MÉTODOS LINEARES NAS ESTIMATIVAS DOS PARÂMETROS DO MODELO INTEIRAMENTE CASUALIZADO

CRISTINA F. F. GONÇALVES[a]
SAMUEL F. SANCHES[b]
NARESH K. SHARMA[c]

RESUMO

São apresentados neste trabalho algumas aplicações de métodos lineares nas estimativas dos parâmetros do modelo inteiramente casualizado. Nos propusemos a este trabalho porque os resultados aqui obtidos atendem às necessidades práticas na área de Estatística, com aplicações em Agronomia, Veterinária, Ciências Sociais, Biologia e outras. A metodologia que utilizamos para solucionar sistemas lineares, quando deparamos com matrizes singulares, consiste em "diminuir" o número de colunas da matriz, de maneira que ela se torne inversivo, facilitando assim o desenvolvimento de toda a teoria da estimação estatística.

PALAVRAS-CHAVE: *Matriz elementar, Matriz de Dispersão, Somas de Quadrados.*

1. INTRODUÇÃO

Solucionar sistemas de equações lineares, quando a matriz em questão é singular, tem sido um dos principais problemas enfrentados pelos matemáticos, especialmente os estatísticos.

Ocorrem situações em que a matriz, apesar de ser quadrada, não é definida positiva, ou, ao menos uma de suas raízes características é nula, ou seu posto é menor que sua ordem, não existindo a sua inversa.

A noção de inversa às matrizes singulares tem sido um tema bastante debatido, desde o início deste século.

Ao se fazer a opção por processos matriciais, para a solução de sistemas lineares que deparem com matrizes singulares, deve-se utilizar um conceito mais abrangente e menos restritivo de matriz inversa e, um desses conceitos é o de Inversa Generalizada.

RAO[9] encontrou uma Inversa Generalizada para uma matriz singular que aparecia nas equações da teoria dos mínimos quadrados e a denominou pseudoinversa, mostrando ainda que, na resolução das equações normais, a pseudoinversa se comporta da mesma maneira que uma inversa regular de uma matriz não singular.

SEARLE[12] desenvolveu um algorítmo para se obter também uma Inversa Generalizada, denominada Inversa Condicional. MAULE[8] apresentou um trabalho recente, onde aborda a Inversa Generalizada de Quadrados Mínimos e a Inversa Generalizada de Moore-Penrose.

Por outro lado, IEMMA[7], apresentou uma alternativa interessante para a solução de equações lineares cujo sistema é indeterminado, através da "complementação" do posto da matriz singular.

2. MÉTODOS

2.1. Modelo Matemático

Estudamos o delineamento inteiramente casualizado, cujo modelo é

$$Y_{ij} = m + t_i + e_{ij}\text{, com } i = 1,2,\ldots, I \qquad j = 1,2,\ldots, n_i$$

onde

Y_{ij} é a j-ésima observação do i-ésimo tratamento;

m é a média geral teórica, admitida fixa;

t_i é o efeito do i-ésimo tratamento, suposto aleatório;

e_{ij} são os erros aleatórios, supostos independentes com distribuição normal de média zero e variância σ_e^2, isto é, $e_{ij} \sim N(0, \sigma_e^2)$

Este modelo pode ser escrito na forma matricial, na forma

$$Y = X\beta + \varepsilon$$

onde

Y é a matriz das observações Y_{ij}, de ordem n.x1, com $n. = \sum_{i=1}^{I} n_i$, onde n_i é o número de observações do i-ésimo tratamento;

β é a matriz dos parâmetros m e t_i, de ordem (I+1)x1;

[a] Mestre do Departamento de Matemática Aplicada da Universidade Estadual de Londrina, Paraná.
[b] Prof. Dr. do Departamento de Matemática Aplicada da Universidade Estadual de Londrina, Parana.
[c] Prof. Dr. do Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, Paraná.

X é a matriz dos coeficientes dos parâmetros m e t_i, de ordem n.x(I+1);

& é a matriz dos erros e_{ij}, de ordem n.x1, onde & $\sim$ N $(\phi, I\sigma_e^2)$

2.2. Equações Normais

Apresentamos a seguir algumas proposições necessárias para o desenvolvimento do trabalho, cujas demonstrações podem ser encontradas no trabalho de GONÇALVES[4].

Proposição 2.2.1 – O sistema de equações normais é dado por $X'X\beta = X'Y$.

Proposição 2.2.2 -Apenas uma restrição será suficiente para determinar uma solução particular do sistema $X'X\hat{\beta} = X'Y$.

