Detalhamento Completo da Seção 5

Distribuições das Somas de Quadrados
Fundamentação Teórica via Teorema de Cochran

Documento Complementar

17 de novembro de 2025

1 Introdução

Este documento complementar apresenta o desenvolvimento teórico completo e detalhado da Seção 5 sobre Distribuições das Somas de Quadrados. O objetivo é fornecer uma fundamentação rigorosa e aprofundada do Teorema de Cochran e sua aplicação ao modelo de Delineamento Inteiramente Casualizado (DIC), incluindo todas as demonstrações e justificativas matemáticas necessárias para nível de doutorado.

2 Fundamentos: Teorema de Cochran

2.1 Enunciado Formal

Teorema 2.1 (Teorema de Cochran)**.** *Seja* $\mathbf{y} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \sigma^2\mathbf{I})$ *um vetor aleatório* n*-dimensional com distribuição normal multivariada, onde* $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n$ *e* $\sigma^2 > 0$*. Sejam* $\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \ldots, \mathbf{Q}_k$ *matrizes simétricas idempotentes (*$\mathbf{Q}_i = \mathbf{Q}_i^T$ *e* $\mathbf{Q}_i^2 = \mathbf{Q}_i$*) de dimensão* $n \times n$ *tais que:*

1. $\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2 + \cdots + \mathbf{Q}_k = \mathbf{I}_n$ *(decomposição da identidade)*
2. *rank*$(\mathbf{Q}_i) = r_i$ *para* $i = 1, \ldots, k$
3. $r_1 + r_2 + \cdots + r_k = n$

Então:

1. $\frac{\mathbf{y}^T\mathbf{Q}_i\mathbf{y}}{\sigma^2} \sim \chi^2_{r_i}(\delta_i)$ *são variáveis aleatórias* ***independentes****, onde* $\delta_i = \frac{\boldsymbol{\mu}^T\mathbf{Q}_i\boldsymbol{\mu}}{\sigma^2}$ *são os parâmetros de não-centralidade.*
2. *Se* $\mathbf{Q}_i\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ *para algum* i*, então* $\delta_i = 0$ *e temos distribuição qui-quadrado central:* $\frac{\mathbf{y}^T\mathbf{Q}_i\mathbf{y}}{\sigma^2} \sim \chi^2_{r_i}$*.*
3. *As matrizes* $\mathbf{Q}_i\mathbf{Q}_j = \mathbf{0}$ *para* $i \neq j$ *(condição de ortogonalidade das projeções).*

2.2 Interpretação e Importância

O Teorema de Cochran estabelece condições sob as quais somas de quadrados de variáveis aleatórias normais seguem distribuições qui-quadrado independentes. A intuição é:

- **Decomposição ortogonal:** Quando decompomos o espaço em subespaços ortogonais via matrizes de projeção idempotentes que somam a identidade, cada componente gera uma soma de quadrados independente.
- **Rank = graus de liberdade:** O rank de cada matriz de projeção corresponde aos graus de liberdade da distribuição qui-quadrado correspondente.
- **Não-centralidade:** O parâmetro de não-centralidade δ_i captura o deslocamento da média em relação à origem no subespaço correspondente.

Este teorema é fundamental para a validade exata do teste F, pois garante que as somas de quadrados SQ_A e SQ_E seguem distribuições qui-quadrado independentes sob normalidade.

2.3 Demonstração Conceitual (Esboço)

A demonstração completa do Teorema de Cochran requer conhecimento de álgebra linear avançada e teoria de distribuições quadráticas. Os passos principais são:

1. **Ortogonalidade das projeções:** Mostrar que se $\mathbf{Q}_i + \mathbf{Q}_j = \mathbf{I}$ e ambas são idempotentes, então $\mathbf{Q}_i\mathbf{Q}_j = \mathbf{0}$.
2. **Formas quadráticas:** Usar o fato de que formas quadráticas de vetores normais seguem distribuições qui-quadrado quando a matriz é idempotente.
3. **Independência:** Demonstrar que a ortogonalidade das matrizes implica independência das formas quadráticas correspondentes.
4. **Graus de liberdade:** O rank de uma matriz idempotente é igual ao seu traço, que corresponde aos graus de liberdade.

Para referências completas, consultar Hocking (2003) ou Searle (1997).

