COMPONENTES ORTOGONAIS NO CASO EM QUE FALTA UM TÊRMO NA PROGRESSÃO ARITMÉTICA DOS NÍVEIS DE UM FATOR QUANTITATIVO [1]

EDILBERTO AMARAL [2]

Sinopse

Quando os níveis de um fator quantitativo estão em progressão aritmética, os contrastes linear, quadrático, etc., podem determinar-se fàcilmente por meio das tabelas de polinômios ortogonais.

O autor apresenta um método que permite o emprêgo dessas tabelas no caso muito freqüente em que falta um têrmo na progressão aritmética dos níveis de um fator quantitativo. Os casos 1, 2, 4 e 0, 1, 2, 4 são estudados.

O desenvolvimento matemático é publicado em apêndice.

INTRODUÇÃO

Com certa freqüência, o Estatístico é solicitado a analisar experimentos em que falta um têrmo na progressão aritmética dos níveis de um ou mais fatôres.

Assim é que, num experimento da Seção de Solos do Instituto de Pesquisas e Experimentação Agropecuárias do Sul (IPEAS), o fósforo foi aplicado nos níveis 1, 2 e 4 e, num experimento do Departamento de Zootecnia da Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, sôbre adubação de forrageiras, o nitrogênio foi empregado nos níveis zero, 1, 2 e 4.

O problema não oferece maior dificuldade para o Estatístico, mas seu tratamento é tedioso, de vez que não se pode usar, nestas condições, a tabela de polinômios ortogonais (tabela XXIII de Fisher e Yates 1949).

O objetivo do presente trabalho é o estabelecimento de um método que permita o uso da tabela de polinômios ortogonais, habilitando o experimentador a decompor a variação entre os tratamentos em componentes ortogonais, sem o concurso do Estatístico.

Como indicam Fisher e Yates, se se tem de ajustar uma curva polinomial

$$Y_j = B_o + B_1 x_j + B_2 x_j^2 + B_3 x_j^3 + \dots,$$

de grau não maior do que $n-1$, a uma série de n observações, $y_1, y_2, \dots, y_n$, correspondentes aos níveis $x_1, x_2, \dots, x_n$, pode-se fazer o ajustamento com o polinômio na forma

$$Y_j = b_o + b_1 a_{1j} + b_2 a_{2j} + b_3 a_{3j} + \dots,$$

onde

$$b_o = \bar{y} = \frac{y_1 + y_2 + \dots + y_n}{n}$$

é a média aritmética das observações e $a_{1j}, a_{2j}, a_{3j}, \dots$ são polinômios de graus 1, 2, 3, ... em x_j satisfazendo as condições

$$\mathop{S}_{j=1}^{n} a_{ij} = 0 \quad \text{e} \quad \mathop{S}_{j=1}^{n} a_{ij}\, a_{sj} = 0$$

$$i, s = 1, 2, 3, \dots, \ i \neq s.$$

Os polinômios a_{ij}, a_{sj} satisfazendo a estas condições denominam-se polinômios ortogonais. O coeficiente do têrmo de maior grau em a_{ij} é igual à unidade.

A vantagem do método, no caso geral, consiste em que, para todo $i \leq n-1$,

$$Y_j = \bar{y} + b_1 a_{1j} + b_2 a_{2j} + \dots + b_i a_{ij}$$

é o polinômio de grau i que se ajusta melhor às observações, no sentido de ser mínima a soma dos quadrados das diferenças entre os valores observados y_j e os valores calculados Y_j.

Ajustado o polinômio de grau i, se o acôrdo entre os valores observados e os calculados não fôr considerado satisfatório e desejar-se passar a um polinômio de grau $i+1$, bastará adicionar ao polinômio de grau i o polinômio

$$b_{i+1}\, a_{(i+1)j}.$$

[1] Recebido 7 jan. 1970, aceito 9 mar. 1970.
Apresentado em reunião científica da região brasileira da Sociedade Internacional de Biometria, São Paulo, 14 nov. 1967.

[2] Eng.º Agrônomo, Doutor em Agronomia, do Instituto de Pesquisas e Experimentação Agropecuária do Sul (IPEAS), Caixa Postal E, Pelotas, Rio Grande do Sul, e Prof. Titular de Matemática do Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, Rio Grande do Sul.

Quando o grau do polinômio ajustado é igual ao número de observações menos um, a curva passa exatamente sôbre os n pontos.

Os coeficientes $b_1, b_2, \ldots, b_{n-1}$ determinam-se pela fórmula geral

$$b_i = \frac{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} a_{ij}\, y_j}{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} a_{ij}^2}$$

e os quadrados médios correspondentes, cada um dêles com um grau de liberdade, são

$$(Q.\,M.)_i = \frac{\left(\overset{n}{\underset{j=1}{S}} a_{ij}\, y_j\right)^2}{r \overset{n}{\underset{j=1}{S}} a_{ij}^2}$$

sendo y_j o total de r repetições.

