

FATORIAIS FIXOS DESBALANCEADOS: UMA ANÁLISE MAL COMPREENDIDA¹

FRANCISCO STEFANO WECHSLER²

RESUMO - Poucos são os usuários de aplicativos estatísticos que sabem analisar adequadamente fatoriais desbalanceados, pois os compêndios introdutórios não tratam do assunto em detalhe. Este trabalho visa a explicar a pesquisadores de ciências agrárias as diferenças entre os principais programas. Mostra-se como testar hipóteses de interesse relativas a médias populacionais, em modelos com fatores qualitativos e quantitativos. Enfatizam-se os perigos de empregar cegamente os aplicativos sem antes conhecer as hipóteses por eles testadas.

Termos para indexação: aplicativos estatísticos, análise estatística, parcelas perdidas.

UNBALANCED FACTORIALS: A MISUNDERSTOOD ANALYSIS

ABSTRACT - Few users of statistical packages are capable of analyzing unbalanced factorials properly, because introductory textbooks do not discuss this topic in detail. The present article is directed to agriculture researchers, with the purpose of clarifying the differences among several widely used programs. It shows how to test useful hypotheses about population means in models having qualitative and quantitative factors. The paper emphasizes the pitfalls of blindly applying packages without prior knowledge of the hypotheses being tested.

Index terms: statistical packages, statistical analysis, missing data.

INTRODUÇÃO

É freqüente, em pesquisa agropecuária, a necessidade de investigar vários dos fatores que atuam sobre uma variável dependente. A primeira opção consiste em montar um experimento para cada fator. A segunda, consiste em estudar os fatores simultaneamente, num fatorial. Este arranjo permite investigar as interações entre os fatores, além de estimar a variância do erro experimental com maior precisão, aumentando destarte a potência dos testes estatísticos. Por estas razões, os fatoriais adquiriram grande popularidade, sendo tratados em qualquer livro introdutório de delineamentos experimentais.

¹ Aceito para publicação em 29 de julho de 1997.

² Eng. Agr., Ph.D., Prof. Assistente, Dep. de Produção e Exploração Animal, Fac. de Med. Veterinária e Zootecnia, Univ. Estadual Paulista, Caixa Postal 560, CEP 18618-000 Botucatu, SP.

Quando se trabalha com número de repetições constante e se empregam os delineamentos mais simples (inteiramente casualizado, blocos completos ao acaso e quadrados latinos), a análise de fatoriais é relativamente fácil. Nesta situação, todos os efeitos são ortogonais, o que permite calcular cada soma de quadrados (S.Q.) independentemente das demais. Existindo números desiguais de repetições (fatoriais desbalanceados), destrói-se a ortogonalidade, e os cálculos das S.Q. tornam-se bem mais complexos.

O advento de aplicativos estatísticos nos últimos vinte anos simplificou a análise de fatoriais desbalanceados. Todavia, graças à facilidade de uso dos programas, criou-se a falsa impressão de que bastaria fornecer os dados ao computador e este se encarregaria do resto. Os mesmos dados, analisados por diferentes aplicativos, ou por diferentes opções do mesmo programa, podem gerar várias S.Q. e testes F inteiramente diversos. Até meados da década de 70 grassava a controvérsia entre os estatísticos quanto ao método adequado de análise. Grande parte da confusão foi desfeita pelos trabalhos de Speed et al. (1978) e Searle et al. (1981). Estes autores mostraram que as discrepâncias entre as S.Q. resultavam de diferenças nas hipóteses testadas; salientaram a importância de conhecer bem o programa empregado, sob pena de testar hipóteses de pouco ou nenhum interesse; e alertaram sobre as deficiências de documentação dos programas. Hocking (1984) oferece um tratamento matematicamente rigoroso do assunto.

Decorridos mais de dez anos, a situação na prática infelizmente pouco mudou. Poucos são os usuários que estão a par do problema e sabem manejar os aplicativos adequadamente para testar as hipóteses desejadas. Os compêndios introdutórios de Estatística Experimental, via de regra, omitem este tópico, ou tratam-no perfunctoriamente.

Este artigo visa a explicar como analisar modelos fatoriais fixos desbalanceados, testando hipóteses de real interesse. Apenas modelos bifatoriais serão discutidos, mas aplicam-se os mesmos princípios à análise de modelos com maior número de fatores. Os exemplos referir-se-ão sempre ao delineamento inteiramente casualizado, exceto na última seção, onde os princípios serão estendidos à análise de experimentos em blocos completos ao acaso com parcelas perdidas. Fatoriais com caselas vazias, isto é, com um ou mais tratamentos sem nenhuma observação, não serão aqui tratados, devido à complexidade da análise.

Cinco aplicativos estatísticos (três estrangeiros e dois nacionais) serão comparados (Tabela 1).

TABELA 1. Aplicativos estatísticos comparados neste artigo.

Titulo	Sigla	Referência
Mixed Model Least-Squares and Maximum Likelihood Computer Program (Modelo 1) ¹	LSMLMW	Harvey (1987)
Sistema para Análises Estatísticas e Genéticas	SAEG	Euclides (1983)
Sistema de Análise Estatística para Microcomputadores	SANEST ²	Zonta et al. (1984)
Statistical Analysis System	SAS	SAS Institute (1985)
Statistical Package for the Social Sciences	SPSS	Norušis (1986)

¹ Os demais modelos são mistos.

² No caso de dados desbalanceados, o programa analisa somente modelos bifatoriais.

Modelos estatísticos superparametrizados

Seja um experimento no qual aplicamos o fator A em a níveis e o fator B em b níveis (fatorial a x b). Inicialmente suporemos que A e B são qualitativos, isto é, têm níveis que representam categorias distintas, como sexos, produtos, raças etc. Na maioria dos compêndios, este fatorial é representado por um modelo semelhante ao abaixo:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + \varepsilon_{ijk} \quad i = 1, 2, \dots, a; \quad j = 1, 2, \dots, b; \quad k = 1, 2, \dots, r_{ij}$$

onde μ é uma constante, α_i denota o efeito do i-ésimo nível de A, β_j o efeito do j-ésimo nível de B, γ_{ij} o efeito da interação entre A e B, e ε_{ijk} o erro experimental aleatório associado à k-ésima repetição. Geralmente presume-se que os ε_{ijk} são normal e independentemente distribuídos, com média 0 e variância σ^2 , ou seja, $\varepsilon \sim \text{NID}(0, \sigma^2)$, o que permite a aplicação dos testes estatísticos usuais.

Este modelo não define claramente o que se entende por “efeito de A”, “efeito de B” e “efeito da interação”. Os parâmetros α , β e γ não são estimáveis, a menos que se adote alguma restrição (Searle, 1971), sendo a mais comum admitir que:

$$\sum_{i=1}^a \alpha_i = \sum_{j=1}^b \beta_j = \sum_{i=1}^a \gamma_{ij} = \sum_{j=1}^b \gamma_{ij} = 0 \quad (\text{“restrições usuais”}).$$

Por esta razão, o modelo recebe o nome de “superparametrizado”. Num fatorial desbalanceado, as S.Q. de A, B e interação poderão variar, bem assim as hipóteses de nulidade a elas associadas, dependendo das restrições e procedimentos computacionais empregados. Daí surgem os freqüentes mal-entendidos acerca das hipóteses testadas pelos aplicativos.

Modelos de médias

Para maior clareza, torna-se preferível trabalhar com o modelo de médias (Searle, 1971; Hocking & Speed, 1975; Hocking, 1984). Nele se pressupõe que as unidades experimentais que recebem determinado tratamento pertencem a uma população. O fatorial a x b da seção precedente é simbolizado por:

$$y_{ij} = \mu_{ij} + \varepsilon_{ijk} \quad i = 1, 2, \dots, a; \quad j = 1, 2, \dots, b; \quad k = 1, 2, \dots, r_{ij}$$

onde μ_{ij} representa a média populacional do tratamento formado pela combinação do i-ésimo nível de A com o j-ésimo de B. Também aqui se admite que $\varepsilon \sim \text{NID}(0, \sigma^2)$. Ocasionalmente impõem-se restrições ao modelo ditas pelo conhecimento prévio do assunto. Por exemplo, pode-se presumir a ausência de interação:

$$\mu_{ij} - \mu_{i^*j} - \mu_{ij^*} + \mu_{i^*j^*} = 0, \quad \text{onde } i \neq i^* \text{ e } j \neq j^*.$$

Nas discussões subseqüentes, o modelo tratado será sempre o sem restrições, exceto nas duas últimas seções.

Exemplo 1. Seja um fatorial 2 x 3, aqui representado por meio de um quadro com seis caselas (Tabela 2). Em cada casela aplicou-se um tratamen-

to, ao qual corresponde uma μ_{ij} . Esta é sempre estimável, desde que a casela correspondente esteja preenchida, isto é, contenha pelo menos uma repetição ($r_{ij} > 0$). O melhor estimador linear não-viciado (MELNV) de uma μ_{ij} é a média aritmética das observações do tratamento, simbolizada por \bar{y}_{ij} . Em conseqüência, o MELNV de qualquer função linear das μ_{ij} é a correspondente função das \bar{y}_{ij} (Searle, 1971; Hocking, 1984). Por exemplo, o MELNV da diferença $\mu_{11} - \mu_{21}$ é simplesmente a diferença entre as médias aritméticas correspondentes: $\bar{y}_{11} - \bar{y}_{21}$.

Quando todas as caselas de uma linha ou coluna estão preenchidas, pode-se definir a média marginal populacional como sendo a média aritmética das μ_{ij} correspondentes. Por exemplo, a média marginal da *i*-ésima linha é: $\bar{\mu}_i = (\sum_{j=1}^b \mu_{ij})/b$ e seu MELNV é: $(\sum_{j=1}^b \bar{y}_{ij})/b$. As \bar{y}_{ij} são independentes (Hocking, 1984), com variâncias σ^2/r_{ij} e covariâncias nulas; portanto, a variância deste estimador é simplesmente: $(\sigma^2/b^2) \sum_{j=1}^b (1/r_{ij})$. Geralmente substitui-se σ^2 nesta fórmula por uma estimativa s^2 . Raciocínio análogo aplica-se às médias marginais de colunas.

