

SIMULAÇÃO DE DADOS VISANDO A ESTIMAÇÃO DE COMPONENTES DE VARIÂNCIA E COEFICIENTES DE HERDABILIDADE

Ângela Mello COELHO¹
Décio BARBIN¹

- RESUMO: A meta principal desse trabalho foi comparar métodos de estimação para coeficientes de herdabilidade para os modelos inteiramente ao acaso e em blocos casualizados. Para atingir a meta estabelecida, partiu-se de um conjunto de dados cujo coeficiente de herdabilidade é conhecido, o que foi feito pela simulação de dados. Foram comparados dois métodos de estimação, o método da análise da variância e o método da máxima verossimilhança. Foram feitas 80 simulações, 40 para cada ensaio. Depois de realizadas as 80 simulações, cada uma obtendo 1.000 conjuntos de dados, e por conseqüência 1.000 estimativas para cada componente de variância e coeficiente de herdabilidade relativos a cada um dos casos, foram obtidas as médias de cada um dos conjuntos de dados e com essas médias foram montados gráficos comparativos entre os métodos, tendo como referência os valores dos parâmetros utilizados nas simulações. Para ambos os modelos o método da análise da variância se mostrou mais confiável quando se objetiva estimar componentes de variância e coeficientes de herdabilidade, considerando os casos simulados.
- PALAVRAS-CHAVE: Coeficiente de herdabilidade; componente de variância; método da análise da variância; método da máxima verossimilhança; estimação; simulação.

1 Introdução

As estimativas de coeficientes de herdabilidade são de grande importância para a genética, pois elas fornecem uma base para a escolha dos indivíduos que devem ser utilizados para o melhoramento de determinada espécie, seja ela vegetal ou animal.

Para se obterem estimativas de coeficientes de herdabilidade, é necessário escolher um método de estimação de componentes de variância, pois a estimativa de um coeficiente de herdabilidade é encontrada por meio de uma função de estimativas de componentes de variância.

Assim, a fim de se estudarem métodos de estimação para coeficientes de herdabilidade, é preciso estudar métodos de estimação para componentes de variância. Mas como saber se a estimativa encontrada para o coeficiente de herdabilidade, seguindo certo método de estimação de componentes de variância, constitui uma boa estimativa desse coeficiente?

¹Departamento de Ciências Exatas, Universidade de São Paulo, campus de Piracicaba – ESALQ/USP, CEP 13418-900, Piracicaba, SP, Brasil. E-mail: debarbin@carpa.ciaagri.usp.br

A idéia central deste trabalho foi partir de um conjunto de dados cujo coeficiente de herdabilidade é conhecido, e isso pode ser feito pela simulação de dados. Dessa maneira, após utilizar métodos diferentes para estimar os componentes de variância, e por consequência, métodos diferentes para estimar o coeficiente de herdabilidade, os valores encontrados poderão ser comparados com o valor conhecido do coeficiente de herdabilidade, aquele que será utilizado para fazer a simulação dos conjuntos de dados.

Dois métodos de estimação de componentes de variância muito utilizados para modelos aleatórios e para dados balanceados são os métodos da análise da variância (ANOVA) e da máxima verossimilhança (MV), sendo este introduzido por Hartley e Rao (1967).

Considerando modelos para dados balanceados os estimadores encontrados pelo método da ANOVA, segundo Searle et al. (1992), são não tendenciosos, eficientes e são funções de estatísticas suficientes minimais; já os estimadores fornecidos pelo método da MV, segundo Otsuk (1991), solucionam o problema de estimativas negativas, porém são tendenciosos e truncados. Além disso, Custódio (2004) afirma que os estimadores são tendenciosos, pois o método da MV não leva em consideração a perda de graus de liberdade devido a estimação dos efeitos fixos pertencentes ao modelo. Freitas (1991) diz, ainda, que os estimadores da MV são consistentes, assintoticamente normais e eficientes. Também, segundo Fernandez (1991), o procedimento de estimação é sempre bem definido.

Este trabalho teve como objetivos simular conjuntos de dados relativos aos modelos aleatórios referentes a ensaios inteiramente ao acaso e em blocos casualizados, levando em consideração os componentes de variância e o conhecimento do coeficiente de herdabilidade a eles relativos; utilizar os dados simulados para obter estimativas dos componentes de variância e dos coeficientes de herdabilidade utilizando os métodos de estimação da análise da variância e da máxima verossimilhança e comparar os dois métodos de estimação dos coeficientes de herdabilidade.

2 Material e Métodos

2.1 Material

Os dados utilizados neste trabalho foram provenientes de simulações. Foram feitas, ao todo, 80 simulações, cada uma fornecendo 1.000 conjuntos de dados, sendo 40 simulações para cada um dos modelos propostos. Todas partiram do conhecimento dos valores de h^2 e de σ^2 ; outros valores foram estabelecidos de acordo com cada um dos modelos. As 40 simulações se devem ao fato de que foram utilizadas todas as combinações entre $h^2 = 0,1; 0,3; 0,5$ e $0,7$ e $\sigma^2 = 10; 20; 30; 40; 50; 60; 70; 80; 90; 100$, para ambos os modelos. A média geral, também necessária para a simulação, foi a mesma para todos os modelos, $m = 300$.

Para o modelo inteiramente casualizado foram considerados 25 tratamentos e 10 repetições, logo foram simulados conjuntos de dados contendo 250 observações cada. O valor de σ_i^2 , utilizado na simulação, dependeu dos valores de h^2 e de σ^2 , e foi encontrado

pela expressão $h^2 = \frac{4\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \sigma^2}$.

Para o modelo em blocos casualizados foram considerados 25 tratamentos e 10 blocos e os conjuntos de dados tiveram, portanto, 250 observações cada. O efeito relativo ao bloco foi fixado em 20 ($\sigma_b^2 = 20$). O valor de σ_t^2 utilizado na simulação dependeu dos valores de h^2 , de σ^2 e de σ_b^2 , e foi encontrado pela expressão $h^2 = \frac{4\sigma_t^2}{\sigma_t^2 + \sigma_b^2 + \sigma^2}$.

2.2 Métodos

2.2.1 O método da análise da variância

O método da análise da variância, também conhecido como método dos momentos, para dados balanceados, consiste em equacionar os quadrados médios da análise da variância com as suas respectivas esperanças matemáticas.

A Tabela 1 fornece o quadro da análise da variância com as expressões dos graus de liberdade, das somas de quadrados, dos quadrados médios e das esperanças dos quadrados médios (E(QM)) para o modelo inteiramente ao acaso. A demonstração de como se calculam as E(QM), pode ser encontrada em Barbin (1993).

