

**Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”**

Modelagem de peso e consumo de sólidos totais em bezerros leiteiros e o uso dos resíduos de confundimento mínimo no diagnóstico de modelos lineares mistos

Allison Queiroz de Oliveira

Dissertação apresentada para a obtenção do título de Mestre em Ciências. Área de concentração: Estatística e Experimentação Agronômica

**Piracicaba
2022**

Allison Queiroz de Oliveira
Bacharel em Zootecnia

**Modelagem de peso e consumo de sólidos totais em bezerros leiteiros e o uso dos resíduos de
confundimento mínimo no diagnóstico de modelos lineares mistos**
versão revisada de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011

Orientador:
Prof. Dr. **CÉSAR GONÇALVES DE LIMA**

Dissertação apresentada para a obtenção do título de
Mestre em Ciências. Área de concentração: Estatística e
Experimentação Agronômica

Piracicaba
2022

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
DIVISÃO DE BIBLIOTECA – DIBD/ESALQ/USP**

Oliveira, Allison Queiroz de

Modelagem de peso e consumo de sólidos totais em bezerros leiteiros e o uso dos resíduos de confundimento mínimo no diagnóstico de modelos lineares mistos / Allison Queiroz de Oliveira. - - versão revisada de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011. - - Piracicaba, 2022.

97 p.

Dissertação (Mestrado) - - USP / Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz".

1. Dados longitudinais 2. Modelos hierárquicos 3. Correlação 4. Desempenho I. Título

DEDICATÓRIA

*A Deus.
Dedico.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus, pelo dom da vida e por sempre estar ao meu lado em todos os momentos. Sem Ti nada em minha vida teria sentido ou seria possível.

A Nossa Senhora por sempre ser o meu alento, meu colo de mãe em dias difíceis e por sempre interceder pela minha vida em cada passo que dou.

Aos meus pais, Rozângela Marvila de Queiroz e Adilson Caetano de Oliveira, por sempre me motivarem a seguir em frente e por todo sacrifício que fizeram para que um dia eu chegasse onde estou.

Aos meus amigos Gabriela, Bruna, Geyse, Nádia e Mateus por estarem ao meu lado e se fazerem presentes em minha vida (mesmo que distantes fisicamente), sempre me apoiando, torcendo e acreditando em mim, mesmo nos dias em que nem eu mesmo conseguia acreditar.

Ao Prof. Dr. César Gonçalves de Lima por todo apoio, confiança, paciência, orientação e amizade ao longo deste trabalho.

A Profa. Dra. Carla Maris Machado Bittar pela cessão do conjunto de dados usados neste trabalho, por todo apoio e disponibilidade em tirar dúvidas e realizar discussões técnica dos resultados obtidos, que foram de extrema importância para a tomada de decisões durante as análises.

Ao Prof. Dr. Idemauro Antonio Rodrigues de Lara pelo apoio, confiança, motivação e amizade durante este caminho.

À Profa. Dra. Renata Alcarde Serardini e ao Prof. Dr. Juvêncio Santos Nobre, pela grande ajuda com a programação computacional e teoria sobre os modelos lineares mistos.

Aos demais professores do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agronômica (PPGEEA) pelos valiosos conhecimentos passados. Minha mais profunda admiração por todos.

À Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” e a Universidade de São Paulo como um todo, pela excelente estrutura acadêmica, respeito e zelo pelos seus alunos e suporte com materiais de qualidade que ajudaram na confecção deste trabalho.

Aos funcionários do Departamento de Ciências Exatas (LCE/ESALQ) por todo auxílio, atenção, disponibilidade e profissionalismo.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES), pela disponibilidade de bolsa de estudos, que permitiu a condução e execução deste trabalho.

A todos que, de forma direta ou indiretamente, ajudaram ao longo dessa jornada, meu muito obrigado.

EPÍGRAFE

A mente que se abre a uma nova ideia jamais retornará ao seu tamanho original.

Albert Einstein

SUMÁRIO

RESUMO	7
ABSTRACT	8
LISTA DE FIGURAS.....	9
LISTA DE TABELAS.....	10
1. INTRODUÇÃO.....	13
2. REFERENCIAL TEÓRICO.....	15
2.1. ANÁLISE DE DADOS LONGITUDINAIS.....	15
2.2. MODELOS LINEARES MISTOS.....	16
2.2.1. Especificação do modelo	16
2.2.1.1. Modelo Condicional.....	17
2.2.1.2. Modelo Marginal.....	17
2.2.3. Estrutura das Matrizes de Covariâncias.....	18
2.2.4. Inferência estatística e métodos de estimação.....	20
2.2.5. Seleção de modelos	21
2.2.6. Estratégias para a seleção de modelos.....	23
2.2.7. Diagnósticos e validação do modelo.....	23
2.2.8. Tipos de resíduos.....	24
2.2.9. Modelos lineares mistos para dados longitudinais bivariados	25
2.2.9.1. Diagnóstico para modelos lineares mistos bivariados.....	27
2.2.9.2. O teste de Henze-Zirkler para verificação da normalidade multivariada	27
3. MATERIAL E MÉTODOS.....	29
3.1. MATERIAL	29
3.2. MÉTODOS.....	29
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	33
4.1. ANÁLISE UNIVARIADA	33
4.1.1. Pesos de bezerros submetidos a três tipos de dieta sólida	33
4.1.2. Avaliação do consumo médio de sólidos totais de bezerros submetidos a três tipos de dieta sólida	43
4.2. ANÁLISE BIVARIADA	58
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	73
REFERÊNCIAS	75
ANEXOS	78

RESUMO

Modelagem de peso e consumo de sólidos totais em bezerros leiteiros e o uso dos resíduos de confundimento mínimo no diagnóstico de modelos lineares mistos

O uso de modelos mistos na análise de respostas influenciadas por fatores de tratamento e por fatores longitudinais, apresenta muitas vantagens quando comparado aos modelos clássicos de regressão. A complexidade desses modelos aumenta quando se modela simultaneamente duas ou mais variáveis respostas correlacionadas, num cenário com forte desbalanceamento no número de observações. No diagnóstico dos modelos mistos ajustados sugere-se o uso dos resíduos de confundimento mínimo em substituição aos resíduos clássicos dos modelos de regressão. No presente trabalho foram utilizados os dados oriundos de um experimento desenvolvido na Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, que avaliou o desempenho de bezerros da raça holandesa, submetidos a três dietas sólidas ao longo de oito semanas. Objetivou-se o ajuste e a comparação de modelos lineares mistos sob as abordagens univariada e bivariada para explicar o comportamento das variáveis respostas peso e consumo médio de sólidos totais ao longo do tempo, utilizando os resíduos de confundimento mínimo no diagnóstico dos modelos selecionados. Nos ajustes foram utilizadas diversas bibliotecas do programa computacional R e na seleção de modelos foram utilizados testes da razão de verossimilhanças para modelos encaixados e o Critério de Informação Bayesiano (BIC) para os modelos não encaixados. A abordagem bivariada foi mais adequada e informativa do que a univariada, porque considera a correlação entre o peso e o consumo medidos nas mesmas unidades experimentais e nos diferentes instantes do tempo. Comprovou-se a eficácia do uso dos resíduos de confundimento mínimo no diagnóstico dos modelos lineares mistos em comparação aos resíduos marginais e condicionais estudentizados, visto que os primeiros apresentam um menor viés quando comparados aos dois últimos.

Palavras-chave: Dados longitudinais, Modelos hierárquicos, Correlação, Desempenho

ABSTRACT**Modeling weight and total solids consumption in dairy calves and the use of least confounded residuals in the diagnosis of linear mixed models**

The use of mixed models in the analysis of responses influenced by treatment factors and by longitudinal factors presents many advantages when compared to classical regression models. The complexity of these models increases when two or more correlated response variables are modeled simultaneously, in a scenario with a strong imbalance in the number of observations. In the diagnosis of adjusted mixed models, the use of least confounded residuals is suggested to replace the classical residuals of regression models. In the present work, data from an experiment developed at the “Luiz de Queiroz” College of Agriculture were used, which evaluated the performance of Holstein calves submitted to three solid diets over eight weeks. The objective was to adjust and compare linear mixed models under univariate and bivariate approaches to explain the behavior of the response variables weight and average consumption of total solids over time and the use of least confounded residuals in the diagnosis of the selected models. In the adjustments, several libraries of the computer program R were used and in the selection of the models, tests of the likelihood ratio were used for nested models and the Bayesian Information Criterion (BIC) for the not nested models. The bivariate approach was more adequate and informative than the univariate one, because it considers the correlation between weight and consumption measured in the same experimental units and at different moments in time. The effectiveness of the use of least confounded residuals in the diagnosis of linear mixed models was proved in comparison to the marginal and conditional studentized residuals, since the first one have a lower bias when compared to the last two.

Keywords: Longitudinal data, Hierarchical models, Correlation, Performance

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Perfis individuais dos pesos semanais dos bezerros que receberam as dietas contendo (a) 22% de FDN, (b) 22% de FDN com adição de feno e (c) 31% de FDN.....	34
Figura 2. Perfis médios dos pesos dos bezerros ao longo das semanas para cada tipo de dieta	35
Figura 3. Perfis médios de cada dieta e curva média ajustada para o peso dos bezerros submetidos a diferentes dietas.	38
Figura 4. Curvas individuais ajustadas para os pesos dos bezerros submetidos às três dietas ao longo das semanas de avaliação.	39
Figura 5. Valores observados versus valores preditos pelo modelo M1.7.	40
Figura 6. Gráficos de diagnóstico dos resíduos de confundimento mínimo, resíduos marginais e condicionais estudentizados do modelo ajustado ao peso de bezerros submetidos a diferentes dietas.	41
Figura 7. Gráficos quantil-quantil dos valores preditos dos efeitos aleatórios associados (a) ao intercepto e (b) coeficientes de 1° e (c) 2° grau do polinômio ajustado ao peso de bezerros submetidos a diferentes dietas.	42
Figura 8. Perfis individuais do consumo médio de sólidos totais para as dietas contendo 22% de FDN (a), 22% de FDN com adição de feno (b) e 31% de FDN (c).	44
Figura 9. Perfis médios de consumo de sólidos totais para cada tipo de dieta.....	45
Figura 10. Perfis médios do consumo de sólidos totais, por dieta, e curvas médias ajustadas	49
Figura 11. Gráficos quantil-quantil dos valores preditos dos efeitos aleatórios associados ao efeito quadrático (a) e de quarto grau (b) do fator semana	52
Figura 12. Comparação entre as curvas médias ajustadas pelo modelo M7.7(2) e os perfis médios para cada dieta. .	53
Figura 13. Curvas individuais ajustadas pelo modelo M7.7(2) para o consumo de sólidos totais.....	54
Figura 14. Valores observados versus valores preditos pelo modelo M7.7(2).....	55
Figura 15. gráficos de diagnóstico dos resíduos de confundimento mínimo, resíduos marginais e condicionais estudentizados do modelo M7.7(2) ajustado ao consumo de sólidos totais.	56
Figura 16. Gráfico quantil-quantil de normalidade do efeito aleatório associado ao coeficiente de 2° grau de semana.	57
Figura 17. Curvas médias ajustadas do modelo M2.7 versus perfis médios de (a) peso e (b) consumo médio de sólidos totais.	62
Figura 18. (a) Curvas individuais ajustadas e (b) perfil médio e curva média ajustada para os pesos dos bezerros.	66
Figura 19. Curvas individuais ajustadas (a) e perfil médio versus curva média ajustada (b) para a variável consumo.	67
Figura 20. Valores observados versus valores preditos pelo modelo para peso (a) e consumo (b).	68
Figura 21. Resíduos versus índices e resíduos versus valores preditos para cada tipo de resíduo para a variável peso (a) e consumo (b).	69
Figura 22. Gráficos quantil-quantil e histogramas para o estudo da normalidade dos resíduos referentes ao peso (a) e ao consumo (b) considerando os resíduos de confundimento mínimo, marginais e condicionais estudentizados.	71
Figura 23. Boxplot bivariado e gráfico de normalidade bivariada de Henze-Zirkler para (a) resíduos de confundimento mínimo, (b) marginais e (c) condicionais estudentizados.....	72

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Exemplo de estrutura bivariada de respostas considerando três tratamentos, quatro repetições por tratamento e mensurações em quatro instantes do tempo	26
Tabela 2. Esboço do croqui experimental.....	29
Tabela 3. Médias e desvios-padrões dos pesos dos bezerros em cada semana para cada dieta fornecida.....	33
Tabela 4. Variâncias (diagonal em negrito), covariâncias (abaixo da diagonal) e correlação (acima da diagonal) dos pesos dos bezerros entre as semanas para cada dieta	33
Tabela 5. Estrutura de efeitos aleatórios considerando o modelo maximal para a variável resposta peso	36
Tabela 6. Comparações visando à seleção da estrutura de efeitos aleatórios para o estudo do peso de bezerros (kg).....	36
Tabela 7. Comparação de estruturas de covariâncias para a matriz \mathbf{G} no modelo M1.....	37
Tabela 8. Comparação de estruturas para a matriz \mathbf{R}_i no modelo M1	37
Tabela 9. Análise de variância para os efeitos fixos do modelo M1.5.....	37
Tabela 10. Estimativas dos coeficientes e erros padrões dos parâmetros do modelo M1.7	38
Tabela 11. Médias e desvios-padrões do consumo de sólidos totais em cada semana para cada dieta fornecida	43
Tabela 12. Variâncias (diagonal), covariâncias (abaixo da diagonal) e correlação (acima da diagonal) do consumo médio de sólidos totais dos bezerros entre as semanas para cada dieta.....	43
Tabela 13. Estruturas de efeitos aleatórios do modelo maximal para o consumo de sólidos totais	46
Tabela 14. Seleção da estrutura de efeitos aleatórios do modelo maximal para o consumo de sólidos totais	47
Tabela 15. Comparação de estruturas de covariâncias para a matriz \mathbf{G} no modelo M7.....	47
Tabela 16. Comparação de estruturas para a matriz \mathbf{R}_i do modelo M7	48
Tabela 17. Análise de variância para os efeitos fixos do modelo M7.5.....	48
Tabela 18. Estimativas dos coeficientes polinomiais e erros padrões dos fatores de efeito fixo do modelo M7.7	48
Tabela 19. Seleção da estrutura de efeitos aleatórios do modelo maximal com dois níveis de dieta, para o consumo de sólidos totais	50
Tabela 20. Comparações entre estruturas de covariâncias para os efeitos aleatórios do modelo M7(2)	50
Tabela 21. Comparação pelo teste da razão de verossimilhanças entre diferentes estruturas de \mathbf{R}_i	51
Tabela 22. Análise de variância para os efeitos fixos do modelo M7.5(2).....	51
Tabela 23. Estimativas dos coeficientes e erros padrões dos fatores de efeito fixo do modelo M7.6(2)	52
Tabela 24. Análise de variância para os efeitos fixos do modelo M7.7(2).....	52
Tabela 25. Estimativas dos coeficientes e erros padrões dos fatores de efeito fixo do modelo M7.7(2)	53
Tabela 26. Estruturas de efeitos aleatórios do modelo maximal da análise bivariada	60
Tabela 27. Seleção da estrutura de efeitos aleatórios para o modelo maximal da análise bivariada.....	60
Tabela 28. Comparação de estruturas de matrizes de covariâncias para os efeitos aleatórios na análise bivariada	60
Tabela 29. Comparação entre as estruturas de covariâncias dos modelos M2.4, M2.5 e M2.6	60
Tabela 30. Análise de variância dos efeitos fixos do modelo maximal M2.5 da análise bivariada	61
Tabela 31. Estimativas dos coeficientes e respectivos erros da parte fixa do modelo M2.7	61
Tabela 32. Estruturas de efeitos aleatórios considerando a igualdade entre as dietas	64
Tabela 33. Seleção da estrutura de efeitos aleatórios para o modelo bivariado com uma única curva para as três dietas.	64

Tabela 34. Comparação de estruturas de covariâncias para os efeitos aleatórios do modelo M2(1).....	64
Tabela 35. Comparação de estruturas de covariâncias R_i para o modelo bivariado com dois níveis do fator dieta...	64
Tabela 36. Análise de variância do modelo M2.5(1)	65
Tabela 37. Coeficientes e erros padrões de cada parâmetro do modelo M2.7(1), considerando a igualdade entre curvas	65

1. INTRODUÇÃO

No contexto das ciências agrárias, a quantidade de experimentos que buscam compreender o comportamento de uma ou mais variáveis respostas ao longo de um intervalo de tempo tem crescido consideravelmente nas últimas décadas, justificando o desenvolvimento de ferramentas estatísticas adequadas que consigam descrever o comportamento das respostas médias, considerando a correlação existente entre as respostas e a possível heterogeneidade de variâncias.

Na presença de correlação não nula entre as medidas repetidas nas mesmas unidades experimentais, os modelos de regressão clássicos se tornam pouco confiáveis, pois pressupõem independência entre as mensurações realizadas (AMARAL, 2013). Já os modelos mistos, lineares ou não lineares, são mais versáteis e conseguem representar bem estruturas de dependência mais complexas, comuns em experimentos com medidas repetidas. Esses modelos incorporam parâmetros associados à estrutura de dependência, sendo estes de efeito aleatório, e parâmetros que interpretam o comportamento médio da variável, considerados de efeitos fixos (LOY, 2013).

A análise de dados longitudinais se torna ainda mais complexa quando duas ou mais variáveis respostas são avaliadas ao longo do tempo nas mesmas unidades experimentais e se deseja modelar suas respostas médias simultaneamente, aproveitando a correlação existente entre as variáveis. Neste caso a análise passa de uma abordagem univariada para bi ou multivariada.

Na verificação das pressuposições feitas sobre os erros dos modelos mistos univariados são comumente realizados diagnósticos gráficos utilizando os resíduos condicionais. Hilden-Minton (1995) propôs o uso de resíduos de confundimento mínimo que, diferente do que ocorre com os resíduos condicionais, não são correlacionados com a fração de confundimento ligada ao vetor de parâmetros de efeito aleatório. Loy (2013) afirmou que tais resíduos são mais adequados para os diagnósticos dos modelos mistos ou modelos multiníveis.

Os dados utilizados neste trabalho são provenientes de um experimento desenvolvido na Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, da Universidade de São Paulo, entre junho a dezembro de 2017, com bezerros da raça holandesa submetidos à três dietas distintas. Dentre as diversas variáveis respostas estudadas, foram feitas as mensurações de peso e consumo médio de sólidos totais dos animais ao longo de oito semanas de avaliação, em um delineamento casualizado em blocos e com muitos dados perdidos.

O objetivo deste trabalho é estudar o comportamento das variáveis peso e consumo de sólidos totais das três dietas ao longo do tempo, comparando os resultados das abordagens univariada e bivariada utilizando modelos lineares mistos e avaliar a utilização dos resíduos de confundimento mínimo no diagnóstico dos modelos ajustados para ambas as abordagens. O ajuste e o diagnóstico dos modelos foram realizados inteiramente em ambiente R (R CORE TEAM, 2021), enquanto que a extração da matriz de correlação para a abordagem bivariada foi feita em ambiente SAS (versão 9.4; SAS Inst. Inc., Cary, NC).

2. REFERENCIAL TEÓRICO

2.1. Análise de dados longitudinais

Dados longitudinais se referem às observações de uma ou mais variáveis respostas, de natureza contínua ou discreta, mensuradas ao longo de um intervalo de tempo ou espaço pré-estabelecido nas mesmas unidades experimentais. O vetor de observações feitas repetidamente no mesmo indivíduo é denominado perfil individual de respostas e o vetor de médias das observações feitas repetidamente em indivíduos sujeitos ao mesmo tratamento, perfil médio de respostas. Para Faraway (2006) quando o fator longitudinal é o tempo, o estudo de dados longitudinais tem como principal objetivo entender a dinâmica das variáveis respostas entre os instantes em que as observações são tomadas, assim como a influência de outros fatores sobre tais variáveis. Por conta disso, é de se esperar que haja alguma dependência entre as observações repetidas, gerando algum grau de correlação entre as mesmas, dentro da unidade experimental avaliada.

Historicamente e para cenários com dados balanceados, a análise de dados longitudinais esteve associada à técnica clássica de análise de perfis uni ou multivariada. Em relação a análise univariada de perfis (ANOVA), feita principalmente em um cenário utilizando o delineamento de parcelas subdivididas, segundo Von Ende (2001), primeiramente há a casualização dos níveis do fator primário (fator de tratamento, por exemplo) às parcelas, e posteriormente os níveis do fator secundário (tempo, neste caso) são distribuídos ao acaso nas subparcelas de cada parcela. Contudo, Xavier e Dias (2001) alertam para o fato que os níveis do fator tempo não podem ser aleatorizados, o que viola a pressuposição de independência das observações e conseqüentemente dos erros, o que implica na presença de correlações amostrais. Ainda pela falta de casualização do tempo, Huynh e Feldt (1970) mostraram que em um delineamento em esquema de parcelas subdivididas considerando o tempo como fator secundário, somente as estatísticas dos testes F para os efeitos dos fatores primários, avaliados nas parcelas, apresentarão distribuição exata, tendo em vista a casualização dos níveis dos fatores primários. A distribuição da estatística F para testes envolvendo o tempo (em nível de subparcelas) apresentará distribuição exata sob homogeneidade de variâncias nas diversas ocasiões e covariâncias iguais entre as medidas tomadas em ocasiões distintas.

Para verificar se os dados de um experimento em parcelas subdivididas no tempo atendem a condição de Huynh e Feldt (1970) utiliza-se o teste de esfericidade, proposto por Mauchly (1940), que testa se uma determinada população de caráter multivariado possui variâncias iguais e correlações nulas. Caso a condição de esfericidade seja atendida os testes F referentes ao fator tempo (fator longitudinal) e à interação entre o tratamento e o tempo passam a ser exatos e o modelo de análise univariada de perfis pode ser usado para analisar os dados em estudo. Caso contrário o modelo de análise multivariada de perfis é mais adequado.

Na abordagem multivariada da análise de perfis utiliza-se a análise multivariada de variância (MANOVA), que apresenta menor número de restrições que a análise univariada de perfis, pois não existe qualquer restrição sobre os parâmetros da matriz de variâncias e covariâncias associada aos níveis do fator longitudinal. Neste modelo de análise admite-se que os vetores $n \times 1$ de observações feitas repetidamente em cada unidade experimental são independentes e têm distribuição normal multivariada (MAESTRE, 2014), com matriz de variâncias e covariâncias não estruturada, dada por:

$$\text{cov}(\mathbf{y}_i) = \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \cdots & \sigma_{1b} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{b1} & \cdots & \sigma_b^2 \end{bmatrix} \quad (1)$$

em que \mathbf{y}_i é o vetor de observações no i – éximo indivíduo.

Apesar da expansão dos recursos computacionais nas últimas décadas ter facilitado o uso dessa abordagem de análise (VON ENDE, 2001), ela apresenta algumas desvantagens como: a necessidade de vetores de dados completos (FREITAS, 2007), o que significa que a perda de uma ou mais observações em uma mesma unidade experimental acarreta na exclusão de todo o vetor de respostas desse indivíduo da análise e o baixo poder dos testes de hipóteses, devido ao número extremamente alto de parâmetros associados ao modelo.

2.2. MODELOS LINEARES MISTOS

Uma abordagem atual e mais apropriada para a análise de dados longitudinais consiste no uso de modelos mistos (*mixed models*) ou modelo de efeitos mistos (*mixed effects models*), propostos por Laird e Ware (1982). Esses modelos são denominados como mistos pois em sua estrutura estão condicionados tanto efeitos fixos quanto efeitos aleatórios (FITMAURICE; LAIRD; WARE, 2011). Tais modelos apresentam uma enorme flexibilidade quando se trata de análises envolvendo dados longitudinais.

A vantagem dos modelos mistos é que apresentam uma estrutura unificada que permite trabalhar com dados balanceados ou desbalanceados (PINHEIRO; BATES, 2000); e uma característica extremamente marcante desses modelos está no fato de conseguirem modelar a correlação intra-indivíduos (PINHEIRO, 1994). Além do mais, atualmente há uma diversidade de programas computacionais, tais como o R e o SAS (SAS 9.4), totalmente seguros e eficientes para realizar o seu ajuste.

2.2.1. Especificação do modelo

Segundo Laird e Ware (1982) o modelo linear misto para dados longitudinais balanceados, pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i\mathbf{b}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i \quad (2)$$

Em que

\mathbf{y}_i é o vetor ($n \times 1$) de n respostas do i – éximo indivíduo;

\mathbf{X}_i é uma matriz ($n \times p$) de posto $p < n$, conhecida e de especificação, associada ao vetor ($p \times 1$) de parâmetros de efeito fixo $\boldsymbol{\beta}$.

\mathbf{Z}_i é uma matriz ($n \times q$) conhecida e de especificação, de posto coluna completo e associada ao vetor ($q \times 1$) de efeitos aleatórios \mathbf{b}_i de diferenças individuais em torno dos valores populacionais;

$\boldsymbol{\varepsilon}_i$ é um vetor ($n \times 1$) de erros aleatórios associados a \mathbf{y}_i .

As matrizes \mathbf{X}_i e \mathbf{Z}_i , por sua vez, podem ser diferentes de acordo com as unidades experimentais, dessa forma, tal modelo pode ser estendido para casos de dados desbalanceados em relação ao tempo. No contexto dos modelos mistos admite-se que \mathbf{b}_i e $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ são independentes, onde $\boldsymbol{\varepsilon}_i \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{R}_i)$ e $\mathbf{b}_i \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{G})$, para $i = 1, \dots, n$, onde \mathbf{R}_i de dimensão ($b \times b$), com b sendo o total de instantes no tempo em que as observação para cada animal foram tomadas e \mathbf{G} de dimensão ($q \times q$), com q sendo o total de parâmetros de efeitos aleatórios, são denominadas matrizes

de covariâncias intra e entre indivíduos, respectivamente. Tais matrizes não necessariamente irão apresentar a mesma estrutura de covariâncias entre si, podendo apresentar estruturas distintas uma da outra.

Segundo Barbosa (2009), quando se refere à matriz \mathbf{X}_i deve-se estar atento ao fato de que a sua especificação é bastante parecida com a utilizada nos modelos de regressão, ou seja, suas colunas podem estar associadas aos níveis dos fatores que definem a estrutura das subpopulações, ao fator tempo (dessa forma caracterizando a forma da curva a ser modelada), ou as covariáveis. Já a matriz \mathbf{Z}_i pode conter covariáveis que influenciam fortemente as unidades experimentais analisadas.

De acordo com os pressupostos apresentados, a matriz de covariância de \mathbf{y}_i é dada por,

$$cov(\mathbf{y}_i) = \mathbf{Z}_i \mathbf{G} \mathbf{Z}_i' + \mathbf{R}_i \quad (3)$$

Observe que sua estruturação permite englobar as abordagens uni e multivariadas, lidar com dados perdidos e assumir as estruturas relativas às séries temporais.

Segundo Oliveira (2015) a principal característica que distingue os modelos lineares mistos dos modelos de regressão usuais é que a resposta média pode ser modelada como uma combinação de características populacionais compartilhadas com todos as unidades experimentais ou indivíduos (efeitos fixos) e efeitos específicos próprios das unidades experimentais (efeitos aleatórios). Para ilustrar tal ideia, o modelo linear misto pode ser formulado em dois estágios, sendo que o primeiro estágio corresponde ao modelo condicional e o segundo ao modelo marginal.

2.2.1.1. Modelo condicional

O modelo condicional ou modelo do primeiro estágio assumido para cada unidade experimental pode ser apresentado como:

$$\mathbf{y}_i | \mathbf{b}_i = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i \quad (4)$$

Desse modo,

$$\mathbf{y}_i | \mathbf{b}_i \sim N(\mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i, \mathbf{R}_i) \quad (5)$$

Uma vez que

$$cov(\mathbf{y}_i | \mathbf{b}_i) = cov(\boldsymbol{\varepsilon}_i) = \mathbf{R}_i$$

sendo \mathbf{R}_i também conhecida como matriz de dispersão condicional, associada ao erro condicional. Todos os outros itens correspondem às especificações descritas anteriormente.

De acordo com Fitzmaurice, Laird e Ware (2011) a obtenção de um modelo que explique a resposta média marginal é direta, mesmo que o modelo linear misto seja um modelo condicional, tendo em vista que a respostas longitudinais são uma combinação de efeitos fixos com efeitos aleatórios.

2.2.1.2. Modelo marginal

No segundo estágio, assume-se que $\mathbf{b}_i \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{G})$ e independentes de $\boldsymbol{\varepsilon}_i$. O perfil médio de respostas da população é obtido pela esperança matemática do o estimador de \mathbf{y}_i em (2). Portanto tem-se:

$$E(\mathbf{y}_i) = E[E(\mathbf{y}_i | \mathbf{b}_i)] = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} \quad (6)$$

Devido à inclusão dos efeitos aleatórios, tem-se que:

$$cov(\mathbf{y}_i) = E[cov(\mathbf{y}_i | \mathbf{b}_i)] + cov[E(\mathbf{y}_i | \mathbf{b}_i)] = \mathbf{Z}_i \mathbf{G} \mathbf{Z}_i' + \mathbf{R}_i$$

E, portanto,

$$\mathbf{y}_i \sim N(\mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta}, \mathbf{Z}_i\mathbf{G}\mathbf{Z}_i' + \mathbf{R}_i)$$

ou

$$\mathbf{y}_i \sim N(\mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta}, \mathbf{V}_i) \quad (7)$$

em que \mathbf{V}_i , é conhecida como matriz de dispersão marginal, pois está associada ao erro marginal, $\mathbf{e}_i = \mathbf{Z}_i\mathbf{b}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i$.

De acordo com Lima (1996) para o ajuste de curvas aos dados longitudinais, os modelos lineares mistos admitem uma curva média para cada nível do fator de tratamento ($\mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta}$), levando em consideração as variações aleatórias ao redor de cada média, representadas por $\mathbf{Z}_i\mathbf{b}_i$, bem como as variações de medidas ($\boldsymbol{\varepsilon}_i$). Vale salientar que a inclusão de um efeito aleatório em um determinado modelo pode ser feita com base na avaliação visual dos gráficos de perfis individuais e médios de respostas (MAESTRE, 2014).

2.2.2. Estrutura das matrizes de covariâncias

Em estudos longitudinais espera-se uma heterogeneidade das variâncias das respostas nos diversos instantes de avaliação e uma diminuição da correlação entre as respostas à medida que a distância entre duas observações feitas na mesma unidade experimental aumente. Portanto é fundamental a escolha de uma estrutura de covariâncias adequada que represente bem essas características nos dados do fenômeno estudado.

Esta escolha afeta diretamente as estimativas e os erros padrões dos parâmetros de efeitos fixos, como também os diagnósticos e as inferências envolvidas no estudo. Para Maestre (2014), a estrutura ideal deste tipo de matriz tem grande dependência da forma como as observações foram obtidas.

A matriz de covariâncias deve apresentar boa flexibilidade em sua estrutura tendo em vista a necessidade da inclusão de, no mínimo, três fontes de variação aleatória (DIGGLE, 1988), sendo estas:

- i. A variação devida aos efeitos aleatórios, tendo em vista que as observações analisadas formam parte de uma população de interesse.
- ii. A variação relacionada à correlação observacional, na qual haverá maior correlação para observações mais próximas do que observações mais distantes.
- iii. A variação que ocorre devido aos erros de mensuração.

Conforme comentado por Singer, Nobre e Rocha (2012) as variâncias e covariâncias entre as observações pode ser modelada unicamente a partir da variabilidade existente entre as unidades amostrais, representadas pelo vetor de efeitos aleatórios, \mathbf{b}_i , ou baseada na matriz de covariâncias intra-unidades, \mathbf{R}_i , ou pode ser modelada combinando as estruturas baseadas no vetor \mathbf{b}_i com a da matriz \mathbf{R}_i , incorporando assim as três fontes de variação no modelo.

Adaptado de Barbosa (2009) e considerando cinco instantes ($t_i = 5$) avaliados no i –ésimo indivíduo, serão apresentadas a seguir algumas estruturas amplamente utilizadas para as matrizes \mathbf{R}_i ou \mathbf{G} , respectivamente, na modelagem estatística de dados de experimentos com medidas repetidas.

- a. Componentes de Variância – VC: Admite a homogeneidade de variâncias e independência das observações. Tem somente um parâmetro.

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma^2 \end{pmatrix} \quad (8)$$

- b. Componentes de Variância Heterogênea – VCH: Admite variâncias diferentes nas diferentes ocasiões, mas independência entre os cinco níveis do fator tempo. Portanto tem cinco parâmetros.

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_4^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_5^2 \end{pmatrix} \quad (9)$$

- c. Simetria Composta – CS: Assim como a estrutura de componente de variância, assume homogeneidade de variâncias e mesma correlação entre as medidas feitas nas diferentes ocasiões. Essa estrutura tem somente dois parâmetros.

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & \rho & \rho & \rho & \rho \\ \rho & \sigma^2 & \rho & \rho & \rho \\ \rho & \rho & \sigma^2 & \rho & \rho \\ \rho & \rho & \rho & \sigma^2 & \rho \\ \rho & \rho & \rho & \rho & \sigma^2 \end{pmatrix} \quad (10)$$

- d. Simetria Composta Heterogênea – CSH: Admite heterogeneidade de variâncias e mesma correlação (ρ) entre as medidas feitas nas diferentes ocasiões. Essa estrutura tem $t_i + 1 = 6$ parâmetros.

