Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"

Comparando delineamentos: um estudo aplicado aos experimentos com nematoides

Bruno Koga

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

Piracicaba
2021

Bruno Koga
Bacharel em Matemática

Comparando delineamentos: um estudo aplicado aos experimentos com nematoides

versão revisada de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011

Orientadora:
Profa. Dra. **RENATA ALCARDE SERMARINI**

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

Piracicaba
2021

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

Koga, Bruno
Comparando delineamentos: um estudo aplicado aos experimentos com nematoides / Bruno Koga. – – versão revisada de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011. – – Piracicaba, 2021 .

60 p.

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

1. Nematoides 2. Delineamento ótimo 3. Modelos mistos 4. Delineamento em blocos casualizados . I. Título.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus pela a oportunidade, pois posso tudo nele. Sem Ele, não poderia estar conquistando mais uma vitória.

Agradeço a família pelo apoio.

A minha orientadora Profa. Dra. Renata Alcarde Sermarini, que antes mesmo do mestrado, sempre ajudou-me durante o breve período na graduação em Engenharia Agronômica, além de sua enorme generosidadde e paciência em estar sanando dúvidas, tanto com a pesquisa, quanto a mais variados assuntos. Esses anos sempre me lembrarei e serei grato por tudo.

Aos professores do Departamento de Ciências Exatas – LCE, em especial, a Prof Dr Roseli Aparecida Leandro, em que sempre esteve de portas abertas para tirar dúvidas sobre a sua disciplina, sempre com muita paciência e dedicação, dentro e fora da sala de aula. Agradeço também aos funcionários Solange Sabadin e a Luciane Brajão, por toda ajuda e informação, desde as mais pequenas e até as mais complicadas.

A pesquisa não poderia ser feita sem a ajuda também de Victor Hugo de Souza, que gentilmente nos ajudou com as dúvidas mais específicas sobre o assunto, e também a Tiarla Souto e Paulo Henrique Pissolito, que deu uma ajuda complementar e a sanar as dúvidas de última hora.

Não poderia deixar de agradecer a minha família que escolhi e que estiveram sempre comigo nos mais variados momentos, meus amigos. Eliane Silva, que desde nos tempos de cursinho pré-vestibular, sempre foi uma grande companheira, tanto de estudos, quanto a mais variados assuntos, e que sempre esteve de braços abertos para me ouvir, nos momentos em que mais precisei, além de mais diversos momentos de risadas, passeios e tudo mais.

A minha família da UNESP de Rio Preto, que apesar da distância, parece sempre estar perto de mim. Cinthia Queiroz e Vanessa Cesário, que desde quando começamos a graduação, foram pessoas indispensáveis nas horas de estudo, que mais riamos do que estudávamos na biblioteca, além dos momentos alegres e tristes, no qual cada um confortava os demais como podia. Com elas percebi o valor e o significado da palavra amizade, e que não há distância que nos separe, pois esteremos sempre juntos. Agradeço a Caroline Campos, que foi uma das grandes parcerias que fiz durante esse tempo, e que sempre será uma grande inspiração para mim.

A família de Piracicaba, que chegou devagar, mas que com o passar do tempo, foi ficando mais forte a nossa conexão. Adriene Alves, Brenda Sterdi e Samira Coba, obrigado pelos mais variados momentos, pelas muitas risadas, festas, nossos incontáveis momentos

juntos no Bar da Maria, além de estar presente nos meus mais difíceis momentos, sempre a postos em ajudar no que fosse necessário.

O meu agradecimento especial a Leonardo Granja, Laura Bellato, Letícia Magalhães e sua mãe, Luciana, e também ao Caio Sampronha, pelos momentos em que me acolheram quando eu precisei.

Nesse tempo de mestrado, não poderia de esquecer de agradecer a Suelen Gasparetto, que desde quando a conheci, soube que teria uma parceira para risadas, estudos, ajudas nos mais diversos momentos do mestrado, e claro, nos momentos em que precisavamos falar sobre assuntos de vida. Agradeço também a sua mãe Arlete, que sempre foi muito generosa. A Kamylla Rodrigues pelo o companheirismo e ajuda, em que aprendi muito durante esse tempo.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

SUMÁRIO

Resumo 7

Abstract 9

Lista de Figuras 10

Lista de Tabelas 11

1 Introdução 13

2 Revisão de Literatura 15

2.1 Análise 15

2.1.1 Descrição de Modelos Mistos 15

2.1.2 Estimação em Modelos Lineares Mistos 18

2.1.2.1 Método da Máxima Verossimilhança 18

2.1.2.2 Método da Máxima Verossimilhança Restrita 20

2.1.3 Estruturas para Matrizes de Covariâncias 21

2.1.4 Seleção de Modelos 24

2.1.4.1 Teste Assintótico de Razão de Verossimilhança 24

2.1.4.2 Critérios de Informação 25

2.1.5 Testes para Parâmetros de Efeitos Fixos 26

2.1.5.1 Teste de Wald 26

2.1.5.2 Teste Wald-F 26

2.1.5.3 Teste t 27

2.2 Delineamentos Experimentais 27

2.2.1 Delineamento Inteiramente Casualizado 27

2.2.2 Delineamento em Blocos Casualizados 28

2.2.3 Delineamentos Ótimos 29

2.2.3.1 Modelo para Obtenção do Delineamento Ótimo 29

2.2.3.2 Critérios de Otimalidade 30

2.2.3.3 Medidas de Comparação dos Delineamentos 32

3 Materiais e Métodos 33

3.1 Materiais 33

3.1.1 Dados Reais 33

3.1.2 Delineamento 34

3.2 Métodos 35

3.2.1 Análise dos Dados e Seleção dos Modelos 35

3.2.2 Comparando Delineamentos 36

3.2.3 Avaliando Outros Delineamentos 36

4 Resultados e Discussão 39
4.1 Dados Reais e Delineamentos 39
4.1.1 Comparando Delineamento 43
4.2 Delineamentos Obtidos 45
5 Conclusões 53
Referências 55
Apêndices 59

RESUMO

Comparando delineamentos: um estudo aplicado aos experimentos com nematoides

Nematoides são microorganismo vermiformes e não segmentados. Como forma de controle desses vermes, utilizam-se ensaios em campos experimentais e em casas de vegetação. Para os ensaios, além dos tratamentos em teste, usam-se uma testemunha pareada, ou seja, uma testemunha na parcela vizinha ao tratamento. Os tipos de delineamentos mais usuais variam entre inteiramente casualizados e em blocos casualizados, podendo apresentar também em esquema fatorial de tratamentos. Ainda, a utilização de modelos mistos permite uma possível correlação existente entre as observações. Dessa forma, são necessários delineamentos que apresentem a maior informação possível a respeito dos tratamentos. O presente trabalho avalia e compara os delineamentos, motivados pelos experimentos de presença de nematoides em diferentes culturas, em dois casos: o primeiro, através de um conjunto de dados reais de um experimento de cultura de soja, em casa de vegetação, instalada em delineamento inteiramente casualizado, compara esse delineamento com o C-ótimo, envolvendo erros correlacionados, e o segundo (i) casualizado em blocos (ii) com a testemunha disposta sistematicamente em parcelas em diagonais e (iii) espacialmente otimizados de acordo com diferentes valores para correlação espacial. Para comparação foram utilizados o traço da inversa da matriz de informação, a média da variância dos contrastes simples de médias de tratamentos e o determinante da matriz de informação. Para os casos avaliados, conclui-se que os delineamentos otimizados apresentaram os melhores resultados no primeiro caso, sendo 100% nos casos para as medidas A e C, e no segundo caso, delineamentos que consideram negativa a correlação residual entre colunas apresentam melhores resultados. Dessa forma, são necessários delineamentos que apresentem a maior informação possível a respeito dos tratamentos. A utilização de modelos mistos ajuda a modelar e estimar a correlação existente entre as observações, além de permitir inferências a respeito dos tratamentos. A partir dos resultados obtidos, conclui-se que os delineamentos otimizados apresentam melhores valores do critério estabelecido, porém quando estes assumem correlação negativa entre colunas, sendo o caso em que repetições do mesmo tratamento são alocadas às parcelas próximas, o que pode não ser interessante, do ponto de vista prático.

Palavras-chave: Nematoides, Delineamento ótimo, Modelos mistos, Delineamento em blocos casualizados

ABSTRACT

Comparing designs: a study applied to experiments with nematodes

Nematodes are vermiform and non-segmented microorganisms. As a way to control these worms, tests in experimental fields and in greenhouses are used. For the tests, in addition to the treatments under test, a paired control is used, that is, a control in the plot next to the treatment. The most common types of designs vary between completely randomized and randomized blocks, and may also present a factorial scheme of treatments. Furthermore, the use of mixed models allows for a possible correlation between observations. Thus, designs that present as much information as possible about the treatments are needed. The present work evaluates and compares the designs, motivated by the experiments of the presence of nematodes in different cultures, in two cases: the first, through a set of real data from a soybean crop experiment, in a greenhouse, installed in a design. completely randomized, compares this design with the C-optimal, involving correlated errors, and the second (i) randomized in blocks (ii) with the control systematically arranged in diagonal plots and (iii) spatially optimized according to different values for correlation space. For comparison, the trace of the inverse of the information matrix, the mean of the variance of the simple contrasts of treatment means and the determinant of the information matrix were used. For the cases evaluated, it is concluded that the optimized designs showed the best results in the first case, with 100% in the cases for measures A and C, and in the second case, designs that consider negative the residual correlation between columns present better results . Thus, designs that present as much information as possible about the treatments are needed. The use of mixed models helps to model and estimate the correlation between observations, in addition to allowing inferences about treatments. From the results obtained, it is concluded that the optimized designs have better values of the established criterion, but when these assume a negative correlation between columns, in the case where repetitions of the same treatment are allocated to the next parcels, which may not be interesting , from a practical point of view.

Keywords: Nematodes, Optimal design, Mixed models, Randomized complete block design

LISTA DE FIGURAS

3.1 Gráfico de pontos para a variável SPAD1 em função dos tratamentos. . . . 34
3.2 Croqui de delineamento em blocos casualizados, com 6 tratamentos e testemunha, distribuídos em 6 blocos, com os blocos intercalados entre tratamentos e testemunha. 35

4.1 Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados versus* tratamentos por tratamentos considerando o primeiro modelo ajustado, em que $\mathbf{R} = \sigma^2\mathbf{I}_{36}$. 39
4.2 Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados* considerando o primeiro modelo ajustado, em que $\mathbf{R} = \sigma^2\mathbf{I}_{36}$. 39
4.3 Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados* por tratamento, considerando o segundo modelo ajustado, em que $\mathbf{R} = \mathrm{UN}(1) \otimes \mathbf{I}_6$. 40
4.4 Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados* vesus os valores preditos, considerando o modelo ajustado. 40
4.5 Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados versus* tratamento, considerando o terceiro modelo ajustado, em que $\mathbf{R}$ apresenta dois parâmetros. 42
4.6 Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados* em função dos valores preditos, considerando o terceiro modelo ajustado, em que $\mathbf{R}$ apresenta dois parâmetros. 42
4.7 Croqui de delineamento apresentando 6 tratamentos, em que os tratamentos e a testemunha são dispostos nas diagonais. 46
4.8 Croquis de delineamentos otimizados para o valor de correlação espacial $\rho_L = 0{,}2$ e valor de correlação espacial ρ_C indicado, com estes apresentando 6 tratamentos cada. 47
4.9 Croquis de delineamentos otimizados para o valor de correlação espacial $\rho_L = 0{,}4$ e valor de correlação espacial ρ_C indicado, com estes apresentando 6 tratamentos cada. 48

LISTA DE TABELAS

3.1 Valores para os parâmetros de correlação espacial entre linhas e colunas, para cada delineamento otimizado. 37

4.1 Estimativas dos componentes de variância do modelo em que $\mathbf{R}$ é uma matriz UN(1)$\otimes\mathbf{I}_6$. 41

4.2 Estimativas dos componentes de variância do modelo mais parcimonioso. . 42

4.3 Resultados para os testes das razões de verossimilhanças. 43

4.4 Teste Wald-F para o modelo selecionado que apresenta efeitos fixos de tratamentos e heterogeneidade de variâncias residuais, assumindo-se dois parâmetros. 43

4.5 Médias para as medidas C, A e D obtidas considerando-se os 1000 DIC e os 1000 delineamentos C-ótimos. 45

4.6 Resultado dos valores médios para o critério de otimização C-ótimo em relação a todos os delineamentos apresentados, com os respectivos valores de correlação espacial entre linhas e colunas, e a variância *nugget*, indicado por γ_n. 50

1 INTRODUÇÃO

Nematoides são microorganismos vermiformes e não segmentados, de coloração transparente e não possuem órgãos de locomoção, chegando a medir cerca de 0,3 milímetros. Possuem o corpo em formato cilíndrico, geralmente alongado e com as extremidades afiladas. Os nematoides que atacam as plantas são chamados de fitonematoides (Ritzinger, 2013).

As formas de dispersão dos nematoides em áreas de cultivo, apesar de serem bastante limitadas, são altamente dependentes do homem, pois é o principal meio de propagação dos vermes. A disseminação pode ocorrer através da irrigação e/ou água das chuva contaminada, podendo apresentar na forma de ovos ou de larvas, pois podem sobreviver por períodos prolongados, mudas contaminadas, transporte de máquinas agrícola que foram utilizadas em áreas contaminadas, e depois utilizadas em áreas sadias, sem a limpeza das máquinas, e pelo transporte de animais, que trafegam de áreas contaminadas para áreas sadias (Charchar, 1999).

Para examinar quais são as melhores formas de controlar estes vermes, utilizam-se ensaios em campos experimentais ou em casas de vegetação. Esses, geralmente, são compostos pelos tratamentos em teste e sua correspondente parcela terá uma testemunha pareada, ou seja, a parcela vizinha não apresentará tratamento ativo.

Os delineamentos mais utilizados para o caso descrito acima, variam entre inteiramente casualizados ou em blocos casualizados, podendo apresentar esquema fatorial de tratamentos.

Apesar da utilização dos delineamentos mais comuns, eles podem não apresentar as melhores estimativas dos parâmetros de interesse do estudo. Para isso, uma alternativa seria a chamada Teoria dos Delineamentos Ótimos, a qual propõe uma forma de obtenção do delineamento, sob a suposição de um modelo para a variável resposta e os fatores de tratamento e apenas seus parâmetros são desconhecidos (Santos, 2010). A construção dos delineamentos é feita, em geral, através de recursos computacionais.

Com a capacidade de modelar a correlação existente entre as observações, a utilização de modelos mistos seria adequada.

Para modelos lineares, a teoria de delineamentos ótimos aparenta estar bem consolidada, existindo diversos recursos computacionais para a obtenção dos mesmos (Santos, 2010). Com relação aos modelos lineares mistos, tal teoria é dependente de particularidades de cada modelo. Desse modo, diferentes suposições levam a diferentes delineamentos ótimos.