As hipóteses de nulidade por testar neste modelo referem-se sempre às médias de caselas ou às médias marginais. As de maior interesse para o pesquisador, denominadas neste trabalho de hipóteses preferidas, são geralmente as seguintes:

- diferenças entre tratamentos: $H_0: \mu_{ij} = \mu_{i^*j^*} \quad i = i^* \text{ e/ou } j \neq j^*$
- efeito médio de A: $H_0: \bar{\mu}_i = \bar{\mu}_{i^*} \quad i = i^*$
- efeito médio de B: $H_0: \bar{\mu}_j = \bar{\mu}_{j^*} \quad j = j^*$
- efeito da interação: $H_0: \mu_{ij} - \mu_{i^*j} = \mu_{ij^*} - \mu_{i^*j^*} \quad i = i^* \text{ e } j \neq j^*$

A primeira hipótese refere-se à igualdade entre as médias das caselas; para testá-la, usa-se a S.Q. de tratamentos, que é sempre a mesma, independentemente do programa e método computacional empregados. As hipóteses relativas aos efeitos principais (A e B) referem-se à igualdade entre médias marginais. Por fim, a hipótese de interação refere-se à constância da diferença entre dois níveis de A dentro de qualquer nível de B (e vice-versa). Estas definições não são únicas; por exemplo, poder-se-ia conceituar o "efeito de A" como

$H_0: (\sum_{j=1}^b r_{ij} \mu_{ij})/r_i = (\sum_{j=1}^b r_{i^*j} \mu_{i^*j})/r_{i^*} \quad (i \neq i^*)$, uma hipótese sobre médias marginais ponderadas das μ_{ij} . Contudo, as definições acima correspondem, quase sempre,

TABELA 2. Quadro esquemático de um fatorial 2 x 3.

Níveis do fator A	Níveis do fator B		
	1	2	3
1	μ_{11}	μ_{12}	μ_{13}
2	μ_{21}	μ_{22}	μ_{23}

às hipóteses consideradas de maior utilidade para o teste a ser feito por meio do aplicativo.

Amiúde deseja-se desdobrar certo efeito principal mediante contrastes previamente planejados: $\ell_1 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b c_{ij} \mu_{ij}$, tais que

$\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b c_{ij} = 0$. O MELNV de um contraste é:

$$\hat{\ell} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b c_{ij} \bar{y}_{ij}$$

Havendo número constante de repetições, costuma-se proceder a este desdobramento mediante contrastes ortogonais previamente planejados, que testem hipóteses de real interesse. Para que exista ortogonalidade é necessário que, para todos os pares de contrastes, seja preenchida a condição $\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (c_{ij} c_{h*ij}) = 0$, onde $h \neq h^*$. Deste modo, como existem $a-1$ graus de liberdade para o efeito de A, este poderá ser desdobrado em $a-1$ contrastes ortogonais. A cada contraste corresponde uma S.Q. e o total destas S.Q. é igual à S.Q. de A. A S.Q. de um contraste é dada pela conhecida fórmula:

$$S.Q. = r \hat{\ell}^2 / \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b c_{ij}^2$$

Esta S.Q., dividida por s^2 , produz um teste F de $H_0: \ell_1 = 0$. Similarmente desdobra-se o efeito de B em $b-1$ contrastes. De forma mais geral, é possível desdobrar os $ab-1$ graus de liberdade de tratamentos em $ab-1$ contrastes ortogonais, cujas S.Q., somadas, fornecem a S.Q. de tratamentos. Estes contrastes são linearmente independentes, isto é, nenhum contraste é função linear dos demais. Mais rigorosamente, a matriz de coeficientes dos contrastes tem posto completo de linha (Noble & Daniel, 1986). A independência linear assegura que as hipóteses testadas sejam distintas.

Em fatoriais desbalanceados, para atender à condição $\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (c_{ij} c_{h*ij} / r_{ij}) = 0$ seriam amiúde necessários contrastes de escassa serventia. É preferível, portanto, usar os mesmos contrastes que se aplicariam caso o número de repetições fosse constante. Eles já não são ortogonais, mas continuam sendo linearmente independentes. A S.Q. de cada contraste é dada pela fórmula:

$$S.Q. = \hat{\ell}_1^2 / \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (c_{ij}^2 / r_{ij})$$

O total destas S.Q. não é igual à S.Q. do efeito desdobrado; não obstante, elas testam as hipóteses de interesse. Uma notável exceção a este princípio é o caso de polinômios ortogonais, tratado mais adiante.

Exemplo 2. Suponhamos que se pretendia realizar o fatorial do Exemplo 1 com quatro repetições, mas perdeu-se uma repetição do tratamento 23. Havia sido planejado desdobrar o efeito de B em dois contrastes (Tabela 3), caso a análise de variância (ANDEVA) preliminar não acusasse interação. Se o número de repetições fosse constante, estes contrastes seriam ortogonais, pois:

$$(2)(0) + (-1)(1) + (-1)(-1) + (2)(0) + (-1)(1) + (-1)(-1) = 0$$

$$(2)(0)/4 + (-1)(1)/4 + (-1)(-1)/4 + (2)(0)/4 + (-1)(1)/4 + (-1)(-1)/3 = 1/12 \neq 0$$

Se os coeficientes do primeiro contraste passarem a ser: 2, -1, -1, 7/4, -1 e -3/4, a ortogonalidade será restaurada; contudo, a hipótese testada por este contraste dificilmente teria algum significado biológico. Toma-se, pois, preferível aplicar os contrastes originalmente planejados. Caso a ANDEVA acusasse interação, seria melhor analisar o efeito de B dentro de cada nível de A, mantendo, pelo mesmo motivo, os contrastes originais.

Às vezes, já no planejamento decidiu-se analisar o efeito de um fator mediante g contrastes não-ortogonais, porém linearmente independentes, que testam hipóteses de interesse. O total das S.Q. destes contrastes não será igual à S.Q. do fator analisado, mesmo com número constante de repetições. Quando se opta por contrastes não-ortogonais, é recomendável (Gill, 1978a), para proteger a probabilidade de erro do tipo 1, rejeitar as hipóteses de nulidade somente quando $|t|$ exceder o valor crítico da distribuição de Student correspondente a $\alpha/2g$ (testes bilaterais) ou α/g (testes unilaterais). Obtém-se, destarte, o conhecido teste de Bonferroni, para o qual Chew (1977) fornece tabelas apropriadas.

Exemplo 3. Plantaram-se duas variedades de milho (fator A), nas quais se estudou a resposta ao nitrogênio mineral ou à presença da bactéria *Azospirillum* (fator B). O fator B consistiu dos seguintes níveis qualitativos: 1) bactéria viva + meio de cultura; 2) bactéria morta + meio de cultura (testemunha 1); 3) nitrogênio mineral em cobertura sem bactéria; 4) nada adicionado (testemunha 2). Com relação ao fator B, foram planejados quatro contrastes não-ortogonais (Tabela 4) que elucidariam as questões julgadas mais importantes. O primeiro contraste testa a ação da bactéria viva, pois o efeito do meio de cultura é eliminado; o segundo verifica se o meio de cultura produziria algum efeito; o terceiro testa o efeito da adubação mineral; e o quarto compara a produção obtida com bactéria + meio à obtida com adubação mineral. Admitindo-se que se deseje realizar testes bilaterais e se use $\alpha = 0,05$, as hipóteses de nulidade serão rejeitadas sempre que $|t|$ exceder o valor crítico correspondente a $0,05 / [(2)(4)] = 0,00625$.

TABELA 3. Análise do efeito do fator B num fatorial 2 x 3 por meio de contrastes linearmente independentes (Exemplo 2).

Contraste	Tratamento					
	11	12	13	21	22	23
Nível 1 de B vs. a média dos demais.	2	-1	-1	2	-1	-1
Nível 2 de B vs. Nível 3.	0	1	-1	0	1	-1
Número de repetições.	4	4	4	4	4	3

TABELA 4. Análise do efeito do fator B num fatorial.

Contraste	Tratamento ¹							
	11	12	13	14	21	22	23	24
Viva vs. testemunha 1	1	-1	0	0	1	-1	0	0
Morta vs. testemunha 2	0	1	0	-1	0	1	0	-1
Nitrogênio vs. testemunha 2	0	0	1	-1	0	0	1	-1
Viva vs. nitrogênio	1	0	-1	0	1	0	-1	0

¹ Fator A: variedades de milho. Fator B: 1 = bactéria viva + meio de cultura; 2 = testemunha 1 (bactéria morta + meio de cultura); 3 = nitrogênio mineral; 4 = testemunha 2 (nada adicionado).

Ajuste total ou parcial do modelo

Os programas estatísticos comumente trabalham com o modelo superparametrizado, com base no qual geram as S.Q. e os testes F. Não há diferenças entre programas no tocante às S.Q. de tratamentos ou dos resíduos. As discrepâncias surgem no cálculo das demais S.Q., que se obtêm por ajuste total ou parcial do modelo.

No ajuste total, a S.Q. do efeito é calculada com todos os demais parâmetros presentes. A soma das S.Q. de A, B e interação não é igual à S.Q. de tratamentos. As hipóteses de nulidade, em termos do modelo superparametrizado, são comumente expressas da seguinte forma:

efeito de A (ajustado para os demais parâmetros): $H_0: \alpha = 0 \mid \mu, \beta, \gamma$
 efeito de B (ajustado para os demais parâmetros): $H_0: \beta = 0 \mid \mu, \alpha, \gamma$
 efeito da interação (ajustado para os demais parâmetros): $H_0: \gamma = 0 \mid \mu, \alpha, \beta$

onde o símbolo “|” significa “na presença de”. A notação acima não expressa com clareza o que de fato está sendo testado em termos das médias populacionais. Searle et al. (1981) mostraram que, quando se empregam as “restrições usuais” e o ajuste total, as hipóteses relativas às médias populacionais são as preferidas.

Nos cinco aplicativos estatísticos aqui discutidos, estas hipóteses correspondem às S.Q. da Tabela 5. Quando se empregam estes programas, consoante as especificações da Tabela 5, as S.Q. dos efeitos principais correspondem às S.Q. obtidas pelo método das “médias ponderadas” (Yates, 1934). As S.Q. de contrastes linearmente independentes calculadas por estes programas correspondem às S.Q. calculadas pela fórmula da seção anterior.

No ajuste parcial, nem todos os parâmetros são introduzidos no modelo para testar uma hipótese. Uma variante deste método é o ajuste sequencial, que introduz os parâmetros um a um. Por exemplo, se for especificado o modelo na seguinte ordem: A, B e interação, as hipóteses, em termos do modelo superparametrizado, são as seguintes:

efeito de A, ajustado para a média: $H_0: \alpha = 0 \mid \mu$
 efeito de B, ajustado para a média e A: $H_0: \beta = 0 \mid \mu, \alpha$
 efeito da interação, ajustado para os demais parâmetros: $H_0: \gamma = 0 \mid \mu, \alpha, \beta$

TABELA 5. Somas de quadrados geradas pelo método de ajuste total nos diversos programas.

Aplicativo	Programa	Tipo de S.Q.
LSMLMW		Modelo 1
SAEG	ANOVAG ¹	
SANEST		Não calcula
SAS	GLM	3 e 4 ²
SPSS	MANOVA	“Única”
SPSS	ANOVA	Opção 9

¹ Este programa baseia-se numa versão anterior do LSMLMW.

² O tipo 3 é computacionalmente diverso do 4, mas as S.Q. se igualam quando não há caselas vazias.

