

**Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”**

**Polinômios fracionários e planejamento de Littell e Mott em ensaios de
nutrição mineral de plantas**

Mateus Ormondes de Magalhães

Dissertação apresentada para obtenção do título de
Mestre em Ciências. Área de concentração: Estatística e Experimentação Agronômica

**Piracicaba
2023**

Mateus Ormondes de Magalhães
Bacharel em Estatística

**Polinômios fracionários e planejamento de Littell e Mott em ensaios de
nutrição mineral de plantas**

versão revisada de acordo com a Resolução CoPGr 6018 de 2011

Orientador:

Prof. Dr. **SILVIO SANDOVAL ZOCCHI**

Dissertação apresentada para obtenção do título de
Mestre em Ciências. Área de concentração: Estatística e Experimentação Agronômica

Piracicaba
2023

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
DIVISÃO DE BIBLIOTECA - DIBD/ESALQ/USP**

Magalhães, Mateus Ormondes

Polinômios fracionários e planejamento de Littell e Mott em ensaios de nutrição mineral de plantas / Mateus Ormondes Magalhães. -- versão revista de acordo com a resolução CoPGr 6018 de 2011 -- Piracicaba, 2023 .

63 p.

Dissertação (Mestrado) -- USP / Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz".

1. Modelos de regressão 2. Fertilidade do solo 3. Produtividade 4.
Panicum maximum . I. Título.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por ter me cuidado e me sustentado nessa caminhada, estando sempre ao meu lado.

Aos meus pais Marcondes Leite de Magalhães e Nilva Maria Ormondes de Magalhães por todo apoio e incentivo brindado para que eu estivesse aqui.

Aos meus irmãos André Felipe Ormondes de Magalhães, Ester Ormondes de Magalhães por sempre me incentivar nos meus objetivos.

Ao Prof. Dr. Silvio Sandoval Zocchi por todo apoio, confiança, paciência, orientação e amizade ao longo do trabalho.

Ao Prof. Dr. José Lavres Junior por disponibilizar o conjunto de dados utilizados neste trabalho.

À Prof. Dr. Renata Alcarde Sermarini pelo apoio, confiança e motivação durante o curso de mestrado.

Aos demais professores do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agronômica (PPGEEA) pela amizade e conhecimento passados.

À Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” e a Universidade de São Paulo pelo suporte e estrutura acadêmica, zelo por seus alunos e materiais que auxiliariam na realização deste trabalho.

Aos funcionários do Departamento de Ciência Exatas (LCE/ESALQ) pelo auxílio, atenção, disponibilidade e amizade.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES), pela disponibilidade de bolsa de estudos, que permitiu a condução e execução deste trabalho.

Agradeço a todos amigos e colegas que de forma direta ou indireta me ajudaram durante todo o processo.

EPÍGRAFE

*“Aqueles que passam por nós não vão sós.
Deixam um pouco de si, levam um pouco de nós.”
(Antoine de Saint-Exupéry)*

SUMÁRIO

RESUMO	6
ABSTRACT	7
LISTA DE FIGURAS	8
LISTA DE TABELAS	10
1 INTRODUÇÃO	11
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	13
3 MATERIAIS E MÉTODOS	27
3.1 Materiais. Dados de um ensaio de adubação NK em capim-mombaça . . .	27
3.2 Métodos	31
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES	43
4.1 Produção de massa seca da parte aérea	44
4.2 Produção de massa seca da raiz	48
4.3 Estimativa do teor de clorofila	51
4.4 Considerações gerais	52
5 CONCLUSÕES	57
REFERÊNCIAS	59
ANEXOS	63

RESUMO

Polinômios fracionários e planejamento de Littell e Mott em ensaios de nutrição mineral de plantas