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho & \rho & \rho & \rho \\ \rho & \sigma_2^2 & \rho & \rho & \rho \\ \rho & \rho & \sigma_3^2 & \rho & \rho \\ \rho & \rho & \rho & \sigma_4^2 & \rho \\ \rho & \rho & \rho & \rho & \sigma_5^2 \end{pmatrix} \quad (11)$$

- e. Não Estruturada (UN): Admite heterogeneidade de variâncias e covariâncias distintas entre os pares de medidas. Essa estrutura tem $t_i(t_i + 1)/2 = 15$ parâmetros.

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho_{21} & \rho_{31} & \rho_{41} & \rho_{51} \\ \rho_{21} & \sigma_2^2 & \rho_{32} & \rho_{42} & \rho_{52} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \sigma_3^2 & \rho_{43} & \rho_{53} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \sigma_4^2 & \rho_{54} \\ \rho_{51} & \rho_{52} & \rho_{53} & \rho_{54} & \sigma_5^2 \end{pmatrix} \quad (12)$$

- f. Autorregressiva de 1ª ordem - AR(1): Admite homogeneidade de variâncias e decrescimento da correlação à medida que as observações ficam mais distantes. Envolve somente 2 parâmetros.

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & \rho & \rho^2 & \rho^3 & \rho^4 \\ \rho & \sigma^2 & \rho & \rho^2 & \rho^3 \\ \rho^2 & \rho & \sigma^2 & \rho & \rho^2 \\ \rho^3 & \rho^2 & \rho & \sigma^2 & \rho \\ \rho^4 & \rho^3 & \rho^2 & \rho & \sigma^2 \end{pmatrix} \quad (13)$$

- g. Autorregressiva de 1ª Ordem com Heterogeneidade de Variâncias - ARH (1): Admite heterogeneidade de variâncias e decrescimento da correlação à medida que as observações ficam mais distantes. Essa estrutura envolve $t_i + 1 = 6$ parâmetros.

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho & \rho^2 & \rho^3 & \rho^4 \\ \rho & \sigma_2^2 & \rho & \rho^2 & \rho^3 \\ \rho^2 & \rho & \sigma_3^2 & \rho & \rho^2 \\ \rho^3 & \rho^2 & \rho & \sigma_4^2 & \rho \\ \rho^4 & \rho^3 & \rho^2 & \rho & \sigma_5^2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Dentre as estruturas que representem bem as características de variabilidade e de correlação intrínsecas aos dados longitudinais, deve-se escolher a estrutura mais parcimoniosa, ou seja, aquela que possua o menor número possível de parâmetros (LIMA, 1996). Littel et al. (2000) sugerem que a comparação entre essas estruturas seja feita por meio dos critérios de informação de Akaike (AIC) ou Bayesiano (BIC).

Singer, Nobre e Rocha (2012), ressaltado por Maestre (2014), indicam algumas etapas para identificar a estrutura da matriz de covariâncias mais adequada aos dados longitudinais, quais sejam:

- i. Análise gráfica dos perfis médios a fim de propor um modelo para os efeitos fixos;
- ii. Identificar nos perfis individuais padrões que apontam possíveis efeitos aleatórios, como a heterogeneidade das variâncias ao longo dos níveis do fator longitudinal;
- iii. Quando possível, sugere-se calcular as correlações intraunidades amostrais buscando facilitar a identificação dos padrões de variação;
- iv. Como já citado por Littel et al. (2000), uso dos critérios de informação para a seleção da melhor estrutura da matriz \mathbf{G} e \mathbf{R}_i , para modelos não encaixados;
- v. Análise dos resíduos para verificar a qualidade do ajuste do modelo escolhido.

2.2.3. Inferência estatística e métodos de estimação

No contexto dos modelos lineares mistos, escolher o melhor método de estimação dos efeitos fixos e estimação dos componentes de variância e covariância dos efeitos aleatórios é fundamental para se realizar uma seleção adequada de modelos (CAMARINHA FILHO, 2002; MAESTRE, 2014).

Um ponto importante a ser levado em conta é que a estimação de fato ocorre somente para os efeitos fixos do modelo, enquanto que para os efeitos aleatórios ocorre a predição dos seus valores, tendo em vista que não possuem valor fixo e são realizações de variáveis aleatórias, portanto para estes efeitos a estimação ocorre somente para os componentes de variância.

Quando o vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ é conhecido o melhor estimador não viesado (*Best Linear Unbiased Estimator* - BLUE) de $\boldsymbol{\beta}$ é dado por:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y} \quad (15)$$

enquanto que o melhor preditor não viesado (*Best Linear Unbiased Predictor* - BLUP) do vetor de efeitos aleatórios, \mathbf{b} , é:

$$\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{WZ}'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (16)$$

sendo,

$$\mathbf{V} = \mathbf{Z}\mathbf{W}\mathbf{Z}' + \mathbf{R} \quad (17)$$

em que \mathbf{W} e \mathbf{R} são matrizes conhecidas, em que $\mathbf{W} = \text{diag}(\mathbf{G})$ e $\mathbf{R} = \text{diag}(\mathbf{R}_i)$.

Como geralmente o vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ é desconhecido Pinheiro e Bates (2000), dentre outros, indicam os principais métodos utilizados para a estimação: o Método de Máxima Verossimilhança (MV) e o Método da Máxima Verossimilhança Restrita (MVR).

O método MV apresenta algumas desvantagens, sendo que a principal se refere ao fato de não considerar a perda de graus de liberdade que ocorre durante a estimação dos parâmetros relacionados aos efeitos fixos, na estimação dos componentes de variância. O segundo problema se concentra na forma como as deduções são feitas, na qual toda a sua dedução está baseada em uma parametrização particular, geralmente normal, para a distribuição do

vetor de observações (FERNANDEZ, 1991). Em relação ao último problema Harville (1977) garantiu que os estimadores pelo método MV, encontrados com base em uma distribuição normal, conseguem ser ajustados até mesmo quando a distribuição dos dados não estiver muito clara. Para contornar o problema da perda de graus de liberdade que ocorre na estimação dos componentes de variância sugere-se o uso do método MVR.

A estimação pelo método MVR difere do método MV pois, enquanto o primeiro baseia-se na verossimilhança dos resíduos, o último se baseia na verossimilhança das observações (BARBOSA, 2009). Patterson e Thompson (1971) apresentaram a ideia do método MVR, de forma que fosse uma ferramenta para estimar os componentes de variância para casos desbalanceados em um delineamento de blocos incompletos. Outros autores, como Harville (1977), Verbylla e Cullis (1990) vieram depois ajustando tal método a fim de torná-lo mais geral, conforme relatado por Maestre (2014). A contribuição deste método está na ideia de ele levar em consideração os graus de liberdade que estão envolvidos na estimação dos parâmetros. Frente a isso, as estimativas pelo MVR tendem a serem menos tendenciosas do que as fornecidas pelo MV (HARVILLE, 1977 e GILMOUR; THOMPSON; CULLIS, 1995 e ALCARDE, 2012).

A estimação pelo método de máxima verossimilhança restrita requer métodos numéricos de iteração para poder ser alcançada, tais como o método de Newton-Raphson e o método Escore de Fisher. O primeiro é o método mais utilizado para estes casos, principalmente porque é mais rápido para atingir a convergência. Para trabalhar com métodos iterativos há uma forte necessidade de apoio computacional, o que facilita o processo de estimação. Algumas funções estão disponíveis no R, tal como o `lme()` presente no pacote `nlme`, enquanto no SAS há a possibilidade do uso dos pacotes `proc mixed` e `proc nlmixed`.

2.2.4. Seleção de modelos

No estudo dos modelos mistos o objetivo principal nesta etapa é procurar a melhor estrutura da matriz \mathbf{V} , bem como selecionar o modelo que melhor atenda a ideia da parcimônia, ou seja, que possua o menor número de parâmetros possível e que consiga explicar bem o comportamento dos dados.

A busca por tal modelo, requer atenção para alguns aspectos que são fundamentais para a determinação do mesmo, tais como: entender os objetivos da pesquisa, o tipo de amostragem que está sendo realizada, o delineamento experimental utilizado, as variáveis preditoras de maior importância, além da variabilidade existente entre as unidades amostrais (OLIVEIRA, 2015). Neste contexto lança-se mão das análises descritivas e ferramentas analíticas, como os testes de hipóteses e critérios de informação.

O teste da razão de verossimilhanças (TRV) está baseado na razão entre duas verossimilhanças e procura comparar dois modelos aninhados. O primeiro modelo é chamado modelo de referência ou aninhante, ou seja, o modelo mais geral, com uma maior quantidade de parâmetros, que geralmente é o modelo de interesse do pesquisador. O segundo é chamado modelo aninhado, na qual se refere a hipótese nula, sendo um modelo mais simples, cujo espaço paramétrico é um subespaço do primeiro. Desta forma, para testar H_0 : o modelo aninhado é adequado *versus* H_a : o modelo aninhante é adequado, utiliza-se a estatística:

$$Q = -2[\log(L_2) - \log(L_1)] \quad (18)$$

em que L_2 representa a máxima verossimilhança do modelo aninhado ou restrito e L_1 a máxima verossimilhança do modelo de referência ou aninhante, enquanto \log é o logaritmo das máximas verossimilhanças calculadas. Sob as condições de regularidade e do ponto de vista assintótico, a estatística (18) segue uma distribuição qui-quadrado (χ^2),

em que o número de graus de liberdade é calculado pela diferença entre o número de parâmetros do modelo aninhante e do modelo aninhado.

Barbosa (2009) afirma que, caso o modelo aninhado seja admitido como o mais adequado, os valores da função de verossimilhança dos dois modelos devem estar próximos, suportando a ideia de que ambos os modelos se ajustam bem aos dados e seguindo a ideia de parcimônia o modelo com menor número de parâmetros deve ser escolhido.

Os critérios de informação utilizados para a seleção de modelos são o Critério de Informação de Akaike - AIC (AKAIKE, 1974) e o Critério de Informação Bayesiano – BIC (SCHWARZ, 1978). Tanto o AIC quanto o BIC são baseados no logaritmo da função de verossimilhança e dependem do número de observações e de parâmetros presentes em cada modelo. O critério BIC, por sua vez, penaliza com mais rigor os modelos com maior número de parâmetros e nem sempre os dois critérios indicam o mesmo modelo como sendo o melhor para os dados em estudo (FREITAS, 2007). Wolfinger (1993), Verbeke e Molenberghs (2000) e West, Welch e Galecki (2007), dentre outros, indicam o uso de tais critérios para selecionar de forma adequada os efeitos fixos e aleatórios, quando os modelos não estão encaixados.

Segundo Regazzi e André (2008), o critério de informação de Akaike admite que não existe um modelo verdadeiro, em que todos os modelos testados são aproximações do ideal. Dessa forma, quando há baixa divergência, automaticamente haverá um menor valor de AIC e o modelo com um menor valor de AIC é tomado como o modelo mais próximo do real. A fórmula do cálculo do critério é:

$$AIC = -2l(\mathbf{y}; \boldsymbol{\theta}) + 2p \quad (19)$$

em que $l(\mathbf{y}; \boldsymbol{\theta})$ é o logaritmo natural da função de verossimilhança e p se refere ao número de parâmetros do modelo.

Ainda de acordo com Regazzi e André (2008), o critério de informação bayesiano, também conhecido como BIC, admite a existência de um modelo verdadeiro, e dessa forma procura a menor divergência entre os modelos propostos com o modelo tomado como verdadeiro. Portanto, assim como o AIC, quanto menor o valor dessa divergência, mais adequado é o modelo encontrado. O cálculo de tal critério é feito por:

$$BIC = -2l(\mathbf{y}; \boldsymbol{\theta}) + p \log(n) \quad (20)$$

em que n é o número de observações usadas na estimação do modelo.

Quando dois modelos são ajustados pelo método MVR, os valores de log-verossimilhança, AIC e BIC só podem ser usados em comparações se os modelos apresentarem a mesma estrutura de efeitos fixos. Porém, quando tais modelos são ajustados utilizando a método MV, os valores de AIC e BIC podem ser usados em comparações mesmo se os modelos apresentarem estruturas de efeitos fixos distintas (BATES, 2000).

Quando o interesse do pesquisador está em avaliar a significância dos efeitos fixos presentes na estrutura do modelo, o teste de Wald é adequado. Esse teste pode ser realizado para cada $\boldsymbol{\beta}_j$ de $\boldsymbol{\beta}$, sendo $j = 1, \dots, p$. A estatística utilizada para testar $H_0: \mathbf{C}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$, em que \mathbf{C} uma matriz de constantes ($c \times p$), de posto completo c ($c \leq p$), é dada por:

$$Q_c = (\mathbf{C}\hat{\boldsymbol{\beta}})' [\mathbf{C} \widehat{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) \mathbf{C}']^{-1} (\mathbf{C}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (21)$$

sendo $\widehat{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}})$, a matriz de covariâncias de $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, é calculada por:

$$\widehat{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = (\sum_i \mathbf{X}_i' \mathbf{V}(\boldsymbol{\theta})^{-1} \mathbf{X}_i)^{-1} \quad (22)$$

Quando H_0 é aceita a estatística Q_c apresenta distribuição assintótica quiquadrado com c graus de liberdade. Barbosa (2009) ressalta que o quociente entre Q_c por c é uma estatística que tem distribuição F com c e $posto(\mathbf{X})$ graus de liberdade.

2.2.5. Estratégias para a seleção de modelos

Como já dito anteriormente, o melhor modelo é aquele que atenda a parcimônia, ou seja, que apresente o menor número possível de parâmetros e consiga explicar bem o comportamento da variável resposta.

Tendo em vista que na maior parte das vezes o modelo verdadeiro para o comportamento da variável resposta é desconhecido, a construção de um modelo linear misto deve ser feita ajustando uma quantidade de modelos com estruturas diferentes, tanto para a parte fixa, como para a parte aleatória, buscando selecionar aquele que se aproxima mais do real ou consiga explicar bem o comportamento da variável em estudo e de forma adequada a estrutura de covariâncias.

Para realizar essa busca são propostas duas estratégias: a estratégia *Top-Down* e a *Step-up*.

A estratégia *Top-Down*, sugerida por Verbeke e Molenberghs (2000), tem como objetivo principal, entender a variação sistemática do modelo antes de investigar a variação aleatória presente nos dados. Para isso, em um primeiro momento, é ajustado um modelo maximal, que considera todos os termos de efeitos fixos (efeitos principais e de interação entre níveis de fatores de tratamento) mais prováveis e na qual o pesquisador tenha interesse. A seguir, admitindo $cov(\boldsymbol{\varepsilon}_i) = \mathbf{R}_i = \mathbf{I}\sigma^2$, estuda-se a inclusão dos termos de efeito aleatório, \mathbf{Z}_i , e a escolha da melhor estrutura de $cov(\mathbf{b}_i) = \mathbf{G}$. Nas comparações de modelos utiliza-se o teste da razão de verossimilhança.

Após o ajuste do modelo maximal e a escolha da melhor estrutura de efeitos aleatórios, se necessário, pode-se buscar uma estrutura mais complexa para \mathbf{R}_i , que explique a variabilidade não explicada pelos efeitos aleatórios. O último passo consiste em reduzir o modelo maximal em busca do modelo parcimonioso, testando gradativamente a retirada de parâmetros de efeito fixo e aleatório, utilizando os testes estatísticos ou os critérios de informação já apresentados na seção 2.2.5.

Já a estratégia *Step-up* foi sugerida por Snijders e Bosker (1999) e Raudenbush e Bryk (2002) e consiste em ajustar, em um primeiro momento, um modelo que considere somente o intercepto ou um parâmetro comum a todas as observações e, progressivamente, realizar a inserção dos fatores de interesse, bem como as suas interações.

Vale ressaltar que em ambas as estratégias, o teste da razão de verossimilhanças pode ser usado para verificar a inclusão ou exclusão dos termos no modelo. Os critérios de informação também são apropriados.

2.2.6. Diagnósticos e validação do modelo

Após o ajuste do modelo, deve ser feita uma avaliação para verificar se o modelo de fato está bem ajustado aos dados, observando se as suposições assumidas foram realmente satisfeitas e se existem observações atípicas. Apesar de ser necessária, na prática, essa verificação pode ser mais difícil para dados longitudinais, tendo em vista a forma pela qual os dados estão estruturados.

Para verificar a normalidade dos dados, Dempster e Ryan (1985) propuseram uma avaliação utilizando gráficos de probabilidade normais ponderados (*weighted normal plots*). Para Lima (1996) quando os dados apresentam normalidade, a identificação de valores e de perfis atípicos pode ser feita avaliando-se os diagramas paralelos de dispersão, que são gráficos com os perfis individuais de respostas.

No contexto dos modelos lineares mistos diversas técnicas, tanto formais quanto informais, vem sendo utilizadas a fim de validar a utilização do modelo, tal como fizeram West, Welch e Galecki (2007). Para esses autores realizar diagnósticos e suas devidas interpretações para esses tipos de modelos se torna uma tarefa árdua quando comparado aos modelos lineares tradicionais, tendo em vista a alta complexidade que os modelos lineares mistos

apresentam, consequência da presença dos efeitos aleatórios e as diferentes estruturas de covariâncias que estes mesmos efeitos podem assumir.

2.2.7. Tipos de resíduos

Os diagnósticos dos modelos utilizam os resíduos gerados por ele. Para o caso dos modelos lineares tradicionais existem três tipos de resíduos: o resíduo ordinário, calculado como a diferença entre cada valor observado no conjunto de dados e o valor predito pelo modelo e os resíduos estudentizados internamente e externamente, que se referem a correções feitas a partir dos resíduos ordinários, procurando retirar qualquer viés presente na variância do erro (DEMÉTRIO; ZOCHI, 2011). As principais estatísticas utilizadas para os diagnósticos são: *leverage*, estatísticas DFBeta, DFFit, Distância de Cook. Para as análises gráficas utilizam-se: o diagrama de dispersão entre os resíduos e os valores ajustados, gráfico da variável adicionada, gráfico de resíduos parciais e os gráficos *normal plot* e *half-normal plot* com envelope de simulação.

No caso de modelos lineares mistos tem-se os seguintes resíduos:

- a) Resíduo marginal

$$\mathbf{r}_m = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} \quad (23)$$

Consiste na diferença entre o vetor de valores observados e a média marginal estimada. Tais resíduos são empregados na verificação da linearidade dos efeitos fixos e a presença de outliers (SINGER; NOBRE; ROCHA, 2013).

- b) Resíduo condicional

$$\mathbf{r}_c = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{b}} \quad (24)$$

Consiste na diferença entre o vetor de valores observados e o valor predito do modelo. Tal como os resíduos marginais, este tipo de resíduos também é utilizado na verificação da presença de outliers, como também das pressuposições de normalidade e homogeneidade dos erros condicionais do modelo (SINGER; NOBRE; ROCHA, 2013).

- c) Efeitos aleatórios ou resíduos de 2º nível

$$\mathbf{r}_e = \mathbf{Z}\hat{\mathbf{b}} \quad (25)$$

Alcarde (2012) e Loy (2013) sustentam a ideia de que os resíduos condicionais e marginais não são os mais adequados para o diagnóstico dos modelos lineares mistos, já que podem apresentar correlação entre si, até mesmo para dados não correlacionados. A fim de contornar este problema a padronização de tais resíduos deve ser realizada. Essa padronização consiste em dividir os resíduos pela estimativa do desvio padrão, obtendo-se os chamados resíduos estudentizados para os modelos lineares mistos, quais sejam:

- a) Resíduo marginal estudentizado

$$\mathbf{r}_{mes} = \frac{\mathbf{r}_{m_i}}{\sqrt{\text{Var}(\mathbf{r}_{m_i})}} \quad (26)$$

- b) Resíduo condicional estudentizado

$$\mathbf{r}_{ces} = \frac{\mathbf{r}_{c_i}}{\sqrt{\text{Var}(\mathbf{r}_{c_i})}} \quad (27)$$

Por possuírem uma estrutura hierárquica, Loy (2013) propõe que a avaliação da estrutura referente aos resíduos do modelo linear misto ajustado seja muito mais minuciosa tendo vista a dependência existente entre os dois estágios do modelo, conforme apresentado na seção 2.1.2.

O primeiro passo para se realizar um bom diagnóstico é entender que a inferência para a parte fixa do modelo é bastante robusta (BUTLER; LOUIS, 1992 e VERBEKE; LESAFFRE, 1997 e LOY, 2013), o que não ocorre para os efeitos aleatórios que são bem mais sensíveis à má especificação do modelo da estrutura de covariâncias.

O aninhamento dos dois estágios do modelo linear misto reflete em uma dependência entre as diferentes estruturas de resíduos (LOY, 2013). Por conta desta influência, propôs verificar as pressuposições do modelo com base nos denominados resíduos de confundimento mínimo (HILDEN-MINTON, 1995), que consistem em uma combinação linear dos resíduos condicionais ($\mathbf{U}'\mathbf{r}_c$) com o objetivo de reduzir ao máximo possível confundimento entre os resíduos do modelo, representados pelos vetores $\hat{\mathbf{b}}$ e $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$.

O processo para determinação da melhor combinação linear dos resíduos condicionais visando à obtenção dos resíduos de confundimento mínimo encontra-se no ANEXO A. Segundo Hilden-Minton (1995), os resíduos não correlacionados que contêm a fração de confundimento mínimo são calculados pela expressão

$$\frac{\mathbf{l}'_i \mathbf{r}_c}{\sigma}, i = 1, 2, \dots, (n - p_X)$$

sendo $(n - p_X)$ o número de autovalores não nulos da matriz $\mathbf{R}^{1/2} \mathbf{Q} \mathbf{R}^{1/2}$ presentes em uma das fases da transformação linear dos resíduos, como apresentada no ANEXO A.

Os efeitos aleatórios preditos, também chamados resíduos de segundo nível, podem ser usados no diagnóstico de modelos, embora apresentem confundimento com os resíduos condicionais (LOY, 2013). Tais resíduos de segundo nível são utilizados para identificar variáveis explanatórias adicionais que contribuem significativamente para o modelo; conferir a linearidade das variáveis adicionadas na estrutura de efeitos aleatórios e verificar a normalidade dos efeitos aleatórios, tendo em vista o confundimento já mencionado com os outros dois tipos de resíduos.

A obtenção desse tipo de resíduo pode ser feita facilmente com o uso da função **ranef()** ou com a função **hlm_resid()** do pacote **HLMdiag** do programa R. Tal pacote também permite a extração de algumas matrizes de interesse associadas ao modelo linear misto: as matrizes de especificação \mathbf{X} e \mathbf{Z} , o vetor de efeitos aleatórios preditos $\hat{\mathbf{b}}$, as estimativas das matrizes de variâncias e covariâncias intra-indivíduos, \mathbf{R} , e inter-indivíduos, \mathbf{G} .

A verificação da normalidade dos erros utilizando os resíduos de confundimento mínimo ou os resíduos de segundo nível pode ser feita utilizando-se os testes tradicionais, com os de Shapiro-Wilk e de Anderson-Darling, bem como o uso de gráfico normal-plot ou quantil-quantil (LOY, 2013).

2.2.8. Modelos lineares mistos para dados longitudinais bivariados

Embora a análise de dados longitudinais por meio de modelos lineares mistos seja bastante usual em algumas áreas de pesquisa, pode ser importante o estudo simultâneo de duas ou mais variáveis respostas medidas repetidamente nos mesmos indivíduos ao longo do tempo, aproveitando a possível correlação, positiva ou negativa, entre essas variáveis.

Segundo Fieuws (2006, apud AMARAL, 2013) essa análise bivariada é bastante flexível, pois permite a modelagem de dados com as mesmas distribuições probabilísticas ou com distribuições diferentes. Também não há

necessidade de que haja o mesmo número de mensurações ao longo do tempo para as duas variáveis medidas nos mesmos indivíduos.

A Tabela 1 apresenta um exemplo simples da estrutura de dados bivariados balanceados, considerando y_{rijk} a mensuração da r -ésima variável resposta ($r = 1, 2$) na i -ésima unidade experimental ($i = 1, 2, 3, 4$) referente ao k -ésimo tratamento ($k = 1, 2, 3$), na j -ésima ocasião ($j = 1, 2, 3, 4$).

Tabela 1. Exemplo de estrutura bivariada de respostas considerando três tratamentos, quatro repetições por tratamento e mensurações em quatro instantes do tempo

Tratamento	Unidade Experimental	Variável resposta							
		1				2			
		Ocasião				Ocasião			
		1	2	3	4	1	2	3	4
1	1	y_{1111}	y_{1121}	y_{1131}	y_{1141}	y_{2111}	y_{2121}	y_{2131}	y_{2141}
1	2	y_{1211}	y_{1221}	y_{1231}	y_{1241}	y_{2211}	y_{2221}	y_{2231}	y_{2241}
1	3	y_{1311}	y_{1321}	y_{1331}	y_{1341}	y_{2311}	y_{2321}	y_{2331}	y_{2341}
1	4	y_{1411}	y_{1421}	y_{1431}	y_{1441}	y_{2411}	y_{2421}	y_{2431}	y_{2441}
2	1	y_{1112}	y_{1122}	y_{1132}	y_{1142}	y_{2112}	y_{2122}	y_{2132}	y_{2142}
2	2	y_{1212}	y_{1222}	y_{1232}	y_{1242}	y_{2212}	y_{2222}	y_{2232}	y_{2242}
2	3	y_{1312}	y_{1322}	y_{1332}	y_{1342}	y_{2312}	y_{2322}	y_{2332}	y_{2342}
2	4	y_{1412}	y_{1422}	y_{1432}	y_{1442}	y_{2412}	y_{2422}	y_{2432}	y_{2442}
3	1	y_{1113}	y_{1123}	y_{1133}	y_{1143}	y_{2113}	y_{2123}	y_{2133}	y_{2143}
3	2	y_{1213}	y_{1223}	y_{1233}	y_{1243}	y_{2213}	y_{2223}	y_{2233}	y_{2243}
3	3	y_{1313}	y_{1323}	y_{1333}	y_{1343}	y_{2313}	y_{2323}	y_{2333}	y_{2343}
3	4	y_{1413}	y_{1423}	y_{1433}	y_{1443}	y_{2413}	y_{2423}	y_{2433}	y_{2443}

Dada a mensuração de duas variáveis respostas, y_1 e y_2 , em um experimento com medidas repetidas, Amaral (2013) propõe o seguinte modelo linear misto:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{1i} &= \mathbf{X}_{1i}\boldsymbol{\beta}_1 + \mathbf{Z}_{1i}\mathbf{b}_{1i} + \boldsymbol{\varepsilon}_{1i} \\ \mathbf{y}_{2i} &= \mathbf{X}_{2i}\boldsymbol{\beta}_2 + \mathbf{Z}_{2i}\mathbf{b}_{2i} + \boldsymbol{\varepsilon}_{2i} \end{aligned} \quad (28)$$

em que \mathbf{y}_{1i} é o vetor de observações da primeira variável resposta do i -ésimo indivíduo, e \mathbf{y}_{2i} é o vetor de observações da segunda variável resposta. Os demais vetores e matrizes presentes em (28) são especificados como em (2), mas considerando as duas variáveis respostas.

Outra particularidade se encontra na distribuição do vetor de efeitos aleatórios \mathbf{b}_i que considera mais de uma variável em sua estrutura, admitindo uma distribuição normal bivariada, com um vetor de médias nulo e matriz de variâncias e covariâncias \mathbf{G} :

$$\mathbf{b}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{1i} \\ \mathbf{b}_{2i} \end{pmatrix} \sim N \left[\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{11} & \mathbf{G}_{12} \\ \mathbf{G}_{21} & \mathbf{G}_{22} \end{pmatrix} \right]$$

De forma similar, admite-se que o vetor de erros $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ é:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{1i} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{2i} \end{pmatrix} \sim N \left[\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{1i} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\Sigma}_{2i} \end{pmatrix} \right]$$

Supor a não correlação entre os vetores de erros $\boldsymbol{\varepsilon}_{i1}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_{i2}$ é o mesmo que admitir que as trajetórias das duas respostas são distintas e independentes (FIEUWS; VERBEKE, 2004; AMARAL, 2013).

2.2.8.1. Diagnóstico para modelos lineares mistos bivariados

O gráfico boxplot bivariado é um dos recursos usados para verificar a presença de valores atípicos e a normalidade bivariada dos erros. Este gráfico apresenta linhas de regressão relacionando uma variável à outra, definidas dentro de um par de elipses concêntricas (EVERITT, 2005). A normalidade bivariada dos resíduos é atendida quando todos os resíduos ou sua maioria se encontrarem no interior da elipse (AMARAL, 2013).

Uma estatística útil para a verificação da normalidade bivariada é a distância de Mahalanobis, que é baseada na distância entre os vetores de observações e o ajustado pelo modelo e a covariância entre as variáveis respostas e os vetores de características estudados (LI; JAIN, 2009). A expressão da distância de Mahalanobis é dada por:

$$d_i = \sqrt{(\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{y}}_i)' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{y}}_i)} \quad (29)$$

em que \mathbf{V} é a matriz de variâncias e covariâncias do modelo bivariado marginal. Por exemplo: considerando somente o efeito aleatório no intercepto de cada reta, três medidas repetidas, nomeando para a primeira variável resposta $b_{0_1} = b_1$ e para a segunda $b_{0_2} = b_2$, e usando a expressão (17), Amaral (2013) apresentou para o caso bivariado a seguinte configuração da matriz \mathbf{V} :

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{b_1}^2 & \sigma_{b_1 b_2} \\ \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} + \mathbf{I}_3 \otimes \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$$

Ou

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \sigma_{b_1}^2 + \sigma_1^2 & \sigma_{b_1}^2 & \sigma_{b_1}^2 & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} \\ \sigma_{b_1}^2 & \sigma_{b_1}^2 + \sigma_1^2 & \sigma_{b_1}^2 & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} \\ \sigma_{b_1}^2 & \sigma_{b_1}^2 & \sigma_{b_1}^2 + \sigma_1^2 & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} \\ \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_2}^2 + \sigma_2^2 & \sigma_{b_2}^2 & \sigma_{b_2}^2 \\ \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_2}^2 & \sigma_{b_2}^2 + \sigma_2^2 & \sigma_{b_2}^2 \\ \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_1 b_2} & \sigma_{b_2}^2 & \sigma_{b_2}^2 & \sigma_{b_2}^2 + \sigma_2^2 \end{pmatrix} \quad (30)$$

2.2.8.2. O teste de Henze-Zirkler para verificação da normalidade multivariada

O teste de Henze-Zirkler (HZ) está baseado numa distância funcional não negativa, que mede a distância entre duas funções de distribuição (KORKMAZ; GOKSULUK; ZARARSIZ, 2015). A estatística do teste é

$$HZ = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \epsilon^{\frac{\beta^2}{2} D_{ij}} - 2(1 + \beta^2)^{\frac{r}{2}} \sum_{i=1}^n \epsilon^{-\frac{\beta^2}{2(1+\beta^2)} D_i} - n(1 + 2\beta^2)^{-\frac{r}{2}}$$

Em que:

r é o número de variáveis respostas

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{n(2r+1)}{4} \right)^{\frac{1}{r+4}}$$

$D_{ij} = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ é a distância de Mahalanobis entre as observações de ordem i e j ;

$D_i = (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})$, é a distância de Mahalanobis entre a observação de ordem i e o centróide.

Mangueira (2017) ressalta que quando os dados possuem distribuição normal multivariada, a distribuição da estatística do teste possui uma distribuição log-normal aproximada. Considerando dados normalmente distribuídos sob o ponto de vista multivariado, então a média μ e a variância σ^2 são definidas por:

$$\mu = 1 - \frac{a^{-\frac{r}{2}} \left(1 + r\beta^2 + r(r+2)\beta^4 \right)}{2a^2}$$

$$\sigma^2 = 2(1 + 4\beta^2)^{-r/2} + \frac{2a^{-r}(1+2r\beta^4)}{a^2} + \frac{3r(r+2)\beta^8}{4a^4} - 4w\beta^{-\frac{r}{2}} \left(1 + \frac{3p\beta^4}{2w\beta} + \frac{r(r+2)\beta^8}{2w\beta^2} \right)$$

em que:

$$a = 1 + 2\beta^2$$

$$w\beta = (1 + \beta^2)(1 + 3\beta^2)$$

Sabendo que distribuição da estatística do teste será uma log-normal aproximada, então a média e a variância log-normalizadas serão:

$$\ln(\mu) = \ln \left(\sqrt{\frac{\mu^4}{\sigma^2 + \mu^2}} \right)$$

$$\ln(\sigma^2) = \ln \left(\frac{\sigma^2 + \mu^2}{\sigma^2} \right)$$

Tendo calculado os parâmetros μ e σ^2 da distribuição log-normalizada, a significância da normalidade multivariada pode ser feita pelo teste de Wald, que apresenta a seguinte estatística:

$$z = \frac{\ln(HZ) - \ln(\mu)}{\ln(\sigma)}$$

Outros testes para análise de normalidade multivariada são citados na literatura, como o teste de Doornik-Hansen (DOORNIK; HANSEN, 1994) e o teste de Royston (ROYSTON, 1992), sendo este último uma extensão do teste de Shapiro-Wilk usado para o caso univariado.