O método do ajuste seqüencial corresponde às S.Q. listadas na Tabela 6. Se β for o primeiro parâmetro e α o segundo, obter-se-ão S.Q. diferentes, mas a soma das três S.Q. é sempre igual à S.Q. de tratamentos. A S.Q. do primeiro efeito (no caso A) é a que se obteria numa análise de variância com o fator A como único critério de classificação: $\sum_{i=1}^b (y_i^2/r_i) - (y^2)/r$ (Searle, 1971; Harvey, 1975). Percebe-se que a hipótese testada por último pelo método seqüencial coincide sempre, num fatorial a x b, com a do método de ajuste total. Contudo, novamente não fica claro o que de fato está sendo testado em termos de médias populacionais.

Na realidade, o efeito de A ajustado para a média corresponde a $H_0: \left(\sum_{j=1}^b r_{ij} \mu_{ij} \right) / r_i = \left(\sum_{j=1}^b r_{i^*j} \mu_{i^*j} \right) / r_{i^*}$ ($i \neq i^*$), e o efeito de B, ajustado para a média e A, corresponde a $H_0: \sum_{i=1}^b r_{ij} \mu_{ij} = \sum_{j=1}^b \sum_{i=1}^b \frac{r_{ij} r_{i^*j} \mu_{i^*j}}{r_i}$ ($j \neq j^*$) (Speed et al., 1978). A primeira hipótese refere-se à igualdade entre as "médias marginais ponderadas" de A, onde os pesos são os números de repetições. Esta hipótese, embora de claro significado, dificilmente teria relevância biológica. O significado da segunda hipótese é bem mais obscuro, e interessa menos ainda. A hipótese da interação ajustada para os demais parâmetros é a única que normalmente teria utilidade:

$H_0: \mu_{ij} - \mu_{i^*j} = \mu_{ij^*} - \mu_{i^*j^*}$, a mesma testada pelo método de ajuste total.

Há, ainda, programas que adotam outros tipos de ajuste parcial. Por exemplo, Nelder & Wedderburn (1972) afirmam que não faz sentido introduzir a interação no modelo antes dos efeitos principais. Seguindo esta filosofia, as hipóteses "adequadas" seriam:

efeito de A (ajustado para a média e B): $H_0: \alpha = 0 \mid \mu, \beta$
 efeito de B (ajustado para a média e A): $H_0: \beta = 0 \mid \mu, \alpha$
 efeito da interação (ajustado para os demais parâmetros): $H_0: \gamma = 0 \mid \mu, \alpha, \beta$

Este método corresponde ao "ajuste de constantes" (Yates, 1934), bem como às S.Q. do tipo 2 do GLM e às S.Q. "ajustadas" do SANEST. A hipótese da interação é a mesma do método de ajuste total. A soma das três S.Q. não fornece a S.Q. de tratamentos.

Em termos de médias populacionais, o efeito de A obtido pelo método de ajuste de constantes corresponde a $H_0: \sum_{j=1}^b r_{ij} \mu_{ij} = \sum_{i=1}^b \sum_{j=1}^b \frac{r_{ij} r_{i^*j} \mu_{i^*j}}{r_j}$ ($i \neq i^*$), e o de

TABELA 6. Somas de quadrados geradas pelo método de ajuste seqüencial nos diversos programas.

Aplicativo	Programa	Tipo de S.Q.
LSMLMW		Somente para ajuste de polinômios ortogonais
SAEG	ANOVAG	Idem
SANEST		"Sem ajuste"
SAS	GLM	1
SPSS	MANOVA	"Seqüencial"

B a $H_0: \sum_{i=1}^a r_i \mu_{ij} = \sum_{j=1}^b \sum_{i=1}^a \frac{r_i r_j \mu_{ij}^*}{r_i} \quad (j \neq j^*)$ (Speed et al., 1978), hipóteses de

significado obscuro e sem interesse. Se for restringido "a priori" o modelo, presumindo ausência de interação, as S.Q. de A e B obtidas pelo método de ajuste de constantes coincidem com as do método de ajuste total.

Facilmente se verifica que, sendo o número de repetições constante ($r_i = r$), as hipóteses testadas pelos dois últimos métodos reduzem-se às preferidas. Daí por que todos os métodos chegam às mesmas S.Q. no caso balanceado.

Exemplo 4. Realizou-se, em casa de vegetação, com caixas, um ensaio de competição entre quatro variedades de feijão cultivadas em três tipos de solo (Tabela 7). A Tabela 8 mostra as médias aritméticas dos tratamentos (arredondadas até a primeira casa decimal). As médias marginais estimadas são simplesmente médias aritméticas das médias dos tratamentos. A Tabela 9 mostra os quadrados médios obtidos na ANDEVA.

O grupo 1 de aplicativos usa o método de ajuste total e testa as hipóteses preferidas. Com base nos resultados deste grupo, verifica-se que os solos diferem, mas não há evidência de interação nem de diferenças entre variedades. Os quadrados médios dos efeitos principais calculados pelo grupo 3 são idênticos aos obtidos pelo grupo 1 com o modelo sem interação (vide Exemplo 8), mas o quadrado médio dos resíduos corresponde ao do modelo completo.

Seja verificar se o solo 1 difere da média dos outros dois. Formula-se o contraste:

$$\ell = 2(\mu_{11} + \mu_{21} + \mu_{31} + \mu_{41}) - (\mu_{12} + \mu_{22} + \mu_{32} + \mu_{42}) - (\mu_{13} + \mu_{23} + \mu_{33} + \mu_{43}),$$

que é estimado por:

$$\hat{\ell} = 2(1106,7 + \dots + 976,3) - (1148,0 + \dots + 1162,7) - (1026,5 + \dots + 732,5) = 1335,8.$$

TABELA 7. Produção de quatro variedades de feijão cultivadas em três tipos de solo (Exemplo 4).

Variedade	Produção (g/10 m ²)									
	Tipo de solo									
	1			2			3			
1	1107	1014	1199	1148	-	-	902	885	1179	1140
2	1477	1260	-	1223	-	-	797	899	-	-
3	1210	1333	-	980	-	-	820	1159	-	-
4	1150	1095	684	1346	1108	1034	927	505	682	816

TABELA 8. Médias aritméticas dos tratamentos e médias marginais estimadas do Exemplo 4.

Variedade	Solo			Média marginal estimada de variedade
	Solo			
	1	2	3	
1	1106,7	1148,0	1026,5	1093,7
2	1368,5	1223,0	848,0	1146,5
3	1271,5	980,0	989,5	1080,3
4	976,3	1162,7	732,5	957,2
Média marginal estimada de solo	1180,8	1128,4	899,1	-

Em outras palavras, deseja-se testar se a média marginal do solo 1 é igual à média das médias marginais dos outros dois solos. A S.Q. deste contraste é dada por:

$(1335,8)^2 / (4/3 + 4/2 + \dots + 1/4) = 155161,88$. Os programas do grupo 1 calculam esta mesma S.Q. (com pequena diferença, devido à maior precisão dos cálculos). O F respectivo é dado por:

$155161,88 / 29031,84 = 5,34$ ($p < 0,05$). O SANEST estima o mesmo contraste de forma diferente: as estimativas das médias marginais e a S.Q. do contraste são obtidas por meio do modelo restrito, ou seja, sem interação (vide penúltima seção), mas o teste F usa como denominador o quadrado médio dos resíduos do modelo completo. Este procedimento segue a filosofia do método de ajuste de constantes, mas é incongruente do ponto de vista do modelo de médias. A interação só deveria ser omitida do modelo em virtude de evidências anteriores ao experimento (Urquhart & Weeks, 1978).

Se a ANDEVA do Exemplo 4 houvesse acusado interação, seria preferível analisar o efeito de solos separadamente para cada variedade, ou vice-versa (como na Tabela 10), usando sempre o ajuste total.

O LSMLMW, ANOVAG, SANEST, GLM e MANOVA chegam ao mesmo resultado.

TABELA 9. Quadrados médios da análise de variância Exemplo 4, calculada pelos diversos aplicativos.

Fonte de variação	G.L.	Grupo 1 ¹	Grupo 2 ²	Grupo 3 ³
Variedades (V)	3	47059,45	59571,12	65760,84
Solos (S)	2	218210,91*	233276,74*	233276,74*
VxS	6	42475,44	42475,44	42475,44
Resíduos	16	29031,84	29031,84	29031,84

¹ LSMLMW modelo 1; ANOVAG; GLM com S.Q. dos tipos 3 e 4; ANOVA com opção 9; MANOVA com S.Q. "únicas".

² SANEST com a primeira S.Q. "não ajustada"; GLM com S.Q. do tipo 1; ANOVA com opção 10; MANOVA com S.Q. "sequenciais".

³ SANEST com S.Q. "ajustadas"; GLM com S.Q. do tipo 2.

* $p < 0,01$.

TABELA 10. Análise do efeito de variedades dentro de cada tipo de solo (Exemplo 4).

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Solos	2	436421,82	218210,91	7,52**
Variedades dentro do solo 1	3	221038,57	73679,52	2,54*
Variedades dentro do solo 2	3	34094,17	11364,72	0,39
Variedades dentro do solo 3	3	197002,42	65667,47	2,26
Resíduos	16	464509,50	29031,84	-

* $p < 0,10$.

** $p < 0,01$.

Possivelmente, desejar-se-ia comparar a variedade 2 com as outras três, dentro do solo 1, formulando o contraste:

$\ell = 3\mu_{12} - (\mu_{11} + \mu_{13} + \mu_{14})$, que é estimado por:

$\hat{\ell} = (3)(1368,5) - (1106,7 + 1271,5 + 976,3) = 751,0$. Calcula-se a S.Q. por: $(751)^2 / (9/2 + 1/3 + 1/2 + 1/3) = 99529,59$. O F é obtido por: $99529,59 + 29031,84 = 3,43$ ($p < 0,10$). Estes mesmos valores são obtidos pelo LSMLMW, SANEST, GLM e MANOVA.

Vários programas calculam médias denominadas de "quadrados mínimos" ou "ajustadas". Todavia, como ressaltam Searle et al. (1980), nem sempre estas médias estimam alguma função das μ_{ij} que seja útil. Para os dados do Exemplo 4, o LSMLMW, ANOVAG (versão 3.0), GLM e MANOVA fornecem médias de quadrados mínimos que coincidem com as estimativas calculadas nesta seção. (A versão 4.0 do ANOVAG não fornece estas médias.) Os erros-padrões também coincidem com os calculados mediante a fórmula (o ANOVAG não os fornece). Por exemplo, o erro-padrão da média marginal estimada do solo 3 é:

$\sqrt{(29031,84/4^2)(1/4 + 1/2 + 1/2 + 1/4)} = 52,17$. O SANEST estima as médias de caselas por meio do modelo fatorial completo, chegando aos mesmos valores obtidos pelos demais programas; contudo, emprega o modelo sem interação para estimar as médias marginais (vide Exemplo 8).

