

MODELOS LINEARES COM RESTRIÇÃO ESTIMÁVEL NA PESQUISA AGRONÔMICA¹

C.R. de M. GODOI²

RESUMO - Apresenta-se uma dedução da solução de quadrados mínimos com restrição nos parâmetros, baseada no método de Lagrange dos coeficientes a serem determinados. Aborda-se também uma aplicação do método geral no caso de experimentos de adubação de um modo geral, quando duas parábolas são justapostas. Trata-se de dois casos: quando a justaposição se dá no ponto máximo e quando ela se dá num ponto qualquer. Em ambos os casos, a dose economicamente aconselhável é deduzida.

Termos para indexação: quadrados mínimos, parâmetros, método Lagrange, adubação, parábolas justapostas, coeficientes indeterminados.

RESTRICTED LINEAR MODELS IN AGRONOMIC EXPERIMENTATION

ABSTRACT - In this paper restricted linear models are presented, based on Lagrange n undetermined coefficients. This method is applied in cases of fertilizer experiments when searching for response model and economic level of fertilizer by fitting grafted parabolas considering two cases: when the grafting is at the maximum point and when it is not at any specific point. Economical levels are obtained in both cases.

Index terms: Lagrange method, indetermined coefficients, fertilization, grafted parabolas, minimum squares, parameters.

INTRODUÇÃO

As plantas alimentícias respondem favoravelmente à adubação, desde que o solo seja carente dos elementos presentes no adubo. A produção cresce até um limite máximo; após esse máximo, pelo efeito tóxico dos nutrientes, essa produção decresce.

Um modelo simples e muito usado é o trinômio do 2º grau

$$y = a + bx + cx^2,$$

que possui um inconveniente de ser simétrico em relação ao ponto de máximo $\frac{-b}{2c}$, fato que não reflete, em geral, a realidade.

Consideraremos duas modificações desse modelo, que mantêm a simplicidade do trinômio, suprimindo porém essa deficiência de simetria.

Rao (1945 e 1973) estuda o Teorema de Markoff com restrição sobre os parâmetros, num contexto bem geral. Recentemente, Fuller (1969) e Gallant (1974) estudaram polinomiais justapostas ("grafted polynomials") com aplicação em economia.

MATERIAL E MÉTODOS

Teorema - Uma solução $\hat{\beta}$ que satisfaça o sistema

$$\begin{bmatrix} X'X & R' \\ R & \phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta} \\ \hat{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X'y \\ r \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} R: \text{matriz } s \times p \\ X: \text{matriz } n \times p \\ n > p \end{array} \quad (1)$$

minimiza $SQR(\beta) = (y - X\beta)'(y - X\beta)$, com a característica de X igual a p, X'X positivo definido, as linhas de R independentes das linhas de X, X e sob a restrição $R\beta = r$

Demonstração: Usando o método de Lagrange temos que

$$F(\beta, \lambda) = (y - X\beta)'(y - X\beta) + 2\lambda'(R\beta - r)$$

Diferenciando F em relação a β e λ e identificando a zero obtemos

$$\begin{aligned} dF \equiv 0 &\Rightarrow d\{y'y - 2y'X\beta + \beta'X'X\beta + 2\lambda'R\beta - 2\lambda'r\} \equiv 0 \\ &\Rightarrow (-2y'Xd\beta + 2\beta'X'Xd\beta + 2\lambda'Rd\beta) + (2\beta'R'd\lambda - 2r'd\lambda) \equiv 0 \\ &\Rightarrow 2(-y'X + \beta'X'X + \lambda'R) d\beta + 2(R\beta - r)'d\lambda \equiv 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} X'X\beta + R'\lambda = X'y \\ R\beta = r \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} X'X & R' \\ R & \phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X'y \\ r \end{bmatrix}$$

provando a necessidade de (1).

Para a suficiência, seja $d\beta = \beta - \hat{\beta}$ e $d\lambda = \lambda - \hat{\lambda}$. Então, diferenciando novamente, obtemos,

¹ Aceito para publicação em 28 de outubro de 1983.