As plantas forrageiras desempenham um papel importante na alimentação dos animais de produção e na economia para os produtores. Elas fornecem nutrientes essenciais aos animais e têm boas capacidades de rebrota e adaptação. A produção dessas plantas está diretamente relacionada com a fertilidade do solo, com destaque para dois nutrientes: nitrogênio e o potássio. Para maximizar a produtividade e otimizar o uso dos fertilizantes, são realizados ensaios de adubação para determinar as doses mais eficientes. Nesses ensaios, utiliza-se o esquema fatorial 5^k incompleto de Littell e Mott (1975). Para as análises estatísticas de um conjunto de dados provenientes de ensaios adubação com dois nutrientes, erroneamente, utilizam os modelos polinomiais de primeira e segunda ordem, pois estes modelos, frequentemente, apresentam falta de ajuste devido ao comportamento do crescimento das plantas ao serem submetidas às doses desses nutrientes. Uma alternativa são os polinômios fracionários proposto por Royston e Altman (1994), como sendo uma classe mais geral dos modelos de regressão. Neste trabalho, propomos então uma abordagem mais geral desses polinômios, tanto para o ajuste quanto para a seleção dos modelos. A metodologia foi implementada utilizando a interface Rstudio (R Core Team, 2022) e ilustrada através de um conjunto de dados de um ensaio de adubação envolvendo cinco doses distintas de nitrogênio e potássio em plantas de *Panicum maximum* Jacq. cv. Mombaça. As análises mostraram que os modelos de polinômios fracionários, oferecem diversas vantagens em relação aos modelos polinomiais, dentre elas, maior flexibilidade dos modelos para obter um modelo adequado para dados de crescimento vegetal e determinar as doses que otimizam a produção dos vegetais, em especial, neste caso, para plantas forrageiras.

Palavras-chave: Modelos de regressão, Fertilidade do solo, Produtividade, *Panicum maximum*

ABSTRACT

Fractional polynomials and Littell and Mott design in plant mineral nutrition assays

Forage plants play an important role in feeding livestock and in the economy for producers. They provide essential nutrients to animals and have good regrowth and adaptation capabilities. The production of these plants is directly related to soil fertility, with emphasis on two nutrients: nitrogen and potassium. To maximize productivity and optimize the use of fertilizers, fertilizer trials are carried out to determine the most efficient doses. In these essays, the incomplete factorial scheme 5^k from Littell e Mott (1975) is used. For the statistical analyzes of a set of data from trials of fertilization with two nutrients, they erroneously use first and second order polynomial models, as these models often present a lack of adjustment due to the behavior of plant growth when subjected to doses of these nutrients. An alternative is the fractional polynomials proposed by Royston e Altman (1994), as a more general class of regression models. In this work, we therefore propose a more general approach to these polynomials, both for the adjustment and for the selection of models. The methodology was implemented using the Rstudio (R Core Team, 2022) interface and illustrated through a set of data from a fertilization trial involving five different doses of nitrogen and potassium in *Panicum maximum* Jacq plants. cv. Mombasa. The analyzes showed that the fractional polynomial models offer several advantages in relation to the polynomial models, among them, greater flexibility of the models to obtain an adequate model for plant growth data and to determine the doses that optimize the production of plants, in particular, in this case, for forage plants.

Keywords: Regression models, Soil fertility, Productivity, *Panicum maximum*

LISTA DE FIGURAS

1	Esquema fatorial 2^k completos para $k = 2$ fatores (à esquerda) e $k = 3$ fatores (à direita).	14
2	Esquema fatorial 3^k completos para $k = 2$ fatores (à esquerda) e $k = 3$ fatores (à direita).	15
3	Delineamento composto central para $k = 2$ fatores (à esquerda) e $k = 3$ fatores (à direita).	15
4	Esquema fatorial 5^k incompleto, de Littell e Mott (1975), para $k = 2$ fatores (à esquerda) e $k = 3$ fatores (à direita).	16
5	Curvas de um modelo FP2 com potências (a) $\mathbf{p} = \{-2, 1\}$, (b) $\mathbf{p} = \{-2, -0.5\}$, (c) $\mathbf{p} = \{0, 3\}$ e (d) $\mathbf{p} = \{-2, -2\}$. Para cada curva foram especificados distintos valores de β (REGIER; PARKER, 2015).	19
6	Gráficos das funções de polinômios fracionários, $\phi_1(X)$ e $\phi_2(X)$, diversos valores das potências p e diferentes coeficientes de β	21
7	Combinações das doses de nitrogênio (N) e potássio (K), em mgL^{-1} , utilizadas no experimento com capim-mombaça conduzido por Lavres Junior (2001).	27
8	Combinações dos níveis dos fatores, X_1 e X_2 , para um esquema fatorial 5^2 incompleto de Littell e Mott (1975).	32
9	Gráfico de envelope simulado do modelo FP2 para a variável resposta peso de massa seca da parte aérea.	45
10	Superfície de resposta da produção de massa seca da parte aérea do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1}	46
11	Curvas de nível da produção de massa seca da parte aérea do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1}	47
12	Gráfico de envelope simulado do modelo FP2 para a variável resposta peso de massa seca da raiz.	49
13	Superfície de resposta da produção de massa seca da raiz do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1}	49
14	Curvas de nível da produção de massa seca da raiz do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1}	50
15	Gráfico de envelope simulado do modelo FP2 para a variável resposta estimativa do teor de clorofila.	52
16	Superfície de resposta da estimativa do teor de clorofila do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1}	53
17	Curvas de nível da estimativa do teor de clorofila do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1}	54