3. MATERIAL E MÉTODOS

3.1. Material

O conjunto de dados utilizados neste trabalho resultaram de um experimento ocorrido no campus da Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” – ESALQ, da Universidade São Paulo, Piracicaba – SP, com duração de 8 semanas. Intencionalmente seriam utilizados 66 bezerros leiteiros distribuídos em 22 blocos, com três animais por bloco, tendo como fator de blocagem o peso ao nascimento, e comparados os efeitos de três tipos de dietas para o concentrado inicial:

A: Dieta contendo 22% de fibra detergente neutro (FDN);

B: Dieta contendo 22% de fibra detergente neutro com adição de feno;

C: Dieta contendo 31% de fibra detergente neutro.

Dentre as variáveis respostas avaliadas no experimento, foram utilizadas no presente trabalho, o peso (kg) e o consumo médio semanal de sólidos (g) totais de cada animal. Tais variáveis foram selecionadas entre as demais respostas analisadas pois teoricamente espera-se uma provável correlação entre ambas, dada a influência do nível de consumo sobre a evolução do peso dos animais, bem como a influência do peso sobre o grau do consumo. As medidas de consumo foram feitas diariamente antes da nova oferta de concentrado e foram calculadas pela diferença entre a quantidade ofertada no dia anterior e a quantidade restante nos cochos na hora da próxima oferta. O peso dos animais foi avaliado semanalmente, antes da alimentação matutina com uma balança mecânica do tipo ICS-300, Coimma Ltda. As três diferentes dietas foram aleatorizadas aos animais dentro de cada bloco, sendo utilizado somente um animal para a avaliação de cada dieta em cada bloco.

Ao decorrer do experimento alguns animais vieram à óbito, devido às condições sanitárias que estes apresentavam ao chegarem ao mesmo, enquanto outros animais não entraram no estudo pois não atendiam às condições de blocagem propostas pelos pesquisadores responsáveis. Com isso houve a falta de informações de 26 unidades experimentais, caracterizando um cenário de desbalanceamento no conjunto de dados, conforme o Tabela 2.

Tabela 2. Esboço do croqui experimental

Bloco										
	1		2		3		4		5	
Parcela	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal
1	A	1	C	4	A	6	A	7	C	10
2	C	2	-	-	C	8	C	11	-	-
3	B	3	-	-	B	9	-	-	-	-
Bloco										
	6		7		8		9		10	
Parcela	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal
1	B	12	C	19	C	15	A	21	B	22
2	A	14	B	20	A	18	-	-	C	25
3	C	16	-	-	-	-	-	-	A	26
Bloco										
	11		12		13		14		15	
Parcela	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal
1	C	23	A	24	B	27	A	29	C	30
2	-	-	-	-	A	28	-	-	-	-
3	-	-	-	-	C	34	-	-	-	-

Continua.

Continuação

Bloco										
	16		17		18		19		20	
Parcela	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal	Dieta	Animal
1	B	31	B	36	A	37	B	40	B	41
2	A	33	A	39	-	-	A	43	A	42
3	C	35	-	-	-	-	-	-	-	-

Bloco				
	21		22	
Parcela	Dieta	Animal	Dieta	Animal
1	A	44	B	45
2	-	-	-	-
3	-	-	-	-

3.2. Métodos

A análise estatística dos dados foi feita utilizando modelos lineares mistos uni e bivariados, seguindo as etapas que serão descritas a seguir.

Numa primeira etapa definiu-se o modelo maximal das partes fixa e aleatória. As escolhas do grau do polinômio que explica bem o comportamento da variável resposta ao longo do tempo e de uma estrutura de efeitos aleatórios associados aos seus coeficientes foram baseadas na análise visual dos gráficos de perfis individuais e médios de respostas. Na parte fixa, o modelo maximal incluiu uma curva polinomial para cada dieta.

Usando esse modelo maximal na estrutura fixa do modelo, numa segunda etapa, foram comparadas diversas estruturas mais simples de efeitos aleatórios e diferentes estruturas das matrizes de covariâncias inter-indivíduos (matriz \mathbf{G}) e intra-indivíduos (matriz \mathbf{R}). Na comparação das estruturas para os efeitos aleatórios utilizou-se a estratégia *top-down*.

Para contornar o severo desbalanceamento entre os blocos, provocado pela perda dos animais durante a execução do experimento, optou-se por substituir o fator bloco da parte fixa do modelo pelo uso da covariável peso dos animais ao nascimento. Por se tratar de uma característica inerente ao animal, foi estudada a inclusão dessa covariável somente na parte aleatória do modelo.

Em todas as comparações de modelos utilizou-se o Teste da Razão de Verossimilhanças para modelos encaixados e o Critério de Informação Bayesiano de Schwarz (BIC), dado o seu rigor na seleção dos modelos conforme descrito na seção 2.2.4 para modelos não encaixados.

Numa terceira etapa, realizada após a seleção da melhor estrutura de efeitos aleatórios e das estruturas das matrizes de covariâncias inter e intra-indivíduos, foram feitas comparações na parte fixa do modelo maximal com modelos mais simples, a partir de sugestões evidenciadas nos valores dos coeficientes polinomiais ajustados para as diferentes dietas e pelos gráficos das curvas médias ajustadas. Nessas comparações utilizou-se o teste de Wald.

Admitindo a possibilidade de uma nova estrutura aleatória se adequar melhor à estrutura selecionada na etapa anterior, numa quarta etapa, repetiu-se o processo de seleção de efeitos aleatórios utilizando os mesmos testes e estatísticas destacados na segunda etapa do processo de análise dos dados.

Após a escolha do melhor modelo realizou-se o diagnóstico do modelo para ambas as abordagens, utilizando, principalmente, análises gráficas de resíduos.

Tanto para o caso univariado quanto para o caso bivariado, foram utilizados: o gráfico quantil-quantil para verificar a normalidade dos resíduos, o gráfico dos valores preditos versus valores observados, o histograma e o boxplot

dos resíduos do modelo para verificação de presença de valores atípicos, além do gráfico com os valores observados e as curvas individuais ajustadas.

Utilizou-se o teste de Shapiro-Wilk para a verificação da pressuposição de normalidade dos resíduos de confundimento mínimo para o caso univariado, e para o caso bivariado utilizou-se o teste de Henze-Zirkler. Em todos os testes foi utilizado o nível de significância de 5% para a tomada de decisões, considerando este o grau adotado na maioria dos experimentos agrícolas.

O estudo da presença de outliers na análise bivariada baseou-se no boxplot bivariado e a normalidade uni e bivariada dos efeitos aleatórios foi verificada utilizando as mesmas ferramentas de verificação utilizadas para os resíduos.

A comparação entre os resíduos de confundimento mínimo, marginal e condicional estudentizados foi baseada em análises gráficas, para as abordagens uni e bivariada.

O ajuste dos modelos foi feito inteiramente em ambiente R (R CORE TEAM, 2021), com o uso da função **lme()** do pacote **nlme**, e a extração da matriz **V** de variâncias e covariâncias para a abordagem bivariada pelo programa SAS (SAS 9.4), dado o desconhecimento de um recurso específico para esta função no primeiro.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1. ANÁLISE UNIVARIADA

4.1.1. Pesos de bezerros submetidos a três tipos de dieta sólida

Na Tabela 3 percebe-se um aumento nos valores das médias e dos desvios padrões dos pesos dos bezerros submetidos às três dietas, ao longo do período experimental.

Tabela 3. Médias e desvios-padrões dos pesos dos bezerros em cada semana para cada dieta fornecida

Semana	Dieta					
	A: 22% FDN		B: 22% FDN + feno		C: 31%FDN	
	Média	d.p.	Média	d.p.	Média	d.p.
1	37,125	4,379	38,400	3,578	37,623	5,560
2	37,287	4,961	38,600	3,672	38,176	5,118
3	38,481	4,811	40,700	4,018	39,661	5,048
4	39,956	5,544	42,254	5,571	42,161	6,419
5	42,037	5,829	43,672	6,092	44,761	6,808
6	44,093	6,369	46,554	6,650	47,784	7,804
7	46,593	6,805	49,109	8,769	51,838	8,918
8	51,525	8,484	52,790	10,394	56,076	9,957

Na Tabela 4 fica evidente o aumento das variâncias dos pesos ao longo do tempo para as três dietas e um decréscimo da correlação amostral à medida que o intervalo entre as semanas aumenta.

Tabela 4. Variâncias (diagonal em negrito), covariâncias (abaixo da diagonal) e correlação (acima da diagonal) dos pesos dos bezerros entre as semanas para cada dieta

Semana	Dieta A: 22% de FDN							
	Semana							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	17,983	0,962	0,884	0,832	0,707	0,549	0,454	0,271
2	19,627	23,105	0,909	0,892	0,814	0,660	0,543	0,324
3	17,941	20,912	22,902	0,946	0,881	0,795	0,713	0,533
4	19,617	23,856	25,176	30,895	0,960	0,890	0,821	0,652
5	17,655	23,044	24,840	31,425	34,633	0,965	0,900	0,733
6	15,011	20,455	24,537	31,881	36,607	41,531	0,974	0,836
7	13,226	17,925	23,437	31,348	36,389	43,098	47,100	0,912
8	9,612	13,027	21,348	30,313	36,103	45,094	52,385	69,946
Semana	Dieta B: 22% de FDN com adição de feno							
	Semana							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	14,108	0,954	0,816	0,799	0,654	0,565	0,608	0,573
2	13,858	14,942	0,907	0,889	0,802	0,747	0,799	0,777
3	12,746	14,594	17,293	0,961	0,875	0,857	0,870	0,815
4	17,212	19,712	22,933	32,872	0,923	0,851	0,820	0,797
5	15,141	19,104	22,419	32,583	37,909	0,948	0,896	0,913
6	14,373	19,540	24,134	33,017	39,498	45,777	0,960	0,951
7	20,681	27,972	32,767	42,594	49,978	58,831	81,900	0,975
8	23,288	32,483	36,637	49,416	60,799	69,557	95,423	116,729

Continua.

Continuação

Dieta C: 31% de FDN								
Semana	Semana							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	30,916	0,944	0,918	0,786	0,689	0,594	0,631	0,593
2	26,890	26,200	0,980	0,912	0,827	0,762	0,787	0,749
3	25,784	25,329	25,484	0,959	0,894	0,831	0,843	0,792
4	28,067	29,990	31,110	41,214	0,972	0,933	0,932	0,896
5	26,103	28,840	30,745	42,492	46,354	0,980	0,973	0,924
6	25,782	30,453	32,780	46,770	52,095	60,914	0,988	0,929
7	31,334	35,955	37,977	53,393	59,087	68,782	79,539	0,962
8	32,883	38,203	39,840	57,309	62,688	72,245	85,500	99,160

Na Figura 1 também se percebe um aumento na variabilidade dos pesos dos bezerros ao longo das semanas, que é mais evidente na dieta B: 22% de FDN com adição de feno, além de certa curvatura nos perfis individuais de peso indicando que um polinômio de 2º grau possa explicar bem o comportamento médio das respostas ao longo do tempo. Os perfis individuais indicam também a necessidade de inclusão de efeitos aleatórios no intercepto e nos coeficientes de primeiro e segundo graus do polinômio a ser ajustado.

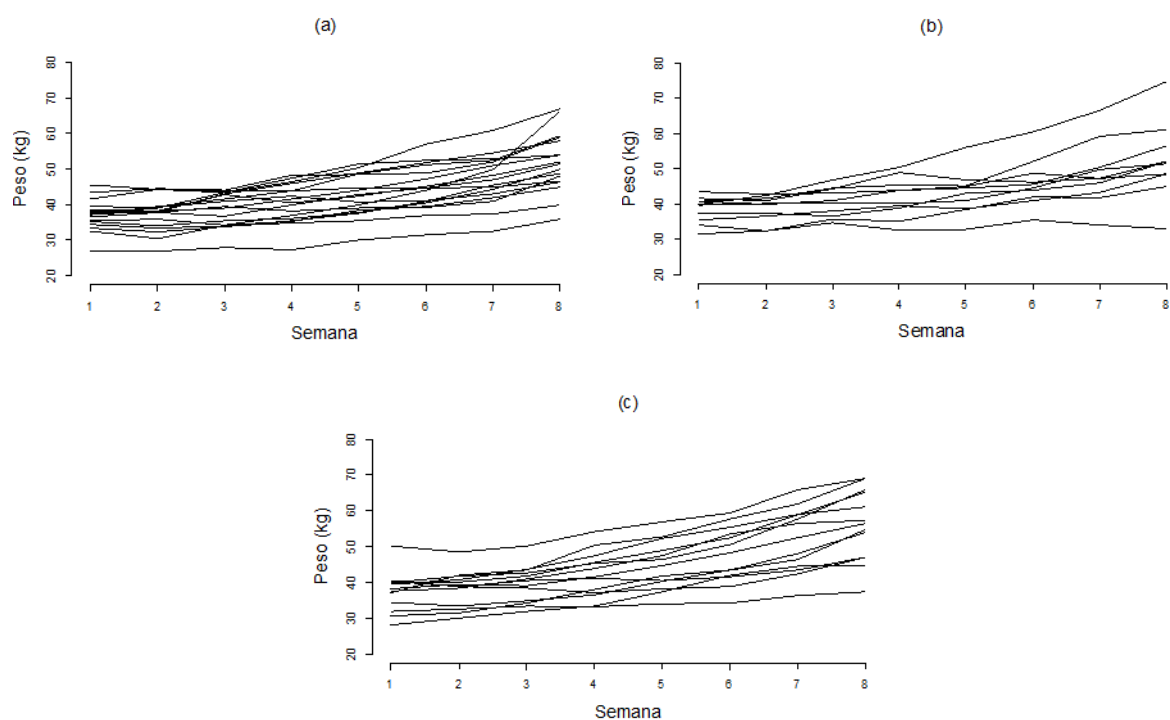


Figura 1. Perfis individuais dos pesos semanais dos bezerros que receberam as dietas contendo (a) 22% de FDN, (b) 22% de FDN com adição de feno e (c) 31% de FDN.

A Figura 2 confirma a indicação de um polinômio de 2º grau para explicar o crescimento em peso dos bezerros ao longo do tempo e o distanciamento entre os perfis médios de peso das dietas nas últimas semanas de avaliação, indica a necessidade de ajustar curvas polinomiais distintas para as três dietas.

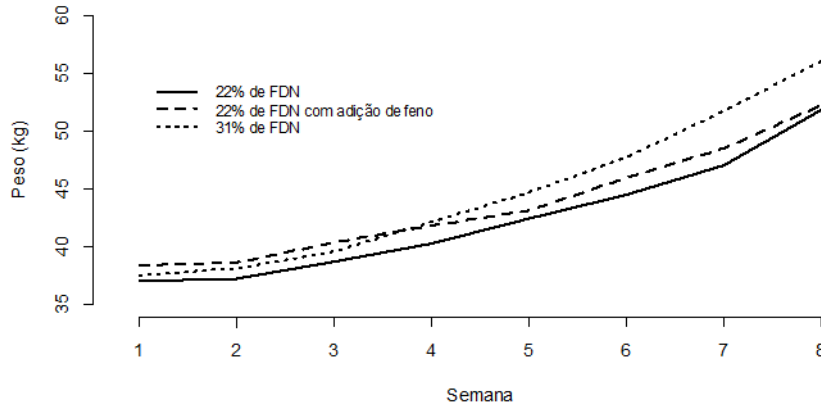


Figura 2. Perfis médios dos pesos dos bezerros ao longo das semanas para cada tipo de dieta.

Diante do exposto, o modelo misto maximal, ou de referência, usado para explicar o comportamento longitudinal dos pesos dos bezerros submetidos a três diferentes dietas é apresentado na expressão (31). Note que o efeito da terceira dieta e a sua interação com o fator tempo não estão explícitos na expressão pois, dada a parametrização realizada em R, tal efeito se encontra confundido em β_0 , sendo este considerado o efeito fixo comum do intercepto às três dietas.

$$y_{ij} = \underbrace{\beta_0 + \beta_1 t_j + \beta_2 t_j^2 + \beta_3 a_{1i} + \beta_4 a_{2i} + \beta_5 a_{1i} t_j + \beta_6 a_{2i} t_j + \beta_7 a_{1i} t_j^2 + \beta_8 a_{2i} t_j^2}_{\text{parte fixa}} + \underbrace{b_{0i} + b_{1i} t_j + b_{2i} t_j^2 + \varepsilon_{ij}}_{\text{parte aleatória}} \quad (31)$$

para $i = 1, 2, \dots, 40$ e $j = 1, 2, 3, \dots, 8$ em que

y_{ij} é a resposta do i -ésimo indivíduo na j -ésima semana;

β_0 é o intercepto comum à todas as dietas;

β_1 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à j -ésima semana;

β_2 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à j -ésima semana;

β_3 é o coeficiente associado à dieta a_1 ;

β_4 é o coeficiente associado à dieta a_2 ;

β_5 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_1 ;

β_6 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_2 ;

β_7 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_1 ;

β_8 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_2 ;

b_{0i} é o efeito aleatório associado ao intercepto do polinômio para o i -ésimo indivíduo;

b_{1i} é o efeito aleatório associado ao coeficiente de primeiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo;

b_{2i} é o efeito aleatório associado ao coeficiente de segundo grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo;

ε_{ij} é o erro aleatório associado a y_{ij} .

A escolha do melhor conjunto de efeitos aleatórios (\mathbf{b}_i) e da melhor estrutura de variâncias e covariâncias (\mathbf{G}), admitindo $\mathbf{R}_i = \mathbf{I}\sigma^2$, foi feita a partir do modelo maximal formado pela parte fixa da expressão (31). A Tabela 5 apresenta as estruturas de efeitos aleatórios que foram comparadas. Também se avaliou a inclusão de efeitos aleatórios associados ao peso ao nascimento (PN) dos bezerros, por considerá-lo uma provável causa de variações entre indivíduos, em substituição à inclusão do efeito da blocagem dos bezerros na parte fixa do modelo.

Tabela 5. Estrutura de efeitos aleatórios considerando o modelo maximal para a variável resposta peso

Modelo	Efeitos aleatórios
M1	$b_0 + b_1 + b_2$
M2	$b_0 + b_2$
M3	$b_0 + b_1$
M4	b_0
M5	PN e $(b_0 + b_1 + b_2)$
M6	PN e $(b_0 + b_2)$
M7	PN e $(b_0 + b_1)$
M8	PN e b_0

Os resultados apresentados na Tabela 6 indicam que os modelos M1 e M5 foram significantes dado os dois considerados melhores nos conjuntos de modelos encaixados (com e sem influência do peso ao nascimento na estrutura de efeitos aleatórios). Como estes dois modelos não são encaixados e baseando-se no menor valor do BIC, escolheu-se o modelo M1, que apresenta em sua estrutura aleatória os efeitos associados a todos os coeficientes do polinômio de 2º grau. Por *default*, o a função `lme()` do pacote `nlme` em R realiza os ajustes considerando uma matriz intra-indivíduos \mathbf{R} de componentes de variância homogênea, denotada como $\mathbf{I}\sigma^2$, e uma matriz \mathbf{G} do tipo positiva definida geral (não estruturada).

Tabela 6. Comparações visando à seleção da estrutura de efeitos aleatórios para o estudo do peso de bezerros (kg)

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M1	16	1510,793	1418,957	-	-	-
M2	13	1550,654	1476,037	M1 x M2	57,080	<0,0001
M3	13	1557,663	1483,046	M1 x M3	64,089	<0,0001
M4	11	1841,694	1778,557	M2 x M4	302,519	<0,0001
-	-	-	-	M3 x M4	295,510	<0,0001
M5	16	1516,551	1424,715	-	-	-
M6	13	1556,043	1481,426	M5 x M6	56,711	<0,0001
M7	13	1562,722	1488,105	M5 x M7	63,390	<0,0001
M8	11	1845,692	1782,554	M6 x M8	301,128	<0,0001
-	-	-	-	M7 x M8	294,449	<0,0001

n.p.: número de parâmetros

Na busca pela melhor estrutura de variâncias e covariâncias da matriz \mathbf{G} associada ao conjunto de efeitos aleatórios do modelo M1, foram comparadas as estruturas: diagonal (M1.1), simetria composta (M1.2) e múltipla identidade (M1.3). Os resultados apresentados na Tabela 7 indicam que a estrutura mais geral (UN), que admite variâncias e covariâncias distintas, é a mais adequada para os efeitos aleatórios.

Tabela 7. Comparação de estruturas de covariâncias para a matriz \mathbf{G} no modelo M1

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M1	16	1510,793	1418,957	-	-	-
M1.1	13	1518,100	1443,483	M1 x M1.1	24,526	<0,0001
M1.2	12	1856,633	1787,756	M1 x M1.2	368,798	<0,0001
M1.3	11	1866,284	1803,146	M1 x M1.3	384,189	<0,0001

n.p.: número de parâmetros

Após a escolha do conjunto de efeitos aleatórios e da estrutura da matriz \mathbf{G} , foi testada a necessidade de uma estrutura mais complexa que $\mathbf{R}_i = \sigma^2 \mathbf{I}$, para a matriz de variâncias e covariâncias intra-indivíduos. Com os resultados apresentados na Tabela 8, escolheu-se a estrutura do modelo M1.5, autorregressiva de 1ª ordem com heterogeneidade de variâncias - ARH(1), que é melhor que a estrutura $\mathbf{R}_i = \sigma^2 \mathbf{I}$ e apresenta o menor valor de BIC que as demais estruturas. Essa estrutura admite diferentes variâncias para cada semana e a diminuição da correlação entre as semanas à medida que o intervalo entre os tempos aumenta.

Tabela 8. Comparação de estruturas para a matriz \mathbf{R}_i no modelo M1

Modelo	Estrutura	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M1	VC	16	1510,793	1418,957	-	-	-
M1.4	VCH	23	1516,214	1384,198	M1 x M1.4	34,758	<0,0001
M1.5	ARH(1)	24	1505,514	1367,759	M1.4 x M1.5	16,439	<0,0001
M1.6	CSH	24	1512,511	1374,756	M1.4 x M1.6	9,442	0,0021

n.p.: número de parâmetros; VC: Componentes de Variância Homogênea; VCH: Componentes de Variância Heterogênea; ARH(1): Autorregressiva de 1ª Ordem com Heterogeneidade de Variâncias; CSH: Simetria Composta com Heterogeneidade de Variâncias.

Os resultados dos testes de Wald para os efeitos fixos do modelo M1.5 apresentados na Tabela 9, permitem concluir que o modelo ideal consiste de uma única curva polinomial do 2º grau para as três dietas, já que os interceptos e os coeficientes de 1º e 2º graus das três curvas foram considerados iguais entre si ($p > 0,05$) e todos os coeficientes foram individualmente considerados não nulos ($p < 0,0001$). Um novo modelo considerando tais especificações foi ajustado e denominado M1.7.

Tabela 9. Análise de variância para os efeitos fixos do modelo M1.5

Fonte de Variação	G.L.	F_{calc}	p-valor
Intercepto	1	2524,613	<0,0001
Dieta	2	0,249	0,780
Semana	1	72,948	<0,0001
Semana ²	1	91,991	<0,0001
Dieta x Semana	2	1,016	0,3632
Dieta x Semana ²	2	0,832	0,4361

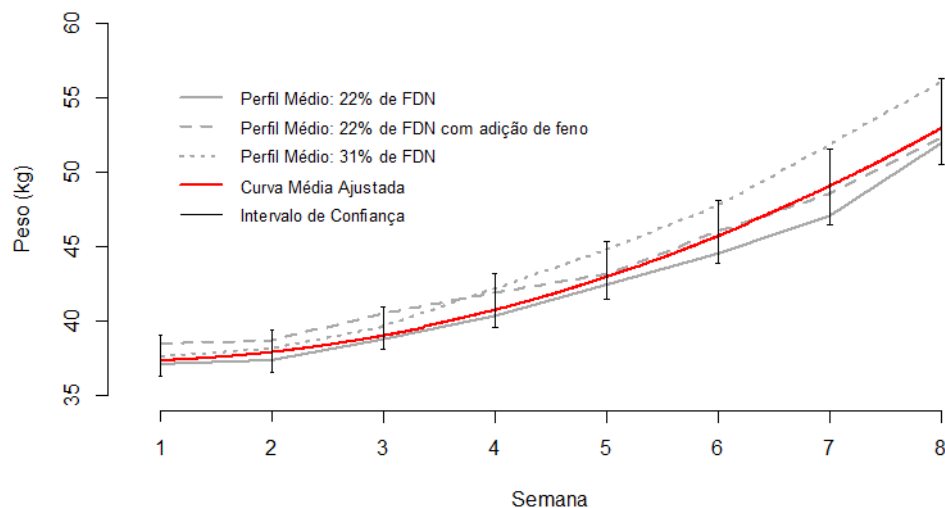
Tabela 10. Estimativas dos coeficientes e erros padrões dos parâmetros do modelo M1.7

Fator	Coefficiente	Erro Padrão
Intercepto	37,365	0,793
Semana	-0,270	0,244
Semana ²	0,277	0,028

A Tabela 10 apresenta as estimativas dos coeficientes e erros padrões dos parâmetros do modelo M1.7. Portanto, o modelo que explica o comportamento do peso médio dos bezerros submetidos às diferentes dietas em função do tempo (semanas) é dado pela expressão:

$$\bar{y} = 37,365 - 0,270t + 0,277t^2, t = 1, 2, \dots, 8 \text{ semanas} \quad (32)$$

A Figura 3 apresenta os perfis médios de pesos dos bezerros submetidos às três diferentes dietas e o modelo final ajustado.

**Figura 3.** Perfis médios de cada dieta, curva média ajustada para o peso dos bezerros submetidos a diferentes dietas.

Por meio da metodologia de modelos mistos, em um experimento conduzido por Omidi-Mirzaei et al. (2018) com bezerros leiteiros envolvendo dez semanas de avaliação, também foi verificado que diferentes dietas sólidas, considerando formulações de concentrado inicial e inclusão de forrageiras, apresentaram respostas semelhantes em relação ao desenvolvimento do peso dos animais, o que condiz com os resultados obtidos no presente estudo.

As estimativas das matrizes de variâncias e covariâncias de efeitos aleatórios, \mathbf{G} , e dos erros intra-indivíduos, \mathbf{R}_i , são apresentadas em (33) e (34), respectivamente. Na diagonal das matrizes estão as estimativas das variâncias, abaixo da diagonal estão as covariâncias e acima, as correlações.

Para o caso univariado, essas estimativas podem ser obtidas em ambiente R com a função `getVarCov()` presente no pacote `nlme`, tendo como argumentos o modelo de interesse e o tipo de matriz que se deseja, sendo a condicional (\mathbf{R}) obtida pela especificação “*conditional*”; marginal (\mathbf{V}) sob especificação “*marginal*” e a matriz de efeitos aleatórios (\mathbf{G}) com a especificação “*random.effects*”. Detalhes da programação encontram-se no ANEXO B.

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 22,709 & -1,569 & 0,064 \\ -1,569 & 1,318 & -0,067 \\ 0,064 & -0,067 & 0,014 \end{pmatrix} \quad (33)$$

$$\mathbf{R}_i = \begin{pmatrix} 1,122 & 0,009 & 0,757 & 0,576 & 0,364 & 0,256 & 0,213 & 0,238 \\ 0,009 & 0,000 & 0,014 & 0,010 & 0,006 & 0,004 & 0,004 & 0,004 \\ 0,757 & 0,014 & 2,557 & 1,946 & 1,230 & 0,865 & 0,720 & 0,804 \\ 0,576 & 0,010 & 1,946 & 3,312 & 2,095 & 1,472 & 1,226 & 1,369 \\ 0,364 & 0,006 & 1,230 & 2,095 & 2,962 & 2,082 & 1,734 & 1,936 \\ 0,256 & 0,004 & 0,865 & 1,472 & 2,082 & 3,272 & 2,726 & 3,043 \\ 0,213 & 0,004 & 0,720 & 1,226 & 1,734 & 2,726 & 5,081 & 5,672 \\ 0,238 & 0,004 & 0,804 & 1,369 & 1,936 & 3,043 & 5,672 & 14,161 \end{pmatrix} \quad (34)$$

Nos gráficos com os ajustes das curvas individuais apresentados na Figura 4 percebe-se a boa qualidade do ajuste do modelo final a cada bezerro.

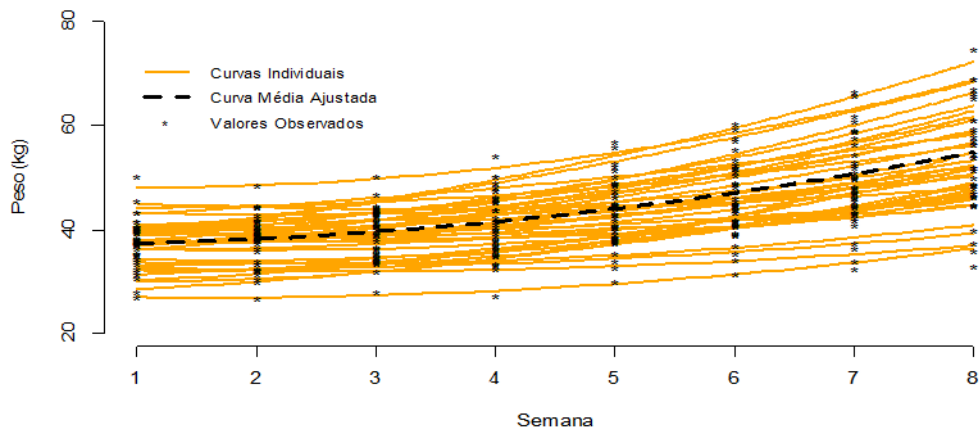


Figura 4. Curvas individuais ajustadas para os pesos dos bezerros submetidos às três dietas ao longo das semanas de avaliação.

Tanto as curvas individuais (Figura 4) quanto a curva média (Figura 3) ajustadas ficaram próximas dos respectivos perfis de pesos observados, indicando que o modelo linear misto ajustado conseguiu modelar bem tanto a resposta média dos dados, quanto a sua estrutura de variâncias e de correlações. Essa boa qualidade do ajuste do modelo final pode ser confirmada pela proximidade dos valores observados e preditos apresentados na Figura 5.

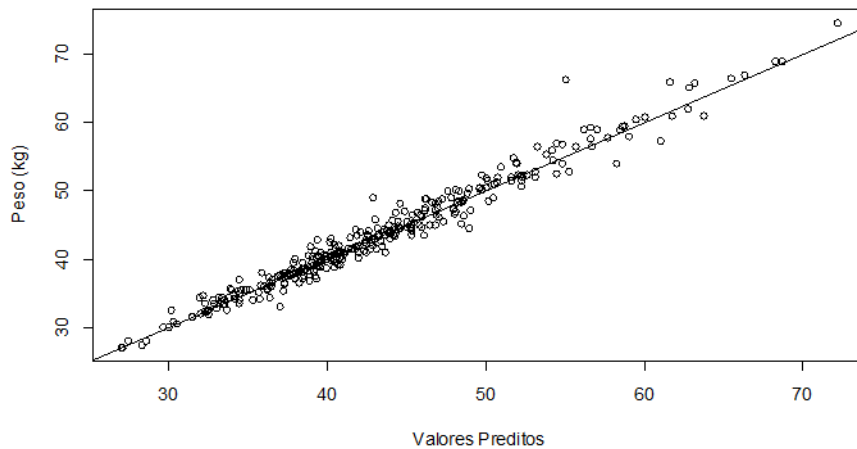


Figura 5. Valores observados versus valores preditos pelo modelo M1.7.

O diagnóstico de resíduos baseou-se no comportamento dos resíduos de confundimento mínimo e dos resíduos marginais e condicionais estudentizados. Os resíduos marginais e condicionais estudentizados foram extraídos com a função `resid_marginal()` e `resid_conditional()` do pacote **HLMdiag**, enquanto que os resíduos de confundimento mínimo foram extraídos com a função `residdiag.nlme()`. Mais detalhes sobre as funções podem ser encontrados nos anexos C, D e.

A Figura 6 apresenta os gráficos (a) dos resíduos versus índices, (b) dos valores preditos versus os resíduos do modelo, além de (c) gráfico quantil-quantil e (d) histograma para os três tipos de resíduos.

Percebe-se que os resíduos de confundimento mínimo apresentam uma distribuição mais aleatória quando associados aos índices e aos valores preditos e não indica a presença de pontos discrepantes em relação aos limites estabelecidos (-3 e 3), diferente do que ocorre com os resíduos marginais e condicionais. Os gráficos quantil-quantil mostram uma aparente normalidade dos resíduos de confundimento mínimo e dos resíduos marginais, o que é confirmado pelo teste de Shapiro-Wilk (p-valor igual a 0,360 e 0,713 respectivamente). Já os resíduos condicionais indicam pontos discrepantes nos dois primeiros tipos de gráficos e não mostram aderência à distribuição normal, hipótese que também é confirmada pelo teste de Shapiro-Wilk ($p < 0,0001$).

Apesar do teste de Shapiro-Wilk para os resíduos marginais estudentizados ter apresentado um p-valor maior que dos resíduos de confundimento mínimo na análise de normalidade, vale ressaltar que sua vantagem foi somente neste quesito, tendo em vista que a sua distribuição espacial em relação aos valores preditos ainda evidencia certa tendência de aumento linear e de variabilidade, confirmando mais uma vez o problema de viés que tais resíduos apresentam.