Se todos os $n-1$ contrastes ortogonais forem determinados, verifica-se

$$\overset{n}{\underset{j=1}{S}} (y_j - \bar{y})^2 = \overset{n-1}{\underset{i=1}{S}} (Q.\,M.)_i$$

Tem-se

$$a_1 = x - \bar{x},$$

onde

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \ldots + x_n}{n},$$

visto como

$$\overset{n}{\underset{j=1}{S}} a_{1j} = 0.$$

Fazendo

$$a_2 = a_1^2 + m a_1 + p,$$

as condições

$$\overset{n}{\underset{j=1}{S}} a_{2j} = 0 \quad \text{e} \quad \overset{n}{\underset{j=1}{S}} a_{2j}\, a_{1j} = 0$$

permitem determinar m e p:

$$Sa_1^2 + np = 0 \quad \text{e} \quad Sa_1^3 + mSa_1^2 = 0,$$

donde

$$m = \frac{-Sa_1^3}{Sa_1^2} \text{ e } p = \frac{-Sa_1^2}{n}.$$

Substituindo em a_2, vem

$$a_2 = a_1^2 - \frac{Sa_1^3}{Sa_1^2}\, a_1 - \frac{Sa_1^2}{n}.$$

Anàlogamente, fazendo

$$a_3 = a_1^3 + m'\, a_1^2 + p'\, a_1 + q',$$

as condições

$$Sa_3 = 0, \quad Sa_3\, a_1 = 0 \quad \text{e} \quad Sa_3\, a_2 = 0$$

permitem determinar m', p', q', a substituir em a_3, e assim sucessivamente.

No caso particular em que $x_1, x_2, \ldots, x_n$ estão em progressão aritmética, o método dos polinômios ortogonais apresenta a vantagem adicional de possibilitar o uso de tabelas de polinômios ortogonais ou de dispositivos de cálculo muito simples, como é o caso do processo das adições sucessivas (Fisher 1941). Neste caso, as somas das potências ímpares de $a_1 = x - \bar{x}$ são tôdas nulas, tem-se

$$a_2 = a_1^2 - \frac{Sa_1^2}{n}$$

$$a_3 = a_1^3 - \frac{Sa_1^4}{Sa_1^2}\, a_1$$

e em a_i figuram apenas potências de $a_1 = x - \bar{x}$ com a mesma paridade de i.

Verifica-se a recorrência (Fisher e Yates)

$$a_{i+1} = a_1\, a_i - \frac{i^2\,(n^2 - i^2)\, a_{i-1}}{4\,(4\, i^2 - 1)}.$$

Os valores numéricos, para $x = x_1, x_2 \ldots x_n$ em progressão aritmética, dos polinômios

$$a_{ij}' = k_i\, a_{ij}$$

onde k_i é a menor constante positiva que dá valores inteiros para a_{ij}', encontram-se nas tabelas de polinômios ortogonais (Tabela XXIII de Fisher e Yates 1949).

APRESENTAÇÃO DO NÔVO MÉTODO

Sejam $y_1, y_2, \ldots, y_{s-1}, y_{s+1}, \ldots, y_n, y_{n+1}$ os valores de y correspondentes aos n níveis $X_1, X_2, \ldots, X_{s-1}, X_{s+1}, \ldots, X_n, X_{n+1}$, tais que $x_1 = X_1, x_2 = X_2, \ldots, x_{s-1} = X_{s-1}, x_s = \dfrac{(X_{s-1} + X_{s+1})}{2}, x_{s+1} = X_{s+1}, \ldots, x_n = X_n, x_{n+1} = X_{n+1}$ formem uma progressão aritmética.

O nôvo método consiste na determinação dos polinômios ortogonais correspondentes aos n níveis $X_1, X_2, \ldots, X_{s-1}, X_{s+1}, \ldots, X_{n+1}$ em função dos polinômios ortogonais para os $n+1$ níveis em progressão aritmética, de tal modo que os contrastes respectivos se possam determinar com a tabela de polinômios ortogonais.

Contraste linear

Embora o contraste linear, quaisquer que forem os n níveis, seja

$$A_{11}y_1 + A_{12}y_2 + \ldots + A_{1(s-1)}y_{s-1} + A_{1(s+1)}y_{s+1} + \ldots + A_{1n}y_n + A_{1(n+1)}y_{n+1},$$

onde

$$A_{1j} = X_j - \overline{X}$$

$$\overline{X} = \frac{X_1 + X_2 + \ldots + X_{s-1} + X_{s+1} + \ldots + X_n + X_{n+1}}{n}$$

sendo, portanto, dispensável o uso da tabela de polinômios ortogonais, aplicar-se-á o nôvo método também na determinação dêste contraste.

Para o contraste linear, faça-se

$$A_{1j} = a_{1j} + \frac{a_{1s}}{n}$$

sendo $a_{11}, a_{12}, \ldots, a_{1(s-1)}, a_{1s}, a_{1(s+1)}, \ldots, a_{1n}, a_{1(n+1)}$ proporcionais aos $n+1$ valores correspondentes, $a'_{11}, a'_{12}, \ldots, a'_{1(n+1)}$, dados na primeira coluna da tabela de polinômios ortogonais para $n' = n+1$ observações[3].