18	Sobreposição das Curvas de nível da produção de massa seca da parte aérea (linhas pretas), produção de massa seca da raiz (linhas azuis) e estimativa do teor de clorofila (linhas vermelhas), segundo as doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1}	55
----	--	----

LISTA DE TABELAS

1	Combinções de potências considerando os modelos FP1 e FP2 para apenas uma variável regressora.	20
2	Exemplos de funções para os modelos FP com $m = 1,2$	20
3	Produções de massa seca da parte aérea, em gramas por vaso, segundo o bloco e as doses de nitrogênio, N , e potássio, K , em mgL^{-1}	29
4	Produções de massa seca da raiz, em gramas por vaso, segundo o bloco e as doses de nitrogênio, N , e potássio, K , em mgL^{-1}	29
5	Estimativas do teores de clorofila, em unidade SPAD por vaso, segundo o bloco e as doses de nitrogênio, N , e potássio, K , em mgL^{-1}	30
6	Observações de uma variável Y num ensaio de adubação com 2 nutrientes, cujas doses utilizadas, X_1 e X_2 , com 5 níveis cada, seguem o esquema fatorial 5^2 incompleto de Littell e Mott (1975) com total de 13 tratamentos (Trat.), casualizados em b blocos completos.	31
7	Tabela da Análise de Variância - ANOVA	38
8	Médias de massa seca da parte aérea, em g, segundo as doses dos nutrientes N e K , em mg.L^{-1}	43
9	Médias de massa seca das raízes, em g, segundo as doses dos nutrientes N e K , em mg.L^{-1}	43
10	Médias de teor de clorofila, em unidades SPAD, segundo as doses dos nutrientes N e K , em mg.L^{-1}	43
11	Possíveis funções de modelo com duas variáveis regressoras, considerando os modelos polinomiais e com polinômios fracionários, com e sem a interação entre as variáveis.	44
12	Valores de AIC e p-valor dos testes para falta de ajuste e pressuposições dos modelos com interação.	45
13	Valores de AIC e p-valor dos testes para falta de ajuste e pressuposições dos modelos com interação.	48
14	Valores de AIC e p-valor dos testes para falta de ajuste e pressuposições dos modelos com interação.	51

1 INTRODUÇÃO

As plantas forrageiras são aquelas cultivadas especificamente como fonte de alimentos para animais de produção, como bovinos, ovinos e caprinos, podendo ser consumida na forma de pastagem ou depois de colhida, como o feno. Essas plantas possuem alta capacidade de produção de biomassa e nutrientes, sendo ricas em carboidratos, proteínas, vitaminas e minerais que atendem as necessidades nutricionais dos animais. Além disso, podem apresentar baixo custo de produção em relação a outros tipos de alimentos, como rações e suplementos.

No Brasil, os gêneros das plantas forrageiras mais utilizadas na pecuária são: *Brachiaria*, com destaque para as espécies *B. decumbens* e *B. brizantha*; *Panicum*, cuja principal espécie é a *P. maximum*; *Cynodon*, em especial a *C. dactylon*, conhecida popularmente como capim-bermuda e *Pennisetum*, destacando a espécie *P. purpureum*, conhecida como capim-elefante (JANK et al., 2014). Dentre as espécies citadas, destaca-se o capim-mombaça (*Panicum maximum* Jacq. cv. Mombaça) que se desenvolve principalmente em regiões tropicais, possui alta produtividade e boa qualidade nutricional. Possui, ainda, uma boa relação folha/colmo, porte elevado, bom perfilhamento, resistência à cigarrinha-das-pastagens e boas capacidades de rebrota e de adaptação (CANTO et al., 2012; EMBRAPA, 2023) e produtividade elevada, aproximadamente 33 toneladas de massa seca foliar/ha/ano com 13,4% de proteína (SALES; VALENTIM; ANDRADE, 2002).

O desempenho e qualidade do capim-mombaça, no entanto, estão diretamente associados à fertilidade do solo, sendo que os nutrientes nitrogênio e potássio estão entre os mais importantes, pois de acordo com Lavres Junior (2001) e Taiz et al. (2015) são os mais exigidos para o desenvolvimento dos vegetais. Por outro lado, sabe-se pela lei do máximo, que uma quantidade excessiva de nutrientes pode provocar a toxicidade das plantas e, conseqüentemente, o decaimento da produtividade (SILVA et al., 2021). Portanto, é de suma importância quantificá-los corretamente de modo a não haver desperdício de insumos e maximizar a produtividade (FERREIRA; ZOCCHI; BARON, 2017).