Analisando todos os resultados de diagnósticos dos resíduos pode-se concluir que os resíduos de confundimento mínimo tiveram um melhor desempenho na avaliação da qualidade do modelo selecionado.

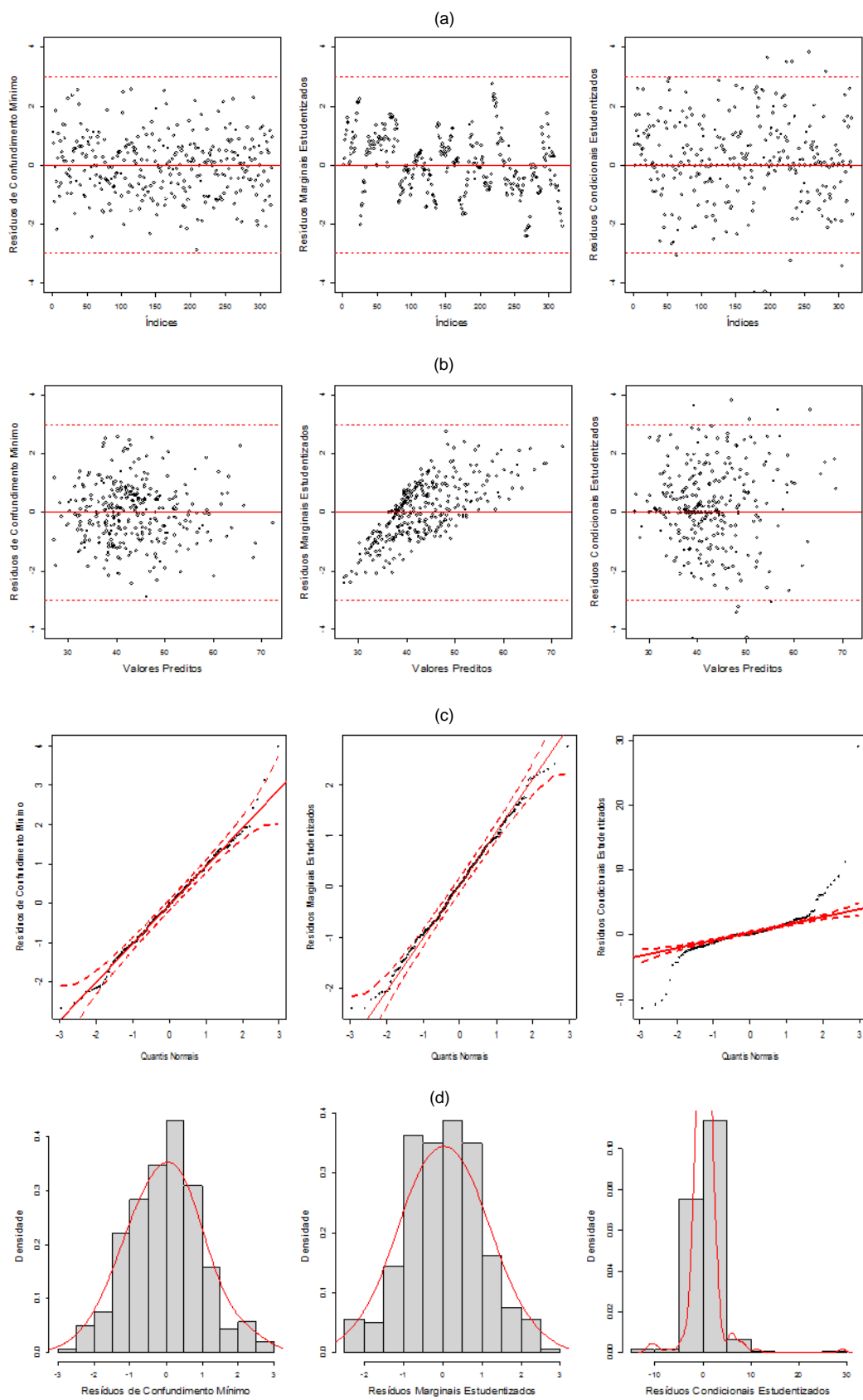


Figura 6. Gráficos de diagnóstico dos resíduos de confundimento mínimo, resíduos marginais e condicionais estudantizados do modelo ajustado ao peso de bezerros submetidos a diferentes dietas.

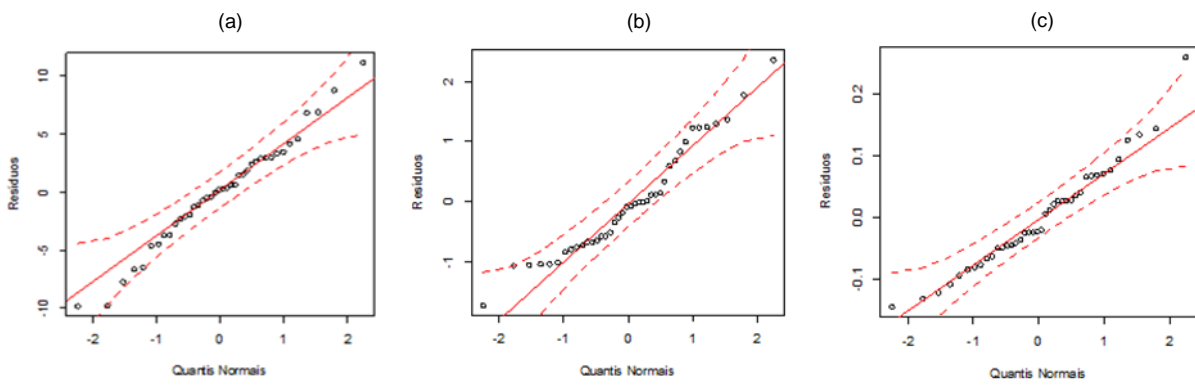


Figura 7. Gráficos quantil-quantil dos valores preditos dos efeitos aleatórios associados (a) ao intercepto e (b) coeficientes de 1º e (c) 2º graus do polinômio ajustado ao peso de bezerros submetidos a diferentes dietas.

Os gráficos quantil-quantil apresentados na Figura 7 indicaram uma boa aderência dos efeitos aleatórios à distribuição normal e o teste de Shapiro-Wilk confirmou essa hipótese, com p-valores iguais a 0,845, 0,077 e 0,243, respectivamente.

4.1.2. Avaliação do consumo médio de sólidos totais de bezerros submetidos a três tipos de dieta sólida

Tal como o comportamento do peso dos bezerros, também fica evidente na Tabela 11 o aumento muito acentuado da resposta média e dos desvios padrões do consumo médio semanal de sólidos totais para as três dietas ao longo do período experimental.

Tabela 11. Médias e desvios-padrões do consumo de sólidos totais em cada semana para cada dieta fornecida

Semana	Dieta					
	A: 22% FDN		B: 22% FDN + feno		C: 31%FDN	
	Média	d.p.	Média	d.p.	Média	d.p.
1	22,649	32,323	16,500	21,034	59,936	62,273
2	43,264	39,306	60,730	109,222	50,544	35,897
3	141,102	111,092	177,834	222,361	169,036	93,568
4	223,701	160,914	273,423	279,357	340,417	262,721
5	317,701	278,602	255,985	310,541	467,836	307,045
6	372,045	324,194	359,415	365,013	556,406	347,262
7	404,082	340,664	547,100	529,151	674,471	417,952
8	609,218	419,190	647,285	502,690	917,171	477,956

A Tabela 12 evidencia o aumento acentuado na variabilidade das respostas ao longo do tempo e uma tendência de diminuição da correlação amostral à medida que o intervalo entre os níveis do fator semana aumentam, o que é comum em estudos de crescimento de animais ao longo do tempo. Esse comportamento é semelhante aos resultados apresentados na Tabela 4, referente ao peso dos bezerros.

Tabela 12. Variâncias (diagonal), covariâncias (abaixo da diagonal) e correlação (acima da diagonal) do consumo médio de sólidos totais dos bezerros entre as semanas para cada dieta

Semana	Dieta A: 22% de FDN							
	Semana							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1009,69	0,06	0,22	0,26	0,27	0,15	0,22	0,09
2	81,83	1544,98	0,51	0,42	0,38	0,46	0,55	0,39
3	776,69	2242,64	12341,46	0,71	0,62	0,52	0,60	0,66
4	1362,85	2711,26	12761,53	25893,58	0,95	0,79	0,62	0,59
5	2401,07	4258,79	19395,13	42629,04	77619,40	0,88	0,71	0,66
6	1553,28	5984,27	18916,60	41230,39	80232,11	105101,88	0,88	0,74
7	2452,04	7460,93	22999,45	34256,64	67891,99	97900,70	116052,17	0,86
8	1327,90	6533,93	30993,41	40022,93	77865,67	100740,38	123170,70	175720,43

Continua.

Continuação

Dieta B: 22% de FDN com adição de feno								
Semana	Semana							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	442,44	0,69	0,94	0,82	0,28	0,21	0,24	0,33
2	1586,07	11929,54	0,72	0,91	0,77	0,68	0,65	0,84
3	4416,15	17670,14	49444,55	0,89	0,32	0,40	0,48	0,46
4	4828,83	28037,62	55377,40	78040,64	0,63	0,60	0,63	0,70
5	1832,74	26407,20	22737,29	55197,25	96435,99	0,84	0,73	0,87
6	1681,52	27367,48	32479,75	62191,43	95508,50	133234,50	0,94	0,85
7	2762,51	37801,80	57130,86	93548,55	121134,18	182399,91	280001,36	0,86
8	3590,50	46592,90	51837,19	98709,50	136268,04	156421,35	230978,60	252697,55

Dieta C: 31% de FDN								
Semana	Semana							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	3878,04	0,79	0,34	0,43	0,04	0,14	0,49	0,52
2	1779,64	1288,64	0,61	0,79	0,55	0,59	0,66	0,71
3	1985,08	2076,99	8755,12	0,81	0,70	0,66	0,80	0,61
4	7173,14	7472,45	20042,94	69022,82	0,87	0,78	0,81	0,82
5	893,08	6126,24	20324,17	70763,68	94276,87	0,89	0,74	0,72
6	3125,34	7410,68	21606,28	71198,12	95842,28	120591,38	0,78	0,69
7	12781,26	9998,83	31589,27	89457,03	95073,28	114519,25	174683,99	0,85
8	15771,51	12300,54	27481,76	103210,09	106225,53	115326,87	170444,81	228442,40

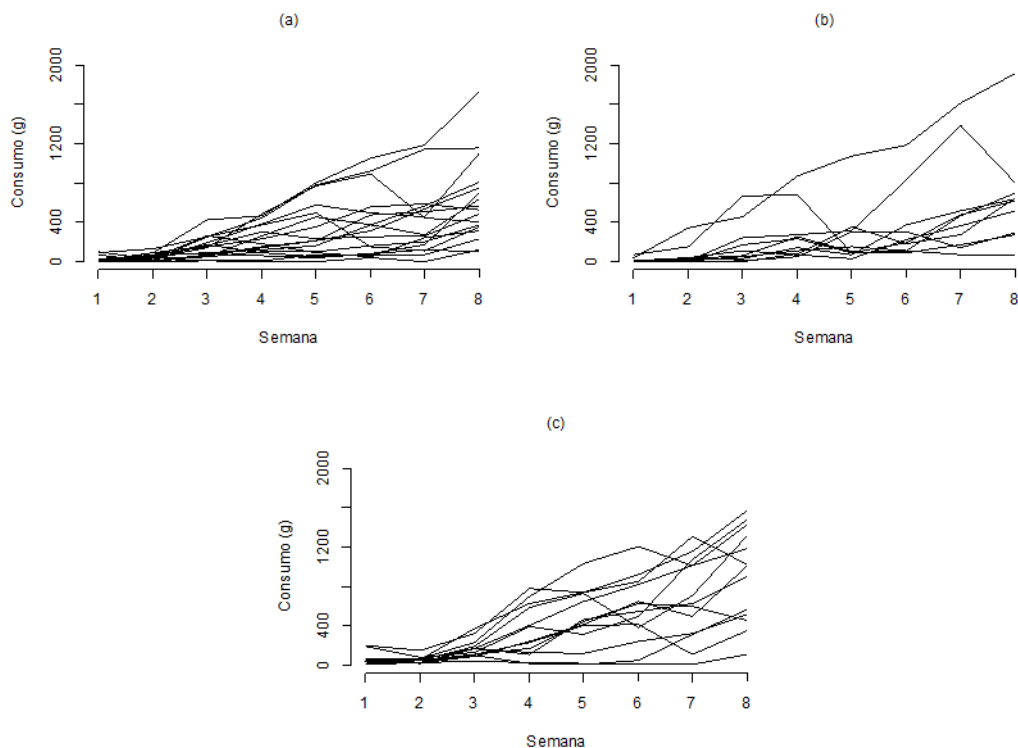


Figura 8. Perfis individuais do consumo médio de sólidos totais para as dietas contendo 22% de FDN (a), 22% de FDN com adição de feno (b) e 31% de FDN (c).

Os perfis individuais de consumo (Figura 8) também mostram claramente o aumento da variabilidade das respostas ao longo do tempo. Na Figura 9 percebe-se um aumento no consumo médio com o avanço das semanas, sendo mais acentuado em bezerros que receberam a dieta contendo 31% de FDN. Quando comparada às outras duas dietas, diferente do comportamento quadrático do crescimento do peso dos animais, o consumo de sólidos totais apresenta significativas oscilações de consumo para cada dieta, sugerindo o uso de um polinômio superior ao 2º grau na composição do modelo maximal.

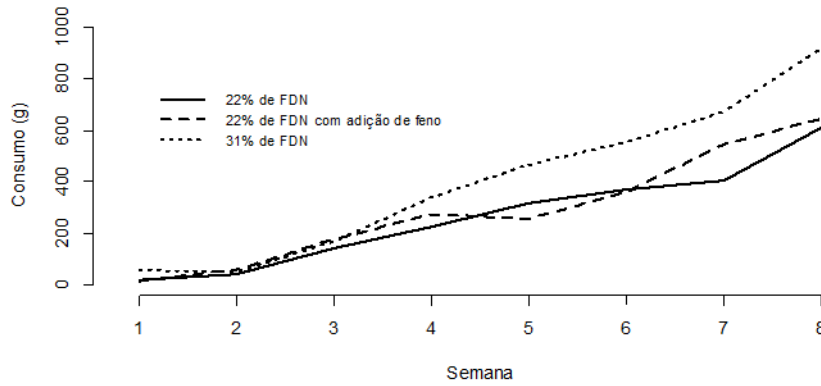


Figura 9. Perfis médios de consumo de sólidos totais para cada tipo de dieta.

Diante do exposto, o modelo maximal utilizado para a seleção da parte aleatória considerou um polinômio de quarto grau dado pela expressão (35). Tal como para o peso, a parametrização realizada no R considera o efeito da terceira dieta confundido em β_0 .

$$y_{ij} = \underbrace{\beta_0 + \beta_1 t_j + \beta_2 t_j^2 + \beta_3 t_j^3 + \beta_4 t_j^4 + \beta_5 a_{1i} + \beta_6 a_{2i} + \beta_7 a_{1i} t_j + \beta_8 a_{2i} t_j + \beta_9 a_{1i} t_j^2 + \beta_{10} a_{2i} t_j^2 + \beta_{11} a_{1i} t_j^3 + \beta_{12} a_{2i} t_j^3 + \beta_{13} a_{1i} t_j^4 + \beta_{14} a_{2i} t_j^4}_{\text{parte fixa}} + \underbrace{b_{1i} t_j + b_{2i} t_j^2 + b_{3i} t_j^3 + b_{4i} t_j^4 + \varepsilon_{ij}}_{\text{parte aleatória}} \quad (35)$$

para $i = 1, 2, \dots, 40$ e $j = 1, 2, 3, \dots, 8$ em que

y_{ij} é a resposta do i -ésimo indivíduo na j -ésima semana;

β_0 é o intercepto comum à todas as dietas;

β_1 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à j -ésima semana;

β_2 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à j -ésima semana;

β_3 é o coeficiente de terceiro grau do polinômio associado à j -ésima semana;

β_4 é o coeficiente de quarto grau do polinômio associado à j -ésima semana;

β_5 é o coeficiente associado à dieta a_1 ;

β_6 é o coeficiente associado à dieta a_2 ;

β_7 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_1 ;

β_8 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_2 ;

β_9 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_1 ;
 β_{10} é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_2 ;
 β_{11} é o coeficiente de terceiro grau do polinômio associado à dieta a_1 ;
 β_{12} é o coeficiente de terceiro grau do polinômio associado à dieta a_2 ;
 β_{13} é o coeficiente de quarto grau do polinômio associado à dieta a_1 ;
 β_{14} é o coeficiente de quarto grau do polinômio associado à dieta a_2 ;
 b_{1i} é o efeito aleatório associado ao coeficiente de primeiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo;
 b_{2i} é o efeito aleatório associado ao coeficiente de segundo grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo;
 b_{3i} é o efeito aleatório associado ao coeficiente de terceiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo;
 b_{4i} é o efeito aleatório associado ao coeficiente de quarto grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo;
 ε_{ij} é o erro aleatório associado a y_{ij} .

Diferente do que aconteceu para o peso e de acordo com o que é mostrado nas Figuras 8 e 9, percebe-se que os valores iniciais de consumo para todas as dietas, seja nos perfis individuais ou nos perfis médios, são extremamente próximos, indicando não ser necessário associar um efeito aleatório ao intercepto das curvas

Seguindo o mesmo procedimento utilizado na escolha dos efeitos aleatórios a serem incluídos no modelo linear misto para a variável peso, foram comparadas as estruturas apresentadas na Tabela 13.

Tabela 13. Estruturas de efeitos aleatórios do modelo maximal para o consumo de sólidos totais

Modelo	Efeitos aleatórios	Modelo	Efeitos aleatórios
M1	$b_1 + b_2 + b_3 + b_4$	M16	PN e $(b_1 + b_2 + b_3 + b_4)$
M2	$b_2 + b_3 + b_4$	M17	PN e $(b_2 + b_3 + b_4)$
M3	$b_1 + b_3 + b_4$	M18	PN e $(b_1 + b_3 + b_4)$
M4	$b_1 + b_2 + b_4$	M19	PN e $(b_1 + b_2 + b_4)$
M5	$b_1 + b_2 + b_3$	M20	PN e $(b_1 + b_2 + b_3)$
M6	$b_3 + b_4$	M21	PN e $(b_3 + b_4)$
M7	$b_2 + b_4$	M22	PN e $(b_2 + b_4)$
M8	$b_2 + b_3$	M23	PN e $(b_2 + b_3)$
M9	$b_1 + b_4$	M24	PN e $(b_1 + b_4)$
M10	$b_1 + b_3$	M25	PN e $(b_1 + b_3)$
M11	$b_1 + b_2$	M26	PN e $(b_1 + b_2)$
M12	b_4	M27	PN e b_4
M13	b_3	M28	PN e b_3
M14	b_2	M29	PN e b_2
M15	b_1	M30	PN e b_1

Tendo em vista a quantidade de modelos ajustados e das possíveis comparações, a Tabela 14 apresenta um resumo dos resultados dos testes da razão de verossimilhanças, em que as caselas vazias indicam modelos estatisticamente iguais. A conferência dos resultados pode ser feita seguindo a programação do ANEXO D.

Embora a comparação entre os modelos M11 e M12 tenha sido favorável ao modelo mais complexo, M11, decidiu-se pela escolha pela estrutura de efeitos aleatórios do modelo M7, que tem o mesmo número de parâmetros que o M11 e apresenta menor valor do BIC.

Tabela 14. Seleção da estrutura de efeitos aleatórios do modelo maximal para o consumo de sólidos totais

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M1	26	4190,807	4042,079	-	-	-
M2	22	4168,033	4042,187	M1 x M2	0,107	0,998
M3	22	4170,273	4044,426	-	-	-
M4	22	4168,264	4042,417	-	-	-
M5	22	4171,471	4045,624	-	-	-
M6	19	4156,015	4047,329	M5 x M6	1,704	0,636
M7	19	4150,899	4042,213	-	-	-
M8	19	4154,309	4045,623	-	-	-
M9	19	4176,015	4067,329	-	-	-
M10	19	4176,923	4068,237	-	-	-
M11	19	4179,201	4070,516	-	-	-
M12	17	4315,513	4218,268	M11 x M12	147,752	<0,0001
M13	17	4261,069	4163,824	-	-	-
M14	17	4197,147	4099,902	-	-	-
M15	17	4194,258	4097,013	-	-	-
M16	26	4191,115	4042,387	-	-	-
M17	22	4168,342	4042,496	M16 x M17	0,108	0,998
M18	22	4170,359	4044,512	-	-	-
M19	22	4168,522	4042,675	-	-	-
M20	22	4175,185	4049,339	-	-	-
M21	19	4155,685	4047,000	M20x M21	2,338	0,505
M22	19	4151,229	4042,543	-	-	-
M23	19	4154,632	4045,946	-	-	-
M24	19	4176,436	4067,750	-	-	-
M25	19	4177,351	4068,665	-	-	-
M26	19	4179,693	4071,007	-	-	-
M27	17	4318,025	4220,780	M26 x M27	149,772	<0,0001
M28	17	4263,529	4166,283	-	-	-
M29	17	4199,504	4102,259	-	-	-
M30	17	4196,426	4099,181	-	-	-

n.p.: número de parâmetros

Assim como foi feito para a variável peso, buscou-se a melhor estrutura de covariâncias para os efeitos aleatórios, matriz \mathbf{G} , tendo como candidatas a estrutura diagonal, simetria composta e múltipla identidade, denominadas M7.1, M7.2, M7.3 respectivamente. Os resultados são apresentados na Tabela 15.

Tabela 15. Comparação de estruturas de covariâncias para a matriz \mathbf{G} no modelo M7

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M7	19	4150,899	4042,213	-	-	-
M7.1	18	4185,719	4170,522	M7 x M7.1	40,540	<0,0001
M7.2	18	4318,919	4215,954	M7 x M7.2	173.741	<0,0001
M7.3	17	4315,416	4218,172	M7 x M7.3	175.958	<0,0001

n.p.: número de parâmetros

Os resultados dos testes da razão de verossimilhanças apresentados na Tabela 15 permitiram escolher o modelo M7, que apresenta em sua estrutura de covariâncias uma matriz não estruturada, com variâncias distintas e covariâncias significativas entre os efeitos aleatórios associados aos coeficientes de segundo e quarto grau de semana.

Na Tabela 16 foram comparadas algumas estruturas para a matriz de covariâncias intra-indivíduos, R_i . Pelo teste da razão de verossimilhanças e considerando o menor valor de BIC, o modelo M7.5 foi escolhido, ou seja, a estrutura da matriz de covariâncias R_i deve ser do tipo autorregressiva de 1ª ordem.

Tabela 16. Comparação de estruturas para a matriz R_i do modelo M7

Modelo	Estrutura	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M7	VC	19	4150,899	4042,213	-	-	-
M7.4	VCH	26	4100,822	3952,094	M7 x M7.4	90,119	<0,0001
M7.5	ARH(1)	27	4063,263	3908,814	M7.4 x M7.5	43,278	<0,0001
M7.6	CSH	27	4084,438	3929,990	M7.4 x M7.6	22,104	<0,0001

n.p.: número de parâmetros; VC: Componentes de Variância Homogênea; VCH: Componente de Variância Heterogênea; ARH(1): Autorregressiva de 1ª Ordem com Heterogeneidade de Variâncias; CSH: Simetria Composta Heterogênea

Os resultados dos testes de Wald para os efeitos fixos do modelo maximal (Tabela 17) permitiram concluir que: os interceptos das três curvas devem ser considerados iguais (p-valor igual a 0,298); um componente quadrático para a curva de cada dieta e um único componente cúbico e de quarto grau para as curvas das três dietas (p-valor igual a 0,005, 0,005 e menor do que 0,0001, respectivamente).

Tabela 17. Análise de Variância para os efeitos fixos do modelo M7.5

Fonte de Variação	G.L.	F_{calc}	p-valor
Intercepto	1	5,432	0,020
Dieta	2	1,248	0,298
Semana	1	39,796	<0,0001
Semana ²	1	52,941	<0,0001
Semana ³	1	7,703	0,005
Semana ⁴	1	18,728	<0,0001
Dieta x Semana	2	0,362	0,696
Dieta x Semana ²	2	5,314	0,005
Dieta x Semana ³	2	2,080	0,126
Dieta x Semana ⁴	2	0,667	0,513

As estimativas dos coeficientes e dos seus respectivos erros padrões do novo modelo, denominado modelo M7.7, são apresentadas na Tabela 18.

Tabela 18. Estimativas dos coeficientes polinomiais e erros padrões dos fatores de efeito fixo do modelo M7.7

Fator	Coefficiente	Erro Padrão
Intercepto	219,198	42,360
Semana	-338,079	67,947
Dieta (22% FDN) x Semana ²	177,452	34,426
Dieta (22% FDN adc. feno) x Semana ²	177,882	34,456
Dieta (31% FDN) x Semana ²	182,398	34,439
Semana ³	-29,576	6,362
Semana ⁴	1,680	0,384

Avaliando a Figura 10, que apresenta as curvas médias observadas e ajustadas para as três dietas, percebe-se um aumento mais acentuado no consumo da dieta contendo 31% de FDN em relação às outras duas, que por sua vez apresentam perfis médios e curvas ajustadas muito próximas. A proximidade das estimativas dos coeficientes de 2º grau apresentadas na Tabela 18 referentes às dietas contendo 22% de FDN e 22% de FDN com adição de feno, reforçam o comentário anterior e sugerem o ajuste de uma única curva para ambas as dietas.

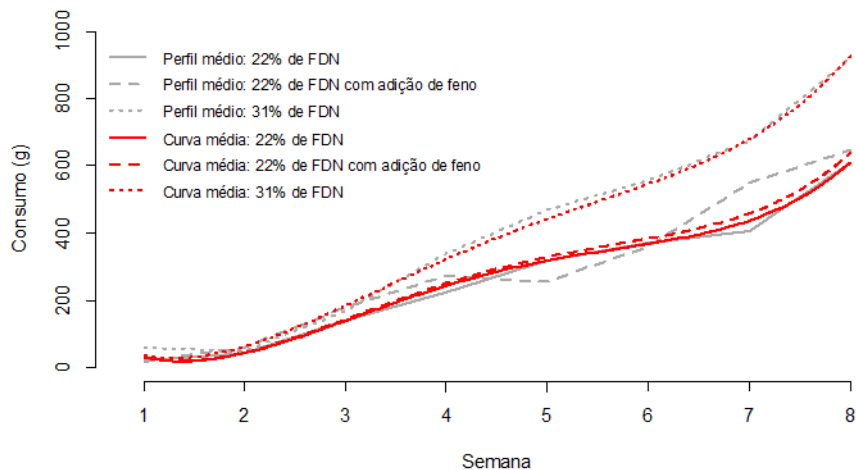


Figura 10. Perfis médios do consumo de sólidos totais, por dieta, e curvas médias ajustadas.

Tendo concluído que o melhor modelo para a parte fixa deve ter um único coeficiente de 2º grau para ambas as dietas com 22% de FDN e outro para a dieta com 31% de FDN, optou-se por repetir o processo de escolha da estrutura de efeitos aleatórios.

Para a seleção da estrutura aleatória foram utilizadas as mesmas estruturas de efeitos aleatórios indicadas na Tabela 13 e na parte fixa, uma simplificação do modelo maximal dado pela expressão (35) admitindo somente dois níveis para o fator dieta e utilizando.

A fim de evitar confusões com a primeira etapa da análise, que envolvia três níveis distintos de dieta, e facilitar as futuras comparações, os modelos apresentados a seguir serão acompanhados pelo número (2), indicando a análise sob dois níveis de dietas somente.

Na Tabela 19 são apresentados os resultados dos testes de razão de verossimilhanças das comparações comparando as diferentes estruturas de efeito aleatório e os valores do BIC. Pelos resultados apresentados, escolheu-se a estrutura do modelo M7(2), análogo ao modelo M7 da primeira etapa. Vale notar também que o modelo M7(2) apresentou o menor valor da estatística BIC.

Tabela 19. Seleção da estrutura de efeitos aleatórios do modelo maximal com dois níveis de dieta, para o consumo de sólidos totais

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M1(2)	21	4193,806	4073,338	-	-	-
M2(2)	17	4170,962	4073,440	M1 x M2	0,102	0,998
M3(2)	17	4173,084	4075,562	-	-	-
M4(2)	17	4171,175	4073,653	-	-	-
M5(2)	17	4176,709	4079,187	-	-	-
M6(2)	14	4159,109	4078,797	M5 x M6	0,389	0,942
M7(2)	14	4153,779	4073,467	-	-	-
M8(2)	14	4157,148	4076,836	-	-	-
M9(2)	14	4178,658	4098,346	-	-	-
M10(2)	14	4179,520	4099,208	-	-	-
M11(2)	14	4181,738	4101,425	-	-	-
M12(2)	12	4318,157	4249,318	M11 x M12	147,892	<0,0001
M13(2)	12	4263,285	4194,447	-	-	-
M14(2)	12	4199,063	4130,224	-	-	-
M15(2)	12	4196,405	4127,566	-	-	-
M16(2)	21	4193,962	4073,494	-	-	-
M17(2)	17	4171,119	4073,597	M16 x M17	0,103	0,998
M18(2)	17	4173,037	4075,515	-	-	-
M19(2)	17	4171,286	4073,764	-	-	-
M20(2)	17	4177,714	4080,192	-	-	-
M21(2)	14	4158,431	4078,119	M20x M21	2,072	0,557
M22(2)	14	4153,957	4073,645	-	-	-
M23(2)	14	4157,319	4077,007	-	-	-
M24(2)	14	4178,952	4098,640	-	-	-
M25(2)	14	4179,830	4099,518	-	-	-
M26(2)	14	4182,142	4101,830	-	-	-
M27(2)	12	4320,623	4251,785	M26 x M27	149,954	<0,0001
M28(2)	12	4265,706	4196,867	-	-	-
M29(2)	12	4201,387	4132,548	-	-	-
M30(2)	12	4198,543	4129,704	-	-	-

n.p.: número de parâmetros

A seguir são apresentadas as comparações entre o modelo M7(2), que assume uma matriz de covariâncias não estruturada para os efeitos aleatórios, e os modelos M7.1(2) (diagonal), M7.2(2) (simetria composta) e M7.3(2) (múltipla identidade).

Tabela 20. Comparações entre estruturas de covariâncias para os efeitos aleatórios do modelo M7(2)

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M7(2)	14	4153,779	4073,467	-	-	-
M7.1(2)	13	4189,044	4114,468	M7(2) x M7.1(2)	41.001	<0,0001
M7.2(2)	13	4321,559	4246,984	M7(2) x M7.2(2)	173.516	<0,0001
M7.3(2)	12	4318,060	4249,220	M7(2) x M7.3(2)	175.754	<0,0001

n.p.: número de parâmetros

Os resultados dos testes de razão de verossimilhanças e o menor valor do BIC, apresentados na Tabela 21, indicam a escolha do modelo M7(2), com matriz \mathbf{G} não estruturada, tal como indicado na primeira etapa do presente estudo, quando o fator dieta tinha três níveis.

A Tabela 21 apresenta comparações do modelo M7(2) que assume a estrutura mais simples para a matriz de variâncias e covariâncias intra-indivíduos, $\mathbf{R}_i = \mathbf{I}\sigma^2$, com o modelo M7.4(2), que admite heterogeneidade de variâncias nas diferentes semanas e com o modelo M7.5(2), que admite estrutura autorregressiva de 1ª ordem com heterogeneidade de variâncias.

Tabela 21. Comparação pelo teste da razão de verossimilhanças entre diferentes estruturas de \mathbf{R}_i

Modelo	Estrutura	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M7(2)	VC	14	4153,779	4073,467	-	-	-
M7.4(2)	VCH	21	4098,692	3978,224	M7(2) x M7.4(2)	95,242	<0,0001
M7.5(2)	ARH(1)	22	4061,281	3935,076	M7.4(2) x M7.5(2)	43,147	<0,0001

n.p.: número de parâmetros; VC: Componentes de Variância Homogênea; VCH: Componentes de Variância Heterogênea; ARH(1): Autorregressiva de 1ª Ordem com Heterogeneidade de Variâncias.

Considerando a significância nos testes de razão de verossimilhanças comparando os três modelos e o valor do BIC, escolheu-se o modelo M7.5(2), que assume estrutura ARH(1) para a matriz \mathbf{R}_i .