Calcula-se

$$b_1 = \frac{\underset{i \neq s}{S} A_{1j}\, y_j}{\underset{i \neq s}{S} A_{1j}^2}$$

e o quadrado médio correspondente ao contraste linear é

$$(Q.\,M.)_1 = \frac{\left(\underset{i \neq s}{S} A_{1j}\, y_j\right)^2}{r\, \underset{i \neq s}{S} A_{1j}^2},$$

sendo y_j o total de r repetições.

O polinômio do primeiro grau do conjunto dos polinômios ortogonais é

$$A_1 = a_1 + \frac{a_{1s}}{n}$$

onde

$$a_1 = x - \overline{x}$$

e

$$\overline{x} = \frac{\overset{n+1}{\underset{j=1}{S}}\, x_j}{n+1}.$$

[3] Tem-se $a'_{1j} = k_1 a_{1j}$, figurando k_1 sob a primeira coluna para $n' = n+1$ observações.

Verifica-se, no caso do polinômio do primeiro grau,

$$A_1 = X - \overline{X}$$

$$\overline{X} = \frac{\underset{i \neq s}{S} X_j}{n}$$

Contraste quadrático

Faça-se

$$A_{2j} = a_{2j} + a_{2s}\left(\frac{1}{n} + \frac{A_{1s}\, A_{1j}}{\underset{i \neq s}{S} A_{1j}^2}\right)$$

onde A_{1s} é o valor de A_{1j} para $X = x_s = \dfrac{X_{s-1} + X_{s+1}}{2}$

Calcula-se

$$b_2 = \frac{\underset{i \neq s}{S} A_{2j}\, y_j}{\underset{i \neq s}{S} A_{2j}^2}$$

e

$$(Q.\,M.)_2 = \frac{\left(\underset{i \neq s}{S} A_{2j}\, y_j\right)^2}{r\, \underset{i \neq s}{S} A_{2j}^2}.$$

O polinômio do segundo grau, A_2, do conjunto de polinômios ortogonais obtém-se aplicando a fórmula de recorrência

$$a_2 = a_1^2 - \frac{(n'^2 - 1)\, a_0}{12}$$

onde

$$a_0 = 1 \quad \text{e} \quad n' = n + 1,$$

e a fórmula

$$A_2 = a_2 + a_{2s}\left(\frac{1}{n} + \frac{A_{1s}\, A_1}{\underset{i \neq s}{S} A_{1j}^2}\right)$$

Contraste de ordem m

Para $2 < m < n$, faça-se

$$A_{mj} = a_{mj} + a_{ms}\left(\frac{1}{n} + \frac{A_{1s}\, A_{1j}}{\underset{i \neq s}{S} A_{ij}^2} + \ldots + \frac{A_{(m-1)s} A_{(m-1)j}}{\underset{i \neq s}{S} A_{(m-1)}^2}\right)$$

onde A_{ij} é o valor de A_i para $X = x_j$ $(i = 1, 2 \ldots m-1)$.

Calcula-se

$$b_m = \frac{\underset{i \neq s}{S} A_{mj}\, y_j}{\underset{i \neq s}{S} A_{mj}^2}$$

$$(Q.\,M.)_m = \frac{\left(\underset{i \neq s}{S} A_{mj}\, y_j\right)^2}{r\, \underset{i \neq s}{S} A_{mj}^2}.$$

O polinômio de grau m, A_m, do conjunto de polinômios ortogonais obtém-se aplicando a fórmula de recorrência (Fisher e Yates)

$$a_m = \frac{a_1\, a_{m-1} - (m-1)^2\,[n'^2 - (m-1)^2]\, a_{m-2}}{4\,[4\,(m-1)^2 - 1]}$$

onde $n' = n+1$ é o número de níveis em progressão aritmética, é a fórmula

$$A_m = a_m + a_{ms}\left(\frac{1}{n} + \frac{A_{1s}\,A_1}{\underset{i \neq s}{S}\, A_{1i}^2} + \ldots + \frac{A_{(m-1)s}\,A_{m-1}}{\underset{i \neq s}{S}\, A_{(m-1)i}^2}\right)$$

EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

Níveis 1, 2 e 4

Considere-se o caso em que os níveis são $X_1 = 1$, $X_2 = 2$ e $X_4 = 4$. Da tabela XXIII de Fisher e Yates, para $n' = n + 1 = 4$, obtém-se

$$a_{11} = -\frac{3}{2},\; a_{12} = -\frac{1}{2},\; a_{13} = \frac{1}{2} \text{ e } a_{14} = \frac{3}{2},$$

sendo o denominador 2 indicado na parte inferior da primeira coluna da tabela.