De acordo com o que foi exposto, o objetivo do trabalho é fazer uma revisão

sobre modelos mistos, além de uma revisão de critérios para a obtenção dos delineamentos ótimos. Já os objetivos especifícos são os de comparar a abordagem de análise usual com a de modelos mistos, além de avaliar diferentes delineamentos ótimos (considerando-se diferentes critérios e modelos para a obtenção dos mesmos) e compará-los com o usual.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Análise

Um dos delineamentos mais usuais, em casos que envolvem o uso de testemunha (ou controle), é o delineamento em blocos casualizados completos (DBC), ou casualizado em blocos. Por tratar-se de um delineamento ótimo, em termos de apresentar variância mínima para as estimativas dos parâmetros e para as diferenças para pares de médias, quando o modelo é de efeitos fixos, os pesquisadores acabam adotando-o para o uso. Em alguns casos, empregam-se testemunhas, de forma pareada com seus tratamentos, e executam seus experimentos, obtendo os dados necessários.

Para esta seção, descrevem-se as definições e equações do modelo de delineamento inteiramente casualizado, usual e de misto. Além disso, apresentam-se as estruturas das matrizes de covariâncias, os testes para a seleção de modelo e para os efeitos fixos, além da estimação de parâmetros do mesmo.

2.1.1 Descrição de Modelos Mistos

Existem vários modelos estatísticos comuns que são expressos como modelos lineares, e precisam incorporar o que são chamados de efeitos fixos e efeitos aleatórios. Um modelo que incorpora todos estes é denominado de modelo de efeitos mistos, ou simplesmente de modelo misto.

Segundo Littell et al. (1998), modelos lineares mistos foram elaborados por criadores de animais, para avaliar o potencial genético de touros. A aplicação dos modelos mistos foi espalhada por todas as áreas de pesquisa, sendo encorajada pela disponibilidade de *software* avançados. Antes de sua elaboração, as análises eram feitas, de forma que, adaptavam-se os métodos de efeitos fixos para modelos com efeitos aleatórios. Isso fez com que implicassem em restrições de aplicação, já que a estrutura de covariância não pode ser modelada adequadamente.

De acordo com Pinheiro e Bates (2000), a utilização de modelos mistos é principalmente para a descrição de relações entre uma variável resposta e algumas covariáveis em dados agrupados, segundo um ou mais fatores de classificação.

Alguns exemplos de dados agrupados seriam: dados longitudinais, dados multiníveis e dados resultantes de experimentos em blocos casualizados, quando estes podem ser considerados uma possível amostra de uma população em blocos.

Ao associar os efeitos aleatórios comuns a todas as observações, que compartilham o mesmo nível de fator de classificação, os modelos de efeitos mistos representam estrutura

de covariância induzida pelo agrupamento de dados.

Brien (2010) designa um fator aleatório se for apropriado utilizar uma função de probabilidade para descrever a distribuição de efeitos associados ao conjunto populacional de níveis, e define como fator fixo se for considerado apropriado os efeitos relacionados com o conjunto populacional de níveis para o fator, em que diferem de maneira arbitrária.

Para Verbeke e Molenberghs (2008); Laird e Ware (1982), um modelo linear misto considerando medidas repetidas no tempo, pode ser construído através de dois estágios:

- Estágio 1:
  Sendo y_{ij} a variável resposta de cada indivíduo i, medida no tempo t_{ij}, com $i = 1, \ldots, m$ e $j = 1, \ldots, n_i$, e sendo $\mathbf{y}_{ij} = (y_{i1}, y_{i2}, \ldots, y_{in_i})'$ um n_i-vetor de variáveis respostas, para cada indivíduo i. Para este estágio, o modelo tem como princípio a modelagem da variável resposta de cada indivíduo i, ao longo do tempo, por meio do modelo de regressão:
  $$\mathbf{y}_i = \mathbf{Z}_i\boldsymbol{\beta}_i + \boldsymbol{\epsilon_i}, \tag{2.1}$$
  em que, $\mathbf{Z}_i$ é uma matriz de variáveis regressoras conhecidas, de dimensão n_i x q, $\boldsymbol{\beta}_i$ é um q-vetor dos parâmetros de regressão e $\boldsymbol{\epsilon_i}$ é um n_i-vetor de erros. Assume-se que os $\boldsymbol{\epsilon_i} = (\epsilon_{i1}, \epsilon_{i2}, \ldots, \epsilon_{in_i})'$ são independentes, com $\boldsymbol{\epsilon_i} \sim \mathrm{N}_{n_i}(\mathbf{0}; \sigma^2\mathbf{I}_{n_i})$, sendo $\mathbf{I}_{n_i}$ uma matriz identidade, de ordem n_i.

- Estágio 2:
  Já o modelo do segundo estágio, tem a finalidade de explicar a variabilidade entre os indivíduos, e é representado por:
  $$\beta_i = \mathbf{K}_i\boldsymbol{\beta} + \mathbf{u}_i, \tag{2.2}$$
  na qual, $\mathbf{K}_i$ é uma matriz de covariáveis conhecidas, com dimensão q x p, $\boldsymbol{\beta}$ é um p-vetor de parâmetros de regressão desconhecidos, e assume-se $\mathbf{u}_i$ independente, com $\mathbf{u}_i \sim \mathrm{N}_q(\mathbf{0}, \mathbf{G})$.

Ao combinar as equações (2.1) e (2.2), obtemos o modelo:

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta}_i + \mathbf{Z}_i\mathbf{u}_i + \boldsymbol{\epsilon_i}, \tag{2.3}$$

com, $\mathbf{y}_i$ é um n-vetor, conhecido como perfil individual de resposta, em que, $i = 1, \ldots, m$, $\boldsymbol{\beta}_i$ é um p-vetor de parâmetros de efeitos fixos, $\mathbf{X}_i = \mathbf{K}_i\mathbf{Z}_i$ exprime uma matriz de especificação de efeitos fixos (de posto completo), de dimensão n_i x p, $\mathbf{u}_i$ é um q-vetor de efeitos aleatórios, $\mathbf{Z}_i$ representa uma matriz de especificação de efeitos aleatórios (de posto completo), com dimensão n_i x q, e $\boldsymbol{\epsilon_i}$ é um n_i-vetor de erros aleatórios. Adota-se

que $\mathbf{u}_i \sim \mathrm{N}_q(\mathbf{0}; \mathbf{G})$, $\boldsymbol{\epsilon_i} \sim \mathrm{N}_{n_i}(\mathbf{0}; \mathbf{R}_i)$ e $\mathbf{u}_i$ e $\boldsymbol{\epsilon_i}$ independentes. Já as matrizes $\mathbf{G}$ e $\mathbf{R}_i$, são quadradas de ordens q e n_i, respectivamente, e também são positivas definidas, sendo que a matriz $\mathbf{G}$ está relacionado com a variação dos indivíduos, e a matriz de covariância $\mathbf{R}_i$ está relacionada à variação dentro do indivíduo, isto é, ao longo do tempo.

De acordo com o modelo (2.3), temos que o modelo hierárquico $\mathbf{y}_i|\mathbf{u}_i \sim \mathrm{N}(\mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i\mathbf{u}_i; \mathbf{R}_i)$. Dessa forma, a função densidade marginal $\mathbf{y}_i$ é dada por:

$$\mathbf{y}_i = \int f(\mathbf{y}_i|\mathbf{u}_i) f(\mathbf{u}_i) d\mathbf{u}_i, \tag{2.4}$$

resulta que $\mathbf{y}_i \sim \mathrm{N}(\mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta}; \mathbf{V}_i)$, com $\mathbf{V}_i = \mathbf{Z}_i\mathbf{G}\mathbf{Z}_i' + \mathbf{R}_i$.

Outra forma de representar o modelo seria a de considerar todos os indivíduos. Em conformidade com Da Costa (2003), uma exibição para a forma matricial do modelo é apresentada na equação (2.5):

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\epsilon}, \tag{2.5}$$

no qual, $\mathbf{y}$ é um n-vetor de observações (ou dados observados), $\boldsymbol{\beta}$ é um p-vetor de parâmetros para efeitos fixos desconhecidos, $\mathbf{X}$ é uma matriz n x p de incidência para efeitos fixos, $\mathbf{Z}$ é uma matriz n x q de incidência para efeitos aleatórios, $\mathbf{u}$ é um q-vetor de efeitos aleatórios não observáveis, e $\boldsymbol{\epsilon}$ é um n-vetor de erros aleatórios.

De forma matricial, temos que:

$$\mathrm{E}[\mathbf{u}] = \mathbf{0},\ \mathrm{E}[\boldsymbol{\epsilon}] = \mathbf{0} \text{ e } \mathrm{Var}\begin{bmatrix}\mathbf{u}\\ \boldsymbol{\epsilon}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{G} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{R}\end{bmatrix}.$$

No modelo da equação (2.5), é assumido que os vetores $\mathbf{u}$ e $\boldsymbol{\epsilon}$ sejam independentes, com $\mathbf{u} \sim \mathrm{N}(\mathbf{0}; \mathbf{G})$ e $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathrm{N}(\mathbf{0}; \mathbf{R})$, e as matrizes de variâncias e covariâncias, respectivamente, $\mathbf{G}$ e $\mathbf{R}$ positivas definidas, ou seja, matrizes simétricas cujos autovalores são todos positivos e não-nulos, por hipótese. Sendo assim,

$$\mathrm{Var}(\mathbf{u}) = \mathrm{E}(\mathbf{uu'}) = \mathbf{G} \text{ e } \mathrm{Var}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathrm{E}(\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon'}) = \mathbf{R}.$$

Dessa forma, obtém-se:

$$\mathbf{V} = \mathrm{Var}(\mathbf{y}) = \mathrm{Var}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) + \mathrm{Var}(\mathbf{Zu}) + \mathrm{Var}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{Z}\mathrm{Var}(\mathbf{u})\mathbf{Z'} + \mathbf{R} = \mathbf{ZGZ'} + \mathbf{R}. \tag{2.6}$$

Assumindo que a matriz $\mathbf{V}$ seja não-singular, isto é, $\mathbf{V}$ admite inversa, com $\det(\mathbf{V}) \neq 0$, então:

$$\mathrm{E}(\mathbf{y}) = \mathrm{E}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Zu} + \boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}.$$

Sendo assim, $\mathbf{y} \sim \mathrm{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta};\ \mathbf{ZGZ'} + \mathbf{R})$.

2.1.2 Estimação em Modelos Lineares Mistos

Do modelo misto apresentado em (2.3), considere o vetor $\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{g}}$ associado aos parâmetros da matriz $\mathbf{G}$, $\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{r}}$ o vetor de parâmetros de $\mathbf{R}_{\mathrm{i}}$, $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{g}}, \boldsymbol{\theta}_{\mathrm{r}})'$ e $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})'$, e $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de parâmetros fixos de regressão.

De acordo com Pinheiro e Bates (2000), os métodos de estimação para os modelos lineares mistos mais utilizados, dentre os vários existentes, são os Métodos da Máxima Verossimilhança (MV) e Máxima Verossimilhança Restrita (MVR). Para Littell et al. (1998), embora existam vários outros métodos para a estimação dos parâmetros de covariâncias (Método dos Momentos, Método da Estimação Quadrática Não-Viesada de Variância Mínima, Pseudo-Verossimilhança), o MVR é, indiscutivelmente, o mais importante. Estes métodos podem ser encontrados em Singer e Andrade (1986); West et al. (2006), dentre outros. A seguir, detalham-se os métodos citados.

2.1.2.1 Método da Máxima Verossimilhança

O método de estimação da máxima verossimilhança (MV) tem como processo a maximização, de forma conjunta, da função de parâmetros de uma distribuição conhecida, denominada função de verossimilhança.

West et al. (2006), no contexto de modelos lineares mistos, constrói a função de verossimilhança de $\boldsymbol{\theta}$, com base na distribuição marginal da variável dependente $\mathbf{y}_{\mathrm{i}}$, que segue uma distribuição multivariada com função de densidade de probabilidade definida por:

$$f(\mathbf{y}_i|\boldsymbol{\theta}) = (2\pi)^{-\frac{n_i}{2}} \det(\mathbf{V}_i)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta})'\mathbf{V}_i^{-1}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta})\right\}, \tag{2.7}$$

na qual, $\mathbf{V}_i = \mathbf{Z}_i\mathbf{G}\mathbf{Z}_i' + \mathbf{R}_i$.

A função de verossimilhança, $\mathrm{L}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_i)$ é dada por:

$$\mathrm{L}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_i) = \prod_{i=1}^{m}(2\pi)^{-\frac{n_i}{2}} \det(\mathbf{V}_i)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta})'\mathbf{V}_i^{-1}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta})\right\}, \tag{2.8}$$

e o logaritmo da função de verossimilhança $l(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_i)$, será:

$$l(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_i) = \ln(\mathrm{L}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_i))$$

$$l(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_i) = -\frac{\mathrm{N}}{2}\ln(2\pi) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\ln(\det(\mathbf{V}_i))) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta})'\mathbf{V}_i^{-1}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta}), \tag{2.9}$$

com $\mathrm{n} = \sum_{i=1}^{m} n_i$ sendo o número de observações (linhas) no conjunto de dados e ln é o logaritmo natural.

O logaritmo da função de verossimilhança depende dos parâmetros contidos em $\boldsymbol{\beta}$ e dos componentes de variância de $\mathbf{V}_i$ contidos em $\boldsymbol{\alpha}$. O problema consiste na maximização da função de verossimilhança para obter as estimativas de $\boldsymbol{\theta}$ (West et al., 2006). Para isso, consideram-se dois casos:

(i) **Caso especial**: assumindo-se $\boldsymbol{\alpha}$ conhecido.

Considerando a matriz $\mathbf{V}_i$ conhecida, ou seja, $\boldsymbol{\alpha}$ conhecido, ao derivar parcialmente a equação (2.9) em relação a $\boldsymbol{\beta}$ e igualando a um vetor de zeros, obtém-se que:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\alpha) = \left(\sum_{i=1}^{m} \mathbf{X}_i' \mathbf{V}_i^{-1} \mathbf{X}_i\right)^{-1} \sum_{i=1}^{m} \mathbf{X}_i \mathbf{V}_i^{-1} \mathbf{y}_i, \tag{2.10}$$

tal que,

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \sim \mathrm{N}\left(\boldsymbol{\beta}, \sum_{i=1}^{m} \left(\mathbf{X}_i' \mathbf{V}_i^{-1} \mathbf{X}_i\right)^{-1}\right).$$

O estimador $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ obtido recebe o nome de BLUE(*Best Linear Unbiased Estimator* - Melhor Estimador Não-Viesado), pois ele apresenta as propriedades desejáveis. Ele é dito "melhor" no sentido de minimizar a variância do estimador, "linear" no fato de que é função linear de $\mathbf{y}$ e "não-viesado", pois $\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{\beta}$.

(ii) **Caso geral**: Assumindo-se $\boldsymbol{\alpha}$ desconhecido.

