POLINÔMIOS ORTOGONAIS E ORTONORMAIS EM ANÁLISE DE REGRESSÃO POLINOMIAL COM NÍVEIS ARBITRÁRIOS

JOÃO JOSÉ DE OLIVEIRA FILHO

Orientador: **Dr. Izaias Rangel Nogueira**

Dissertação apresentada à Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Experimentação e Estatística

P I R A C I C A B A
Estado de São Paulo - Brasil
Abril 1 9 7 6

Aos meus pais e irmãos

à minha esposa

aos meus filhos

D E D I C O

A G R A D E C I M E N T O S

Ao Prof. Dr. Izaias Rangel Nogueira, pelo esforço e segurança na orientação do presente trabalho.

Aos Prof^{s}. Dr. Orlando de Toledo Piza e Dr. Sérgio do Nascimento Kronka, pelos subsídios concedidos.

Ao Prof. Euclides Braga Malheiros, pela elaboração e execução dos programas de computação.

Ao Prof. Argemiro Oliveira Sousa, pela revisão do texto em Português.

À Escola de Agronomia da Universidade Federal da Paraíba e à Faculdade de Medicina Veterinária e Agronomia de Jaboticabal "Prof. Antonio Ruete" (F.M.V.A.J.) pela oportunidade oferecida.

Ao Conselho Nacional de Pesquisas, pela bolsa concedida.

À Sr^{ta}. Maria de Lourdes Moretto, secretária do Departamento de Ciências Físicas e Matemáticas da F.M.V.A.J., pelo eficiente trabalho de datilografia em rascunho.

E a todos que direta ou indiretamente concorreram para o bom andamento deste trabalho.

ÍNDICE

Página

Página

1 - INTRODUÇÃO

Os experimentos devem sempre ser planejados de forma que possibilitem a aplicação de testes estatísticos.

Quando há interesse em se fazer análise de regressão polinomial, é conveniente planejar os ensaios no sentido de que os níveis da variável fixada sejam igualmente espaçados.

Neste caso, pode-se usar tabelas de coeficientes para interpolação de polinômios ortogonais, e sua aplicação, sendo relativamente fácil, tem sido extensivamente usada nos mais variados campos de pesquisas.

Uma das vantagens deste método é que os termos do polinômio ajustado sao independentes entre si, permitindo o cálculo e o teste de significância de cada componente de regressão, independentemente dos demais.

Às vezes, por interesse científico, ou por um mau planejamento do ensaio ou ainda por causas inerentes ao próprio material em estudo, o experimentador se depara com casos onde não há condição de se utilizar tabelas de polinômios ortogonais, que se limitam geralmente aos casos em que os valores assumidos pela variável independente são igualmente espaçados.

Nestes casos os polinômios ortogonais devem ser especialmente construídos. No presente trabalho discutem-se dois métodos de construção de polinômios ortonormais e suas aplicações em análise de regressão.

Estando a validade desta análise condicionada à pressuposição de que os dados experimentais estejam normalmente distribuídos para um conjunto fixado de valores, serão usados, nas aplicações, experimentos fictícios baseados em tabelas de erros aleatórios.

2 - REVISÃO DA LITERATURA

Os polinômios ortogonais em interpolação polinomial podem ser usados nos casos em que os níveis da variável independente são igualmente espaçados ou não.

Muitos autores discutiram a teoria da interpolação polinomial associada com a análise de regressão, apresentando as mais variadas técnicas de computação.

ISSERLIS (1927) apresenta uma breve revisão bibliográfica sobre trabalhos desenvolvidos por P. L. Chebysheff entre 1854 e 1875, referentes à interpolação pelo método dos mínimos quadrados. É discutido o caso mais geral de interpolação usando polinômios ortogonais, sob o seguinte aspecto:

Seja $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \ldots, (X_n, Y_n)$ um conjunto de pontos com pesos respectivamente $p_1, p_2, \ldots, p_n$. Suponha que se deseje ajustar um polinômio da forma

$$P_\lambda(X) = K_0\,\Psi_0(X) + K_1\,\Psi_1(X) + \ldots + K_\lambda\,\Psi_\lambda(X)$$

ao conjunto de pontos dados, onde $\Psi_\mu(X)$ é um polinômio de grau μ e K_0, k_1, ..., K_λ são coeficientes numéricos a serem determinados pelo método dos mínimos quadrados, para $\lambda = 0, 1, 2, \ldots, n-1$.

Nestas condições deve-se ter, para $i = 1, 2, \ldots, n$

$\sum_i p_i \left[Y_i - P_\lambda(X_i) \right]^2 = \text{mínimo}$, para $\lambda = 0, 1, 2, \ldots, n-2$

e igual a zero para $\lambda = n-1$. Neste caso $Y_i = P_{n-1}(X_i)$.

P_λ pode ser escrito na forma

$$P_\lambda = a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + \ldots + a_\lambda X^\lambda \quad .$$

Substituindo na condição de mínimo e diferenciando em relação a a_μ, tem-se

$$\sum_i p_i \left[Y_i - P_\lambda(X_i) \right] X_i^\mu = 0 \quad , \text{ para } \quad \mu = 0, 1, 2, \ldots, \lambda$$

e $\lambda = 0, 1, 2, \ldots, n-1$, ou, visto que $Y_i = P_{n-1}(X_i)$,

$$\sum_i \left[P_{n-1}(X_i) - P_\lambda(X_i) \right] p_i X_i^\mu = 0 \quad .$$

Deste sistema conclue-se que

$$\sum_i \left[P_{\lambda+1}(X_i) - P_\lambda(X_i) \right] p_i X_i^\mu = 0$$

ou

$$\sum_i \Psi_{\lambda+1}(X_i)\, p_i\, X_i^\mu = 0 \quad .$$

Segue-se que se $\phi_\mu(X)$ é qualquer polinômio de grau μ em X, então, se $\mu < \lambda + 1$,

$$\sum_i p_i\, \Psi_{\lambda+1}(X_i)\, \phi_\mu(X_i) \equiv 0 \quad .$$

Admitindo que os polinômios $\Psi(X)$ são conhecidos, os coeficientes numéricos k_0, k_1, ..., k_λ são determinados como segue:

$$\sum_i p_i \left[Y_i - P_\lambda \; (X_i) \right]^2 = \text{mínimo},$$

ou

$$\sum_i p_i \left[Y_i - k_0 \; \Psi_0 \; (X_i) - k_1 \; \Psi_1 \; (X_i) - \ldots - K_\mu \; \Psi_\mu \; (X_i) - \ldots + \right.$$

$$\left. - K_\lambda \; \Psi_\lambda \; (X_i) \right]^2 = \text{mínimo}$$

Diferenciando em relação a K_μ e sabendo-se que

$$\sum_i p_i \; \Psi_\mu \; (X_i) \; \Psi_\gamma \; (X_i) \equiv 0 \qquad \text{se} \qquad \mu \neq \gamma$$

então

$$K_\mu = \frac{\sum_i p_i \; Y_i \; \Psi_\mu \; (X_i)}{\sum_i p_i \; \Psi_\mu^2 \; (X_i)} \tag{3}$$

Para a determinação de Ψ_μ (X) nota-se que

$$\frac{\Psi_{\lambda+1} \; (X_i)}{X - X_i} = \Psi_{\lambda+1} \; (X_i) \left[\frac{1}{X} + \frac{X_i}{X^2} + \ldots + \frac{X_i^{\mu-1}}{X^\mu} + \ldots \right] ,$$

e sendo

$$\sum_i \Psi_\lambda \; (X_i) \; p_i \; X_i^\mu = 0 \quad , \qquad \mu < \lambda \quad ,$$

tem-se

$$\sum_i p_i \frac{\Psi_{\lambda+1} \; (X_i)}{X - X_i} = \sum_i p_i \; \Psi_{\lambda+1} \; (X_i) \left[\frac{X_i^{\lambda+1}}{X^{\lambda+2}} + \frac{X_i^{\lambda+2}}{X^{\lambda+3}} + \ldots \right] .$$

Mas

$$\Psi_{\lambda+1} \; (X) \sum_i \frac{p_i}{X - X_i} = \sum_i p_i \frac{\Psi_{\lambda+1} \; (X) - \Psi_{\lambda+1} \; (X_i)}{X - X_i} + \sum_i p_i \frac{\Psi_{\lambda+1} \; (X_i)}{X - X_i}$$

$$= \sum_i p_i \frac{\Psi_{\lambda+1} \; (X) - \Psi_{\lambda+1} \; (X_i)}{X - X_i} + \sum_i p_i \; \Psi_{\lambda+1} \; (X_i) \left[\frac{X_i^{\lambda+1}}{X^{\lambda+2}} + \frac{X_i^{\lambda+2}}{X^{\lambda+3}} + \ldots \right]$$

Resulta, então

$$\sum_i \frac{p_i}{X - X_i} = \frac{\sum_i p_i \left[\dfrac{\Psi_{\lambda+1}(X) - \Psi_{\lambda+1}(X_i)}{X - X_i} \right]}{\Psi_{\lambda+1}(X)}$$

mais os termos em $1/X$ de ordem maior que

$$\frac{1}{\left[\Psi_{\lambda+1}(X) \right]^2} \quad .$$

Então

$$\frac{\sum_i p_i \left[\dfrac{\Psi_{\lambda+1}(X) - \Psi_{\lambda+1}(X_i)}{X - X_i} \right]}{\Psi_{\lambda+1}(X)}$$

converge a

$$\sum_i \frac{p_i}{X - X_i}$$

quando expresso na forma de frações contínuas

$$\frac{a_1}{(X - b_1) -} \quad \frac{a_2}{(X - b_2) -} \quad \cdots \quad \frac{a_{\lambda+1}}{(X - b_{\lambda+1}) -} \quad \cdots$$

Para se determinar a_1 , a_2 ,..., $a_{\lambda+1}$,... e b_1 , b_2 ,..., $b_{\lambda+1}$,... verifica-se inicialmente que

$$\frac{a_1}{X - b_1} = \frac{\sum_i p_i \dfrac{\Psi_1(X) - \Psi_1(X_i)}{X - X_i}}{\Psi_1(X)}$$

de modo que

$$a_1 = \sum_i p_i \left[\frac{\Psi_1(X) - \Psi_1(X_i)}{X - X_i} \right] \quad ,$$

e

$$X - b_1 = \Psi_1(X) \quad .$$

Então

$$\sum_i p_i \; (X_i - b_1) = \sum_i p_i \; \Psi_1 \; (X_i) = 0$$

pela propriedade (1) .

Logo,

$$b_1 = \frac{\sum\limits_i p_i \; X_i}{\sum\limits_i p_i} \tag{4}$$

enquanto

$$a_1 = \sum_i p_i \; \frac{\left[X - b_1 - (X_i - b_1) \right]}{X - X_i} = \sum_i p_i \tag{5}$$

Em geral, pela propriedade das frações contínuas

$$\Psi_{\lambda+1} \; (X) = (X - b_{\lambda+1}) \; \Psi_\lambda \; (X) - a_{\lambda+1} \; \Psi_{\lambda-1} \; (X) \tag{6}$$

Multiplicando (6) por $p_i \; X_i^{\lambda-1}$ e somando, pela propriedade em (1) , tem-se

$$0 \equiv \sum_i p_i \; X_i^\lambda \; \Psi_\lambda \; (X_i) - a_{\lambda+1} \sum_i p_i \; \Psi_{\lambda-1} \; (X_i) \; X_i^{\lambda-1}$$

ou

$$a_{\lambda+1} = \frac{\sum\limits_i p_i \; X_i^\lambda \cdot \Psi_\lambda \; (X_i)}{\sum\limits_i p_i \; \Psi_{\lambda-1} \; (X_i) \; X_i^{\lambda-1}} = \frac{(\lambda \; , \; \lambda)}{(\lambda - 1 \; , \; \lambda - 1)} \tag{7}$$

Multiplicando (6) por $p_i \; X_i^\lambda$ e somando, obtém-se

$$0 = (\lambda \; , \; \lambda + 1) - b_{\lambda+1} \; (\lambda \; , \; \lambda) - a_{\lambda+1} \; (\lambda - 1 \; , \; \lambda) \quad ,$$

resultando

$$b_{\lambda+1} = \frac{(\lambda \; , \; \lambda + 1)}{(\lambda \; , \; \lambda)} - \frac{(\lambda - 1 \; , \; \lambda)}{(\lambda - 1 \; , \; \lambda - 1)}$$

O caso particular em que as ordenadas são equidistantes e os pesos são iguais, é reduzido por Chebysheff à seguinte forma:

$$Y = \frac{1}{n} \sum_i Y_i \phi_0 (t) + \frac{3}{n (n^2 - 1^2)} \sum_i \frac{i}{1} \cdot \frac{n - i}{1} \Delta Y_i \phi_1 (t) +$$

$$+ \frac{5}{n (n^2 - 1^2)(n^2 - 2^2)} \sum_i \frac{i (i + 1)(n - i)(n - i - 1)}{1 \circ 2 \circ 1 \circ 2} \Delta^2 Y_i \phi_2 (t) +$$

$$+ \frac{7}{n (n^2 - 1^2)(n^2 - 2^2)(n^2 - 3^2)} \sum_i \left[\frac{i (i + 1)(i + 2)}{1 \cdot 2 \circ 3} \cdot \frac{(n - 1)}{1 \circ 2 \circ 3} \cdot \right.$$

$$\left. \cdot (n - i - 1)(n - i - 2) \Delta^3 Y_i \phi_3 (t) \right] + \ldots ,$$

onde

$$t = \frac{2 X - X_1 - X_n}{X_2 - X_1}$$

$$= 2 X - n - 1 \quad \text{se} \quad X_i = i \quad ;$$

e

$$\phi_\lambda (t) = (2 \lambda - 1) t \phi_{\lambda-1} (t) - (\lambda - 1)^2 \left[n^2 - (\lambda - 1)^2 \right] \phi_{\lambda-2} (t) \quad .$$

Os cinco primeiros polinômios têm as seguintes expressões:

$$\phi_0 (t) = 1$$

$$\phi_1 (t) = t$$

$$\phi_2 (t) = 3 t^2 - (n^2 - 1)$$

$$\phi_3 (t) = 15 t^3 - 3 (3 n^2 - 7) t$$

$$\phi_4 (t) = 105 t^4 - 30 (3 n^2 - 13) t^2 + 9 (n^2 - 1)(n^2 - 9)$$

$$\phi_5 (t) = 945 t^5 \quad 1050 (n^2 - 7) t^3 + 15 (15 n^4 - 230 n^2 + 407) t$$

ROMANOVSKY (1927) aborda o método geral de interpolação pelos mínimos quadrados com o auxílio de um dado sistema de funções.

O processo é discutido como se segue:

Sejam Y_1 , Y_2 ,...., Y_n os valores de Y observados para os valores X_1 , X_2 ,...., X_n de X , e seja p_1 , p_2 ,...., p_n os pesos dos valores observados de Y . O sistema de valores

$$X_i \ , \ Y_i \ , \ p_i \qquad (i = \overline{1\ ,\ n}) \tag{1}$$

($i = \overline{1\ ,\ n}$ é equivalente a $i = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n$) denomina-se a *base de interpolação*.

Seja

$$U_0\ (X)\ ,\ U_1\ (X)\ ,\ U_2\ (X)\ ,\ldots,\ U_s\ (X) \tag{2}$$

o sistema de algumas funções bem definidas e apresentando um só valor para cada X .

O processo consiste na *ortogonalização do sistema* (2) *na base* (X , p) que é a notação para o sistema de números X_i , p_i ($i = \overline{1\ ,\ n}$).

Diz-se que o sistema de funções (2) é ortogonalizável na base (X , p) se for possível determinar um novo sistema de funções

$$\phi_0\ (X)\ ,\ \phi_1\ (X)\ ,\ \phi_2\ (X)\ ,\ \ldots\ ,\ \phi_s\ (X) \tag{3}$$

apresentando as duas propriedades seguintes:

1º) Tem-se

$$\phi_h\ (X) = \sum_{g=0}^{s} a_{gh}\ U_g\ (X)\ ,\ (h = \overline{0\ ,\ s}) \tag{4}$$

a_{gh} sendo qualquer constante ;

2º) Tem-se

$$(\phi_h\ \phi_k) = \sum_{i=1}^{n} p_i\ \phi_h\ (X_i)\ \phi_k\ (X_i) \quad \begin{cases} = 0 & \text{se } h \neq k \\ \neq 0 & \text{se } h = k \end{cases} \tag{5}$$

Para se determinar as funções (3) , admite-se inicialmente

$$\phi_0 \ (X) = U_0 \ (X) \quad .$$

Então $\phi_1 \ (X)$ pode ser escrito na forma

$$\phi_1 \ (X) = a \ \phi_0 \ (X) + b \ U_1 \ (X) \quad ,$$

devendo-se ter

$$(\phi_0 \ \phi_1) = a \ (\phi_0 \ \phi_0) + b \ (U_1 \ \phi_0) = 0 \quad .$$

Então, tomando-se

$$b = 1 \quad , \quad a = - \frac{(U_1 \ \phi_0)}{(\phi_0 \ \phi_0)}$$

e

$$\phi_1 \ (X) = - \frac{(U_1 \ \phi_0)}{(\phi_0 \ \phi_0)} \phi_0 \ (X) + U_1 \ (X) \quad .$$

Similarmente,

$$\phi_2 \ (X) = - \frac{(U_2 \ \phi_0)}{(\phi_0 \ \phi_0)} \phi_0 \ (X) - \frac{(U_2 \ \phi_1)}{(\phi_1 \ \phi_1)} \phi_1 \ (X) + U_2 \ (X) \quad .$$

Assim o problema da ortogonalização do sistema (2) é resolvido pelas equações

$$\phi_0 \ (X) = U_0 \ (X)$$

$$\phi_h \ (X) = - \sum_{k=0}^{h-1} \frac{(U_h \ \phi_k)}{(\phi_k \ \phi_k)} \phi_k \ (X) + U_h \ (X)$$

$$(h = \overline{1 \ , s})$$

se nenhuma das somas $(\phi_h \ \phi_h)(h = \overline{0 \ , s})$ é nula para os valores dados de X e $\underline{p}$.