² Eng.^o Agr.^o, Dr. Livre Docente em Matemática e Estatística, ESALQ/USP, Caixa Postal 96, CEP.13400 - Piracicaba, SP.

$$\begin{aligned}
 d^2F &= 2d\beta'X'Xd\beta + 2d\beta'R'd\lambda + 2d\lambda'Rd\beta \\
 &= 2d\beta'X'Xd\beta + 4d\lambda'Rd\beta \\
 &= 2d\beta'X'Xd\beta + 4d\lambda'R(\beta - \hat{\beta}) \\
 &= 2d\beta'X'Xd\beta > 0, \text{ pois } X'X \text{ por hipótese é positiva definida e } R\beta = R\hat{\beta} = 0, \text{ C.Q.D.}
 \end{aligned}$$

O importante para as aplicações é a determinação da matriz de restrições, R, que surge no caso das polinomiais justapostas naturalmente pelas imposições feitas ao modelo matemático.

Justaposição de duas parábolas

Caso I - Justaposição no ponto de máximo.

Para que duas parábolas

$$y = a_1 + b_1x + c_1x^2 \text{ e } y = a_2 + b_2x + c_2x^2$$

se justaponham sem formar ângulo, ou seja, uma seja a continuação da outra de um modo suave, deveremos exigir derivabilidade (e portanto continuidade) da função combinada resultante no ponto de ligação x_0 . Como x_0 deverá ser ponto de máximo, teremos as restrições:

$$\begin{aligned}
 \text{Continuidade: } & a_1 + b_1x_0 + c_1x_0^2 = a_2 + b_2x_0 + c_2x_0^2 \\
 \text{Derivabilidade} & \begin{cases} b_1 + 2c_1x_0 = 0 \\ b_2 + 2c_2x_0 = 0 \end{cases} \\
 \text{e} & \\
 \text{Máximo} &
 \end{aligned}$$

Re-arrajando, obtemos

1. $a_1 + b_1x_0 + c_1x_0^2 - a_2 - b_2x_0 - c_2x_0^2 = 0$
2. $b_1 + 2c_1x_0 = 0$ (1)
3. $b_2 + 2c_2x_0 = 0$

Consideremos, agora, o modelo

$$\begin{cases} y = a_1 + b_1x + c_1x^2 & \text{para } x \leq x_0 \\ y = a_2 + b_2x + c_2x^2 & \text{para } x > x_0 \end{cases}$$

sujeito às restrições indicadas por (1)

Determinemos as matrizes X e R que representem o problema. Seja n_0 o número de pares (x, y) tais que $x \leq x_0$ e seja n_1 o número de pares (x, y) tais que $x > x_0$ e seja $N = n_0 + n_1$ o número total de pares.

Arrajemos os pares (x, y) de modo que num grupo fiquem os casos em que $x \leq x_0$ e num outro os restantes. Então, poderemos escrever o sistema inconsistente de equações ($N > 6$)

$$\begin{cases} a_1 + b_1x_1 + c_1x_1^2 = y_1 \\ a_1 + b_1x_2 + c_1x_2^2 = y_2 \\ \dots \dots \\ a_1 + b_1x_{n_0} + c_1x_{n_0}^2 = y_{n_0} \\ a_2 + b_2x_{n_0+1} + c_2x_{n_0+1}^2 = y_{n_0+1} \\ a_2 + b_2x_{n_0+2} + c_2x_{n_0+2}^2 = y_{n_0+2} \\ \dots \dots \dots \\ a_2 + b_2x_N + c_2x_N^2 = y_N \end{cases}$$

onde $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$ são os dados observados.

Escrevendo na forma matricial temos

$$\begin{matrix} & X & & \beta = y \\ \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{n_0} & x_{n_0}^2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & x_{n_0+1} & x_{n_0+1}^2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & x_{n_0+2} & x_{n_0+2}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & x_N & x_N^2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \dots \\ c_2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_{n_0} \\ \dots \\ y_{n_0+1} \\ \dots \\ y_{n_0+2} \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix} \end{matrix}$$

e as restrições ficam,

$$\begin{matrix} & R & & \beta = 0 \\ \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & -1 & -x_0 & -x_0^2 \\ 0 & 1 & 2x_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2x_0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