Neste caso, é preciso estimar os componentes de variância de $\boldsymbol{\alpha}$ através do logaritmo da função de verossimilhança $l(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_i)$. Isso é feito pela substituição de $\boldsymbol{\beta}$, obtido em (2.10), na equação (2.9). Assim, os únicos componentes desconhecidos ficam sendo os parâmetros de $\boldsymbol{\alpha}$.

Normalmente, a maximização de $l(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_i)$, em relação a $\boldsymbol{\alpha}$, envolve processos computacionais iterativos, em que, este é um exemplo de otimização não-linear, pois envolve restrições impostas a $\boldsymbol{\alpha}$, de forma que as matrizes $\mathbf{G}$ e $\mathbf{R}_i$ sejam positivas definidas. Obtendo as estimativas de máxima verossimilhança $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$, e consequentemente as matrizes $\hat{\mathbf{G}}$ e $\hat{\mathbf{R}}_i$, tem-se uma estimativa para a matriz $\mathbf{V}_i$:

$$\hat{\mathbf{V}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i) = \mathbf{Z}_i \hat{\mathbf{G}} \mathbf{Z}_i' + \hat{\mathbf{R}}_i. \tag{2.11}$$

Sendo assim, o estimador $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ dos parâmetros de efeitos fixos é obtido pela substituição de $\hat{\mathbf{V}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i)$ na equação (2.10):

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \left(\sum_{i=1}^{m} \mathbf{X}_i' \hat{\mathbf{V}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i)^{-1} \mathbf{X}_i\right)^{-1} \sum_{i=1}^{m} \mathbf{X}_i' \hat{\mathbf{V}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i)^{-1} \mathbf{y}_i. \tag{2.12}$$

A solução de $\hat{\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})$ foi escrita como forma condicionada de $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$, como forma de tornar evidente a dependência da estimativa de MV dos parâmetros de covariância na estimativa dos parâmetros de efeitos fixos (Rocha, 2015).

O estimador $\hat{\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})$, por conter $\hat{\mathbf{V}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i)$ em sua formulação, é chamado de EBLUE (*Empirical Best Linear Unbiased Estimator*). Sua variância assintótica é dada por:

$$\mathrm{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})) = \left(\sum_{i=1}^{m} \mathbf{X}_i' \hat{\mathbf{V}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i)^{-1} \mathbf{X}_i \right)^{-1}. \tag{2.13}$$

Por ignorar a variabilidade introduzida ao se trabalhar com as estimativas dos componentes de variância em vez de valores paramétricos verdadeiros (desconhecidos), a variância, como apresentada na equação (2.13) apresenta um viés descendente.

Os estimadores de MV de $\boldsymbol{\alpha}$, em geral, apresentam viés para pequenas amostras, pois não consideram a perda de números de graus de liberdade resultante da estimação dos efeitos fixos do modelo (West et al., 2006). Como forma alternativa, a correção do viés é realizada com a utilização do método de máxima verossimilhança restrita, que apresenta tendência a correção de alguns dos problemas da estimação por máxima verossimilhança.

2.1.2.2 Método da Máxima Verossimilhança Restrita

De acordo com West et al. (2006), a estimação do vetor de parâmetros das matrizes de covariâncias $\mathbf{G}$ e $\mathbf{R}$, $\boldsymbol{\alpha}$ produz estimativas viesadas, por não considerar a perda de graus de liberdade resultante da estimação dos parâmetros de efeito fixo $\boldsymbol{\beta}$. Uma alternativa para corrigir este viés, seria o uso do método da Máximo Verossimilhança Restrita (MVR), no qual as estimativas dos componentes de variância tendem a ser menos viesadas que as estimativas produzidas pelo MV.

O MVR foi proposto por Patterson e Thompson (1971) em um trabalho envolvendo delineamentos desbalanceados e blocos incompletos. Este método é um dos mais importantes para a estimação dos parâmetros de covariância em modelos lineares mistos, e consiste em maximizar a função de verossimilhança de uma transformação linear ortogonal $\mathbf{y}^* = \mathbf{U}'\mathbf{y}$, com $\mathbf{U}$ uma matriz com posto completo, de dimensão (n x $n - p$) e colunas ortogonais às colunas da matriz $\mathbf{X}$, tal que $\mathrm{E}(\mathbf{y}^*) = \mathbf{0}$. A verossimilhança obtida por meio dessa transformação não depende do vetor de parâmetros de efeito fixo $\boldsymbol{\beta}$ nem da escolha da matriz $\mathbf{U}$. De forma geral, utiliza-se $\mathbf{U} = \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$, que é a matriz de projeção que gera os resíduos do ajuste obtidos por mínimos quadrados ordinários (Singer e Andrade, 1986).

Assim, $\mathbf{y}^* \sim \mathrm{N}(\mathbf{0}, \mathbf{U}'\mathbf{V}\mathbf{U})$, e a função de verossimilhança restrita $l_R(\boldsymbol{\theta})$ é dada por:

$$l_R(\boldsymbol{\alpha}) = -\frac{1}{2}\ln(\det(\mathbf{V})) - \frac{1}{2}\ln(\det(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})) - \frac{\mathrm{N}-\mathrm{p}}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) - \frac{\mathrm{N}-\mathrm{p}}{2}\ln(2\pi), \tag{2.14}$$

que também pode ser escrita como:

$$l_R(\boldsymbol{\alpha}) = -\frac{1}{2}\ln(2\pi)\sum_{i=1}^{m} n_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\ln(\det(\mathbf{V}_i)) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\hat{\boldsymbol{\beta}}')\mathbf{V}_i^{-1}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \frac{1}{2}\ln\det\left(\sum_{i=1}^{m}\mathbf{X}_i'\mathbf{V}_i^{-1}\mathbf{X}_i\right), \tag{2.15}$$

em que, p é o número de parâmetros na parte fixa.

Dessa forma, a maximização de (2.14) ou (2.15), produz as estimativas de MVR de $\boldsymbol{\theta}$.

Para Rocha (2015), de forma geral, não há forma explícita para a maximização de $l_R(\boldsymbol{\alpha})$ em modelos de efeitos mistos. As estimativas de MV e MVR podem ser obtidas por meio de métodos numéricos iterativos como *Newton-Raphson*, o método *Fisher scoring* e o método de EM, proposto por Laird e Ware (1982). Nestes métodos, a otimização da função começa a partir de valores iniciais dos parâmetros $\boldsymbol{\alpha}^{(0)}$ e as demais iterações são controladas através de um critério de convergência, com a finalidade de encontrar valores dos parâmetros que maximizam a função de verossimilhança.

2.1.3 Estruturas para Matrizes de Covariâncias

A estrutura da matriz de covariâncias deve depender da forma em que as observações foram obtidas e do conhecimento sobre o mecanismo de geração dessas observações.

Já a covariância entre as observações obtidas na mesma unidade amostral, pode ser modelada de forma direta por meio da matriz $\mathbf{R}$, que representa a estrutura de covariância das observações, por meio da combinação da matriz $\mathbf{G}$ associada aos efeitos aleatórios $\mathbf{u}$, que representam a variabilidade entre unidades amostrais com a matriz $\mathbf{R}$ (Singer e Andrade (1986)).

Como $\mathbf{u} \sim \mathrm{N}(\mathbf{0}; \mathbf{G})$ e $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathrm{N}(\mathbf{0}; \mathbf{R})$, então as matrizes de variâncias e covariâncias $\mathbf{G}$ e $\mathbf{R}$ podem assumir diferentes estruturas. Apresentam-se algumas das matrizes de variâncias e covariâncias a seguir, adotando um caso particular, para a ordem da matriz $n = 3$:

(i) **Componentes de Variância - CV ("*Variance Components*")**:

$$\begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^2 \end{bmatrix} = \mathbf{I}\sigma^2,$$

em que, **I** é uma matriz identidade de ordem 3, neste caso, e σ^2 é um parâmetro de variância. Essa estrutura matricial parte do pressuposto da independência e homogeneidade de variâncias entre os componentes, suposição utilizada em ANOVA.

(ii) **Simetria Composta - SC (*"Compound Symmetry"*)**:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1^2 + \sigma^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 \\ \sigma_1^2 & \sigma_1^2 + \sigma^2 & \sigma_1^2 \\ \sigma_1^2 & \sigma_1^2 & \sigma_1^2 + \sigma^2 \end{bmatrix}$$

A estrutura dessa matriz envolve dois parâmetros, em que admite-se homogeneidade entre as variâncias $(\sigma_1^2 + \sigma^2)$ e covariâncias constantes entre as medidas repetidas (σ_1^2).

(iii) **Simetria Composta com Heterogeneidade de Variâncias (*"Heterogeneous CS - CSH"*)**:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_1\sigma_2\rho & \sigma_1\sigma_3\rho \\ \sigma_1\sigma_2\rho & \sigma_2^2 & \sigma_2\sigma_3\rho \\ \sigma_1\sigma_3\rho & \sigma_2\sigma_3\rho & \sigma_3^2 \end{bmatrix}$$

Para esta estrutura, admite-se variâncias e covariâncias distintas, porém as correlações devem ser iguais. De maneira geral, o número de parâmetros na estrutura é igual a $n + 1$.

(iv) **Auto-Regressiva de Primeira Ordem (*"First-Order Autoregressive - AR(1)"*)**:

$$\sigma^2 \begin{bmatrix} 1 & \rho & \rho^2 \\ \rho & 1 & \rho \\ \rho^2 & \rho & 1 \end{bmatrix}$$

Esta matriz apresenta dois parâmetros, admite homogeneidade de variâncias (σ^2) e covariâncias decrescentes, que tendem a zero, à medida de em que aumenta-se a distância entre as observações repetidas, pois $|\rho| \leq 1$. Segundo West et al. (2006), o uso dessa matriz é comum na estrutura para a matriz **R**, no ajuste de modelos para dados com observações igualmente espaçadas, tanto para o tempo, quanto para o espaço.

(v) **Auto-Regressiva de Primeira Ordem com Heterogeneidade de Variâncias (*"Heterogeneous AR(1) - ARH(1)"*)**:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 & \rho^2\sigma_1\sigma_3 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 & \rho\sigma_2\sigma_3 \\ \rho^2\sigma_1\sigma_3 & \rho\sigma_2\sigma_3 & \sigma_3^2 \end{bmatrix}$$

Este tipo de matriz é uma generalização da AR(1), na qual são consideradas variâncias e covariâncias distintas entre as observações, e a correlação decrescente com o tempo. No geral, o número de parâmetros dessa matriz é igual a $n + 1$.

(vi) **Potência (“*Power - SP(POW)(c-list)*”)**:

$$\sigma^2 \begin{bmatrix} 1 & \rho^{d_{12}} & \rho^{d_{13}} \\ \rho^{d_{12}} & 1 & \rho^{d_{23}} \\ \rho^{d_{13}} & \rho^{d_{23}} & 1 \end{bmatrix}$$

Esta matriz, assim como a da estrutura AR(1), apresentam dois parâmetros, além das características semelhantes, em que d é o valor absoluto (ou distância Euclidiana) entre os pontos de observação. Contudo, seu uso é recomendado apenas para os casos com observações repetidas não equidistantes.

(vii) **Banda (*“Banded - UN(q)”*)**:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12}^2 & 0 \\ \sigma_{12}^2 & \sigma_2^2 & \sigma_{23}^2 \\ 0 & \sigma_{23}^2 & \sigma_3^2 \end{bmatrix}$$

Sob esta matriz supõe-se heterogeneidade entre as variâncias e as covariâncias presentes, considerando uma distância pré-determinada, com as observações mais distantes supostos independentes, onde q é o número de bandas. No exemplo, q = 2.

(viii) **Componentes de Variâncias com Heterogeneidade (*“Banded Main Diagonal - UN(1)”*)**:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3^2 \end{bmatrix}$$

Esta estrutura de matriz conserva a pressuposição de independência, mas isso não ocorre com a homogeneidade de variâncias. Esta matriz apresenta o número de parâmetros igual a n, que é igual a ordem da matriz.

(ix) **Não Estruturada (*“Unstructured” - UN*)**

$$\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_3^2 \end{bmatrix}$$

Para esta matriz, ela não apresenta homogeneidade entre variâncias, e nem entre covariâncias. Ela apresenta o maior número de parâmetros, sendo ele igual a $\dfrac{n(n+1)}{2}$ parâmetros.

Existem outras estruturas de matrizes de covariâncias, e elas podem ser encontradas em Xavier (2000); Pinheiro e Bates (2000); SAS (2014) dentre outros.

2.1.4 Seleção de Modelos

Em vista do elevado número de possibilidades para as estruturas das matrizes de covariâncias, um dos objetivos com a análise de dados é a seleção da mesma.

Selecionar um modelo apropriado ao conjunto de dados requer cuidados, pois o uso de um modelo inadequado, pode produzir resultados inválidos, e assim, levar a conclusões errôneas. Ao selecionar um modelo, deseja-se sempre obter uma relação parcimoniosa, ou seja, o modelo que apresenta o menor número de parâmetros, e ainda assim, explique adequadamente o comportamento dos dados.

Dentre os vários métodos existentes na literatura, os mais utilizados são o Teste Assintótico de Razão de Verossimilhança e os critérios de informação, tais como os critérios de Informação de Akaike (AIC:original e AICc:corrigido), descritos por Akaike (1974) e Bozdogan (1987), respectivamente, e o critério de Informação Bayesiano (BIC), enunciado por Schwarz et al. (1978), os quais, serão utilizados neste estudo.

2.1.4.1 Teste Assintótico de Razão de Verossimilhança

Na comparação de modelos aninhados (ou hierárquicos), ou seja, um modelo é caso especial do outro, ajustados por máxima verossimilhança (MV) pode-se utilizar o Teste da Razão de Verosssimilhança (TRV). Segundo Pinheiro e Bates (2000), ele também pode ser usado com os modelos ajustados pelo método da máxima verossimilhança restrita (MVR), quando os dois modelos apresentam os mesmos termos para compor seus efeitos fixos.

Para este teste, as hipóteses são:

$$\mathrm{H}_0 : \text{modelo restrito é adequado } \textit{vs.}\ \mathrm{H}_1 : \text{modelo completo é adequado}, \tag{2.16}$$

em que, o modelo completo apresenta ν parâmetros adicionais, em comparação ao modelo restrito.

A estatística do teste de razão de verossimilhanças é dada por:

$$\mathrm{TRV} = \boldsymbol{-2\log\left(\frac{\mathrm{L}(\boldsymbol{\theta_1})}{\mathrm{L}(\boldsymbol{\theta_2})}\right) = -2\log[\mathrm{L}(\boldsymbol{\theta_1})] + 2\log[\mathrm{L}(\boldsymbol{\theta_2})],} \tag{2.17}$$

sendo, L($\boldsymbol{\theta}_1$) a verossimilhança do modelo aninhado ou restrito e L($\boldsymbol{\theta}_2$) a verossimilhança do modelo de referência ou completo. Sob condições de regularidades (Singer e Andrade, 1986), a equação (2.17) segue, assintoticamente, uma distribuição qui-quadrado com ν graus de liberdade ($\chi^2_{(\nu)}$), desde que H_0 não especifique valores na fronteira do espaço paramétrico, com ν sendo a diferença entre o número de parâmetros de $\boldsymbol{\theta}_1$ e $\boldsymbol{\theta}_2$.