Com esse objetivo em mente, frequentemente são conduzidos ensaios de adubação envolvendo 2 ou 3 nutrientes. Nesses ensaios, as diferentes combinações das doses dos nutrientes, ou tratamentos, usualmente seguem os esquemas fatoriais 3^k , em que k é o número de nutrientes, ou de Box-Behnken e casualizados em blocos. Como uma alternativa, Littell e Mott (1975) apresentaram o esquema fatorial 5^k incompleto, na qual cada um dos k nutrientes possui cinco níveis diferentes. Este esquema fatorial permite verificar de modo mais eficiente se há falta de ajuste do modelo considerado e, por esse motivo, têm sido muito utilizado nas duas últimas décadas por inúmeros pesquisadores como Lavres Junior (2001), Bonfim-Silva e Monteiro (2010), Megda e Monteiro (2015) e Garrone et al. (2016), dentre outros.

Uma vez obtidos os resultados do ensaio de adubação, isto é, as observações da(s) variável(is) de interesse, o passo seguinte é o ajuste do modelo matemático que relacionará essas variáveis com as doses dos nutrientes considerados. Para esse fim, convencionalmente são utilizados os modelos polinomiais de primeira e segunda ordem (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016) que, no entanto, frequentemente não se ajustam bem aos dados e, por consequência, ter informações imprecisas e não confiáveis.

Como alternativa para estes modelos, Royston e Altman (1994), baseando-se no trabalho dos autores Box e Tidwell (1962), apresentaram os modelos com polinômios fracionários (*fractional polynomials - FP*), em que, de modo simplificado, as variáveis regressoras em cada um dos termos do modelo polinomial podem ser transformadas por valores pertencentes a um determinado conjunto. Posteriormente, inspirados no polinômios fracionários, Gilmour e Trinca (2005), de modo a produzir modelos de interpretação mais simples, porém ainda mais flexível que modelos polinomiais, sugeriram os modelos com polinômio fracionários de primeira e segunda ordem. Diferente da metodologia apresentada por Royston e Altman (1994), em que os modelos não possuem uma estrutura estabelecida, os modelos com polinômio fracionário de primeira e segunda ordem, propostos por Gilmour e Trinca (2005), assumem estruturas como dos modelos polinomiais de primeira e segunda ordem.

Neste trabalho, propomos a utilização de uma abordagem mais geral do que as utilizadas pelos autores Royston e Altman (1994), Gilmour e Trinca (2005), diferindo destas metodologias, o procedimento de ajuste e a seleção do modelo que se ajusta bem aos dados. A metodologia proposta neste trabalho, visa apresentar alternativas de abordagem a serem empregadas quando os modelos polinomiais convencionalmente utilizados apresentarem falta de ajuste, em especial, para análise dos dados de um ensaio de adubação cujas combinações das doses dos nutrientes seguem o planejamento de Littell e Mott (1975). Como ilustração da metodologia desenvolvida, analisamos os resultados de um experimento conduzido em Piracicaba por Lavres Junior (2001) com a espécie forrageira *Panicum maximum* Jacq. cultivar Mombaça.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A metodologia de superfícies de resposta (MSR), frequentemente utilizada para o planejamento e análise de ensaios de adubação, é um conjunto de técnicas matemáticas e estatísticas que têm o objetivo geral de construir e selecionar modelos que forneçam informações precisas e confiáveis a respeito do comportamento entre a variável resposta e pelo menos duas variáveis regressoras numa determinada região experimental (KHURI, 2017). Portanto, com base nas funções ajustadas, busca-se dentro da região experimental as condições que otimizam a variável resposta.

Os primórdios dessa metodologia surgiram ainda no século XIX, porém ela começou a ser aprimorada somente após o trabalho realizado por Box e Wilson (1951), no qual os autores desenvolveram a metodologia para a otimização de processos industriais. Nos anos seguintes houve uma grande contribuição dos autores Box e Hunter (1957) e Box e Draper (1959) no que diz respeito ao planejamento dos experimentos.