Tabela 22. Análise de Variância para os efeitos fixos do modelo M7.5(2)

Fonte de Variação	G.L.	F_{calc}	p-valor
Intercepto	1	5,601	0,018
Dieta	1	2,534	0,119
Semana	1	41,379	<0,0001
Semana ²	1	53,767	<0,0001
Semana ³	1	7,910	0,005
Semana ⁴	1	19,028	<0,0001
Dieta x Semana	1	0,186	0,665
Dieta x Semana ²	1	10,551	0,001
Dieta x Semana ³	1	3,804	0,052
Dieta x Semana ⁴	1	0,945	0,331

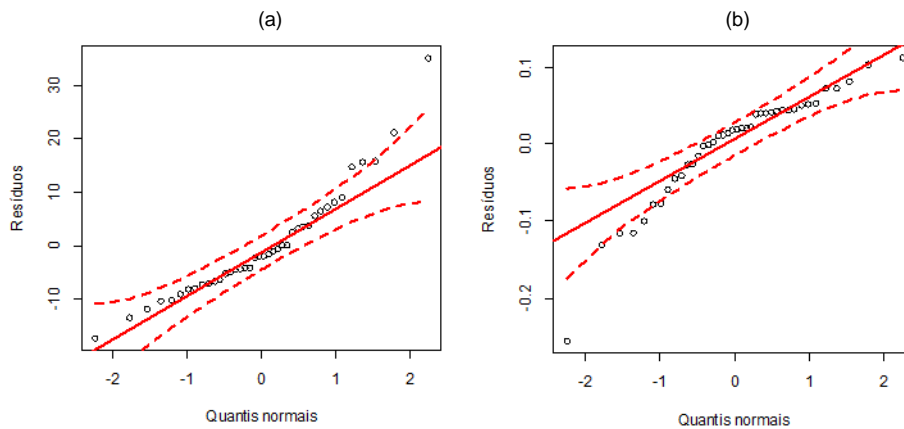
Os resultados dos testes de Wald para os efeitos fixos do modelo M7.5(2) apresentados na Tabela 22, indicam que o melhor modelo polinomial tem em sua estrutura fixa: um único intercepto, um único coeficiente de primeiro, terceiro e quarto grau comuns às duas curvas, e coeficientes de segundo grau distintos para as dietas com 22% e 31% de FDN.

As estimativas dos coeficientes desse novo modelo, denominado M7.6(2), e de seus erros padrões, são apresentados na Tabela 23.

Tabela 23. Estimativas dos coeficientes e erros padrões dos fatores de efeito fixo do modelo M7.6(2)

Fator	Coefficiente	Erro Padrão
Intercepto	219,216	42,354
Semana	-338,111	67,933
Dieta (22% FDN = 22% FDN adc. feno) x Semana ²	177,630	34,403
Dieta (31% FDN) x Semana ²	182,416	34,431
Semana ³	-29,580	6,361
Semana ⁴	1,680	0,384

Apesar da análise feita indicar o modelo M7.6(2) como o modelo mais adequado para descrever o comportamento do consumo médio de sólidos totais, os vetores de efeito aleatório associados aos efeitos quadrático e de quarto grau não apresentaram distribuição normal (p -valor igual a 0,006 e 0,001, respectivamente). Os gráficos quantil-quantil apresentados na Figura 11 evidenciam este problema.

**Figura 11.** Gráficos quantil-quantil dos valores preditos dos efeitos aleatórios associados ao efeito quadrático (a) e de quarto grau (b) do fator semana

Para contornar este problema, sem realizar grandes alterações no modelo M7.6(2), foi proposto o modelo M7.7(2) que, diferente do modelo anterior, considera interceptos distintos para as duas dietas e somente um efeito aleatório associado ao efeito quadrático do fator semana na estrutura aleatória. A fim de comparação os valores de BIC para o modelo M7.6(2) e M7.7(2) foram respectivamente 4070,896 e 4059,872, evidenciando o melhor ajuste do segundo. Os resultados dos testes de Wald apresentados na Tabela 24, mostram que todos os efeitos fixos do modelo M7.7(2) foram considerados significativos. As estimativas dos seus coeficientes e respectivos erros padrões se encontram na Tabela 25.

Tabela 24. Análise de variância para os efeitos fixos do modelo M7.7(2)

Fonte de Variação	G.L.	F_{calc}	p-valor
Dieta	2	7,987	0,001
Semana	1	48,380	<0,0001
Semana ³	1	37,950	<0,0001
Semana ⁴	1	7,797	0,005
Dieta x Semana ²	2	13,795	<0,0001

Tabela 25. Estimativas dos coeficientes e erros padrões dos fatores de efeito fixo do modelo M7.7(2)

Fator	Coefficiente	Erro Padrão
Dieta (22% FDN = 22% FDN adc. feno)	209,920	43,373
Dieta(31% FDN)	238,729	44,330
Semana	-338,168	70,835
Dieta (22% FDN = 22% FDN adc. feno) x Semana ²	177,807	36,106
Dieta (31% FDN) x Semana ²	181,948	36,134
Semana ³	-29,573	6,710
Semana ⁴	1,679	0,405

Tendo encontrado um novo modelo maximal para a parte fixa, refez-se o estudo buscando a melhor estrutura de efeitos aleatórios e das matrizes de variâncias e covariâncias entre e intra-indivíduos, mas o modelo final permaneceu inalterado, com efeito aleatório associado ao efeito quadrático do fator semana, interceptos e coeficientes de segundo grau diferentes para cada uma das dietas e coeficientes iguais de primeiro, terceiro e quarto graus para ambas as dietas. O modelo ajustado é dado por:

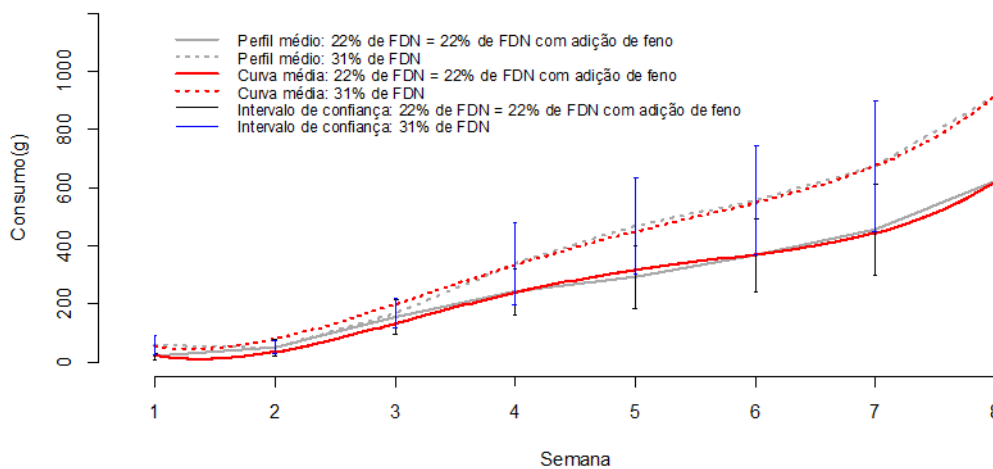
$$\begin{aligned}\bar{y}_1 &= 209,920 - 338,168t + 177,807t^2 - 29,573t^3 + 1,679t^4 \\ \bar{y}_2 &= 238,729 - 338,168t + 181,948t^2 - 29,573t^3 + 1,679t^4\end{aligned}\quad (36)$$

para $t = 1, 2, \dots, 8$ semanas, em que:

\bar{y}_1 é a média do consumo das dietas contendo 22% de FDN e 22% de FDN com adição de feno;

\bar{y}_2 é a média do consumo das dietas contendo 31% de FDN;

As curvas médias ajustadas para o consumo de sólidos totais dos dois níveis da dieta apresentadas na Figura 12 evidenciam a boa qualidade do ajuste do modelo final aos perfis médios de consumo observados.

**Figura 12.** Comparação entre as curvas médias ajustadas pelo modelo M7.7(2) e os perfis médios para cada dieta.

Resultados semelhantes a tal comportamento do consumo de sólidos totais foram encontrados por Movahedi et al. (2016) em um experimento com bezerros holandeses na comparação de diferentes composições

dietéticas entre concentrados e fontes forrageiras, indicando comportamentos distintos de consumo de acordo com a dieta fornecida aos animais.

A estimativa da matriz de efeitos aleatórios é apresentada em (37) e a matriz R_i é dada por (38).

$$G = (50,375) \quad (37)$$

$$R_i = \begin{pmatrix} 2128,3 & 1600,3 & 1769,8 & 1324,6 & 892,87 & 550,720 & 321,890 & 0,089 \\ 1600,3 & 3730,1 & 4125,1 & 3087,5 & 2081,1 & 1283,6 & 750,280 & 0,207 \\ 1769,8 & 4125,1 & 14141 & 10584 & 7134,1 & 4400,3 & 2572 & 0,712 \\ 1324,6 & 3087,5 & 10584 & 24555 & 16551 & 10209 & 5967,1 & 1,653 \\ 892,87 & 2081,1 & 7134,1 & 16551 & 34583 & 21331 & 12468 & 3,455 \\ 550,72 & 1283,6 & 4400,3 & 10209 & 21331 & 40782 & 23837 & 6,606 \\ 321,89 & 750,28 & 2572 & 5967,1 & 12468 & 23837 & 43188 & 11,969 \\ 0,0892 & 0,207 & 0,712 & 1,653 & 3,455 & 6,606 & 11,969 & 0,010 \end{pmatrix} \quad (38)$$

Os gráficos das curvas individuais de consumo de sólidos totais ajustadas pelo modelo final, apresentados na Figura 13, mostram uma boa qualidade do ajuste.

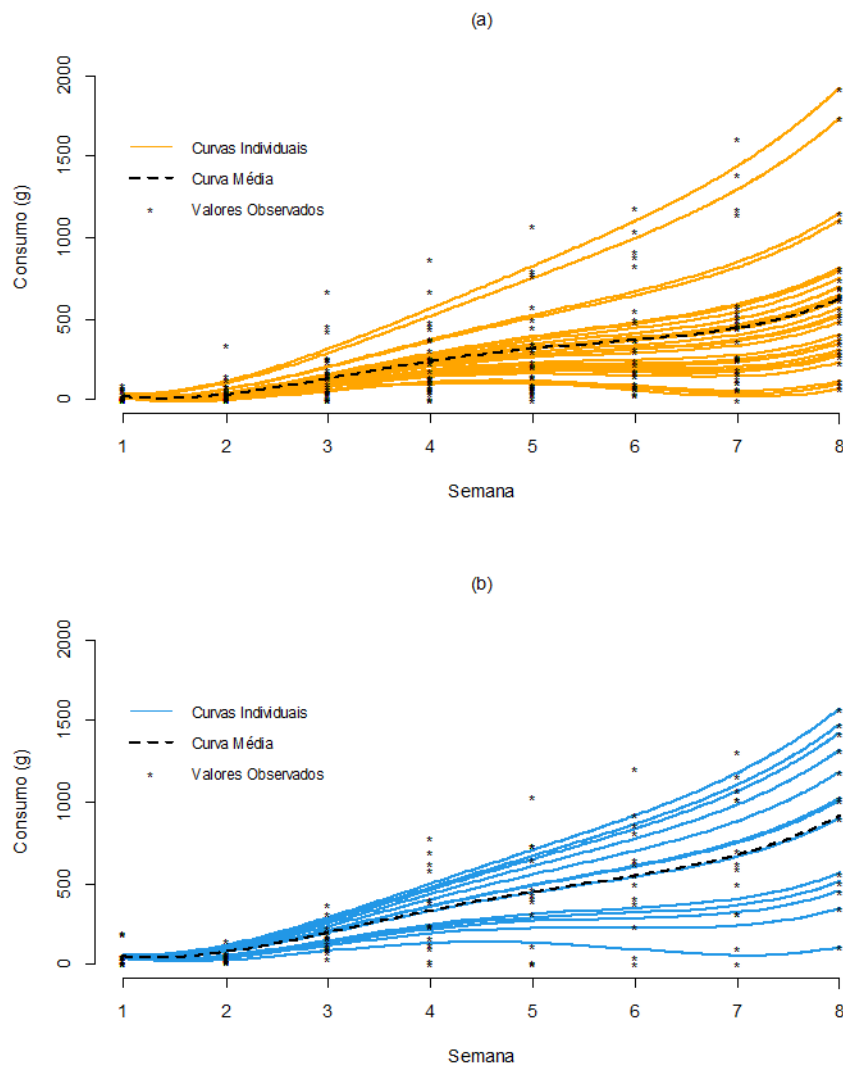


Figura 13. Curvas individuais ajustadas pelo modelo M7.7(2) para o consumo de sólidos totais.

Apesar das curvas individuais ajustadas não estarem tão próximas dos consumos observados (Figura 13) quanto as curvas médias estão (Figura 12), pode ser observado que o comportamento ondular do consumo foi bem explicado pelo modelo selecionado em ambos os casos. A pouca precisão do modelo M7.7(2) em explicar o comportamento de alguns perfis individuais de consumo é evidenciado na Figura 14, que compara os valores individuais de consumo preditos pelo modelo M7.7(2) e os valores de consumo observados

Vale salientar que nos experimentos zootécnicos a maior preocupação dos pesquisadores está em explicar bem o comportamento médio das respostas, o que, no presente estudo, foi alcançado. Contudo, isto não invalida a necessidade de se avaliar o comportamento individual dos animais, tendo em vista as características inerentes ao indivíduo que pode vir a afetar significativamente a resposta analisada, fazendo com que tais características se tornem de interesse para o pesquisador.

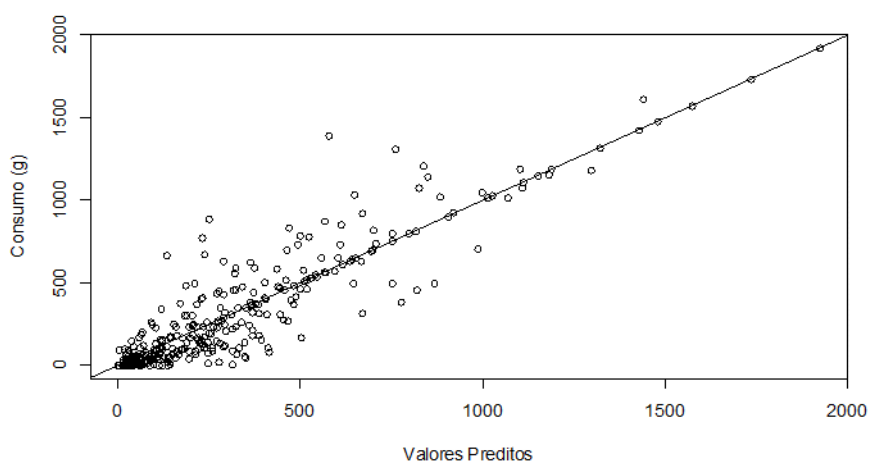


Figura 14. Valores observados versus valores preditos pelo modelo M7.7(2).

Nas Figuras 15(a) e 15(b), que apresentam os gráficos de índices e resíduos versus valores preditos para os três tipos de resíduos (seção 2.2.8), pode-se perceber que os resíduos de confundimento mínimo apresentam uma distribuição aleatória em relação aos índices e aos valores preditos, quando comparados aos resíduos marginais e condicionais, que por sua vez apresentam um certo tipo de tendência ou ultrapassam os limites estabelecidos de -3 e 3. Mais uma vez, tal como no estudo do peso, um maior viés destes dois últimos resíduos fica evidente, diferente do que ocorre para os resíduos de confundimento mínimo.

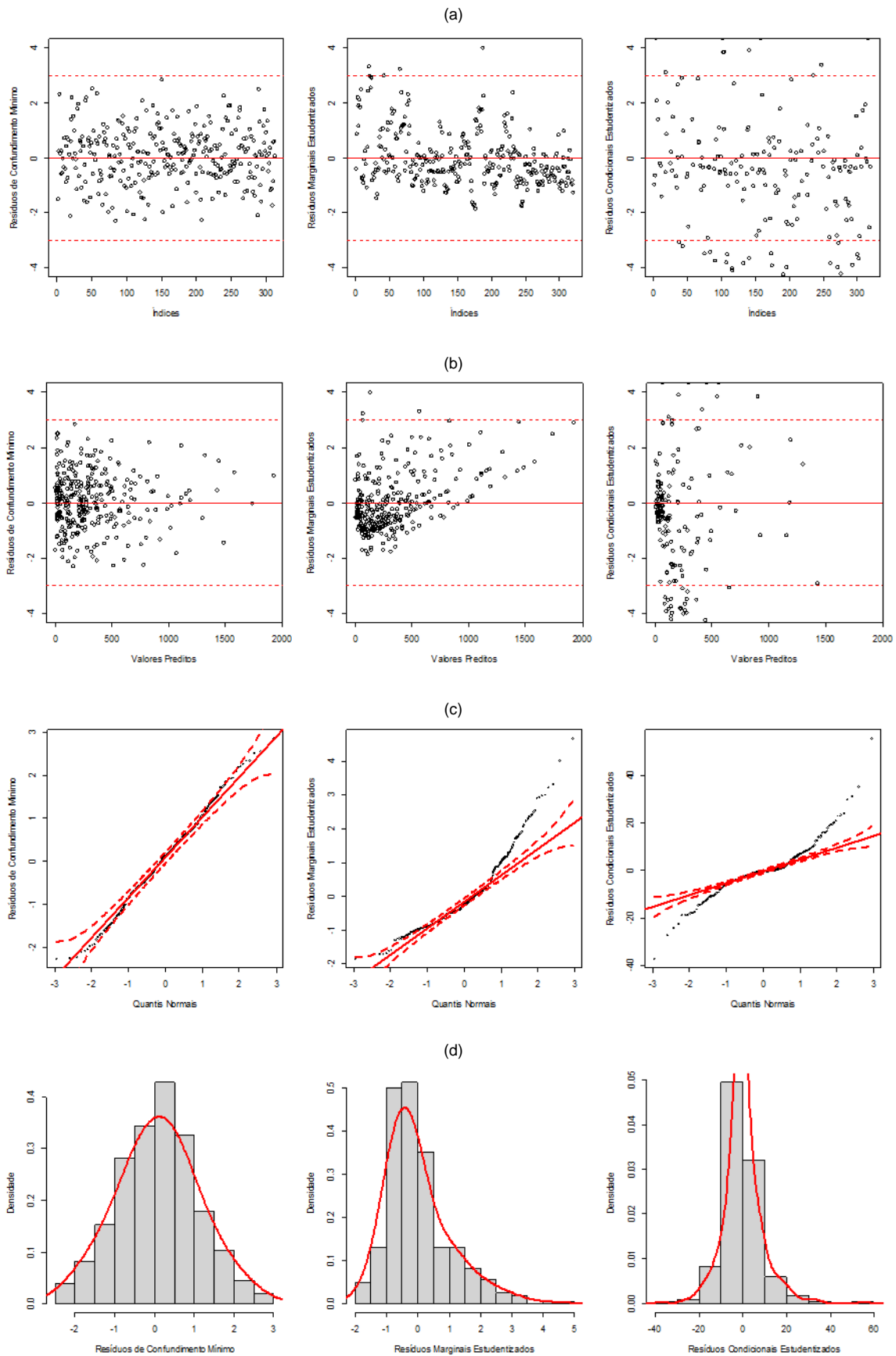


Figura 15. Gráficos de diagnóstico dos resíduos de confundimento mínimo, resíduos marginais e condicionais estudantizados do modelo M7.7(2) ajustado ao consumo de sólidos totais.

Avaliando a normalidade dos resíduos nos gráficos quantil-quantil (Figura 15(c)) e no histograma (Figura 15(d)) percebe-se que os resíduos de confundimento mínimo atendem à suposição de normalidade, mas os resíduos marginais e condicionais não atendem. O teste de Shapiro-Wilk para os resíduos de confundimento mínimo, marginais e condicionais apresentou p-valores iguais 0,507, 3,083⁻¹³ e 7,392⁻¹⁴, respectivamente, confirmando tais afirmações.

O gráfico quantil-quantil apresentado na Figura 16 sugere que a normalidade do vetor de efeito aleatório do modelo M7.7(2) tenha sido atendida, o que é confirmado pelo teste de Shapiro-Wilk (p-valor = 0,066).

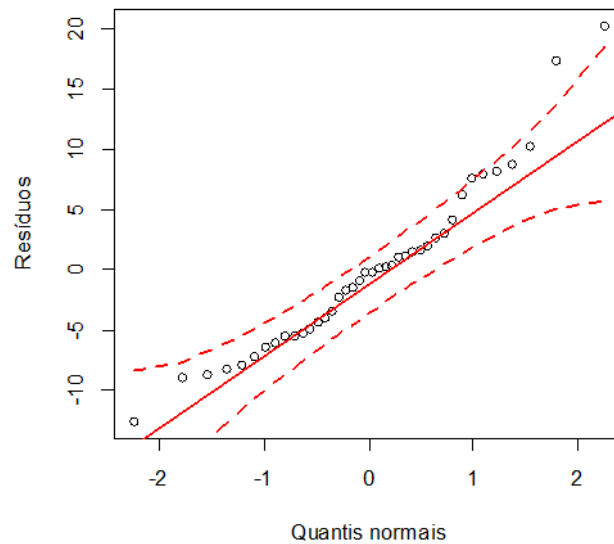


Figura 16. Gráfico quantil-quantil de normalidade do efeito aleatório associado ao coeficiente de 2º grau de semana.

4.2. ANÁLISE BIVARIADA

Para realizar a análise bivariada os dados de peso e de consumo foram concatenados verticalmente, ou seja, empilhados e criada uma variável indicadora que identifica se as respostas se referem ao peso ou ao consumo. Na estrutura maximal da parte fixa aproveitaram-se os modelos finais das análises univariadas: para o peso dos bezerros considerou-se um polinômio de segundo grau e para o consumo médio de sólidos considerou-se um polinômio de até quarto grau para explicar o comportamento médio das respostas ao longo das semanas.

Para facilitar a formulação do modelo maximal no software R, considerou-se um intercepto distinto para as dietas com 22% e 31% de FDN em cada uma das variáveis respostas. Este procedimento também foi utilizado por Sartorio (2013) dentro do programa SAS.

O modelo maximal proposto para a abordagem bivariada é dado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 y_{ijr} = & \beta_0 a_{1_{i1}} + \beta_1 a_{2_{i1}} + \beta_2 a_{3_{i1}} + \beta_3 t_{j1} + \beta_4 t_{j1}^2 + \beta_5 a_{1_{i1}} t_{j1} + \beta_6 a_{2_{i1}} t_{j1} + \beta_7 a_{3_{i1}} t_{j1} + \beta_8 a_{1_{i1}} t_{j1}^2 + \\
 & \beta_9 a_{2_{i1}} t_{j1}^2 + \beta_{10} a_{3_{i1}} t_{j1}^2 + \beta_{11} a_{1_{i2}} + \beta_{12} a_{2_{i2}} + \beta_{13} a_{3_{i2}} + \beta_{14} t_{j2} + \beta_{15} t_{j2}^2 + \beta_{16} t_{j2}^3 + \\
 & \beta_{17} t_{j2}^4 + \beta_{18} a_{1_{i2}} t_{j2} + \beta_{19} a_{2_{i2}} t_{j2} + \beta_{20} a_{3_{i2}} t_{j2} + \beta_{21} a_{1_{i2}} t_{j2}^2 + \beta_{22} a_{2_{i2}} t_{j2}^2 + \beta_{23} a_{3_{i2}} t_{j2}^2 + \\
 & \beta_{24} a_{1_{i2}} t_{j2}^3 + \beta_{25} a_{2_{i2}} t_{j2}^3 + \beta_{26} a_{3_{i2}} t_{j2}^3 + \beta_{27} a_{1_{i2}} t_{j2}^4 + \beta_{28} a_{2_{i2}} t_{j2}^4 + \beta_{29} a_{3_{i2}} t_{j2}^4 + \\
 & \underbrace{\hspace{15em}}_{\text{parte fixa}} + \\
 & \underbrace{b_{0_{i1}} + b_{1_{i1}} t_{j1} + b_{2_{i1}} t_{j1}^2 + b_{3_{i2}} t_{j2} + b_{4_{i2}} t_{j2}^2 + b_{5_{i2}} t_{j2}^3 + b_{6_{i2}} t_{j2}^4 + \varepsilon_{ijr}}_{\text{parte aleatória}} \quad (39)
 \end{aligned}$$

para $i = 1, 2, \dots, 40$ e $j = 1, 2, 3, \dots, 8$ e $r = 1, 2$ (sendo 1 referente ao peso e 2, ao consumo médio de sólidos totais), em que

y_{ijr} é a r -ésima resposta do i -ésimo indivíduo na j -ésima semana;

β_0 é o coeficiente associado à dieta a_1 para o peso;

β_1 é o coeficiente associado à dieta a_2 para o peso;

β_2 é o coeficiente associado à dieta a_3 para o peso;

β_3 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à j -ésima semana para o peso;

β_4 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à j -ésima semana para o peso;

β_5 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_1 para o peso;

β_6 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_2 para o peso;

β_7 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_3 para o peso;

β_8 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_1 para o peso;

β_9 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_2 para o peso;

β_{10} é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_3 para o peso;

β_{11} é o coeficiente associado à dieta a_1 para o consumo;

β_{12} é o coeficiente associado à dieta a_2 para o consumo;

β_{13} é o coeficiente associado à dieta a_3 para o consumo;

β_{14} é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à j -ésima semana para o consumo;

β_{15} é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à j -ésima semana para o consumo;

β_{16} é o coeficiente de terceiro grau do polinômio associado à j -ésima semana para o consumo;

β_{17} é o coeficiente de quarto grau do polinômio associado à j -ésima semana para o consumo;
 β_{18} é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_1 para o consumo;
 β_{19} é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_2 para o consumo;
 β_{20} é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à dieta a_3 para o consumo;
 β_{21} é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_1 para o consumo;
 β_{22} é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_2 para o consumo;
 β_{23} é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à dieta a_3 para o consumo;
 β_{24} é o coeficiente de terceiro grau do polinômio associado à dieta a_1 para o consumo;
 β_{25} é o coeficiente de terceiro grau do polinômio associado à dieta a_2 para o consumo;
 β_{26} é o coeficiente de terceiro grau do polinômio associado à dieta a_3 para o consumo;
 β_{27} é o coeficiente de quarto grau do polinômio associado à dieta a_1 para o consumo;
 β_{28} é o coeficiente de quarto grau do polinômio associado à dieta a_2 para o consumo;
 β_{29} é o coeficiente de quarto grau do polinômio associado à dieta a_3 para o consumo;
 $b_{0_{i1}}$ é o efeito aleatório associado ao intercepto do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o peso;
 $b_{1_{i1}} t_{j1}$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de primeiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o peso;
 $b_{2_{i1}} t_{j1}^2$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de segundo grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o peso;
 $b_{3_{i2}} t_{j2}$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de primeiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o consumo;
 $b_{4_{i2}} t_{j2}^2$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de segundo grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o consumo;
 $b_{5_{i2}} t_{j2}^3$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de terceiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o consumo;
 $b_{6_{i2}} t_{j2}^4$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de quarto grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o consumo;
 ε_{ijr} é o erro aleatório associado a y_{ijr} .

Aproveitando os resultados das análises univariadas o efeito de intercepto foi estudado somente no comportamento do peso, por conta da proximidade dos valores de consumo médio de sólidos totais no início do experimento (Figuras 1 e 8, respectivamente). Frente ao comportamento distinto dos perfis individuais de respostas, diversas estruturas foram comparadas pelo teste da razão de verossimilhanças e estatística BIC, considerando diversas combinações de fatores de efeito aleatório para ambas as variáveis respostas. Para resumir tal procedimento são listadas na Tabela 26 somente algumas estruturas que explicaram bem a variabilidade entre indivíduos das duas variáveis respostas. Detalhes sobre o grupo de estruturas montadas e ajustadas podem ser solicitados ao autor e detalhes da programação usada na especificação do modelo maximal podem ser vistos no Anexo D.

Tabela 26. Estruturas de efeitos aleatórios do modelo maximal da análise bivariada

Modelo	Efeitos aleatórios
M1	$b_{0_1} + b_{1_1} + b_{2_1} + b_{4_2} + b_{6_2}$
M2	$b_{0_1} + b_{1_1} + b_{4_2} + b_{6_2}$
M3	$b_{0_1} + b_{1_1} + b_{4_2}$

Avaliando os resultados dos testes da razão de verossimilhanças e valor do BIC apresentados na Tabela 27 escolheu-se o modelo M2, que considera efeitos aleatórios de intercepto e de primeiro grau do fator semana para o peso e efeitos aleatórios de segundo e quarto graus para o consumo médios de sólidos.

Tabela 27. Seleção da estrutura de efeitos aleatórios para o modelo maximal da análise bivariada

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M1	40	7711,910	7454,98	-	-	-
M2	35	7679,820	7455,006	M1 x M2	0.025	1
M3	31	7848,604	7649,484	M2 x M3	194.477	<0,0001

n.p.: número de parâmetros

A seguir são comparadas diferentes estruturas de matrizes de variâncias e covariâncias para os efeitos aleatórios, sendo uma diagonal, simetria composta e múltipla identidade, denominadas modelo M2.1, M2.2 e M2.3 respectivamente.

Tabela 28. Comparação de estruturas de matrizes de covariâncias para os efeitos aleatórios na análise bivariada

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M2	35	7679,820	7455,006	-	-	-
M2.1	29	7688,925	7502,650	M2 x M2.1	47,645	<0,0001
M2.2	27	8079,607	7906,180	M2 x M2.2	451,173	<0,0001
M2.3	30	8078,058	7911,054	M2 x M2.3	456,048	<0,0001

n.p.: número de parâmetros

Baseado nos resultados apresentados na Tabela 28, concluiu-se que a matriz não estruturada para os efeitos aleatórios (matriz \mathbf{G}) apresentou melhor ajuste quando comparado às demais estruturas.

Tabela 29. Comparação entre as estruturas de covariâncias dos modelos M2.4, M2.5 e M2.6

Modelo	Estrutura R	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M2	VC	35	7679,820	7455,006	-	-	-
M2.4	VCH	43	5669,658	5393,458	M2 x M2.4	2061,547	<0,0001
M2.5	ARH(1)	44	5607,052	5324,430	M2.4 x M2.5	69,029	<0,0001
M2.6	CSH	44	5650,988	5368,366	M2.4 x M2.6	25,093	<0,0001

n.p.: número de parâmetros; VC: Componentes de Variância Homogênea; VCH: Componentes de Variância Heterogênea; ARH(1): Autorregressiva de 1ª Ordem com Heterogeneidade de Variâncias; CSH: Simetria Composta com Heterogeneidade de Variâncias.

Antes de realizar testes sobre os efeitos fixos do modelo, buscou-se comparar a estrutura original da matriz intra-indivíduos, $\mathbf{R} = \mathbf{I}\sigma^2$, do modelo M2, com estruturas mais complexas que admitem heterogeneidade de variâncias, fato este já constatado em ambas as análises univariadas. As comparações apresentadas na Tabela 29 indicam a escolha

do modelo M2.5, que admite uma estrutura do tipo autorregressiva de 1ª ordem com heterogeneidade de variâncias, denominada ARH(1). Note que os modelos M2.5 e M2.6 são melhores que o modelo M2, mas M2.5 apresenta o menor valor do BIC.

A seguir foram realizados os testes de Wald sobre os termos da parte fixa do modelo maximal bivariado. Os resultados apresentados na Tabela 30 permitem concluir que para o peso dos bezerras, há a necessidade de curvas polinomiais com efeitos de intercepto distintos e efeito linear e quadrático do fator semana diferentes para cada dieta. Já para o consumo médio de sólidos totais, os resultados dos testes sugerem o ajuste de curvas com interceptos distintos, mas coeficientes iguais de primeiro, segundo e quarto grau para todas as dietas.

Tabela 30. Análise de variância dos efeitos fixos do modelo maximal M2.5 da análise bivariada

Fonte de Variação	G.L.	F_{calc}	p-valor
Peso			
Dieta	3	920,118	<0,0001
Semana	1	85,806	<0,0001
Semana ²	1	150,580	<0,0001
Dieta x Semana	2	1,032	0,356
Dieta x Semana ²	2	0,782	0,458
Consumo			
Dieta	3	7,324	0,0002
Semana	1	58,552	<0,0001
Semana ²	1	16,380	<0,0001
Semana ³	1	2,302	0,129
Semana ⁴	1	16,747	<0,0001
Dieta x Semana	2	0,234	0,791
Dieta x Semana ²	2	1,947	0,143
Dieta x Semana ³	2	1,679	0,187
Dieta x Semana ⁴	2	1,033	0,356

Um novo modelo, denominado M2.7, foi formulado com base nas conclusões dos testes apresentados na Tabela 30 e as estimativas dos seus coeficientes e respectivos erros padrões são apresentadas na Tabela 31.

Tabela 31. Estimativas dos coeficientes e respectivos erros da parte fixa do modelo M2.7

Fator	Coefficiente	Erro Padrão
Peso		
Dieta (22% de FDN)	37,126	1,146
Dieta (22% de FDN com adição de feno)	38,485	1,477
Dieta (31% de FDN)	37,781	1,302
Semana	-0,291	0,235
Semana ²	0,279	0,022'
Consumo		
Dieta (22% de FDN)	7,361	18,116
Dieta (22% de FDN com adição de feno)	0,188	20,417
Dieta (31% de FDN)	46,528	19,162
Semana	4,840	16,914
Semana ²	12,443	2,045
Semana ⁴	-0,041	0,051

Neste ponto da análise bivariada podem ser observadas algumas diferenças dos resultados com aqueles obtidos com as análises univariadas, principalmente para o consumo médio de sólidos totais. A análise univariada (Tabela 18) indicou curvas com coeficientes de 2º grau diferentes para as dietas com 22% e 31% de FDN, enquanto a análise bivariada indicou a necessidade de um único coeficiente de 2º grau para todas as dietas. A Tabela 18 também indica a necessidade de manutenção dos coeficientes polinomiais de primeiro, segundo, terceiro e quarto graus na estrutura fixa do modelo, mas a Tabela 31 indica que o coeficiente de terceiro grau não precisa ser mantido no modelo bivariado.