De acordo com Matsushita (1994) e Guimarães (1994), uma das desvantagens da utilização deste teste é a comparação de somente dois modelos por vez.

2.1.4.2 Critérios de Informação

Para a comparação entre modelos não-aninhados (ou não-hierárquicos), deve-se ter em mente que há apenas modelos aproximados para a realidade, que causam perda de informação (Emiliano et al., 2010). Esses critérios são baseados nos logaritmos da função de verossimilhança, e são dependentes do número de parâmetros do modelo a serem estimados. Para essa comparação, pode-se utilizar um dos critérios descritos a seguir:

(i) **Critério de Informação de Akaike ("*Akaike Information Criterion* - AIC")**:

$$\text{AIC} = -2\log L(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + 2(m), \tag{2.18}$$

em que: m é o número de parâmetros a serem estimados no modelo, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ é o vetor de parâmetros estimados, e $L(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ é o valor assumido pela função de verossimilhança.

(ii) **Critério de Informação de Akaike Corrigido ("*Corrected Akaike Information Criterion* - AICc")**:

$$\text{AICc} = -2\log L(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + 2(m) + \frac{m(m+1)}{n-m-1}, \tag{2.19}$$

em que: n é o número de observações, m é o número de parâmetros a serem estimados do modelo, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ é o vetor de parâmetros estimados, e $L(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ é o valor assumido pela função de verossimilhança.

(iii) **Critério de Informação Bayesiano ("*Bayesian Information Criterion* - BIC")**:

$$\text{BIC} = -2\log L(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + m\log n, \tag{2.20}$$

na qual, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ é o vetor de parâmetros estimados do modelo, $L(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ é o valor assumido pela função de verossimilhança, m é o número de parâmetros a serem estimados, e n é o número de observações da amostra. O BIC penaliza o modelo com grande número de parâmetros.

Por mais que cada critério apresente sua peculiaridade, a interpretação para a escolha do modelo, descrita a seguir, segue a mesma forma. Para a escolha do modelo, dentre os comparados, é feita através dos valores obtidos pelo critério, no qual, quanto menor for o valor obtido pelo critério, maior será a evidência de que o modelo apresenta melhor ajuste, dentre aqueles em comparação.

2.1.5 Testes para Parâmetros de Efeitos Fixos

De acordo com Verbeke e Molenberghs (2008); West et al. (2006), testes com o propósito de verificar os efeitos fixos, ou da combinação linear dos mesmos, do modelo apresentado em (2.5) seriam: Wald, Wald-F e t.

2.1.5.1 Teste de Wald

O teste de Wald aproximado pode ser utilizado para testar cada elemento β_i em $\boldsymbol{\beta}$, com $i = 1, \ldots, p$. De forma geral, para uma matriz $\mathbf{L}$, com dimensão n x p, de constantes conhecida, sendo n o número de observações e $\mathbf{L}$ de posto completo, as hipóteses a serem testadas são:

$$\mathrm{H}_0 : \mathbf{L}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \ \textit{vs.} \ \mathrm{H}_1 : \mathbf{L}\boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{0}. \tag{2.21}$$

A estatística de teste para o teste de Wald é definida por (Verbeke e Molenberghs, 2008):

$$\mathrm{W} = (\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})'\mathbf{L}' \left[\mathbf{L} \left(\sum_{i=1}^{n} \mathbf{X}_i' \mathbf{V}_i^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \mathbf{X}_i \right)^{-1} \mathbf{L}' \right]^{-1} \mathbf{L}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}). \tag{2.22}$$

Esta estatística segue, assintoticamente, uma distribuição $\chi^2_{(\nu)}$, sendo ν os graus de liberdade igual ao posto da matriz $\mathbf{L}$.

De acordo com Verbeke e Molenberghs (2008), a estatística deste teste subestima a verdadeira variabilidade de $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, já que não considera a verdadeira variabilidade introduzida pelos componentes de variância $\boldsymbol{\theta}$. A correção para o viés é amenizado, frequentemente, utilizando o teste t ou Wald-F.

2.1.5.2 Teste Wald-*F*

Para este teste, as hipóteses são as mesmas definidas em (2.21), e sua estatística é definida por:

$$\mathrm{F} = \frac{(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})'\mathbf{L}' \left[\mathbf{L} \left(\sum_{i=1}^{n} \mathbf{X}_i' \mathbf{V}_i^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \mathbf{X}_i \right)^{-1} \mathbf{L}' \right]^{-1} \mathbf{L}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})}{\mathrm{posto}(\mathbf{L})}, \tag{2.23}$$

e segue uma distribuição $\mathrm{F}_{(\nu_1;\nu_2)}$, com o número de graus de liberdade do numerador sendo igual ao posto da matriz $\nu_1 = \text{posto}(\mathbf{L})$, e o número de graus de liberdade do denominador ν_2 pode ser estimado através dos métodos propostos por Satterthwaite (1946), Kenward e Roger (1997), Hrong-Tai Fai e Cornelius (1996).

Segundo Galwey (2007), este teste superestima a significância do efeito fixo testado, pois assume efetivamente que $\nu_2 \to \infty$, em certos casos. Sendo assim, um teste alternativo, e mais conservador, seria o teste de Razão de Verossimilhança (TRV), devido ao fato deste subestimar a importância do efeito fixo.

2.1.5.3 Teste *t*

Esse teste tem como finalidade testar cada parâmetro β_i, em $\boldsymbol{\beta}$. As hipóteses são, frequentemente, dadas por:

$$\mathrm{H}_0 : \beta_i = 0 \ \textit{vs.} \ \mathrm{H}_1 : \beta_i \neq 0, \tag{2.24}$$

com $i = 1, \ldots, p$. Já a estatística t é definida por:

$$t = \frac{\hat{\beta}_i}{\sqrt{\hat{Var}(\hat{\beta}_i)}}. \tag{2.25}$$

De acordo com Verbeke e Molenberghs (2008), no contexto de modelos mistos, essa estatística não segue uma distribuição t exata e o número de graus de liberdade ν associado é calculado com base no conjunto de dados. Para calcular o valor de ν, utilizam-se métodos descritos por Satterthwaite (1946), Hrong-Tai Fai e Cornelius (1996), Kenward e Roger (1997).

2.2 Delineamentos Experimentais

Para esta parte, apresentam-se o tipo de delineamento inteiramente casualizado, o correntemente utilizado na situação com o uso de testemunhas pareadas, que seria o delineamento em blocos casualizados (DBC), o modelo para a obtenção de delineamento ótimo, proposto para o caso citado, para efeito de comparação com o DBC, alguns critérios de otimalidade, e as medidas de comparação para os delineamentos.

2.2.1 Delineamento Inteiramente Casualizado

O delineamento inteiramente casualizado é o mais simples de todos os delineamentos, e os experimentos instalados são denominados experimentos inteiramente ao acaso.

Em experimentos que envolvem laboratórios e nos ensaios de vasos, realizados dentro de casas de vegetação, nos quais as condições experimentais podem ser controladas (Banzatto e Kronka, 2006).

De acordo com Oehlert (2000), o modelo é dado pela equação:

$$\mathrm{y}_{ij} = \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij}, \tag{2.26}$$

em que, y_{ij} é o valor observado da variável resposta na parcela que recebeu o tratamento i na repetição j, com $i \in \{1, 2, 3, \ldots, I\}$ e $j \in \{1, 2, 3, \ldots, J\}$, μ é a média geral (ou constante comum a todas as observações); α_i é o efeito do tratamento i aplicado na parcela, e ϵ_{ij} é o erro aleatório associado ao i-ésimo tratamento e j-ésima repetição, tal que $\epsilon_{ij} \sim \mathrm{NID}(0; \sigma^2)$.

Além disso, a utilização desse tipo de delineamento, a homogeneidade das condições ambientais e do material experimental é obrigatório.

2.2.2 Delineamento em Blocos Casualizados

Em experimentos com a utilização de testemunhas de forma pareada, o delineamento mais utilizado é o delineamento em blocos casualizados (DBC). Ele pode ser encontrado também com o nome de delineamento em blocos ao acaso ou delineamento em blocos completos casualizados.

Para Dean et al. (2017); Pimentel-Gomes e Garcia (2002); Banzatto e Kronka (2006), o uso deste delineamento é apropriado quando o objetivo do experimento é comparar os efeitos de diferentes tratamentos em média, com uma variedade de condições diferentes, e quando não se verifica ou se suspeita pela heterogeneidade entre as parcelas em que utiliza-se o princípio do controle local. Dessa forma, estabelece-se, então, subambientes homogêneos (blocos) e instalando em cada um deles, todos os tratamentos, igualmente repetidos. Já para Montgomery (2012) e Lawson (2014), além de todas as características listadas acima, o uso deste delineamento é útil quando envolvem necessariamente fatores incômodos, ou seja, fatores que possam interferir nas inferências dos tratamentos testados.

Gomes (1963) ressalta ainda que, para o experimento ser eficiente, cada bloco deverá ser o mais uniforme possível, porém, os blocos podem diferir bastante uns dos outros. Além disso, o sorteio dos tratamentos é restrito a cada bloco.

De acordo com Banzatto e Kronka (2006) e Gomes (1963), esse delineamento constitui o mais importante e o mais utilizado. O controle local é representado pelos blocos, em que, quando completos, cada um deles inclui todos os tratamentos. Para

Oehlert (2000), o modelo utilizado é dado pela equação:

$$\mathrm{y}_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \epsilon_{ij}, \tag{2.27}$$

em que, y_{ij} é o valor observado da variável resposta na parcela que recebeu o tratamento i no bloco j, com $i \in \{1, 2, 3, \ldots, I\}$ e $j \in \{1, 2, 3, \ldots, J\}$, μ é a média geral (ou constante comum a todas as observações); α_i é o efeito do tratamento i aplicado na parcela, β_j é o efeito do bloco j, onde encontra-se a parcela; e ϵ_{ij} é o erro aleatório associado ao i-ésimo tratamento e j-ésimo bloco, tal que $\epsilon_{ij} \sim \mathrm{NID}(0; \sigma^2)$.

Este modelo apresentado nos mostra que os efeitos de tratamentos e os blocos são aditivos, de forma que os tratamentos apresentam o mesmo efeito em cada bloco, e que os blocos são apenas utilizados para controlar efeitos sistemáticos (heterogeneidade), corrigindo, tanto para cima, quanto para baixo. Ambos os efeitos, tratamento e blocos, são considerados constantes fixas, e o único componente aleatório é o erro.

2.2.3 Delineamentos Ótimos

A teoria de delineamentos ótimos foi introduzida por Kiefer (1959) com o objetivo de investigar delineamentos que maximizem a informação a partir de propriedades ligadas aos estimadores de interesse. Segundo Shah e Sinha (1989), essa teoria centraliza-se em torno dos problemas de caracterização e construção de delineamentos, que sejam ótimos em algum sentido, entre uma série de experimentos alternativos em uma determinada configuração do delineamento. Além disso, delineamentos ótimos são delineamentos experimentais baseados em um critério e são ótimos apenas para um modelo estatístico específico.

De acordo com Silva (2014), o objetivo na busca por um delineamento ótimo ou quase-ótimo é escolher n pontos de um conjunto de N pontos possíveis, chamados pontos candidatos, que é o conjunto de todas as possíveis combinações dos níveis de fatores, de forma que alguma função da matriz de informação seja ótima.

Para a obtenção dos delineamentos ótimos deve-se informar o modelo, assim como seus parâmetros e o critério de otimalidade a ser utilizado. A seguir, são apresentados o modelo para a obtenção do mesmo, alguns critérios de otimalidade, além de seus tipos de classificação existentes, e também as medidas de comparação dentre os delineamentos.

2.2.3.1 Modelo para Obtenção do Delineamento Ótimo

Segundo Hooks et al. (2009), o modelo para a obtenção do delineamento ótimo pode ser dado pelo modelo misto, conforme a Equação (2.28). Neste caso, assume-se que

os efeitos de tratamentos são fixos.

$$\mathbf{y} = \mathbf{W}\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\epsilon}, \tag{2.28}$$

em que, $\mathbf{y}$ corresponde ao n-vetor de observações, $\boldsymbol{\gamma}$ é o r-vetor de efeitos fixos de tratamentos, $\mathbf{W}$ é a matriz de delineamento para os efeitos de tratamentos, com dimensão n x r, $\boldsymbol{\beta}$ é o p-vetor de efeitos fixos diferentes de tratamentos, $\mathbf{X}$ é a matriz de delineamento para todos os efeitos fixos que não seja tratamentos, de dimensão n x p, $\mathbf{u}$ é o q-vetor de efeitos aleatórios, $\mathbf{Z}$ é a matriz de delineamento para os efeitos aleatórios, de dimensão n x q, e $\boldsymbol{\epsilon}$ é o n-vetor de erros aleatórios.

Assume-se que $\mathbf{u}$ e $\boldsymbol{\epsilon}$ são normalmente distribuídos e independentes, tais que:

$$\mathrm{E}\begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\epsilon} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \text{ e } \mathrm{Var}\begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\epsilon} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R} \end{bmatrix}.$$

A matriz relacionada aos efeitos de tratamentos correspondente ao referido modelo é dada por:

$$\mathbf{M} = \mathbf{W}'(\mathbf{ZGZ}'+\mathbf{R})^{-1}\mathbf{W} - \mathbf{W}'(\mathbf{ZGZ}'+\mathbf{R})^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'(\mathbf{ZGZ}'+\mathbf{R})^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'(\mathbf{ZGZ}'+\mathbf{R})^{-1}\mathbf{W}. \tag{2.29}$$

2.2.3.2 Critérios de Otimalidade

Os critérios de otimalidade, ou critérios alfabéticos de otimalidade (Kiefer, 1959; Atkinson et al., 2007) são quase sempre, relacionados ao processo de se maximizar a informação obtida a partir de um número fixo de observações, que consistem em funções da matriz de informação para dadas estimativas dos parâmetros (Shah e Sinha, 1989; Hooks et al., 2009). Alguns dos principais critérios de otimalidade são apresentados a seguir:

1. **Critério *A* (ou A-Otimalidade)**:
   Introduzido por Chernoff (1953), este critério é definido como:

   $$\min\ \mathrm{tr}(\mathbf{M})^{-1}, \tag{2.30}$$

   em que, tr denota o traço da matriz. Este critério tem como finalidade minimizar o traço da inversa da matriz de informação, que é equivalente a minimizar a variância do erro de predição do modelo ajustado e, consequentemente, a sua média.
   Uma outra forma de definir este critério apresentado em (2.30) é da forma:

   $$\max \frac{1}{\mathrm{tr}(\mathbf{M})^{-1}}. \tag{2.31}$$

Esta forma tem a mesma finalidade de minimizar o traço da inversa da matriz de informação. Já uma generalização de (2.31) é dado por:

$$\max \frac{1}{\mathrm{tr}(\mathbf{D}(\mathbf{M})^{-1})}, \tag{2.32}$$

sendo $\mathbf{D}$ uma matriz diagonal, isto é, uma matriz quadrada em que os elementos da diagonal principal são não-nulos, de pesos, que podem ser atribuídos aos parâmetros de acordo com prioridades. Ele serve também para poder equilibrar a busca quando as escalas dos parâmetros são diferentes.