Tabela 1 - Quadro da análise da variância para o delineamento inteiramente casualizado com as expressões das esperanças dos quadrados médios

C.V.	GL	SQ	QM	E(QM)
Tratamentos	$I - 1$	$\frac{1}{J} \sum_i y_i^2 - C$	$\frac{SQ_{Trat}}{I - 1}$	$J\sigma_t^2 + \sigma^2$
Resíduos	$I(J - 1)$	$\sum_{i,j} y_{ij}^2 - \frac{1}{J} \sum_i y_i^2$	$\frac{SQ_{Res}}{I(J - 1)}$	σ^2
Total	$IJ - 1$	$\sum_{i,j} y_{ij}^2 - C$		

$$y_i = \sum_j y_{ij}, \quad y_{.j} = \sum_i y_{ij}, \quad C = \frac{1}{IJ} (\sum y_{ij})^2.$$

Logo, pelo método da análise da variância, têm-se as seguintes expressões para as estimativas dos componentes de variância:

$$E(QM_{Res}) = \sigma^2 \Rightarrow \hat{\sigma}^2 = QM_{Res}$$

$$E(QM_{Trat}) = J\sigma_t^2 + \sigma^2 \Rightarrow J\hat{\sigma}_t^2 + \hat{\sigma}^2 = QM_{Trat}$$

$$\therefore \hat{\sigma}_t^2 = \frac{QM_{Trat} - QM_{Res}}{J}$$

Para o modelo em blocos casualizados tem-se, na Tabela 2, o quadro da análise da variância com as expressões dos graus de liberdade, das somas de quadrados, dos quadrados médios e das esperanças dos quadrados médios (E(QM));

Tabela 2 - Quadro da análise da variância para o delineamento em blocos casualizados com as expressões das esperanças dos quadrados médios

C.V.	GL	SQ	QM	E(QM)
Tratamentos	$I - 1$	$\frac{1}{J} \sum_i y_i^2 - C$	$\frac{SQ_{Trat}}{I - 1}$	$J\sigma_t^2 + \sigma^2$
Blocos	$J - 1$	$\frac{1}{I} \sum_j y_{.j}^2 - C$	$\frac{SQ_{Blocos}}{J - 1}$	$I\sigma_b^2 + \sigma^2$
Resíduos	$(I - 1)(J - 1)$	Por diferença	$\frac{SQ_{Res}}{(I - 1)(J - 1)}$	σ^2
Total	$IJ - 1$	$\sum_{i,j} y_{ij}^2 - C$		

Assim, pelo método da análise da variância, têm-se as seguintes expressões para as estimativas dos componentes de variância:

$$E(QM_{Res}) = \sigma^2 \Rightarrow \hat{\sigma}^2 = QM_{Res}$$

$$E(QM_{Trat}) = J\sigma_t^2 + \sigma^2 \Rightarrow J\hat{\sigma}_t^2 + \hat{\sigma}^2 = QM_{Trat}$$

$$\therefore \hat{\sigma}_t^2 = \frac{QM_{Trat} - QM_{Res}}{J}$$

$$E(QM_{Blocos}) = I\sigma_b^2 + \sigma^2 \Rightarrow I\hat{\sigma}_b^2 + \hat{\sigma}^2 = QM_{Blocos}$$

$$\therefore \hat{\sigma}_b^2 = \frac{QM_{Blocos} - QM_{Res}}{I}$$

2.2.2 O método da máxima verossimilhança

O método da máxima verossimilhança consiste em maximizar a função de verossimilhança relativa aos dados observados, em relação aos parâmetros do modelo em questão.

Para tal, deve-se derivar parcialmente a função de verossimilhança em relação aos parâmetros do modelo e/ou combinações lineares desses parâmetros que venham a facilitar o processo de maximização. Depois de calculadas, as derivadas parciais devem

ser igualadas a zero, a fim de encontrar os valores dos parâmetros que maximizam a função.

Para o modelo inteiramente casualizado, a fim de simplificar o logaritmo da função de máxima verossimilhança, define-se a seguinte combinação linear dos componentes de variância: $\lambda = \sigma^2 + J\sigma_i^2$

Após todas as simplificações, encontra-se o seguinte logaritmo da função de máxima verossimilhança de y_{ij} :

$$l = -\frac{IJ}{2} \ln 2\pi - \frac{I(J-1)}{2} \ln \sigma^2 - \frac{I}{2} \ln(\lambda) - \frac{\text{SQRes}}{2\sigma^2} - \frac{\text{SQTrat}}{2\lambda} - \frac{IJ(\bar{y}_{..} - m)^2}{2\lambda}$$

Fazendo-se $\frac{\partial l}{\partial m} = 0$, $\frac{\partial l}{\partial \sigma^2} = 0$ e $\frac{\partial l}{\partial \lambda} = 0$,

tem-se: $\frac{IJ(\bar{y}_{..} - \hat{m})}{\hat{\lambda}} = 0 \Rightarrow (\bar{y}_{..} - \hat{m}) = 0 \Rightarrow \hat{m} = \bar{y}_{..}$

$$-\frac{I(J-1)}{2\sigma^4} \left[\sigma^2 - \frac{\text{SQRes}}{I(J-1)} \right] = 0 \Rightarrow \sigma^2 - \frac{\text{SQRes}}{I(J-1)} = 0 \Rightarrow \sigma^2 = \text{QMRes}$$

$$-\frac{I}{2\hat{\lambda}^2} \left(\hat{\lambda} - \frac{\text{SQTrat}}{I} \right) + \frac{IJ(\bar{y}_{..} - \hat{m})^2}{2\hat{\lambda}^2} = 0 \Rightarrow \hat{\lambda} - \frac{\text{SQTrat}}{I} = 0 \Rightarrow \hat{\lambda} = \left(1 - \frac{1}{I}\right) \text{QMTrat}$$

Como $\lambda = \sigma^2 + J\sigma_i^2$ tem-se que $\hat{\lambda} = \hat{\sigma}^2 + J\hat{\sigma}_i^2$ ou seja $\hat{\sigma}_i^2 = \frac{\hat{\lambda} - \hat{\sigma}^2}{J}$, logo:

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{\left(1 - \frac{1}{I}\right) \text{QMTrat} - \text{QMRes}}{J} \quad (1)$$

Esses estimadores ainda não podem ser considerados os estimadores de máxima verossimilhança. É preciso verificar se eles estão contidos no espaço de existência dos parâmetros, ou seja, tem que se olhar na definição dos parâmetros antes de decidir sobre as estimativas. As notações normalmente utilizadas para as estimativas encontradas pelo método da máxima verossimilhança são: \hat{m} , $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\lambda}$.