Qualquer restrição que concorde com as condições já existentes pode ser usada, porém, a mais geral é $\sum_i n_i t_i = 0$. Se tivermos $n_1 = n_2 = \ldots = n_I$ uma restrição natural será $\sum_i t_i = 0$. Pode-se fazer também $\hat{t}_p = 0$, para um dado p, ou qualquer outra restrição.

Utilizamos neste trabalho a restrição $\sum_i t_i = 0$, por ser a mais prática e por não interferir nas condições iniciais, como veremos mais adiante.

2.3. Transformação da Matriz X'X

Consideremos as equações normais $X'X\hat{\beta} = X'Y$. É trivial que $X'XI\hat{\beta} = X'Y$, onde $I = EE^{-1}$, sendo E uma matriz elementar da forma:

$E = E_{2,\ I+1(-1)} \cdot E_{3,\ I+1(-1)} \cdot \ldots \cdot E_{I,I+1(-1)}$, onde $E_{ij}(c)$ significa "C vezes a j-ésima coluna somada na i-ésima coluna".

Assim, teremos $X'X\ E\ E^{-1}\hat{\beta} = X'Y$. Como se sabe, a matriz X'X é simétrica; para se conservar esta simetria é necessário fazermos $E'X'X\ EE^{-1}\hat{\beta} = E'X'Y$.

Denominemos $A = E'X'XE$ e $A^* = E^*B$, onde B é a matriz aumentada do sistema e $E^* = E_{2,I+1(1)} \cdot E_{3,\ I+1(2)} \ldots E_{I,\ I+1(1)}$. A estrela indica que estamos operando com as linhas da matriz.

Proposição 2.3.1 –

(i) Posto de $A^* = I$

(ii) Posto de A = I, onde I é o número de tratamentos do experimento.

Esta proposição nos garante que, para a solução do sistema, podemos retirar uma linha qualquer da matriz A, sem perda nos resultados. Iremos, pois, retirar a última linha da matriz A.

Por outro lado, como utilizamos a restrição $\sum_i \hat{t}_i = O$ e, como a matriz resultante do produto $E^{-1}\hat{\beta}$ será

$$E^{-1}\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{m} \\ \hat{t}_1 \\ \hat{t}_2 \\ \ldots \\ \hat{t}_{I-1} \\ \hat{t}_1+\hat{t}_2+\ldots+\hat{t}_I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{m} \\ \hat{t}_1 \\ t_2 \\ \ldots \\ \hat{t}_{I-1} \\ 0 \end{bmatrix}$$

isso possibilita também a retirada da última coluna de A, sem qualquer prejuízo nos resultados, visto que esta coluna irá se anular ao se efetuar o produto $AE^{-1}\hat{\beta}$.

2.4. Modelo Matemático com X'X transformada.

O sistema de equações, após as transformações efetuadas, ficará da seguinte forma:

$$\underset{I\ I}{\begin{bmatrix} n. & n_1-n_I & n_2-n_I & \ldots & n_{I-1}-n_I \\ n_1-n_I & n_1+n_I & n_I & \ldots & n_I \\ n_2-n_I & n_I & n_2+n_I & \ldots & n_I \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ n_{I-1}-n_I & n_I & n_I & \ldots & n_{I-1}+n_I \end{bmatrix}} \underset{I\ \ \ 1}{\begin{bmatrix} \hat{m} \\ \hat{t}_1 \\ \hat{t}_2 \\ \ldots \\ \hat{t}_{I-1} \end{bmatrix}} = \underset{I\ \ \ 1}{\begin{bmatrix} G \\ T_1 - T_I \\ T_2 - T_I \\ \ldots \\ T_{I-1} - T_I \end{bmatrix}}$$

onde a primeira matriz à esquerda é inversível, daí a facilidade de se estimar os parâmetros do modelo.

Denominemos a matriz da esquerda por Z'Z, onde

$$Z = \underset{n.\ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ I}{\begin{bmatrix} 1\ 1\ 0\ 0\ 0 \ldots\ldots 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 1\ 1\ 0\ 0\ 0 \ldots\ldots 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 1\ 0\ 1\ 0\ 0 \ldots\ldots 0 \\ 1\ 0\ 1\ 0\ 0 \ldots\ldots 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 1\ 0\ 0\ 0\ 0 \ldots\ldots 1 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 1\ 0\ 0\ 0\ 0 \ldots\ldots 1 \\ 1\ {-1}\ {-1}\ {-1}\ {-1} \ldots\ldots {-1} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 1\ {-1}\ {-1}\ {-1}\ {-1} \ldots\ldots {-1} \end{bmatrix}}$$

a matriz das estimativas dos parâmetros por $\hat{\theta}$ e a matriz do 2º membro por Z'W, onde W = Y.