Testes de comparação múltipla com médias marginais

Quando um fator possui mais de dois níveis qualitativos, e não existe entre eles uma relação estrutural que permita planejar o desdobramento em contrastes, costuma-se aplicar um teste de comparação múltipla às médias marginais. Seja comparar as médias marginais de A, duas a duas. O erro-padrão estimado da diferença entre duas médias marginais de A é:

$\sqrt{\frac{s^2}{b^2} \sum_{j=1}^b (1/r_{ij} + 1/r_{i^*j})}$, onde $i \neq i^*$. Este erro-padrão serve como denominador num teste t da diferença:

$$t = \frac{\sum_{j=1}^b (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{i^*j}) / b}{\sqrt{\frac{s^2}{b^2} \sum_{j=1}^b (1/r_{ij} + 1/r_{i^*j})}}$$

Seja comparar no Exemplo 4 a média marginal do solo 1 com a do solo 2:

$$t = \frac{(1180,8 - 1128,4)}{\sqrt{(29031,84/4^2)(1/3 + 1/1 + \dots + 1/3)}} = 0,550$$

O GLM fornece todos os testes t realizados com os pares das médias de quadrados mínimos. No LSMLMW, SANEST e MANOVA é preciso espe-

cificar todos os contrastes desejados. Em todos estes programas, os testes são bilaterais. Ademais, o SANEST usa estimativas das médias marginais obtidas pelo modelo sem interação, obtendo, para o contraste acima, $t = -0,239$ ($p > 0,10$).

Para comparar as médias marginais do fator A, duas a duas, serão necessários $g = a(a-1)/2$ contrastes. Uma maneira de proteger a probabilidade α de erro do tipo 1 consiste em aplicar o teste de Bonferroni, rejeitando as hipóteses de nulidade apenas quando $|t|$ exceder o valor crítico da distribuição de Student correspondente $\alpha/2g = \alpha/[a(a-1)]$. Como os testes efetuados pelos programas são bilaterais, para comparar por meio deles as três médias marginais de solos, com $\alpha = 0,05$, rejeitam-se as hipóteses de nulidade sempre que $p < 0,05/3 \approx 0,0167$. Cumpre ressaltar que o teste de Bonferroni é conservador, ou seja, a probabilidade global de erro do tipo 1 fica abaixo de α , ocasionando perda de sensibilidade para acusar diferenças reais entre médias (Chew, 1977; Stoline, 1981).

Uma segunda (e melhor) possibilidade consiste em aplicar o teste de Tukey. Num fatorial balanceado, a diferença mínima significativa (Δ) entre médias marginais obtém-se pela conhecida fórmula:

$\Delta = q_{\alpha,a,v} \sqrt{s^2/br}$ (Neter & Wasserman, 1974), onde $q_{\alpha,a,v}$ representa o valor crítico da amplitude estudentizada para uma probabilidade α de erro do tipo 1, a médias e v graus de liberdade usados para calcular o quadrado médio dos resíduos.

Num fatorial desbalanceado, as variâncias das médias marginais estimadas dependem dos números de repetições envolvidos, e podem diferir para cada nível de A. Por conseguinte, sugere-se empregar uma variante do teste de Tukey-Kramer (Kramer, 1956), que usa a média aritmética das variâncias. A fórmula da diferença mínima significativa torna-se, pois:

$$\Delta = q_{\alpha,a,v} \sqrt{\frac{s^2}{ab^2} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (1/r_{ij})}$$

Para comparar os níveis de B, usa-se $q_{\alpha,b,v}$ e s^2/a^2b na fórmula acima. O teste de Tukey-Kramer é conservador, mas em menor grau que o de Bonferroni (Kramer, 1956; Stoline, 1981).

Havendo evidência de interação, é preferível comparar as médias de A dentro de cada nível de B:

$$\Delta = q_{\alpha,a,v} \sqrt{\frac{s^2}{a} \sum_{i=1}^a (1/r_{ij})}$$

No Exemplo 4, para comparar as médias marginais dos solos, o valor crítico da amplitude estudentizada para $\alpha = 0,05$, três médias e 16 graus de liberdade é 3,649. Calcula-se, pois:

$$\Delta = 3,649 \sqrt{\frac{29031,84}{(4)^2(3)} (1/3+1/1+\dots+1/3+1/4)} = 228,8 \text{ kg/ha.}$$

A seguir, colocam-se as médias marginais dos solos em ordem decrescente e aplica-se o teste (Tabela 11).

Se a ANDEVA houvesse acusado interação, usar-se-ia, para comparar os solos dentro da variedade 1:

$$\Delta = 3,649 \sqrt{\frac{29031,84}{3} (1/3 + 1/1 + 1/3)} = 463,4 \text{ kg/ha.}$$

De forma análoga se aplicaria o teste dentro das demais variedades.

O ANOVAG e o GLM calculam um teste de Tukey, mas usando as médias de linhas ou colunas, não as médias marginais estimadas, e as hipóteses testadas são de escasso interesse. O LSMLMW e MANOVA não dispõem do teste de Tukey. Cabe ao usuário que optar pela aproximação aqui sugerida empregar um destes programas para obter os valores das médias marginais estimadas, números de repetições e quadrado médio dos resíduos, aplicando-os em seguida na fórmula acima.

O SANEST calcula o teste de Tukey-Kramer, mas compara as médias "ajustadas" de solos, que são obtidas pelo modelo sem interação. Em rigor, dever-se-ia usar neste caso outra aproximação proposta por Kramer (1957), que leva em conta também as covariâncias entre as médias "ajustadas" (vide penúltima seção). Os resultados no Exemplo 4 foram os mesmos obtidos pela aproximação acima proposta, mas esta coincidência nem sempre ocorrerá.

Modelos com um fator qualitativo e o outro quantitativo

Seja A o fator qualitativo e B, o quantitativo. Também neste caso pode-se aplicar o modelo de médias. Usualmente inicia-se a análise por meio do teste de interação, empregando as S.Q. obtidas pelo método do ajuste total. Não se detectando interação, analisam-se os efeitos de A e B. Testa-se o primeiro pelo método do ajuste total. Quanto ao efeito de B, por ser este fator quantitativo, é preferível analisá-lo por meio de regressão. Comumente se adota um modelo polinomial:

$$y_{ijk} = \beta_{\alpha} + \beta_1(x_j - \bar{x}_{..}) + \beta_2(x_j - \bar{x}_{..})^2 + \dots + \beta_{b-1}(x_j - \bar{x}_{..})^{(b-1)} + \varepsilon_{ijk}$$

TABELA 11. Comparação das médias marginais de solos por meio do teste de Tukey-Kramer (Exemplo 4).

Solo	Média marginal estimada ¹
1	1180,8a
2	1128,4a
3	899,4b

¹ Médias com a mesma letra não diferem estatisticamente ($p > 0,05$).

onde a variável x denota o efeito dos níveis quantitativos de B ; e os β são parâmetros da regressão. Neste modelo, o "efeito de A " refere-se às distâncias médias entre as curvas polinomiais, isto é, testa-se:

$$H_0: \beta_{0i} = \beta_{0i^*} \quad (i \neq i^*)$$

A análise dos efeitos polinomiais pode ser efetuada por meio dos métodos usuais de análise de regressão (Neter & Wasserman, 1974). As hipóteses de nulidade de maior interesse são quase sempre as seguintes:

Efeito linear:	$H_0: \beta_1 = 0 \mid \beta_0$
Efeito quadrático:	$H_0: \beta_2 = 0 \mid \beta_0, \beta_1$
Efeito cúbico:	$H_0: \beta_3 = 0 \mid \beta_0, \beta_1, \beta_2$
etc.	

Trata-se de hipóteses seqüenciais, pois cada coeficiente é testado na presença de todos os termos polinomiais de menor grau. A soma das S.Q. seqüenciais dos $b-1$ termos é sempre igual à S.Q. de B , com ou sem número constante de repetições. Estas hipóteses podem ser testadas, em vários aplicativos, substituindo as classes do fator B pelos seus correspondentes níveis quantitativos e realizando uma análise de regressão, na qual os efeitos de B são introduzidos no modelo conforme a seqüência acima. Os testes apropriados para a análise de regressão são obtidos pelos programas que usam o ajuste seqüencial.

Cumprê salientar que as hipóteses seqüenciais numa análise de regressão não são as únicas possíveis. Poder-se-ia, por exemplo, testar cada termo na presença dos demais (ajuste simultâneo). Para um polinômio de terceiro grau, as hipóteses de nulidade neste caso seriam as seguintes:

Efeito linear:	$H_0: \beta_1 = 0 \mid \beta_0, \beta_2, \beta_3$
Efeito quadrático:	$H_0: \beta_2 = 0 \mid \beta_0, \beta_1, \beta_3$
Efeito cúbico:	$H_0: \beta_3 = 0 \mid \beta_0, \beta_1, \beta_2$

A hipótese relativa ao termo de grau mais elevado (cúbico, no caso) é sempre idêntica à testada pelo ajuste seqüencial. As demais hipóteses são de difícil interpretação biológica e raramente interessam. As S.Q. correspondentes são aquelas obtidas pelos programas que usam o método de ajuste total. A soma destas S.Q. não é igual à S.Q. de B , mesmo havendo número constante de repetições. Esta advertência faz-se necessária, pois o método de ajuste total, apropriado aos testes de hipóteses que envolvem níveis qualitativos, não testa hipóteses de interesse geral relativas à regressão polinomial.

A análise de regressão pode provocar, com polinômios de grau mais elevado, sérias imprecisões nos cálculos, devido às altas correlações entre os efeitos (Neter & Wasserman, 1974). Por este motivo, prefere-se recorrer a polinômios ortogonais, desdobrando-se a S.Q. de B em até $(b-1)$ contrastes, relativos ao efeito linear, quadrático, cúbico etc. No caso de fatoriais balanceados e níveis equidistantes de B , o desdobramento efetua-se facilmente mediante tabelas de polinômios ortogonais (Fisher & Yates, 1971). É possí-

vel calcular estes coeficientes também para níveis não-eqüidistantes. As hipóteses de nulidade testadas por estes polinômios são as seqüenciais acima descritas (Chew, 1977). Num fatorial balanceado, os polinômios ortogonais podem ser incluídos em qualquer ordem no modelo, sem alterar as S.Q. ou a seqüencialidade das hipóteses acima. A soma das S.Q. dos polinômios é sempre igual à S.Q. de B. Esta é a análise clássica, explanada em muitos compêndios, como o de Pimentel-Gomes (1982).

No caso de fatoriais desbalanceados, não se devem usar diretamente os coeficientes de tabelas, pois os contrastes resultantes tornam-se não-ortogonais, e não testam as hipóteses de interesse. As hipóteses mais úteis permanecem sendo as seqüenciais, e as respectivas S.Q. podem ser obtidas usando-se os contrastes do caso balanceado, mas ajustados seqüencialmente. Por este motivo, especificar corretamente a ordem de inclusão dos efeitos polinomiais no modelo é crucial em vários aplicativos, para que se testem as hipóteses adequadas.

Exemplo 5. Os dados da Tabela 12 provieram de um ensaio de adubação nitrogenada de capim-elefante. A ANDEVA preliminar (obtida pelo método de ajuste total) é mostrada na Tabela 13.