2. **Critério *C* (ou C-Otimalidade)**:
   Um delineamento C-ótimo é aquele que apresenta menor variância dos contrastes simples dos efeitos de tratamentos, ou seja, a menor média das variâncias dos pares das diferenças entre os tratamentos. Segundo Hooks et al. (2009), ele é definido por:

$$\min \left(\frac{2}{\mathrm{I}-1} \left(\mathrm{tr}((\mathbf{M})^{-1}) - \frac{1}{\mathrm{I}} \mathbf{1}'(\mathbf{M})^{-1}\mathbf{1} \right) \right), \tag{2.33}$$

   na qual, I é o número de tratamentos e $\mathbf{1}$ é um n-vetor de uns.

3. **Critério *D* (ou D-Otimalidade)**:
   Wald (1943) introduziu este critério, e ele tem sido considerado o mais importante e popular nas construções de delineamentos ótimos (Silva, 2014). Este critério, também conhecido como Critério do Determinante, é definido como:

$$\min \det((\mathbf{M})^{-1}), \tag{2.34}$$

   em que, det denota o determinante da matriz. A interpretação deste critério é que ao maximizar o determinante da matriz de informação, a variância generalizada dos estimadores dos parâmetros é minimizada.
   O critério definido em (2.34) pode ser encontrado como sendo:

$$\max \det(\mathbf{M})^{1/q}, \tag{2.35}$$

   com q o número de parâmetros no modelo.

Existem outros critérios de otimalidade, e eles podem ser consultados em Atkinson et al. (2007); SAS (2014); Gilmour e Trinca (2012) entre outros.

2.2.3.3 Medidas de Comparação dos Delineamentos

Para poder ter uma mensuração de comparação dos delineamentos, utilizam-se os seguintes casos:

(i) As próprias medidas utilizadas para a obtenção do delineamento, ou seja, os critérios de otimalidade;

(ii) O uso da eficiência relativa.
Para esse caso, segundo John e Williams (1995), como as comparações feitas dentro de blocos são feitas com maior precisão, o objetivo deve ser escolher o delineamento que apresente os maiores fatores de eficiência possível, desde que todos os tratamentos sejam iguais.
John e Williams (1995); Brien (2017) mostram que o cálculo da eficiência (E) é definida pela média harmônica dos autovalores não-nulos da matriz de informação $\mathbf{M}$ dividido pelo número de repetições:

$$\mathrm{E} = \frac{\mathrm{I} - 1}{\mathrm{J} \cdot \mathrm{tr}\left(\mathbf{M}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{M}\right)^{-1}}, \tag{2.36}$$

em que, J é o número de repetições e I é o número de tratamentos.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Motivado pelos experimentos com objetivo de avaliar a influência da presença dos nematóides em diferentes culturas, o estudo realizado se divide em duas partes: (i) a análise de um conjunto de dados reais e a obtenção e comparação de delineamentos motivados pelos resultados obtidos, e (ii) a obtenção e comparação de delineamentos considerando-se diferentes parâmetros e suas propriedades.

3.1 Materiais

3.1.1 Dados Reais

Para o estudo, utiliza-se um conjunto de dados obtidos a partir de um experimento com a cultura de soja, realizado em uma casa de vegetação, com o uso de delineamento inteiramente casualizado (DIC), apresentando 6 tratamentos e 6 repetições. Os tratamentos representam tipos de nematicidas, sendo um deles o tratamento controle, com o objetivo de verificar a eficiência e comparação entre eles. O conjunto de dados foi obtido no Edifício "Professor Salvador Toledo Piza Junior", situado no câmpus "Luiz de Queiroz", em dependências do LFN – Departamento de Fitopatologia e Nematologia da ESALQ–USP, na cidade de Piracicaba – SP, localizada na latitude 22°42'15.1"S, longitude 47°38'00.0"W e altitude de 546 m.

Do conjunto de dados, dentre todas as variáveis analisadas, a variável índice SPAD1 (*Soil Plant Analysis Development*), sendo ele um equipamento que visa medir o teor de clorofila nas plantas, será utilizada para a apresentação dos resultados. Nesse conjunto de dados, o tratamento 1 representa o controle.

Uma visualização dos dados é apresentada na Figura 3.1, de acordo com o gráfico de pontos:

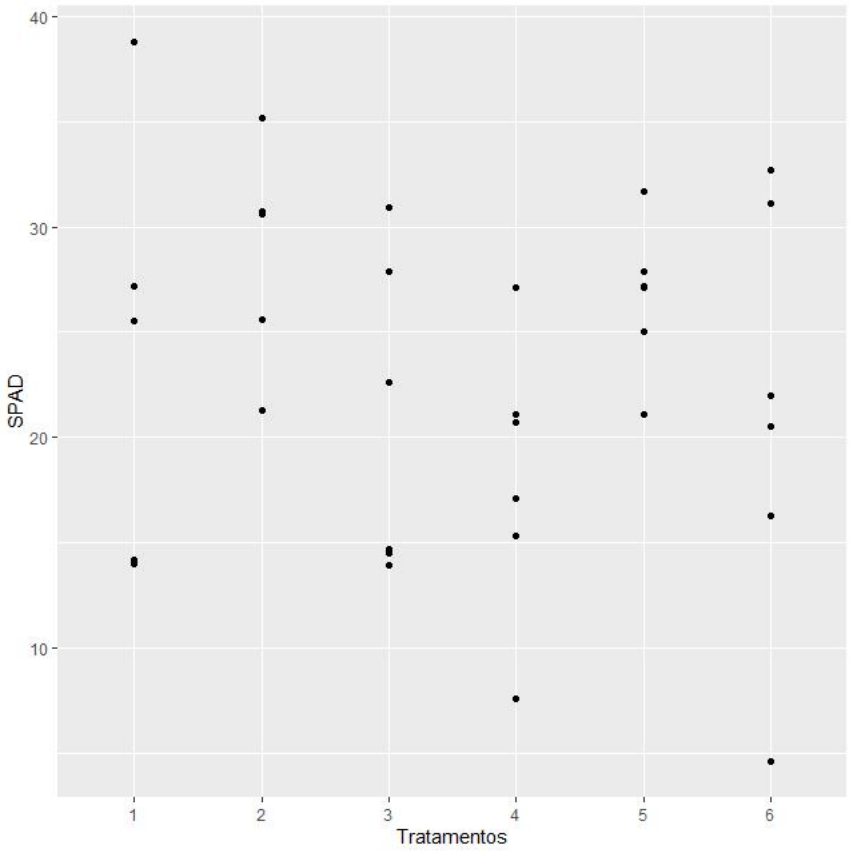

Figura 3.1. Gráfico de pontos para a variável SPAD1 em função dos tratamentos.

3.1.2 Delineamento

Estudos experimentais com nematoides comumente adotam o delineamento em blocos casualizados, sendo que cada parcela ocupada por um tratamento de interesse tem como vizinha uma parcela ocupada pelo tratamento controle, o que é denominado por testemunha pareada.

No presente estudo, foram considerados seis tratamentos mais o controle e uma área experimental com 36 parcelas dispostas em seis linhas e seis colunas. Na Figura 3.2 pode-se observar uma possível croqui para o experimento descrito, para o caso de três blocos:

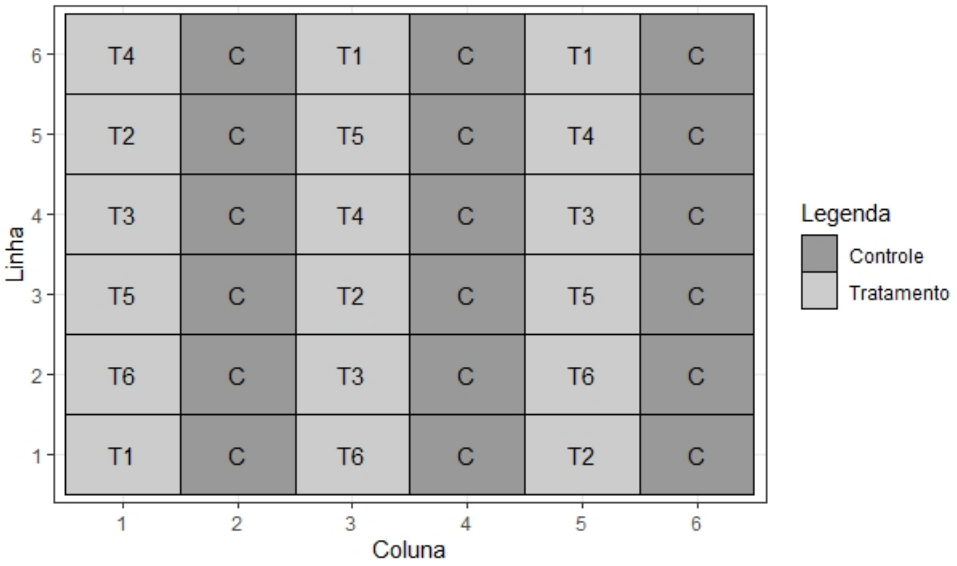

Figura 3.2. Croqui de delineamento em blocos casualizados, com 6 tratamentos e testemunha, distribuídos em 6 blocos, com os blocos intercalados entre tratamentos e testemunha.

3.2 Métodos

3.2.1 Análise dos Dados e Seleção dos Modelos

Para a análise dos dados, inicialmente foi ajustado o modelo conforme a Equação (3.1), em que $\mathbf{y}$ são os valores de SPAD1 observados, $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de parâmetros de efeitos fixos de tratamentos e $\mathbf{X}$ sua respectiva matriz de incidências e $\boldsymbol{\epsilon}$ é o efeito do acaso, tal que $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathrm{N}(\mathbf{0}, \mathbf{R})$.

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \tag{3.1}$$

Para o modelo inicial assumiu-se $\mathbf{R} = \sigma^2\mathbf{I}$, em que $\mathbf{I}$ denota a matriz identidade. Os modelos ajustados posteriormente consideram diferentes estruturas para a matriz $\mathbf{R}$, permitindo heterogeneidade de variâncias.

Os modelos foram comparados por meio do teste da razão de verossimilhanças (2.17), quando encaixados, e também fazendo uso dos critérios de informação AIC (2.18) e BIC (2.20), quando não encaixados.

Após selecionada a estrutura mais apropriada para a matriz de variâncias e covariâncias residual, verificou-se a significância dos efeitos de tratamentos fazendo uso do teste Wald-F (2.23). Em todos os testes o nível de significância adotado foi $\alpha = 0{,}05$. As análises foram realizadas utilizando-se o *software* SAS (*Statistical Analysis System*), na versão *OnDemand* (SAS, 2014), juntamente com o procedimento MIXED.

3.2.2 Comparando Delineamentos

Como mencionado anteriormente, motivado pela análise dos dados, porém assumindo-se um experimento de campo, para o mesmo número de tratamentos e de parcelas, com estas em um arranjo com seis linhas e seis colunas, um delineamento experimental diferente foi gerado e comparado com o delineamento inteiramente casualizado (DIC).

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \tag{3.2}$$

em que $\mathbf{y}$ corresponde ao vetor da variável resposta, $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de efeitos fixos de tratamentos, com matriz de incidências $\mathbf{X}$ e $\boldsymbol{\epsilon}$ é o vetor de erros aleatórios, tal que, $\mathrm{E}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{0}$ e $\mathrm{Var}(\boldsymbol{\epsilon}) = \sigma^2 \mathrm{AR1}(\rho_C) \otimes \mathrm{AR1}(\rho_L)$, com $\otimes$ representando produto Kronecker, ρ_C a correlação residual entre colunas, aqui dada por 0,1 e ρ_L a correlação residual entre linhas, aqui dada por 0,1 e assumiu-se $\sigma^2 = 1$.

O critério adotado foi a medida-C, ou seja, aquele que apresenta a menor média das variâncias dos contrastes simples de médias de tratamentos, permitindo-se 20.000 movimentos aleatórios. Para a obtenção dos delineamentos utilizou-se a biblioteca `od` (Butler, 2014) para o *software* R Core Team (2017). Estes 20.000 movimentos referem-se às mudanças aleatórias dos tratamentos, resultando em um delineamento com o número de movimentos dados. O processo foi repetido 1000 vezes. Os valores para movimentos de busca e número de delineamentos são arbitrários, podendo variar de acordo com o interesse.

Para cada um dos delineamentos obtidos, assim como para o delineamento experimental utilizado, foram calculadas, conforme a equação (2.33), (i) a média da variância dos contrastes simples considerando-se todos os pares possíveis de médias de tratamentos, medida-C, conforme a equação (2.30), (ii) o traço da matriz de variâncias dos efeitos de tratamentos, medida-A e, conforme a equação (2.34), (iii) o determinante da matriz de variâncias dos efeitos de tratamentos, medida-D.

3.2.3 Avaliando Outros Delineamentos

Com o objetivo de verificar, dentre algumas situações possíveis, a existência de um delineamento com melhores características, isto é, que permita uma melhor comparação entre tratamentos sob diferentes cenários, foram gerados delineamentos ótimos.

O modelo para a busca por delineamentos ótimos foi o apresentado na Equação (2.28), entretanto não foram considerados efeitos fixos além dos efeitos de tratamentos e, como vetor de efeitos aleatórios, assumiu-se o efeito pepita ou *nugget*, que refere-se ao

erro das parcelas. Desse modo, o modelo para o delineamento foi dado por:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} + \boldsymbol{\eta}, \tag{3.3}$$

em que, $\boldsymbol{\eta}$ é um n-vetor representando o erro em cada parcela (erro puro), com $\mathrm{E}(\boldsymbol{\eta}) = \mathbf{0}$ e $\mathrm{Var}(\boldsymbol{\eta}) = \sigma_n^2\mathbf{I}$, com $\mathbf{I}$ denotando a matriz identidade e σ_n^2 sendo a variância *nugget*. Os demais termos presentes no modelo são como descritos anteriormente.

A suposição dos erros espacialmente dependentes está relacionada ao fato de a presença de nematoides em uma parcela poder afetar a resposta observada na parcela vizinha.

Foram assumidos dez possíveis combinações para os parâmetros de correlação entre linhas e entre colunas de acordo com processos autorregressivos de primeira ordem separáveis, $\mathbf{R} = \sigma^2\mathrm{AR1}(\rho_C) \otimes \mathrm{AR1}(\rho_L)$, com $\otimes$ representando o produto Kronecker, ρ_C a correlação espacial de coluna e ρ_L sendo a correlação espacial de linha. Adicionalmente, $\sigma^2 = 1$ e $\sigma_n^2 = 0{,}1$, em que, estes valores podem ser mudados conforme a necessidade. Foram tomados, para ρ_C, valores negativos, indicando competição entre as parcelas, e valores positivos, representando a dependência entre as parcelas. Os dez conjuntos de parâmetros utilizados foram:

Tabela 3.1. Valores para os parâmetros de correlação espacial entre linhas e colunas, para cada delineamento otimizado.