A solução de quadrados mínimos para o vetor dos parâmetros (ou incógnitas)

$$\hat{\beta}' = [a_1 \ b_1 \ c_1 \ a_2 \ b_2 \ c_2]$$

é a que minimiza a função de β

$$(\underline{y} - \underline{X}\underline{\beta})' (\underline{y} - \underline{X}\underline{\beta})$$

sujeita à condição $R\underline{\beta} = 0$. Estamos, portanto, nas condições do Teorema de Markoff com restrição sobre os parâmetros, cuja solução será a que satisfaz a equação matricial.

$$\begin{bmatrix} \underline{X}'\underline{X} & R' \\ R & \phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\underline{\beta}} \\ \hat{\underline{\lambda}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{X}'\underline{y} \\ \underline{r} \end{bmatrix}$$

No caso presente teremos

n_0	n_0	n_0	0	0	0	1	0	0	\hat{a}_1	n_0
$\sum_1 x_i$	$\sum_1 x_i^2$	$\sum_1 x_i^3$	0	0	0	x_0	1	0	\hat{b}_1	$\sum_1 y_i$
$\sum_1 x_i^2$	$\sum_1 x_i^3$	$\sum_1 x_i^4$	0	0	0	x_0^2	$2x_0$	0	\hat{c}_1	$\sum_1 y_i x_i^2$
0	0	0	n_1	$\sum x_i$	$\sum x_i^2$	-1	0	0	\hat{a}_2	$\sum y_i$
0	0	0	$\sum x_i$	$\sum x_i^2$	$\sum x_i^3$	$-x_0$	0	1	\hat{b}_2	$\sum y_i x_i$
0	0	0	$\sum x_i^2$	$\sum x_i^3$	$\sum x_i^4$	$-x_0^2$	0	$2x_0$	\hat{c}_2	$\sum y_i x_i^2$
1	x_0	x_0^2	-1	$-x_0$	$-x_0^2$	0	0	0	$\hat{\lambda}_1$	0
0	1	$2x_0$	0	0	0	0	0	0	$\hat{\lambda}_2$	0
0	0	0	0	1	$2x_0$	0	0	0	$\hat{\lambda}_3$	0

A solução desse sistema de equações lineares resolverá o nosso problema.

Caso II - Justaposição num ponto qualquer.

No caso presente, teremos as restrições

Continuidade: $a_1 + b_1 x_0 + c_1 x_0^2 = a_2 + b_2 x_0 + c_2 x_0^2$

Derivabilidade: $b_1 + 2c_1 x_0 = b_2 + 2c_2 x_0$

Ou ainda,

1. $a_1 + b_1 x_0 + c_1 x_0^2 - a_2 - b_2 x_0 - c_2 x_0^2 = 0$

2. $b_1 + 2c_1 x_0 - b_2 - 2c_2 x_0 = 0$

A solução desse segundo caso é análoga ao primeiro, com a única diferença aparecendo na matriz, R, que fica

$$R = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & -1 & -x_0 & -x_0^2 \\ 0 & 1 & 2x_0 & 0 & -1 & -2x_0 \end{bmatrix}$$

ou seja, a primeira linha fica inalterada e a segunda é a diferença entre a segunda e terceira do caso I, o mesmo acontecendo com as colunas.

Dose econômica. Consideremos w o preço unitário do produto (y), e t o preço unitário do nutriente (x) e m o custo fixo, independente de x . A renda líquida será sempre $wy - tx - m$.

Caso I

$$wy - tx - m = \begin{cases} w(a_1 + b_1x + c_1x^2) - tx - m, & x < x_0 \\ w(a_2 + b_2x + c_2x^2) - tx - m, & x > x_0 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} wa_1 + (wb_1 - t)x + wc_1x^2 - m, & x < x_0 \\ wa_2 + (wb_2 - t)x + wc_2x^2 - m, & x > x_0 \end{cases}$$

Derivando, obtemos

$$(wy - tx - m)' = \begin{cases} wb_1 - t + 2wc_1x & \text{se } x < x_0 \\ wb_2 - t + 2wc_2x & \text{se } x > x_0 \end{cases}$$

Igualemos a zero para achar a renda líquida máxima. Para $x < x_0$, obtemos a dose econômica (x^*)

$$x^* = \frac{\frac{t}{w} - b_1}{2c_1} = \frac{t}{2wc_1} + x_0$$

pois x_0 é ponto de máximo por hipótese. Como $c_1 < 0$, então vemos que $x^* < x_0$. Considerando que $c_2 < 0$, vemos que a solução acima é a pedida no problema.