Como o SANEST não usa o ajuste total, mas sim o método de ajuste de constantes, os resultados são previsivelmente outros (Tabela 14). Os F dos efeitos principais, como já visto, não testam hipóteses de interesse geral.

Já que a ANDEVA da Tabela 13 não acusou interação, será possível ajustar um polinômio comum às duas variedades, empregando desta feita o ajuste seqüencial. O usuário deverá incluir no modelo as variedades e a interação antes do N. Desprezam-se os testes F de variedades e interação nesta ANDEVA (Tabela 15). Ressalte-se que a soma das S.Q. dos efeitos polinomiais de N é igual à S.Q. de N obtida pelo método de ajuste total,

TABELA 12. Produção de capim-elefante sob quatro níveis de adubação nitrogenada (Exemplo 5).

Variedade	Produção de matéria seca (t/ha/ano)													
	N (kg/ha)													
	50		150		250		350							
1	21.9	25.2	-	-	23.2	23.5	22.3	28.9	27.8	26.1	26.4	-	-	-
2	21.8	21.8	18.8	16.1	21.3	24.6	-	24.3	31.5	-	30.6	25.4	31.7	28.3

TABELA 13. Análise de variância do Exemplo 5 pelo método de ajuste total.

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Variedades (V)	1	0,32	0,32	0,05
Nitrogênio (N)	3	139,38	46,46	6,91*
V x N	3	24,26	8,09	1,20
Resíduos	13	87,44	6,73	-

* $p < 0,01$.

correspondendo ao desdobramento clássico do caso balanceado. Se a interação fosse incluída depois dos efeitos polinomiais, a soma das S.Q. destes seria igual à S.Q. de N obtida com base no modelo restrito (sem interação) e não corresponderia ao desdobramento do efeito de N calculado na ANDEVA anterior.

Com o LSMLMW e ANOVAG, a análise é mais simples, pois estes programas já ajustam o polinômio seqüencialmente, após haver incluído os demais efeitos, chegando às S.Q. acima.

O MANOVA adverte o usuário de que ele especificou um conjunto de contrastes não-ortogonais, havendo necessidade de verificar a matriz de soluções para determinar as hipóteses testadas. O aviso decorre da maneira pela qual o programa monta os contrastes relativos aos polinômios. Para melhor esclarecer este ponto, cumpre lembrar que, no caso balanceado, os coeficientes dos polinômios ortogonais são (Fisher & Yates, 1971): -3, -1, +1, +3; +1, -1, -1, +1; e -1, +3, -3, +1; para o efeito linear, quadrático e cúbico, respectivamente. Estes contrastes de fato não são ortogonais no exemplo em tela, devido aos números desiguais de repetições. O MANOVA, na análise seqüencial, modifica estes valores, usando: -0,770, -0,169, +0,354, +0,585; +0,539, -0,569, -0,477, +0,508; e -0,243, -0,728, +0,728 e -0,243. Facilmente se comprova a ortogonalidade destes contrastes, cujas S.Q. são as da Tabela 15. O contraste referente ao efeito cúbico, aliás, equivale ao do caso balanceado.

O SANEST emprega os coeficientes do caso balanceado, aplicando-os no modelo restrito (sem interação). O efeito da interação é incluído pelo

TABELA 14. Análise de variância do Exemplo 5 pelo SANEST.

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Variedades (V) ajustadas para o nitrogênio	1	1,80	1,80	0,27
Nitrogênio (N) ajustado para as variedades	3	217,76	72,59	10,79*
V x N ajustada para N e V	3	24,26	8,09	1,20
Resíduos	13	87,44	6,73	-

* p < 0,01.

TABELA 15. Análise do efeito do nitrogênio por meio de polinômios, usando o ajuste seqüencial (Exemplo 5).

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Variedades (V)	1	0,63	0,63	0,09
V x N	3	102,64	34,21	5,09
N linear	1	121,94	121,94	18,13*
N quadrático	1	1,57	1,57	0,23
N cúbico	1	15,87	15,87	2,36
Resíduos	13	87,44	6,73	-

*p < 0,001.

programa no final (Tabela 16). Por não serem ortogonais estes contrastes, a soma das S.Q. dos efeitos polinomiais não é igual à S.Q. de N obtida na primeira ANDEVA do SANEST. A hipótese relativa ao efeito cúbico é idêntica à obtida pelo método seqüencial na ausência de interação; as demais são de pouco interesse.

Exemplo 6. Se a análise inicial do Exemplo 5 houvesse revelado interação, seria recomendável ajustar separadamente um polinômio dentro de cada nível de A, o que se consegue, no GLM e MANOVA, pelo método seqüencial, tendo o cuidado de incluir previamente todos os demais efeitos. É necessária uma ANDEVA para cada polinômio (Tabela 17). Em cada análise, consideram-se apenas os três últimos testes F, desprezando-se os demais. O LSMLMW e ANOVAG efetuam estas análises automaticamente num único conjunto. O SANEST fornece desta feita os mesmos resultados, pois emprega contrastes ortogonais.

TABELA 16. Análise do efeito do nitrogênio por meio de polinômios, usando o SANEST (Exemplo 5).

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
N linear	1	204,41	204,41	30,39*
N quadrático	1	0,87	0,87	0,13
N cúbico	1	10,94	10,94	0,22
Resíduos	13	87,44	6,73	-

* $p < 0,001$.

TABELA 17. Análise do efeito do nitrogênio dentro de variedades por meio de polinômios (Exemplo 6).

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Análise do efeito de N dentro da variedade 1				
Variedades	1	0,63	0,63	0,09
N dentro da variedade 2	3	203,58	67,86	10,09*
N linear dentro da variedade 1	1	22,44	22,44	3,34*
N quadrático dentro da variedade 1	1	0,00	0,00	0,00
N cúbico dentro da variedade 1	1	15,99	15,99	2,38
Resíduos	13	87,44	6,73	-
Análise do efeito de N dentro da variedade 2				
Variedades	1	0,63	0,63	0,09
N dentro da variedade 1	3	38,43	12,81	1,90
N linear dentro da variedade 2	1	197,13	197,13	29,31**
N quadrático dentro da variedade 2	1	3,30	3,30	0,49
N cúbico dentro da variedade 2	1	3,16	3,16	0,47
Resíduos	13	87,44	6,73	-

* $p < 0,100$.

** $p < 0,001$.

Ambos os fatores quantitativos (Superfície de resposta)

O modelo polinomial completo neste caso é:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_1(x_i - \bar{x}) + \alpha_2(x_i - \bar{x})^2 + \dots + \alpha_{a-1}(x_i - \bar{x})^{(a-1)} + \beta_1(z_j - \bar{z}) + \beta_2(z_j - \bar{z})^2 + \dots + \beta_{b-1}(z_j - \bar{z})^{(b-1)} + \gamma_{11}(x_i - \bar{x})(z_j - \bar{z}) + \dots + \gamma_{(a-1)(b-1)}(x_i - \bar{x})^{(a-1)}(z_j - \bar{z})^{(b-1)} + \epsilon_{ijk}$$

onde as variáveis x e z denotam os efeitos dos níveis quantitativos de A e B, respectivamente; e μ , os α e os β são parâmetros da regressão.

Seguindo a filosofia das seções precedentes, procede-se à análise dos efeitos principais e interação pelo método do ajuste total. Em seguida, cada um dos três efeitos é desdobrado pelo método seqüencial. Desta forma, cada coeficiente do polinômio é testado na presença de todos os termos afins de menor grau, bem como de todos os demais efeitos (Damon Junior & Harvey, 1987). O LSMLMW e ANOVAG efetuam automaticamente estes testes. Um inconveniente desta análise é que se torna difícil decidir qual o modelo polinomial mais simples que se deve adotar para explicar e prever satisfatoriamente a resposta.

Um modo mais lógico de análise consiste em ajustar inicialmente um modelo tão simples quanto possível, incluindo progressivamente termos de grau mais elevado. Seguindo Cochran & Cox (1957), pode-se recomendar a seguinte seqüência. Testam-se inicialmente as seguintes hipóteses:

$$H_0: \alpha_1 = 0 \mid \mu \text{ e}$$

$$H_0: \beta_1 = 0 \mid \mu. \text{ Os testes subseqüentes são os dos efeitos quadráticos:}$$

$$H_0: \alpha_2 = 0 \mid \mu, \alpha_1, \beta_1 \text{ e}$$

$$H_0: \beta_2 = 0 \mid \mu, \alpha_1, \beta_1. \text{ Posteriormente, testa-se a interação entre os termos lineares:}$$

$$H_0: \gamma_{11} = 0 \mid \mu, \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2. \text{ A seguir, vêm os testes dos efeitos cúbicos:}$$

$$H_0: \alpha_3 = 0 \mid \mu, \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, \gamma_{11} \text{ e}$$

$H_0: \beta_3 = 0 \mid \mu, \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, \gamma_{11}$. Depois, vêm os testes das interações entre termos lineares e quadráticos, e assim por diante. Segue-se o mesmo princípio para modelos com mais de dois fatores. Damon Junior & Harvey (1987) sugerem iniciar com o modelo completo e efetuar estes testes na ordem inversa. Obviamente, há necessidade de efetuar várias análises pelo método de ajuste seqüencial.

Em experimentação agrícola é comum o ajuste de uma superfície de resposta de segundo grau, ou seja, uma função que inclui os termos lineares e quadráticos e os produtos entre termos lineares. Na maioria dos casos, tal superfície mostra-se adequada para explicar o comportamento da variável dependente. Igualando as derivadas parciais de primeira ordem a zero, forma-se um sistema de equações lineares, que permite obter o ponto estacionário da função; este poderá ser um máximo, mínimo ou ponto de sela

(Granville et al., 1965). Para esclarecer a natureza do ponto estacionário, é preciso calcular as derivadas parciais de segunda ordem neste ponto, obtendo a matriz hessiana. Se todos os autovalores da hessiana forem negativos, a matriz é definida negativa, e a função atinge um máximo; se todos forem positivos, a hessiana é definida positiva, e tem-se um mínimo; e se alguns autovalores forem positivos e outros negativos, trata-se de um ponto de sela (Gill, 1978b; Pimentel-Gomes & Conagin, 1991). O programa RSREG do SAS ajusta superfícies multifatoriais de segundo grau e calcula os autovalores da hessiana.

Uma terceira possibilidade consiste em obter o "melhor" modelo por meio de inclusão ou remoção sucessiva de termos. Há três tipos principais de análise: ascendente ("step-up"), descendente ("step-down") e passo-a-passo ("stepwise") (Neter & Wasserman, 1974). Na análise ascendente, começa-se por um modelo que só inclui μ (ou nem este termo, se se pressupuser que $\mu = 0$); a seguir, adiciona-se o termo que melhor contribuição apresente; posteriormente, adiciona-se o melhor segundo termo, e assim sucessivamente, até esgotar os graus de liberdade do modelo ou até que não se disponha de nenhum termo que dê contribuição adicional significativa. Na análise descendente, começa-se com um modelo complexo e tenta-se eliminar um termo de cada vez, testando a diferença que isto provoca no ajuste, até chegar ao modelo mais simples possível, no qual todos os termos dão contribuição significativa. Na análise passo-a-passo, adiciona-se um termo de cada vez; a diferença com relação à análise ascendente é que se testa a contribuição de todos os demais termos a cada adição, podendo sair um termo que havia sido incluso num passo anterior.