	D1	D2	D3	D4	D5	D6	D7	D8	D9	D10
ρ_C	-0,4	-0,2	0	0,2	0,4	-0,4	-0,2	0	0,2	0,4
ρ_L	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4

Para cada um dos dez conjuntos de parâmetros foram obtidos delineamentos C-ótimos permitindo-se 20.000 movimentos, fazendo uso da biblioteca `od` Butler (2014) para o *software* R Core Team (2017). Estes 20.000 movimentos referem-se as mudanças aleatórias dos tratamentos, resultando em um delineamento com o número de movimentos dados. O processo foi repetido 30 vezes para cada conjunto. Os valores para movimentos de busca e número de delineamentos são arbitrários, podendo variar de acordo com o interesse.

Os 300 delineamentos ótimos foram comparados ao delineamento casualizado em blocos e ao delineamento que tem as parcelas diagonais ocupadas pelo controle. A medida de comparação foi a mesma utilizada para a obtenção dos delineamentos ótimos, ou seja, a variância média dos pares de diferenças entre tratamentos, e sendo assim, menores valores são preferíveis.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Dados Reais e Delineamentos

O modelo inicialmente ajustado, conforme a Equação 3.1, considerando os erros independentes e com variâncias homogêneas teve como resíduos os que estão apresentados nas Figuras 4.1 e 4.2.

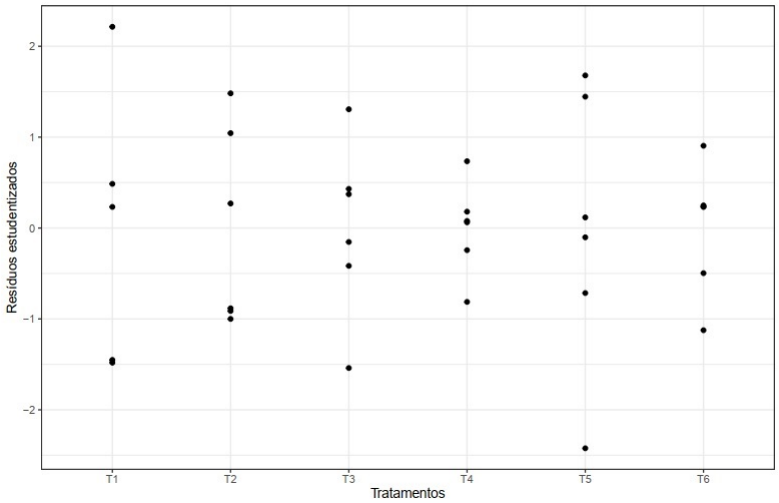

Figura 4.1. Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados versus* tratamentos por tratamentos considerando o primeiro modelo ajustado, em que $\mathbf{R} = \sigma^2\mathbf{I}_{36}$.

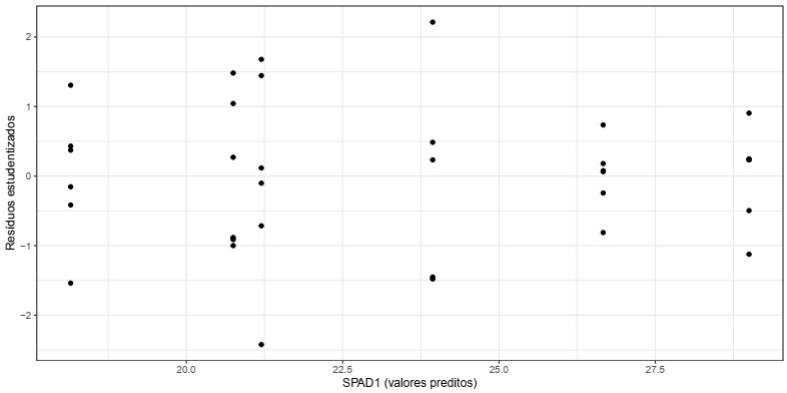

Figura 4.2. Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados* considerando o primeiro modelo ajustado, em que $\mathbf{R} = \sigma^2\mathbf{I}_{36}$.

Como, aparentemente, as variâncias residuais não são homogêneas, o segundo modelo foi ajustado. Nesse caso, a parte fixa se manteve como para o modelo 1, entretanto, a matriz de variâncias e covariâncias residuais, para o conjunto de dados ordenado por nível de tratamento, $\mathbf{R}$ foi representada por,

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_4^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_5^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_6^2 \end{bmatrix} \otimes \mathbf{I}_6.$$

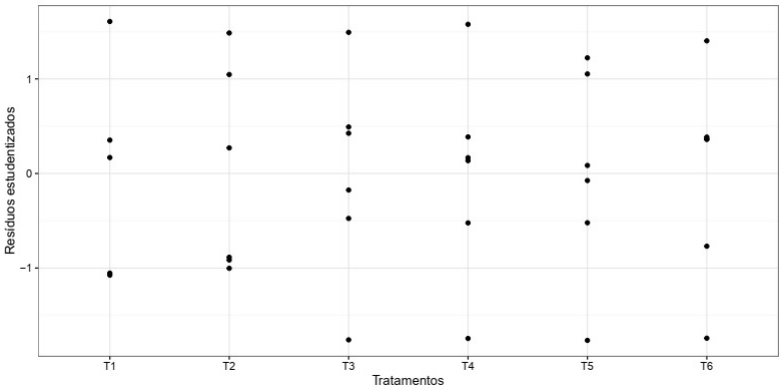

Figura 4.3. Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados* por tratamento, considerando o segundo modelo ajustado, em que $\mathbf{R} = \mathrm{UN}(1) \otimes \mathbf{I}_6$.

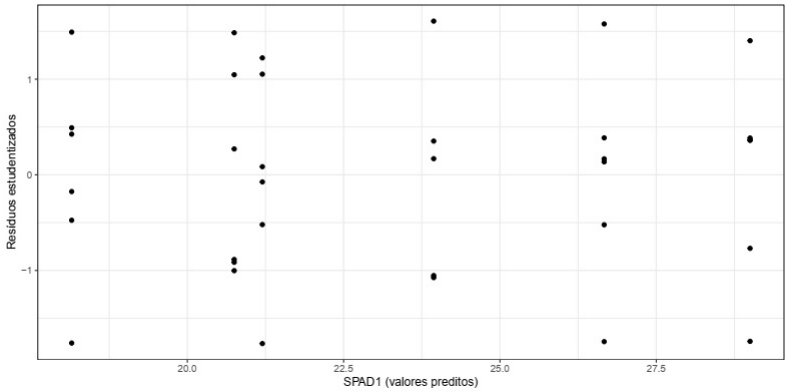

Figura 4.4. Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados* vesus os valores preditos, considerando o modelo ajustado.

Observando-se as Figuras 4.3 e 4.4, é notável a melhora na qualidade do ajuste do modelo quando comparado ao modelo que assume homogeneidade de variâncias. Entretanto, de acordo com o teste da razão de verossimilhanças, não há evidências para afirmar que as variâncias sejam não homogêneas.

Tabela 4.1. Estimativas dos componentes de variância do modelo em que $\mathbf{R}$ é uma matriz UN(1)$\otimes\mathbf{I}_6$.

$\hat{\sigma}_1^2$	$\hat{\sigma}_2^2$	$\hat{\sigma}_3^2$	$\hat{\sigma}_4^2$	$\hat{\sigma}_5^2$	$\hat{\sigma}_6^2$
106,8880	56,0310	43,1670	12,2187	106,1920	23,4600

Avaliando as estimativas dos componentes de variância, dadas na Tabela 4.1 e buscando um modelo mais parcimonioso, ajustou-se o modelo que considera apenas dois parâmetros relacionados à variância residual, tais que, os erros associados às parcelas que receberam aos tratamentos T1 e T5 apresentam variância $\sigma^2_{G_1}$ e os erros associados às parcelas que receberam os demais tratamentos apresentam variância $\sigma^2_{G_2}$. Assim,

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \sigma^2_{G_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^2_{G_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^2_{G_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma^2_{G_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma^2_{G_1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma^2_{G_2} \end{bmatrix} \otimes \mathbf{I}_6.$$

.

Graficamente, a qualidade do ajuste do terceiro modelo pode ser verificada nas Figuras 4.5 e 4.6. Quando comparado ao modelo com homogeneidade de variâncias (Tabela 4.3), verifica-se que o modelo com dois parâmetros relacionados à variância residual deve ser selecionado (valor-p = 0,0239). As estimativas para os dois componentes de variância são apresentados na Tabela 4.2.

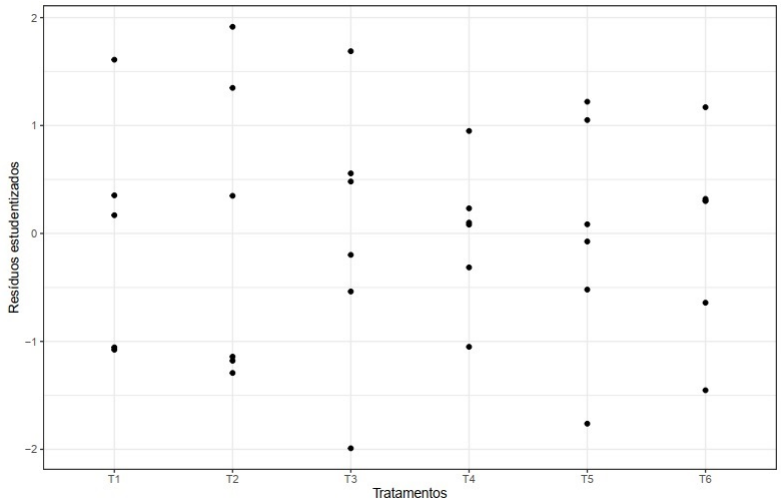

Figura 4.5. Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados versus* tratamento, considerando o terceiro modelo ajustado, em que **R** apresenta dois parâmetros.

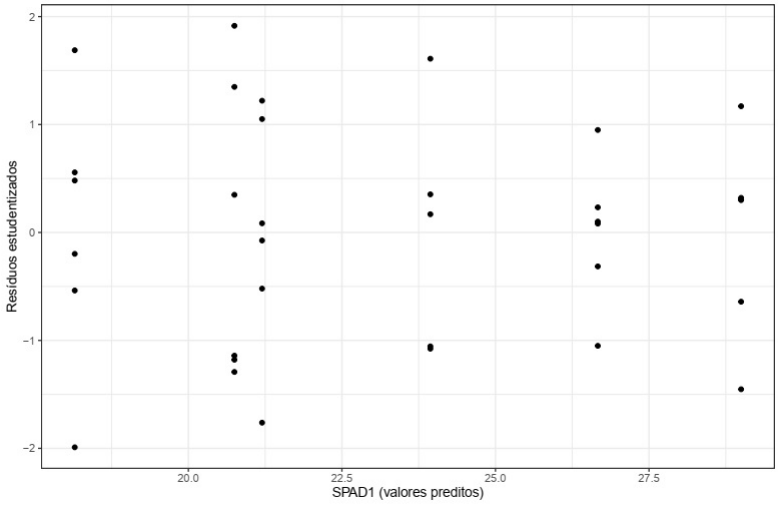

Figura 4.6. Gráfico de pontos para os resíduos *studentizados* em função dos valores preditos, considerando o terceiro modelo ajustado, em que **R** apresenta dois parâmetros.

Tabela 4.2. Estimativas dos componentes de variância do modelo mais parcimonioso.

$\hat{\sigma}^2_{G_1}$	$\hat{\sigma}^2_{G_2}$
106,5013	33,7192

Tabela 4.3. Resultados para os testes das razões de verossimilhanças.

Comparação	gl	Razão das verossimilhanças	valor-p
Modelo 1 *vs* Modelo 2	5	7,6340	0,1776
Modelo 3 *vs* Modelo 2	4	3,1152	0,5387
Modelo 1 *vs* Modelo 3	1	4,5189	0,0335

Os resultados para o teste Wald-F para o modelo selecionado (Modelo 3), são apresentados na Tabela 4.4, na qual pode-se observar um efeito significativo de tratamentos.

Tabela 4.4. Teste Wald-F para o modelo selecionado que apresenta efeitos fixos de tratamentos e heterogeneidade de variâncias residuais, assumindo-se dois parâmetros.

Efeito	graus de liberdade	Soma de quadrados	Estatística de Wald	valor-p
Tratamento	5	13,91	13,91	0,0162

A título de comparação, adicionalmente, foi realizado o teste de Levene (1961), para o qual não houve evidências para a rejeição da hipótese de que as variâncias não fossem homogêneas (valor-p = 0,1925), o que equivale à seleção do modelo inicialmente ajustado (Modelo 1). Para tal modelo, não houve indícios de efeito significativo de tratamentos, uma vez que o valor-p relacionado à estatística de Wald-F para o teste correspondente foi igual a 0,1219, o que evidencia a importância do modelo ajustado, que neste caso, leva a tomada de decisões totalmente diferentes.

4.1.1 Comparando Delineamento

O modelo selecionado para representar o conjunto de dados analisado considera heterogeneidade de variâncias para os erros de acordo com dois grupos, preservando a independência entre os erros. Para seis tratamentos e o mesmo número de repetições e matriz $\mathbf{R}$ de variâncias e covariâncias residuais (supondo que o vetor de variável resposta

esteja ordenado por tratamento), dada por:

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \sigma_{G_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{G_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{G_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{G_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_{G_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_{G_2} \end{bmatrix} \otimes \mathbf{I}_6,$$

em que $\sigma^2_{G_1}$ é a variância residual associada às parcelas ocupadas pelos tratamentos T_1, T_2 ou T_3 e $\sigma^2_{G_2}$ é a variância residual associada às parcelas ocupadas pelos tratamentos T_4, T_5 ou T_6. A matriz de informação é dada pela expressão:

$$\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X},$$

em que $\mathbf{X}$ corresponde à matriz de incidências de tratamentos. Desse modo,

(i) a variância da diferença entre pares de médias de tratamentos do grupo G_1 é:

$$\text{Var}(\mu_{T_i} - \mu_{T_{i'}}) = \frac{1}{3}\sigma^2_{G_1}, \text{ com } i,i' \in \{1,2,3\} \text{ e } i \neq i';$$

(ii) a variância da diferença entre pares de médias de tratamentos do grupo G_2 é:

$$\text{Var}(\mu_{T_i} - \mu_{T_{i'}}) = \frac{1}{3}\sigma^2_{G_2}, \text{ com } i,i' \in \{4,5,6\} \text{ e } i \neq i';$$

(iii) a variância da diferença entre pares de médias de tratamentos em diferentes grupos é:

$$\text{Var}(\mu_{T_i} - \mu_{T_{i'}}) = \frac{1}{6}(\sigma^2_{G_1} + \sigma^2_{G_2}), \text{ com } i \in \{1,2,3\} \text{ e } i' \in \{4,5,6\}.$$

Portanto, a média das variâncias dos contrastes simples de tratamentos será

$$\frac{1}{6}(\sigma^2_{G_1} + \sigma^2_{G_2}),$$

e o DIC é o delineamento ótimo para qualquer que seja a casualização dos tratamentos às parcelas.