Caso II. Neste caso, x_0 não é necessariamente ponto de máximo. Obtemos, por processo análogo ao anterior,

$$x_1^* = \frac{\frac{t}{w} - b_1}{2c_1} \quad \text{e} \quad x_2^* = \frac{\frac{t}{w} - b_2}{2c_2}$$

e a dose econômica será uma das duas expressões, seguindo o seguinte critério: Se

$x^* = x_1^*$ se x_1^* e x_2^* forem menores ou iguais a x_0

$x^* = x_2^*$ se x_1^* e x_2^* forem maiores que x_0 .

Podemos facilmente verificar que os critérios acima são exaustivos e mutuamente exclusivos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Aplicação em ensaios de adubação

Tomemos $x_0 = 100$ como ponto de justaposição das curvas, decorrendo $z_0 = 0$. Admitamos o Caso II como modelo, donde, usando as variáveis codificadas z e os dados da Tabela 1,

$$\begin{bmatrix} Z'Z & R' \\ R & \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & -3 & 5 & 0 & 0 & 0 & . & 1 & 0 \\ -3 & 5 & -9 & 0 & 0 & 0 & . & 0 & 1 \\ 5 & -9 & 17 & 0 & 0 & 0 & . & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 10 & 30 & . & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10 & 30 & 100 & . & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 30 & 100 & 354 & . & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & . & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & . & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z' y \\ \tilde{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 148,5 \\ -116,1 \\ 176,1 \\ 245,2 \\ 596,8 \\ 1753,2 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

TABELA 1. Dados adaptados de um experimento de adubação com K_2O em cana-de-açúcar.

x (kg/ha)	z ($x-100$) 50	y (t/ha)	\hat{y} (t/ha) (1)	\hat{y}_q
0	-2	30,0	30,3	34,2
50	-1	56,1	54,6	50,0
$x_0 = 100$	$z_0 = 0$	62,4	63,9	60,8
150	1	65,0	64,9	66,4
200	2	64,0	63,8	67,0
250	3	61,0	60,6	62,4
300	4	55,2	55,6	52,9
		393,7	393,7	393,7

Resolvendo o sistema de equações, obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{a}_1 &= 64,0 & \hat{a}_2 &= 64 \\ \hat{b}_1 &= 1,827 & \hat{b}_2 &= 1,827 \\ \hat{c}_1 &= -7,5 & \hat{c}_2 &= -0,988 \end{aligned}$$

O modelo estimado fica

$$\begin{aligned} \hat{y} &= 64 + 1,827 z - 7,5 z^2 & \text{para } z \leq 0 \\ \hat{y} &= 64 + 1,827 z - 0,988 z^2 & \text{para } z > 0 \end{aligned}$$

Em termos da variável original x, temos

$$\begin{aligned} \hat{y} &= 30,346 + 0,636 x - 0,003 x^2 & \text{para } x \leq 100 \\ \hat{y} &= 56,394 + 0,116 - 0,0003952 x^2 & \text{para } x > 100 \end{aligned}$$

onde,

$$x^* = x_1^* = \frac{\frac{t}{w} - 0,636}{-0,006} = 106 - 166,7 \frac{t}{w} \quad \text{se } x_1^* \text{ e } x_2^* \leq 100$$

$$x^* = x_2^* = \frac{\frac{t}{w} - 0,116}{-0,0007904} = 146,8 - 1265,2 \frac{t}{w} \quad \text{se } x_1^* \text{ e } x_2^* > 100$$

Adaptação do trinômio

Se o modelo fosse quadrático puro, ou seja,
 $y = a + bx + cx^2$

obteríamos do sistema $X'X\hat{\beta} = X'y$ irrestrito,

$$\begin{bmatrix} 7 & 7 & 35 \\ 7 & 35 & 91 \\ 35 & 91 & 371 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \\ \hat{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 393,7 \\ 480,7 \\ 1929,3 \end{bmatrix}$$

a solução $\hat{y}_q = 60,75 + 8,183 z - 2,538 z^2$

TABELA 2. Variação da dose econômica em função de $\frac{t}{w}$ (relação: $\frac{\text{preço adubo}}{\text{preço produto}}$).