Como as funções obtidas por métodos de "melhor" regressão nem sempre serão superfícies de segundo grau, a obtenção dos pontos estacionários poderá requerer procedimentos complexos de resolução de equações não-lineares (Kopchenova & Maron, 1975), e a interpretação biológica será dificultada. Ademais, a lógica de inclusão de determinados termos e exclusão de outros poderá ser duvidosa. Por exemplo, em certas situações o programa incluirá no modelo $(x_i - \bar{x})(z_j - \bar{z})$, mas não $(x_i - \bar{x})^2$ ou $(z_j - \bar{z})^2$, o que é questionável (Cochran & Cox, 1957). Na Tabela 18 listam-se os programas dos aplicativos estatísticos que efetuam estas análises.

Exemplo 7. Na Tabela 19 listam-se os resultados de um fatorial 3^2 no qual se estudou o efeito da adubação fosfatada e potássica sobre a produção de grãos de soja.

TABELA 18. Programas que buscam o "melhor" modelo de regressão.

Aplicativo	Programa	Método de análise		
		Ascendente	Descendente	Passo-a-passo
LSMLMW		Não	Sim	Não
SAEG	REGRELIN	Não	Sim	Não
SAS	REG ¹	Sim	Sim	Sim
SPSS	REGRESSION	Sim	Sim	Sim

¹ Este programa oferece outros métodos, além dos três citados.

Os resultados da análise pelo LSMLMW ou ANOVAG são mostrados na Tabela 20. Nesta, as S. Q. entre parênteses foram obtidas pelo método de ajuste total, sendo, a seguir, desdobradas seqüencialmente em efeitos polinomiais. Resultados idênticos obtêm-se por meio do GLM e MANOVA, usando o método seqüencial e colocando os termos polinomiais na ordem apropriada.

O SANEST, como de costume, analisa cada efeito principal na presença do outro, e, a seguir, ajusta a interação. Na análise de regressão polinomial, aplica os contrastes do caso balanceado às médias "ajustadas" (Tabela 21). As S.Q. dos efeitos quadráticos são as que se obteriam pelo método seqüencial num modelo sem interação. Os efeitos lineares testam $H_0: \beta_1 = 0 \mid \beta_0, \beta_2$.

TABELA 19. Efeito da adubação fosfatada e potássica sobre a produção de soja (Exemplo 7).

P ₂ O ₅ (kg/ha)	Produção de grãos (kg/ha)									
	K ₂ O (kg/ha)									
	0			30			60			
0	508	626	541	-	-	788	-	1330	1111	1289
60	996	1357	1290	1641	1089	1543	2001	2437	-	-
120	1746	1434	1850	1525	1797	2437	-	1601	2137	1819

TABELA 20. Análise de variância do Exemplo 7 efetuada pelo LSMLMW e ANOVAG.

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Fósforo (P)	(2)	(4068106)	(2034053)	(45,60)**
Linear	1	3483530	3483530	78,10**
Quadrático	1	584576	584576	13,10**
Potássio (K)	(2)	(1969519)	(984760)	(22,08)**
Linear	1	1895506	1895506	42,50**
Quadrático	1	74013	74013	1,66
P x K	4	851106	212776	4,77*
Resíduos	15	669084	44606	-

*p < 0,05.

**p < 0,001.

TABELA 21. Análise de variância do Exemplo 7 efetuada pelo SANEST.

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
P ajustado para K	(2)	(4088113)	(2044056)	(45,83)**
Linear	1	3890695	3890695	87,22**
Quadrático	1	378287	378287	8,48*
K ajustado para P	(2)	(1623540)	(811770)	(18,20)**
Linear	1	1327935	1327935	29,77**
Quadrático	1	122463	122463	2,75*
P x K ajustada para P e K	4	851106	212776	4,77*
Resíduos	15	669084	44606	-

*p < 0,05.

**p < 0,001.

Para comparar os programas de ajuste de superfície de resposta, recodificaram-se os valores de P e K, para passarem a ser -1, 0 e 1. A Tabela 22 mostra a análise realizada pelo RSREG, que acusou significativa contribuição dos termos lineares e quadráticos, evidenciada pelos testes F. O termo do produto deu uma contribuição mais fraca. Por outro lado, o F dos desvios da regressão indica que a adição de outros termos melhoraria o ajuste, mas dificultaria a interpretação biológica. A superfície ajustada é expressa pela seguinte equação (arredondando-se os coeficientes até o inteiro mais próximo):

$$\hat{y} = 1840 + 487\tilde{P} + 290\tilde{K} - 296\tilde{P}^2 - 201\tilde{K}^2 - 126\tilde{P}\tilde{K}$$

onde \hat{y} representa a produção esperada, e \tilde{P} e \tilde{K} , os valores recodificados de P e K, respectivamente. O coeficiente de determinação calculado pelo RSREG é R^2 do modelo, definido por:

S.Q. do modelo / S.Q. total. Este R^2 mede a eficiência do modelo estatístico em explicar a variação total; o modelo poderia incluir, além da regressão, efeitos de blocos e/ou outros fatores qualitativos, dependendo do tipo de experimento. Outra definição, aqui denominada de R^2 da regressão, é:

S.Q. da regressão / S.Q. de tratamentos. (Entenda-se aqui por "tratamentos" o conjunto de combinações de níveis dos fatores quantitativos usadas no experimento.) O R^2 da regressão mede especificamente a eficiência da regressão em explicar a variação entre tratamentos, ou seja, o ajuste da regressão em termos do máximo que se poderia conseguir com um modelo polinomial completo (Draper & Smith, 1981). Portanto, este R^2 avalia mais claramente a adequação da superfície de resposta. Na Tabela 22 listam-se os R^2 do modelo e da regressão. O RSREG fornece automaticamente o ponto estacionário, determinado por $P = 103$ kg/ha e $K = 45$ kg/ha, para o qual a produção esperada é 2.086 kg/ha. Também calcula os autovalores da hessiana: -170 e -327. Por serem ambos negativos, trata-se de um ponto de máximo.

Na Tabela 23 mostram-se os resultados fornecidos pelos diversos programas que trabalham com ajuste sucessivo. O método ascendente do REG omitiu \tilde{K}^2 , mas incluiu todas as interações, o que, segundo as recomenda-

TABELA 22. Análise de variância do Exemplo 7 efetuada pelo RSREG.

Efeito	G.L.	S.Q. seqüenciais	Incremento no R^2 do modelo ¹	Incremento no R^2 da regressão ²	F	p
P e K lineares	2	4535973	0,681	0,757	31,26	0,000
P e K quadráticos	2	602176	0,090	0,100	4,15	0,033
$P_L \times K_L$	1	214147	0,032	0,036	2,95	0,103
Superfície quadrática	5	5352296	0,803	0,893	14,75	0,000
Desvios da regressão	3	636958	-	-	4,76	0,016
Erro puro	15	669084	-	-	-	-
Total	23	6658339	-	-	-	-

¹ R^2 do modelo = S.Q. do modelo/S.Q. total. Esta definição de R^2 é a usada pelo RSREG.

² R^2 da regressão = S.Q. do modelo/S.Q. de tratamentos.

ções de Cochran & Cox (1957), é incongruente. O LSMLMW omitiu $\tilde{P}^2\tilde{K}^2$. Os demais programas produziram a mesma regressão, omitindo \tilde{P}^2 e \tilde{K}^2 , mas incluindo $\tilde{P}\tilde{K}$; também aqui a lógica é questionável. Note-se a discrepância entre o método ascendente de REG e o de REGRESSION, que é provocada por diferenças entre os programas nos critérios de inclusão de termos no modelo. Pelo mesmo motivo, a análise do LSMLMW não concorda com as demais análises descendentes. Ademais, este programa produziu uma estimativa de μ que é incorreta para o modelo adotado, pois baseia-se numa definição diferente (Harvey, 1987). O REG e REGRESSION, bem como o GLM e o MANOVA, fornecem a estimativa correta para o mesmo modelo.

Na Tabela 24 mostram-se os coeficientes de determinação (R^2) e Q.M. dos resíduos correspondentes às regressões obtidas pelo LSMLMW, REGRELIN, RSREG, REG e REGRESSION. Todos os programas, com exceção do LSMLMW, calculam o R^2 do modelo; o LSMLMW, no caso de superfície de resposta, fornece o R^2 da regressão. A função que melhor se ajustou aos dados, a julgar pelo Q.M. dos resíduos, foi a gerada pela análise ascendente do REG; esta função explica 89,9% da variação total ou 99,9% do que se conseguiria com o modelo polinomial completo. Neter & Wasserman (1974) e Draper & Smith (1981) discutem outros critérios para avaliar o ajuste de regressões múltiplas.

TABELA 23. Resultados da análise do Exemplo 7 por programas que buscam a "melhor" regressão.

Programa ¹	Método ²	Coeficientes do polinômio ³								
		μ	\tilde{P}	\tilde{K}	\tilde{P}^2	\tilde{K}^2	$\tilde{P}\tilde{K}$	$\tilde{P}^2\tilde{K}$	$\tilde{P}\tilde{K}^2$	$\tilde{P}^2\tilde{K}^2$
LSMLMW	D	1928 ⁴	824	528	-425	-128	-124	-309	-396	0
REGRELIN	D	1767	824	522	0	0	-126	-305	-394	-435
REG	A	1824	824	560	-212	0	-126	-344	-394	-281
	D, P	1767	824	522	0	0	-126	-305	-394	-435
REGRESSION	A, D, P	1767	824	522	0	0	-126	-305	-394	-435

¹ Usaram-se os critérios de inclusão e remoção definidos pelo próprio programa.

² A = ascendente; D = descendente; P = passo-a-passo.

³ Obtidos para valores recodificados de P e K (-1, 0 e 1).

⁴ Para o modelo adotado, este valor deveria ser 1905.

TABELA 24. Comparação dos coeficientes de determinação e quadrados médios dos resíduos correspondentes às regressões das Tabelas 22 e 23.

Programa	Método ¹	R^2 do modelo ²	R^2 da regressão ³	Q.M. _{RES}
LSMLMW	D	0,885	0,984	47880
REGRELIN	D	0,888	0,988	43715
RSREG	-	0,803	0,893	72558
REG	A	0,898	0,999	42366
	D, P	0,888	0,988	43715
REGRESSION	A, D, P	0,888	0,988	43715

¹ A = ascendente; D = descendente; P = passo a passo.

² R^2 do modelo = S.Q. do modelo / S.Q. total. Todos os programas, à exceção do LSMLMW, usam esta definição de R^2 .