Comparando os valores das estimativas dos coeficientes das curvas ajustadas e seus respectivos erros padrões das análises uni e bivariadas, nota-se que os erros padrões obtidos na análise bivariada são bem inferiores àqueles obtidos nas análises univariadas. Isso pode ser visualizado comparando os resultados numéricos das Tabelas 10 e 31 relativos ao peso dos bezerros e das Tabelas 18 e 31 para o consumo de sólidos totais.

Acredita-se que essas diferenças ocorram porque na análise bivariada os valores das estimativas e dos erros padrões são calculados considerando a correlação positiva existente entre as duas variáveis respostas, como informado anteriormente, e nas análises univariadas, são calculados de forma independente. Outro motivo está relacionado às diferentes estruturas aleatórias selecionadas em ambas as abordagens. Por exemplo, na análise univariada do peso dos bezerros foi incluído somente um efeito aleatório ao efeito quadrático de semana, enquanto na abordagem bivariada tal efeito não precisou ser incluído na parte aleatória do modelo selecionado.

Os gráficos com as curvas médias ajustadas para as duas variáveis respostas e os perfis médios de respostas são apresentados na Figura 17.

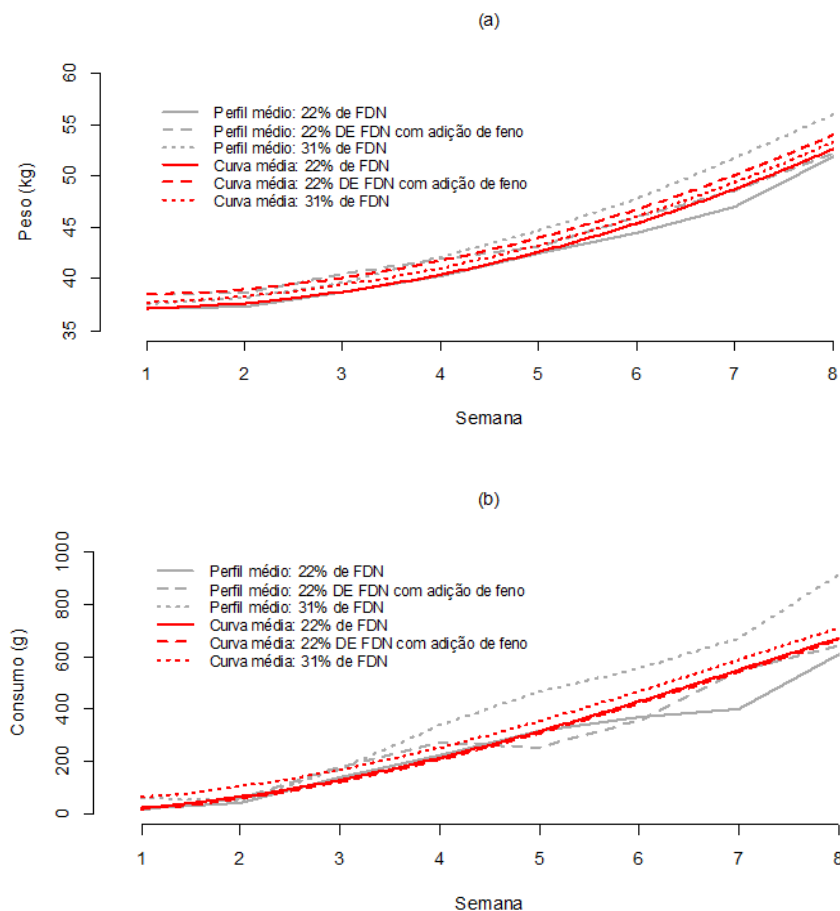


Figura 17. Curvas médias ajustadas do modelo M2.7 versus perfis médios de (a) peso e (b) consumo médio de sólidos totais.

A Figura 17 deixa evidente a proximidade entre as curvas médias ajustadas, sugerindo que o atual modelo bivariado seja comparado com um modelo mais simples envolvendo uma única curva para as três dietas. Esse modelo maximal mais simples pode ser ajustado em R como:

$$y_{ijr} = \underbrace{\beta_0 + \beta_1 t_{j1} + \beta_2 t_{j1}^2 + \beta_3 + \beta_4 t_{j2} + \beta_5 t_{j2}^2 + \beta_6 t_{j2}^3 + \beta_7 t_{j2}^4}_{\text{parte fixa}} + \underbrace{b_{0_{i1}} + b_{1_{i1}} t_{j1} + b_{2_{i1}} t_{j1}^2 + b_{3_{i2}} t_{j2} + b_{4_{i2}} t_{j2}^2 + b_{5_{i2}} t_{j2}^3 + b_{6_{i2}} t_{j2}^4 + \varepsilon_{ijr}}_{\text{parte aleatória}} \quad (40)$$

com $j = 1, 2, 3, \dots, 8$ e $r = 1, 2$, em que

y_{ijr} é a r -ésima resposta do i -ésimo indivíduo na j -ésima semana;

β_0 é o intercepto em relação ao peso;

β_1 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à j -ésima semana para o peso;

β_2 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à j -ésima semana para o peso;

β_3 é o intercepto em relação ao consumo;

β_4 é o coeficiente de primeiro grau do polinômio associado à j -ésima semana para o consumo;

β_5 é o coeficiente de segundo grau do polinômio associado à j -ésima semana para o consumo;

β_6 é o coeficiente de terceiro grau do polinômio associado à j -ésima semana para o consumo;

β_7 é o coeficiente de quarto grau do polinômio associado à j -ésima semana para o consumo;

$b_{0_{i1}}$ é o efeito aleatório associado ao intercepto do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o peso;

$b_{1_{i1}} t_{j1}$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de primeiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o peso;

$b_{2_{i1}} t_{j1}^2$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de segundo grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o peso;

$b_{3_{i2}} t_{j2}$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de primeiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o consumo;

$b_{4_{i2}} t_{j2}^2$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de segundo grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o consumo;

$b_{5_{i2}} t_{j2}^3$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de terceiro grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o consumo;

$b_{6_{i2}} t_{j2}^4$ é o efeito aleatório associado ao coeficiente de quarto grau do polinômio para o i -ésimo indivíduo para o consumo;

ε_{ijr} é o erro aleatório associado a y_{ijr} .

As estruturas de efeitos aleatórios comparadas na Tabela 32 são as mesmas apresentadas na Tabela 26. Para efeito de identificação dos modelos sem efeito da dieta, será utilizada a identificação (1) na numeração de cada modelo em alusão a um único nível de dieta.

Tabela 32. Estruturas de efeitos aleatórios considerando a igualdade entre as dietas

Modelo	Efeitos aleatórios
M1(1)	$b_{0_1} + b_{1_1} + b_{2_1} + b_{4_2} + b_{6_2}$
M2(1)	$b_{0_1} + b_{1_1} + b_{4_2} + b_{6_2}$
M3(1)	$b_{0_1} + b_{1_1} + b_{4_2}$

Avaliando os resultados dos testes da razão de verossimilhanças e valor do BIC apresentados na Tabela 33 escolheu-se o modelo M2(1), que considera efeitos aleatórios de intercepto e de primeiro grau do fator semana para o peso e efeito quadrático e de quarto grau de semana para o consumo de sólidos totais.

Tabela 33. Seleção da estrutura de efeitos aleatórios para o modelo bivariado com uma única curva para as três dietas

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M1(1)	24	7705,871	7551,098	-	-	-
M2(1)	19	7673,653	7551,124	M1(1) x M2(1)	0,026	1
M3(1)	15	7840,142	7743,408	M2(1) x M3(1)	192,284	<0,0001

n.p.: número de parâmetros

Os resultados das comparações visando à escolha da melhor estrutura da matriz de covariâncias entre indivíduos apresentados na Tabela 34 permitem escolher o modelo M2(1), que admite covariâncias significativas entre os fatores da estrutura aleatória.

Tabela 34. Comparação de estruturas de covariâncias para os efeitos aleatórios do modelo M2(1)

Modelo	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M2(1)	19	7673,653	7551,124	-	-	-
M2.1(1)	13	7683,373	7599,538	M2(1) x M2.1(1)	48.413	<0,0001
M2.2(1)	11	8088,539	8017,602	M2(1) x M2.2(1)	466.477	<0,0001
M2.3(1)	10	8087,309	8022,820	M2(1) x M2.3(1)	471.696	<0,0001

n.p.: número de parâmetros

Os resultados das comparações dos modelos com estruturas mais complexas que a estrutura original da matriz intra-indivíduos, $\mathbf{R} = \mathbf{I}\sigma^2$, apresentados na Tabela 35 indicam a escolha do modelo M2.5(1), que admite uma estrutura do tipo autorregressiva de 1ª ordem com heterogeneidade de variâncias, denominada ARH(1). Note que os modelos M2.5(1) e M2.6(1) são melhores que o modelo M2(1), mas M2.5(1) apresenta o menor valor do BIC.

Tabela 35. Comparação de estruturas de covariâncias \mathbf{R}_i para o modelo bivariado com dois níveis do fator dieta

Modelo	Estrutura R	n.p.	BIC	-2logLik	Comparação	χ^2_{calc}	p-valor
M2(1)	VC	19	7673,653	7551,124	-	-	-
M2.4(1)	VCH	27	5633,411	5459,290	M2(1) x M2.4(1)	2091.834	<0,0001
M2.5(1)	ARH(1)	28	5573.470	5392.902	M2.4(1) x M2.5(1)	66.389	<0,0001
M2.6(1)	CSH	28	5616.502	5435.934	M2.4(1) x M2.6(1)	23.357	<0,0001

n.p.: número de parâmetros; VC: Componentes de Variância Homogênea; VCH: Componentes de Variância Heterogênea; ARH(1): Autorregressiva de 1ª Ordem com Heterogeneidade de Variâncias; CSH: Simetria Composta com Heterogeneidade de Variâncias.

Tabela 36. Análise de variância do modelo M2.5(1)

Fonte de Variação	G.L.	F_{calc}	p-valor
Peso			
Intercepto	1	2855,117	<0,0001
Semana	1	86,965	<0,0001
Semana ²	1	156,093	<0,0001
Consumo			
Intercepto	1	13,357	0,0005
Semana	1	55,717	<0,0001
Semana ²	1	16,844	<0,0001
Semana ³	1	2,429	0,1197
Semana ⁴	1	17,016	<0,0001

Os resultados da análise de variância para a seleção dos efeitos fixos do modelo M2.5(1) apresentados na Tabela 36 indicam a manutenção dos efeitos originais do modelo, com exceção do efeito cúbico de semana para a variável resposta consumo. Ajustando um novo modelo, denominado M2.7(1), com os fatores selecionados, os seus respectivos coeficientes e erros padrões são apresentados a seguir.

Tabela 37. Coeficientes e erros padrões de cada parâmetro do modelo M2.7(1), considerando a igualdade entre curvas

Fator	Coefficiente	Erro Padrão
Peso		
Intercepto	37,672	0,760
Semana	-0,292	0,234
Semana ²	0,279	0,022
Consumo		
Intercepto	18,561	21,641
Semana	3,629	25,534
Semana ²	12,760	5,777
Semana ⁴	-0,044	0,050

O modelo bivariado final ajustado para as duas variáveis respostas é dado por:

$$\text{Peso:} \quad \bar{y}_j = 37,672 - 0,292t_j + 0,279t_j^2 \quad t = 1, 2, \dots, 8 \quad (41)$$

$$\text{Consumo:} \quad \bar{y}_j = 18,561 + 3,629t_j + 12,760t_j^2 - 0,044t_j^4 \quad t = 1, 2, \dots, 8 \quad (42)$$

Onde,

\bar{y}_j é a média da variável resposta na j -ésima semana;

t_j é o efeito da j -ésima semana;

t_j^2 é o efeito quadrático da j -ésima semana;

t_j^4 é o efeito de quarto grau da j -ésima semana;

A qualidade de ajuste dos modelos M2.7 e M2.7(1) pode ser comparada pelos valores de BIC de ambos, sendo estes de 5589,968 e 5587,403, enfatizando a melhor qualidade do último.

A matriz V (ANEXO B) apresenta as estimativas de variâncias (diagonal), covariâncias (abaixo da diagonal) e correlação (acima da diagonal) para o modelo marginal. Como, até a execução deste trabalho, o programa R não possui uma função específica para a extração da matriz V sob abordagem bivariada, a obtenção da matriz foi feita utilizando o **proc mixed** do SAS 9.4 (SAS Institute, Cary NC). Detalhes são encontrados no ANEXO F.

Pode-se perceber na matriz V do modelo bivariado alguns comportamentos típicos de dados longitudinais resultantes de experimentos envolvendo o crescimento de animais: aumento das variâncias das respostas ao longo do tempo e correlações não nulas que tendem a diminuir de valor quando aumenta o intervalo entre as medidas. Percebe-se também valores medianos de correlações entre os pesos e os consumos em algumas semanas. Esses aspectos reforçam a escolha adequada das estruturas de efeitos aleatórios e das matrizes de covariâncias intra e entre indivíduos, que compõem o modelo linear misto bivariado escolhido para explicar o comportamento longitudinal simultâneo do peso e do consumo de sólidos totais dos bezerros.

Os gráficos das curvas individuais e da curva média ajustadas aos dados de peso e consumo de sólidos totais dos bezerros são apresentados nas Figuras 18 e 19, respectivamente.

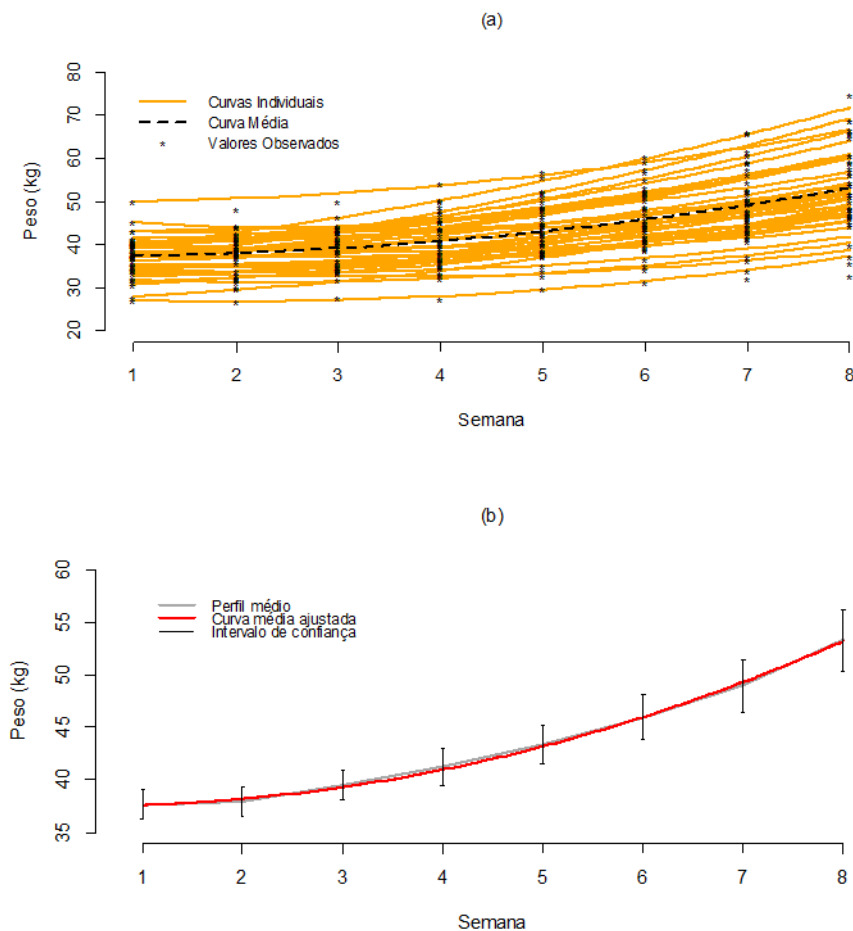


Figura 18. (a) Curvas individuais ajustadas e (b) perfil médio e curva média ajustada para os pesos dos bezerros.

Em ambas as figuras se percebe um bom ajuste do modelo linear misto bivariado aos perfis individuais de peso e consumo, bem como aos perfis médios de respostas. O ajuste do modelo aos dados de peso foi melhor que aos dados de consumo.

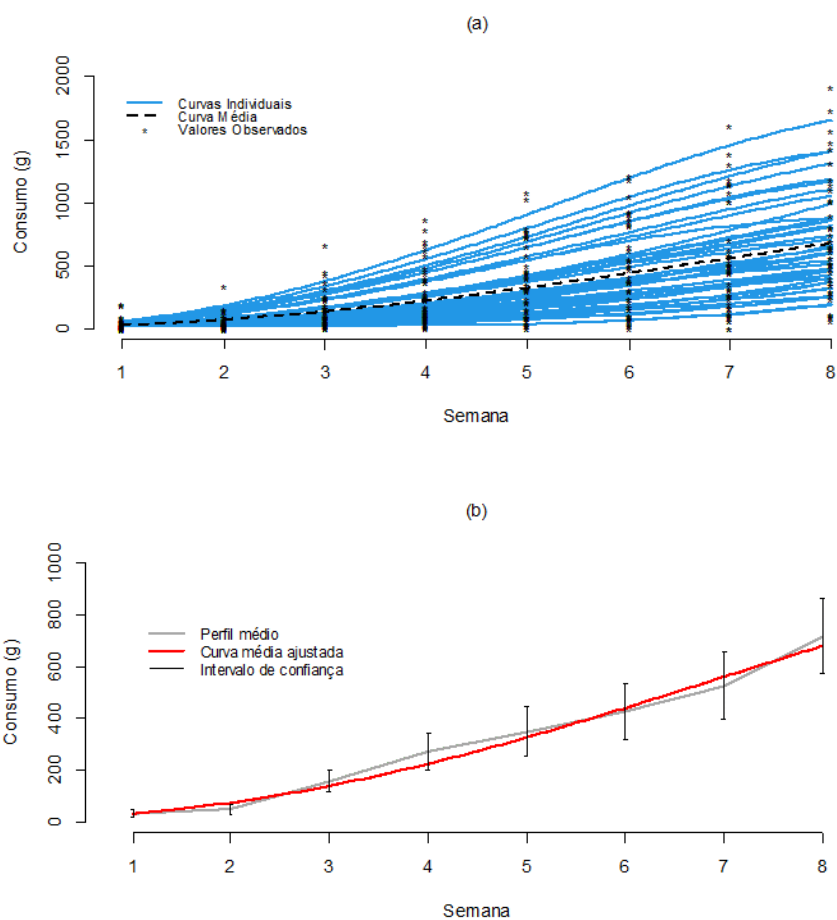


Figura 19. Curvas individuais ajustadas (a) e perfil médio versus curva média ajustada (b) para a variável consumo.

As Figuras 20(a) e 20(b) apresentam os valores preditos pelo modelo M2.6(1) em comparação com os valores observados tanto para as variáveis peso e consumo, respectivamente. Tal como observado no caso univariado, o ajuste do modelo foi melhor para os pesos dos bezerros do que para os consumos de sólidos totais.

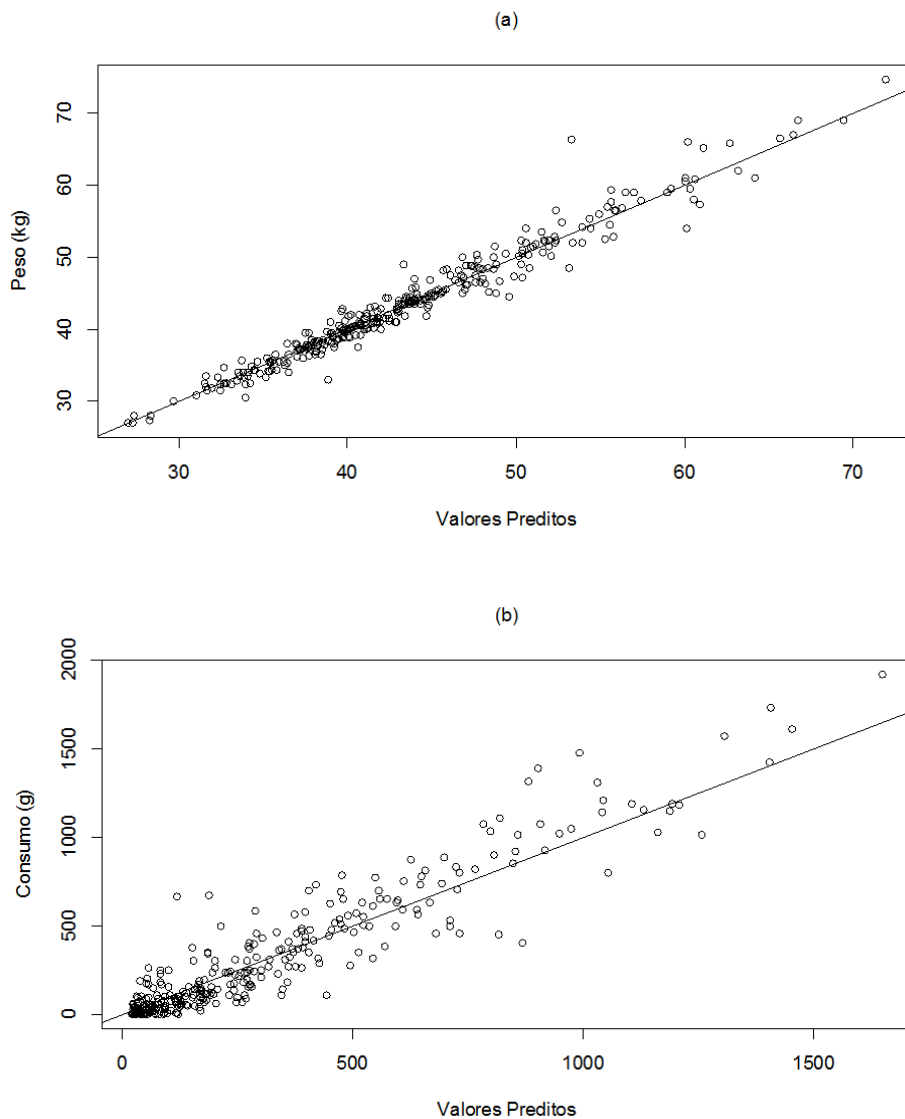


Figura 20. Valores observados versus valores preditos pelo modelo para peso (a) e consumo (b).

As Figuras 21(a) e 21(b) apresentam o gráfico de índices e o gráfico de valores preditos versus os resíduos do modelo para a variável peso e consumo, respectivamente, considerando os resíduos de confundimento mínimo, marginais e condicionais estudentizados. Pode-se perceber para ambas as variáveis que os resíduos de confundimento mínimo apresentam uma distribuição aleatória em relação aos índices do modelo e um único resíduo com valor absoluto superior a 3. Já os resíduos marginais e condicionais estudentizados aparentam alguma tendência, sendo o último mais próximo da nulidade para a variável peso. No estudo do comportamento dos resíduos versus os valores preditos, os resíduos de confundimento mínimo aparentam um comportamento aleatório, tal como no gráfico dos resíduos versus os índices, o que não ocorre para os resíduos marginais e condicionais estudentizados.

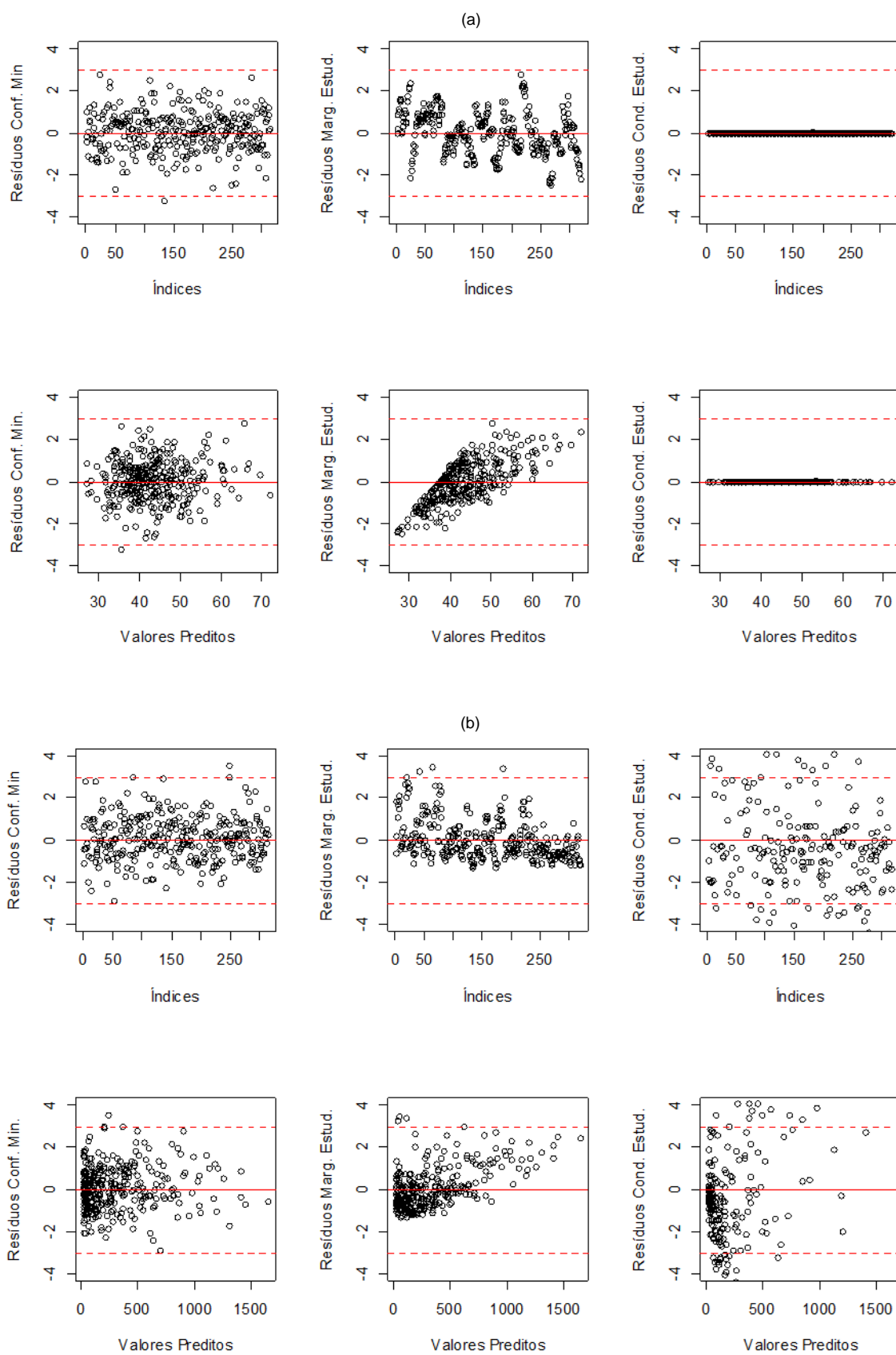


Figura 21. Resíduos versus índices e resíduos versus valores preditos para cada tipo de resíduo para a variável peso (a) e consumo (b).

Sob abordagem bivariada, as Figuras 22(a) e 22(b) apresentam respectivamente o gráfico quantil-quantil e o histograma para o estudo da normalidade dos resíduos referentes ao peso e ao consumo médio de sólidos totais.

No caso dos pesos, é notável que tanto os resíduos de confundimento mínimo quanto os marginais têm distribuição próxima à normal, o que não acontece com os resíduos condicionais. Essas afirmações foram confirmadas pelo teste de Shapiro-Wilk que indicou normalidade para os dois primeiros resíduos (p-valor igual a 0,397 e 0,665, respectivamente) e fuga da normalidade para os resíduos condicionais (p-valor = $2,2 \cdot 10^{-16}$).

Os gráficos quantil-quantil e histograma dos resíduos do consumo indicam que a suposição de normalidade só foi atendida pelos resíduos de confundimento mínimo, o que foi confirmado pelo teste de Shapiro-Wilk, com p-valor igual a 0,281 para os resíduos de confundimento mínimo e p-valores iguais a $4,535 \cdot 10^{-14}$ e $2,2 \cdot 10^{-16}$ para os resíduos marginais e condicionais, respectivamente.

Para o estudo da normalidade bivariada fez-se uso do boxplot bivariado e do teste de Henze-Zirkler. Esses dois dispositivos podem ser vistos na Figura 23 para os três tipos de resíduos. Analisando somente o boxplot bivariado, percebe-se que uma maior quantidade de resíduos de confundimento mínimo está no interior da elipse do que de resíduos marginais ou condicionais. A grande quantidade de pontos desses dois resíduos fora da elipse é um forte indicativo de que os mesmos não têm distribuição normal bivariada. Note que para os resíduos condicionais a elipse nem aparece, ou seja, praticamente todos os pontos estão fora do mesmo.

O teste de Henze-Zirkler indica normalidade bivariada dos resíduos de confundimento mínimo (p-valor = 0,129) e fuga dessa normalidade para os resíduos marginais (p-valor = $2,864 \cdot 10^{-14}$) e condicionais (p-valor < 0,0001). Esses resultados ficam evidentes nos gráficos dos quantis do teste, quando se percebe a maior quantidade de pontos do resíduo de confundimento mínimo próximos da reta do que dos outros dois tipos de resíduos.

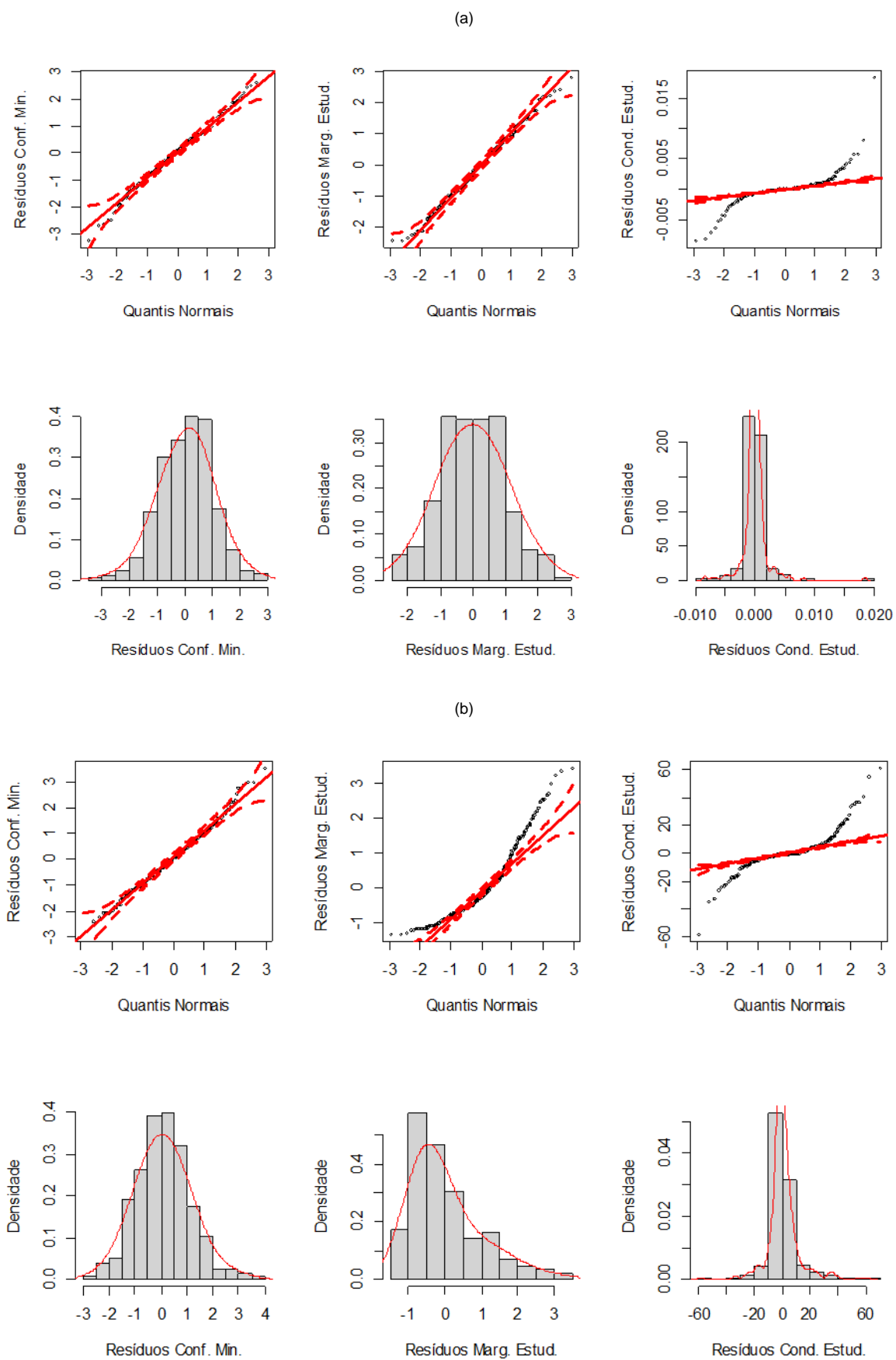


Figura 22. Gráficos quantil-quantil e histogramas para o estudo da normalidade dos resíduos referentes ao peso (a) e ao consumo (b) considerando os resíduos de confundimento mínimo, marginais e condicionais estudentizados.