3 Aplicação ao Modelo DIC

3.1 Notação e Estrutura do Modelo

No modelo DIC, temos:

- t tratamentos
- r repetições por tratamento
- Total de observações: $n = tr$
- Modelo: $y_{ij} = \mu + \tau_i + \epsilon_{ij}$, onde $\epsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)$ independentes

Em notação matricial: $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$, onde:

- $\mathbf{y}$ é o vetor $tr \times 1$ de observações
- $\mathbf{X}$ é a matriz de delineamento $tr \times (t+1)$ com estrutura de blocos
- $\boldsymbol{\beta} = (\mu, \tau_1, \ldots, \tau_t)^T$
- $\boldsymbol{\epsilon} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_{tr})$

3.2 Matrizes de Projeção no Modelo DIC

Para aplicar o Teorema de Cochran, precisamos identificar as matrizes de projeção correspondentes às somas de quadrados. Definimos:

3.2.1 Projeção na Média Geral

A projeção no espaço gerado pelo vetor de uns $\mathbf{1}_{tr}$ (subespaço da média geral) é:

$$\mathbf{P}_0 = \frac{1}{tr}\mathbf{1}_{tr}\mathbf{1}_{tr}^T = \frac{1}{tr}\mathbf{J}_{tr},$$

onde $\mathbf{J}_{tr}$ é a matriz $tr \times tr$ de uns. Esta matriz projeta cada observação na média geral $\bar{y}$.

Propriedades:

- $\mathbf{P}_0$ é simétrica e idempotente: $\mathbf{P}_0^2 = \mathbf{P}_0$
- $\text{rank}(\mathbf{P}_0) = 1$ (projeta em espaço unidimensional)
- $\mathbf{P}_0\mathbf{y} = \bar{y}\mathbf{1}_{tr}$ (projeta todas observações na média)

3.2.2 Projeção no Espaço do Modelo

A projeção no espaço coluna da matriz de delineamento $\mathbf{X}$ é:

$$\mathbf{P}_A = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}^T,$$

onde $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-}$ é uma inversa generalizada (necessária devido à parametrização não-identificável).

Para o modelo DIC com restrição $\sum_{i=1}^t \tau_i = 0$, esta projeção pode ser escrita explicitamente como:

$$\mathbf{P}_A = \mathbf{P}_0 + \mathbf{P}_\tau,$$

onde $\mathbf{P}_\tau$ é a projeção no espaço dos efeitos dos tratamentos.

Propriedades:

- $\mathbf{P}_A$ é simétrica e idempotente
- $\text{rank}(\mathbf{P}_A) = t$ (projeta em espaço t-dimensional)
- $\mathbf{P}_A\mathbf{y}$ é o vetor de valores ajustados $\hat{\mathbf{y}}$

3.2.3 Projeção no Espaço dos Efeitos

A projeção no espaço dos efeitos dos tratamentos (diferenças em relação à média geral) é:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_A - \mathbf{P}_0.$$

Esta projeção captura as diferenças entre médias dos tratamentos e a média geral.

Propriedades:

- $\mathbf{P}$ é simétrica e idempotente
- $\text{rank}(\mathbf{P}) = t - 1$ (projeta em espaço $(t-1)$-dimensional)
- $\mathbf{Py}$ representa os desvios das médias dos tratamentos em relação à média geral

3.2.4 Projeção no Espaço Residual

A projeção no espaço residual (complemento ortogonal do espaço do modelo) é:

$$\mathbf{Q}_2 = \mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_A.$$

Esta projeção captura a variação residual (diferenças entre observações e valores ajustados).

Propriedades:

- $\mathbf{Q}_2$ é simétrica e idempotente
- $\text{rank}(\mathbf{Q}_2) = tr - t = t(r-1)$ (projeta em espaço residual)
- $\mathbf{Q}_2\mathbf{y}$ são os resíduos do modelo

3.2.5 Projeção no Espaço dos Efeitos (Notação Alternativa)

Para facilitar a aplicação do Teorema de Cochran, definimos:

$$\mathbf{Q}_1 = \mathbf{P} = \mathbf{P}_A - \mathbf{P}_0.$$

3.3 Verificação das Condições do Teorema de Cochran

Para aplicar o Teorema de Cochran, precisamos verificar que:

$$\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2 + \mathbf{P}_0 = \mathbf{I}_{tr}.$$

Demonstração:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2 + \mathbf{P}_0 &= (\mathbf{P}_A - \mathbf{P}_0) + (\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_A) + \mathbf{P}_0 \\
&= \mathbf{P}_A - \mathbf{P}_0 + \mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_A + \mathbf{P}_0 \\
&= \mathbf{I}_{tr}
\end{aligned}$$

Além disso, verificamos que:

- $\text{rank}(\mathbf{P}_0) = 1$
- $\text{rank}(\mathbf{Q}_1) = \text{rank}(\mathbf{P}) = t - 1$
- $\text{rank}(\mathbf{Q}_2) = t(r-1)$
- $1 + (t-1) + t(r-1) = tr = n$

3.4 Ortogonalidade das Projeções

Para garantir independência das somas de quadrados, precisamos verificar ortogonalidade:

Proposição 3.1. *As matrizes* $\mathbf{Q}_1$ *e* $\mathbf{Q}_2$ *são ortogonais:* $\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2 = \mathbf{0}$.