Da fórmula

$$A_{1i} = a_{1i} + \frac{a_{13}}{3},$$

obtém-se

$$A_{11} = -\frac{3}{2} + \frac{1}{6} = -\frac{4}{3},$$

$$A_{12} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{6} = -\frac{1}{3},$$

$$A_{13} = \frac{1}{2} + \frac{1}{6} = \frac{2}{3},$$

$$A_{14} = \frac{3}{2} + \frac{1}{6} = \frac{5}{3}.$$

O contraste linear é, portanto, proporcional a

$$5y_4 - y_2 - 4y_1$$

e o quadrado médio respectivo é

$$\frac{(5y_4 - y_2 - 4y_1)^2}{42r},$$

sendo $X_1 = 1$, $X_2 = 2$, $X_4 = 4$ e y_1, y_2 e y_4 representando, cada um dêles, a soma dos resultados experimentais. O fator que aparece no denominador, $42 = 5^2 + (-1)^2 + (-4)^2$, é a soma dos quadrados dos coeficientes no contraste linear.

Tem-se, ainda,

$$b_1 = \frac{\dfrac{5y_4 - y_2 - 4y_1}{3}}{\dfrac{42}{3^2}} = \frac{5y_4 - y_2 - 4y_1}{14}$$

Passando, agora, ao contraste quadrático e sendo $a_{21} = 1, a_{22} = -1, a_{23} = -1$ e $a_{24} = 1$ (tabela XXIII), tem-se, pela fórmula

$$A_{2i} = a_{2i} + a_{23}\left(\frac{1}{3} + \frac{A_{13}\,A_{1i}}{\underset{i \neq 3}{S}\, A_{1i}^2}\right) =$$

$$= a_{2i} - \left(\frac{1}{3} + \frac{A_{1i}}{7}\right),$$

$$A_{21} = \frac{6}{7},\; A_{22} = -\frac{9}{7} \text{ e } A_{24} = \frac{3}{7},$$

sendo desnecessário calcular A_{23}.

O contraste quadrático é proporcional a

$$y_4 - 3y_2 + 2y_1$$

e o quadrado médio correspondente é

$$\frac{(y_4 - 3y_2 + 2y_1)^2}{14r},$$

visto como $1^2 + (-3)^2 + 2^2 = 14$.

Tem-se, ainda,

$$b_2 = \frac{\dfrac{3(y_4 - 3y_2 + 2y_1)}{7}}{\dfrac{9 \times 14}{49}} = \frac{y_4 - 3y_2 + 2y_1}{6}.$$

Resumindo, os contrastes linear e quadrático são, respectivamente, proporcionais a

$$5y_4 - y_2 - 4y_1 \text{ e } y_4 - 3y_2 + 2y_1,$$

sendo $X_1 = 1$, $X_2 = 2$ e $X_4 = 4$.

Os polinômios ortogonais são

$$A_1 = a_1 + \frac{a_{13}}{3} = x - \bar{x} + \frac{1}{6} = X - \frac{7}{3},$$

visto como

$$\bar{x} = \frac{1 + 2 + 3 + 4}{4} = \frac{5}{2}, \text{ e}$$

$$A_2 = a_2 - \left(\frac{1}{3} + \frac{A_1}{7}\right) = x^2 - \frac{36x}{7} + 5,$$

visto como

$$a_{23} = -1,\; a_1 = x - \bar{x} = x - \frac{5}{2},\; a_2 = a_1^2 - \frac{5}{4},$$

pela fórmula de recorrência, e

$$A_1 = x - \frac{7}{3}.$$

As fórmulas acima concordam com as obtidas diretamente, sem o uso das tabelas de polinômios ortogonais. Efetivamente, para o contraste linear, com $x_1 = 1$, $x_2 = 2$ e $x_3 = 4$, tem-se

$$\bar{x} = \frac{(1+2+4)}{3} = \frac{7}{3}, \quad A_1 = x - \frac{7}{3},$$

$$A_{11} = -\frac{4}{3}, \ A_{12} = -\frac{1}{3} \quad \text{e} \quad A_{14} = \frac{5}{3}.$$

O contraste linear é, portanto, proporcional a

$$5y_4 - y_2 - 4y_1,$$

donde

$$(Q.\ M.)_1 = \frac{(5y_4 - y_2 - 4y_1)^2}{42r},$$

$$b_1 = \frac{\dfrac{5y_4 - y_2 - 4y_1}{3}}{\dfrac{42}{3^2}} = \frac{5y_4 - y_2 - 4y_1}{14}.$$

Quando há apenas três níveis, como no caso presente, só pode haver dois contrastes ortogonais e se um dêles é o contraste linear, então o outro é necessàriamente o contraste quadrático.