Segundo Khuri (2017), como característica básica da metodologia, tem-se que a sua natureza é sequencial. Isto é, são realizados experimentos iniciais para a seleção dos fatores e outros subsequentes com objetivo de otimização das variáveis de interesse. Esta é uma abordagem ideal para o ambiente industrial, uma vez que o erro experimental é geralmente pequeno e se podem obter os resultados em curtos períodos de tempo. No entanto, de acordo com Edmondson (1991), o tempo de obtenção dos resultados nos experimentos agrônômicos podem durar um ano ou mais, podendo haver a necessidade da utilização de delineamentos experimentais mais complexos que os utilizados para a indústria. Além disso, segundo o autor, o formato da superfície de resposta pode ser mais complexo do que o dado por um modelo polinomial de segunda ordem, padrão da metodologia. Sugere, assim, que seja sempre realizado o teste da falta de ajuste do modelo considerado.

De modo geral, a metodologia é dividida em duas etapas, sendo que a primeira consiste na escolha do planejamento do experimento e a segunda, a função que irá descrever, pelo menos aproximadamente, a relação entre a resposta e as variáveis regressoras (HILL; HUNTER, 1966; MEAD; PIKE, 1975), em geral os modelos polinomial de primeira ou de segunda ordem (KHURI; CORNELL, 1996; KHURI, 2017).

O planejamento do experimento envolvendo k fatores, por sua vez, consiste na definição da região experimental, na escolha dos níveis dos fatores e de suas combinações, ou tratamentos, e no modo de atribuição dos mesmos às unidades experimentais. Estes podem, por exemplo, ser atribuídos inteiramente ao acaso, casualizados em blocos, em parcelas subdivididas, em quadrados latinos ou de formas menos convencionais.

Sem perda de generalidades, deste ponto em diante, a palavra planejamento será considerada sem dar destaque à forma de atribuição dos tratamentos às unidades experimentais. Assim, de modo mais detalhado, os planejamentos associados à MSR são

divididos em dois principais grupos (HILL; HUNTER, 1966). O primeiro inclui os voltados para o ajuste de modelos polinomiais de primeira ordem, sendo os principais o esquema fatorial 2^k e suas frações. O segundo, por sua vez, inclui os planejamentos em que há o interesse no ajuste dos modelos de segunda ordem, como o fatorial 3^k e frações, o composto central (DCC) e o de Box-Behnken (KHURI; CORNELL, 1996; KHURI, 2017). Para a área de nutrição mineral de plantas, em especial, um planejamento a ser considerado é o esquema fatorial 5^k incompleto proposto por Littell e Mott (1975).

A título de ilustração, serão apresentados, a seguir, para $k = 2$ e 3 fatores, as estruturas dos planejamentos 2^k e 3^k completos, composto central e 5^k incompleto de Littell e Mott (1975), convencionando-se que os níveis dos fatores codificados do menor para o maior, serão representados por $-2, -1, 0, 1$ e 2 , respectivamente. A codificação dos fatores pode ser obtido por meio da seguinte expressão (KHURI; CORNELL, 1996)

$$x_i = \frac{X_i - \bar{X}_i}{\Delta X_i},$$

em que $\bar{X}_i = [\text{máx}(X_i) + \text{mín}(X_i)]/2$ e $\Delta X_i = [\text{máx}(X_i) - \text{mín}(X_i)]/2$, sendo X_i a i -ésima variável regressora.

Os fatoriais 2^k têm seus pontos dado por -1 e 1 , sendo respectivamente o nível baixo e alto de cada um dos fatores (Figura 1), sendo comumente utilizados na indústria numa fase de seleção inicial de fatores importantes para uma posterior realização de experimentos complementares. Entretanto, como ressaltado por Edmondson (1991), tal estratégia sequencial pode não ser adequada para experimentos agrônômicos como os de adubação.

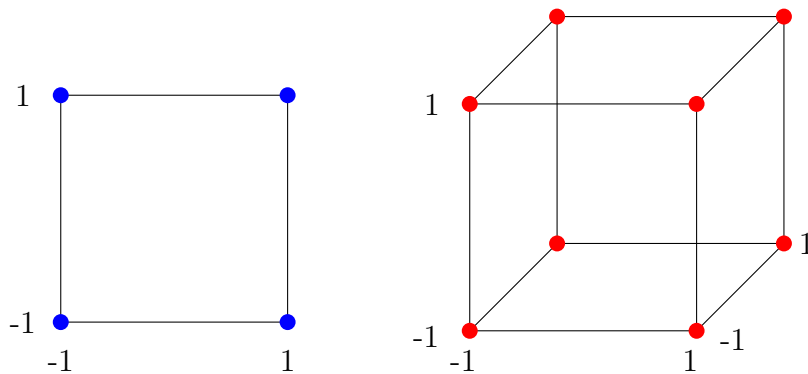


Figura 1. Esquema fatorial 2^k completos para $k = 2$ fatores (à esquerda) e $k = 3$ fatores (à direita).