A seguir são dados os domínios dos parâmetros e os seus respectivos estimadores:

1) $-\infty < m < \infty$, logo $\hat{m} = \bar{y}_{..}$ e

como os componentes de variância estão relacionados entre si, um não deve ser considerado sem o outro, logo

2) $\sigma_i^2 \geq 0$ e $\sigma^2 > 0$. Pode-se verificar que se $\left(1 - \frac{1}{I}\right) \text{QMTrat} \leq \text{QMRes}$

o estimador $\hat{\sigma}_i^2$ dado pela equação (1) toma valores negativos. Quando isso acontece, o comum é tomar o valor da estimativa como nulo. Têm-se, então, os seguintes estimadores dos componentes de variância encontrados pelo método da máxima verossimilhança:

$$i) \left(1 - \frac{1}{I}\right) \text{QMTrat} \geq \text{QMRes} \Rightarrow \begin{cases} \tilde{\sigma}_i^2 = \frac{(1 - 1/I) \text{QMTrat} - \text{QMRes}}{J} \\ \tilde{\sigma}^2 = \text{QMRes} \end{cases}$$

$$ii) \left(1 - \frac{1}{I}\right) \text{QMTrat} < \text{QMRes} \Rightarrow \begin{cases} \tilde{\sigma}_i^2 = 0 \\ \tilde{\sigma}^2 = \frac{\text{SQTrat} + \text{SQRes}}{IJ} \end{cases}$$

A fim de simplificar a equação de máxima verossimilhança para o modelo matemático que considera o delineamento em blocos casualizados, definem-se as seguintes combinações lineares dos componentes de variância:

$$\theta_0 = \sigma^2, \theta_1 = \sigma^2 + J\sigma_r^2, \theta_2 = \sigma^2 + I\sigma_b^2 \text{ e } \theta_3 = \sigma^2 + J\sigma_r^2 + I\sigma_b^2 = \theta_1 + \theta_2 - \theta_0$$

Depois de se calcularem as derivadas parciais do logaritmo da função de máxima verossimilhança e igualá-las a zero, chega-se ao seguinte sistema:

$$\begin{cases} \frac{1}{\hat{\theta}_3} + \frac{I-1}{\hat{\theta}_1} + \frac{J-1}{\hat{\theta}_2} + \frac{(I-1)(J-1)}{\hat{\theta}_0} = \frac{\text{SQTrat}}{\hat{\theta}_1^2} + \frac{\text{SQBlocos}}{\hat{\theta}_2^2} + \frac{\text{SQRes}}{\hat{\theta}_0^2}, \\ \frac{1}{\hat{\theta}_3} + \frac{I-1}{\hat{\theta}_1} = \frac{\text{SQTrat}}{\hat{\theta}_1^2}, \\ \frac{1}{\hat{\theta}_3} + \frac{J-1}{\hat{\theta}_2} = \frac{\text{SQBlocos}}{\hat{\theta}_2^2}. \end{cases}$$

Subtraindo da primeira equação as outras duas, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hat{\theta}_3} + \frac{I-1}{\hat{\theta}_1} + \frac{J-1}{\hat{\theta}_2} + \frac{(I-1)(J-1)}{\hat{\theta}_0} - \left(\frac{1}{\hat{\theta}_3} + \frac{I-1}{\hat{\theta}_1}\right) - \left(\frac{1}{\hat{\theta}_3} + \frac{J-1}{\hat{\theta}_2}\right) &= \\ = \frac{\text{SQTrat}}{\hat{\theta}_1^2} + \frac{\text{SQBlocos}}{\hat{\theta}_2^2} + \frac{\text{SQRes}}{\hat{\theta}_0^2} - \frac{\text{SQTrat}}{\hat{\theta}_1^2} - \frac{\text{SQBlocos}}{\hat{\theta}_2^2} & \\ \frac{(I-1)(J-1)}{\hat{\theta}_0} - \frac{1}{\hat{\theta}_3} = \frac{\text{SQRes}}{\hat{\theta}_0^2} & \quad (2) \end{aligned}$$

Esse resultado permite que as três equações sejam reescritas de maneira que torne mais simples a resolução do sistema. Tomando a equação (2) como exemplo, tem-se:

$$\frac{(I-1)(J-1)}{\hat{\theta}_0} - \frac{1}{\hat{\theta}_3} = \frac{\text{SQRes}}{\hat{\theta}_0^2}$$

$$\frac{(I-1)(J-1)}{\hat{\theta}_0} - \frac{\text{SQRes}}{\hat{\theta}_0^2} = \frac{1}{\hat{\theta}_3}$$

$$\frac{(I-1)(J-1)\hat{\theta}_0 - \text{SQRes}}{\hat{\theta}_0^2} = \frac{1}{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)}$$

$$(I-1)(J-1)(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)\hat{\theta}_0 - \text{SQRes}(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0) = \hat{\theta}_0^2$$

$$\hat{\theta}_0 = \frac{\text{SQRes}}{(I-1)(J-1)} + \frac{\hat{\theta}_0^2}{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)(I-1)(J-1)} e$$

$$\hat{\theta}_0 = \text{QMRes} + \frac{\hat{\theta}_0^2}{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)(I-1)(J-1)}$$

De maneira análoga, as outras duas equações podem ser escritas das seguintes formas:

$$\hat{\theta}_1 = \text{QMTrat} + \frac{\hat{\theta}_1^2}{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)(I-1)} \quad \hat{\theta}_2 = \text{QMBlocos} + \frac{\hat{\theta}_2^2}{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)(J-1)}$$

Tem-se, então, o seguinte sistema:

$$\begin{cases} \hat{\theta}_0 = \text{QMRes} + \frac{\hat{\theta}_0^2}{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)(I-1)(J-1)}, \\ \hat{\theta}_1 = \text{QMTrat} + \frac{\hat{\theta}_1^2}{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)(I-1)}, \\ \hat{\theta}_2 = \text{QMBlocos} + \frac{\hat{\theta}_2^2}{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0)(J-1)}. \end{cases}$$

A maneira de se resolver esse sistema é por iteração, sendo o método iterativo utilizado discutido mais adiante.

Após encontrados os valores de $\hat{\theta}_0$, $\hat{\theta}_1$ e $\hat{\theta}_2$, podem-se encontrar os valores de $\hat{\sigma}^2$, $\hat{\sigma}_t^2$ e $\hat{\sigma}_b^2$, por meio das expressões $\hat{\sigma}^2 = \hat{\theta}_0$, $\hat{\sigma}_t^2 = \frac{\hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_0}{J}$ e $\hat{\sigma}_b^2 = \frac{\hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0}{I}$, respectivamente.