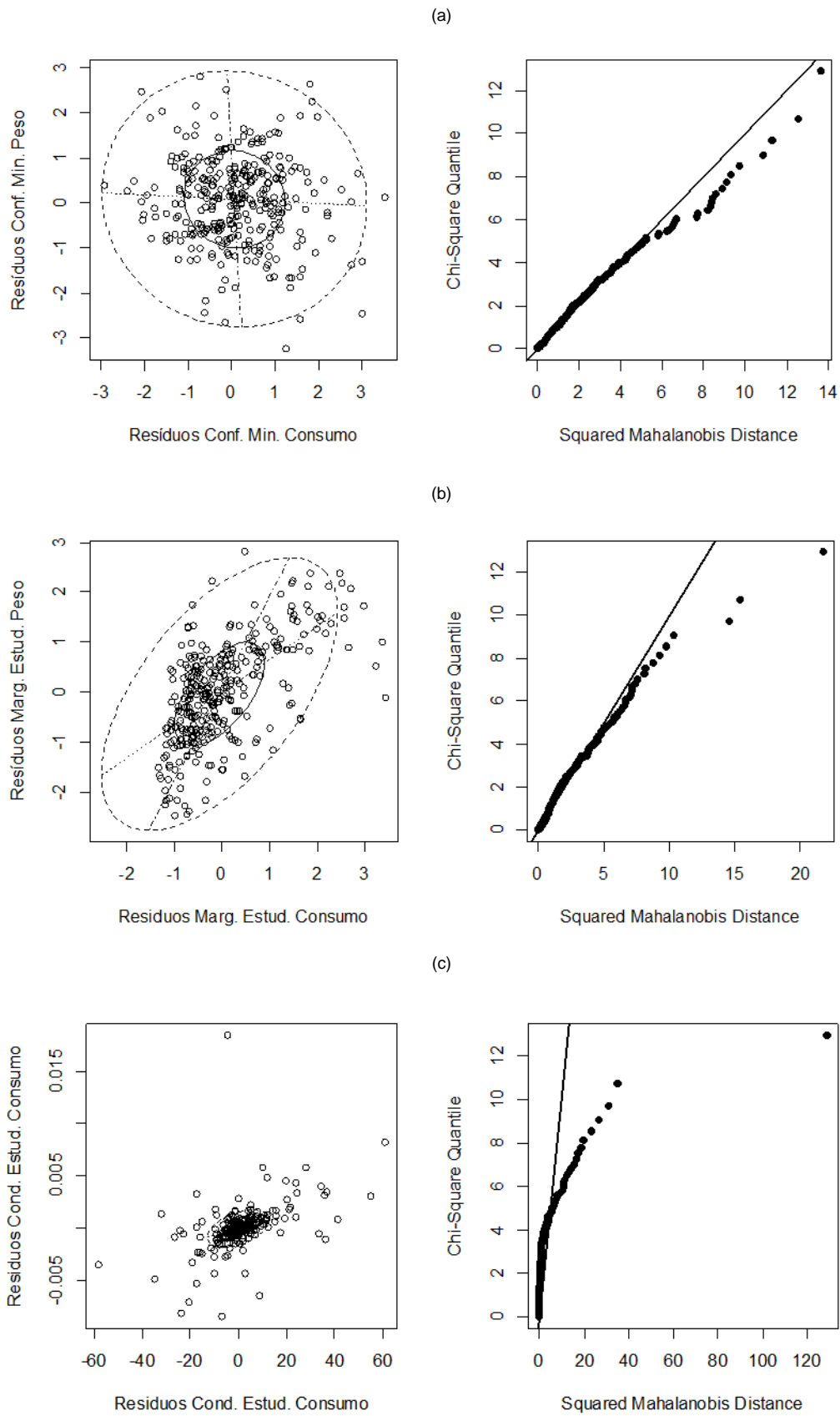


Figura 23. Boxplot bivariado e gráfico de normalidade bivariada de Henze-Zirkler para (a) resíduos de confundimento mínimo, (b) marginais e (c) condicionais estudantizados.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Sob abordagem univariada, um modelo considerando uma mesma curva polinomial para as três dietas, constituído na sua parte fixa pelo intercepto e os efeitos linear e quadrático de semana e em sua parte aleatória com efeitos aleatórios em todos os coeficientes, com uma estrutura de covariâncias \mathbf{G} não estruturada e \mathbf{R} do tipo autorregressiva de 1ª ordem com heterogeneidade de variâncias, proporcionou a melhor explicação do comportamento longitudinal dos pesos dos bezerros ao longo do tempo.

Para o consumo de sólidos totais, o melhor modelo considerou curvas distintas para as dietas com 22% e 31% de FDN, constituído na sua parte fixa por interceptos e efeito quadrático de semana distintos para essas dietas e o mesmo efeito cúbico e quarto grau para todas as dietas. A estrutura aleatória inclui efeito aleatório somente ao efeito quadrático e uma matriz de covariâncias \mathbf{R} do tipo autorregressiva de 1ª ordem com heterogeneidade de variâncias.

A abordagem bivariada indicou como melhor modelo linear misto bivariado, uma única curva polinomial para as três dietas para as duas variáveis respostas. Sua estrutura fixa incluiu um polinômio de segundo grau para o peso e um polinômio de quarto grau, sem o termo de terceiro grau, para explicar o comportamento médio do consumo de sólidos totais. A melhor matriz de covariâncias entre indivíduos, \mathbf{G} , foi a não estruturada, e para a matriz de covariâncias intra-indivíduos, \mathbf{R} , uma estrutura autorregressiva de 1ª ordem com heterogeneidade de variâncias.

A abordagem bivariada mostrou-se mais adequada do que a abordagem univariada na análise dos dados de peso e consumo de sólidos totais de bezerros. A possibilidade de usar simultaneamente as informações dessas duas variáveis respostas, que são positivamente correlacionadas, provocou alterações nas estimativas dos coeficientes do modelo e dos seus respectivos erros padrões, alterando as inferências feitas sobre os parâmetros. O modelo final da análise univariada do consumo resultou em curvas distintas para as dietas com 22% e 31% de FDN, enquanto que no modelo bivariado, foi necessária uma única curva para as três dietas.

Os resíduos de confundimento mínimo são altamente indicados para o diagnóstico dos modelos lineares mistos. No presente trabalho estes resíduos apresentaram resultados menos tendenciosos do que os resíduos marginais e condicionais estudentizados, conforme citado na literatura.

O programa computacional R pode ser considerado uma excelente ferramenta na análise dos modelos lineares mistos uni e bivariados. Contudo, há necessidade de implementação de funções que possibilitem a saída da matriz de correlação marginal, \mathbf{V} , para o estudo bivariado. O proc mixed do SAS tem a vantagem de mostrar tal matriz sem qualquer tipo de dificuldade. Também são necessárias funções mais simples que permitam o ajuste de curvas polinomiais de diferentes graus para duas ou mais variáveis respostas e a declaração de diferentes estruturas de covariâncias \mathbf{R} para cada variável resposta de interesse.

A análise univariada dos vetores de efeitos aleatórios deve ser estudada com mais cautela em relação aos resultados apresentados neste trabalho, tendo em vista o viés de sua predição, procurando retirar os efeitos aleatórios com confundimento mínimo tal como feito para os resíduos do modelo. Este procedimento não foi realizado neste trabalho pois o autor não conseguiu ter acesso à programação para a estimação do confundimento. É necessário o desenvolvimento de funções com tal objetivo.

O estudo bivariado dos efeitos aleatórios não foi realizado neste trabalho pois uma teoria acerca deste assunto não foi encontrada, precisando ser que ela seja desenvolvida para este tipo de análise.

REFERÊNCIAS

- AKAIKE, H. A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on automatic control*. New York, v.19, n.6, p.716-723. Dezembro,1974;
- ALCARDE, R. Modelos lineares mistos em dados longitudinais com o uso do pacote ASReML-R. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo. Piracicaba. 2012;
- AMARAL, S. S. W. G. Modelos lineares mistos para análise de dados longitudinais bivariados provenientes de ensaios agropecuários. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agronômica). Universidade de São Paulo. Piracicaba. 2013;
- BARBOSA, M. Uma abordagem para análise de dados com medidas repetidas utilizando modelos lineares mistos. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo. 118p. Piracicaba, 2009.;
- BUTLER, S.; LOUIS, T. Random effects models with non-parametric priors. *Statistics in Medicine*, 11(14-15):1981–2000. 1992;
- CAMARINHA FILHO, J. A. Modelos lineares mistos: estruturas de matrizes de variâncias e covariâncias e seleção de modelos. 2002. 85p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo. Piracicaba, 2002.;
- DEMÉTRIO, C. G. B.; ZOCCHI, S. S. Modelos de regressão. Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo. 221 p. Piracicaba, 2011.;
- DEMPSTER, A.P.; RYAN, L.M. Weighted normal plots. *Journal of the American Statistical Association*, Boston, v. 80, n. 392, p. 845-950. December, 1985;
- DIGGLE, P.J. An approach to the analysis of repeated measurements. *Biometrics*. v. 44, p.959-971. Washington, 1988.;
- DOORNIK, J. A.; HANSEN, D. An omnibus test for univariate and multivariate normality. Working Paper, Oxford: Nuffield College, 1994;
- EVERITT, B. An R and S-PLUS R companion to multivariate analysis. 221 p. London: Springer-Verlag, 2005.;
- FARAWAY, J.J. Extending the linear model with R: generalized linear, mixed effects and nonparametric regression models. 331 p. New York: Chapman & Hall/CRC, 2006.;
- FERNANDEZ, G.C.J. Repeated measure analysis of line-source sprinkler experiments. *HortScienc*, St. Joseph, v. 26, n. 4, p. 339-342. 1991.;
- FIEUWS, S. Mixed models for multivariate longitudinal data. 2006. 126 p. Thesis (PhD in Medical Sciences) - Katholieke Universiteit Leuven, Leuven, 2006.;
- FIEUWS, S.; VERBEKE, G. Joint modelling of multivariate longitudinal profiles: pitfalls of the random-effects approach. *Statistics in Medicine*, Diepenbeek, v. 23, p. 3093-3104. 2004.;
- FITZMAURICE, G. M.; LAIRD, N.M.; WARE, J.H. Applied Longitudinal Analysis. Wiley Series in Probability and Statistics. 752p. New Jersey, USA, 2011.;
- FREITAS, E. G. Análise de dados longitudinais em experimentos com cana-de-açúcar. Dissertação (Mestrado). 74 p. Universidade de São Paulo. Piracicaba, 2007.;
- GILMOUR, A.R.; THOMPSON, R.; CULLIS, B.R. Average information REML: an efficient algorithm for variance parameter estimation in linear models. *Biometrics*, Arlington, v.51, 4, p. 1440-1450. December, 1995;

- HARVILLE, D.A. Maximum Likelihood Approaches to Variance Component Estimation and to Related Problems. *Journal of the American Statistical Association*, Alexandria, v. 72, n. 358, p. 320-338. June, 1977.;
- HILDEN-MINTON, J.A. Multilevel Diagnostics for Mixed and Hierarchical Linear Models. PhD Thesis (Philosophy in Mathematics), University of California, Los Angeles, 110p. 1995.
- HUYINH, H; FELDT, L.S. Conditions under which mean square ratios in repeated measurements designs have exact F-distributions. *Journal of the American Statistical Association*, Boston, v.65, n.332, p.1582-1589. December 1970.;
- KORKMAZ, S.; GOKSULUK, D.; ZARARSIZ, G. MVN: An R package for assessing multivariate normality. 2015. Disponível em: < <https://cran.r-project.org/web/packages/MVN/vignettes/MVN.html>>. Acesso em: 22 set. 2021.;
- LAIRD, N.M.; WARE, J.H. Random-effects models for longitudinal data. *Biometrics*, Washington, v.38, n.4, p. 963-974. December, 1982.;
- LI, S.Z.; JAIN, A. Mahalanobis Distance. *Encyclopedia of Biometrics*. Springer, Boston, MA. 2009.;
- LIMA, C.G. Análise de dados longitudinais provenientes de experimentos em blocos casualizados. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo. 119 p. Piracicaba, 1996.;
- LITTELL, R.C.; PENDERGAST, J.; NATARAJAN, R. Modelling covariance structure in the analysis of repeated measures data. *Statistics in Medicine*, Chichester, n.19, p. 1793-1819. 2000.;
- LOY, A. M. M. Diagnostics for mixed/hierarchical linear models. Thesis (Doctor of Philosophy). Iowa State University; 2013.;
- MAESTRE, M. R. Análise de modelos lineares mistos com um fator longitudinal quantitativo e um qualitativo ordinal. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo. 85 p. Piracicaba, 2014.;
- MANGUEIRA, A. C. H. Métodos multivariados no estudo das relações entre variáveis socioeconômicas do estado de Mato Grosso. Universidade Estadual da Paraíba. Campina Grande, PB. 2017.;
- MAUCHLY, J.W. Significance test for sphericity of a normal n-variate distribution. *Annals of Mathematical Statistics*, Ann Arbor. v.11, p.204-209. 1940.;
- MOVAHEDI, B.; FOROOZANDEH, A.D.; SHAKERI, P. Effects of different forage sources as a free-choice provision on the performance, nutrient digestibility, selected bloodmetabolites and structural growth of Holstein dairy calves. *Journal of Animal Physiology and Animal Nutrition*. vol. 101, 9 p. 2016.
- OLIVEIRA, L. P. Modelos lineares mistos em estudos toxicológicos longitudinais. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agronômica). Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". 159 p. Universidade de São Paulo. Piracicaba, 2015.;
- OMIDI-MIRZAEI, H.; AZARFAR, A.; MIRZAEI, M.; KIANI, A.; GHAFFARI, M.H. Effects of forage source and forage particle size as a free-choice provision on growth performance, rumen fermentation, and behavior of dairy calves fed texturized starters. *Journal of Dairy Science*. vol.101, n. 5. 15p. 2018.;
- PATTERSON, H.D.; THOMPSON, R. Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. *Biometrika*, London, v.58, n.3, p.545-554, 1971.;
- PAULA, M.R.; OLTRAMARI, J.T.; SILVA, M.P.C. et al. Intensive liquid feeding of dairy calves with a medium crude protein milk replacer: Effects on performance, rumen, and blood parameters. *American Dairy Science Association*. Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo. Piracicaba, 2017.;

- PINHEIRO, J.C. Topics in mixed effects models. 1994. 210 p. Thesis (PhD). University of Wisconsin, Madison 1994.;
- PINHEIRO, J.C.; BATES, D.M. Mixed-effects models in S and S-PLUS. 528p. New York: Springer-Verlag, 2000.;
- R CORE TEAM (2021). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>;
- RAUDENBUSH, S.W.; BRYK, A.S. Hierarchical linear models: Applications and data analysis methods. 2 Ed., 457 p. Thousand Oaks: Sage Publications, Inc., 2002.
- REGAZZI, A.J; ANDRÉ, C. M. Critérios para seleção de modelos baseados na razão de verossimilhança. Viçosa, MG. UFV. 2008. Disponível em: <<http://arquivo.ufv.br/dbg/resumos2008b/Resumo%20ClaudioMiro.htm>>. Acessado em 12 de abril de 2021.
- ROYSTON, J. B. Approximating the Shapiro-Wilk W-Test for non-normality. Statistics and Computing, London v. 2, n. 1, 1992;
- SARTORIO, S. D. Modelos não lineares mistos em estudos de degradabilidade ruminal in situ. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agrônômica). Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". Universidade de São Paulo. 197 p. Piracicaba, 2013;
- SAS Institute Inc 2013. SAS/ACCESS® 9.4 Interface to ADABAS: Reference. Cary, NC: SAS Institute Inc.;
- SCHWARZ, G. Estimating the Dimension of a Model. Annals of Statistics, 6, 461-464. 1978;
- SINGER, J.M.; NOBRE, J.S.; ROCHA, F.M.M. Análise de dados longitudinais. Universidade de São Paulo. 2012;
- SINGER, J.M.; NOBRE, J.S.; ROCHA, F.M.M. Diagnostic and treatment for linear mixed models. Proceedings 59th ISI World Statistics Congress, 25-30, Hong Kong, 2013.
- SNIJDERS, T.; BOSKER, R. Multilevel Analysis: An introduction to basic and advanced multilevel modeling. 1 Ed. 251 p. Thousand Oaks: Sage Publications Inc., 1999.;
- VERBEK, G.; MOLENBERGHS, G. Linear mixed models for longitudinal data. 586 p. New York: Springer - Verlag, 2000.;
- VERBEKE, G.; LESAFFRE, E. The effect of misspecifying the random-effects distribution in linear mixed models for longitudinal data. Computational Statistics & Data Analysis, 23(4):541-556. 1997.
- VERBYLA, A.P.; CULLIS, B.R. Modelling in repeated measures experiments. Journal of the Royal Statistical Society, London, v. 39, n.3, p. 341-356. 1990;
- VON ENDE, C. N. Design and analysis of ecological experiments. Oxford University Press. 134 – 157. 2001.
- WEST, B.T.; WELCH, K.B.; GALECKI, A.T. Linear mixed models: A practical guide using statistical software. 339p. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2007.
- WOLFINGER, R.D. Covariance structure selection in general mixed models. Communications in Statistics, Simulation and Computation, New York, v. 22, n. 4, 1079-1106. 1993;
- XAVIER, L.H.; DIAS, C. T. S. Acurácia do modelo univariado para análise de medidas repetidas por simulação multidimensional. Scientia Agrícola, Piracicaba, v. 58, n. 2, p. 241-250, 2001.

ANEXOS

ANEXO A. Transformação linear proposta por Hilden-Minton (1995), retirado de Alcarde (2012)

Considerando as seguintes matrizes:

$$\begin{aligned}\Sigma &= \sigma^2 \mathbf{R} \\ \mathbf{D} &= \sigma^2 \mathbf{G} \\ \mathbf{M} &= (\mathbf{ZGZ}' + \mathbf{R})^{-1} \\ \mathbf{Q} &= \mathbf{M} - \mathbf{MX}(\mathbf{X}'\mathbf{MX})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{M} \\ \mathbf{d} &= \mathbf{Z}\hat{\mathbf{b}} \\ \boldsymbol{\zeta} &= \mathbf{Z}\mathbf{b} + \boldsymbol{\varepsilon}\end{aligned}$$

A matriz de variâncias e covariâncias de $\boldsymbol{\zeta}$ será dada por:

$$\mathbf{V} = \sigma^2(\mathbf{ZGZ}' + \mathbf{R})$$

Considerando os resíduos condicionais e marginais não estudentizados, as suas respectivas variâncias serão dadas por:

$$\begin{aligned}var(\mathbf{r}_c) &= \sigma^2 \mathbf{RQR} \\ var(\mathbf{r}_m) &= \sigma^2[\mathbf{ZGZ}' + \mathbf{R} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{MX})^{-1}\mathbf{X}']\end{aligned}$$

Para \mathbf{d} sua variância é dada por:

$$var(\mathbf{d}) = \sigma^2 \mathbf{ZGZ}'\mathbf{QZGZ}'$$

Assim,

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_c - \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{RQZb} + (\mathbf{RQ} - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon} \\ \mathbf{d} - \mathbf{Zb} &= (\mathbf{ZGZ}'\mathbf{Q} - \mathbf{I})\mathbf{Zb} + \mathbf{ZGZ}'\mathbf{Q}\boldsymbol{\varepsilon}\end{aligned}$$

Portanto percebe-se que \mathbf{r}_c está confundido com \mathbf{b} , assim como \mathbf{d} está confundido com $\boldsymbol{\varepsilon}$. Para a correção deste problema, Hilden-Minton (1995) definiu a fração de confundimento, CF_{r_c} , que é dada por:

$$CF_{r_c} = \frac{\mathbf{u}_i' \text{Var}(\mathbf{RQZb}) \mathbf{u}_i}{\mathbf{u}_i' \text{Var}(\mathbf{r}_c) \mathbf{u}_i} = \frac{\mathbf{u}_i' \mathbf{RQZGZ}' \mathbf{QRu}_i}{\mathbf{u}_i' \mathbf{RQRu}_i} = 1 - \frac{\mathbf{u}_i' \mathbf{RQRQRu}_i}{\mathbf{u}_i' \mathbf{RQRu}_i}$$

em que \mathbf{u}_i se refere a i -ésima coluna de uma determinada matriz identidade.

Partindo do objetivo que é obter uma transformação linear dos resíduos condicionais, assume-se que

$$\lambda_i = \frac{\mathbf{l}_i' \mathbf{RQRQRl}_i}{\mathbf{l}_i' \mathbf{RQRl}_i}$$

Desde que λ_i assumo seu valor máximo. Contudo um problema aparece nesta etapa em relação aos autovalores de matrizes positivas semidefinidas, em que o vetor de transformação linear estará condicionado ao fato de que λ_i tenha valores entre o intervalo 0 e 1. Para isso é necessário que:

$$\mathbf{l}_i' \mathbf{RQRl}_i > 0$$

Dada a restrição da expressão acima e \mathbf{R} como de posto completo, é necessário que a matriz \mathbf{Q} seja não nulo a fim de garantir tal restrição. Para isto deve-se tomar as propriedades dos autovalores e autovetores propostas por Hilden-Mintos (1995) para \mathbf{RQ} , bem como a decomposição em valores singulares apresentada por Harville (1997).

$$\mathbf{R}^{1/2} \mathbf{QR}^{1/2} = \mathbf{K}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{K}' \text{ e } \mathbf{K}'\mathbf{K} = \mathbf{I}$$

em que \mathbf{K} é uma matriz de ordem $n \times (n - p_X)$, $\mathbf{\Lambda}$ é uma matriz quadrada de ordem $(n - p_X)$, $(n - p_X)$ é o número de autovalores não nulos de $\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{1/2}$ e p_X é o posto da matriz \mathbf{X} do modelo não linear misto.

Seja,

$$\mathbf{l}_i = \mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{K}\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\mathbf{v}_i$$

Substituindo em λ_i tem-se:

$$\lambda_i = \frac{\mathbf{v}'_i\mathbf{\Lambda}\mathbf{v}_i}{\mathbf{v}'_i\mathbf{v}_i}$$

em que \mathbf{v}_i é a i -ésima coluna de uma matriz identidade de ordem $(n - p_X)$.

Portanto $\lambda_{n-p_X} \leq \lambda_i \leq \lambda_1$, com $\lambda_{n-p_X} \leq \dots \leq \lambda_1 \leq 1$, representando os valores ordenados de $\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{1/2}$.

Substituindo λ_i em \mathbf{l}_i , o último ficará como:

$$\mathbf{l}_i = \lambda_i^{-1/2}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{K}_i \quad i = 1, \dots, n - p_X,$$

em que \mathbf{K}_i é a i -ésima coluna de \mathbf{K} .

Então,

$$\begin{aligned} \mathbf{l}'_i\mathbf{r}_c &= (\lambda_i^{-1/2}\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{K}_i)'\mathbf{R}\mathbf{Q}\mathbf{y} \\ &= \lambda_i^{-1/2}\mathbf{K}'_i\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{Q}\mathbf{y} \end{aligned}$$

Com,

$$\text{Cov}(\mathbf{l}'_i\mathbf{r}_c, \mathbf{l}'_j\mathbf{r}_c) = \sigma^2\mathbf{l}'_i\mathbf{R}\mathbf{Q}\mathbf{r}\mathbf{l}_j$$

sendo σ^2 se $i = j$ e 0 se $i \neq j$.

Logo, os resíduos não correlacionados contendo a fração de confundimento mínimo, $1 - \lambda_i$, apresentam a seguinte expressão:

$$\frac{\mathbf{l}'_i\mathbf{r}_c}{\sigma}, i = 1, 2, \dots, n$$

ANEXO B. Matriz de covariâncias e correlação marginal V para distribuição marginal do modelo linear misto bivariado

36974	0,0226	0,0005	0,0180	0,0155	0,0131	0,0109	0,0089	0,0008	0,0020	0,0020	0,0021	0,0020	0,0017	0,0009	-0,0002
21,0085	23,2837	0,0239	0,8448	0,7768	0,7029	0,6327	0,5535	0,0964	0,2354	0,2358	0,2622	0,2786	0,2879	0,2501	0,1996
20,1992	22,1799	36976	0,0243	0,0234	0,0221	0,0207	0,0188	0,0039	0,0097	0,0098	0,0110	0,0119	0,0127	0,0116	0,0102
19,3899	22,7626	26,1353	31,1835	0,9453	0,9201	0,8837	0,8194	0,1904	0,4676	0,4733	0,5350	0,5832	0,6273	0,5835	0,5319
18,5806	23,3473	28,1140	32,8806	38,8012	0,9650	0,9432	0,8874	0,2187	0,5377	0,5451	0,6179	0,6763	0,7321	0,6877	0,6380
17,7714	23,9320	30,0927	36,2533	42,4140	49,7824	0,9661	0,9184	0,2355	0,792	0,5879	0,6675	0,7326	0,7961	0,7525	0,7055
16,9621	24,5167	32,0714	39,6260	47,1807	54,7353	64,4830	0,9255	0,2442	0,6008	0,6103	0,6938	0,7628	0,8311	0,7889	0,7448
16,1528	25,1014	34,05	42,9987	51,9473	60,8960	69,8446	88,3168	0,2405	0,5919	0,6016	0,6845	0,7535	0,8227	0,7832	0,7452
7,5106	21,0304	34,5502	48,0700	61,5898	75,1095	88,6293	102,15	2043,20	0,1864	0,1889	0,2139	0,2338	0,2525	0,2364	0,2180
28,5557	81,4639	134,37	187,28	240,19	293,10	346,00	398,91	604,40	5143,46	0,4645	0,5262	0,5757	0,6226	0,5840	0,5405
58,6747	273,33	287,98	402,63	517,28	631,94	746,59	861,24	1300,86	5074,28	23207	0,5343	0,5855	0,6346	0,5975	0,5565
90,4334	283,33	476,23	669,13	862,03	1054,92	1247,82	1440,72	2165,70	8452,70	18231	50166	0,6667	0,7253	0,6868	0,6459
113,42	392,87	572,32	951,77	1231,22	1510,66	1790,11	2069,56	3088,72	12066	26064	43638	85406	0,8038	0,7675	0,7318
114,26	478,03	841,79	1025,56	1569,32	1933,09	2296,85	2660,62	3928,23	15366	33271	55907	80843	118431	0,8564	0,8327
76,6006	509,57	942,54	1375,50	1808,47	2241,44	2674,41	3107,37	4511,06	17683	38430	64944	94693	124423	178232	0,8423
18,8975	452,94	924,77	1396,61	1868,44	2340,27	2812,11	3283,94	4632,54	18225	39862	68018	100557	134732	167188	221056

ANEXO C. Principais comandos em R para a análise da variável resposta peso, sob abordagem univariada

```

# Importando o conjunto de dados
dados <- read.csv2("peso.csv", header = TRUE, sep = ";", dec = ",")

# Pacotes necessários
library(nlme)
library(longCatEDA)
library(HLMdiag)
library(car)

# Matriz de variâncias e covariâncias para cada dieta
attach(dados)

## Dieta contendo 22% de FDN
s1.1 <- c(resp[semana == "1" & trat == "22FDN"])
s2.1 <- c(resp[semana == "2" & trat == "22FDN"])
s3.1 <- c(resp[semana == "3" & trat == "22FDN"])
s4.1 <- c(resp[semana == "4" & trat == "22FDN"])
s5.1 <- c(resp[semana == "5" & trat == "22FDN"])
s6.1 <- c(resp[semana == "6" & trat == "22FDN"])
s7.1 <- c(resp[semana == "7" & trat == "22FDN"])
s8.1 <- c(resp[semana == "8" & trat == "22FDN"])
s.1 <- cbind(s1.1, s2.1, s3.1, s4.1, s5.1, s6.1, s7.1, s8.1)
cov(s.1) # matriz de variâncias e covariâncias
cor(s.1) # correlação amostral entre as observações

## Dieta contendo 22% de FDN com adição de feno
s1.2 <- c(resp[semana == "1" & trat == "22FDNFENO"])
s2.2 <- c(resp[semana == "2" & trat == "22FDNFENO"])
s3.2 <- c(resp[semana == "3" & trat == "22FDNFENO"])
s4.2 <- c(resp[semana == "4" & trat == "22FDNFENO"])
s5.2 <- c(resp[semana == "5" & trat == "22FDNFENO"])
s6.2 <- c(resp[semana == "6" & trat == "22FDNFENO"])
s7.2 <- c(resp[semana == "7" & trat == "22FDNFENO"])
s8.2 <- c(resp[semana == "8" & trat == "22FDNFENO"])
s.2 <- cbind(s1.2, s2.2, s3.2, s4.2, s5.2, s6.2, s7.2, s8.2)
cov(s.2)
cor(s.2)

## Dieta contendo 31% de FDN
s1.3 <- c(resp[semana == "1" & trat == "31FDN"])
s2.3 <- c(resp[semana == "2" & trat == "31FDN"])
s3.3 <- c(resp[semana == "3" & trat == "31FDN"])
s4.3 <- c(resp[semana == "4" & trat == "31FDN"])
s5.3 <- c(resp[semana == "5" & trat == "31FDN"])
s6.3 <- c(resp[semana == "6" & trat == "31FDN"])
s7.3 <- c(resp[semana == "7" & trat == "31FDN"])
s8.3 <- c(resp[semana == "8" & trat == "31FDN"])
s.3 <- cbind(s1.3, s2.3, s3.3, s4.3, s5.3, s6.3, s7.3, s8.3)
cov(s.3)
cor(s.3)

# ANÁLISE DOS DADOS

## Definindo as variáveis de interesse
Tratamento <- as.factor(dados$trat)
Semana <- as.numeric(dados$semana)
Peso <- dados$resp
Animal <- as.factor(dados$animal)

```

```

dados$unidade <- as.factor(Animal)
PN <- dados$pn

# Estrutura de dados utilizada
peso1 <- groupedData(Peso ~ Semana | unidade, data = dados, order.groups=F)

# Gráficos de perfis individuais

## Dieta contendo 22% de FDN
grupo1 <- subset(dados, trat == "22FDN", c(semana, resp))
s1.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 1, resp)
s2.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 2, resp)
s3.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 3, resp)
s4.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 4, resp)
s5.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 5, resp)
s6.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 6, resp)
s7.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 7, resp)
s8.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 8, resp)
sem <- seq(1, 8, 1)
dados.grupo1 <- cbind(s1.grupo1, s2.grupo1, s3.grupo1, s4.grupo1, s5.grupo1,
                      s6.grupo1, s7.grupo1, s8.grupo1)
longContPlot(dados.grupo1, sem, main = "(a)", font.main = 1, cex.main=1,
              ylab = "Peso (kg)", xlab = "Semana", xlim = c(1,8),
              ylim = c(20,80), axes = 'F')
axis(1, c(1,2,3,4,5,6,7,8))
axis(2, seq(20, 80, 10))

## Dieta contendo 31% de FDN
grupo2 <- subset(dados, trat == "31FDN", c(semana, resp))
s1.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 1, resp)
s2.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 2, resp)
s3.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 3, resp)
s4.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 4, resp)
s5.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 5, resp)
s6.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 6, resp)
s7.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 7, resp)
s8.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 8, resp)
dados.grupo2 <- cbind(s1.grupo2, s2.grupo2, s3.grupo2, s4.grupo2, s5.grupo2,
                      s6.grupo2, s7.grupo2, s8.grupo2)
longContPlot(dados.grupo2, sem, main = "(c)", font.main = 1, cex.main=1,
              ylab = "Peso (kg)", xlab = "Semana", xlim = c(1,8),
              ylim = c(20,80), axes = 'F')
axis(1, c(1,2,3,4,5,6,7,8))
axis(2, seq(20, 80, 10))

## Dieta contendo 22% de FDN com adição de feno
grupo3 <- subset(dados, trat == "22FDNFENO", c(semana, resp))
s1.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 1, resp)
s2.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 2, resp)
s3.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 3, resp)
s4.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 4, resp)
s5.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 5, resp)
s6.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 6, resp)
s7.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 7, resp)
s8.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 8, resp)
dados.grupo3 <- cbind(s1.grupo3, s2.grupo3, s3.grupo3, s4.grupo3, s5.grupo3,
                      s6.grupo3, s7.grupo3, s8.grupo3)
longContPlot(dados.grupo3, sem, main = "(b)", font.main = 1, cex.main=1,
              ylab = "Peso (kg)", xlab = "Semana", xlim = sem,
              ylim = c(20,80), axes = 'F')
axis(1, c(1,2,3,4,5,6,7,8))
axis(2, seq(20, 80, 10))