Os fatoriais completos 3^k , que têm seus pontos dado por $-1, 0$ e 1 , sendo respectivamente o nível baixo, intermediário e alto de cada um dos fatores (Figura 2). Este esquema pode, por outro lado, serem utilizados para o ajuste de modelos polinomiais de segunda ordem e quando se consideram regiões experimentais hipercúbicas. No entanto, podem não ser os mais indicados quando a região é hiper esférica, podendo, ainda, não ser os mais eficientes para a estimação dos parâmetros do modelo (MONTGOMERY, 2012).

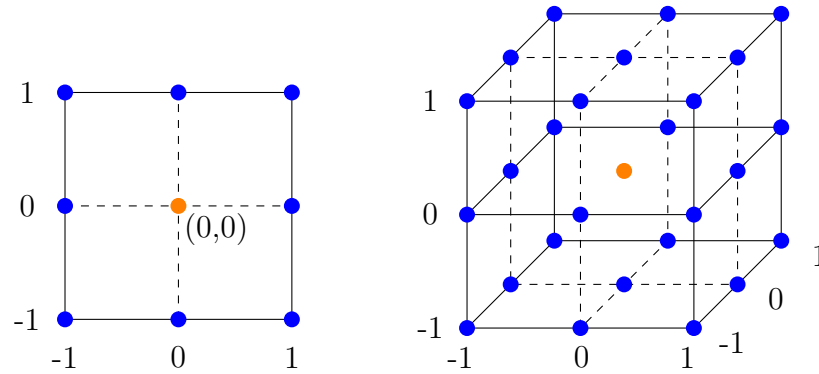


Figura 2. Esquema fatorial 3^k completos para $k = 2$ fatores (à esquerda) e $k = 3$ fatores (à direita).

Assim, como alternativa, Box e Wilson (1951) apresentaram o planejamento (ou delineamento) composto central, que é composto de três partes: um fatorial 2^k completo ou uma fração, pontos centrais e pontos axiais. Para $k = 2$, por exemplo, -1 e 1 são os pontos fatoriais, $(0, 0)$ é o ponto central e $(-\alpha, 0)$, $(+\alpha, 0)$, $(0, -\alpha)$, $(0, +\alpha)$ são os pontos axiais, em que $\alpha > 0$ (KHURI; CORNELL, 1996; MONTGOMERY, 2012) (Figura 3). Sendo que o valor de α , geralmente, é obtido por $\alpha = \sqrt[4]{2^k}$, conferindo ao delineamento a propriedade de ser rotacional (KHURI; CORNELL, 1996). A rotacionalidade, garante que a variância do valor predito permanecerá constante para um determinado raio fixo (CONAGIN, 1982; KHURI, 2017).

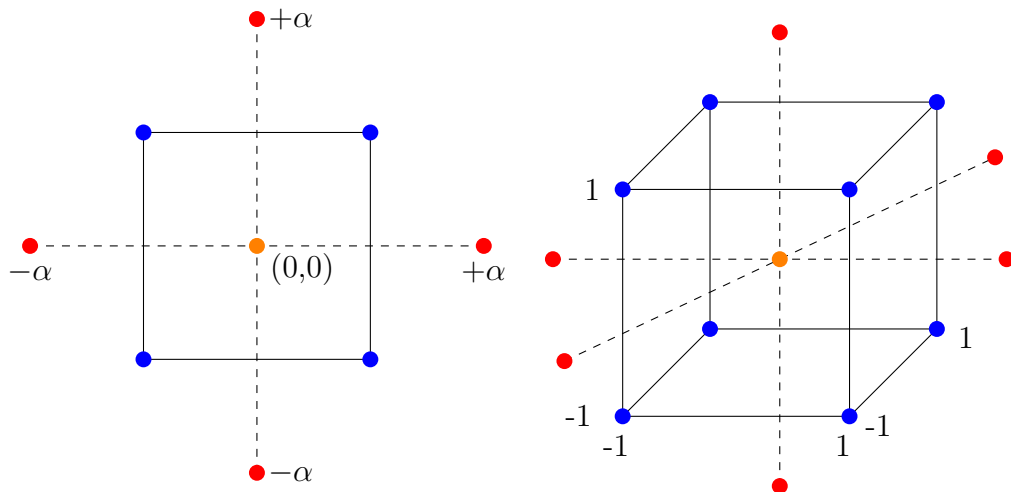


Figura 3. Delineamento composto central para $k = 2$ fatores (à esquerda) e $k = 3$ fatores (à direita).