Assim, como para o modelo inteiramente casualizado, deve-se estudar, conjuntamente, os espaços de existência dos componentes de variância antes de especificar seus estimadores.

Os espaços paramétricos são definidos por: $\sigma_b^2 \geq 0$, $\sigma_t^2 \geq 0$ e $\sigma^2 > 0$. Pode-se verificar que se $\hat{\theta}_1 < \hat{\theta}_0$ o estimador $\hat{\sigma}_t^2$ toma valores negativos, e quando isso acontece, o comum é

tomar o valor da estimativa como nulo. Analogamente, se $\hat{\theta}_2 < \hat{\theta}_0$, o estimador $\hat{\sigma}_b^2$ toma valores negativos. Como $\hat{\theta}_0$ é sempre positivo, não há a necessidade de preocupar-se com ele. Têm-se, então, os seguintes estimadores dos componentes de variância encontrados pelo método da máxima verossimilhança:

$$i) \hat{\theta}_1 \geq \hat{\theta}_0 \text{ e } \hat{\theta}_2 \geq \hat{\theta}_0 \Rightarrow \begin{cases} \hat{\sigma}^2 = \hat{\theta}_0 \\ \hat{\sigma}_t^2 = \frac{\hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_0}{J} \\ \hat{\sigma}_b^2 = \frac{\hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0}{I} \end{cases}$$

$$ii) \hat{\theta}_1 < \hat{\theta}_0 \text{ e } \hat{\theta}_2 \geq \hat{\theta}_0 \Rightarrow \begin{cases} \hat{\sigma}^2 = \hat{\theta}_0 \\ \hat{\sigma}_t^2 = 0 \\ \hat{\sigma}_b^2 = \frac{\hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_0}{I} \end{cases}$$

em que $\hat{\theta}_0$ passa a ser:
$$\hat{\theta}_0 = \frac{\text{SQRes} + \text{SQTrat}}{J(I-1)} + \frac{\hat{\theta}_0^2}{(\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2)(I-1)(J-1)},$$

$$iii) \hat{\theta}_1 \geq \hat{\theta}_0 \text{ e } \hat{\theta}_2 < \hat{\theta}_0 \Rightarrow \begin{cases} \hat{\sigma}^2 = \hat{\theta}_0 \\ \hat{\sigma}_t^2 = \frac{\hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_0}{J} \\ \hat{\sigma}_b^2 = 0 \end{cases}$$

em que $\hat{\theta}_0$ passa a ser:

$$\hat{\theta}_0 = \frac{\text{SQRes} + \text{SQBlocos}}{I(J-1)} + \frac{\hat{\theta}_0^2}{(\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2)(I-1)(J-1)};$$

$$iv) \hat{\theta}_1 < \hat{\theta}_0 \text{ e } \hat{\theta}_2 < \hat{\theta}_0 \Rightarrow \begin{cases} \hat{\sigma}^2 = \hat{\theta}_0 \\ \hat{\sigma}_t^2 = 0 \\ \hat{\sigma}_b^2 = 0 \end{cases}$$

em que $\hat{\theta}_0$ passa a ser:

$$\hat{\theta}_0 = \frac{\text{SQRes} + \text{SQTrat} + \text{SQBlocos}}{IJ} + \frac{\hat{\theta}_0^2}{(\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2)(I-1)(J-1)}$$

Para uma demonstração mais detalhada de como obter os estimadores de máxima verossimilhança para os modelos mencionados ver Coelho (2005).

2.2.3 Método iterativo para a obtenção dos parâmetros (θ 's)

O método iterativo utilizado para a obtenção dos parâmetros consiste em, primeiramente, estabelecer um vetor s_0 de soluções iniciais, em seguida, deve-se calcular um novo vetor s_1 de soluções encontradas ao substituir o vetor s_0 no sistema. Se s_0 e s_1 forem iguais, considera-se encerrado o processo iterativo e toma-se s_1 como o vetor solução. Se s_0 e s_1 diferirem entre si, calcula-se um novo vetor de soluções s_2 , a partir do vetor s_1 . Se s_1 e s_2 forem iguais, considera-se encerrado o processo iterativo e toma-se s_2 como o vetor solução. Se s_1 e s_2 diferirem entre si, continua-se com o processo até serem encontrados dois vetores solução seguidos que sejam idênticos entre si.

2.2.4 Coeficiente de herdabilidade

Neste trabalho, foi utilizado o coeficiente de herdabilidade no sentido restrito, ou seja, $h^2 = \frac{V_a}{V_f}$

Sendo assim, para estimar h^2 é necessário fazer a relação entre as variâncias aditiva (V_a) e fenotípica (V_f) com o modelo utilizado na simulação dos dados. Vejamos um exemplo para ilustrar. Considerando o modelo inteiramente casualizado, é necessário conhecer as variâncias relacionadas a y_{ij} a fim de relacioná-las com as variâncias utilizadas no cálculo de h^2 . Tem-se:

$$\begin{aligned} V(y_{ij}) &= V(m + t_i + e_{ij}) = E[(m + t_i + e_{ij})^2] - [E(m + t_i + e_{ij})]^2 \\ &= E[m^2 + (t_i)^2 + (e_{ij})^2 + dp] - m^2 = m^2 + \sigma_t^2 + \sigma^2 - m^2 \\ \therefore V(y_{ij}) &= \sigma_t^2 + \sigma^2 \end{aligned}$$

A variância total de y_{ij} pode ser considerada como a variância fenotípica (V_f), relativa aos supostos indivíduos dos quais teriam sido retiradas as informações descritas pelo conjunto de dados se esse não fosse simulado e sim observado em uma amostra aleatória retirada de uma população. Assim sendo, tem-se: $V_f = \sigma_t^2 + \sigma^2$

Segundo o modelo inteiramente casualizado tem-se que a covariância entre observações pertencentes a tratamentos diferentes é nula e a covariância entre observações pertencentes ao mesmo tratamento, porém em repetições distintas, é igual a σ_t^2 . De fato:

$$\begin{aligned} \text{cov}(y_{ij}, y_{i'j'}) &= E\left\{[y_{ij} - E(y_{ij})][y_{i'j'} - E(y_{i'j'})]\right\} = E[(m + t_i + e_{ij} - m)(m + t_{i'} + e_{i'j'} - m)] \\ &= E[(t_i + e_{ij})(t_{i'} + e_{i'j'})] = E(t_i t_{i'} + t_i e_{i'j'} + t_{i'} e_{ij} + e_{ij} e_{i'j'}) = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{cov}(y_{ij}, y_{ij'}) &= E\left\{[y_{ij} - E(y_{ij})][y_{ij'} - E(y_{ij'})]\right\} = E[(m + t_i + e_{ij} - m)(m + t_i + e_{ij'} - m)] \\ &= E[(t_i + e_{ij})(t_i + e_{ij'})] = E(t_i^2 + t_i e_{ij'} + t_i e_{ij} + e_{ij} e_{ij'}) = \sigma_t^2. \end{aligned}$$

Sendo assim, σ_t^2 está relacionado à variância genética (σ_g^2), enquanto a covariância entre duas observações referentes ao mesmo tratamento em repetições diferentes refere-se à variabilidade existente no ambiente, que não pode ser controlada por completo durante a aplicação de um experimento.