```

```

# Modelos ajustados

M1 <- lme(Peso ~ Tratamento + Semana + I(Semana^2) + Tratamento:Semana + Tratamento:I(Semana^2),
  random = ~Semana + I(Semana^2), data = peso1,
  control = lmeControl(opt = "optim"))

M2 <- lme(Peso ~ Tratamento + Semana + I(Semana^2) + Tratamento:Semana + Tratamento:I(Semana^2),
  random = ~I(Semana^2), data = peso1,
  control = lmeControl(opt = "optim"))

M3 <- lme(Peso ~ Tratamento + Semana + I(Semana^2) + Tratamento:Semana + Tratamento:I(Semana^2),
  random = ~Semana, data = peso1,
  control = lmeControl(opt = "optim"))

M4 <- lme(Peso ~ Tratamento + Semana + I(Semana^2) + Tratamento:Semana + Tratamento:I(Semana^2),
  random = ~1 | unidade, data = peso1)

M5 <- lme(Peso ~ Tratamento + Semana + I(Semana^2) + Tratamento:Semana + Tratamento:I(Semana^2),
  random = ~ - 1 + PN + PN:Semana + PN:I(Semana^2), data = peso1,
  control = lmeControl(opt = "optim"))

M6 <- lme(Peso ~ Tratamento + Semana + I(Semana^2) + Tratamento:Semana + Tratamento:I(Semana^2),
  random = ~ - 1 + PN + PN:I(Semana^2), data = peso1,
  control = lmeControl(opt = "optim"))

M7 <- lme(Peso ~ Tratamento + Semana + I(Semana^2) + Tratamento:Semana + Tratamento:I(Semana^2),
  random = ~ - 1 + PN + PN:Semana, data = peso1,
  control = lmeControl(opt = "optim"))

M8 <- lme(Peso ~ Tratamento + Semana + I(Semana^2) + Tratamento:Semana + Tratamento:I(Semana^2),
  random = ~ - 1 + PN, data = peso1)

### Teste para modelos encaixados

anova(M1, M2, M4)
anova(M1, M3, M4)
anova(M5, M6, M8)
anova(M5, M7, M8)

# MATRIZ G

## Diagonal
M1.1 <- update(m4, random = pdDiag(~Semana + I(Semana^2)))

## Simetria composta
M1.2 <- update(m4, random = pdCompSymm(~Semana + I(Semana^2)))

## Multipla identidade
M1.3 <- update(m4, random = pdIdent(~Semana + I(Semana^2)))

# MATRIZ R

## Modelo considerando somente diferenças significativas entre os níveis de semana.
M1.4 <- update(M1, weights = varIdent(form = ~1 | Semana))

## Matriz autoregressiva com heterogeneidade de variâncias
M1.5 <- update(M1.4, correlation = corAR1(form = ~Semana | unidade))

## Matriz de simetria composta
M1.6 <- update(M1.4, correlation = corCompSymm(form = ~Semana | unidade))
## Verificando quais fatores de efeitos fixos permanecerão no modelo

```

```

anova(M1.5, test = "Wald")

## Ajuste de um novo modelo com os efeitos selecionados
M1.7 <- update(M1.5, fixed = Peso ~ Semana + I(Semana^2))

## Extrair os coeficientes dos efeitos fixos
bet <- fixef(M1.7)
bet1 <- bet[1] # Intercepto
bet2 <- bet[2] # Semana
bet3 <- bet[3] # Semana^2

## Curvas individuais ajustadas
bi <- cbind(ranef(M1.7), seq(1,40)) # Extrair os vetores de efeito aleatório
b1 <- matrix(c(bi$`Intercept`), byrow = T)
b2 <- matrix(c(bi$Semana), byrow = T)
b3 <- matrix(c(bi$I(Semana^2)), byrow = T)
plot(c(1,8), c(20, 80), type = "n", ylab = "Peso (kg)",
      xlab = "Semana", main = "a)", font.main = 1, cex.main=1, axes = 'F')
axis(1, c(1,2,3,4,5,6,7,8))
axis(2, seq(20, 80, 20))
x <- seq(1, 8, length.out = 1000)
for(i in 1:40)
  lines(x, (bet1+b1[i]) + (bet2 + b2[i])*x + (bet3+b3[i])*I(x^2), col = "orange", lwd = 2)
lines(x, bet1 + bet2 + bet3*I(x^2), col = 1, lwd = 3, lty = 2)
points(Semana[Semana == 1], Peso[Semana == 1], pch = c(rep("x", length(Peso[Semana == 1]))), col = c(rep("black",
length(Peso[Semana == 1])))) ## Seguir o mesmo modelo para plotar os valores observados de cada semana
legend(1, 75, legend = c("Curvas Individuais", "Curva Média Ajustada", "Valores Observados"),
      col = c("orange", 1, 1), lty = c(1, 2, 0), pch = c("x", "", "*"), lwd = c(2, 3, 0), cex = 0.8, bty = 'n')

## Gráfico comparando os perfis médios com a curva ajustada
interaction.plot(dados$semana, dados$trat, dados$resp, legend = FALSE, trace.label = "",
  lty = c(1,2,3),
  col = c(1,1,1),
  lwd = c(2,2,2),
  xlab="Semana",
  ylab = "Peso (kg)",
  ylim = c(35,60),
  main = "b)", font.main = 1, cex.main=1, axes = 'F')
axis(1, c(1,2,3,4,5,6,7,8))
axis(2, seq(35, 60, 5))
lines(x, bet1 + bet2*x + bet3*I(x^2), col = "red", lwd = 2, lty = 2)
legend(1, 57, legend = c("Perfil Médio = 22% de FDN",
  "Perfil Médio = 22% de FDN com adição de feno",
  "Perfil Médio = 31% de FDN",
  "Curva Média Ajustada"),
  col = c(1, 1, 1, "red"), lty = c(1, 2, 3, 2), lwd = c(2, 2, 2, 2), cex = 0.8, bty = 'n')

## Diagnóstico do modelo M1.7

## Valores preditos
pred <- predict(M1.7)

# Valores preditos x Valores observados
plot(pred, dados$resp, main = "", xlab = "Valores Preditos",
  ylab = "Peso (kg)")
abline(0,1)

## Resíduos de confundimento mínimo: a programação em R para a retirada deste tipo de resíduo pode ser encontrada
em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/lmmdiagnosics.zip>

resid1 <- residdiag.nlme(M1.7,limit=2,plotid=6)
resid.conf <- as.vector(resid1$least.confounded.residuals)

```

```

## Resíduos marginais estudentizados
resid.marg <- resid_marginal(M1.7, type = c("studentized"))

## Resíduos condicionais estudentizados
resid.cond <- resid_conditional(M1.7, type = c("studentized"))

## Resíduos x Valores preditos
plot(pred, resid.conf, main = "", xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos de Confundimento Mínimo", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(pred, resid.marg, main = "", xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Marginais Estudentizados", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(pred, resid.cond, main = "", xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Condicionais Estudentizados", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

## Normalidade dos resíduos
par(mfrow = c(1,3))
qqPlot(resid.conf, col = "black", ylab = "Resíduos de Confundimento Mínimo",
       xlab = "",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

qqPlot(resid.marg, col = "black", ylab = "Resíduos Marginais Estudentizados",
       xlab = "",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

qqPlot(resid.cond, col = "black", ylab = "Resíduos Condicionais Estudentizados",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

## Histogramas
hist(resid.conf, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos de Confundimento Mínimo", ylab = "Densidade",
     cex.lab = 1.5)
lines(density(resid.conf), adjust=2, lty=1, col="red", lwd=2)
shapiro.test(resid.conf)

hist(resid.marg, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos Marginais Estudentizados", ylab = "Densidade",
     cex.lab = 1.5)
lines(density(resid.marg), adjust=2, lty=1, col="red", lwd=2)
shapiro.test(resid.marg)

hist(resid.cond, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos Condicionais Estudentizados", ylab = "Densidade",
     cex.lab = 1.5)
lines(density(resid.cond), adjust=2, lty=1, col="red", lwd=2)
shapiro.test(resid.cond)

# Verificando a normalidade dos efeitos aleatórios

## Intercepto
qqPlot(b1, col = "black", ylab = "Resíduos",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE)
shapiro.test(b1)

## Semana
qqPlot(b2, col = "black", ylab = "Resíduos",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE)

```

```

shapiro.test(b2)

## Semana2
qqPlot(b3, col = "black", ylab = "Resíduos",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE)
shapiro.test(b3)

## Resíduos x Índices
par(mfrow = c(1,3))
plot(resid.conf, ylim = c(-4, 4),
     xlab = "Índices", ylab = "Resíduos de Confundimento Mínimo", cex.lab = 1.5)
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(resid.marg, ylim = c(-4, 4),
     xlab = "Índices", ylab = "Resíduos Marginais Estudentizados", cex.lab = 1.5)
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(resid.cond, ylim = c(-4, 4),
     xlab = "Índices", ylab = "Resíduos Condicionais Estudentizados", cex.lab = 1.5)
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

## Resíduos x Valores preditos
plot(pred, resid.conf, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos de Confundimento Mínimo", ylim = c(-4,4), cex.lab = 1.5)
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(pred, resid.marg, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Marginais Estudentizados", ylim = c(-4,4), cex.lab = 1.5)
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(pred, resid.cond, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Condicionais Estudentizados", ylim = c(-4,4), cex.lab = 1.5)
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

## Extrair as matrizes de covariâncias G e R

## Matriz G
getVarCov(M1.7, type = "random.effects")

## Matriz R
getVarCov(M1.7, type = "conditional")

```

ANEXO D. Principais comandos em R para a análise da variável resposta consumo médio de sólidos totais, sob abordagem univariada

```

# Importando o conjunto de dados
dados <- read.csv2("consumo.csv", header = TRUE, sep = ";", dec = ",")

# Pacotes necessários
library(nlme)
library(longCatEDA)
library(HLMdiag)
library(car)

# Matriz de variâncias e covariâncias
attach(dados)

## Dieta contendo 22% de FDN
s1.1 <- c(resp[semana == "1" & trat == "22FDN"])
s2.1 <- c(resp[semana == "2" & trat == "22FDN"])
s3.1 <- c(resp[semana == "3" & trat == "22FDN"])
s4.1 <- c(resp[semana == "4" & trat == "22FDN"])
s5.1 <- c(resp[semana == "5" & trat == "22FDN"])
s6.1 <- c(resp[semana == "6" & trat == "22FDN"])
s7.1 <- c(resp[semana == "7" & trat == "22FDN"])
s8.1 <- c(resp[semana == "8" & trat == "22FDN"])
s.1 <- cbind(s1.1, s2.1, s3.1, s4.1, s5.1, s6.1, s7.1, s8.1)
cov(s.1)
cor(s.1)

## Dieta contendo 22% de FDN com adição de feno
s1.2 <- c(resp[semana == "1" & trat == "22FDNFENO"])
s2.2 <- c(resp[semana == "2" & trat == "22FDNFENO"])
s3.2 <- c(resp[semana == "3" & trat == "22FDNFENO"])
s4.2 <- c(resp[semana == "4" & trat == "22FDNFENO"])
s5.2 <- c(resp[semana == "5" & trat == "22FDNFENO"])
s6.2 <- c(resp[semana == "6" & trat == "22FDNFENO"])
s7.2 <- c(resp[semana == "7" & trat == "22FDNFENO"])
s8.2 <- c(resp[semana == "8" & trat == "22FDNFENO"])
s.2 <- cbind(s1.2, s2.2, s3.2, s4.2, s5.2, s6.2, s7.2, s8.2)
cov(s.2)
cor(s.2)

## Dieta contendo 31% de FDN
s1.3 <- c(resp[semana == "1" & trat == "31FDN"])
s2.3 <- c(resp[semana == "2" & trat == "31FDN"])
s3.3 <- c(resp[semana == "3" & trat == "31FDN"])
s4.3 <- c(resp[semana == "4" & trat == "31FDN"])
s5.3 <- c(resp[semana == "5" & trat == "31FDN"])
s6.3 <- c(resp[semana == "6" & trat == "31FDN"])
s7.3 <- c(resp[semana == "7" & trat == "31FDN"])
s8.3 <- c(resp[semana == "8" & trat == "31FDN"])
s.3 <- cbind(s1.3, s2.3, s3.3, s4.3, s5.3, s6.3, s7.3, s8.3)
cov(s.3)
cor(s.3)

detach(dados)

```


ANÁLISE DOS DADOS

```
## Definindo as variáveis de interesse
```

```
Tratamento <- as.factor(dados$trat)
Semana <- as.numeric(dados$semana)
Animal <- as.factor(dados$animal)
Consumo <- dados$resp
dados$unidade <- as.factor(Tratamento:Animal)
PN <- as.numeric(dados$pn)
```

```
## Estrutura de dados utilizada
```

```
cons <- groupedData(Consumo~Semana|unidade, data = dados, order.groups=F)
```

```
# Gráficos de perfis individuais
```

```
## Dieta contendo 22% de FDN
```

```
grupo1 <- subset(dados, trat == "22FDN", c(semana, resp))
s1.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 1, resp)
s2.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 2, resp)
s3.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 3, resp)
s4.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 4, resp)
s5.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 5, resp)
s6.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 6, resp)
s7.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 7, resp)
s8.grupo1 <- subset(grupo1, semana == 8, resp)
sem <- seq(1, 8, 1)
dados.grupo1 <- cbind(s1.grupo1, s2.grupo1, s3.grupo1, s4.grupo1, s5.grupo1,
                      s6.grupo1, s7.grupo1, s8.grupo1)
longContPlot(dados.grupo1, sem, main = "(a)", font.main = 1, cex.main=1.5,
             ylab = "Consumo (g)", xlab = "Semana", xlim = c(1,8),
             ylim = c(0,2000), axes = 'F', cex.lab = 1.5)
axis(1, c(1,2,3,4,5,6,7,8))
axis(2, seq(0, 2000, 400))
```

```
## Dieta contendo 31% de FDN
```

```
grupo2 <- subset(dados, trat == "31FDN", c(semana, resp))
s1.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 1, resp)
s2.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 2, resp)
s3.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 3, resp)
s4.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 4, resp)
s5.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 5, resp)
s6.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 6, resp)
s7.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 7, resp)
s8.grupo2 <- subset(grupo2, semana == 8, resp)
dados.grupo2 <- cbind(s1.grupo2, s2.grupo2, s3.grupo2, s4.grupo2, s5.grupo2,
                      s6.grupo2, s7.grupo2, s8.grupo2)
longContPlot(dados.grupo2, sem, main = "(c)", font.main = 1, cex.main=1.5,
             ylab = "Consumo (g)", xlab = "Semana", xlim = c(1,8),
             ylim = c(0,2000), axes = 'F', cex.lab = 1.5)
axis(1, c(1,2,3,4,5,6,7,8))
axis(2, seq(0, 2000, 400))
```

```
## Dieta contendo 22% de FDN com adição de feno
```

```
grupo3 <- subset(dados, trat == "22FDNFENO", c(semana, resp))
s1.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 1, resp)
s2.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 2, resp)
s3.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 3, resp)
s4.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 4, resp)
s5.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 5, resp)
s6.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 6, resp)
s7.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 7, resp)
s8.grupo3 <- subset(grupo3, semana == 8, resp)
```

```

dados.grupo3 <- cbind(s1.grupo3, s2.grupo3, s3.grupo3, s4.grupo3, s5.grupo3,
                      s6.grupo3, s7.grupo3, s8.grupo3)
longContPlot(dados.grupo3, sem, main = "(b)", font.main = 1, cex.main=1.5,
             ylab = "Consumo (g)", xlab = "Semana", xlim = sem,
             ylim = c(0,2000), axes = 'F', cex.lab = 1.5)
axis(1, c(1,2,3,4,5,6,7,8))
axis(2, seq(0, 2000, 400))

```

```
# Modelos ajustados
```

```
M1 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 + Semana +
I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M2 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 +
I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M3 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 + Semana +
I(Semana^3) + I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M4 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 + Semana +
I(Semana^2) + I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M5 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 + Semana +
I(Semana^2) + I(Semana^3), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M6 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 +
I(Semana^3) + I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M7 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 +
I(Semana^2) + I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M8 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 +
I(Semana^2) + I(Semana^3), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M9 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) + Tratamiento2:Semana
+ Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random = ~ - 1 + Semana +
I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M10 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) +
Tratamiento2:Semana + Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random
= ~ - 1 + Semana + I(Semana^3), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M11 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) +
Tratamiento2:Semana + Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random
= ~ - 1 + Semana + I(Semana^2), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M12 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) +
Tratamiento2:Semana + Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random
= ~ - 1 + I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```

```
M13 <- lme(Consumo ~ Tratamiento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) +
Tratamiento2:Semana + Tratamiento2:I(Semana^2) + Tratamiento2:I(Semana^3) + Tratamiento2:I(Semana^4), random
= ~ - 1 + I(Semana^3), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
```



```

M29 <- lme(Consumo ~ Tratamento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) +
Tratamento2:Semana + Tratamento2:I(Semana^2) + Tratamento2:I(Semana^3) + Tratamento2:I(Semana^4), random
= ~ - 1 + PN:I(Semana^2), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))
M30 <- lme(Consumo ~ Tratamento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) +
Tratamento2:Semana + Tratamento2:I(Semana^2) + Tratamento2:I(Semana^3) + Tratamento2:I(Semana^4), random
= ~ - 1 + PN:Semana , data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))

# MATRIZ G

## Diagonal
M7.1 <- update(M7, random = pdDiag(~ - 1 + I(Semana^2) + I(Semana^4)))

## Simetria composta
M7.2 <- update(M7, random = pdCompSymm(~ - 1 + I(Semana^2) + I(Semana^4)))

## Múltipla identidade
M7.3 <- update(M7, random = pdIdent~ - 1 + I(Semana^2) + I(Semana^4)))

# MATRIZ R

## Modelo considerando somente diferenças significativas entre os níveis de semana.
M7.4 <- update(m7,
              weights = varIdent(form = ~1 | Semana))

## Matriz autoregressiva com heterogeneidade de variâncias
M7.5 <- update(M7.4, correlation = corAR1(form = ~Semana | unidade))

## Matriz de simetria composta
M7.6 <- update(M7.4, correlation = corCompSymm(form = ~Semana | unidade))

## Verificando os fatores de efeito fixo a serem mantidos no modelo
anova(M7.5, test = "Wald")

## Ajustando um novo modelo com os fatores selecionados
M7.7 <- update(M7.5, fixed = Consumo ~ Semana + Tratamento2:I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4))

## Programação de gráficos idem àquela realizada para a análise univariada do peso ##

## Igualando curvas
dados$trat2[dados$trat == "22FDN"] <- 1
dados$trat2[dados$trat == "22FDNFENO"] <- 1
dados$trat2[dados$trat == "31FDN"] <- 2
Tratamento2 <- as.factor(dados$trat2)
dados$unid2 <- as.factor(Tratamento2:Animal)

## Nova estrutura de dados utilizada
cons2 <- groupedData(Consumo~Semana | unid2, data = dados, order.groups=F)

## Ajuste do modelo selecionado considerando a nova estrutura utilizada. M7.7.2 representa o modelo M7.7(2) dado
no trabalho.

M7.7.2 <- lme(Consumo ~ Tratamento2 + Semana + I(Semana^2) + I(Semana^3) + I(Semana^4) +
Tratamento2:Semana + Tratamento2:I(Semana^2) + Tratamento2:I(Semana^3) + Tratamento2:I(Semana^4), random
= ~ - 1 + I(Semana^2) + I(Semana^4), data = cons2, control = lmeControl(opt = "optim"))

## Ajuste de modelos com diferentes estruturas de covariâncias, programação para os gráficos de curvas individuais
e médias ajustadas e para o diagnóstico do modelo selecionado idem ao apresentado anteriormente para a variável
resposta peso ##

```

ANEXO E. Principais comandos em R para a análise bivariada de peso e consumo médio de sólidos totais

```

## Importando os conjuntos de dados
dados.peso <- read.csv2("peso.csv", header = TRUE, sep = ";", dec = ",")
dados.cons <- read.csv2("consumo.csv", header = TRUE, sep = ";", dec = ",")

## Criação de variáveis indicadoras para as respostas
Peso <- as.matrix(rep(c(1,0), each = 320), ncol = 1)
Consumo <- as.matrix(rep(c(0,1), each = 320), ncol = 1)

## Concatenando os dados de peso e consumo
dados.biv <- rbind(dados.peso, dados.cons)
dados.biv <- cbind(dados.biv, Peso, Consumo)

## Pacotes necessários
library(nlme)
library(car)
library(HLMdiag)
library(MVA)
library(mvnTest)

# ANÁLISE DOS DADOS

## Declarando as variáveis de interesse
Tratamento <- as.factor(dados.biv$trat)
Semana <- as.numeric(dados.biv$semana)
Variavel <- as.factor(dados.biv$var)
Animal <- as.factor(dados.biv$animal)
Resp <- dados.biv$resp
dados.biv$unidade <- as.factor(Tratamento:Variavel:Animal)
PN <- dados.biv$pn
Peso <- dados.biv$Peso
Consumo <- dados.biv$Consumo

## Estrutura de dados
resp1 <- groupedData(Resp ~ Semana | unidade, data = dados.biv, order.groups=F)

## Ajuste do modelo selecionado
M2 <- lme(Resp ~ - 1 +
  Peso:Tratamento +
  Peso:Semana +
  Peso:I(Semana^2) +
  Peso:Tratamento:Semana +
  Peso:Tratamento:I(Semana^2) +
  Consumo:Tratamento +
  Consumo:Semana +
  Consumo:I(Semana^2) +
  Consumo:I(Semana^3) +
  Consumo:I(Semana^4) +
  Consumo:Tratamento:Semana +
  Consumo:Tratamento:I(Semana^2) +
  Consumo:Tratamento:I(Semana^3) +
  Consumo:Tratamento:I(Semana^4),
  random = ~ - 1 + Peso + Peso:Semana + Consumo:I(Semana^2) + Consumo:I(Semana^4), data = resp1,
  control = lmeControl(opt = "optim"))

```

```
# MATRIZ G
```

```
## Diagonal
```

```
M2.1 <- update(M2, random = pdDiag(~ - 1 + Peso + Peso:Semana + Consumo:I(Semana^2) +
Consumo:I(Semana^4)))
```

```
## Simetria composta
```

```
M2.2 <- update(M2, random = pdCompSymm(~ - 1 + Peso + Peso:Semana + Consumo:I(Semana^2) +
Consumo:I(Semana^4)))
```

```
## Multipla identidade
```

```
M2.3 <- update(M2, random = pdIdent( ~ - 1 + Peso + Peso:Semana + Consumo:I(Semana^2) +
Consumo:I(Semana^4)))
```

```
# MATRIZ R
```

```
## Modelo considerando somente diferenças significativas entre os níveis de semana.
```

```
M2.4 <- update(M2, weights = varComb(varIdent(form = ~ 1 |Semana),
varIdent(form = ~ 1 |Variavel)))
```

```
## Matriz autoregressiva com heterogeneidade de variâncias
```

```
M2.5 <- update(M2.4, correlation = corAR1(form = ~ 1 | unidade))
```

```
## Matriz de simetria composta
```

```
m2.6 <- update(M2.4, correlation = corCompSymm(form = ~ 1 | unidade))
```

```
## Seleção dos efeitos fixos a serem mantidos no modelo
```

```
anova(M2.5, test = "Wald")
```

```
## Ajuste de um novo modelo considerando somente os efeitos fixos selecionados
```

```
M2.7 <- update(M2.5, fixed = Resp ~ - 1 +
Peso:Tratamento +
Peso:Semana +
Peso:I(Semana^2) +
Consumo:Tratamento +
Consumo:Semana +
Consumo:I(Semana^2) +
Consumo:I(Semana^4))
```

```
## Extração dos coeficientes dos parâmetros de efeito fixo
```

```
bet <- fixef(M2.7)
```

```
bet1 <- bet[1] # Efeito da dieta contendo 22% de FDN sobre o peso
```

```
bet2 <- bet[2] # Efeito da dieta contendo 22% de FDN com adição de feno sobre o peso
```

```
bet3 <- bet[3] # Efeito da dieta contendo 31% de FDN sobre o peso
```

```
bet4 <- bet[4] # Efeito linear de semana sobre o peso
```

```
bet5 <- bet[5] # Efeito quadrático de semana sobre o peso
```

```
bet6 <- bet[6] # Efeito da dieta contendo 22% de FDN sobre o consumo
```

```
bet7 <- bet[7] # Efeito da dieta contendo 22% de FDN com adição de feno sobre o consumo
```

```
bet8 <- bet[8] # Efeito da dieta contendo 31% de FDN sobre o consumo
```

```
bet9 <- bet[9] # Efeito linear de semana sobre o consumo
```

```
bet10 <- bet[10] # Efeito quadrático de semana sobre o consumo
```

```
bet11 <- bet[11] # Efeito de quarto grau de semana sobre o consumo
```

```
## Programação para a construção de gráficos de curvas individuais e média ajustadas e igualdade de tratamentos
idem a análise univariada. Deve-se estar atento em separar os parâmetros entre as variáveis respostas, ou seja, identificar
os parâmetros referente ao estudo do peso e os referentes ao estudo do consumo. ##
```

```
# Diagnóstico do modelo selecionado – aqui será usado como exemplo o modelo M2.7, considerando três curvas distintas entre as dietas
```

```
## Valores preditos x valores observados para o peso
pred <- predict(M2.7)
pred.peso <- pred[Variavel == "peso"]
plot(pred.peso, dados.peso$resp, xlab = "Valore Preditos",
      ylab = "Peso (kg)", main = "(a)", font.main = 1, cex.main=1)
abline(0, 1)
```

```
## Valores preditos x valores observados para o consumo
pred.cons <- pred[Variavel == "consumo"]
plot(pred.cons, dados.cons$resp, main = "(b)", font.main = 1, cex.main=1, xlab = "Valore Preditos",
      ylab = "Consumo (g)")
abline(0, 1)
```

```
# Extraindo os resíduos
```

```
## Resíduos de confundimento mínimo retirados para ambas as variáveis respostas
resid1 <- residdiag.nlme(M2.7, limit=2, plotid=6)
resid.conf <- as.vector(resid1$least.confounded.residuals)
```

```
## Resíduos de confundimento mínimo referentes ao consumo
res.cons.conf <- as.matrix(resid.conf1[Variavel == "consumo"], ncol = 1)
res.peso.conf <- as.matrix(resid.conf1[Variavel == "peso"], ncol = 1)
```

```
## Resíduos marginais estudentizados retirados para ambas as variáveis respostas
res.marg <- resid_marginal(M2.7, type = c("studentized"))
```

```
## Resíduos marginais estudentizados para o consumo e o peso
res.cons.marg <- as.matrix(res.marg[Variavel == "consumo"], ncol = 1)
res.peso.marg <- as.matrix(res.marg[Variavel == "peso"], ncol = 1)
```

```
## Resíduos condicionais estudentizados retirados para ambas as variáveis respostas
res.cond <- resid_conditional(m27.5a, type = c("studentized"))
```

```
## Resíduos condicionais estudentizados para o consumo e o peso
res.cons.cond <- as.matrix(res.cond[Variavel == "consumo"], ncol = 1)
res.peso.cond <- as.matrix(res.cond[Variavel == "peso"], ncol = 1)
```

```
#Boxplot Bivariado
```

```
## Criando uma matriz de duas colunas para os resíduos de confundimento mínimo: uma coluna com os resíduos referentes ao peso e outra coluna com os resíduos referentes ao consumo
RES.conf <- matrix(c(res.cons.conf, res.peso.conf), nrow = length(res.cons.conf), ncol = 2)
```

```
## Criando uma matriz de duas colunas para os resíduos marginais estudentizados: uma coluna com os resíduos referentes ao peso e outra coluna com os resíduos referentes ao consumo
RES.marg <- matrix(c(res.cons.marg, res.peso.marg), nrow = length(res.cons.marg), ncol = 2)
```

```
## Criando uma matriz de duas colunas para os resíduos condicionais estudentizados: uma coluna com os resíduos referentes ao peso e outra coluna com os resíduos referentes ao consumo
RES.cond <- matrix(c(res.cons.cond, res.peso.cond), nrow = length(res.cons.cond), ncol = 2)
```

```
## Boxplot bivariado para estudo dos resíduos de confundimento mínimo
bvbox(RES.conf, main = "", xlab = "Resíduos Conf. Mín. Consumo", ylab = "Resíduos Conf. Mín. Peso")
```

```
## Boxplot bivariado para estudo dos resíduos marginais estudentizados
bvbox(RES.marg, main = "", xlab = "Resíduos Marg. Estud. Consumo", ylab = "Resíduos Marg. Estud. Peso")
```

```
## Boxplot bivariado para estudo dos resíduos condicionais estudentizados
bvbox(RES.cond, main = "", xlab = "Resíduos Cond. Estud. Consumo", ylab = "Resíduos Cond. Estud. Consumo")
```

```

# Estudo da normalidade bivariada pelo teste de Henze-Zirklers

## Resíduos de confundimento mínimo
HZ.test(RES.conf, qqplot=TRUE)

## Resíduos marginais estudentizados
HZ.test(RES.marg, qqplot=TRUE)

## Resíduos condicionais estudentizados
HZ.test(RES.cond, qqplot=TRUE)

# Estudo da normalidade univariada para o peso, considerando cada tipo de resíduo

## Gráficos qqPlot
qqPlot(res.peso.conf, col = "black", ylab = "Resíduos Conf. Min.",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

qqPlot(res.peso.marg, col = "black", ylab = "Resíduos Marg. Estud.",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

qqPlot(res.peso.cond, col = "black", ylab = "Resíduos Cond. Estud.",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

## Histogramas de normalidade de resíduos para o peso e uso do teste de Shapiro-Wilk
hist(res.peso.conf, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos Conf. Min.", ylab = "Densidade")
lines(density(res.peso.conf, adjust=2), lty=1, col="red", lwd=1)
shapiro.test(res.peso.conf)

hist(res.peso.marg, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos Marg. Estud.", ylab = "Densidade")
lines(density(res.peso.marg, adjust=2), lty=1, col="red", lwd=1)
shapiro.test(res.peso.marg)

hist(res.peso.cond, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos Cond. Estud.", ylab = "Densidade")
lines(density(res.peso.cond, adjust=2), lty=1, col="red", lwd=1)
shapiro.test(res.peso.cond)

# Estudo da normalidade univariada para o consumo, considerando cada tipo de resíduo

## Gráficos qqPlot
qqPlot(res.cons.conf, col = "black", ylab = "Resíduos Conf. Min.",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

qqPlot(res.cons.marg, col = "black", ylab = "Resíduos Marg. Estud.",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

qqPlot(res.cons.cond, col = "black", ylab = "Resíduos Cond. Estud.",
       xlab = "Quantis Normais",
       grid = FALSE, col.lines = "red", id = FALSE, envelope=list(style="lines"))

## Histogramas de normalidade de resíduos para o consumo e uso do teste de Shapiro-Wilk
hist(res.cons.conf, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos Conf. Min.", ylab = "Densidade")
lines(density(res.cons.conf, adjust=2), lty=1, col="red", lwd=1)
shapiro.test(res.cons.conf)

hist(res.cons.marg, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos Marg. Estud.", ylab = "Densidade")

```



```

lines(density(res.cons.marg, adjust=2), lty=1, col="red", lwd=1)
shapiro.test(res.cons.marg)

hist(res.cons.cond, probability = TRUE, main = "", xlab = "Resíduos Cond. Estud.", ylab = "Densidade")
lines(density(res.cons.cond, adjust=2), lty=1, col="red", lwd=1)
shapiro.test(res.cons.cond)

### Gráfico de resíduos x índices para o peso
plot(res.peso.conf, ylim = c(-4, 4),
      xlab = "Índices", ylab = "Resíduos Conf. Min")
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(res.peso.marg, ylim = c(-4, 4),
      xlab = "Índices", ylab = "Resíduos Marg. Estud.")
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(res.peso.cond, ylim = c(-4, 4),
      xlab = "Índices", ylab = "Resíduos Cond. Estud.")
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

### Gráfico de resíduos x valores preditos para o peso
plot(pred.peso, res.peso.conf1, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Conf. Min.", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(pred.peso, res.peso.marg, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Marg. Estud.", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(pred.peso, res.peso.cond, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Cond. Estud.", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

### Gráfico de resíduos x índices para o consumo
par(mfrow = c(2,3))
plot(res.cons.conf, ylim = c(-4, 4),
      xlab = "Índices", ylab = "Resíduos Conf. Min")
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(res.cons.marg, ylim = c(-4, 4),
      xlab = "Índices", ylab = "Resíduos Marg. Estud.")
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(res.cons.cond, ylim = c(-4, 4),
      xlab = "Índices", ylab = "Resíduos Cond. Estud.")
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

### Gráfico de resíduos x valores preditos para o consumo
plot(pred.cons, res.cons.conf, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Conf. Min.", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(pred.cons, res.cons.marg, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Marg. Estud.", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

plot(pred.cons, res.cons.cond, xlab = "Valores Preditos", ylab = "Resíduos Cond. Estud.", ylim = c(-4,4))
abline(h = c(-3, 0, 3), lty = c(2, 1, 2), col = c("red", "red", "red"))

```

ANEXO F. Principal comando em SAS para a análise bivariada de peso e consumo médio de sólidos totais e a extração da matriz de covariâncias e correlação marginal V

```
proc mixed data= bivariada method=REML;
title 'Modelo 2.7 com dietas iguais. Matriz G Não Estruturada e Matriz R Autorregressiva de 1ª Ordem com Heterogeneidade de Variâncias';
class Variavel Animal Tempo;
model Resposta = Peso Peso*Semana Peso*Semana2 Consumo Consumo*Semana Consumo*Semana2 Consumo*Semana4 / solution ddfm=sat noint;
random Peso Peso*Semana Consumo*Semana2 Consumo*Semana4 / type= un subject=Animal g v solution;
repeated / type = AR(1) group = Variavel*Tempo sub=Animal R;
Run;
```