Fazendo

$$A_2 = A_1^2 + mA_1 + p,$$

com

$$A_1 = x - \frac{7}{3},$$

as condições $SA_2 = 0$ e $SA_1A_2 = 0$ permitem determinar m e p:

$$p = -\frac{SA_1^2}{3} = -\frac{14}{9}$$

$$m = -\frac{SA_1^3}{SA_1^2} = -\frac{10}{21}.$$

Substituindo, vem

$$A_2 = x^2 - \frac{36x}{7} + 5,$$

$$A_{21} = \frac{6}{7}, \quad A_{22} = -\frac{9}{7}, \quad A_{24} = \frac{3}{7}$$

e daí

$$(Q.\ M.)_2 = \frac{(y_4 - 3y_2 + 2y_1)^2}{42r}$$

$$b_2 = \frac{y_4 - 3y_2 + 2y_1}{6}.$$

Nos casos de mais de três níveis não seria tão simples a discriminação dos contrastes de ordem maior que 1 (quadrático, cúbico, etc.), aparecendo com maior nitidez a vantagem do nôvo método.

Níveis 0, 1 2 e 4

Tem-se, no caso dos níveis 0, 1, 2 e 4 (tabela XXIII, para $n' = n + 1 = 5$):

j	a_{1j}	a_{2j}	a_{3j}
0	-2	2	$-6/5$
1	-1	-1	$12/5$
2	0	-2	0
3	1	-1	$-12/5$
4	2	2	$6/5$

Contraste linear:

$$A_{1j} = a_{1j} + \frac{a_{13}}{4}$$

$$A_{10} = -\frac{7}{4}, \quad A_{11} = -\frac{3}{4}, \quad A_{12} = \frac{1}{4},$$

$$A_{13} = \frac{5}{4}, \quad \text{e} \quad A_{14} = \frac{9}{4}.$$

O contraste linear é proporcional a

$$9y_4 + y_2 - 3y_1 - 7y_0.$$

Tem-se

$$b_1 = \frac{9y_4 + y_2 - 3y_1 - 7y_0}{35} \text{ e}$$

$$(Q.\ M.)_1 = \frac{(9y_4 + y_2 - 3y_1 - 7y_0)^2}{140r},$$

sendo r o número de repetições.

O polinômio do primeiro grau do conjunto de polinômios ortogonais é

$$A_1 = a_1 + \frac{a_{13}}{4} = x - \frac{7}{4},$$

visto como

$$a_1 = x - \bar{x} = x - 2, \quad \bar{x} = \frac{0 + 1 + 2 + 3 + 4}{5} = 2.$$

Contraste quadrático:

$$A_{2j} = a_{2j} + a_{23}\left(\frac{1}{4} + \frac{A_{13}A_{1j}}{\underset{i \neq 3}{S} A_{1j}^2}\right)$$

$$A_{20} = \frac{14}{7}, \quad A_{21} = -\frac{8}{7}, \quad A_{22} = -\frac{16}{7},$$

$$A_{23} = -\frac{10}{7} \text{ e } A_{24} = \frac{10}{7}.$$

O contraste quadrático é proporcional a

$$5y_4 - 8y_2 - 4y_1 + 7y_0.$$

Tem-se

$$b_2 = \frac{5y_4 - 8y_2 - 4y_1 + 7y_0}{44} \text{ e}$$

$$(Q.M.)_2 = \frac{(5y_4 - 8y_2 - 4y_1 + 7y_0)^2}{154r}.$$

O polinômio do segundo grau do conjunto de polinômios ortogonais é

$$A_{2j} = a_{2j} + a_{23}\left(\frac{1}{4} + \frac{A_{13}A_{1j}}{\underset{i \neq 3}{S} A_{1j}^2}\right) = x^2 - \frac{29x}{7} + 2.$$

Contraste cúbico:

$$A_{3j} = a_{3j} + a_{33}\left(\frac{1}{4} + \frac{A_{13}A_{1j}}{\underset{i \neq 3}{S} A_{1j}^2} + \frac{A_{23}A_{2j}}{\underset{i \neq 3}{S} A_{2j}^2}\right)$$

$$A_{30} = -\frac{36}{55}, \quad A_{31} = \frac{96}{55}, \quad A_{32} = -\frac{72}{55},$$

$$A_{33} = -\frac{210}{55} \text{ e } A_{34} = \frac{12}{55}.$$

O contraste cúbico é proporcional a

$$y_4 - 6y_2 + 8y_1 - 3y_0.$$

Tem-se

$$b_3 = \frac{y_4 - 6y_2 + 8y_1 - 3y_0}{24} \text{ e}$$

$$(Q.M.)_3 \frac{(y_4 - 6y_2 + 8y_1 - 3y_0)^2}{110r},$$

sendo r o número de repetições.

O polinômio do terceiro grau do conjunto de polinômios ortogonais é

$$A_{3j} = a_{3j} + a_{33}\left(\frac{1}{4} + \frac{A_{13}A_{1j}}{\underset{i \neq 3}{S} A_{1j}^2} + \frac{A_{23}A_{2j}}{\underset{i \neq 3}{S} A_{2j}^2}\right) =$$

$$= x^3 - \frac{63x^2}{11} + \frac{392x}{55} - \frac{36}{55}.$$

Em resumo:

Os contrastes linear, quadrático e cúbico são proporcionais a

$$9y_4 + y_2 - 3y_1 - 7y_0$$
$$5y_4 - 8y_2 - 4y_1 + 7y_0 \text{ e}$$
$$y_4 - 6y_2 + 8y_1 - 3y_0$$

respectivamente.