Considerando um experimento baseado na estrutura familiar de meio-irmãos, tem-se, segundo (Falconer & Mackay, 1996)

$$\text{cov}(y_{ij}, y_{ij'}) = \frac{1}{4}V_a = \sigma_g^2$$

Pode-se, então, igualar $\sigma_t^2 = \sigma_g^2 = \frac{1}{4}V_a$, ou seja: $V_a = 4\sigma_t^2$

Logo, tem-se o seguinte estimador do coeficiente de herdabilidade:

$$\hat{h}^2 = \frac{4\hat{\sigma}_t^2}{\hat{\sigma}_t^2 + \hat{\sigma}^2}$$

Para o modelo em blocos casualizados tem-se o seguinte estimador do coeficiente de herdabilidade:

$$\hat{h}^2 = \frac{4\hat{\sigma}_t^2}{\hat{\sigma}_t^2 + \hat{\sigma}_b^2 + \hat{\sigma}^2} \quad (1)$$

3 Resultados e Discussão

A fim de resumir os resultados, foram mostradas oito figuras contendo o comportamento, em médias, das estimativas encontradas pelos métodos da análise da variância (ANOVA) e máxima verossimilhança (MV) para cada um dos quatro casos estudados dos valores de h^2 para cada modelo de análise. As quatro primeiras figuras se referem ao modelo inteiramente ao acaso, e as quatro últimas ao modelo em blocos casualizados.

Pode-se notar na Figura 1 que ambos os métodos de estimação se assemelham bastante quanto à estimação de σ^2 e de σ_t^2 . A diferença maior entre os dois métodos pode ser percebida na estimação de h^2 , onde a figura mostra claramente que, apesar dos dois métodos tenderem a superestimar esse parâmetro; as estimativas fornecidas pelo método da ANOVA se aproximam mais do valor de referência.

Pela Figura 2, é possível perceber uma diferença maior entre os métodos quanto à estimação de σ_t^2 . Para o caso de $h^2 = 0,3$ o método da ANOVA estima esse parâmetro com mais precisão, enquanto o método da MV tende a subestimar os valores de referência conforme aumenta o valor de σ^2 . Sendo assim, o método da ANOVA forneceu estimativas mais próximas para h^2 , enquanto o método da MV subestimou esse parâmetro em todos os casos. Ambos os métodos se mostraram satisfatórios na estimação de σ^2 .

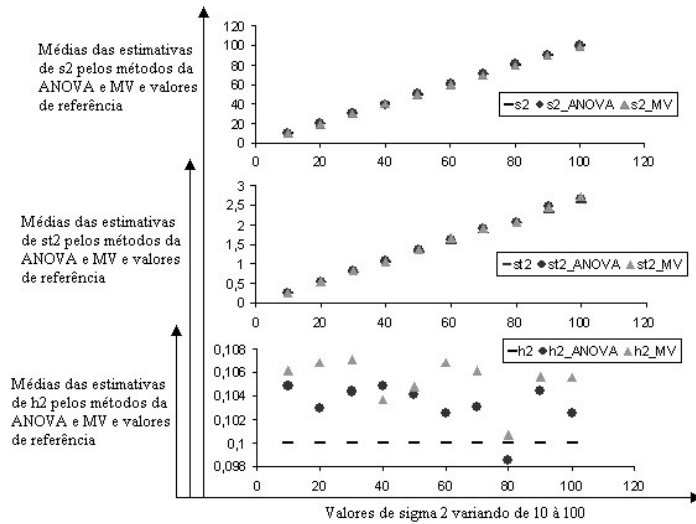


Figura 1 - Comportamento das estimativas de σ^2 (s_2) encontradas pelos métodos da ANOVA (s_2_ANOVA) e MV (s_2_MV), ao alto; de σ_i^2 (st_2), ao meio e de h^2 (h_2), em baixo, para o caso de $h^2 = 0,1$, conforme são alterados os valores de σ^2 .

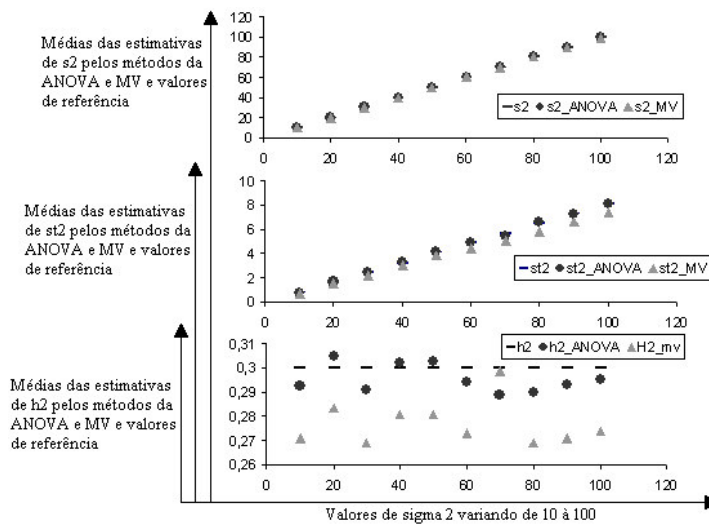


Figura 2 - Comportamento das estimativas de σ^2 (s_2) encontradas pelos métodos da ANOVA (s_2_ANOVA) e MV (s_2_MV), ao alto; de σ_i^2 (st_2), ao meio e de h^2 (h_2), em baixo, para o caso de $h^2 = 0,3$, conforme são alterados os valores de σ^2 .

A Figura 3 mostra a semelhança entre os dois métodos de estimação para os componentes de variância, ambos os métodos forneceram estimativas bastante próximas dos valores de referência. Porém, o método da MV mostrou certa tendência a subestimar o σ_i^2 , conforme aumentou o valor fixado para σ^2 , o que fica bem perceptível ao examinar a Figura 3, pois ambos os métodos tenderam a subestimar h^2 , o método da ANOVA forneceu estimativas mais próximas dos valores utilizados na simulação.