Demonstração:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2 &= (\mathbf{P}_A - \mathbf{P}_0)(\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_A) \\
&= \mathbf{P}_A(\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_A) - \mathbf{P}_0(\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_A) \\
&= \mathbf{P}_A - \mathbf{P}_A^2 - \mathbf{P}_0 + \mathbf{P}_0\mathbf{P}_A \\
&= \mathbf{P}_A - \mathbf{P}_A - \mathbf{P}_0 + \mathbf{P}_0 \quad (\text{pois } \mathbf{P}_A^2 = \mathbf{P}_A \text{ e } \mathbf{P}_0\mathbf{P}_A = \mathbf{P}_0) \\
&= \mathbf{0}
\end{aligned}$$

A última igualdade ($\mathbf{P}_0\mathbf{P}_A = \mathbf{P}_0$) decorre do fato de que $\mathbf{P}_0$ projeta no espaço unidimensional contido no espaço do modelo $\mathbf{P}_A$.

4 Distribuições das Somas de Quadrados

4.1 Soma de Quadrados Residual

A soma de quadrados residual pode ser escrita como:

$$SQ_E = \sum_{i=1}^{t}\sum_{j=1}^{r}(y_{ij} - \bar{y}_i)^2 = \mathbf{y}^T\mathbf{Q}_2\mathbf{y}.$$

Justificativa: Os resíduos são $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = (\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_A)\mathbf{y} = \mathbf{Q}_2\mathbf{y}$, e $SQ_E = \mathbf{e}^T\mathbf{e} = \mathbf{y}^T\mathbf{Q}_2^T\mathbf{Q}_2\mathbf{y} = \mathbf{y}^T\mathbf{Q}_2\mathbf{y}$ (pois $\mathbf{Q}_2$ é idempotente).

Aplicando Teorema de Cochran: Como $\mathbf{Q}_2$ projeta no espaço residual onde a média é zero (o modelo ajusta perfeitamente a média dentro de cada tratamento), temos $\mathbf{Q}_2\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$. Portanto:

$$\frac{SQ_E}{\sigma^2} = \frac{\mathbf{y}^T\mathbf{Q}_2\mathbf{y}}{\sigma^2} \sim \chi^2_{t(r-1)},$$

onde $t(r-1)$ são os graus de liberdade residuais.

4.2 Soma de Quadrados entre Tratamentos

A soma de quadrados entre tratamentos pode ser escrita como:

$$SQ_A = r\sum_{i=1}^{t}(\bar{y}_i - \bar{y})^2 = \mathbf{y}^T\mathbf{Q}_1\mathbf{y}.$$

Justificativa: Os desvios das médias dos tratamentos em relação à média geral são capturados por $\mathbf{P}\mathbf{y} = \mathbf{Q}_1\mathbf{y}$, e $SQ_A = (\mathbf{Q}_1\mathbf{y})^T(\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T\mathbf{Q}_1^T\mathbf{Q}_1\mathbf{y} = \mathbf{y}^T\mathbf{Q}_1\mathbf{y}$.

Aplicando Teorema de Cochran: Sob H_0 ($\tau_1 = \cdots = \tau_t = 0$), temos $\boldsymbol{\mu} = \mu\mathbf{1}_{tr}$. Neste caso:

$$\mathbf{Q}_1\boldsymbol{\mu} = (\mathbf{P}_A - \mathbf{P}_0)\mu\mathbf{1}_{tr} = \mu(\mathbf{P}_A\mathbf{1}_{tr} - \mathbf{P}_0\mathbf{1}_{tr}) = \mu(\mathbf{1}_{tr} - \mathbf{1}_{tr}) = \mathbf{0}.$$

Portanto, sob H_0:

$$\frac{SQ_A}{\sigma^2} = \frac{\mathbf{y}^T\mathbf{Q}_1\mathbf{y}}{\sigma^2} \sim \chi^2_{t-1},$$

onde $t-1$ são os graus de liberdade associados aos efeitos dos tratamentos.