$\frac{t}{w}$	x_1^*	x_2^*	x^*	x_q^*
0,000	106,0	146,8	146,8	183,5
0,005	105,2	140,8	140,8	181,0
0,010	104,3	134,1	134,1	178,5
0,015	103,5	127,8	127,8	176,0
0,020	102,7	121,5	121,5	173,5

obtendo a última coluna da Tabela 1. Em termos da variável original x, obtemos

$$\hat{y}_q = 34,232 + 0,367 x - 0,001 x^2$$

e a dose econômica x_q^* na Tabela 2,

$$x_q^* = \frac{\frac{t}{w} - 0,367}{-0,002} = 183,5 - 500 \frac{t}{w}$$

Da análise das Tabelas 1 e 2, observemos a importância da escolha do modelo adequado. O modelo restrito é melhor em todos os sentidos e levando inclusive à recomendação de menos adubo do que se poderia esperar pelo trinômio do 2º grau apenas.

Vemos, também, a importância de, em ensaios com adubação, experimentarmos doses maciças de nutrientes, pois isso provoca uma estimação muito mais precisa do modelo, em especial nos extremos.

EXEMPLO

Aos preços do 2º semestre de 1980, $t =$ Cr\$ 26,00/kg K_2O e $w =$ Cr\$ 580,00/t de cana, obteremos

$$\begin{aligned} x_1^* &= 106 - 166,7 (0,0448) = 98,5 \text{ kg/ha} \\ x_2^* &= 146,8 - 1265,2 (0,0448) = 90,1 \text{ kg/ha} \end{aligned}$$

$x^* = 98,5 \text{ kg/ha}$

Como ambas são menores que $x_0 = 100 \text{ kg/ha}$, recomendamos 98,5 kg/ha de K_2O como dose economicamente aconselhável. Na verdade, o cálculo de x_2^* é sempre desnecessário, visto que não é possível x_1^* e x_2^* estarem em lados distintos relativamente ao ponto x_0 .

TABELA 2. Continuação.

$\frac{t}{w}$	x_1^*	x_2^*	x^*	x_q^*
0,025	101,8	115,2	115,2	171,0
0,030	101,0	108,8	108,8	168,5
0,035	100,2	102,5	102,5	166,0
.....				
0,040	99,3	96,2	99,3	163,5
0,045	98,5	89,9	98,5	161,0
0,050	97,7	83,5	97,7	158,5
0,055	96,8	77,2	96,8	156,0
0,060	96,0	70,9	96,0	153,5
0,065	95,2	64,6	95,2	151,0
0,070	94,3	58,2	94,2	148,5
0,075	93,5	51,9	93,5	146,0
0,080	92,7	45,6	92,7	143,5
0,085	91,8	39,2	91,8	141,0
0,090	91,0	32,9	91,0	138,5
0,095	90,2	26,6	90,2	136,0
0,100	89,3	20,3	89,3	133,5
0,105	88,5	14,0	88,5	131,0
0,110	87,7	7,6	87,7	128,5
0,115	86,8	1,3	86,8	126,0
0,120	86,0	- 5,0	86,0	123,5

CONCLUSÃO

Os modelos apresentados mantêm a simplicidade do trinômio, inclusive no cálculo da dose economicamente aconselhável, aumentando, contudo, a flexibilidade para uma adaptação mais perfeita a dados observados.

Um problema de cálculo numérico que surge é a estimação de x_0 , quando não se conhece o ponto de justaposição. Uma proposta razoável é a de tentativas sucessivas e orientadas para uma minimização de SQR (β, λ).

Outro tópico interessante é a introdução de

uma estrutura estocástica para y e seu reflexo na distribuição da dose economicamente aconselhável x^* .

REFERÊNCIAS

- FULLER, W.A. Grafted polynomials as approximating functions. *Aust. J. Agric. Econ.*, 6:35-46, 1969.
- GALLANT, R. Estimation on restricted linear models. Raleigh, EUA, NCSU, 1974. (Tech. Bull.).
- RAO, C.R. Linear statistical inference and its applications. New York, John Wiley, 1973.
- RAO, C.R. Maskoff's theorem with linear restrictions on parameters. *Sankhya*, 7:16-9, 1945.