Daí podemos escrever $Z'Z\ \hat{\theta} = Z'W$, cujo modelo, na forma matricial, será $W = Z\ \hat{\theta} + \gamma$, onde γ = &

2.5. Equações Normais com X'X Transformada

Proposição 2.5.1 – O sistema de equações normais de $W = Z\theta + \gamma$ é dado por $Z'Z\hat{\theta} = Z'W$.

Proposição 2.5.2. – A matriz $\hat{\theta}$ é dada por

$$\hat{\theta} = \begin{pmatrix} \frac{1}{I}\sum_i \hat{m}_i \\ \hat{m}_1 - \hat{m} \\ \hat{m}_2 - \hat{m} \\ \cdots\cdots \\ \hat{m}_{I-1} - \hat{m} \end{pmatrix}_{I \cdot 1} ; i = 1, 2, \ldots I$$

2.6. Distribuição de W e de $\hat{\theta}$

Proposição 2.6.1 – $W \sim N(Z\theta ; I\sigma_e^2)$

Proposição 2.6.2 – $\hat{\theta} \sim N[\theta ; (Z'Z)^{-1}\sigma_e^2]$

2.7. Análise de Variância

Para construírmos o quadro de análise de variância necessitamos de alguns resultados importantes, que apresentamos em forma de proposições e teoremas.

2.7.1 Somas de Quadrados

Proposição 2.7.1.1 – A soma de quadrados de resíduos é dada por $SQR = W'W - \hat{\theta}'Z'W$.

Proposição 2.7.1.2 – As somas de quadrados totais e somas de quadrados de tratamentos são, respectivamente, dadas por

(i) $SQt = W'W - C$

(ii) $SQT = \hat{\theta}'Z'W - C$, com $C = \frac{W'UU'W}{U'U}$, onde a matriz U é definida como

$$U = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \cdots \\ 1 \end{pmatrix}_{n. \; 1}$$

Proposição 2.7.1.3 – (1) $SQt = \sum_{i,j} y_{ij}^2 - C$

(ii) $SQT = \sum_i \frac{T_i^2}{n_i} - C$, com $C = \frac{G^2}{n.}$

2.7.2 Componentes de Variância

Neste tópico apresentamos os quadrados médios de tratamentos e de resíduos, denotados, respectivamente, por QMT e QMR e suas esperanças matemáticas.

Os quadrados médios são definidos da seguinte forma

$$QMT = \frac{SQT}{I-1} \quad e \quad QMR = \frac{SQR}{n.-I}$$

Proposição 2.7.2.1 – $E(QMT) = \frac{1}{I-1}\left(n. - \frac{\sum_i n_i^2}{n.}\right) \sigma_t^2 + \sigma_e^2$

Proposição 2.7.2.2. – $E(QMR) = \sigma_e^2$

2.7.3. Independência Estatística

Teorema 2.7.3.1 – Se $W \sim N(\mu, v)$

(i) $E(W'AW) = tr(AV) + \mu'A\mu$,

(ii) $COV(W, W'AW) = 2VA\mu$.

Teorema 2.7.3.2 – Se $W \sim N(\mu, V)$, então W'AW e BW são independentes se, e somente se, $BVA = \phi$

Corolário 2.7.3.3 – SQT e SQR são independentes.

Teorema 2.7.3.4 – Se $W \sim N(\mu, v)$,

$W'AW \sim \chi^2 [\rho(A) ; \frac{1}{2}\mu'A\mu]$ se, e somente se, AV é idempotente.

2.7.4 Distribuição das Somas de Quadrados

Corolário 2.7.4.1 – SQR/σ_e^2 tem distribuição de $X^2_{(n.-I)}$

Corolário 2.7.4.2 – C/σ_e^2 tem distribuição de

$$\chi^2 \left[1; \frac{1}{2\sigma_e^2 n.} \theta'Z'UU'Z\theta\right]$$

Corolário 2.7.4.3 – SQT/σ_e^2 tem distribuição de

$$\chi^2 \left[I-1; \frac{k}{2\sigma_e^2}\right], \text{ com } K = \frac{\theta'Z'UU'Z\theta}{n.} - \theta'Z'Z\theta$$

2.7.5 Distribuição não Central F de Snedecor

Definição 2.7.5.1 – Sejam W_1 e W_2 independentes, com $w_1 \sim \chi^2(n_1 ; \lambda)$ e $w_2 \sim \chi^2(n_2)$, então

$\frac{W_1/n_1}{W_2/n_2} \sim F(n_1, n_2 ; \lambda)$, onde F é denominada distribuição "F de Snedecor" com n_1 e n_2 graus de liberdade e λ, parâmetro de não centralidade.