Para isto as funções $U_h \ (X)$ são de tal forma que $\phi_h \ (X)$ não se anule para todos os valores de X mencionados. Por exemplo, $U_h = X^h$, $(h = \overline{0 \ , s})$ quando $n > s$ são tais funções.

A aplicação das funções ϕ_h (X) em interpolação pelo método dos mínimos quadrados consiste em se determinar uma expressão

$$Y = \sum_h A_h \phi_h (X) \quad , \quad h = 0 , 1 , 2 ,\ldots, s \qquad (7)$$

tal que a soma

$$S = \sum_i p_i \left[Y_i - \sum_h A_h \phi_h (X_i) \right]^2 , \quad i = 1 , 2 ,\ldots, n \qquad (8)$$

seja mínima. Os valores dos coeficientes A_h podem ser obtidos das equações normais

$$(Y \phi_h) - \sum_{k=0}^{s} A_h (\phi_h \phi_k) = 0 \quad , \quad (h = \overline{0 , s})$$

cujas soluções são

$$A_h = \frac{(Y \phi_h)}{(\phi_h \phi_h)} \quad , \quad (h = \overline{0 , s}) \qquad (9)$$

Assim obtém-se a expressão

$$Y = \sum_h \frac{(Y \phi_h)}{(\phi_h \phi_h)} \phi_h (X) \qquad (10)$$

para a interpolação, reduzindo S ao mínimo.

PIMENTEL GOMES (1970) discute, através de um ensaio em blocos ao acaso, o método dos polinômios ortogonais aplicáveis a dados com repetições. No experimento considerado, os tratamentos constaram de adubação com doses 0 , 25 , 50 , 75 e 100 kg de P_2O_5 por hectare, com 4 repetições. O processo consiste em isolar cada um dos quatro graus de liberdade para tratamentos, a fim de avaliar separadamente os efeitos de 1º grau , de 2º grau , de 3º grau e de 4º grau.

Conforme o autor, sendo as doses de P_2O_5 igualmente espaçadas, o processo se torna relativamente fácil por permitir o uso de tabelas de coeficientes de interpolação de polinômios ortogonais. Após discussão detalhada do processo de cálculos, obteve-se o seguinte quadro de análise de variância.

Causa de Variação	G. L.	S. Q.	Q. M.	F
Regressão Linear	1	40,64	40,64	44,66 **
Regressão Quadrática	1	21,28	21,28	23,38 **
Regressão Cúbica	1	9,23	9,23	10,14 **
Regressão de 4º grau	1	1,07	1,07	1,18
(Tratamentos)	(4)	(72,22)		
Blocos	3	2,73		
Resíduo	12	10,92	0,91	
Total	19	85,87		

Sendo significativos os componentes de 1º, de 2º e de 3º grau, a equação de regressão obtida foi

$$Y = 4,708 + 0,277\ X - 0,00483\ X^2 + 0,0000256\ X^3$$

Ainda segundo o autor, quando não há repetições para os dados a serem analisados, deve-se utilizar como resíduo o quadrado médio dos desvios da regressão. Um exemplo numérico é apresentado, referente a dados de temperaturas máximas médias de julho de Piracicaba, em graus centígrados, de quinze anos de observações, chegando-se à seguinte análise de variância:

Causa de Variação	G. L.	S. Q.	Q. M.	F
Regressão Linear	1	7,560	7,560	7,05 *
Regressão Quadrática	1	0,076	0,076	0,07
Desvios da Regressão (Resíduo)	12	15,874	1,073	
Total	14			

Com o indício de regressão linear, a equação de regressão correspondente foi

$$Y = 23,595 + 0,164\ X \quad .$$

FISHER (1970) discute o ajuste de uma equação de regressão polinomial do tipo

$$Y = A + B\ \xi_1 + C\ \xi_2 + D\ \xi_3 + \ldots$$

a uma série de n' observações com intervalos iguais de X , onde ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 ,... são polinômios ortogonais de grau 1 , 2 , 3 ,... ($A = \bar{Y}$ e $\xi_1 = X - \bar{X}$) .

É dado um método de se determinar os coeficientes de regressão por adições sucessivas e também de calcular os valores dos polinômios pelo mesmo processo.

O método apresenta a vantagem de reduzir sensivelmente o número de operações aritméticas necessárias ao ajustamento da equação de regressão aos pontos observados, podendo ser aplicável a polinômio de qualquer grau.

SNEDECOR (1966) discute o ajuste de polinômios ortogonais para os casos em que os n valores de X são espaçados em intervalos unitários e onde há uma correspondência unívoca da variável independente X para a variável dependente Y. O ajuste do polinômio

$$Y = A + B X_1 + C X_2 + D X_3 + \dots$$

é feito por etapas, determinando e testando sucessivamente os coeficientes A, B, C, D,... No modelo anterior, X_1, X_2, X_3,... são polinômios de graus respectivamente um, dois, três, ... e funções de X.

Neste caso particular, os cinco primeiros polinômios são

$$X_1 = X - \bar{x} \qquad \text{onde} \qquad \bar{x} = \frac{\Sigma X}{n}$$

$$X_2 = X_1^2 - \frac{n^2 - 1}{12}$$

$$X_3 = X_1^3 - \frac{3 n^2 - 7}{20} (X_1)$$

$$X_4 = X_1^4 - \frac{3 n^2 - 13}{14} (X_1^2) + \frac{2 (n^2 - 1)(n^2 - 9)}{560}$$

$$X_5 = X_1^5 - \frac{5 (n^2 - 7)}{18} (X_1^3) + \frac{15 n^4 - 230 n^2 + 407}{1.008} (X_1)$$

Uma aplicação, com exemplo numérico, é apresentada pelo autor.

PEARSON e HARTLEY (1970) discutem o uso de tabelas de coeficientes de polinômios ortogonais, quando a variável independente X apresenta valores equidistantes, mas em que ocorreu a perda de dados, provocando uma "descontinuidade" na série. O processo consiste essencialmente em se atribuir valores arbitrários àqueles pontos omissos e pelo uso das tabelas. determinam-se os coeficientes de regressão que serão usados posteriormente para fazer correções.

Testes apropriados de significância podem ser utilizados em tais casos.

ANDERSON e BANCROFT (1952) discutem o caso em que se faz o ajuste do polinômio da forma

$$Y_j = \alpha_0 + \alpha_1 P_{1j} + \alpha_2 P_{2j} + \ldots + \alpha_r P_{rj} + e_j \quad , \quad j = 1 , 2 , \ldots , n$$

a <u>n</u> pares de valores X_i , Y_i , com X igualmente espaçado, onde

$$P_{ij} = C_{i0} + C_{i1} x_j + C_{i2} x_j^2 + \ldots + C_{ii} X_j^i \quad ,$$

sendo

$$x_j = X_j - \bar{X} = j - \bar{j} \quad .$$

A determinação dos coeficientes de P_{ij} é feita de modo que

$$\sum_j P_{ij} P_{kj} = 0 \quad , \quad i = 0 , 1 , 2 , \ldots , r \quad ; \quad k \neq i$$

Visto que os polinômios são funções de potências de <u>x</u> igual ou menor que <u>k</u> , podemos expressar a equação anterior como

$$\sum_j P_{ij} x_j^k = 0 \quad , \quad k = 0 , 1 , 2 , \ldots , i - 1 \quad .$$

Tem-se, portanto, <u>i</u> equações com (i + 1) coeficientes a serem determinados. Impõe-se, então, por restrição, que

$$C_{ii} = 1 \quad .$$

Assim, para um dado <u>k</u>

$$\sum_j (C_{i0} + C_{i1} x_j + \ldots + C_{i,i-1} x_j^{i-1} + x_j^i)\, x_j^k = \sum_v C_{iv} \sum_j x_j^{k+v} + \sum_j x_j^{i+k} = 0$$

para

$$v = 0\ ,\ 1\ ,\ 2\ ,\ \ldots\ ,\ i - 1\ .$$

No caso particular, se $\underline{m}$ é ímpar, $\sum_j x_j^m = 0$

Para $\underline{i}$ ímpar, têm-se as seguintes equações:

k	EQUAÇÕES
0	$C_{i,0}\, n + C_{i,2} \Sigma x^2 + \ldots + C_{i,i-1} \Sigma x^{i-1} = 0$
2	$C_{i,0} \Sigma x^2 + C_{i,2} \Sigma x^4 + \ldots + C_{i,i-1} \Sigma x^{i+1} = 0$
.	....
i-1	$C_{i,0} \Sigma x^{i-1} + C_{i,2} \Sigma x^{i+1} + \ldots + C_{i,i-1} \Sigma x^{2(i-1)} = 0$
----------	----------
1	$C_{i,1} \Sigma x^2 + C_{i,3} \Sigma x^4 + \ldots + C_{i,i-2} \Sigma x^{i-1} + \Sigma x^{i+1} = 0$
3	$C_{i.1} \Sigma x^4 + C_{i,3} \Sigma x^6 + \ldots + C_{i,i-2} \Sigma x^{i+1} + \Sigma x^{i+3} = 0$
.	....
i-2	$C_{i,1} \Sigma x^{i-1} + C_{i,3} \Sigma x^{i+1} + \ldots + C_{i,i-2} \Sigma x^{2i-4} + \Sigma x^{2i-2} = 0$

Em todos os casos, a soma se refere a j , $j = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ ,\ n$. As $(1/2)(i + 1)$ equações, para $\underline{k}$ de valor par, envolvem somente os coeficientes $(C_{i,0}\ ,\ C_{i,2}\ ,\ \ldots\ ,\ C_{i,i-1})$, e, em vista destas equações não terem termos constantes, todos os coeficientes são nulos.

Mas nas $(1/2)(i - 1)$ equações, para $\underline{k}$ ímpar, ocorrem termos constantes não nulos, podendo-se resolvê-las para os coeficientes

$$(C_{i,1}\ ,\ C_{i,3}\ ,\dots,\ C_{i,i-2}) \quad .$$

Então conclue-se que $\underline{i}$ sendo ímpar $(i = 1\ ,\ 3\ ,\ \dots)$

$$P_1 = x$$

$$P_3 = x^3 + C_{3,1}\ x$$

.. . .

$$P_i = x_i + C_{i,i-2}\ x^{i-2} + \dots + C_{i,3}\ x^3 + C_{i,1}\ x$$

Quando $\underline{i}$ for par $(i = 0\ ,\ 2\ ,\ 4\ ,\dots)$

$$P_0 = 1$$

$$P_2 = x^2 + C_{2,0}$$

$$P_4 = x^4 + C_{4,2}\ x^2 + C_{4,0}$$

.. . .

$$P_i = x^i + C_{i,i-2}\ x^{i-2} + \dots + C_{i,2}\ x^2 + C_{i,0}$$

Destes resultados os autores concluem que

$$x\ P_i = P_{i+1} + D_{i,1} + D_{i,2}\ P_{i-3} + \dots$$

onde os D são funções dos C e $D_{i,v} = 0$ para $v > 1$.

Como $x\ P_i$ é uma função de potências de $\underline{x}$ igual ou menor que $i + 1$, e sabendo-se que $\Sigma\ P_v\ x^k = 0$, para $v > k$, então $\Sigma\ x\ P_i\ P_v = 0$ para $v > i + 1$. Uma vez que P_i^2 é uma função de potên-cia pares de $\underline{x}$, então

$$\Sigma\ x\ P_i^2 = 0 \quad .$$

Logo

$$\Sigma\ x\ P_i\ P_v \neq 0$$

somente quando $v = i \pm 1$.

Assim

$$\Sigma\, x\, P_i\, P_{i+1} = \Sigma\, P_{i+1}^2 \qquad \text{ou} \qquad \Sigma\, x\, P_{i-1}\, P_i = \Sigma\, P_i^2 \quad ,$$

$$\Sigma\, x\, P_i\, P_{i-1} = \Sigma\, (P_{i+1} + D_{i,1}\, P_{i-1} + D_{i,2}\, P_{i,3} + \ldots\ )\, P_{i-1}$$

$$\Sigma\, x\, P_i\, P_{i-1} = D_{i,1}\, \Sigma\, P_{i-1}^2 \quad .$$

Então

$$D_{i,1} = \frac{\Sigma\ P_i^2}{\Sigma\, P_{i-1}^2} \qquad \text{e} \qquad D_{i,2} = D_{i,3} = \ldots = 0$$

Resulta, portanto,

$$P_{i+1} = x\, P_i - \left(\frac{\Sigma\, P_i^2}{\Sigma\, P_{i-1}^2}\right) P_{i-1}$$

que é a fórmula de recorrência para a obtenção dos polinômios ortogonais.

Genericamente,

$$\Sigma\, P_i^2 = \frac{n\ (n^2 - 1)(n^2 - 4)\ \ldots\ (n^2 - i^2)(i\ !)^2\ \left[\ (i - 1)\ !\ \right]^2}{4\ (2\ i + 2)\ \left[\ (2\ i - 1)\ !\ \right]^2}$$

e consequentemente

$$D_{i,1} = \frac{(n^2 - i^2)\ i^2}{4\ (4\ i^2 - 1)}$$

Além desses, AITKEN (1957) , STEEL e TORRIE (1960) , DRAPER e SMITH (1966) , FISHER e YATES (1971) , dentre outros, abordam o uso de polinômios ortogonais em análise de regressão, fazendo referências aos casos onde a variável independente assume valores igualmente espaçados.

GUEST (1953) aplica o método de Doolittle no ajustamento de polinômios para dados com frequências diferentes e empregando momentos fatoriais. A curva de mínimos quadrados $U_p\ (X)$ de grau $\underline{p}$ que se ajusta a $\underline{n}$ observações $Y\ (X_i)$, de peso $w\ (X_i)$, é obtida da condição de que

$$\sum_i w\ (X_i) \left[Y\ (X_i) - U_p\ (X_i) \right]^2 \quad , \quad i = 1\ , 2\ , \ldots, n$$

seja mínima.

Considera-se o caso em que se deseja expressar $U_p\ (X)$ como uma função linear de polinômios $f_j\ (X)$ de grau $\underline{j}$ em X, para $j = 0\ , 1\ , 2\ , \ldots, p$. Então

$$U_p\ (X) = \sum_j b_{pj}\ f_j\ (X)$$

cujas equações normais são dadas por

$$\sum_j b_{pj}\ \phi_{jk} = M_k \tag{1}$$

onde

$$\phi_{jk} = \sum_i w\ (X_i)\ f_j\ (X_i)\ f_k\ (X_i) \qquad e \qquad M_k = \sum_i w\ (X_i)\ Y\ (X_i)\ f_k\ (X_i)$$

Usando para as funções $f_j\ (X)$ os fatoriais não reduzidos

$$X^{(j)} = X\ (X - 1) \ldots (X - j + 1) \quad ,$$

por combinação linear convertem-se as equações (1) no sistema equivalente

$$\sum_j b_{pj} \sum_i w\ (X_i)(X_i + k)^{(j+k)} = \sum_i w\ (X_i)\ Y\ (X_i)(X_i + k)^{(k)}$$

para

$$i = 1\ , 2\ , \ldots, n \qquad e \qquad j = 0\ , 1\ , 2\ , \ldots, p\ .$$

cuja matriz dos coeficientes b_{pj} é, neste caso, não simétrica. Assim o método de Fisher é indicado para a determinação das equações normais, sendo estas resolvidas pelo método de Doolittle.

BRIGHT e DAWKYNS (1965) , fazendo um estudo comparativo entre dois métodos de ajustamento de curvas, quadrados mínimos e polinômios ortogonais, verificaram que, em todos os casos analisados, o método dos polinômios ortogonais foi mais preciso e o tempo requerido para os cálculos foi menor.

A inversão da matriz no método dos mínimos quadrados foi feita usando o método de redução Gauss-Jordon , cujos trabalhos anteriorres mostram ser o mais rápido.

Os polinômios ortogonais são da forma

$$P_j(X_i) = (X_i - \alpha_j)\, P_{j-1}(X_i) - \beta_{j-1}\, P_{j-2}(X_i) , \qquad \begin{array}{l} i = 1 , 2 , \ldots , n \\ j = 2 , 3 , \ldots , \end{array}$$

onde

$$P_0(X) = 1 \qquad e \qquad P_1(x) = X_i - \bar{X}$$

$$\alpha_j = \frac{\sum_i X_i\, P^2_{j-1}(X_i)}{\sum_i P^2_{j-1}(X_i)}$$

$$\beta_j = \frac{\sum_i X_i\, P_{j-1}(X_i)\, P_j(X_i)}{\sum_i P^2_{j-1}(X_i)}$$

WISHART e METAKIDES (1953) apresentam um esquema de cálculos dispostos em forma de tabelas para ajustamento de polinômios da forma

$$Y = A + B\,\xi_1 + C\,\xi_2 + D\,\xi_3 + \ldots$$

a $\underline{n}$ pares de valores observados X_i , Y_i , onde ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 , ... são polinômios ortogonais, funções de X .

As tabelas apresentam os resultados parciais e finais do processo de ajustamento, análise de variância e uma coluna auxiliar para a verificação dos resultados.

Um exemplo numérico de análise de regressão polinomial é apresentado para o caso em que a variável independente assume valores desigualmente espaçados.

GRANDAGE (1958) discute um método direto de determinação dos coeficientes ortogonais de polinômios para intervalos desiguais da variável independente X, através da resolução de $\underline{r}$ equações lineares, para a obtenção de polinômios de grau $\underline{r}$.

O coeficiente do termo de maior grau (coeficiente líder), por restrição, é igual a unidade. É feita uma aplicação usando quatro níveis de um nutriente: 0 , 5 , 10 e 20 mg , obtendo-se os polinômios de até 3º grau respectivamente das relações, para $i = 1, 2, \dots, n$,

$$\sum_i \xi_{1i} = 0$$

$$\sum_i \xi_{2i} = 0 \quad ; \quad \sum_i \xi_{1i}\, \xi_{2i} = 0$$

$$\sum_i \xi_{3i} = 0 \quad ; \quad \sum_i \xi_{1i}\, \xi_{3i} = 0 \quad ; \quad \sum_i \xi_{2i}\, \xi_{3i} = 0$$

onde

$$\xi_{1i} = X_i + a_1$$

$$\xi_{2i} = X_i^2 + b_2 X_i + a_2$$

$$\xi_{3i} = X_i^3 + c_3 X_i^2 + b_3 X_i + a_3$$

Se o ajuste envolve polinômios de grau maior que três, a determinação dos coeficientes ortogonais de polinômios torna-se bastan te trabalhosa.