Desde que se tenha um modelo fixo e que os erros experimentais sejam independentes, o DIC é o delineamento C-ótimo, A-ótimo e D-ótimo. Entretanto, cabe a pergunta: Para o caso em que os erros sejam correlacionados, a afirmação continua sendo verdadeira? Buscando responder tal pergunta para o caso específico, as médias para as medidas C, A e D obtidas considerando-se os 1000 DIC e os 1000 delineamentos C-ótimos, são apresentadas na Tabela 4.5.

Tabela 4.5. Médias para as medidas C, A e D obtidas considerando-se os 1000 DIC e os 1000 delineamentos C-ótimos.

médias	DIC	Delineamento C-ótimo
medida-C	0,3212	0,3003
medida-A	0,8029	0,7508
medida-D	$1{,}23\times10^{-20}$	$0{,}63\times10^{-20}$

Como esperado, os delineamentos C-ótimos apresentam melhores resultados, menor média para as medidas C, A e D. Quando comparados delineamento a delineamento, em 100% dos casos, ou seja, para os 1000 delineamento, o C-ótimo apresentou menor variância média para os contrastes simples de médias de tratamentos (medida-C) e menor variância do erro de predição do modelo (medida-A). Entretanto, em 24,5% dos casos o DIC apresenta melhores resultados quando utilizada a medida-D para comparação. O que indica que, sob tais condições, um delineamento C-ótimo pode não apresentar a menor variância generalizada do erro de predição.

Apesar do estudo realizado não permitir a definição de um melhor delineamento para todos os casos similares, pois está vinculado à escolha dos parâmetros, ele cria um alerta de que pode ser possível trabalhar com outros delineamentos quando se espera correlação residual.

4.2 Delineamentos Obtidos

Salientando que todos os delineamentos avaliados conservam o número de tratamentos e consideram uma área experimental de 6 linhas por 6 colunas, totalizando 36 parcelas, na Figura 4.7 é apresentado um possível croqui para o caso em que o tratamento controle ocupa parcelas dispostas em diagonal.

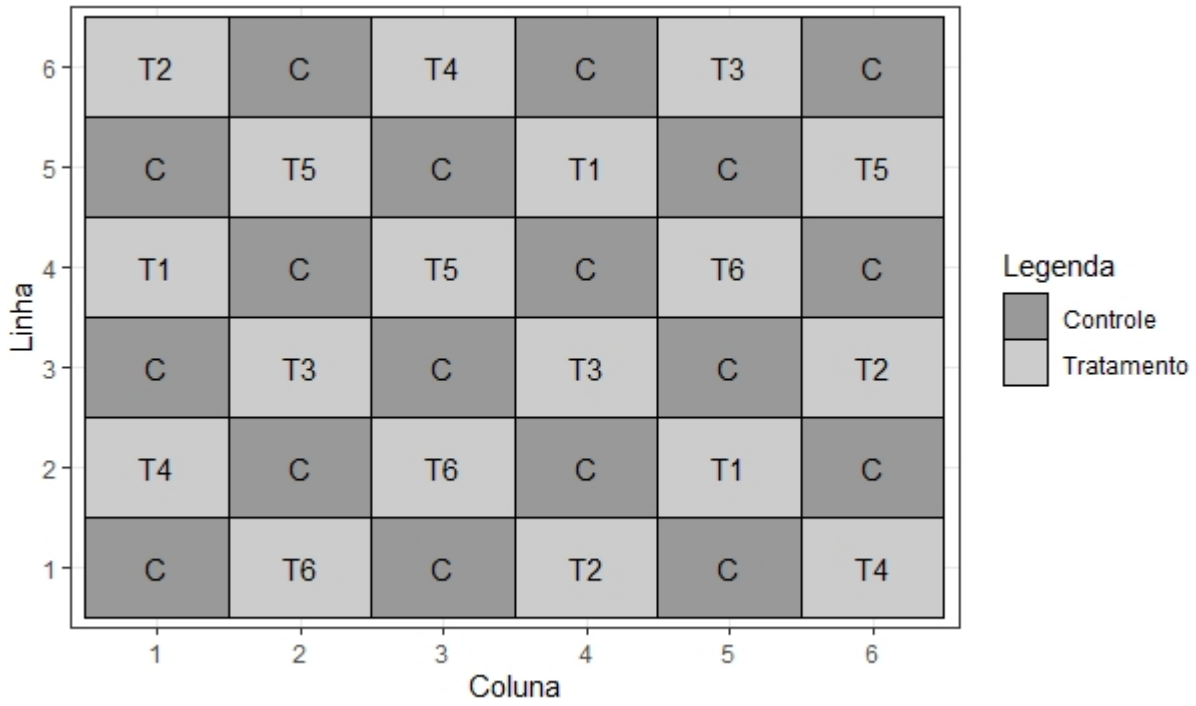

Figura 4.7. Croqui de delineamento apresentando 6 tratamentos, em que os tratamentos e a testemunha são dispostos nas diagonais.

Considerando-se os delineamentos ótimos, a título de exemplo, para cada um dos cinco cenários em que o valor da correlação espacial ρ_L for 0,2, como descritos na Tabela 3.1, é apresentado um croqui, conforme a Figura 4.8.

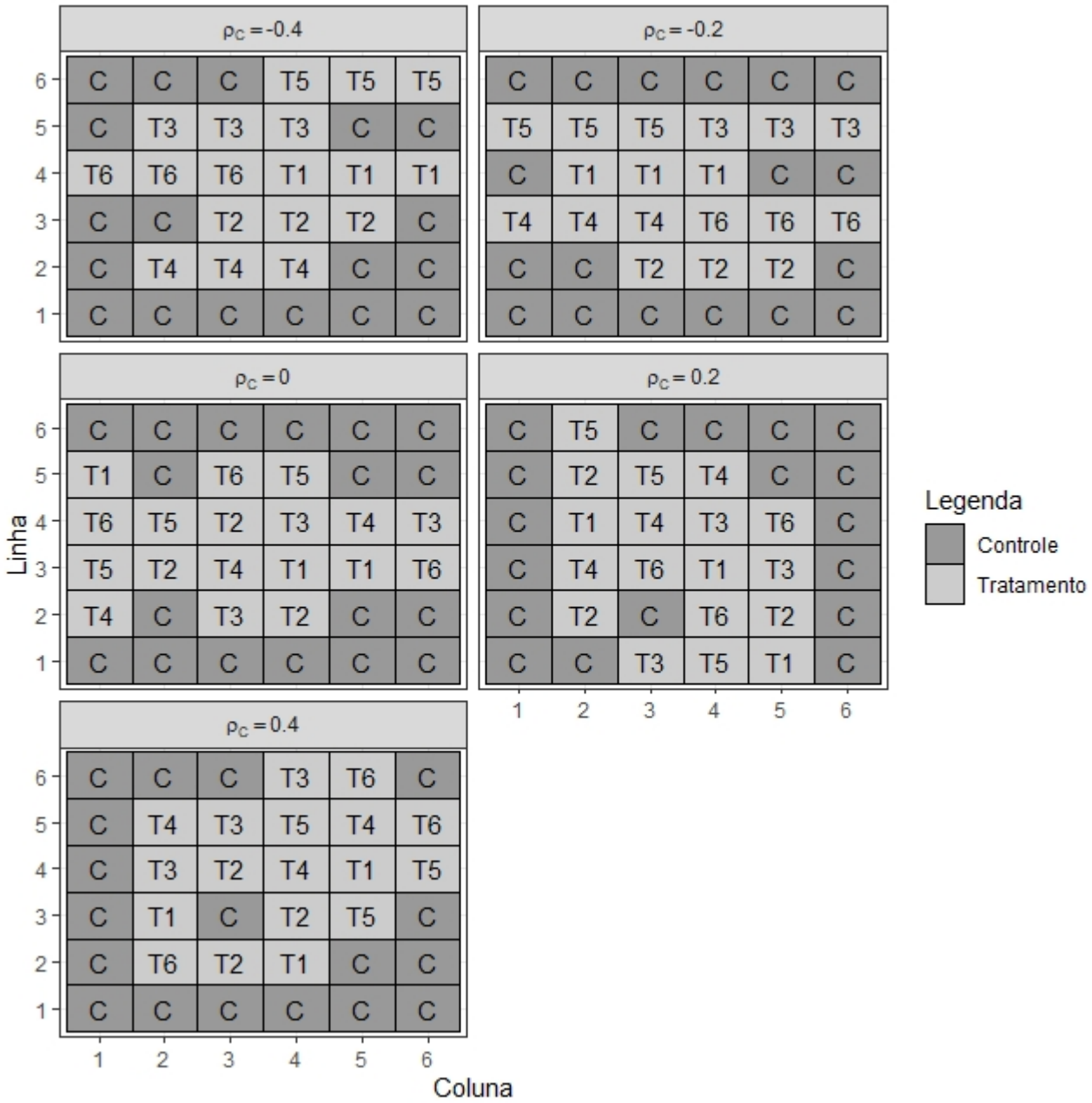

Figura 4.8. Croquis de delineamentos otimizados para o valor de correlação espacial $\rho_L = 0{,}2$ e valor de correlação espacial ρ_C indicado, com estes apresentando 6 tratamentos cada.

Ainda, a título de exemplos, para cada um dos cinco cenários em que o valor da correlação espacial é alterado para $\rho_L = 0{,}4$, e utilizando os cenários apresentados na Tabela 3.1, são apresentados croqui, de acordo com a Figura 4.9.

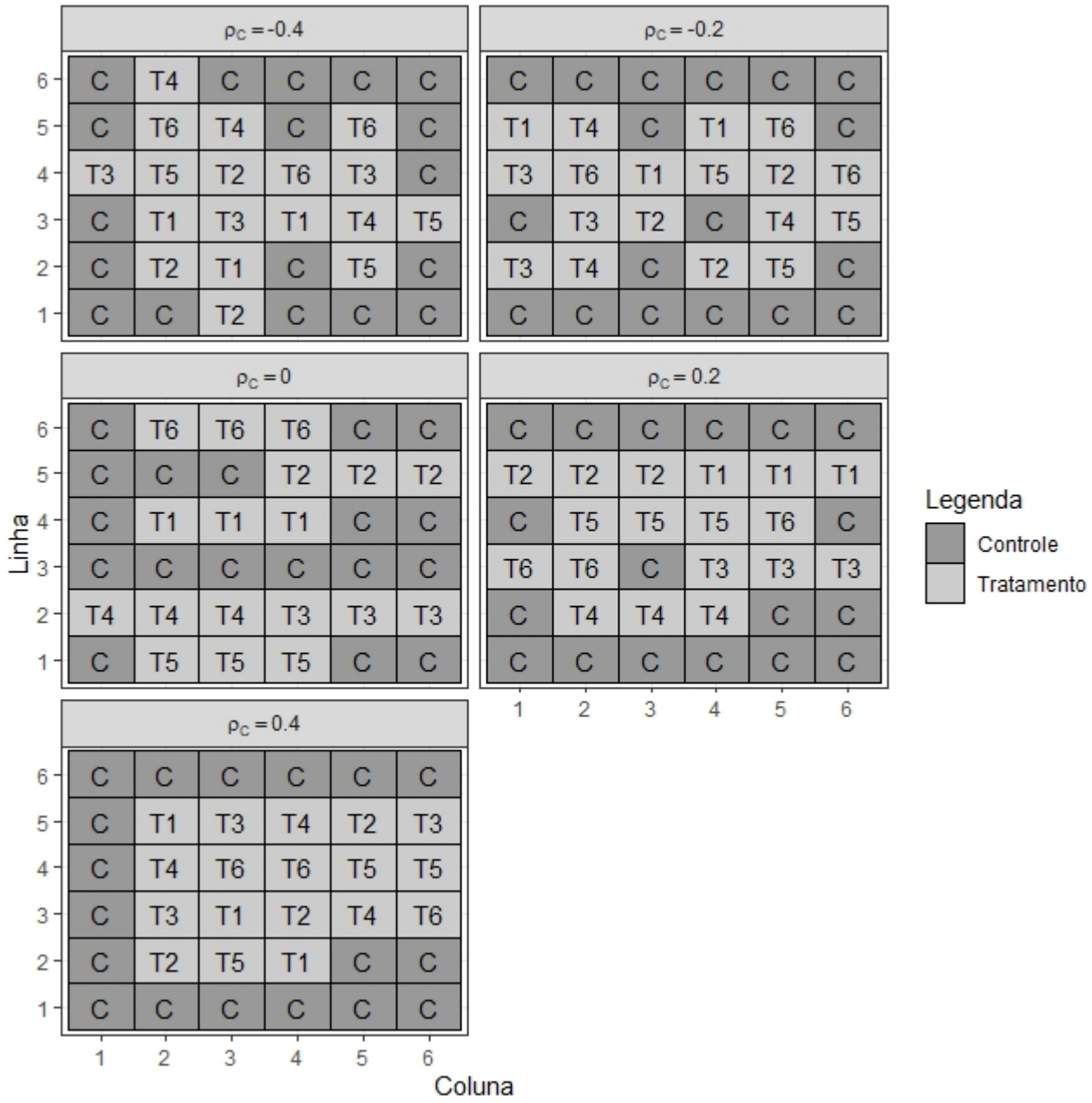

Figura 4.9. Croquis de delineamentos otimizados para o valor de correlação espacial $\rho_L = 0{,}4$ e valor de correlação espacial ρ_C indicado, com estes apresentando 6 tratamentos cada.

Diante dos croquis apresentados, para os casos em que $\rho_L = 0{,}2$, pode-se observar que para ρ_C variando entre $-0{,}4$ e 0, (Figura 4.8), tem-se uma tendência de ocupação de parcelas das linha de fronteira do experimento pelo tratamento controle. Para os casos em que $\rho_C > 0$, essa tendência de ocupação é observada para as parcelas de fronteira em

termos das colunas. Isso se deve ao valor assumido para a correlação espacial utilizado, o que permite uma melhor estimação da correlação entre linhas. Cabe salientar ainda, o fato de que para os valores de $\rho_C = -0{,}4$ e $\rho_C = -0{,}2$, os tratamentos acabam ficando agrupados também em linhas iguais, sendo cada uma, ocorrendo em parcelas vizinhas.

Para os valores de $\rho_L = 0{,}4$, mostrado na Figura 4.9, observam-se as mesmas tendências, parcelas ocupadas pelo controle tendem a ocupar a mesma linha, porém, nessa situação, eles acabam ocupando a primeira e a última linha do croqui (fronteira do experimento), com os mesmos valores de ρ_C, analisados previamente. O comportamento das parcelas ocupadas pelos demais tratamentos foi análogo ao observado para o caso em que $\rho_L = 0{,}2$.

Ressalta-se que, nos outros 29 delineamentos gerados, para cada valor de correlação espacial ρ_L e ρ_C expostos na Tabela 3.1, as mesmas tendências descritas acima, foram observadas.