Proposição 2.7.5.2 – $\frac{QMT}{QMR} \sim F_{(I-1;\, n.-I)}$

2.7.6 Quadro da Análise de Variância

O quadro da análise de variância será

Causas de variação	Grau de Liberdade	Somas de Quadrados	Quadrados médios	E(QM)	F	Fα
tratamento	I-1	QMT	QMT	$\sigma_e^2 + \zeta\sigma_t^2$	$\frac{QMT}{QMR}$	$F_{(I-1;\, n.-I)}$
Resíduo	n. -I	SQR	QMR	σ_e^2		
Total	n. -1	SQt				

com $\zeta = \frac{1}{I-1} \left(n. - \frac{\sum_i n_i^2}{n.}\right)$, $i = 1, 2, \ldots, I$

2.8 Cálculo da SQT através da matriz $(Z'Z)^{-1}$

Proposição 2.8.1 – A soma de quadrados de tratamento pode ser obtida da matriz $(Z'Z)^{-1}$, através da seguinte relação

$$SQT = B'\, T^{-1}\, B, \text{ onde}$$

B é a matriz das estimativas $\hat{t}_i$

T^{-1} é a inversa da parte da matriz $(Z'Z)^{-1}$, correspondente às variâncias e covariâncias relativas aos $\hat{t}_i$.

2.9 Comparações Múltiplas

Definição 2.9.1 – Admitamos uma função linear $Y = a_1x_1 + a_2x_2 + \ldots + a_Ix_I$. Se tivermos $\sum_i a_i = 0$, dizemos que Y é um contraste da variável x. Se, ao invés das variáveis x_i tivermos médias, teremos um contraste de médias.

Definição 2.9.2 – Consideremos a estimativa de um contraste $\hat{Y} = c_1\hat{m}_1 + C_2\hat{m}_2 + \ldots + c_I\hat{m}_I$. A estimativa de sua variância, admitidas todas as médias independentes, será

$$\hat{V}(\hat{Y}) = C_1^2\, \hat{V}(\hat{m}_1) + C_2^2\, \hat{V}(\hat{m}_2) + \ldots + C_I^2\, \hat{V}(\hat{m}_I)$$

Definição 2.9.3 – Admitamos as seguintes estimativas de contrastes.

$$\hat{Y}_1 = a_1\hat{m}_1 + a_2\hat{m}_2 + \ldots + a_I\hat{m}_I \text{ e } \hat{Y}_2 = b_1\hat{m}_1 + b_2\hat{m}_2 + \ldots + b_I\hat{m}_I$$

A estimativa da covariância entre estes dois contrastes é definida por

$$\hat{C}ov(\hat{Y}_1, \hat{Y}_2) = a_1b_1\hat{V}(\hat{m}_1) + a_2b_2\hat{V}(\hat{m}_2) + \ldots + a_Ib_I\hat{V}(\hat{m}_I)$$

Definição 2.9.4 – Dizemos que dois contrastes são ortogonais entre si, se a covariância entre eles for nula.

Definição 2.9.5 – Podemos confrontar um contraste através do teste t. Usualmente confrontamos com zero. A estatística t assume, neste particular, a seguinte forma.

$$t = \frac{\hat{Y} - O}{\sqrt{\hat{V}(\hat{Y})}} = \frac{\hat{Y}}{\sqrt{\hat{V}(\hat{Y})}}$$

3. CONCLUSÃO

3.1. A matriz X'X, após sofrer a transformação imposta, passa a ser denominada de Z'Z e sua forma é a seguinte

$$Z'Z = \begin{pmatrix} n. & n_1 - n_I & n_2 - n_I \ldots & n_{I-1} - n_I \\ n_1 - n_I & n_1 + n_I & n_I \ldots & n_I \\ n_2 - n_I & n_I & n_2 + n_I \ldots & n_I \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ n_{I-1} - n_I & n_I & n_I & n_{I-1} + n_I \end{pmatrix}_{I \times I}$$

A matriz X'Y também se transforma e, com a denominação de Z'W, passa a ser

$$Z'W = \begin{pmatrix} G \\ T_1 - T_I \\ T_2 - T_I \\ \ldots \\ T_{I-1} - T_I \end{pmatrix}_{I \times 1}$$