Convém ressaltar, entretanto, que os autores desenvolveram tal delineamento pensando em situações em que há escassez de unidades experimentais e pouca influência do ambiente sobre as respostas. Consideraram, ainda, a possibilidade de realizar o experimento em duas etapas distintas, inicialmente considerando a parte fatorial mais repetições do ponto central e, posteriormente, acrescentando os pontos axiais, como tam-

bém as repetições do ponto central. Mais uma vez, como já foi salientado, tal situação pode ser inadequada para ensaios de adubação.

Assim, de modo a atender às características típicas dos experimentos agrônômicos, Littell e Mott (1975) em trabalho desenvolvido em conjunto com os alunos de pós graduação da Universidade da Flórida, apresentaram o planejamento fatorial 5^k incompleto (Figura 4). Cada um dos fatores possuem 5 níveis distintos, denotados por $\{-2, -1, 0, 1, 2\}$, e por esse motivo a falta de ajuste do modelo considerado pode ser realizada com um maior número de graus de liberdade, o que, segundo Edmondson (1991), é altamente desejável.

Sob um outro ponto de vista, tal planejamento pode ser visto como um delineamento composto central com $\alpha = 2$ acrescido de 2^k pontos fatoriais, dado pelas combinações dos níveis -2 e 2 de cada um dos fatores, proporcionando assim uma maior cobertura da região experimental (PALADINES; LASCANO, 1993). Quanto ao número de pontos, o planejamento é composto por $t = 1 + 2^{k+1} + 2k$ pontos distintos, ou tratamentos, isto é, $t = 13$ para $k = 2$ fatores e $t = 23$ para $k = 3$ fatores.

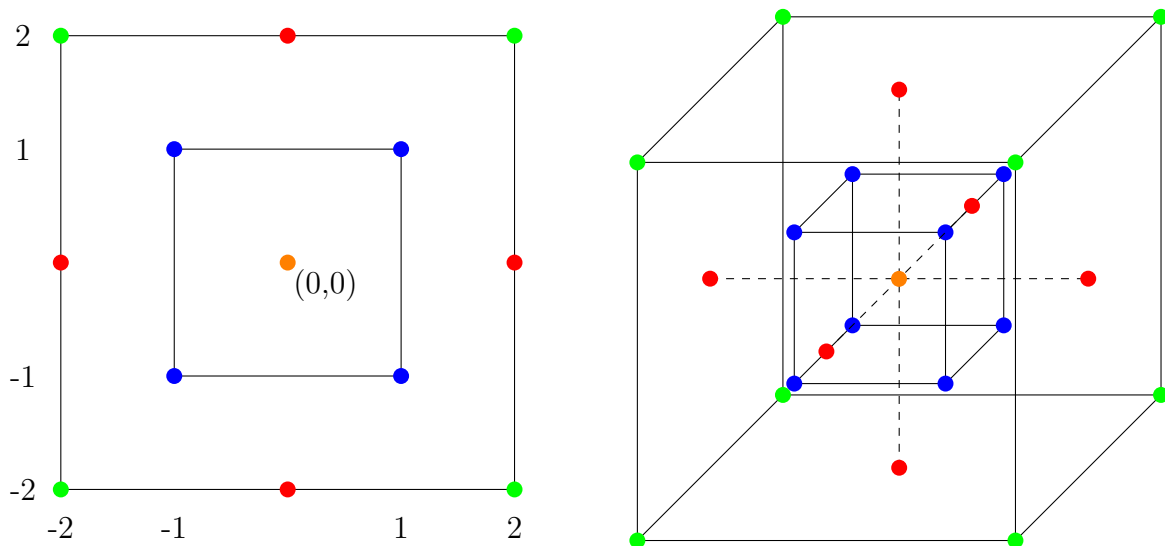


Figura 4. Esquema fatorial 5^k incompleto, de Littell e Mott (1975), para $k = 2$ fatores (à esquerda) e $k = 3$ fatores (à direita).

Na área de nutrição mineral de plantas, este planejamento vem sendo muito utilizado nas duas últimas décadas por diversos autores como Lavres Junior e Monteiro (2003), Bonfim-Silva, Monteiro e Silva (2007), Silveira e Monteiro (2010), Silveira e Monteiro (2011), Megda e Monteiro (2015), Silva et al. (2018), Silva et al. (2022), que realizaram diferentes ensaios para estudar a influência de diversos nutrientes, tais como o nitrogênio, potássio, cálcio e enxofre na fixação dos macronutrientes, nas características morfológicas e produtivas, como também, na qualidade da produção.