4.3 Soma de Quadrados Total

A soma de quadrados total é:

$$SQ_T = \sum_{i=1}^{t}\sum_{j=1}^{r}(y_{ij} - \bar{y})^2 = \mathbf{y}^T(\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_0)\mathbf{y}.$$

Note que $\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_0 = \mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2$, confirmando a decomposição ortogonal:

$$SQ_T = SQ_A + SQ_E.$$

4.4 Independência entre SQ_A e SQ_E

A independência entre SQ_A e SQ_E decorre diretamente da ortogonalidade entre $\mathbf{Q}_1$ e $\mathbf{Q}_2$, conforme estabelecido pelo Teorema de Cochran. Como $\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2 = \mathbf{0}$ e as condições do teorema são satisfeitas, temos que $\mathbf{y}^T\mathbf{Q}_1\mathbf{y}$ e $\mathbf{y}^T\mathbf{Q}_2\mathbf{y}$ são independentes.

Esta independência é essencial para que a estatística F tenha distribuição exata, pois:

$$F = \frac{MS_A}{MS_E} = \frac{SQ_A/(t-1)}{SQ_E/[t(r-1)]} = \frac{(SQ_A/\sigma^2)/(t-1)}{(SQ_E/\sigma^2)/[t(r-1)]}$$

é a razão entre duas variáveis qui-quadrado independentes divididas por seus respectivos graus de liberdade, que segue distribuição $F_{t-1,t(r-1)}$ sob H_0.

5 Forma Explicita das Matrizes para o DIC

Para o modelo DIC com t tratamentos e r repetições, as matrizes de projeção podem ser escritas explicitamente em termos de blocos.

5.1 Estrutura em Blocos

Organizando o vetor $\mathbf{y}$ por tratamento:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_t \end{pmatrix},$$

onde $\mathbf{y}_i = (y_{i1}, y_{i2}, \ldots, y_{ir})^T$ são as r observações do tratamento i.

5.2 Matriz $\mathbf{P}_0$

$$\mathbf{P}_0 = \frac{1}{tr}\mathbf{J}_{tr} = \frac{1}{tr}\begin{pmatrix} \mathbf{J}_r & \mathbf{J}_r & \cdots & \mathbf{J}_r \\ \mathbf{J}_r & \mathbf{J}_r & \cdots & \mathbf{J}_r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{J}_r & \mathbf{J}_r & \cdots & \mathbf{J}_r \end{pmatrix},$$

onde $\mathbf{J}_r$ é a matriz $r \times r$ de uns.

5.3 Matriz $\mathbf{P}_A$

$$\mathbf{P}_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{r}\mathbf{J}_r & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{1}{r}\mathbf{J}_r & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \frac{1}{r}\mathbf{J}_r \end{pmatrix}.$$

Esta matriz projeta cada grupo de r observações em sua média: $\mathbf{P}_A\mathbf{y} = (\bar{y}_1\mathbf{1}_r, \bar{y}_2\mathbf{1}_r, \ldots, \bar{y}_t\mathbf{1}_r)^T$.

5.4 Matriz $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{P}_A - \mathbf{P}_0$

A matriz $\mathbf{Q}_1$ captura as diferenças entre médias dos tratamentos e a média geral. Pode ser escrita como blocos diagonais com estrutura específica que representa essas diferenças.

5.5 Matriz $\mathbf{Q}_2 = \mathbf{I}_{tr} - \mathbf{P}_A$

$$\mathbf{Q}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_r - \frac{1}{r}\mathbf{J}_r & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_r - \frac{1}{r}\mathbf{J}_r & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{I}_r - \frac{1}{r}\mathbf{J}_r \end{pmatrix}.$$

Esta matriz projeta cada grupo em seu complemento ortogonal ao espaço gerado por $\mathbf{1}_r$, capturando a variação dentro de cada tratamento.

6 Conclusão

Este documento apresentou o desenvolvimento teórico completo e rigoroso das distribuições das somas de quadrados no modelo DIC via Teorema de Cochran. Os pontos principais são:

1. O Teorema de Cochran fornece condições sob as quais somas de quadrados de vetores normais seguem distribuições qui-quadrado independentes.
2. As matrizes de projeção ortogonais no modelo DIC permitem decompor o espaço em subespaços correspondentes a efeitos de tratamentos e resíduos.
3. A ortogonalidade das projeções garante independência das somas de quadrados SQ_A e SQ_E.
4. Sob H_0, ambas as somas de quadrados seguem distribuições qui-quadrado centrais com graus de liberdade apropriados.
5. Esta fundamentação teórica é essencial para a validade exata do teste F.

Para referências detalhadas sobre o Teorema de Cochran e sua aplicação em modelos lineares, consultar:

- Hocking, R. R. (2003). *Methods and Applications of Linear Models: Regression and the Analysis of Variance*. Wiley.
- Searle, S. R. (1997). *Linear Models*. Wiley.

- Christensen, R. (2011). *Plane Answers to Complex Questions: The Theory of Linear Models*. Springer.