Como forma de comparar os delineamentos, uma tabela com a média de todos os valores das medidas C calculados são mostrados na Tabela 4.6. É importante ressaltar que, como foram obtidos 30 delineamentos ótimos para cada combinação de valores ρ_L e de ρ_C, foram calculadas as médias de tais valores para cada conjunto. O delineamento padrão, (Figura 3.2), e o de diagonal, (Figura 4.7), são representados por D11 e D12, respectivamente.

Tabela 4.6. Resultado dos valores médios para o critério de otimização C-ótimo em relação a todos os delineamentos apresentados, com os respectivos valores de correlação espacial entre linhas e colunas, e a variância *nugget*, indicado por γ_n.

ρ_L	ρ_C	γ_n	**D1**	**D2**	**D3**	**D4**	**D5**	**D6**	**D7**	**D8**	**D9**	**D10**	**D11**	**D12**
0,2	−0,4	0,1	**0,3384**	0,3396	0,4987	0,5125	0,5088	0,3415	0,3485	0,4908	0,5246	0,5157	0,5293	0,5033
	−0,2		0,4615	**0,4611**	0,5616	0,5823	0,5850	0,4630	0,4669	0,5574	0,5842	0,5847	0,5850	0,5763
	0		0,5968	0,5938	0,5828	0,5862	0,5915	0,5947	0,5906	**0,5827**	0,5847	0,5886	0,5969	0,6035
	0,2		0,7299	0,7243	0,5633	**0,5296**	0,5322	0,7219	0,7059	0,5656	0,5326	0,5322	0,5551	0,5738
	0,4		0,8292	0,8260	0,5040	0,4320	**0,4286**	0,8157	0,7880	0,5057	0,4419	0,4336	0,4660	0,4910
0,4	−0,4	0,1	**0,2912**	0,2893	0,4042	0,4285	0,4328	**0,2912**	0,2925	0,3978	0,4354	0,4349	0,4872	0,4187
	−0,2		0,3905	0,3860	0,4508	0,4772	0,4886	0,3883	**0,3856**	0,4474	0,4750	0,4826	0,5155	0,4793
	0		0,4989	0,4912	**0,4674**	0,4757	0,4894	0,4932	0,4834	**0,4674**	0,4705	0,4799	0,5140	0,5056
	0,2		0,6051	0,5947	0,4549	0,4305	0,4407	0,5944	0,5758	0,4569	**0,4285**	0,4329	0,4743	0,4888
	0,4		0,6847	0,6761	0,4132	**0,3558**	0,3591	0,6697	0,6438	0,4149	0,3595	**0,3558**	0,3999	0,4293

De acordo com a Tabela 4.6, pode-se observar que os delineamentos otimizados, considerando os correspondentes parâmetros, apresentaram menor variância média, indicando que seriam melhores para comparar os efeitos dos tratamentos. Esse fato é de importância para uma comparação a ser feita, entre os delineamentos ótimos gerados, com o usual e o da diagonal.

Observa-se que, independentemente do valor assumido para a correlação residual entre linhas dos dados, $\rho_L = 0{,}2$ ou $\rho_L = 0{,}4$, para um dado ρ_C, o delineamento é pouco afetado pela suposição de ρ_L no modelo. O mesmo não ocorre a respeito da correlação residual entre colunas, ou seja, se é esperada correlação residual entre colunas negativa para os dados, o ideal é que o delineamento assuma valor negativo para tal parâmetro. E, se for esperada correlação residual positiva entre colunas para dos dados, os melhores resultados estão relacionados aos delineamentos obtidos sub tal suposição.

Sempre que os dados apresentaram $\rho_C \leq 0$, os delineamentos ótimos que assumiram correlação residual entre colunas igual a zero apresentaram melhores resultados, quando comparados ao delineamento em blocos e ao delineamento com testemunha nas diagonais.

Adicionalmente, comparando o delineamento em blocos casualizados com testemunha pareada nas parcelas e o delineamento com testemunha nas diagonais, o segundo apresenta melhores resultados quando os dados apresentam correlação residual entre colunas negativa e quando esta é positiva o delineamento em blocos teve um melhor desempenho.

5 CONCLUSÕES

Ao se analisar o conjunto de dados para a variável resposta SPAD1, o modelo selecionado apresentou heterogeneidade de variâncias residuais.

Assumindo-se que os erros possam ser correlacionados, foram obtidos delineamentos ótimos. Os delineamentos ótimos foram comparados ao delineamento inteiramente casualizado, sob os mesmos parâmetros e pôde-se verificar que os delineamentos ótimos apresentaram menor média para as variâncias dos contrastes simples de tratamentos e menor variância para o erro de predição, entretanto, nem sempre apresentou a menor variância generalizada. Nesse sentido, recomenda-se uma investigação mais detalhada a respeito dos parâmetros do modelo para a obtenção do delineamento e a possível utilização de delineamentos ótimos quando a correlação entre os erros é esperada.

No segundo estudo realizado, os delineamentos ótimos, obtidos a partir dos verdadeiros valores para os parâmetros, foram os que apresentaram melhores resultados, quando comparados ao delineamento casualizado em blocos e ao delineamento que apresenta o tratamento controle sistematicamente atribuídos às parcelas na diagonal do experimento, sendo os melhores resultados relacionados aos delineamentos gerados considerando-se os verdadeiros valores assumidos para os dados, apesar de que Hoefler et al. (2020) apresentar que o delineamento usual é o mais utilizado. Destaca-se a importância de ter conhecimento a respeito dos parâmetros de correlação, ao se obter um delineamento ótimo, pois ao assumir uma correlação negativa (ou positiva) na busca de um delineamento, pode prejudicar as comparações de interesse.

Para trabalhos futuros, pretende-se avaliar a qualidade dos delineamentos envolvendo testemunha pareada, nos quais os efeitos de vizinhança entre parcelas sejam consideradas aleatórios, assim como o efeito de tratamentos. Assim, espera-se obter outros delineamentos ótimos, diferentes dos que foram obtidos neste estudos, e compará-los, para obter os que apresentem as melhores estimativas de parâmetros, por meio de estudos de simulação. Além disso, a utilização de outros critérios para a comparação dos mesmos.

REFERÊNCIAS

Akaike, H. (1974). A new look at the statistical model identification. *IEEE transactions on automatic control*, 19(6):716–723.

Atkinson, A., Donev, A., Tobias, R., et al. (2007). *Optimum experimental designs, with SAS*, volume 34. Oxford University Press.

Banzatto, D. A. e Kronka, S. N. (2006). *Experimentação agrícola*. FUNEP, Jaboticabal, 4 edition.

Bozdogan, H. (1987). Model selection and akaike's information criterion (aic): The general theory and its analytical extensions. *Psychometrika*, 52(3):345–370.

Brien, C. (2017). *dae: Functions Useful in the Design and ANOVA of Experiments*. R package version 3.0-13.

Brien, C. J. (2010). *Design and randomization-based analysis of experiments in R*. Australia.

Butler, D. (2014). *od: generate optimal designs*. R package version 0.75.

Charchar, J. (1999). Nematóide em hortaliças. *Embrapa Hortaliças-Circular Técnica (INFOTECA-E)*.

Chernoff, H. (1953). Locally optimal designs for estimating parameters. *The Annals of Mathematical Statistics*, pages 586–602.

Da Costa, S. C. (2003). *Modelos Lineares Generalizados Mistos para Dados Longitudinais*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba.

Dean, A., Voss, D., e Draguljić, D. (2017). *Design and Analysis of Experiments*. Springer Texts in Statistics. Springer International Publishing.

Emiliano, P. C., Veiga, E. P., Vivanco, M. J., e Menezes, F. S. (2010). Critérios de informação de akaike versus bayesiano: análise comparativa. *19º Simpósio Nacional de Probabilidade e Estatística*.

Galwey, N. (2007). *Introduction to Mixed Modelling: Beyond Regression and Analysis of Variance*. Wiley.

Gilmour, S. G. e Trinca, L. A. (2012). Optimum design of experiments for statistical inference. *Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)*, 61(3):345–401.

Gomes, F. P. (1963). *Curso de estatística experimental*. Universidade de São Paulo, Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba, 13 edition.

Guimarães, P. R. B. (1994). Modelo linear misto de laird-ware: Predição de efeitos aleatórios e estimação de parâmetros via filtro de kalman. Master's thesis, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matematica, Estatistica e Ciencia da Computação, Campinas.

Hoefler, R., González-Barrios, P., Bhatta, M., Nunes, J. A., Berro, I., Nalin, R. S., Borges, A., Covarrubias, E., Diaz-Garcia, L., Quincke, M., et al. (2020). Do spatial designs outperform classic experimental designs? *Journal of Agricultural, Biological and Environmental Statistics*, 25(4):523–552.

Hooks, T., Marx, D., Kachman, S., e Pedersen, J. (2009). Optimality criteria for models with random effects. *Revista Colombiana de Estadistica*, 32(1):17–31.

Hrong-Tai Fai, A. e Cornelius, P. L. (1996). Approximate f-tests of multiple degree of freedom hypotheses in generalized least squares analyses of unbalanced split-plot experiments. *Journal of statistical computation and simulation*, 54(4):363–378.

John, J. e Williams, E. (1995). *Cyclic and Computer Generated Designs, Second Edition*. Chapman & Hall/CRC Monographs on Statistics & Applied Probability. Taylor & Francis, 2 edition.

Kenward, M. G. e Roger, J. H. (1997). Small sample inference for fixed effects from restricted maximum likelihood. *Biometrics*, pages 983–997.

Kiefer, J. (1959). Optimum experimental designs. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 21(2):272–319.

Laird, N. M. e Ware, J. H. (1982). Random-effects models for longitudinal data. *Biometrics*, 38(4):963–974.

Lawson, J. (2014). *Design and Analysis of Experiments with R*, volume 115. CRC Press.

Levene, H. (1961). Robust tests for equality of variances. *Contributions to probability and statistics. Essays in honor of Harold Hotelling*, pages 279–292.

Littell, R. C., Henry, P., e Ammerman, C. B. (1998). Statistical analysis of repeated measures data using sas procedures. *Journal of animal science*, 76(4):1216–1231.

Matsushita, R. Y. (1994). Modelos longitudinais mistos com correlação serial nos erros. Master's thesis, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, Campinas.

Montgomery, D. (2012). *Design and Analysis of Experiments, 8th Edition*. John Wiley & Sons, Incorporated.

Oehlert, G. W. (2000). *A First Course in Design and Analysis of Experiments*. W. H. Freeman.

Patterson, H. D. e Thompson, R. (1971). Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. *Biometrika*, 58(3):545–554.

Pimentel-Gomes, F. e Garcia, C. H. (2002). *Estatística aplicada a experimentos agronômicos e florestais: exposição com exemplos e orientações para uso de aplicativos*. FEALQ.

Pinheiro, J. C. e Bates, D. M. (2000). *Mixed-Effects Models in S and S-PLUS*. Statistics and Computing. Springer New York.

R Core Team (2017). *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria.

Ritzinger, C. (2013). Nematoides. *Embrapa Mandioca e Fruticultura-Capítulo em livro científico (ALICE)*.

Rocha, G. S. (2015). *Modelos lineares mistos para dados longitudinais em ensaio fatorial com tratamento adicional*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba.

Santos, M. B. d. (2010). Delineamentos ótimos para experimentos farmacocinéticos. Master's thesis, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Instituto de Biociências de Botucatu, Botucatu.

SAS, I. (2014). *SAS/QC 13.2: User's Guide*. SAS Institute.

Satterthwaite, F. E. (1946). An approximate distribution of estimates of variance components. *Biometrics bulletin*, 2(6):110–114.

Schwarz, G. et al. (1978). Estimating the dimension of a model. *The annals of statistics*, 6(2):461–464.

Shah, K. e Sinha, B. (1989). *Theory of Optimal Designs*. 3Island Press.

Silva, M. A. (2014). Critérios compostos para delineamentos ótimos robustos. Master's thesis, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Instituto de Biociências de Botucatu, Botucatu.

Singer, J. M. e Andrade, D. F. (1986). Análise de dados longitudinais. *Simpósio Nacional de Probabilidade e Estatística*, 7.

Verbeke, G. e Molenberghs, G. (2008). *Linear Mixed Models for Longitudinal Data*. Springer Series in Statistics. Springer New York.

Wald, A. (1943). On the efficient design of statistical investigations. *The annals of mathematical statistics*, 14(2):134–140.

West, B., Welch, K., e Galecki, A. (2006). *Linear Mixed Models: A Practical Guide Using Statistical Software*. Taylor & Francis.

Xavier, L. H. (2000). Modelos univariado e multivariado para análise de medidas repetidas e verificação da acurácia do modelo univariado por meio de simulação. Master's thesis, Universidade de São Paulo, Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba.

APÊNDICES

Apêndice I - Programação utilizada para a geração de delineamentos ótimos

```
# Geração dos delineamentos
# Leitura das bibliotecas utilizadas
library(dae)
library(od)
setwd("C:/Users/Bruno Koga/Downloads/Mestrado")
# setwd("colocar aqui o caminho para a pasta na qual deseja salvar os delineamentos obtidos")
Delineamento.od <- function(
phic = -0.4, # correlação residual entre colunas
phir = 0.2, # correlação residual entre linhas
maxit = 20000, # número de movimentos para busca do delineamento ótimo
criterio = "avalue", # critério de busca do delineamento ótimo
experimento # nome dado ao experimento (para poder salvar com esse nome depois de gerado) ){
Layout <- fac.gen(list(Columns = 6,
Rows = 6
))
Layout$Treat <- as.factor(sample(c(rep(paste("T", 1:6, sep = ), times = 3),
rep("C", times = 18))))
# valores para os parâmetros de variância no modelo para o delineamento
par.init <- od.init(" Columns:Rows"= 1,
" Columns:Rows|Columns"= phic,
" Columns:Rows|Rows"= phir)
Layout.od<- od(fixed =   Treat,
rcov =   ar1(Columns):ar1(Rows),
permute =   Treat,
Rstart = par.init,
method = criterio,
maxit = maxit,
data = Layout)
name <- paste(paste(paste(experimento, phic, sep = "_"),
phir, sep = "_"),
```

```
criterio, sep = "_")
# para exportar o delineamento ótimo como arquivo .csv
# irá salvar o arquivo no diretório de trabalho indicado no R
write.table(Layout.od$design,
file = paste(paste("Delineamento", name, sep = ), ".csv", sep = ),
row.names = FALSE, sep = ",")
write.table(Layout.od$criterion,
file = paste(paste("Crioterion", name, sep = ), ".csv", sep = ),
row.names = FALSE, sep = ",")
}
Experimento1 <- Delineamento.od(
phic = -0.4, # correlação residual entre colunas
phir = 0.2, # correlação residual entre linhas
maxit = 20000, # número de movimentos para busca do delineamento ótimo
criterio = "avalue", # critério de busca do delineamento ótimo
experimento = "Exp1"# nome dado ao experimento (para poder salvar com esse
nome
depois de gerado)
)
```