Finalmente, a matriz β passa a ser denominada de θ e tem o seguinte aspecto

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} \hat{m} \\ \hat{t}_1 \\ \hat{t}_2 \\ \cdots \\ \hat{t}_{I-1} \end{bmatrix}_{I \quad 1}$$

3.2. O efeito estimado do I-ésimo tratamento é obtido da seguinte maneira

$$\hat{t}_I = -(\hat{t}_1 + \hat{t}_2 + \ldots\ldots + \hat{t}_{I-1})$$

3.3. A matriz de dispersão de $\hat{\theta}$ é dada por

$$D(\hat{\theta}) \quad = (Z'Z)^{-1} \ \sigma_e^2$$

3.4. Apesar das transformações efetuadas, não ocorre nenhuma mudança no cálculo das somas de quadrados. Apesar da ausência do efeito estimado do I-ésimo tratamento na mátriz $\hat{\theta}$, teremos as somas de quadrados de tratamento calculadas do modo usual, isto é,

$$SQT = \hat{\theta}'Z'W - C = \sum_i \frac{T_i^2}{n_i} - C$$

3.5. O quadro da análise de variância, para o modelo inteiramente casualizado, será

Causas de variação	graus de liberdade	somas de quadrados	Quadrados médios	E(QM)	F_{α}	$\tilde{F}$
tratamento	I - 1	SQT	QMT	$\sigma_e^2 + \zeta\,\sigma_t^2$	$\frac{QMT}{QMT}$	$F_{(I-1\,;\,n.-I)}$
resíduo	n.-I	SQR	QMR	σ_e^2		
TOTAL	n. -1	SQt				

onde

$$SQT = \hat{\theta}'Z'W - C = \sum_i \frac{T_i^2}{n_i} - C$$

$$SQt = W'W - C = \sum_{ij} Y_{ij}^2 - C \ ; C = \frac{G^2}{n.}$$

$$SQR = SQt - SQT \ ; QMT = \frac{SQT}{I-1} \ ; \ QMR = \frac{SQR}{n.-I}$$

e

$$\zeta = \frac{1}{I-1}\left(n. - \frac{\sum_i n_i^2}{n.}\right) \quad , \ i = 1, 2, \ldots, I \qquad j = 1, 2, \ldots, n_i$$

3.6. Toda a metodologia desenvolvida no presente trabalho, envolvendo apenas o modelo inteiramente casualizado, pode ser estendida a outros delineamentos, com a mesma facilidade na aplicação dos conceitos.

ABSTRACT

Here we give some applications of linear methods in the estimates of parameters of one-way classification. We proposed this work because the results obtained are suitable for practical necessities in statistics with applications in agronomy, veterinary, social sciences, biology and other sciences. The method used here to solve a system of linear equations, when its matrix is singular, consists of reducing the number of columns of the matrix, in such a manner that it turns out to be practically inversive, thus simplifying the development of the theory of Statistical Estimates.

KEY-WORDS: *Elementary matrix, Matrix of dispersion, Sum of squares.*

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. CAMPOS, H. *Estatística aplicada à experimentação com cana-de-açúcar.* Piracicaba, FEALO, 1984 -
2. COCHRAN, W. G. & COX, G. M. *Experimental Designs.* New York, John Wiley & Sons, 1957.
3. GOMES, F. P. *Curso de estatística experimental.* Piracicaba, Nobel, 1982.
4. GONÇALVES, C. F. F. *Métodos lineares nas estimativas parâmetros do modelo inteiramente casualizado - UEL.* Londrina, 1986. Tese (Mestrado em Matemática – Estatística).
5. HARVEY, W. R. Least–Squares Analysis of Data (with unequal subclass numbers). Agricultural Research Service, United States Departament of Agriculture, 1960.
6. HOFFMANN, K. & KUNZE *Álgebra linear* São Paulo, USP, 1961.
7. IEMMA, A. G. Modelos lineares: uma introdução para profissionais da pesquisa agropecuária. ESALQ, USP, 1985.
8. MAULE, S. E. F. Matrizes inversas generalizadas e algumas aplicações. Londrina, UEL, 1981. Tese (Mest. Matemática) -
9. RAO, C. R. & MITRA, S. K. Generalizada Inversa of Matrice and its applications. New York, John Wiley & Sons, 1971.
10. RAO, C. R. *Linear Statistical Inference and its Applications.* New York, John Wiley & Sons, 1973.
11. SCHEFFÉ, H. The analysis of Variance. New York, John Wiley & Sons, 1959.
12. SEARLE, S. R. *Linear Models.* New York, John Wiley & Sons, 1971.