EMERSON (1965) faz referência à aplicação, em análise de regressão, de funções onde a ortogonalidade é satisfeita através de uma função peso $w(X)$, isto é,

$$\sum_i w(X_i)\, f_j(X_i)\, f_k(X_i) = \delta_{j,k} \quad , \qquad i = 1, 2, \ldots, n$$

onde $\underline{n}$ é o número de níveis da variável independente X ; $f_j(X)$ e $f_k(X)$ são elementos do conjunto de funções ortogonais, e $\delta_{j,k} = 0$ se $j \neq k$.

Se $w(X_i) = n_i$, o número de observações em X_i , então o critério de mínimos quadrados pode ser expresso como a condição de que

$$\sum_i w(X_i) \left[\bar{Y}_i - Y_{Xi} \right]^2$$

seja mínima, onde $\bar{Y}_i$ é a média das observações no nível X_i e Y_{Xi} é o valor a ser ajustado ao mesmo ponto.

Por outro lado, quando as proporções de observações seguem uma distribuição binomial, os polinômios de Krawtchouk poderão ser usados, visto que a função peso será

$$w(X) = \binom{n}{X} \cdot p^X \cdot q^{n-X} \quad ,$$

para $p, q > 0$ e $p + q = 1$

Uma aplicação destes polinômios ocorre quando se deseja analisar a tendência de um conjunto de dados, com relação aos níveis, em um ensaio onde o número de observações referentes aos diferentes níveis são determinadas pelas correspondentes proporções na população.

Nestes casos, e em particular quando $p = q = 1/2$, o experimentador pode tomar uma amostra de $m \cdot \binom{n}{X}$ observações em cada ní -

vel

$$X = 0 , 1 , \ldots , n$$

onde m é uma constante.

O coeficiente C_j do j-ésimo grau do polinômio de Krawtchouk na equação de regressão será

$$C_j = \frac{\sum\limits_X K_{n,j}(X) \sum\limits_k \sum\limits_i Y_{X,k,i}}{m \cdot 2^n \binom{n}{j}} , \qquad \begin{array}{l} X = 0 , 1 , 2 , \ldots , n \\ k = 1 , 2 , \ldots , m \\ i = 1 , 2 , \ldots , \binom{n}{X} \end{array}$$

onde, $m \binom{n}{j}$ é o total das observações.

$$K_{n,j}(X) = \binom{n}{j} \sum_\gamma (-2) \cdot \frac{\binom{X}{\gamma}\binom{j}{\gamma}}{\binom{n}{\gamma}} , \qquad \gamma = 0 , 1 , 2 , \ldots , j$$

$Y_{X,K,i}$ é a i-ésima observação no k-ésimo grupo de $\binom{n}{X}$ observações no ponto X , e a soma de quadrados da regressão é:

$$S\ Q\ Reg._j = \frac{\left[\sum\limits_X K_{n,j}(X) \sum\limits_k \sum\limits_i Y_{X,k,i}\right]^2}{m \cdot 2^n \binom{n}{j}} , \qquad \begin{array}{l} j = 1 , 2 , \ldots , n \\ k = 1 , 2 , \ldots , m \\ i = 1 , 2 , \ldots , \binom{n}{X} \end{array}$$

com um grau de liberdade.

A análise de variância pode ser usada para testar os diferentes componentes de regressão. A única restrição a ser considerada é que as inferências estatísticas obtidas se restringem às populações com distribuições binomiais.

KENDALL e STUART (1967) discutem um método de obtenção de polinômios da forma

$$\phi_i = \sum_r C_{ir} X^r \qquad , \qquad r = 0 , 1 , 2 , \ldots , i \qquad (1)$$

com a propriedade

$$\sum_j \phi_i (X_j) \phi_h (X_j) = 0 \tag{2}$$

$$i,h = 0 , 1 , 2 ,\ldots, k \quad ; \quad i \neq h$$

$$j = 1 , 2 , \ldots , n$$

Neste caso tem-se

$$\frac{(k + 1)(k + 2)}{2}$$

coeficientes a serem determinados para um sistema de $\frac{1}{2} K (K + 1)$ equações. É imposta a condição $C_{ii} = 1$, para qualquer $\underline{i}$. Assim sendo,

$$\phi_0 (X) = C_{00} \equiv 1 \tag{3}$$

identicamente em X .

Das equações (1) e (2) , resulta, com $h = k$

$$\sum_j \sum_r C_{ir} X_j^r \sum_s C_{ks} X_j^s = 0 \quad ,$$

$$i \neq k \quad e \quad s = 0 , 1 , 2 ,\ldots, k$$

ou

$$\sum_r C_{ir} \sum_s C_{ks} \mu'_{r+s} = 0 \tag{4}$$

onde μ'_p é o p-ésimo momento do conjunto de X . Sendo válida para todo $i = 0 , 1 , 2 ,\ldots, k - 1$, devemos ter

$$\sum_s C_{ks} \mu'_{r+s} = 0 \quad , \quad r = 0 , 1 , 2 ,\ldots, k - 1 \tag{5}$$

Escrevendo o determinante

$$
\left| M_k \right| = \begin{vmatrix} \mu'_0 & \mu'_1 & \cdots & \mu'_{k-1} & \mu'_k \\ \mu'_1 & \mu'_2 & \cdots & \mu'_k & \mu'_{k+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mu'_{k-1} & \mu'_k & \cdots & \mu'_{2k-2} & \mu'_{2k-1} \\ \mu'_k & \mu'_{k+1} & \cdots & \mu'_{2k-1} & \mu'_{2k} \end{vmatrix}
$$

e $\left| M_k^{u \cdot v} \right|$ sendo o menor do elemento na u-ésima linha e v-ésima coluna de $\left| M_k \right|$, a solução de (5) é

$$
C_{k,s} = \frac{\left| M_k^{k+1\ ,\ s+1} \right|}{\left| M_{k-1} \right|} \tag{6}
$$

$$
s = 0\ ,\ 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ k-1
$$

Portanto, de (1) e (6)

$$
\phi_k\ (X) = \frac{1}{\left| M_{k-1} \right|} \cdot \begin{vmatrix} \mu'_0 & \mu'_1 & \cdots & \mu'_k \\ \mu'_1 & \mu'_2 & \cdots & \mu'_{k+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mu'_{k-1} & \mu'_k & \cdots & \mu'_{2k-1} \\ 1 & X & \cdots & X^k \end{vmatrix} \tag{7}
$$

que é a expressão usada para o cálculo do polinômio de grau $\underline{k}$.

COX (1958) , através da expansão Schweinsiana de um determinante, obtém uma fórmula geral de polinômios ortogonais em regressão. Cita que a equação de regressão pode ser expressa como:

$$\Delta = \begin{vmatrix} \hat{Y} & 1 & X & \cdots & X^p \\ \mu_{01} & \mu'_0 & \mu'_1 & \cdots & \mu'_p \\ \mu_{11} & \mu'_1 & \mu'_2 & \cdots & \mu'_{p+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mu_{p1} & \mu'_p & \mu'_{p+1} & \cdots & \mu'_{2p} \end{vmatrix} = 0 \qquad (1)$$

onde μ'_j é o momento de ordem $\underline{j}$ de X em relação à origem e μ_{j1} é o $(j , 1)$ momento bidimensional de X e Y.

A expansão Schweinsiana de Δ dá, para $j = 1 , 2 , \ldots , p$

$$0 = \frac{\Delta}{\Delta^{(p)}} = \hat{Y} - \frac{\mu_{01}}{\mu'_0} +$$

$$- \sum_j \frac{\begin{vmatrix} 1 & X & \cdots & X^j \\ \mu'_0 & \mu'_1 & \cdots & \mu'_j \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mu'_{j-1} & \mu'_j & \cdots & \mu'_{2j-1} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \mu_{01} & \mu'_0 & \cdots & \mu'_{j-1} \\ \mu_{11} & \mu'_1 & \cdots & \mu'_j \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mu_{j1} & \mu'_j & \cdots & \mu'_{2j-1} \end{vmatrix}}{\Delta^{(j-1)} \cdot \Delta^{(j)}}$$

onde $\Delta^{(p)}$ indica o menor principal de Δ que é equivalente a

$$Y = \bar{Y} + \sum_j b_j P_j$$

onde

$$b_j = \frac{\begin{vmatrix} \mu_{01} & \mu'_1 & \cdots & \mu'_{2j-1} \end{vmatrix}}{\Delta^{(j)}}$$

e

$$P_j = \frac{\begin{vmatrix} 1 & \mu'_1 & \mu'_2 & \cdots & \mu'_{2j-1} \end{vmatrix}}{\Delta^{(j-1)}}$$

Complementando, o autor, através da equação (1) e aplicando a expansão Schweinsiana, mostra que

$$\sum_i e_i^2 = \sum_i Y_i^2 - n \frac{\mu_{01}^2}{\mu'_0} - n \sum_j \frac{\begin{vmatrix} \mu_{01} & \mu'_0 & \cdots & \mu'_{j-1} \\ \mu_{11} & \mu'_1 & \cdots & \mu'_j \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mu_{j1} & \mu'_j & \cdots & \mu'_{2j-1} \end{vmatrix}}{\Delta^{(j-1)} \cdot \Delta^{(j)}}$$

$$= \sum_i Y_i^2 - n \bar{Y}^2 - n \sum_j b_j^2 \; \Delta^{(j)} \Big/ \Delta^{(j-1)}$$

Uma aplicação prática ocorre quando, a priori, já se sabe que a regressão é no máximo de grau $\underline{j}$.

PIZA (1973) , através do uso de polinômios ortogonais, estudou o ajuste de uma função a dados experimentais, com a finalidade de estimar uma equação de regressão para a produção de algodão em caroço em função do índice pH do solo. Como a variável independente era desigualmente espaçada, os coeficientes polinomiais usados nas análises de regressão foram gerados pela fórmula de recorrência, obtida por ROBSON (1959) ,

$$Q_j\ (X) = \frac{1}{c_j} \left[X^j - \sum_{k=0}^{j-1} X_i^j\ Q_k\ (X_i)\ Q_k\ (X) \right]$$

onde c_j é a constante de normalização. Verificou que para solos arenosos, independentemente do ano agrícola considerado, a regressão linear se ajusta bem.

Para terra roxa, a produção de algodão em caroço em função do índice pH do solo não apresentou regressão polinomial significativa.

3 - DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

3.1 - DETERMINAÇÕES DE POLINÔMIOS ORTOGONAIS

3.1.1 - Generalidades sobre polinômios ortogonais

3.1.1.1 - Definição

Um conjunto de polinômios $\{ P_j (X) \}$, $j = 0 , 1 , 2 ,...$ é chamado um conjunto simples se $P_j (X)$ é de grau j em X , de modo que o conjunto contém um polinômio de cada grau.

3.1.1.2 - Considere-se um conjunto simples de polinômios reais $P_j (X)$

Diz-se que os polinômios $P_j (X)$ são ortogonais se

$$\sum_i P_j (X_i) P_k (X_i) = 0 \quad ,$$

$$j \neq k \quad , \quad i = 1 , 2 , \ldots , n$$

Devido $P_j (X_i)$ ser real, tem-se

$$\sum_i P_j^2 (X_i) \neq 0 \quad .$$

Se

$$\sum_i P_j (X_i) P_k (X_i) \begin{cases} = 0 & \text{para} \quad j \neq K \\ = 1 & \text{para} \quad j = K \end{cases}$$

diz-se que os polinômios são ortonormais.

3.1.1.3 - Condição equivalente de ortogonalidade

Teorema 1 -

Se $P_j (X)$ forma um conjunto simples de polinômios reais, uma condição necessária e suficiente para que o conjunto $P_j (X)$ seja ortogonal é que

$$\sum_i X_i^k P_j (X_i) = 0 \quad , \quad k = 0 , 1 , 2 , \ldots , j - 1 \qquad (3.1.1.3.a)$$

Demonstração:

Suponha-se que (3.1.1.3.a) é satisfeita.

Visto que X^k forma um conjunto simples, então existe uma constante $b (k , m)$ tal que

$$P_m (X) = \sum_k b (k , m) X^k \quad , \quad k = 0 , 1 , 2 , \ldots , m \qquad (3.1.1.3.b)$$

onde $b (k , m)$ indica que $\underline{b}$ é função de $\underline{k}$ e $\underline{m}$.

Seja $m < j$, então

$$\sum_i P_j (X_i) P_m (X_i) = \sum_k b (k , m) \sum_i X_i^k P_j (X_i) = 0$$

pois $\underline{m}$ e $\underline{k}$ são menores que $\underline{j}$.

Se $m > j$, troca-se $\underline{m}$ e $\underline{j}$ na expressão e tem-se o mesmo resultado.

Logo, se (3.1.1.3.a) é satisfeita, segue-se que

$$\sum_i P_j (X_i) P_m (X_i) = 0 \quad , \quad j \neq m \qquad (3.1.1.3.c)$$

Agora suponha-se que (3.1.1.3.c) é satisfeita. O $P_j (X)$ forma um conjunto simples, de forma que existe uma constante $a (m , k)$ tal que

$$X^k = \sum_m a (m , k) P_m (X) \quad , \qquad (3.1.1.3.d)$$

$$m = 0 , 1 , 2 ,\ldots, k$$

Para qualquer k $(K = 0 , 1 , 2 ,\ldots, j - 1)$

$$\sum_i X_i^k P_j (X_i) = \sum_m a (m , k) \sum_i P_m (X_i) P_j (X_i) = 0$$

visto que $m \leq k < j$. Então (3.1.1.3.a) resulta de (3.1.1.3.c) , ficando demonstrado o teorema.

Deste teorema 1 pode-se concluir que o conjunto ortogonal $P_j (X)$ apresenta a propriedade seguinte:

$$\sum_i P_j (X_i) Q (X_i) = 0$$

para $Q (X_i)$ de grau $< j$.

Sendo

$$\sum_i P_j^2 (X_i) \neq 0 \quad ,$$

então

$$\sum_i X_i^j P_j (X_i) \neq 0 \quad .$$

3.1.1.4 - Expansão de polinômios

Considere-se a notação (f , h) tal que

$$(f , h) = \sum_i f(X_i)\, h(X_i) \quad , \quad i = 1 , 2 , \ldots , n \quad ,$$

onde $f(X)$ e $h(X)$ são duas funções quaisquer e (f , h) é um número real com as seguintes propriedades:

$$(f , h) = (h , f)$$

$$(f_1 + f_2 , h) = (f_1 , h) + (f_2 , h)$$

$$(c\, f , h) = c\,(f , h) , \quad \text{para } \underline{c} \text{ constante}$$

$$(f\, g , h) = (f , g\, h)$$

Defina-se também

$$g_j = (P_j , P_j) = \sum_i P_j^2 (X_i) \neq 0 \quad .$$

<u>Teorema 2</u>

Seja $P_j(X)$ um conjunto simples de polinômios reais ortogonais e seja $Q(X)$ um polinômio de grau $\underline{m}$. Então

$$Q(X) = \sum_k C_k P_k(X) \quad , \quad k = 0 , 1 , 2 , \ldots , m \qquad (3.1.1.4.a)$$

em que

$$C_k = \frac{(Q , P_k)}{g_k} = \frac{\sum_i Q(X_i)\, P_k(X_i)}{\sum_i P_k^2 (X_i)} \qquad (3.1.1.4.b)$$

<u>Demonstração:</u>

De (3.1.1.4.a) obtém-se, para $j = 0 , 1 , 2 , \ldots , m$

$$\sum_i Q(X_i)\, P_j(X_i) = \sum_k C_k \sum_i P_k(X_i)\, P_j(X_i)$$

ou

$$(Q , P_j) = \sum_k C_k (P_k , P_j) \quad .$$

Pela propriedade de ortogonalidade resulta

$$(Q\ ,\ P_j) = C_j\ (P_j\ ,\ P_j) = C_j\ g_j$$

Logo:

$$C_j = \frac{(Q\ ,\ P_j)}{g_j} = \frac{\sum_i Q\ (X_i)\ P_j\ (X_i)}{\sum_i P_j^2\ \ (X_i)}$$

que é equivalente a (3.1.1.4.b).

3.1.2 - Determinação de polinômios ortonormais pelo método de Gram-Schimdt

Por este método, ROBSON (1959) obtém as funções $P_j\ (X_i)$ pela fórmula de recorrência

$$P_j\ (X_i) = \frac{1}{C_j} \left[X_i^j - \sum_v \sum_h X_h^j\ P_v\ (X_h)\ P_v\ (X_i) \right] , \qquad (3.1.2.a)$$

onde: $j = 1\ ,\ 2\ ,\dots,\ n - 1$

$v = 0\ ,\ 1\ ,\ 2\ ,\dots,\ j - 1$

$h = 1\ ,\ 2\ ,\dots,\ n$, e

C é a constante de normalização, isto é,

$$C_j = \left\{ \sum_i \left[X_i^j - \sum_v \sum_h X_h^j\ P_v\ (X_h)\ P_v\ (X_i) \right]^2 \right\}^{1/2} , \qquad (3.1.2.b)$$

$$i = 1\ ,\ 2\ ,\dots,\ n$$

onde

$P_j\ (X_i)$ é um polinômio de grau $\underline{j}$ em X_i e $P_0\ (X_i) = \dfrac{1}{\sqrt{n}}$.