³ R^2 da regressão = S.Q. do modelo / S.Q. de tratamentos. Somente o LSMLMW usa esta definição de R^2 .

Os resultados dos ajustes de superfície de resposta aos dados do Exemplo 7 devem ser vistos com cautela, pois perderam-se várias repetições. Conquanto superfícies de resposta complexas, com termos de terceiro e quarto graus, sejam matematicamente justificáveis, do ponto de vista biológico é duvidoso refinar a análise até este nível, mormente quando os dados estão comprometidos. Ademais, o uso de superfícies polinomiais de resposta pode provocar o aparecimento de pontos estacionários espúrios. Modelos polinomiais são versáteis e de ajuste relativamente simples, mas nem sempre seus parâmetros possuem validade biológica; modelos não-lineares (Draper & Smith, 1981) poderão ser mais apropriados. Um modelo não-linear bastante usado na análise de superfícies de resposta à adubação é o de Mitscherlich (Pimentel-Gomes, 1982; Pimentel-Gomes & Conagin, 1991).

Modelos sem interação

Ocasionalmente, há razões anteriores ao experimento que justificam pressupor a ausência de interação. O modelo fica sujeito, pois, à restrição: $\mu_{ij} - \mu_{i\cdot j} - \mu_{i\cdot} + \mu_{i\cdot j\cdot} = 0$. No modelo restrito, desde que não existam caselas vazias, todas as μ_{ij} são estimadas sem viés tanto pelas \bar{y}_{ij} como por médias ajustadas. Estas últimas são calculadas com base nas \bar{y}_{ij} , levando-se em consideração as restrições impostas ao modelo. As médias ajustadas possuem menor variância (Searle, 1971; Urquhart & Weeks, 1978; Hocking, 1984), sendo, portanto, os MELNV das μ_{ij} . Ao contrário das \bar{y}_{ij} , as covariâncias das médias ajustadas não são obrigatoriamente nulas. Os programas LSMLMW, SANEST, GLM e MANOVA calculam estes estimadores, que são as médias de quadrados mínimos dos tratamentos.

Na ausência de interação, é preferível estimar contrastes usando as médias ajustadas. Devido à presença de covariâncias não-nulas, o cálculo das respectivas S.Q. é complexo, devendo-se recorrer a algum programa estatístico que empregue o método de ajuste total. Para comparar médias marginais pelo teste de Tukey, sugere-se a aproximação proposta por Kramer (1957) e discutida por Harvey (1975). Para comparar os níveis i e i^* do fator A, usa-se:

$$\Delta = q_{\alpha, a, v} \sqrt{\frac{s^2 (c_{ii} + c_{i^*i^*} - 2c_{ii^*})}{2}} \quad i \neq i^*$$

onde $q_{\alpha, a, v}$ representa a amplitude estudentizada para uma probabilidade α de erro do tipo 1, a médias marginais e v graus de liberdade dos resíduos; s^2 é a estimativa da variância do erro experimental no modelo restrito; e c_{ii} , $c_{i^*i^*}$ e c_{ii^*} representam os coeficientes da matriz de covariâncias (Searle, 1971; Harvey, 1975). Deste modo, c_{ii} é o coeficiente usado para calcular a variância do efeito do i -ésimo nível de A; $c_{i^*i^*}$ é usado para calcular a variância do efeito do nível i^* ; e c_{ii^*} é usado para o cálculo da covariância entre estes dois efeitos.

Exemplo 8. Seja pressupor, no Exemplo 4, a ausência de interação entre variedades e solos. Os MELNV das μ_{ij} (médias ajustadas fornecidas por programa) são mostrados na Tabela 25. Estimam-se as médias marginais por meio das médias aritméticas das médias ajustadas. O LSMLMW, ANOVAG, SANEST, GLM e MANOVA calculam estes valores para as médias ajustadas e estimam corretamente as médias marginais.

A Tabela 26 mostra a ANDEVA obtida pelo método do ajuste total. Todos os cinco aplicativos calculam esta ANDEVA corretamente. As S.Q. de variedades e solos testam as hipóteses preferidas acerca das médias marginais, tal como no modelo completo. O Q.M. dos resíduos no modelo restrito é diferente do obtido com o modelo completo.

O erro-padrão da média marginal estimada do solo 3, calculado pelo LSMLMW e GLM, é: 53,55. O contraste "solo 1 vs. média dos outros dois" é estimado por:

$\hat{\ell}_h = (2) (1162,9) - 1184,2 - 909,3 = 232,3$. A S.Q. correspondente, calculada por estes aplicativos, é 81952,49, dando $F = 81952,49 + 32698,28 = 2,51$ ($p > 0,100$). Os erros-padrões das médias, bem como as S.Q. e os F dos efeitos principais e contrastes, diferem dos valores obtidos no Exemplo 4 com o modelo completo.

Para comparar as médias marginais de solos por meio do teste de Tukey, recorre-se aos coeficientes da matriz de covariâncias. Basta no caso usar a submatriz dos efeitos de solos. O LSMLMW e o MANOVA trabalham com as restrições usuais (Searle, 1971; Harvey, 1975), produzindo:

$$\text{Solo} \begin{matrix} & \text{1} & \text{2} & \text{3} \\ \text{1} & \left[\begin{array}{ccc} 0,073187628 & -0,051510682 & (-0,021676946) \\ & 0,097322785 & (-0,045812103) \\ & & (0,067489049) \end{array} \right] \\ \text{2} & & & \\ \text{3} & & & \end{matrix}$$

O MANOVA fornece os mesmos valores, mas com apenas dois ou três algarismos significativos. Estes programas não fornecem os coeficientes entre parênteses, que se calculam com base na restrição $\sum_{i=1}^3 \alpha_i = 0$ e na simetria da submatriz (Harvey, 1975). Por exemplo, $c_{13} = -[0,073187628 + (-0,051510682)] = -0,021676946$. O valor de c_{21} é idêntico ao de c_{12} , e portanto: $c_{23} = -[(-0,051510682) + 0,097322785] = -0,045812103$. Calcula-se c_{33} de forma análoga. O valor da amplitude estudentizada para $\alpha = 0,05$; 3 médias e 22 graus de liberdade é 3,555. Seja comparar o solo 2 com o 3; calcula-se Δ do seguinte modo:

TABELA 25. Médias ajustadas e médias marginais estimadas do Exemplo 8.

Variedade	Solo			Média marginal estimada de variedade
	1	2	3	
1	1195,9	1217,2	942,3	1118,5
2	1228,4	1249,7	974,8	1151,0
3	1197,6	1218,9	944,0	1120,2
4	1029,8	1051,1	776,1	952,3
Média marginal estimada de solo	1162,9	1184,2	909,3	-

$$S.Q. \text{resíduos} = 432724377 - 6016972 - 409213674 = 17493731$$

$$Q.M. \text{ dos resíduos} = 17493731 / 18 = 971874.$$

A S.Q. de tratamentos acima calculada não serve para testar diferenças entre tratamentos. Contudo, devido à ausência de interação entre blocos e tratamentos, são válidas as seguintes identidades:

$$S.Q. \text{ total} = S.Q. \text{ de blocos (não-ajustada)} + S.Q. \text{ de tratamentos (ajustada)} + S.Q. \text{ dos resíduos}$$

$$S.Q. \text{ total} = S.Q. \text{ de tratamentos (não-ajustada)} + S.Q. \text{ de blocos (ajustada)} + S.Q. \text{ dos resíduos.}$$

Desprezam-se agora as parcelas perdidas nos seguintes cálculos:

$$C = (198788)^2 / 28 = 1411309605$$

$$S.Q. \text{ total} = (11711)^2 + \dots + (1854)^2 - C = 422054545$$

$$S.Q. \text{ de blocos (não-ajustada)} = (34189)^2/5 + (43784)^2/6 + \dots + (40975)^2 - C = 9471541$$

$$S.Q. \text{ de tratamentos (ajustada para blocos)} = 422054545 - 9471541 - 17493731 = 395089273.$$

Caso haja interesse, pode-se calcular também a S.Q. de blocos ajustada:

$$S.Q. \text{ de tratamentos (não-ajustada)} = (30053)^2/4 + (64954)^2/5 + \dots + (18866)^2 + 5 - C = 398734560$$

$$S.Q. \text{ de blocos (ajustada para tratamentos)} = 422054545 - 398734560 - 17493731 = 5826254.$$

A relação entre estas S.Q. e as calculadas por programas estatísticos é direta. As S.Q. ajustadas de blocos e tratamentos, que testam as hipóteses de interesse, correspondem às obtidas pelo método de ajuste total ou ajuste de constantes. O método seqüencial permite obter todas as S.Q. (Tabela 29).

As médias aritméticas dos tratamentos, com inclusão de $\hat{\mu}$ e \hat{z} , estimam as médias marginais dos tratamentos. Por exemplo, para o tratamento "colônia não-adubado", a estimativa é:

$$(30053 + 7103) / 5 = 7431,2. \text{ O LSMLMW, ANOVAG, SANEST, GLM e MANOVA calculam corretamente estes valores.}$$

Como os tratamentos formam um fatorial 3×2 , é preferível analisar o experimento como um fatorial blocos \times espécies \times adubações, usando o método de ajuste total (Tabela 30).

TABELA 29. Somas de quadrados de um delineamento em blocos ao acaso, obtidas pelo método de ajuste seqüencial.

