_{00}, \tau_0, \sigma)$ é igual a
(a) (1, 1, 0.5); (b) (1, 1, 1)

Referências Bibliográficas

- Anderson, D. A. e Aitkin, M. (1985). Variance component models with binary response: interviewer variability. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B: Statistical Methodology* **47**, 203–210.
- Breslow, N. E. e Clayton, D. G. (1993). Approximate inference in generalized linear mixed models. *Journal of the American Statistical Association* **88**, 9–25.
- Breslow, N. E. e Lin, X. (1995). Bias correction in generalised linear mixed models with a single component of dispersion. *Biometrika* **82**, 81–91.
- Davidian, M. e Giltinan, D. (1995). *Nonlinear models for repeated measurement data*. London: Chapman & Hall.
- Diggle, P., Heagerty, P., Liang, K.-Y. e Zeger, S. (2002). *Analysis of longitudinal data*. 2^a ed. Oxford: Oxford University Press.
- Efron, B. (1986). Double exponential families and their use in generalized linear regression. *Journal of the American Statistical Association* **81**, 709–721.
- Fahrmeir, L. e Tutz, G. (2001). *Multivariate statistical modelling based on generalized linear models*. 2^a ed. New York: Springer-Verlag.
- Goldstein, H. (1991). Nonlinear multilevel models, with an application to discrete response data. *Biometrika* **78**, 45–51.
- Goldstein, H. (2003). *Multilevel statistical models*. 3^a ed. New York : Edward Arnold.

- Hedeker, D. e Gibbons, R. D. (1994). A random-effects ordinal regression model for multilevel analysis. *Biometrics* **50**, 933–944.
- Hinde, J. e Demétrio, C. (1998). *Overdispersion: models and estimation*. São Paulo: Associação Brasileira de Estatística.
- Jacob, M. (2000). Extra-binomial variation in logistic multilevel models - a simulation. *Multilevel Modelling Newsletter* **12**(1), 8–14.
- Lee, Y. e Nelder, J. A. (1996). Hierarchical generalized linear models. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B* **58**(4), 619–678.
- Lee, Y. e Nelder, J. A. (2006). Double hierarchical generalized linear models. *Applied Statistics* **55**, 139–185.
- Lee, Y., Nelder, J. A. e Pawitan, Y. (2006). *Generalized linear models with random effects. Unified analysis via h-likelihood*. New York: Chapman & Hall.
- Lin, X. e Breslow, N. E. (1996). Bias correction in generalised linear mixed models with multiple components of dispersion. *Journal of the American Statistical Association* **91**, 1007–1016.
- Liu, Q. e Pierce, D. A. (1994). A note on Gauss-Hermite quadrature. *Biometrika* **81**(3), 624–629.
- McCullagh, P. e Nelder, J. A. (1989). *Generalized linear models*. 2^a ed. New York: Chapman & Hall.
- Molenberghs, G. e Verbeke, G. (2005). *Models for discrete longitudinal data*. New York: Springer Science.
- Natis, L. (2000). *Modelos lineares hierárquicos*. Dissertação de mestrado. Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo.
- Nelder, J. A. e Mead, R. (1965). A simplex algorithm for function minimization. *Computer Journal* **7**, 308–313.
- Nobre, J. S. (2004). *Métodos de diagnóstico para modelos lineares mistos*. Dissertação de mestrado. Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo.
- Nocedal, J. e Wright, S. J. (1999). *Numerical optimization*. New York: Springer-Verlag.

- Paula, G. (2004). *Modelos de regressão com apoio computacional*. São Paulo: Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo.
- Pinheiro, J. C. e Bates, D. M. (1995). Approximations to the log-likelihood function in the nonlinear mixed-effects model. *Journal of Computational and Graphical Statistics* **4**, 12–35.
- Poli, E. C. (2000). *Estudo longitudinal em matemática: possibilidades e leitura de uma realidade do ensino fundamental*. Tese de doutorado. Campinas: Faculdade de Educação, Universidade Estadual de Campinas.
- Raudenbush, S. W. e Bryk, A. S. (2002). *Hierarchical linear models: applications and data analysis methods*. 2^a ed. Thousand Oaks: Sage Publications.
- Raudenbush, S. W., Yang, M. e Yosef, M. (2000). Maximum likelihood for hierarchical models via high-order, multivariate Laplace approximation. *Journal of Computational and Graphical Statistics* **9**(1), 141–157.
- Wolfinger, R. D. e O’Connell, M. (1993). Generalized linear mixed models: a pseudo-likelihood approach. *Journal of Statistical Computation and Simulation* **48**, 233–243.
- Zeger, S. L. e Karim, M. R. (1991). Generalized linear models with random effects; a Gibbs sampling approach. *Journal of the American Statistical Association* **86**, 79–86.