Para a obtenção destas fórmulas o autor procedeu da seguinte forma:

A equação de regressão estimada pelo método dos mínimos quadrados pode ser expressa na forma

$$\hat{Y}_i = \hat{\alpha}_0 P_0 (X_i) + \hat{\alpha}_1 P_1 (X_i) + \dots + \hat{\alpha}_j P_j (X_i) \quad , \qquad (1)$$

$$i = 1 , 2 , \dots , n > j$$

onde $P_k (X_i)$ é um polinômio de grau $\underline{k}$ em X_i ;

$$P_0 (X_i) , P_1 (X_i) , \dots , P_j (X_i)$$

são polinômios ortonormais, isto é

$$\sum_i P_k (X_i) P_{k'} (X_i) = \begin{cases} 0 & \text{se} \quad k \neq k' \\ 1 & \text{se} \quad k = k' \end{cases}$$

e

$$\hat{\alpha}_k = \sum_i Y_i P_k (X_i) .$$

Admitindo-se que $Y_i = X_i^j$, $i = 1 , 2 , \dots , n$, o polinômio de grau $\underline{j}$, de mínimos quadrados, que se ajustará perfeitamente aos dados, para cada $\underline{j}$, $j = 0 , 1 , 2 , \dots , n - 1$, será da forma

$$X_i^j = \left[\sum_h X_h^j P_0 (X_h) \right] P_0 (X_i) + \left[\sum_h X_h^j P_1 (X_h) \right] P_1 (X_i) + \dots +$$

$$+ \left[\sum_h X_h^j P_j (X_h) \right] P_j (X_i) \qquad (3.1.2.c)$$

$$\text{para} \quad i = 1 , 2 , \dots , n$$

$$h = 1 , 2 , \dots , n$$

Da equação (3.1.2.c) , fazendo $\sum_h X_h^j P_j (X_h) = C_j$, obtém-se

$$P_j (X_i) = \frac{1}{C_j} \left\{ X_i^j - \left[\sum_h X_h^j P_0 (X_h) \right] P_0 (X_i) - \left[\sum_h X_h^j P_1 (X_h) \right] P_1 (X_i) + \right.$$

$$\left. - \dots - \left[\sum_h X_h^j P_{j-1} (X_h) \right] P_{j-1} (X_i) \right\} \qquad (3.1.2.d)$$

equivalente a (3.1.2.a) .

Elevando-se ambos os membros da equação (3.1.2.d) ao quadrado, resulta

$$P_j^2\ (X_i) = \frac{1}{C_j^2} \left\{ X_i^j - \left[\sum_h X_n^j\ P_0\ (X_h) \right] P_0\ (X_i) - \left[\sum_h X_h^j\ P_1\ (X_h) \right] P_1\ (X_i) + \right.$$

$$\left. - \ldots - \left[\sum_h X_h^j\ P_{j-1}\ (X_h) \right] P_{j-1}\ (X_i) \right\}^2$$

Somando ambos os membros desta equação em relação a $\underline{i}$, pela propriedade ortonormal dos polinômios deve-se ter

$$\sum_i P_j^2\ (X_i) = \frac{1}{C_j^2} \sum_i \left\{ X_i^j - \left[\sum_h X_h^j\ P_0\ (X_h) \right] P_0\ (X_i) - \left[\sum_h X_h^j\ P_1\ (X_h) \right] P_1\ (X_i) + \right.$$

$$\left. - \ldots - \left[\sum_h X_h^j\ P_{j-1}\ (X_h) \right] P_{j-1}\ (X_i) \right\}^2 = 1 \quad .$$

Logo

$$C_j = \left\{ \sum_i \left[X_i^j - \sum_v \sum_h X_h^j\ P_v\ (X_h)\ P_v\ (X_i) \right]^2 \right\}^{1/2}$$

$$v = 0\ ,\ 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ j - 1$$

Verifica-se que, para

$$j = 1 \qquad \text{e} \qquad P_0\ (X) = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad ,$$

as equações (3.1.2.b) e (3.1.2.a) dão respectivamente

$$C_1 = \left\{ \sum_i \left[X_i - \sum_h X_h\ P_0\ (X_h)\ P_0\ (X_i) \right]^2 \right\}^{1/2}$$

$$= \sqrt{\sum_i (X_i - \bar{X})^2}$$

$$P_1\ (X_i) = \frac{X_i - \bar{X}}{\sqrt{\sum_i (X_i - \bar{X})^2}}$$

Procedendo-se de maneira análoga, obtém-se, pelas equações (3.1.2.a) e (3.1.2.b) um conjunto de polinômios ortonormais.

PIZA (1973) verificou a ortogonalidade desses polinômios, usando o seguinte procedimento: pela condição de ortogonalidade

$$\sum_{i=1}^{n} P_p\ (X_i)\ P_s\ (X_i) = 0 \qquad \text{se} \qquad s < p \tag{3.1.2.e}$$

Por outro lado, substituindo $P_p\ (X_i)$ na equação (3.1.2.e) por seu valor dado na equação (3.1.2.a) resulta:

$$\sum_{i=1}^{n} P_p(X_i)P_s(X_i) = \sum_i \left\{ \frac{1}{C_p} \left[X_i^p - \sum_{v=0}^{p-1} \sum_{i'=1}^{n} X_{i'}^p P_v(X_{i'}) P_v(X_i) \right] P_s\ (X_i) \right\}$$

$$= \frac{1}{C_p} \left[\sum_{i=1}^{n} X_i^p P_s(X_i) - \sum_{v=0}^{p-1} \sum_{i'=0}^{n} X_{i'}^p\ P_v\ (X_{i'})\ \delta_{s,v} \right]$$

onde

$$\delta_{s,v} = \sum_i P_s\ (X_i)\ P_v\ (X_i)$$

Se $\underline{v}$ varia de 0 a $p - 1$, ele assume necessariamente o valor $\underline{s}$, pois $s < p$. Neste caso $\delta_{s,s} = 1$, sendo nulo nos demais casos.

Conclue-se deste modo que

$$\sum_{i=1}^{n} P_p\ (X_i)\ P_s\ (X_i) = \frac{1}{C_p} \left[\sum_{i=1}^{n} X_i^p\ P_s\ (X_i) - \sum_{i'=1}^{n} X_{i'}^p\ P_s\ (X_{i'}) \right] = 0$$

Para uma melhor visualização deste método, considere-se o seguinte exemplo, onde a variável independente X assume os valores X_1, X_2, X_3, ..., X_n .

Para a obtenção de $P_0\ (X_h)$ admite-se inicialmente $j = 0$, tendo-se então

X	$Y = X^0$
X_1	1
X_2	1
X_3	1
$\vdots$	$\vdots$
X_n	1

A equação de regressão que se ajustará perfeitamente aos dados será:

$$\hat{Y}_h = \hat{\alpha}_0\ P_0\ (X_h) \quad , \quad h = 1\ ,\ 2\ ,\ 3\ ,\ldots,\ n$$

Assim

$$\hat{Y}_h = X_h^0 = 1$$

e

$$\hat{\alpha}_0 = \sum_i Y_i\ P_0\ (X_i) = \sum_i X_i^0\ P_0\ (X_i)$$

Logo, resulta

$$1 = \left[\sum_i P_0\ (X_i) \right] P_0\ (X_h) \qquad (1)$$

Fazendo $\sum_i P_0\ (X_i) = C_0$ e elevando-se ambos os membros da equação (1) ao quadrado, tem-se

$$1 = C_0^2\ P_0^2\ (X_h)$$

Somando ambos os membros em relação a $\underline{h}$ e admitindo-se que $\sum_h P_0^2\ (X_h) = 1$, resulta $C_0 = \sqrt{n}$

Logo, pela equação (1), tem-se

$$P_0\ (X_h) = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

Para o cálculo de $P_1\ (X_h)$, toma-se $j = 1$, devendo-se ter

X	$Y = X$
X_1	X_1
X_2	X_2
X_3	X_3
$\vdots$	$\vdots$
X_n	X_n

A equação de regressão

$$\hat{Y}_h = \hat{\alpha}_0\ P_0\ (X_h) + \hat{\alpha}_1\ P_1\ (X_h)$$

se ajustará perfeitamente aos dados e

$$\hat{Y}_h = X_h$$

$$\hat{\alpha}_0 = \sum_i Y_i\ P_0\ (X_i) = \sum_i X_i\ P_0\ (X_i)$$

$$\hat{\alpha}_1 = \sum_i Y_i\ P_1\ (X_i) = \sum_i X_i\ P_1\ (X_i) = C_1$$

Logo

$$X_h = \bar{X} + C_1\ P_1\ (X_h) \Longrightarrow C_1\ P_1\ (X_h) = X_h - \bar{X} \qquad (2)$$

Procedendo da maneira análoga ao caso anterior, resulta

$$C_1 = \sqrt{\sum_h (X_h - \bar{X})^2}$$

e da equação (2) , tem-se

$$P_1\ (X_h) = \frac{X_h - \bar{X}}{\sqrt{\sum_h (X_h - \bar{X})^2}}$$

Para o cálculo de $P_2 (X_h)$, admite-se $j = 2$, tendo-se então

X	$Y = X^2$
X_1	X_1^2
X_2	X_2^2
X_3	X_3^2
⋮	⋮
X_n	X_n^2

Neste caso, a equação de regressão que se ajustará perfeitamente aos dados será:

$$\hat{Y}_h = \hat{\alpha}_0 P_0 (X_h) + \hat{\alpha}_1 P_1 (X_h) + \hat{\alpha}_2 P_2 (X_h) \quad .$$

Com procedimento idêntico aos casos anteriores, obtém-se

$$X_h^2 = \frac{\sum_i X_i^2}{n} + (X_h - \bar{X}) \quad \frac{\sum_i X_i^2 (X_i - \bar{X})}{\sum_i (X_i - \bar{X})^2} + C_2 P_2 (X_h) \qquad (3)$$

onde

$$C_2 = \sum_i X_i^2 P_2 (X_i)$$

Admitindo-se que $\sum_h P_2^2 (X_h) = 1$, resulta

$$C_2 = \sqrt{\sum_h \left[X_n^2 - \frac{\sum_i X_i^2}{n} - (X_h - \bar{X}) \cdot \frac{\sum_i X_i^2 (X_i - \bar{X})}{\sum_i (X_i - \bar{X})^2} \right]}$$

e pela equação (3) , vem

$$P_2\,(X_h) = \frac{1}{C_2}\left[X_h^2 - \frac{\sum_i X_i^2}{n} - (X_h - \bar{X}) \cdot \frac{\sum_i X_i^2\,(X_i - \bar{X})}{\sum_i (X_i - X)^2}\right]$$

$$= \frac{1}{C_2}\left[x^2 - \left(\frac{\Sigma\, x^3}{\Sigma\, x^2}\right) x - \frac{\Sigma\, x^2}{n}\right]$$

onde

$$x = X - \bar{X}$$

Procedendo-se desta forma obtém-se um conjunto de polinômios ortonormais.

3.1.3 - Determinação de polinômios ortonormais pelo método de Christoffel - Darboux

EMERSON (1968) estudou o método baseando-se na relação de recorrência de Christoffel - Darboux

$$P_j\,(X_i) = (A_j\,X_i + B_j)\,P_{j-1}\,(X_i) - C_j\,P_{j-2}\,(X_i)\quad , \qquad (3.1.3.a)$$

sendo

$$j = 2\ ,\ 3\ ,\ldots,\ m < n$$

$$i = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n$$

para quaisquer três polinômios ortogonais consecutivos, onde A_j , B_j e C_j são constantes para um dado $\underline{j}$, com $A_j \neq 0$ e $C_j \neq 0$.

$P_j\,(X_i)$ é um polinômio de grau $\underline{j}$ em X_i .

RAINVILLE (1960) discute os fundamentos teóricos da equação (3.1.3.a) sob o seguinte aspecto: pela estrutura da equação (3.1.3.a), se A_j for nulo para qualquer $\underline{j}$, o segundo membro desta equação será de grau $\leq j - 1$ e o primeiro membro de grau $\underline{j}$. Então $A_j \neq 0$.

A equação (3.1.3.a) pode ser expressa como

$$X A_j P_{j-1} (X_i) = P_j (X_i) - B_j P_{j-1} (X_i) + C P_{j-2} (X_i)$$

ou ainda

$$X P_{j-1} (X_i) = \frac{1}{A_j} P_j (X_i) - \frac{B_j}{A_j} P_{j-1} (X_i) + \frac{C_j}{A_j} P_{j-2} (X_i) \qquad (3.1.3.b)$$

Visto que $X P_{j-1} (X)$ é um polinômio de grau $\underline{j}$, sabe-se, pelo teorema 2 , ítem 3.1.1.4 , que

$$X P_{j-1} (X_i) = \sum_k C_k P_k (X_i) \qquad , \qquad k = 0 , 1 , 2 ,...., j$$

em que

$$C_K = \frac{(X P_{j-1} , P_K)}{g_K} = \frac{(P_{j-1} , X P_K)}{g_K}$$

Verifica-se que $(P_{j-1} , X P_K) = 0$ para $k < j - 2$.

Logo a relação dada pela equação (3.1.3.a) existe.

Mostra-se, em seguida, que na equação (3.1.3.b)

$$\frac{C_j}{A_j} \neq 0 \ .$$

Para isto é conveniente introduzir o símbolo π_m para denotar um polinômio de grau menor ou igual a $\underline{m}$.

Indica-se ainda por h_{j-1} o coeficiente líder do polinômio $P_{j-1} (X_i)$. Então,

$$P_{j-1} (X) = h_{j-1} X^{j-1} + \pi_{j-2}, \quad , \quad \text{com} \quad h_{j-1} \neq 0 \qquad (3.1.3.c)$$

$$X P_{j-2} (X) = h_{j-2} X^{j-1} + \pi_{j-2} \qquad (3.1.3.d)$$

Substituindo o valor de X^{j-1} da equação (3.1.3.c) na equação (3.1.3.d) resulta

$$X P_{j-2}(X) = \frac{h_{j-2}}{h_{j-1}} P_{j-1}(X) + \pi_{j-2} \qquad (3.1.3.e)$$

Da equação (3.1.3.b), pelo Teorema 2 do item 3.1.1.4, tem-se

$$\frac{C_j}{A_j} = \frac{(X P_{j-1}, P_{j-2})}{g_{j-2}} = \frac{(P_{j-1}, X P_{j-2})}{g_{j-2}}$$

e pela equação (3.1.3.e) resulta que

$$\frac{C_j}{A_j} = \frac{1}{g_{j-2}} \left\{ \left[P_{j-1}, \frac{h_{j-2}}{h_{j-1}} P_{j-1}(X) + \pi_{j-2} \right] \right\}$$

d'onde

$$\frac{C_j}{A_j} = \frac{1}{g_{j-2}} \left[(P_{j-1}, \frac{h_{j-2}}{h_{j-1}} P_{j-1}) + (P_{j-1}, \pi_{j-2}) \right]$$

$$= \frac{h_{j-2}}{h_{j-1} \cdot g_{j-2}} (P_{j-1}, P_{j-1}) \qquad (3.1.3.f)$$

Portanto

$$\frac{C_j}{A_j} \neq 0$$

d'onde se conclue que $C_j \neq 0$, para $j \geq 2$, pois $A_j \neq 0$.

Tem-se também, pelo Teorema 2, que na equação (3.1.3.b)

$$\frac{B_j}{A_j} = \frac{(X P_{j-1}, P_{j-1})}{g_{j-1}}$$

concluindo-se que B_j pode, em certos casos particulares, ser nulo.

De acordo com EMERSON (1968), as constantes A_j , B_j e C_j da equação (3.1.3.a) podem ser obtidas através de três operações nesta equação:

a) elevando-se ao quadrado ambos os membros da equação e efetuando somatório em relação a i ,

b) multiplicando-se ambos os membros por $P_{j-1}(X_i)$ e efetuando-se o somatório em relação a i ,

c) multiplicando-se ambos os membros por $P_{j-2}(X_i)$ e efetuando-se o somatório em relação a i .

Nestas três etapas, para se calcular as constantes, impõe-se as condições de que

$$\sum_i P_j(X_i)\, P_k(X_i) \begin{cases} = 0 & \text{se} \quad j \neq k \\ = 1 & \text{se} \quad j = k \end{cases}$$

As soluções podem ser expressas como

$$A_j = \left\{ \sum_i X_i^2\, P_{j-1}^2(X_i) - \left[\sum_i X_i\, P_{j-1}^2(X_i) \right]^2 + \right.$$
$$\left. - \left[\sum_i X_i\, P_{j-1}(X_i)\, P_{j-2}(X_i) \right]^2 \right\}^{-1/2} \qquad (3.1.3.g)$$

$$B_j = - A_j \sum_i X_i\, P_{j-1}^2(X_i)$$

$$C_j = A_j \sum_i X_i\, P_{j-1}(X_i)\, P_{j-2}(X_i)$$

A fórmula de recorrência (3.1.3.a) é também válida para $j = 1$, se admitirmos que $P_{-1}(X) = 0$

Por outro lado, da equação (3.1.3.e) conclue-se que

$$X\, P_{j-1}(X) = \frac{h_{j-1}}{h_j} P_j(X) + \pi_{j-1} \qquad (3.1.3.h)$$

Comparando-se as equações (3.1.3.b) e (3.1.3.h) verifica-se que

$$\frac{1}{A_j} = \frac{h_{j-1}}{h_j} \longleftrightarrow A_j = \frac{h_j}{h_{j-1}} \qquad (3.1.3.i)$$

Por analogia

$$A_{j-1} = \frac{h_{j-1}}{h_{j-2}}$$

Por outro lado, considerando que os polinômios são ortonormais, ou seja,

$$g_j = \sum_i P_j^2 (X_i) = 1 \ ,$$

resulta da equação (3.1.3.f) que

$$\frac{C_j}{A_j} = \frac{h_{j-2}}{h_{j-1}} \longleftrightarrow C_j = A_j \frac{h_{j-2}}{h_{j-1}} \qquad (3.1.3.j)$$

Portanto, da equação (3.1.3.i), teremos, conforme SZÉGO (1959),

$$C_j = \frac{A_j}{A_{j-1}} \qquad (3.1.3.k)$$

3.2 - REGRESSÃO POLINOMIAL NA ANÁLISE DE VARIÂNCIA

A regressão polinomial é uma técnica estatística usada para estudar as relações entre variáveis, podendo ser traduzida pelo modelo matemático

$$Y_i = \alpha_0 P_0 (X_i) + \alpha_1 P_1 (X_i) + \ldots + \alpha_j P_j (X_i) + e_i \qquad (3.2.a)$$

onde

$$e_i \cap N(0\ ;\ \sigma^2) \quad , \quad Y_i \ (i = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n)$$

são valores observados,

$$P_k\ (X_i) \quad (k = 0\ ,\ 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ j < n)$$

são polinômios de grau $\underline{k}$ em X_i , ortonormais, isto é,

$$\sum_i P_s\ (X_i)\ P_r\ (X_i) \begin{cases} = 0 & \text{se} \quad r \neq s \\ = 1 & \text{se} \quad r = s \end{cases} \qquad (3.2.b)$$

e α_k $(k = 0\ ,\ 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ j)$ são parâmetros.