Ordem de inclusão no modelo	ANDEVA 1		ANDEVA 2	
	Fator	S.Q.	Fator	S.Q.
1	Blocos	Não-ajustada	Tratamentos	Não-ajustada
2	Tratamentos	Ajustada	Blocos	Ajustada

Todos os aplicativos calculam corretamente esta ANDEVA, com exceção do SANEST, que não consegue analisar modelos com mais de dois fatores. Observe-se que a soma das S.Q. de espécies, adubações e interação não é igual à S.Q. de tratamentos ajustada. Podem-se formular contrastes, que são testados corretamente pelo LSMLMW, GLM ou MANOVA. Para o teste de Tukey, recorrer-se-ia à aproximação descrita no Exemplo 8, se não existisse evidência de interação. Como a ANDEVA acusou interação no caso em tela, aplica-se o teste dentro de cada nível de adubação, o que torna a fórmula bem mais complexa:

$$\Delta = q_{\alpha, a, v} \sqrt{\frac{s^2 [c_{\alpha, \alpha_i} + c_{\alpha, \alpha_j} + c_{\gamma_i \gamma_j} + c_{\gamma_i \gamma_j} + 2(c_{\alpha, \gamma_i} + c_{\alpha, \gamma_j}) - 2(c_{\alpha, \alpha_i} + c_{\gamma_i \gamma_j} + c_{\alpha, \gamma_j} + c_{\alpha, \gamma_i})]}{2}}$$

onde o índice α dos coeficientes denota o efeito de um nível do fator A e o índice γ , o efeito da interação entre um nível de A e um de B. Por exemplo, c_{α, α_i} representa o coeficiente da matriz de covariâncias correspondente ao i -ésimo nível de A na linha e na coluna; c_{α, α_j} representa o coeficiente correspondente ao i -ésimo nível de A na linha e ao nível j de A na coluna; e assim por diante. Para comparar as espécies sem adubação, usam-se as seguintes submatrizes de coeficientes da matriz de covariâncias geradas pelo GLM:

		Espécie		
		1	2	3
Espécie	1	0,4	0,2	0
	2		0,4601503759	0
	3			0

		Espécie x adubação		
		11	21	31
Espécie	1	-0,4	-0,2	0
	2	-0,203007519	-0,460150376	0
	3	0	0	0

		Espécie x adubação		
		11	21	31
Espécie x adubação	11	0,8601503759	0,4030075188	0
	21		0,8601503759	0
	31			0

Para testar a diferença entre colônio e gordura não-adubados, calcula-se:

$$\Delta_{11 \text{ vs } 31} = 3,609 \sqrt{\frac{971874 [0,4 + 0 + 0,8601503759 + 0 + 2(-0,4 + 0)] - 2(0 + 0 + 0 + 0)}{2}} = 1.707 \text{ kg/ha.}$$

Pelo mesmo processo obtêm-se: $\Delta_{11 \text{ vs } 21} = 1707 \text{ kg/ha}$ e $\Delta_{21 \text{ vs } 31} = 1591 \text{ kg/ha}$, o que leva à Tabela 31. Chega-se a idêntico resultado por meio do LSMLMW ou MANOVA, usando os coeficientes apropriados da matriz de covariâncias.

Por processo análogo, compararam-se as espécies adubadas, usando outras submatrizes apropriadas.

Caso neste exemplo tivessem sido usados mais de dois níveis de adubação, o efeito de adubação seria analisado por regressão polinomial, da forma costumeira.

TABELA 30. Análise de variância do Exemplo 9 por meio do método de ajuste total.

Fonte de variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Blocos	4	5826255	1456564	1,50
Espécies (E)	2	260950627	130475313	134,25*
Adubações (A)	1	100285018	100285018	103,19*
E X A	2	22091036	11045518	11,36*
Resíduos	18	17493730	971874	-

*p < 0,001.

TABELA 31. Comparação das médias de espécies não adubadas do Exemplo 9 pelo teste de Tukey-Kramer.

Tratamento	Média ¹
Colônio não adubado	7431a
Jaraguá não adubado	6077a
Gordura não adubado	2356b

¹ Médias com a mesma letra não diferem estatisticamente (p > 0,05).

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

1. Ao usar um programa estatístico para a análise de fatoriais fixos desbalanceados, deve-se sempre tomar a precaução de verificar quais as hipóteses por ele testadas. Este cuidado é fundamental, pois a documentação dos aplicativos é freqüentemente obscura ou omissa.

2. Para a análise de modelos com fatores exclusivamente qualitativos, recomenda-se usar as S.Q. geradas pelos programas que empregam o ajuste total e testam as hipóteses de maior interesse acerca de médias populacionais (ANOVA com opção 9, ANOVAG, GLM com S.Q. do tipo 3, LSMLMW e MANOVA com S.Q. "únicas"). Estes programas também servem para testar

contrastes linearmente independentes, previamente planejados, que envolvam médias de caselas ou médias marginais. Para efetuar comparações múltiplas que envolvam pares de médias marginais, sugere-se o teste de Bonferroni, ou uma modificação do teste de Tukey-Kramer.

3. Quando um dos fatores for quantitativo, seu efeito deve ser analisado por meio de regressão. Costumeiramente, desdobra-se a S.Q. respectiva mediante polinômios ortogonais, usando-se o ajuste seqüencial. É fundamental que os efeitos polinomiais sejam ajustados em ordem crescente, após a inclusão no modelo dos demais fatores e interações. Para tanto, recomenda-se o ANOVAG, GLM com S.Q. do tipo 1, LSMLMW e MANOVA com S.Q. "seqüenciais".

4. Havendo mais de um fator quantitativo, pode-se escolher um modelo restrito (por exemplo, uma superfície de segundo grau), ou a "melhor" regressão, obtida por ajuste sucessivo. O RSREG ajusta automaticamente uma superfície de segundo grau, e calcula o ponto estacionário. Embora este tipo de superfície seja adequado na maioria dos casos e possua fácil interpretação biológica, nem sempre será o modelo que melhor se ajusta. Caso se opte por um programa que busque a "melhor" regressão, dever-se-á ter em mente que a superfície obtida nem sempre terá significado biológico. Além disso, os programas de "melhor" regressão poderão gerar resultados discrepantes, devido a diferenças nos critérios empregados para a inclusão ou remoção de variáveis. Recomenda-se examinar os resíduos graficamente (Neter & Wasserman, 1974; Draper & Smith, 1981), para aquilatar o ajuste.

5. Sendo válido pressupor a ausência de interação, os melhores estimadores das médias populacionais dos tratamentos são as médias de quadrados mínimos das caselas. Os contrastes são estimados com base nestas médias.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Rinaldo Polastre e aos árbitros anônimos, pela revisão do trabalho e muitas sugestões recebidas; ao Prof. Ângelo Cataneo, pela verificação da regressão calculada pelo LSMLMW no Exemplo 7; ao Sr. José Luís Barbosa de Souza e Prof. Heraldo C. Gonçalves, pelo auxílio com o SAEG; ao Sr. Marcelo Corrêa Alves, pelo auxílio com o SANEST; ao Prof. Amauri A. Machado, por informações acerca do SANEST; e ao Prof. Joachim F. W. von Bülow ("in memoriam"), pela cessão de dados nos quais se baseou o Exemplo 3.

REFERÊNCIAS

- CHEW, V. *Comparisons among treatment means in an analysis of variance*. Washington: Agricultural Research Service, 1977. 64p.
- COCHRAN, W.G.; COX, G.M. *Experimental designs*. New York: John Wiley and Sons, 1957. 611p.
- DAMON JUNIOR, R.A.; HARVEY, W.R. *Experimental design, ANOVA, and regression*. New York: Harper and Row, 1987. 508p.

- DRAPER, N.R.; SMITH, H. **Applied linear regression analysis**. New York: John Wiley and Sons, 1981. 709p.
- EUCLYDES, R.F. **Manual de utilização do programa SAEG (Sistema para Análises Estatísticas e Genéticas)**. Viçosa: UFV, 1983. 59p.
- FISHER, R.A.; YATES, F. **Tabelas estatísticas para pesquisa em biologia, medicina e agricultura**. São Paulo: EDUSP/Polígono, 1971. 150p.
- GILL, J.L. **Design and analysis of experiments in the animal and medical sciences**. Ames: Iowa State University Press, 1978a. v.1, 409p.
- GILL, J.L. **Design and analysis of experiments in the animal and medical sciences**. Ames: Iowa State University Press, 1978b. v.2, 301p.
- GRANVILLE, W.A.; SMITH, P.F.; LONGLEY, W. **Elementos de cálculo diferencial e integral**. Rio de Janeiro: Ed. Científica, 1965. 703p.
- HARVEY, W.R. **Least-squares analysis of data with unequal subclass numbers**. Beltsville: Agricultural Research Service, 1975. 157p.
- HARVEY, W.R. **User's guide for LSMLMW: PC-1 Version**. [S.l.]: 1987. 73p.
- HOCKING, R.R. **The analysis of linear models**. Monterey, CA: Brooks/Cole Publishing Company, 1984. 385p.
- HOCKING, R.R.; SPEED, F.M. A full rank analysis of some linear model problems. *Journal of the American Statistical Association*, v.70, p.706-712, 1975.
- KOPCHENOVA, N.V.; MARON, I.A. **Computational mathematics**. Moscou: Mir Publishers, 1975. 395p.
- KRAMER, C.Y. Extension of multiple range tests to group means with unequal numbers of replications. *Biometrics*, v.12, p.307-310, 1956.
- KRAMER, C.Y. Extension of multiple range tests to group correlated adjusted means. *Biometrics*, v.13, p.13-18, 1957.
- NELDER, J.A.; WEDDERBURN, R.W.M. Generalised linear models. *Journal of the Royal Statistical Society Series "A"*, v.135, p.370-384, 1972.
- NETER, J.; WASSERMAN, W. **Applied linear statistical models**. Homewood, Ill.: Richard D. Irwin, 1974. 842p.
- NOBLE, B.; DANIEL, J.W. **Álgebra linear aplicada**. Rio de Janeiro: Prentice-Hall do Brasil, 1986. 378p.
- NORUŠIS, M.J. **Advanced statistics - SPSS/PC™ for the IBM PC/XT/AT**. Chicago: SPSS Inc., 1986. 202p.
- PIMENTEL-GOMES, F. **Curso de Estatística Experimental**. Piracicaba: Nobel S/A, 1982. 468p.
- PIMENTEL-GOMES, F.; CONAGIN, A. Experimentos de adubação: planejamento e análise estatística. In: GARRIDO, W.E.; ARAUJO, J.D.; LOURENÇO, S. (Orgs.). **Métodos de pesquisa em fertilidade do solo**. Brasília: Embrapa, 1991. 392p.
- SAS INSTITUTE INC. **SAS/STAT™ Guide for Personal Computers, Version 6 Edition**. Cary, NC: SAS Institute Inc., 1985. 378p.

- SEARLE, S.R. *Linear models*. New York: John Wiley and Sons, 1971. 532p.
- SEARLE, S.R.; SPEED, F.M.; HENDERSON, H.V. Some computational and model equivalences in analyses of variance of unequal-subclass-numbers data. *The American Statistician*, v.35, p.16-33, 1981.
- SEARLE, S.R.; SPEED, F.M.; MILLIKEN, G.A. Population marginal means in the linear model: an alternative to least squares means. *The American Statistician*, v.34, p.216-221, 1980.
- SPEED, F.M.; HOCKING, R.R.; HACKNEY, O.P. Methods of analysis of linear models with unbalanced data. *Journal of the American Statistical Association*, v.73, p.105-112, 1978.
- STOLINE, M.L. The status of multiple comparisons: simultaneous estimation of all pairwise comparisons in one-way ANOVA designs. *The American Statistician*, v.35, p.134-141, 1981.
- URQUHART, N.S.; WEEKS, D.L. Linear models in messy data: some problems and alternatives. *Biometrics*, v.34, p.696-705, 1978.
- YATES, F. The analysis of multiple classifications with unequal numbers in the different classes. *Journal of the American Statistical Association*, v.29, p.51-66, 1934.
- YATES, F. The analysis of replicated experiments when the field results are incomplete. *Empire Journal of Experimental Agriculture*, v.1, p.129-142, 1933.
- ZONTA, E.P.; MACHADO, A.A.; SILVEIRA JÚNIOR, P. *Sistemas de Análise Estatística para Microcomputadores (SANEST)*. Pelotas: UFPEL, Dep. Mat. e Estatística, 1984. 151p.