Para o caso de $h^2 = 0,7$ (Figura 4), os resultados mostraram-se muito parecidos com os obtidos para $h^2 = 0,5$ (Figura 3), com a diferença de que houve menos variação nas estimativas obtidas pelos dois métodos, ficando bem clara a tendência de ambos, no entanto, de subestimar h^2 , uma vez que as estimativas fornecidas pelo método da ANOVA se aproximaram mais dos valores de referência.

No caso da Figura 5, pode-se verificar que ambos os métodos de estimação se mantiveram próximos quanto à estimação de σ^2 . Para a estimação de σ_b^2 , o método da MV subestimou o parâmetro em todos os casos, enquanto na estimação de σ_i^2 o método da MV mostrou uma tendência de superestimar esse parâmetro, conforme aumentou o valor de σ^2 . Para esses dois últimos componentes e para h^2 , o método da ANOVA forneceu estimativas mais próximas dos valores utilizados na simulação.

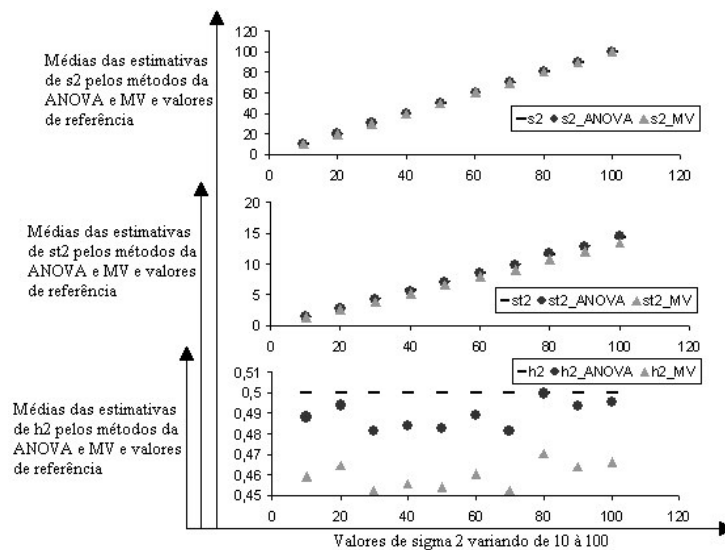


Figura 3 - Comportamento das estimativas de σ^2 (s2) encontradas pelos métodos da ANOVA (s2_ANOVA) e MV (s2_MV), ao alto; de σ_i^2 (st2), ao meio e de h^2 (h2), em baixo, para o caso de $h^2 = 0,5$, conforme são alterados os valores de σ^2 .

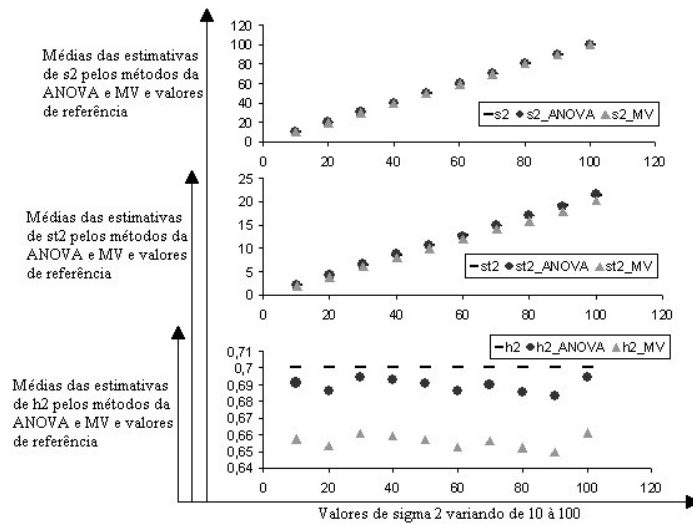


Figura 4 - Comportamento das estimativas de σ^2 (s_2) encontradas pelos métodos da ANOVA (s_{2_ANOVA}) e MV (s_{2_MV}), ao alto; de σ_i^2 (st_2), ao meio e de h^2 (h_2), em baixo, para o caso de $h^2 = 0,7$, conforme são alterados os valores de σ^2 .

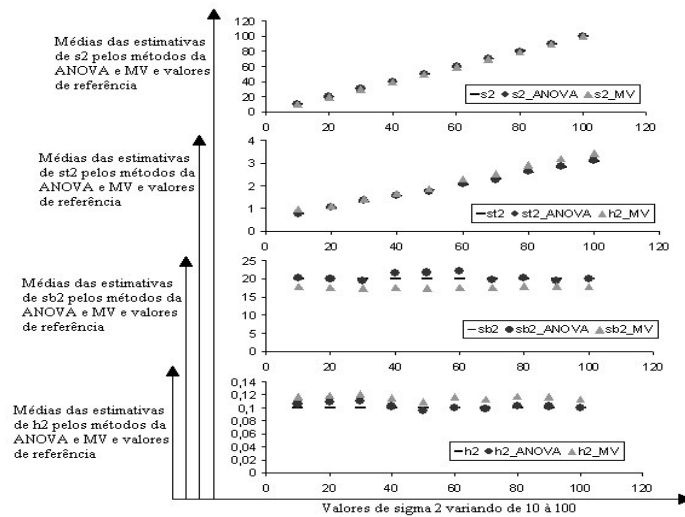


Figura 5 - Comportamento das estimativas de σ^2 (s_2) encontradas pelos métodos da ANOVA (s_{2_ANOVA}) e MV (s_{2_MV}), ao alto; de σ_i^2 (st_2), segunda de cima pra baixo; de σ_b^2 (sb_2), segunda de baixo para cima e de h^2 (h_2), em baixo, para o caso de $h^2 = 0,1$, conforme são alterados os valores de σ^2 .

Pela Figura 6, nota-se que os dois métodos de estimação proporcionaram valores que se aproximam dos de referência para os parâmetros σ^2 e σ_i^2 , além de terem resultados bastante semelhantes para esses dois componentes de variância.

A diferença maior entre os dois métodos de estimação pode ser vista nos gráficos relativos a σ_b^2 e h^2 na Figura 6. Tem-se que as estimativas fornecidas pelo método MV para σ_b^2 subestimaram esse parâmetro em todos os casos, o que não aconteceu com o método da ANOVA. Quanto às estimativas de h^2 , pode-se perceber que conforme aumentou o valor de σ^2 , mais as estimativas de ambos os métodos se aproximaram dos valores de referência, o método da ANOVA forneceu, na maioria dos casos, estimativas mais aproximadas de tais valores do que o método da MV.