3.2.1 - Estimativas dos parâmetros α_k

Para $\underline{n}$ valores observados deve-se ter

$$Y_1 = \alpha_0\ P_0\ (X_1) + \alpha_1\ P_1\ (X_1) + \ldots + \alpha_j\ P_j\ (X_1) + e_1$$

$$Y_2 = \alpha_0\ P_0\ (X_2) + \alpha_1\ P_1\ (X_2) + \ldots + \alpha_j\ P_j\ (X_2) + e_2$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$Y_n = \alpha_0\ P_0\ (X_n) + \alpha_1\ P_1\ (X_n) + \ldots + \alpha_j\ P_j\ (X_n) + e_n$$

Introduzindo a representação matricial, tem-se

$$Y = X\,\alpha + \varepsilon$$

onde

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} , \quad X = \begin{bmatrix} P_0\ (X_1) & P_1\ (X_1) & \cdots & P_j\ (X_1) \\ P_0\ (X_2) & P_1\ (X_2) & \cdots & P_j\ (X_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ P_0\ (X_n) & P_1\ (X_n) & \cdots & P_j\ (X_n) \end{bmatrix} ,$$

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_j \end{bmatrix} , \qquad \varepsilon = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix} .$$

Por outro lado, pela propriedade (3.2.b)

$$X'\ X = S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} = I \quad , \quad X'\ Y = \begin{bmatrix} \sum_i P_0\ (X_i)\ Y_i \\ \sum_i P_1\ (X_i)\ Y_i \\ \vdots \\ \sum_i P_j\ (X_i)\ Y_i \end{bmatrix}$$

Na aplicação do método dos mínimos quadrados a soma dos quadrados dos desvios, $Z = \varepsilon'\ \varepsilon$, é minimizada.

Isto se faz do seguinte modo, de acordo com PIMENTEL GOMES e NOGUEIRA (1964)

$$Z = \varepsilon'\ \varepsilon = (Y' - \alpha'\ X')(Y - X\ \alpha)$$
$$= Y'\ Y - Y'\ X\ \alpha - \alpha'\ X'\ Y + \alpha'\ X'\ X\ \alpha$$

Como

$$Y'\ X\ \alpha = \alpha'\ X'\ Y \qquad \text{e} \qquad X'\ X = I$$

$$Z = Y'\ Y - 2\ \alpha'\ X'\ Y + \alpha'\ I\ \alpha \ .$$

Para se obter o valor de α que minimiza a soma de quadrados dos desvios deve-se diferenciar a matriz $\varepsilon'\ \varepsilon$ e torná-la identicamente nula.

Desta identidade resulta

$$X' \, X \, \hat{\alpha} = X' \, Y \tag{3.2.1.a}$$

$$\hat{\alpha} = X' \, Y \tag{3.2.1.b}$$

que constitue o sistema de equações normais, onde $\hat{\alpha}$ é o vetor das estimativas dos parâmetros.

Substituindo $Y = X \, \alpha + \varepsilon$ em (3.2.1.b) , tem-se

$$\hat{\alpha} = X' \, (X \, \alpha + \varepsilon)$$

$$= X' \, X \, \alpha + X' \, \varepsilon$$

$$= \alpha + X' \, \varepsilon$$

e

$$E \, (\hat{\alpha}) = \alpha + E \, (X' \, \varepsilon) \quad .$$

Sendo

$$E \, (X' \, \varepsilon) = X' \, E \, (\varepsilon) = \phi \quad ,$$

vê-se que

$$E \, (\hat{\alpha}) = \alpha \quad .$$

Diante deste resultado conclue-se que $\hat{\alpha}$ é uma estimativa não tendenciosa de α . A matriz de variância e covariância de $\hat{\alpha}$, segundo PIMENTEL GOMES e NOGUEIRA (1964) é

$$M = E \left[\, (\hat{\alpha} - \alpha)(\hat{\alpha} - \alpha)' \, \right]$$

Como

$$\hat{\alpha} = \alpha + X' \, \varepsilon \quad ,$$

então

$$(\hat{\alpha} - \alpha) = X' \, \varepsilon$$

e

$$M = E \, (X' \, \varepsilon \, \varepsilon' \, X) = X' \, E \, (\varepsilon \, \varepsilon') \, X$$

Se os erros e_i são independentes e de mesma variância σ^2 , então

$$E\,(\varepsilon\,\varepsilon') = \begin{vmatrix} \sigma^2 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & 0 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \sigma^2 \end{vmatrix} = \sigma^2\, I_n$$

Logo,

$$M = X'\, I\, X\, \sigma^2$$

$$= I\, \sigma^2 \qquad (3.2.1.c)$$

Conforme GRAYBILL (1961), sendo $\hat{\alpha}$ o produto de uma matriz constante X' por um vetor Y normalmente distribuído, então $\hat{\alpha}$ tem distribuição normal $(j + 1)$ variada.

Conclue-se que

$$\hat{\alpha} \cap N\,(\alpha\,,\, I\,\sigma^2)$$

3.2.2 - Análise de Variância

Duas pressuposições básicas condicionam a validade desta análise:

1º) que Y seja normalmente distribuído para um conjunto fixado de valores $X_1\,,\, X_2\,,\ldots,\, X_n$

2º) que a variância de Y seja independente das variâncias de $X_1\,,\, X_2\,,\ldots,\, X_n$, ou seja,

$$V\,(Y / X_1\,,\, X_2\,,\ldots,\, X_n) = \sigma^2$$

A soma de quadrados residual (S Q R), segundo PIMENTEL GOMES e NOGUEIRA (1964) é dada por

$$S\ Q\ R = \sum_i (Y_i - \hat{Y}_i)^2 \quad , \quad i = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n$$

onde Y_i são valores observados e $\hat{Y}_i$ são valores estimados pela equação de regressão.

Em linguagem matricial tem-se

$$S\ Q\ R = (Y - \hat{Y})'(Y - \hat{Y})$$

$$= Y'\ Y - Y'\ \hat{Y} - (\hat{Y})'\ Y + (\hat{Y})'\ \hat{Y}$$

Como

$$\hat{Y} = X\ \hat{\alpha}\ ,$$

resulta

$$S\ Q\ R = Y'\ Y - Y'\ X\ \hat{\alpha} - \hat{\alpha}'\ X'\ X\ \hat{\alpha} + \hat{\alpha}'\ X'\ X\ \hat{\alpha}$$

$$= Y'\ Y - \hat{\alpha}'\ X'\ Y \qquad (3.2.2.a)$$

onde $Y'\ Y$ é a soma de quadrados dos valores observados e $\hat{\alpha}'\ X'\ Y$ constitue a soma de quadrados dos parâmetros. A esta soma de quadrados do resíduo atribue-se $(n - j - 1)$ graus de liberdade (G. L.) , pois, como se vê a seguir,

$$E\ (S\ Q\ R) = (n - j - 1)\ \sigma^2$$

Determinando-se $E\ (S\ Q\ R)$ tem-se que

$$E\ (S\ Q\ R) = E\ (Y'\ Y - \hat{\alpha}'\ X'\ Y)$$

$$= E\ (Y'\ Y) - E\ (\hat{\alpha}'\ X'\ Y) \qquad (3.2.2.b)$$

onde

$$E\ (Y'\ Y) = E\ \left[\ (\alpha'\ X' + \varepsilon')(X\ \alpha + \varepsilon)\ \right]$$

$$= E\ (\alpha'\ X'\ X\ \alpha + \alpha'\ X'\ \varepsilon + \varepsilon'\ X\ \alpha + \varepsilon'\ \varepsilon)$$

Sendo

$$E\ (\varepsilon') = \phi \quad , \quad E\ (\varepsilon'\ \varepsilon) = n\ \sigma^2$$

fica

$$E\ (Y'\ Y) = \alpha'\ I\ \alpha + n\ \sigma^2 \quad . \qquad (3.2.2.c)$$

Por outro lado, se $\hat{\alpha}' = Y' X$, então

$$E(\hat{\alpha}' X' Y) = E(Y' X X' Y)$$
$$= E\left[(\alpha' X' + \varepsilon') X X' (X \alpha + \varepsilon)\right]$$
$$= E(\alpha' I \alpha + \alpha' X' \varepsilon + \varepsilon' X \alpha + \varepsilon' X X' \varepsilon)$$
$$= \alpha' I \alpha + E(\varepsilon' X X' \varepsilon) \quad .$$

Sendo

$$E(\varepsilon' X X' \varepsilon) = \sigma^2 \text{ traço } (I_{j+1})$$

Logo

$$E(\hat{\alpha}' X' Y) = \alpha' I \alpha + (j + 1)\sigma^2 \qquad (3.2.2.d)$$

Substituindo (3.2.2.c) e (3.2.2.d) em (3.2.2.b) obtém-se finalmente

$$E(S\,Q\,R) = \alpha' I \alpha + n\sigma^2 - \left[\alpha' I \alpha + (j + 1)\sigma^2\right]$$
$$= (n - j - 1)\sigma^2$$

Assim,

$$Q.\ M.\ \text{Resíduo} = \frac{S\,Q\,R}{(n - j - 1)}$$

e

$$E(Q.\ M.\ \text{Resíduo}) = E\left[\frac{S\,Q\,R}{(n - j - 1)}\right] = \frac{(n - j - 1)}{(n - j - 1)}\sigma^2 = \sigma^2$$

A equação (3.2.2.a) pode ser igualmente expressa na forma

$$S\,Q\,R = (Y' Y - C) - (\hat{\alpha}' X' Y - C) \qquad (3.2.2.e)$$

onde

$$C = \frac{(\sum_i Y_i)^2}{n}$$

enquanto $(Y' Y - C)$ e $(\hat{\alpha}' X' Y - C)$ constituem respectivamente a soma de quadrados total (S. Q. Total) e soma de quadrados da regressão (S. Q. Regressão).

Para a determinação dos graus de liberdade de S. Q. Total deve-se primeiramente calcular a E (C) , conforme discute-se a seguir:

Define-se inicialmente

$$\sum_i Y_i = \begin{bmatrix} 1 , 1 , 1 ,\ldots, 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} = W'\ Y$$

Então,

$$\begin{aligned}(\sum_i Y_i)^2 &= W'\ Y\ W'\ Y \\ &= W'\ Y\ Y'\ W \\ &= W'\ (X\ \alpha + \varepsilon)(\alpha'\ X' + \varepsilon')\ W \\ &= W'\ X\ \alpha\ \alpha'\ X'\ W + W'\ \varepsilon\ \alpha'\ X'\ W + W'\ X\ \alpha\ \varepsilon'\ W + \\ &\qquad + W'\ \varepsilon\ \varepsilon'\ W\end{aligned}$$

Como

$$E\ (W'\ \varepsilon\ \alpha'\ X'\ W) = E\ (W'\ X\ \alpha\ \varepsilon'\ W) = \phi$$

resulta que

$$E\ (\Sigma\ Y_i)^2 = W'\ X\ \alpha\ \alpha'\ X'\ W + E\ (W'\ \varepsilon\ \varepsilon'\ W)$$

onde

$$W'\ X\ \alpha\ \alpha'\ X'\ W = (W'\ X\ \alpha)^2$$

e

$$E\ (W'\ \varepsilon\ \varepsilon'\ W) = W'\ I_n\ W\ \sigma^2 = n\ \sigma^2$$

Assim,

$$E\ (\Sigma\ Y_i)^2 = (W'\ X\ \alpha)^2 + n\ \sigma^2$$

e portanto

$$E\ (C) = E\left[\frac{(W'\ Y)^2}{n}\right] = \frac{(W'\ X\ \alpha)^2}{n} + \sigma^2 \qquad (3.2.2.f)$$

Logo, se

$$E\ (S.\ Q.\ Total) = E\ (Y'\ Y - C)$$
$$= E\ (Y'\ Y) - E\ (C)$$

pelas equações (3.2.2.c) e (3.2.2.f) conclue-se finalmente que

$$E\ (S.\ Q.\ Total) = \alpha'\ I\ \alpha + n\ \sigma^2 - \frac{(W'\ X\ \alpha)^2}{n} - \sigma^2$$

$$= \alpha'\ I\ \alpha - \frac{(W'\ X\ \alpha)^2}{n} + (n - 1)\ \sigma^2$$

$$= \Sigma\ \alpha_k^2 + (n - 1)\ \sigma^2$$

estando a S. Q. Total associada a $(n - 1)$ graus de liberdade.

Para S. Q. Regressão, tem-se

$$E\ (S.\ Q.\ Regressão) = E\ (\hat{\alpha}'\ X'\ Y - C)$$
$$= E\ (\hat{\alpha}'\ X'\ Y) - E\ (C) \quad .$$

Pelas equações (3.2.2.d) e (3.2.2.f) resulta

$$E\ (S\ Q\ Regressão) = \alpha'\ I\ \alpha + (j + 1)\ \sigma^2 - \frac{(W'\ X\ \alpha)^2}{n} - \sigma^2$$

$$= \alpha'\ I\ \alpha - \frac{(W'\ X\ \alpha)^2}{n} + j\ \sigma^2$$

$$= \sum_k \alpha_k^2 + j\ \sigma^2 \qquad , \qquad k = 1\ ,\ 2\ , \ldots ,\ j$$

Estando a S Q Regressão associada a $\underline{j}$ G. L. , tem-se a seguinte tabela de análise de variância, quando não há repetições para os dados analisados (Tabela 1).

TABELA 1 - Análise de variância em regressão polinomial quando não há repetições para os dados analisados

Causa de Variação	G. L.	E (S. Q.)	E (Q. M.)
Regressão	j	$\Sigma\ \alpha_k^2 + j\ \sigma^2$	$\frac{1}{j}\ \Sigma\ \alpha_k^2 + \sigma^2$
Resíduo	$(n - j - 1)$	$(n - j - 1)\ \sigma^2$	σ^2
Total	$n - 1$	$\Sigma\ \alpha_k^2 + (n - 1)\ \sigma^2$	

Ao se estabelecer a hipótese de nulidade para a regressão, ou seja,

$$H_0 : \alpha = \phi$$

então o Q M Regressão e Q M Resíduo são estimativas de um mesmo parâmetro σ^2.

Por outro lado, observa-se que

$$S\ Q\ \text{Parâmetros} = \hat{\alpha}'\ X'\ Y$$

$$= Y'\ X\ I\ X'\ Y \quad \text{pela equação} \quad (3.2.1.a)$$

e

$$S\ Q\ \text{Resíduo} = Y'\ Y - \hat{\alpha}'\ X'\ Y$$

$$= Y'\ Y - Y'\ X\ I\ X'\ Y$$

$$= Y'\ (I - X\ I\ X')\ Y$$

Segundo GRAYBILL (1961), devido $(I - X\ I\ X')$ ser uma matriz idempotente de característica $[\,n - (j + 1)\,]$ e Y distribuída normalmente, então S.Q.Resíduo tem distribuição de $\chi^2_{(n-j-1)G.L.}$..

Ainda, conforme GRAYBILL (1961) estas somas de quadrados são independentes, pois

$$
\begin{aligned}
X\,I\,X'\,(I - X\,I\,X') &= X\,I\,X' - X\,I\,X'\,X\,I\,X' \\
&= X\,I\,X' - X\,I\,I\,I\,X' \\
&= X\,I\,X' - X\,I\,X' \\
&= \phi
\end{aligned}
$$

Nestas condições, a razão

$$F = \frac{Q\ M\ \text{Regressão}}{Q\ M\ \text{Resíduo}}$$

é distribuída segundo a distribuição F, que é o teste apropriado para H_0.

A independência dos parâmetros α_k, evidenciada pela equação (3.2.1.c), nos permite reorganizar a Tabela 1 da análise de variância como segue (Tabela 2).

TABELA 2 - Análise de variância em regressão polinomial com desdobramento dos graus de liberdade da regressão

Causa de Variação	G. L.	E (S. Q.)	E (Q. M.)
Regressão Linear	1	$\alpha_1^2 + \sigma^2$	$\alpha_1^2 + \sigma^2$
Regressão Quadrática	1	$\alpha_2^2 + \sigma^2$	$\alpha_2^2 + \sigma^2$
$\vdots\ \vdots\ \vdots$	$\vdots$	$\vdots\ \vdots\ \vdots$	$\vdots\ \vdots\ \vdots$
Regressão de Ordem j	1	$\alpha_j + \sigma^2$	$\alpha_j^2 + \sigma^2$
Resíduo	$n - j - 1$	$(n - j - 1)\ \sigma^2$	σ^2
Total	$n - 1$	$\Sigma\ \alpha_k^2 + (n - 1)\ \sigma^2$	

Na tabela anterior o resíduo (σ^2) constitue na realidade o quadrado médio dos desvios da regressão.

Assim, as estimativas de α_k ($k = 0, 1, 2, \ldots, j$) dadas pelo sistema de equações (3.2.1.b) serão

$$\hat{\alpha}_k = \sum_i P_k (X_i) Y_i \quad , \qquad i = 1, 2, \ldots, n \qquad (3.2.2.g)$$

enquanto que uma estimativa da E (S Q Regressão de ordem <u>k</u>) será

$$S\ Q\ \text{Regressão}_k = \left[\sum_i P_k (X_i) Y_i \right]^2 , \qquad (3.2.2.h)$$

$$k = 1, 2, \ldots, j$$

4 - MATERIAL E MÉTODO

4.1 - MATERIAL

Os dados utilizados no presente trabalho são apresentados no Apêndice (TABELAS 11 , 12 , 13 e 14) e se referem a experimentos fictícios do tipo inteiramente casualizado.

Na elaboração do experimento A procedeu-se da seguinte forma:

Tomaram-se cinco pontos de uma curva com o aspecto da Figura 1 .