Os coeficientes de regressão linear, quadrática e cúbica são

$$b_1 = \frac{9y_4 + y_2 - 3y_1 - 7y_0}{35},$$

$$b_2 = \frac{5y_4 - 8y_2 - 4y_1 + 7y_0}{44} \text{ e}$$

$$b_3 = \frac{y_4 - 6y_2 + 8y_1 - 3y_0}{24}.$$

Os quadrados médios respectivos são

$$(Q.\ M.)_1 = \frac{(9y_4 + y_2 - 3y_1 - 7y_0)^2}{140r},$$

$$(Q.\ M.)_2 = \frac{(5y_4 - 8y_2 - 4y_1 + 7y_0)^2}{154r} \text{ e}$$

$$(Q.\ M.)_3 = \frac{(y_4 - 6y_2 + 8y_1 - 3y_0)^2}{110r},$$

sendo r o número de repetições.

Os polinômios ortogonais são, respectivamente:

$$A_1 = x - \frac{7}{4}$$

$$A_2 = x^2 - \frac{29x}{7} + 2$$

$$A_3 = x^3 - \frac{63x^2}{11} + \frac{392x}{55} - \frac{36}{55}.$$

A reta de regressão é, assim,

$$y = \bar{y} + b_1\left(x - \frac{7}{4}\right).$$

Se os componentes linear e quadrático forem significativos, mas não o componente cúbico, como ocorreu no experimento do Departamento de Zootecnia da Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, podem-se comparar gràficamente os valores observados com os calculados pelo polinômio de segundo grau que melhor se ajusta aos dados, que é

$$y = \bar{y} + b_1\left(x - \frac{7}{4}\right) + b_2\left(x^2 - \frac{29x}{7} + 2\right) =$$

$$= b_2 x^2 + \left(b_1 - \frac{29b_2}{7}\right) x + \bar{y} - \frac{7b_1}{4} + 2b_2,$$

onde

$$\bar{y} = \frac{y_0 + y_1 + y_2 + y_4}{4}$$

$$b_1 = \frac{9y_4 + y_2 - 3y_1 - 7y_0}{35}$$

$$b_2 = \frac{5y_4 - 8y_2 - 4y_1 + 7y_0}{44},$$

como estabelecido antes.

No experimento citado, de adubação nitrogenada e fosfatada do azevém anual (*Lolium multiforum*), os níveis de nitrogênio foram 0,20, 40 e 80 kg/ha de N, na forma de sulfato de amônio, e as médias das produções correspondentes foram $y_0 = 981$, $y_1 = 1.598$, $y_2 = 2.113$ e $y_4 = 2.593$ kg/ha de matéria sêca.

O polinômio do segundo grau que melhor se ajusta aos dados é, então,

$$y = 974,35 + 720,127x - 78,7273x^2,$$

com os x em unidades de 20 kg de N por hectare, ou

$$y = 974,35 + 36,0063x - 0,196818x^2,$$

sendo os x expressos em quilogramas de N por hectare.

No Quadro 1 e na Fig. 1 representam-se os resultados experimentais e a curva ajustada.

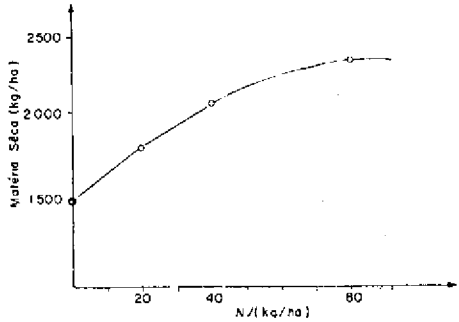

FIG. 1. *Adubação nitrogenada do azevém.*

AGRADECIMENTOS

O autor agradece ao Eng.º Agrônomo Gilberto Azambuja Centeno, técnico do Departamento de Zootecnia da Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel e bolsista do Conselho Nacional de Pesquisas (CNPq), pela permissão de usar os resultados de um experimento de adubação nitrogenada e fosfatada de azevém anual.

REFERÊNCIAS

Fisher, R.A. 1941. Statistical methods for research workers. 8th ed. Oliver and Boyd, London.

Fisher, R.A. & Yates, F. 1949. Statistical tables for biological, agricultural and medical research. 3rd ed. Oliver and Boyd, London.

ORTHOGONAL COMPONENTS IN THE CASE WHERE A TERM IS MISSED IN THE EQUALLY SPACED VALUES OF A QUANTITATIVE FACTOR

Abstract

A method by which the tables of orthogonal polynomials are used in the case where a term is missed in the equally spaced values of a quantitative factor is presented. The cases 1, 2, 4 and 0, 1, 2, 4 are studied.