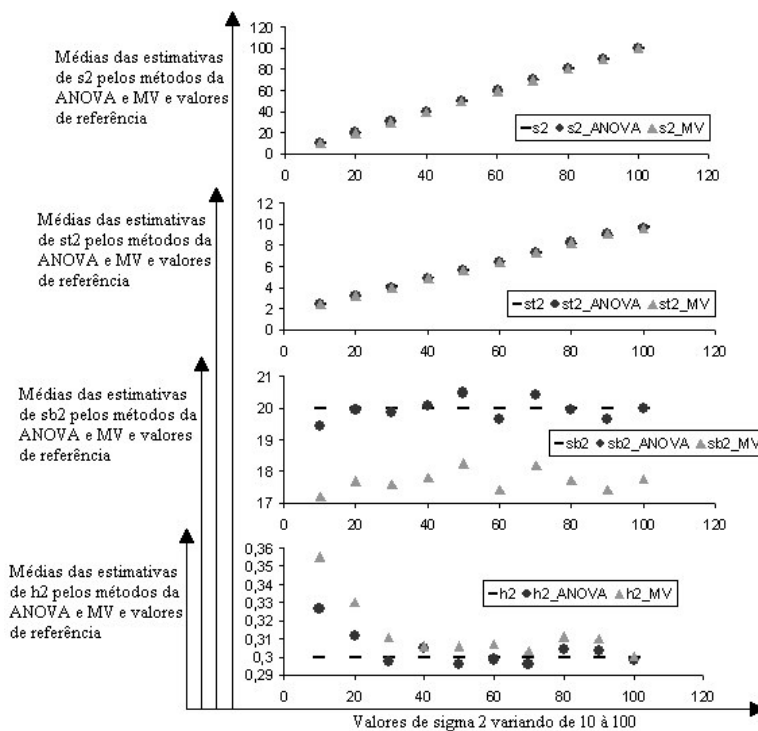


Figura 6 - Comportamento das estimativas de σ^2 (s_2) encontradas pelos métodos da ANOVA (s_2 _ANOVA) e MV (s_2 _MV), ao alto; de σ_i^2 (st_2), segunda de cima pra baixo; de σ_b^2 (sb_2), segunda de baixo para cima e de h^2 (h_2), em baixo, para o caso de $h^2 = 0,3$, conforme são alterados os valores de σ^2 .

As estimativas mostradas pela Figura 7 têm grande semelhança com as dadas na Figura 6, logo, a discussão feita para essa figura se encaixa perfeitamente para a Figura 7.

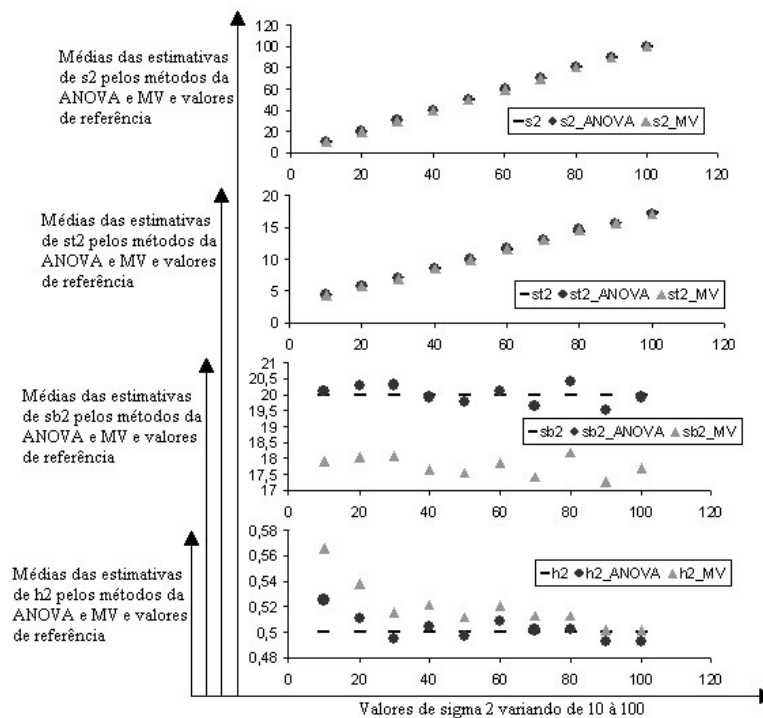


Figura 7 - Comportamento das estimativas de σ^2 (s_2) encontradas pelos métodos da ANOVA (s_2_ANOVA) e MV (s_2_MV), ao alto; de σ_r^2 (st_2), segunda de cima pra baixo; de σ_b^2 (sb_2), segunda de baixo para cima e de h^2 (h_2), em baixo, para o caso de $h^2 = 0,5$, conforme são alterados os valores de σ^2 .

Para o caso de $h^2 = 0,7$, observa-se na Figura 8 que os dois métodos comportaram-se, como nos casos anteriores, de maneira semelhante na estimação de σ^2 e σ_r^2 , apresentando estimativas próximas aos valores de referência. Porém, diferentemente dos casos anteriores, quanto à estimação de σ_b^2 , o método da ANOVA mostrou uma tendência a superestimar o valor do parâmetro fixado quando se aumentou o valor de σ^2 , ao passo que o método da MV subestimou σ_b^2 mas, não se afastou do valor fixado.

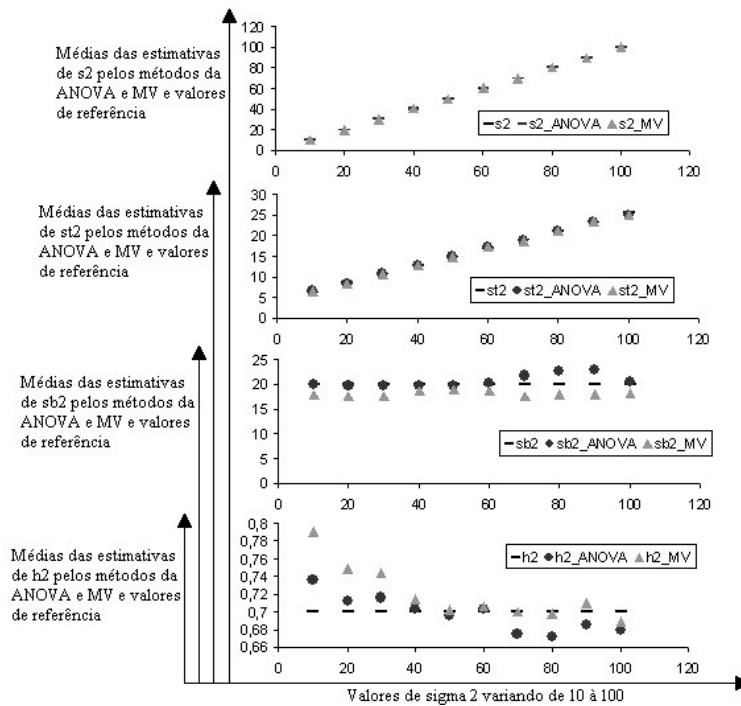


Figura 8 - Comportamento das estimativas de σ^2 (s_2) encontradas pelos métodos da ANOVA (s_{2_ANOVA}) e MV (s_{2_MV}), ao alto; de σ_t^2 (st_2), segunda de cima pra baixo; de σ_b^2 (sb_2), segunda de baixo para cima e de h^2 (h_2), em baixo, para o caso de $h^2 = 0,7$, conforme são alterados os valores de σ^2 .