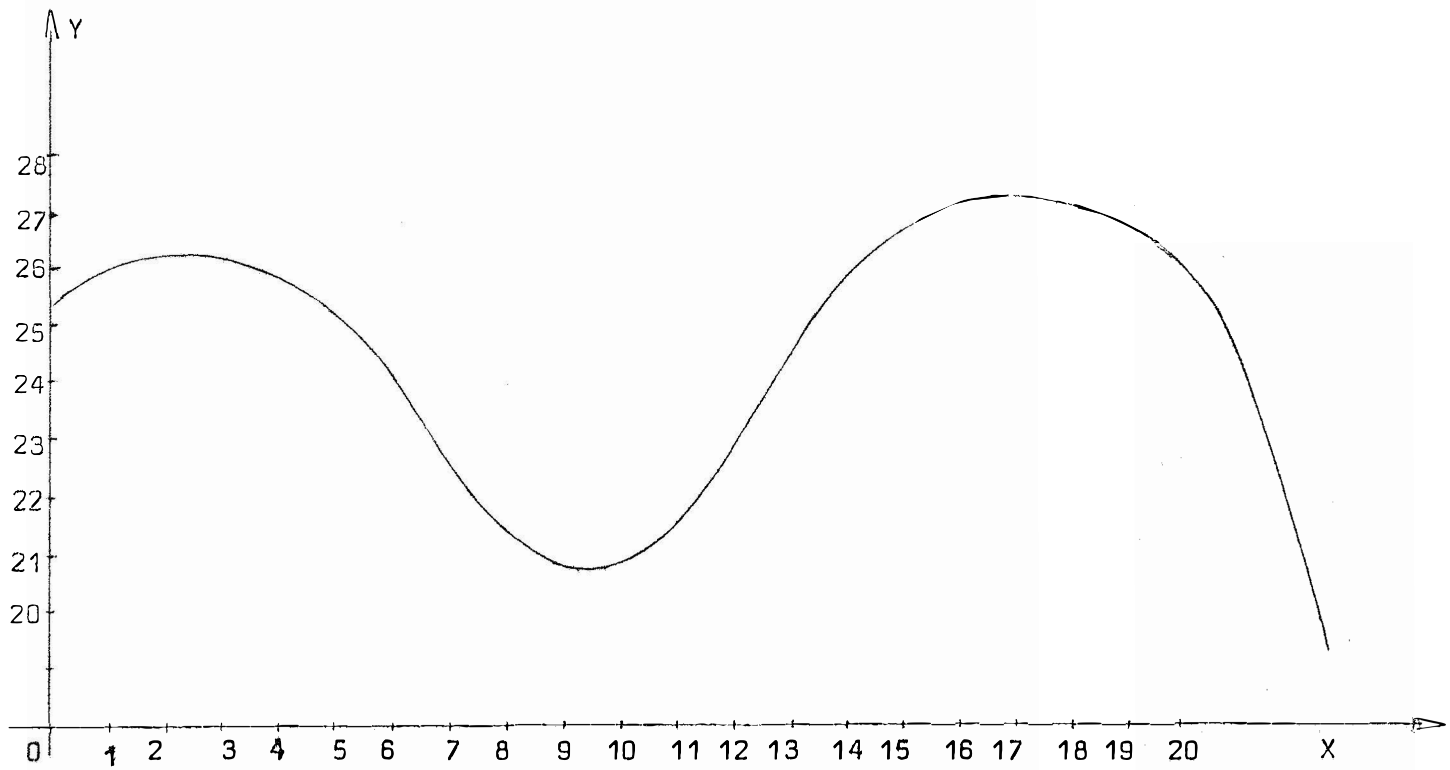

FIGURA 1 - Aspecto da curva que contém os pontos considerados para a elaboração dos experimentos fictícios

X_i	M_i
6	24,2
7	22,7
9	20,8
10	20,8
12	22,7

e admitiu-se o modelo

$$y_{i\ell} = \mu + t_i + e_{i\ell} \qquad \begin{matrix} i = 1 \ , \ 2 \ , \ldots , \ 5 \\ \ell = 1 \ , \ 2 \ , \ldots , \ 5 \end{matrix} \qquad (4.1.a)$$

para gerar os dados experimentais.

Nesta equação, para $\underline{n}$ pontos

$$\mu = \sum_i \frac{M_i}{n} = \frac{24,2 + 22,7 + 20,8 + 20,8 + 22,7}{5} = 22,24$$

$$t_i = M_i - \mu \quad ,$$

de forma que

$$\hat{t}_1 = 24,2 - 22,24 = 1,96$$

$$\hat{t}_2 = 22,7 - 22,24 = 0,46 \quad , \quad \text{etc.}$$

$$e_{i\ell} = \sigma \cdot Z \quad ,$$

onde $Z \cap N\ (0\ ;\ 1)$, sendo obtido aleatoriamente de tabela [DIXON e MASSEY (1957)] e $\sigma = 2,224$ foi calculado em função de um coeficiente de variação teórico de 10% .

Assim,

$$e_{11} = 2,224\ (-\ 0,604) = -\ 1,30$$

$$e_{21} = 2,224\ (\ \ 0,857) = \ \ 1,90 \quad , \quad \text{etc.}$$

Nestas condições

$$y_{11} = 22,24 + 1,96 - 1,30 = 22,9$$

$$y_{21} = 22,24 + 0,46 + 1,90 = 24,6 \quad , \quad \text{etc.}$$

De maneira análoga foram obtidos os demais experimentos.

4.2 - MÉTODO

4.2.1 - Determinação dos polinômios ortonormais

Os polinômios ortonormais pelo método de Gram-Schmidt foram determinados pelas fórmulas (3.1.2.a) e (3.1.2.b) já discutidas anteriormente, e admitindo-se inicialmente

$$P_0\,(X) = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

Para as determinações dos respectivos coeficientes ortonormais usamos calculadora programável Compucorp , Modelo 445 Statistician , localizada no Departamento de Ciências Físicas e Matemáticas da Faculdade de Medicina Veterinária e Agronomia "Prof. Antonio Ruete", de Jaboticabal.

Para o cálculo dos polinômios ortonormais e respectivos coeficientes pelo método de Christoffel-Darboux , usou-se o procedimento indicado por EMERSON (1968) para os casos em que se dispõe de uma calculadora programável. Para isto definiu-se, inicialmente

$$B'_j = \sum_i X_i\, P^2_{j-1}\,(X_i)$$

e

$$C'_j = \sum_i X_i\, P_{j-1}\,(X_i)\, P_{j-2}\,(X_i) \quad , \quad i = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n$$

e

$$Q_j\,(X_i) = (X_i - B'_j)\, P_{j-1}\,(X_i) - C'_j\, P_{j-2}\,(X_i) \qquad (4.2.1.a)$$

onde

$$P_{-1}\,(X) = 0 \qquad \text{e} \qquad P_0\,(X) = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

De (3.1.3.a) e (3.1.3.g) , conclue-se que P_j (X) pode ser obtido pela normalização de Q_j (X) , isto é,

$$P_j\,(X) = \frac{Q_j\,(X)}{A'_j} \qquad \text{onde} \qquad A'_j = \left[\sum_i Q_j^2\,(X_i) \right]^{1/2}$$

Tem-se,então,

$$A_j = \frac{1}{A'_j} \quad ; \quad B_j = -\frac{B'_j}{A'_j} \quad \text{e} \quad C_j = \frac{C'_j}{A'_j}$$

Comparando este valor de C_j aqui obtido com aquele da equação (3.1.3.k) tem-se

$$\frac{A_j}{A_{j-1}} = \frac{C'_j}{A'_j} \quad \Longleftrightarrow \quad C'_j = \frac{1}{A_{j-1}} = A'_{j-1}$$

de forma que C'_j não precisou ser calculado explicitamente.

Logo, a computação procedeu-se fazendo

$$j = 0 \quad , \quad P_{-1}\,(X) = 0 \quad , \quad Q_0\,(X) = 1$$

e calculou-se (4.2.1.d) e (4.2.1.e) dados a seguir

$$B'_j = \frac{\sum_i X_i\, Q^2_{j-1}\,(X_i)}{\sum_i Q^2_{j-1}\,(X_i)} \tag{4.2.1.b}$$

$$Q_j\,(X_i) = (X_i - B'_j)\, P_{j-1}\,(X_i) - A'_{j-1}\, P_{j-2}\,(X_i) \quad , \tag{4.2.1.c}$$

sendo

$$i = 1\ ,\ 2\ , \ldots ,\ n$$

$$A'_j = \left[\sum_i Q_j^2 \ (X_i) \right]^{1/2} \qquad (4.2.1.d)$$

$$P_j \ (X_i) = \frac{Q_j \ (X_i)}{A'_j} \qquad (4.2.1.e)$$

Quando (4.2.1.e) foi calculado, $\underline{j}$ foi aumentado de uma unidade e (4.2.1.b) , (4.2.1.c) , (4.2.1.d) e (4.2.1.e) foram computados novamente naquela ordem.

Repetiu-se este ciclo até $j = m < n$. Um programa para calculadora Compucorp , Modelo 445 , foi elaborado com o propósito de determinar os coeficientes ortonormais destes polinômios.

As expressões polinomiais em função de X foram obtidas à parte.

4.2.2 - Análise de regressão polinomial e equação de regressão

Pela teoria desenvolvida em 3.2.2 , se os dados ocorrem com repetições, PIMENTEL GOMES (1970) sugere que a estimativa de $\hat{\alpha}_k$ e S Q Regressão de ordem $\underline{k}$, dadas por (3.2.2.g) e (3.2.2.h) , sejam usadas nas formas equivalentes

$$\hat{\alpha}_k = \frac{\sum_i P_k \ (X_i) \ T_i}{r} \ , \qquad \begin{array}{l} k = 0 \ , 1 \ , 2 \ , \ldots , j \\ i = 1 \ , 2 \ , \ldots , n \end{array} \qquad (4.2.2.a)$$

onde T_i é o total do nível X_i em $\underline{r}$ repetições, e

$$\text{S Q Regressão}_k = \frac{\left[\sum_i P_k \ (X_i) \ T_i \right]^2}{r} \qquad (4.2.2.b)$$

$$k = 1 \ , 2 \ , \ldots , j$$

Desta forma, fazendo-se uma adaptação da Tabela 2 para os casos em que os dados ocorrem com repetições e seguindo a metodologia indicada por PIMENTEL GOMES (1970) tem-se, no caso de n níveis da variável independente X , com r repetições, o seguinte esquema da análise de variância para ensaios inteiramente casualizados, levando em conta a regressão, com $j \leq n - 1$. (Tabela 3) .

TABELA 3 - Esquema de análise de variância para ensaios inteiramente casualizados, levando em conta a regressão

Causa de Variação	G. L.	S. Q.
Regressão Linear (R L)	1	$\frac{\left[\sum_i P_1 (X_i) T_i\right]^2}{r}$
Regressão Quadrática (R Q)	1	$\frac{\left[\sum_i P_2 (X_i) T_i\right]^2}{r}$
⋮ ⋮ ⋮	⋮	⋮ ⋮ ⋮
Regressão de Ordem j (R_j)	1	$\frac{\left[\sum_i P_j (X_i) T_i\right]^2}{r}$
Desvios da Regressão	$n - j - 1$	S Q (Níveis de X) + - (S Q R L + ... + S Q R_j)
(Níveis de X)	$(n - 1)$	$(\frac{1}{r} \sum_i T_i^2 - C)$
Resíduo	$n (r - 1)$	S Q Total - S Q (Níveis de X)
Total	$n r - 1$	$\sum_{i,\ell} y_{i\ell}^2 - C$

onde S Q Total e S Q (Níveis de X) são calculados nos moldes usuais.

Para a estimativa da equação de regressão calculou-se os coeficientes $\hat{\alpha}_k$ correspondente a todos os componentes, do linear ao último significativo, usando a fórmula (4.2.2.a) .

Convém salientar que o quadrado médio da regressão e dos desvios da regressão são testados em relação ao quadrado médio residual.

Por outro lado, observa-se que, tratando-se de polinômios ortogonais, as fórmulas (4.2.2.a) e (4.2.2.b) serão dadas por

$$\hat{\alpha}_k = \frac{\sum_i P_k (X_i) T_i}{\sum_i P_k^2 (X_i) r} \quad , \qquad \begin{array}{l} k = 0 , 1 , 2 ,\ldots, j \\ i = 1 , 2 ,\ldots, n \end{array} \tag{4.2.2.c}$$

$$S\ Q\ \text{Regressão}_k = \frac{\left[\sum_i P_k (X_i) T_i \right]^2}{r \; {}_i P_k^2 \; (X_i)} \tag{4.2.2.d}$$

$$k = 1 , 2 ,\ldots, j$$

respectivamente.

Estas duas fórmulas serão úteis quando se proceder a análise de regressão polinomial do experimento D .

5 - RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os conjuntos de polinômios ortonormais obtidos pelos métodos de Gram-Schmidt e de Christoffel-Darboux e as análises de regressão polinomial são apresentados a seguir.

Por conveniência relacionam-se exclusivamente os polinômios envolvidos nas análises de regressão

5.1 - RESULTADOS

5.1.1 - Funções polinomiais

Para a determinação dos polinômios ortonormais usa-se a metodologia indicada no ítem 4.2.1 .

5.1.1.1 - Em função dos níveis de X relativo ao Experimento A obtiveram-se os seguintes polinômios ortonormais de graus zero , um e dois:

5.1.1.1.a - Pelo método de Gram-Schmidt

$$P_0 (X_i) = \frac{1}{2,23606797}$$

$$P_1 (X_i) = \frac{1}{4,77493455} (X_i - 8,80000000)$$

$$P_2 (X_i) = \frac{1}{8,54092316} (X_i^2 - 17,89473682 X_i + 75,47368420)$$

5.1.1.1.b - Pelo método de Christoffel-Darboux

$$P_0 (X_i) = \frac{1}{2,23606797}$$

$$P_1 (X_i) = \frac{1}{4,77493455} (X_i - 8,80000000)$$

$$P_2 (X_i) = \frac{1}{8,54092316} (X_i^2 - 17,89473682 X_i + 75,47368420)$$

5.1.1.1.c - Sem fazer aproximações, obteve-se igualmente por ambos os métodos

$$P_0 (X_i) = \frac{1}{\sqrt{5}}$$

$$P_1\ (X_i) = \frac{1}{\sqrt{\frac{228}{10}}}\ (X_i - \frac{44}{5})$$

$$P_2\ (X_i) = \frac{19}{3\ \sqrt{2926}}\ (X_i^2 - \frac{340}{19}\ X_i + \frac{1434}{19})$$

5.1.1.2 - Para o Experimento B e em função dos níveis de X , os seguintes polinômios ortonormais de graus zero , um , dois e três foram calculados:

5.1.1.2.a - Pelo método de Gram-Schmidt

$$P_0\ (X_i) = \frac{1}{2,64575131}$$

$$P_1\ (X_i) = \frac{1}{10,62342425}\ (X_i - 5,85714285)$$

$$P_2\ (X_i) = \frac{1}{36,20532166}\ (X_i^2 - 12,13417721\ X_i + 20,64303797)$$

$$P_3\ (X_i) = \frac{1}{119,65999847}\ (X_i^3 - 17,69046069\ X_i^2 + 76,44905912\ X_i + \\ - 46,66839720)$$

5.1.1.2.b - Pelo método de Christoffel-Darboux

$$P_0\ (X_i) = \frac{1}{2,64575131}$$

$$P_1\,(X_i) = \frac{1}{10{,}62342425}\,(X_i - 5{,}85714285)$$

$$P_2\,(X_i) = \frac{1}{36{,}20532166}\,(X_i^2 - 12{,}13417721\,X_i + 20{,}64303797)$$

$$P_3\,(X_i) = \frac{1}{119{,}65999852}\,(X_i^3 - 17{,}69046070\,X_i^2 + 76{,}44905915\,X_i + \\ - 46{,}66839716)$$

5.1.1.2.c - Sem fazer aproximações obteve-se igualmente por ambos os métodos

$$P_0\,(X_i) = \frac{1}{\sqrt{7}}$$

$$P_1\,(X_i) = \frac{7}{\sqrt{5530}}\,(X_i - \frac{41}{7})$$

$$P_2\,(X_i) = \frac{395}{4\sqrt{12782595}}\,(X_i^2 - \frac{4793}{395}\,X_i + \frac{8154}{395})$$

$$P_3\,(X_i) = \frac{1}{24\sqrt{\frac{38307}{1541}}}\,(X_i^3 - \frac{27261}{1541}\,X_i^2 + \frac{117808}{1541}\,X_i + \\ + \frac{71916}{1541})$$

5.1.1.3 - Relativo ao Experimento C , os polinômios de zero , 1º , 2º , 3º e 4º graus em função dos níveis de $\underline{X}$ foram:

5.1.1.3.a - Pelo método de Gram-Schmidt

$$P_0\ (X_i) = \frac{1}{3,16227766}$$

$$P_1\ (X_i) = \frac{1}{20,36909423}\ (X_i - 10,10000000)$$

$$P_2\ (X_i) = \frac{1}{102,51611154}\ (X_i^2 - 20,55314533\ X_i + 64,08676789)$$

$$P_3\ (X_i) = \frac{1}{513,24118694}\ (X_i^3 - 31,36156263\ X_i^2 + 260,90341141\ X_i + - 436,84021673)$$

$$P_4\ (X_i) = \frac{1}{2523,16731619}\ (X_i^4 - 42,15478266\ X_i^3 + 574,33120014)\ X_i^2 + - 2737,67379841\ X_i + 3108,60322884)$$

5.1.1.3.b - Pelo método de Christoffel-Darboux

$$P_0\ (X_i) = \frac{1}{3,16227766}$$

$$P_1\ (X_i) = \frac{1}{20,36909423}\ (X_i - 10,10000000)$$

$$P_2\ (X_i) = \frac{1}{102,51611154}\ (X_i^2 - 20,55314533\ X_i + 64,08676789)$$

$$P_3\ (X_i) = \frac{1}{513,24118694}\ (X_i^3 - 31,36156263\ X_i^2 + 260,90341141\ X_i + - 436,84021673)$$

$$P_4\ (X_i) = \frac{1}{2523,16727378}\ (X_i^4 - 42,15476804\ X_i^3 + 574,33071628\ X_i^2 + - 2723,67037091\ X_i + 3108,60449611)$$

5.1.1.3.c - Sem aproximações, pelos métodos de Gram-Schmidt e de Christoffel-Darboux determinou-se

$$P_0\ (X_i) = \frac{1}{\sqrt{10}}$$

$$P_1\ (X_i) = \frac{10}{3\sqrt{4610}}\ (X_i - \frac{101}{10})$$

$$P_2\ (X_i) = \frac{461}{2\sqrt{558375185}}\ (X_i^2 - \frac{9475}{461}\ X_i + \frac{29544}{461})$$

$$P_3\ (X_i) = \frac{Q_3\ (X_i)}{\sqrt{\sum_i Q_3^2\ (X_i)}}$$

onde

$$Q_3\ (X_i) = X_i^3 - \frac{3502303668}{111675037}\ X_i^2 + \frac{40295638604849}{154446576171}\ X_i + - \frac{67468475809120}{154446576171}$$

A determinação exata do radicando do denominador de $P_3(X_i)$, assim como a determinação de $P_4(X_i)$, estão sujeitos a cálculos manuais devido a limitada capacidade das calculadoras.