APÊNDICE

O método exposto e aplicado no texto do presente trabalho será estabelecido, neste apêndice, de modo geral: dados $y_1, y_2, \ldots, y_n$, correspondentes aos níveis arbitrários $x_1, x_2, \ldots, x_n$ do fator x, far-se-ão estimativas y_{n+1}, correspondentes a um novo nível arbitrário x_{n+1}, não necessàriamente maior que o precedente, fazendo-se nova estimativa para cada contraste ortogonal — linear, quadrático etc. de tal modo que o contraste respectivo se possa determinar com a nova série de valores de y.

Componente linear[4]

Sejam $y_1, y_2, \ldots, y_n$ os valores de y correspondentes aos níveis $x_1, x_2, \ldots, x_n$ do fator x. Trata-se de determinar y_{n+1}, correspondente a x_{n+1}, de modo que se possa calcular o componente linear da variação entre $y_1, y_2, \ldots, y_n$ em função do componente linear da variação entre $y_1, y_2, \ldots, y_n, y_{n+1}$.

Representando por A_{1j} o polinômio do primeiro grau

$$A_{1j} = x_j - \overline{X}, \quad \text{onde}$$

$$\overline{X} = \frac{x_1 + x_2 + \ldots + x_n}{n}$$

tem-se

$$y_1 = \overline{y} + b_1 A_{11} + b_2 A_{21} + \ldots + b_m A_{m1} + \ldots + b_{n-1} A_{(n-1)1},$$
$$y_2 = \overline{y} + b_1 A_{12} + b_2 A_{22} + \ldots + b_m A_{m2} + \ldots + b_{n-1} A_{(n-1)2},$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$
$$y_n = \overline{y} + b_1 A_{1n} + b_2 A_{2n} + \ldots + b_m A_{mn} + \ldots + b_{n-1} A_{(n-1)n},$$

onde

$$\overline{y} = \frac{y_1 + y_2 + \ldots + y_n}{n},$$

$$b_m = \frac{\underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{mj} y_j}{\underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{mj}^2}, \quad (m = 1, 2, \ldots, n-1),$$

e A_{mj} é o polinômio ortogonal de grau m, a determinar.

Acrescente-se

$$y_{n+1} = \overline{y}.$$

Representando por a_{1j} o polinômio do primeiro grau

$$a_{1j} = x_j - \bar{x},$$

onde

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \ldots + x_n + x_{n+1}}{n+1},$$

tem-se

$$\underset{j=1}{\overset{n+1}{S}} a_{1j} y_j = b_1 \underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{1j} a_{1j},$$

por ser

$$\underset{j=1}{\overset{n+1}{S}} a_{1j} = 0$$

e

$$\underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{mj} a_{1j} = 0, \; m = 2, 3, \ldots, n-1,$$

visto como a_{1j} pode exprimir-se como função linear de A_{1j} e $\underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{mj} A_{1j} = 0$ (condição de ortogonalidade).

Mas

$$a_{1j} = A_{1j} + \overline{X} - \bar{x},$$

donde

$$\underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{1j} a_{1j} = \underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{1j}^2.$$

Resulta

$$\underset{j=1}{\overset{n+1}{S}} a_{1j} y_j = b_1 \underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{1j}^2$$

e, sendo

$$b_1 = \frac{\underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{1j} y_j}{\underset{j=1}{\overset{n}{S}} A_{1j}^2},$$

$A_{11}y_1 + A_{12}y_2 + \ldots + A_{1n}y_n = a_{11}y_1 + a_{12}y^2 + \ldots + a_{1n}y_n + a_{1(n+1)}\bar{y}$, quaisquer que sejam y_1, $y_2, \ldots, y_n$, donde se obtém

$$A_{1j} = a_{1j} + \frac{a_{1(n+1)}}{n}, \; j = 1, 2, \ldots, n,$$

o que permite determinar A_{1j} em função de a_{1j} e $a_{1(n+1)}$.

[4] O contraste linear é, quaisquer que sejam os n níveis, $A_{11}y_1 + A_{12}y_2 + \ldots + A_{1n}y_n$, onde $A_{1j} = x_j - \overline{X}$.

Calcula-se

$$b_1 = \frac{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{1j} y_j}{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{1j}^2}$$

e o quadrado médio correspondente ao contraste linear é

$$(Q.M.)_1 = \frac{\left(\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{1j} y_j\right)^2}{r \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{1j}^2},$$

sendo y_j o total de r repetições.

Componente quadrático

Às equações

$y_1 = \bar{y} + b_1 A_{11} + b_2 A_{21} + \ldots + b_m A_{m1} + \ldots + b_{n-1} A_{(n-1)1}$, $y_2 = \bar{y} + b_1 A_{12} + b_2 A_{22} + \ldots + b_m A_{m2} + \ldots + A_{n-1} A_{(n-1)2}$,

. . . .

$y_n = \bar{y} + b_1 A_{1n} + b_2 A_{2n} + \ldots + b_m A_{mn} + \ldots + b_{n-1} A_{(n-1)n}$,

acrescente-se

$$y_{n+1} = \bar{y} + b_1 A_{1(n+1)}$$

onde $A_{1(n+1)}$ é o valor de A_{1j} para $x_j = x_{n+1}$.