Observando-se a dispersão das estimativas de h^2 pode-se perceber que para valores menores de σ^2 , aquelas obtidas pelo método da ANOVA se aproximaram mais dos valores de referência do que as obtidas pelo método da MV; no entanto, para os valores de σ^2 maiores do que 50, o método da MV forneceu estimativas mais próximas para os valores de h^2 utilizados na simulação.

Conclusões

Estimação considerando o delineamento inteiramente casualizado

Não houve grandes diferenças entre os resultados obtidos pelos métodos da análise da variância (ANOVA) e da máxima verossimilhança (MV) na estimação do componente de variância relativo ao erro experimental para nenhum dos valores estipulados para h^2 . Em todos os casos as estimativas encontradas por ambos os métodos se aproximaram satisfatoriamente dos valores de referência.

Já para o componente de variância relativo ao efeito de tratamentos e para o coeficiente de herdabilidade, ocorreram diferenças marcantes entre os dois métodos. Quanto menores os valores de h^2 , mais distintos foram os métodos. Para $h^2 = 0,1$, os dois métodos tenderam a fornecer estimativas que, em média, superestimaram tanto o h^2 quanto o σ_i^2 , porém as estimativas obtidas pelo método da ANOVA se aproximaram mais dos valores fixados. Para h^2 variando de 0,3 a 0,7, as estimativas encontradas pelo método da MV tendeu a subestimar os valores fixados, tanto para h^2 quanto para σ_i^2 , enquanto o método da ANOVA, além de não apresentar tal tendência, resultou em aproximações mais precisas desses parâmetros.

Sendo assim, para experimentos que visam estimar componentes de variância e/ou coeficientes de herdabilidade, e que se assemelhem aos ensaios aqui simulados, o mais interessante é utilizar o método da análise da variância na estimação dos parâmetros de interesse.

Estimação considerando o delineamento em blocos casualizados

Assim como para o delineamento inteiramente casualizado, os dois métodos de estimação não apresentaram diferenças na estimação do componente de variância relativo ao erro experimental. Quanto à estimação do componente de variância relativo ao efeito de tratamentos, também não existiram diferenças marcantes entre os dois métodos. Ambos estimaram satisfatoriamente os componentes de variância σ^2 e σ_i^2 .

O método da análise da variância se mostrou mais preciso quanto às estimativas do componente de variância relativo ao efeito de bloco e do coeficiente de herdabilidade, pois não mostrou viés na estimação desses parâmetros, enquanto o método da máxima verossimilhança forneceu estimativas que subestimaram os valores fixados para o σ_b^2 e que, como consequência, superestimaram os valores fixados para o h^2 . Os métodos ficaram mais aproximados conforme aumentaram os valores fixados de h^2 . Logo, assim como para o caso do delineamento inteiramente casualizado, conclui-se que o método mais indicado para estimar componentes de variância e/ou coeficientes de herdabilidade, em ensaios que se assemelhem aos aqui apresentados, é o método da análise da variância.

Agradecimentos

Agradecemos à Profa. Dra. Clarice Garcia Borges Demétrio pelas sugestões e ajuda oferecida na realização deste trabalho e à Coordenação para Aperfeiçoamento de Pessoal de nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

COELHO, A. M.; BARBIN, D. Simulation of data aiming at the estimation of variance components and heritability. *Rev. Mat. Est.*, São Paulo, v.24, n.2, p.103-120, 2006.

- *ABSTRACT: The main aim of this work was to compare methods of estimation of heritability for the 1-way classification and the 2-way crossed classification without interaction. To achieve the established aim, a data set with known heritability was used, produced by simulation. Two methods of estimation were compared: the analysis of variance method and the maximum likelihood method. 80 simulations were made, 40 for each classification. After the 80 simulations were performed, each one obtaining 1,000 data sets, and therefore 1,000 estimates of each*

component of variance and the heritability, the means for each set of 1,000 estimates were obtained and comparative graphics, for the two methods, were made using those means, using as reference the values of the parameter used in the simulations. For both models the analysis of variance method proved to be more accurate for the estimation of variance components and heritability, considering the groups of simulation used in this work.

- **KEYWORDS:** Heritability; variance components; analysis of variance method; maximum likelihood method; estimation; simulation.

Referências

BARBIN, D. *Componentes de variância: teoria e aplicações*. Piracicaba: FEALQ, 1993. 120p.

COELHO, A. M. *Simulação de dados visando à estimação de componentes de variância e coeficientes de herdabilidade*. 2005. 131f. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2005.

CUSTÓDIO, T. N. *Comparação de modelos mistos para dados de proporções visando a estimação do coeficiente de herdabilidade*. 2004. 121f. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agronômica) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2004.

FALCONER, D. S.; MACKAY, T. F. C. *Introduction to quantitative genetics*. 4th ed. London: Longman Group, 1996. 464p.

FERNANDEZ, D. W. X. *Modelos de populações finitas e máxima verossimilhança restrita no problema de estimativas negativas para componentes de variância*. 1991. 118f. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 1991.

FREITAS, A. R. *Comparação de métodos para estimação de componentes de variância e parâmetros afins de múltiplos caracteres em bovinos*. 1991. 170f. Tese (Doutorado em Genética e Melhoramento de Plantas) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 1991.

HARTLEY, H. O.; RAO, J. N. K. Maximum likelihood estimation for the mixed analysis of variance model. *Biometrika*, London, v.54, p.93-108, 1967.

OTSUKI, I. P. *Influência de transformações de dados sobre a estimação dos componentes de variância*. 1991. 66f. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agronômica) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 1991.

SCHEFFÉ, H. *The analysis of variance*. New York: John Wiley & Sons, 1961. 477p.

SEARLE, S. R.; CASELLA, G.; McCULLOCH, C. E. *Variance components*. New York: John Wiley & Sons, 1992. 501p.

Recebido em 18.06.2005.

Aprovado após revisão em 24.06.2006.