5.1.1.4 - Para o Experimento D, os polinômios em função dos níveis de X foram:

5.1.1.4.a - Pelo método de Gram-Schmidt

$$P_0(X_i) = \frac{1}{2,82842712}$$

$$P_1(X_i) = \frac{1}{12,96148140}(X_i - 13.00000000)$$

$$P_2(X_i) = \frac{1}{51,84592564}(X_i^2 - 25,99999996\ X_i + 147,99999996)$$

$$P_3(X_i) = \frac{1}{194,97692171}(X_i^3 - 38,99999996\ X_i^2 - 469,99999958\ X_i + \\ - 1715,99999993)$$

5.1.1.4.b - Pelo método de Christoffel-Darboux

$$P_0(X_i) = \frac{1}{2,82842712}$$

$$P_1(X_i) = \frac{1}{12,96148140}(X_i - 13,00000000)$$

$$P_2 (X_i) = \frac{1}{51,84592564} (X_i^2 - 25,99999996\ X_i + 147,99999996)$$

$$P_3 (X_i) = \frac{1}{194,97692152} (X_i^3 - 38,99999997\ X_i^2 + 469,99999994\ X_i + \\ - 1715,99999995)$$

5.1.1.4.c - Sem aproximações, pelos dois métodos obtiveram-se os mesmos resultados seguintes:

$$P_0 (X_i) = \frac{1}{\sqrt{8}}$$

$$P_1 (X_i) = \frac{1}{\sqrt{168}} (X_i - 13)$$

$$P_2 (X_i) = \frac{1}{\sqrt{2688}} (X_i^2 - 26\ X_i + 148)$$

$$P_3 (X_i) = \frac{1}{\sqrt{38016}} (X_i^3 - 39\ X_i^2 + 470\ X_i - 1716)$$

Os valores numéricos de todos os polinômios citados no ítem 5.1.1 para os diferentes níveis de X estão tabelados no Apêndice.

5.1.2 - Coeficientes de regressão

Os valores numéricos de $\hat{\alpha}_k$ foram calculados pela equação (4.2.2.a) usando os coeficientes ortonormais de polinômios obtidos pelos métodos de Gram-Schmidt e de Christoffel-Darboux, e os resultados estão na Tabela 4 .

TABELA 4 - Valores numéricos de $\hat{\alpha}_k$ usando os coeficientes ortonormais de polinômios obtidos pelos métodos de Gram-Schmidt e de Christoffel-Darboux

Ensaios	Com Aproximação Gram Schmidt	Com Aproximação Christoffel-Darboux	Sem Aproximação a/
Exp. A			
$\hat{\alpha}_0$	49,9537586	49,9537586	$\frac{1117\sqrt{5}}{50}$
$\hat{\alpha}_1$	- 2,3539607	- 2,3539607	$-\frac{281\sqrt{570}}{2850}$
$\hat{\alpha}_2$	2,7323555	2,7323555	$\frac{739\sqrt{2926}}{14360}$
Exp. B			
$\hat{\alpha}_0$	62,4926460	62,4926460	$\frac{1181\sqrt{7}}{50}$
$\hat{\alpha}_1$	- 5,1282869	- 5,1282869	$-\frac{681\sqrt{5530}}{9875}$
$\hat{\alpha}_2$	0,1345096	0,1345096	$\frac{48091\sqrt{12782595}}{12782595}$
$\hat{\alpha}_3$	3,7871869	3,7871869	$\frac{1163906\sqrt{59031087}}{2361243480}$

Continua ...

TABELA 4 - Continuação

Ensaios	Com Aproximação Gram-Schmidt	Com Aproximação Christoffel-Darboux	Sem Aproximação a/
Exp. C			
$\hat{\alpha}_0$	80,3977472	80,3977472	$\frac{3178\sqrt{10}}{125}$
$\hat{\alpha}_1$	0,2177805	0,2177805	$\frac{1109\sqrt{4610}}{345750}$
$\hat{\alpha}_2$	4,9155852	4,9155852	$\frac{23231\sqrt{558375185}}{111675037}$
$\hat{\alpha}_3$	- 2,1972113	- 2,1972113	b
$\hat{\alpha}_4$	- 4,7295946	- 4,7296067	b
Exp. D			
$\hat{\alpha}_0$	68,7449212	68,7449212	$\frac{4861\sqrt{8}}{200}$
$\hat{\alpha}_1$	4,6599604	4,6599604	$\frac{151\sqrt{168}}{420}$
$\hat{\alpha}_2$	- 1,2066520	- 1,2066520	$-\frac{391\sqrt{42}}{2100}$
$\hat{\alpha}_3$	- 2,7621728	- 2,7621728	$-\frac{187\sqrt{2376}}{3300}$

a/ Os valores numéricos apresentados foram iguais, usando os coeficientes ortonormais de Gram-Schmidt e de Christoffel-Darboux.

b/ Valores não calculados por falta de capacidade da calculadora.

5.1.3 - Análises de regressão polinomial

Conduzindo os cálculos segundo a metodologia discutida em 4.2.2 e apresentando os resultados conforme a Tabela 3 , determinou-se as seguintes análises de variância:

5.1.3.1 - Para o Experimento A

Usando os coeficientes ortonormais de polinômios obtidos pelo método de Gram-Schmidt obteve-se o seguinte resultado (Tabela 5) .

TABELA 5 - Análise de Variância do Experimento A usando os coeficientes ortonormais de polinômios obtidos pelo método de Gram-Schmidt

Causa de Variação	G. L.	S. Q.	Q. M.	F
Regressão Linear	1	27,7056549	27,7056549	9,284 **
Regressão Quadrática	1	37,3288335	37,3288335	12,509 **
Desvios da Regressão	2	11,7815116	5,8907558	1,974
(Níveis de X)	(4)	(76.8160000)		
Resíduo	20	59,6840000		
Total	24	136,5000000		

Com indício de regressão quadrática sugere-se a equação

$$\hat{Y}_i = \hat{\alpha}_0 P_0 (X_i) + \hat{\alpha}_1 P_1 (X_i) + \hat{\alpha}_2 P_2 (X_i)$$

onde $\hat{\alpha}_0$, $\hat{\alpha}_1$ e $\hat{\alpha}_2$ são determinados pela equação (4.2.2.a) e

$P_0(X_i)$, $P_1(X_i)$ e $P_2(X_i)$ são os polinômios relacionados em (5.1.1.1.a).

Nestas condições a equação de regressão resultante foi

$$\hat{Y}_i = 0{,}31991336\ X_i^2 - 6{,}21774835\ X_i + 50{,}82328937$$

Com o uso dos coeficientes ortonormais de polinômios calculados pelo método de Christoffel-Darboux chegou-se aos mesmos resultados da Tabela 5 , para a análise de variância. Idêntica equação de regressão foi obtida.

5.1.3.2 - Para o Experimento B

De maneira análoga, usando os coeficientes calculados pelo método de Gram-Schmidt , chegou-se ao resultado seguinte (Tabela 6) .

TABELA 6 - Análise de variância do Experimento B usando os coeficientes ortonormais de polinômios obtidos pelo método de Gram-Schmidt

Causa de Variação	G. L.	S. Q.	Q. M.	F
Regressão Linear	1	131,4966328	131,4966328	30,523 **
Regressão Quadrática	1	0,0904642	0,0904642	0,02099
Regressão Cúbica	1	71,7139249	71,7139249	16,51 **
Desvios da Regressão	3	5,0709781	1,6903260	0,39237
(Níveis de X)	(6)	(208,3720000)		
Resíduo	28	120,6240000	4,3080000	
Total	34	328,9960000		

A equação de regressão correspondente foi

$$\hat{Y}_i = 0,03164956\ X_i^3 - 0,55618020\ X_i^2 + 1,89176483\ X_i + 25,04709965$$

Com igual procedimento, usando os coeficientes ortonormais calculados pelo método de Christoffel-Darboux obteve-se, para a análise de variância, os mesmos resultados da Tabela 6 . A equação de regressão do 3º grau foi idêntica a anterior.

5.1.3.3 - Para o Experimento C

Procedendo de forma similar ao Experimento anterior, chegou-se à seguinte análise usando os coeficientes ortonormais obtidos pelo método de Gram-Schmidt (Tabela 7) .

TABELA 7 - Análise de variância do Experimento C usando os coeficientes ortonormais de polinômios obtidos pelo método de Gram-Schmidt

Causa de Variação	G. L.	S. Q.	Q. M.	F
Regressão Linear	1	0,2371418	0,2371418	0,03436
Regressão Quadrática	1	120,8148887	120,8148887	17,507 **
Regressão Cúbica	1	24,1388061	24,1388061	3,498
Regressão de 4º Grau	1	111,8458978	111,8458978	16,207 **
Desvios da Regressão	5	61,4624656	12,2924931	1,781
(Níveis de X)	(9)	(318,4992000)		
Resíduo	40	276,0320000	6,9008000	
Total	49	594,5312000		

Pelos resultados da prova de F pode-se ver que os componentes do 2º e do 4º graus são significativos, levando-nos ao cálculo da seguinte equação de regressão

$$\hat{Y}_i = -\ 0{,}00187447\ X_i^4 + 0{,}07473677\ X_i^3 - 0{,}89435683\ X_i^2 + 3{,}01368604\ X_i + 24{,}43207895$$

Analogamente, usando os coeficientes ortonormais calculados pelo método de Christoffel-Darboux resultou a seguinte análise de variância (Tabela 8) .

TABELA 8 - Análise de variância do Experimento C usando os coeficientes ortonormais de polinômios obtidos pelo método de Christoffel-Darboux

Causa de Variação	G. L.	S. Q.	Q. M.	F
Regressão Linear	1	0,2371418	0,2371418	0,03436
Regressão Quadrática	1	120,8148887	120,8148887	17,507 **
Regressão Cúbica	1	24,1388061	24,1388061	3,498
Regressão do 4º Grau	1	111,8453270	111,8453270	16,207 **
Desvios da Regressão	5	61,4630364	12,2926073	1,781
(Níveis de X)	(9)	(318,4992000)		
Resíduo	40	276,0320000	6,9008000	
Total	49	594,5312000		

Esta análise de variância mostra a existência de uma regressão significativa do 4º grau. A equação de regressão calculada foi

$$\hat{Y}_i = -0{,}00187447\ X_i^4 + 0{,}07473680\ X_i^3 - 0{,}89435593\ X_i^2 + 3{,}01367962\ X_i + 24{,}43208133$$

5.1.3.4 - Para o Experimento D

Obedecendo o mesmo critério adotado para os demais experimentos, com o uso dos coeficientes ortonormais obtidos pelo método de Gram-Schmidt chegou-se a seguinte análise de variância (Tabela 9).

TABELA 9 - Análise de variância do Experimento D usando os coeficientes ortonormais de polinômios obtidos pelo método de Gram-Schmidt

Causa de Variação	G. L.	S. Q.	Q. M.	F
Regressão Linear	1	108,5761569	108,5761569	23,789 **
Regressão Quadrática	1	7,2800450	7,2800450	1,595
Regressão Cúbica	1	38,1479929	38,1479929	8,358 **
Desvios da Regressão	4	12,5628052	3,1407013	0,68812
(Níveis de X)	(7)	(166,5670000)		
Resíduo	32	146,0520000	4,5641250	
Total	39	312,6190000		

Como se observa, existe uma equação de regressão de 3º grau que se ajusta aos dados deste Experimento. Esta equação tem por expressão

$$\hat{Y} = - 0{,}01416666\ X_i^3 + 0{,}52922614\ X_i^2 - 5{,}69369002\ X_i + 40{,}49666576$$

Usando os coeficientes ortonormais calculados pelo método de Christoffel-Darboux, a análise de variância e a equação de regressão resultante foram idênticas àquelas obtidas anteriormente para este experimento.

Sendo os níveis de X igualmente espaçados neste Experimento, procedeu-se a mais uma análise de variância desta feita usando os coeficientes ortogonais de polinômios já tabelados, PEARSON e HARTLEY (1970) , e seguindo a metodologia indicada por PIMENTEL GOMEL (1970).

Com o auxílio da fórmula (4.2.2.d) obteve-se a seguinte análise de variância (Tabela 10).

TABELA 10 - Análise de variância do Experimento D usando os coeficientes ortogonais de polinômios

Causa de Variação	G. L.	S. Q.	Q. M.	F
Regressão Linear	1	108,5761904	108,5761904	23,789 **
Regressão Quadrática	1	7,2800476	7,2800476	1,595
Regressão Cúbica	1	38,1480000	38,1480000	8,358 **
Desvios da Regressão	4	12,5627620	3,1406905	0,68812
(Níveis de X)	(7)	(166,5670000)		
Resíduo	32	146,0520000	4,5641000	
Total	39	312,6190000		

Pelos resultados do teste F se vê que os componentes do 1º e do 3º graus são significativos. Nestas condições, e usando a fórmula (4.2.2.c) obteve-se a equação de regressão

$$\hat{Y}_i = - 0{,}01416667\ X_i^3 + 0{,}52922619\ X_i^2 - 5{,}69369047\ X_i + 40{,}49666659$$

5.2 - DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

5.2.1 - Determinação de polinômios ortonormais

Analisando os resultados do ítem 5.1.1.1 verifica-se que os polinômios ortonormais de graus zero, um e dois obtidos pelo método de Gram-Schmidt, foram exatamente iguais àqueles calculados pelo método de Christoffel-Darboux, considerando até a oitava casa decimal.

Com relação as suas exatidões, comparando os polinômios dos ítens 5.1.1.1.a e 5.1.1.1.b com aqueles de 5.1.1.1.c pode-se perceber que os erros de aproximações não apresentaram influência nos resultados, considerando até a oitava casa decimal.

Os respectivos coeficientes ortonormais se encontram inclusos no Apêndice e evidenciam o que se acabou de comentar.

Aliás, nos demais experimentos, estes fatos se repetiram quando dos cálculos de $P_0(X_i)$, $P_1(X_i)$, $P_2(X_i)$ e $P_3(X_i)$.

Ao contrário, o polinômio de 4º grau obtido pelo método de Gram-Schmidt apresentou diferença daquele calculado pelo método de Christoffel-Darboux a partir da quarta casa decimal, usando os mesmos níveis de X .

Esta diferença pode ser mais acentuada quando se aumentam os níveis da variável independente ou seus valores absolutos.

Convém salientar que nestes casos podem ocorrer diferenças até mesmo nas determinações de polinômios de grau menor que quatro, se precauções não forem tomadas nos cálculos (por exemplo, as multiplicações devem, sempre que possível, preceder às divisões).

5.2.2 - Determinação dos coeficientes de regressão

Pelo exposto na Tabela 4 , verificam-se os mesmos resultados pelos dois métodos até a sétima casa decimal, para todos os coeficientes de regressão, com exceção apenas de $\hat{\alpha}_4$ no Experimento C .

Com relação à exatidão dos cálculos, observa-se na mesma tabela,que pelos resultados obtidos sem aproximações, os erros de arredondamentos afetaram a partir da quarta casa decimal.

5.2.3 - Análises de regressão polinomial e equações de regressão

Analisando os resultados do Experimento A verifica-se que as Somas de Quadrados para Regressão Linear , Regressão Quadrática e Desvios da Regressão apresentaram resultados idênticos até a sétima casa decimal, o mesmo ocorrendo com as respectivas equações de regressão, fato que já era logicamente esperado levando-se em consideração que os coeficientes ortonormais empregados em ambos os casos foram os mesmos.

Com relação aos resultados das análises do Experimento B (Tabela 6), percebe-se, como no caso anterior, que os dois métodos de determinação de coeficientes ortonormais de polinômios nos levaram aos mesmos resultados nas análises de regressão e na equação como era de se esperar, se forem analisados os coeficientes ortonormais de polinômios usados nestas análises.

Referindo-se às análises do Experimento C (Tabelas 7 e 8), a Soma de Quadrados da Regressão de 4º grau e dos Desvios da Regressão apresentaram diferenças a partir da quarta casa decimal.

Esta diferença, entretanto, não chegou a afetar os valores de F. Nas equações de regressão resultantes, influenciadas simultaneamente por $\hat{\alpha}_4$ e $P_4(X_1)$, verificam-se diferenças relativamente grandes nos coeficientes de regressão.

Analisando os resultados referentes ao Experimento D, verifica-se pela Tabela 9, que as Somas de Quadrados das Regressões Linear, Quadrática e Cúbica obtidas usando os coeficientes ortonormais de Gram-Schmidt foram iguais àquelas calculadas com os coeficientes ortonormais de Christoffel-Darboux; esta igualdade se manteve com relação às equações de regressão.

Referindo-se à Tabela 10, verifica-se que as Somas de Quadrados para as Regressões Linear, Quadrática e Cúbica são praticamente iguais àquelas obtidas com o uso dos coeficientes ortonormais e apresentadas na Tabela 9.

As diferenças ocorridas, consequências de erros de aproximações, não trazem nenhuma implicação para o cálculo de F.

Quanto às equações de regressão do Experimento D, observa-se que a substituição de coeficientes ortogonais por ortonormais não afetam em demasia os resultados.

6 - CONCLUSÕES

Tendo em vista os resultados obtidos, pode-se concluir que:

6.1 - Se os níveis da variável independente X não são igualmente espaçados e se dispõe de uma calculadora programável, tanto o método de Gram-Schmidt como o de Christoffel-Darboux, podem ser usados na determinação dos coeficientes ortonormais.