Representando por a_{2j} o polinômio do segundo grau do conjunto dos polinômios ortogonais correspondentes aos $_{n+1}$ níveis $x_1, x_2, \ldots, x_n, x_{n+1}$, tem-se

$$\overset{n+1}{\underset{j=1}{S}} a_{2j} = 0, \quad \overset{n+1}{\underset{j=1}{S}} A_{1j} a_{2j} = 0 \quad \text{e} \quad \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj} a_{2j} = 0,$$

$m = 3, \ldots, n-1$, visto como A_{1j} pode exprimir-se como polinômio do primeiro grau em a_{1j}, e a_{2j} exprimir-se como função linear de A_{1j} e A_{2j}, ortogonais a A_{mj} para todo $m > 2$. Resulta

$$\overset{n+1}{\underset{j=1}{S}} a_{2j} y_j = b_2 \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j} a_{2j}.$$

Mas a_{2j} difere de A_{2j} por um polinômio do primeiro grau em x_j, que se pode exprimir por um polinômio do primeiro grau em A_{1j}. Conclui-se que

$$\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j} a_{2j} = \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j}^2,$$

$$\overset{n+1}{\underset{j=1}{S}} a_{2j} y_j = b_2 \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j}^2$$

e, sendo

$$b_2 = \frac{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j} y_j}{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j}^2},$$

$A_{21} y_1 + A_{22} y_2 + \ldots + A_{2n} y_n = a_{21} y_1 + a_{22} y_2 + \ldots + a_{2n} y_n + a_{2(n+1)} (\bar{y} + b_1 A_{1(n+1)})$,

donde se obtém

$$A_{2j} = a_{2j} + a_{2(n+1)} \left(\frac{1}{n} + \frac{A_{1(n+1)} A_{1j}}{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{1j}^2}\right)$$

Calcula-se

$$b_2 = \frac{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j} y_j}{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j}^2},$$

$$(Q.M.)_2 = \frac{\left(\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j} y_j\right)^2}{r \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{2j}^2}.$$

Generalização

Seja

$y_1 = \bar{y} + b_1 A_{11} + b_2 A_{21} + \ldots + b_{m-1} A_{(m-1)1} + b_m A_{m1} + \ldots + b_{n-1} A_{(n-1)1}$, $y_2 = \bar{y} + b_1 A_{12} + b_2 A_{22} + \ldots + b_{m-1} A_{(m-1)2} + b_m A_{m2} + \ldots + b_{n-1} A_{(n-1)2}$,

. . . .

$y_n = \bar{y} + b_1 A_{1n} + b_2 A_{2n} + \ldots + b_{m-1} A_{(m-1)n} + b_m A_{mn} + \ldots + b_{n-1} A_{(n-1)n}$;

faça-se

$y_{n+1} = \bar{y} + b_1 A_{1(n+1)} + b_2 A_{2(n+1)} + \ldots + b_{m-1} A_{(m-1)(n+1)}$.

Tem-se

$$\overset{n+1}{\underset{j=1}{S}} a_{mj} = 0, \quad \overset{n+1}{\underset{j=1}{S}} A_{ij} a_{mj} = 0, \qquad i < m,$$

visto como A_{ij} se pode exprimir como função linear de $a_{1j}, a_{2j}, \ldots, a_{ij}$ e

$$\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{ij} a_{mj} = 0, \qquad m < i < n,$$

em virtude de exprimir-se a_{mj} como função linear de polinômios ortogonais de grau menor que i.

Resulta

$$\overset{n+1}{\underset{j=1}{S}} a_{mj}y_j = b_m \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj}a_{mj}.$$

Mas a_{mj} difere de A_{mj} por um polinômio de grau menor que m, que se pode exprimir como função linear de $A_{1j}, A_{2j}, \ldots, A_{(m-1)j}$.

Daí,

$$\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj}a_{mj} = \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj}^2$$

e

$$\overset{n+1}{\underset{j=1}{S}} a_{mj}y_j = b_m \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj}^2,$$

isto é,

$$A_{m1}y_1 + A_{m2}y_2 + \ldots + A_{mn}y_n = a_{m1}y_1 + a_{m2}y_2 + \ldots + a_{mn}y_n + a_{m(n+1)}y_{n+1},$$

donde se obtém, substituindo

$$y_{n+1} = \bar{y} + b_1A_{1(n+1)} + \ldots + b_{m-1}A_{(m-1)(n+1)},$$

$$A_{mj} = a_{mj} + a_{m(n+1)} \left(\frac{1}{n} + \frac{A_{1(n+1)}A_{1j}}{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{j1}^2} + \ldots + \frac{A_{(m-1)(n+1)}A_{(m-1)j}}{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{(m-1)j}^2} \right).$$

Calcula-se

$$b_m = \frac{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj}y_j}{\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj}^2}$$

$$(Q.\ M.)_m = \frac{\left(\overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj}y_j\right)^2}{r \overset{n}{\underset{j=1}{S}} A_{mj}^2}.$$