6.2 - Se os níveis da variável independente X naõ sao equidistantes e não se dispõe de uma calculadora programável, a determinação dos coeficientes ortonormais pelo método de Christoffel-Darboux é menos tra-balhosa que o de Gram-Schmidt, pois o número de operações aritméticas envolvidas em cada ciclo (da fórmula 4.2.1.b a 4.2.1.e) após o o primeiro, não depende do grau do polinômio, ao contrário do que ocorre com o método de Gram-Schmidt. Salienta-se que, nestas condições de trabalho, estes métodos de determinação não apresentam nenhuma vantagem em relação a outros já conhecidos e discutidos na Revisão Bibliográfica.

6.3 - A grande desvantagem do uso dos coeficientes ortonormais é que, pela própria estrutura dos polinômios ortonormais, geralmente números irracionais são envolvidos no processamento de cálculos desses coeficientes, de forma que geralmente as condições de normalidade não é verificada senão com aproximações, tendo isto implicações direta na estimativa da equação de regressão.

6.4 - A aplicação de polinômios ortonormais em análise de variância não traz nenhuma vantagem expressível em relação ao uso de polinômios ortogonais, devendo sempre que possível optar-se por estes.

6.5 - Se os níveis da variável independente são equidistantes, o uso dos polinômios ortogonais é mais conveniente para efeito de análise de regressão polinomial por já existirem tabelas apropriadas, dispensando-se, assim, os cálculos dos coeficientes ortogonais.

7 - RESUMO

Dois métodos de obtenção de conjuntos de polinômios ortonormais, em relação a um conjunto de pontos com intervalos arbitrários, são discutidos, abordando-se aspectos de ordem teórica e suas aplicações em análises de regressão polinomial.

Esses métodos, o de Gram-Schmidt e o de Christoffel-Darboux, determinam os conjuntos de polinômios ortonormais respectivamente pelas fórmulas de recorrência

$$P_j\,(X_i) = \frac{1}{C_j}\left[X_i^j \;\; \sum_{v=0}^{j-1} \; \sum_{h=1}^{n} \; X_h^j\, P_v\,(X_h)\, P_v\,(X_i) \right]$$

$$j = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n - 1$$

$$i = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n$$

onde C_j é a constante de normalização, e

$$P_j\ (X_i) = (A_j\ X_i + B_j)\ P_{j-1}\ (X_i) - C_j\ P_{j-2}\ (X_i) \quad ,$$

$$j = 2\ ,\ 3\ ,\ldots,\ m < n$$

$$i = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n$$

onde A_j , B_j e C_j são constantes para um dado $\underline{j}$, com

$$A_j \neq 0 \quad , \quad C_j \neq 0 \quad e \quad P_{-1}\ (X) = 0$$

Em ambos os casos supõe-se

$$P_0\ (X_i) = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad .$$

Para suas aplicações em análise de regressão elaboraram-se quatro experimentos fictícios do tipo inteiramente casualizados, com cinco repetições.

Foram realizadas nove análises de variância, envolvendo equações de regressão de 2º , 3º e 4º graus, concluindo-se que:

a - em geral não há diferença que justifique o uso de um ou de outro método na determinação dos conjuntos de polinômios ortonormais;

b - para efeito de análise de regressão polinomial, a normalização dos polinômios é perfeitamente dispensável.

8 - SUMMARY

Two methods are described for the construction of a set of polynomials which are orthonormal over a set of points with arbitrary spacing, approaching theoretic aspects and their applications in polynomial regression analysis.

Gram-Schmidt and Christoffel-Darboux method's were used for the determination of the orthonormal polynomials sets by recurrence relations, respectively

$$P_j\ (X_i) = \frac{1}{C_j}\left[X_i^j - \sum_{v=0}^{j-1} \sum_{h=1}^{n} X_h^j\ P_v\ (X_h)\ P_v\ (X_i) \right] ,$$

$$j = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n - 1$$

$$i = 1\ ,\ 2\ ,\ldots,\ n$$

where C_j is the normalization constant, and

$$P_j (X_i) = (A_j X_i + B_j) P_{j-1} (X_i) - C_j P_{j-2} (X_i) \quad ,$$

$$j = 2 , 3 ,\dots, m < n$$

$$i = 1 , 2 ,\dots, n$$

where A_j , B_j and C_j are constants for a given j , with

$$A_j \neq 0 \quad , \quad C_j \neq 0 \quad \text{and} \quad P_{-1} (X) = 0 \quad .$$

It was supposed that

$$P_0 (X_i) = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

for the two methods.

The applications of the regression analysis were made by the utilization of four fictitious experiments in the completely randomized design with five replications.

Nine analyses of variance were carried out involving regression equations of 2^{nd} , 3^{rd} and 4^{th} degrees and the following conclusions were drawn:

a - in general there is no difference that justify the utilization of either method in the determination of the orthonormal polynomials sets.

b - the polynomial's normalization is perfectely dispensable for effect of polynomial regression analysis.

9 - BIBLIOGRAFIA

AITKEN, A. C., 1957. Statistical Mathematics. Londres, Oliver and Boyd. 153 p.

ANDERSON, R. L. e BANCROFT, T. A., 1952. Statistical Theory in Research. Nova York. McGraw-Hill, 399 p.

BRIGHT, J. W. e DAWKINS, G. S., 1965. Some Aspects of Curve Fitting Using Orthogonal Polynomials. Industrial and Engineering Fundamentals, 4 (1): 93-97.

COX, C. P., 1958. A Concise Derivation of General Orthogonal Polynomials. J. R. Statist. Soc., B , Londres, 20: 406-407.

DIXON, W. J. e MASSEY, F. J., 1957. Introduction to Statistical Analysis. 2ª edição. Nova York, McGraw-Hill. 488 p.

DRAPER, N.R. e SMITH, H., 1966. Applied Regression Analysis. Nova York, John Wiley & Sons.

EMERSON, P. L., 1965. Orthogonal Polynomials for Unequally Weighted Means. Biometrics, 21: 226-230.

EMERSON, P. L., 1968. Numerical Construction of Orthogonal Polynomials from a General Recurrence Formula. Biometrics, 24: 695-701.

FISHER, R. A., 1970. Statistical Methods for Research Workers. 14ª ed. Edimburgo, Oliver and Boyd, 362 p.

FISHER, R. A. e YATES, F., 1971. Tabelas Estatísticas para Biologia, Medicina e Agricultura. Tradução de Salvator Licco Haim. São Paulo. Ed. da Univ. de São Paulo e Ed. Polígono, 150 p.

GRANDAGE, A., 1958. Orthogonal Coefficients for Unequal Intervals. Biometrics, 14: 287-89.

GRAYBILL, F. A., 1961. An Introduction to Linear Statistical Models. Nova York. McGraw-Hill. 2 Vols.

GUEST, P. G., 1953. The Doolittle Method and the Fitting of Polynomials to Weighted Data. Biometrika, 40: 229-31.

ISSERLIS, L. M. A., 1927. Note on Chebysheff's Interpolation Formula. Biometrika, 19: 87-93.

KENDAL, M. G. e STUART, A., 1967. The Advanced Theory of Statistics. 3ª ed. Londres, Charles Griffin. 3 Vols.

PEARSON, E. S. e HARTLEY, H. O., 1970. Biometrika Tables for Statisticians. 3ª ed., Londres, Cambridge University Press, 270 p.

PIMENTEL GOMES, F. e NOGUEIRA, I. R., 1964. Regressão e Covariância. (Mimeografado). Piracicaba, SP. 45 p.

PIMENTEL GOMES, F., 1970. Curso de Estatística Experimental. 4ª ed. São Paulo, Livraria Nobel, 430 p.

PIZA, O. T., 1973. Determinação de Regressão Polinomial para a Produção de Algodão em Caroço em Função do Índice pH do Solo. Jabotica - bal. F. M. V. A. J. / U. N. E. S. P., 68 p. (Tese de Doutoramento).

RAINVILLE, E. D., 1960. Special Functions. Nova York, The Macmillan Company. 365 p.

ROBSON, D. S., 1959. A Simple Method for Constructing Orthogonal Polynomials when the Independent Variable in Unequally Spaced. Biometrics, 15: 187-91.

ROMANOVSKY, V., 1927. Note on Orthogonalising Series of Functions and Interpolation. Biometrika, 19: 93-99.

SNEDECOR, G. W., 1966. Metodos Estadisticos Aplicados a la Investigacion Agrícola y Biologica. Traduação de Angel R. Fuller. México, Cia., Editorial Continental. 626 p.

STEEL, R. G. D. e TORRIE, J. H., 1960. Principles and Procedures of Statistics. Nova York, McGraw-Hill. 481 p.

SZÉGO, G., 1959. Orthogonal Polynomials. Amer. Math. Soc. Colloquium Publ. 23: Boston, Spaulding - Moss Co., 38-44.

WISHART, J. e METAKIDES, T., 1953. Orthogonal Polynomial Fitting. Biometrika, 40: 361-369.

10 - APÊNDICE

10.1 - Tabelas de dados dos experimentos inteiramente casualizados gerados pela equação (4.1.a)

TABELA 11 - Experimento A

Repetições	Níveis de X				
	6	7	9	10	12
I	22,9	24,6	19,3	21,7	23,3
II	24,2	23,3	18,9	20,8	23,7
III	26,8	24,9	21,2	22,9	21,6
IV	27,7	22,0	18,2	18,7	22,4
V	22,8	22,4	20,8	23,8	19,6

TABELA 12 - Experimento B

Repetições	Níveis de X 0	2	4	5	8	10	12
I	21,6	27,6	23,7	22,7	21,7	21,6	22,7
II	26,3	25,4	25,7	22,6	20,5	17,9	24,2
III	22,0	26,8	25,8	23,9	18,7	21,8	21,9
IV	28,7	28,4	28,5	23,9	17,1	20,2	22,2
V	26,3	26,2	28,0	22,8	24,6	20,8	19,9

TABELA 13 - Experimento C

Repe-	Níveis de X									
tições	1	2	4	6	9	11	14	16	18	20
I	25,7	30,6	25,6	24,8	15,7	20,1	29,3	26,6	27,3	26,4
II	26,1	24,7	23,3	24,2	19,5	21,3	24,1	31,6	25,7	28,6
III	26,2	27,1	26,8	30,2	15,9	30,1	24,8	25,7	29,0	25,7
IV	28,3	25,9	29,9	23,4	22,4	24,3	23,9	26,1	28,9	24,0
V	27,7	26,3	30,0	22,9	20,9	19,7	26,8	24,3	28,5	24,3

TABELA 14 - Experimento D

Repetições	Níveis de X 6	8	10	12	14	16	18	20
I	20,2	23,3	16,4	26,0	27,2	26,0	24,6	28,5
II	23,6	20,2	25,0	23,0	28,2	26,5	26,7	23,9
III	20,7	25,1	21,4	23,2	26,0	27,9	28,2	26,2
IV	24,2	19,8	20,5	21,5	26,0	27,7	26,8	23,3
V	23,0	20,7	25,6	24,5	24,9	27,9	22,7	25,1

10.2 - Coeficientes para interpolação de polinômios ortonormais

10.2.1 - Com aproximações

TABELA 15 - Coeficientes ortonormais referentes ao Experimento A

X	Gram-Schmidt $P_1(X_i)$	Gram-Schmidt $P_2(X_i)$	Christoffel-Darboux $P_1(X_i)$	Christoffel-Darboux $P_2(X_i)$
6	- 0,5863954	0,4806580	- 0,5863954	0,4806580
7	- 0,3769685	- 0,0924342	- 0,3769685	- 0,0924342
9	0,0418853	- 0,5361185	0,0418853	- 0,5361185
10	0,2513123	- 0,4067106	0,2513123	- 0,4067106
12	0,6701662	0,5546054	0,6701662	0,5546054

TABELA 16 - Coeficientes ortonormais referentes ao Experimento B

X	Gram-Schmidt			Christoffel-Darboux		
	$P_1(X_i)$	$P_2(X_i)$	$P_3(X_i)$	$P_1(X_i)$	$P_2(X_i)$	$P_3(X_i)$
0	- 0,5513422	0,5701658	- 0,3900083	- 0,5513422	0,5701658	- 0,3900083
2	- 0,3630790	0,0103488	0,3632615	- 0,3630790	0,0103488	0,3632615
4	- 0,1748158	- 0,3285061	0,3349529	- 0,1748158	- 0,3285061	0,3349529
5	- 0,0806842	- 0,4150729	0,1530618	- 0,0806842	- 0,4150729	0,1530618
8	0,2017105	- 0,3433301	- 0,4618536	0,2017105	- 0,3433301	- 0,4618536
10	0,3899738	- 0,0192992	- 0,4280785	0,3899738	- 0,0192992	- 0,4280785
12	0,5782370	0,5256937	0,4286643	0,5782370	0,5256937	0,4286643

TABELA 17 - Coeficientes ortonormais referentes ao Experimento C

X	Gram-Schmidt			
	$P_1(X_i)$	$P_2(X_i)$	$P_3(X_i)$	$P_4(X_i)$
1	- 0,4467552	0,4344060	- 0,4019520	0,3583217
2	- 0,3976612	0,2631827	- 0,0632833	- 0,1548238
4	- 0,2994733	- 0,0207363	0,3292573	- 0,4338590
6	- 0,2012853	- 0,2266190	0,4200052	- 0,1787235
9	- 0,0540033	- 0,3891245	0,1948477	0,3251982
11	0,0441845	- 0,3999159	- 0,0597219	0,4047495
14	0,1914665	- 0,2697845	- 0,3644655	0,0370017
16	0,2896545	- 0,0854846	- 0,3798324	- 0,3152308
18	0,3878424	0,1768517	- 0,1358525	- 0,3792490
20	0,4860304	0,5172246	0,4609976	0,3366189

X	Christoffel-Darboux			
	$P_1(X_i)$	$P_2(X_i)$	$P_3(X_i)$	$P_4(X_i)$
1	- 0,4467552	0,4344060	- 0,4019520	0,3583234
2	- 0,3976612	0,2631827	- 0,0632833	- 0,1548258
4	- 0,2994733	- 0,0207363	0,3292573	- 0,4338557
6	- 0,2012853	- 0,2266190	0,4200052	- 0,1787205
9	- 0,0540033	- 0,3891245	0,1948477	0,3251997
11	0,0441845	- 0,3999159	- 0,0597219	0,4047495
14	0,1914665	- 0,2697845	- 0,3644655	0,0369996
16	0,2896545	- 0,0854846	- 0,3798324	- 0,3152339
18	0,3878424	0,1768517	- 0,1358525	- 0,3792524
20	0,4860304	0,5172246	0,4609976	0,3366163

TABELA 18 - Coeficientes ortonormais referentes ao Experimento D

X	Gram-Schmidt			Christoffel-Darboux		
	$P_1(X_i)$	$P_2(X_i)$	$P_3(X_i)$	$P_1(X_i)$	$P_2(X_i)$	$P_3(X_i)$
6	- 0,5400617	0,5400617	- 0,4308202	- 0,5400617	0,5400617	- 0,4308202
8	- 0,3857583	0,0771516	0,3077287	- 0,3857583	0,0771516	0,3077287
10	- 0,2314550	- 0,2314550	0,4308202	- 0,2314550	- 0,2314550	0,4308202
12	- 0,0771516	- 0,3857583	0,1846372	- 0,0771516	- 0,3857583	0,1846372
14	0,0771516	- 0,3857583	- 0,1846372	0,0771516	- 0,3857583	- 0,1846372
16	0,2314550	- 0,2314550	- 0,4308202	0,2314550	- 0,2314550	- 0,4308202
18	0,3857583	0,0771516	- 0,3077287	0,3857583	0,0771516	- 0,3077287
20	0,5400617	0,5400617	0,4308202	0,5400617	0,5400617	0,4308202

10.2.2 - Sem aproximações, onde

$$P'_k\ (X_i) \cdot R_k = P_k\ (X_i)$$

TABELA 19 - Coeficientes ortonormais referentes ao Experimento A (iguais por ambos os métodos)

X	$P'_1\ (X_i)$	$P'_2\ (X_i)$
6	- 14	78
7	- 9	- 15
9	1	- 87
10	6	- 66
12	16	90
R	$R_1 = \dfrac{1}{\sqrt{570}}$	$R_2 = \dfrac{1}{\sqrt{26334}}$

TABELA 20 - Coeficientes ortonormais referentes ao Experimento B (iguais por ambos os métodos)

X	$P'_1\ (X_i)$	$P'_2\ (X_i)$	$P'_3\ (X_i)$
0	- 41	4077	- 71916
2	- 27	74	66984
4	- 13	- 2349	61764
5	- 6	- 2968	28224
8	15	- 2455	- 85164
10	29	- 138	- 78936
12	43	3759	79044
R	$R_1 = \dfrac{1}{\sqrt{5530}}$	$R_2 = \dfrac{1}{\sqrt{51130380}}$	$R_3 = \dfrac{1}{\sqrt{34001906112}}$

TABELA 21 - Coeficientes ortonormais referentes ao Experimento C (iguais por ambos os métodos)

X	$P'_1\ (X_i)$	$P'_2\ (X_i)$	$P'_3\ (X_i)$ *	$P'_4\ (X_i)$ *
1	- 91	10265	-	-
2	- 81	6219	-	-
4	- 61	- 490	-	-
6	- 41	- 5355	-	-
9	- 11	- 9195	-	-
11	9	- 9450	-	-
14	39	- 6375	-	-
16	59	- 2020	-	-
18	79	4179	-	-
20	99	12222	-	-
R	$R_1 = \frac{1}{\sqrt{41490}}$	$R_2 = \frac{1}{\sqrt{558375186}}$	-	-

(*) Não calculados por falta de capacidade da calculadora

TABELA 22 - Coeficientes ortonormais referentes ao Experimento D (iguais por ambos os métodos)

X	$P'_1\ (X_i)$	$P'_2\ (X_i)$	$P'_3\ (X_i)$
6	- 7	7	- 84
8	- 5	1	60
10	- 3	- 3	84
12	- 1	- 5	36
14	1	- 5	- 36
16	3	- 3	- 84
18	5	1	- 60
20	7	7	84
R	$R_1 = \dfrac{1}{\sqrt{168}}$	$R_2 = \dfrac{1}{\sqrt{168}}$	$R_3 = \dfrac{1}{\sqrt{38016}}$