Uma vez especificado o planejamento do experimento, deve-se selecionar a função que irá descrever a relação entre a variável resposta e as variáveis regressoras envolvidas no experimento. Seja, assim, o modelo geral que relaciona as variáveis regressoras,

X_1, X_2, \dots, X_k , e a variável resposta, Y , pode ser descrito como sendo,

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_k; \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon$$

em que $f(\cdot)$ é uma função que relaciona Y com X_1, X_2, \dots, X_k , $\boldsymbol{\beta}$ é um vetor de parâmetros desconhecidos e ε é o erro aleatório com distribuição $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$, e $\sigma > 0$ é um parâmetro desconhecido (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016). Segundo Khuri (2017), os modelos polinomiais k fatores utilizados frequentemente são os modelos polinomiais de primeira e segunda ordem dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned} E(Y) &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i \\ E(Y) &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{q=i+1}^k \beta_{iq} X_i X_q \end{aligned}$$

em que $\beta_0, \beta_i, \beta_{ii}$ e β_{iq} , ($i = q = 1, 2, \dots, k$) são os parâmetros a serem estimados.

Estes modelos, entretanto, podem não ser adequados para ensaios de adubação, pois o ajuste desses modelos aos dados observados das variáveis respostas frequentemente revelam falta de ajuste.

Com o objetivo de obter funções com comportamento mais flexíveis, Royston e Altman (1994) apresentaram, então, os denominados polinômios fracionários (*fractional polynomials* - *FP*) como uma extensão dos modelos polinomiais. A metodologia proposta pelos autores realiza transformações nas variáveis regressoras, cujas transformações é proposta por Box e Tidwell (1962). As funções com polinômios fracionários diferem dos modelos polinomiais por permitirem logaritmos e potências não inteiras ou negativas, conferindo maior flexibilidade mesmo com poucos parâmetros. Por esse motivo, estes modelos têm sido amplamente utilizados em diversas áreas da estatística, como por exemplo, análise de regressão, modelos lineares generalizados, análise de sobrevivência e entre outros (GILMOUR; TRINCA, 2005; GARCIA, 2019).

A seguir será apresentado o modelo para um única variável regressora, X e, posteriormente, para várias.

Assim, considere que a variável resposta Y é descrita em função de apenas uma variável regressora, X , em que $X > 0$, e que m é um número inteiro positivo que expressa o grau do polinômio fracionário, denotado por FPm . Define-se a função generalizada de um FPm por

$$\phi_m(X) = \beta_0 + \sum_{s=1}^m \beta_s X^{(p_s)}, \quad (1)$$

em que β_0, β_s ($s = 1, \dots, m$) são os coeficientes de regressão desconhecidos, p_s ($s = 1, \dots, m$) são constantes reais, ou potências, e

$$X^{(p_s)} = \begin{cases} X^{p_s}, & \text{se } p_s \neq 0 \\ \ln(X), & \text{se } p_s = 0 \end{cases},$$

se $p_1 \neq p_2 \neq \dots \neq p_m$.

Algumas potências podem, entretanto, se repetir. Nesse caso, cada vez que uma potência se repete, o termo é multiplicado por $\ln(X)$. No caso extremo de todas as potências serem iguais, isto é, $p_1 = p_2 = \dots = p_m = p$ a função (1) ficará

$$\phi_m(X) = \beta_0 + \beta_1 X^{(p)} + \beta_2 X^{(p)} \ln(X) + \beta_3 X^{(p)} \{\ln(X)\}^2 + \dots + \beta_m X^{(p)} \{\ln(X)\}^{m-1}$$

e se, por exemplo, $m = 4$, $p_1 = 0$, $p_2 = 2$, $p_3 = 0$ e $p_4 = 2$, a função será dada por

$$\phi_4(X) = \beta_0 + \beta_1 \ln(X) + \beta_2 X^2 + \beta_3 \{\ln(X)\}^2 + \beta_4 X^2 \ln(X).$$

Uma das exigências dessas funções é que os valores de X sejam maiores que zero. No entanto, devido à natureza da variável, esta pode assumir valores nulos ou eventualmente menores do que zero e para estes casos, Royston e Altman (1994) sugeriram substituir X por $(X - X_{\min} + \gamma)$, em que X_{\min} é o menor valor de X e γ o menor incremento dos valores ordenados de X . Porém, quando a amplitude dos valores de X é grande, pode haver, no ajuste do modelo, problemas de multicolinearidade. Nesse caso, Royston e Sauerbrei (2007) recomendaram a substituição da variável X por,

$$\delta + (1 - \delta) \left(\frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \right),$$

em que $\delta \in]0, 1[$ é uma constante a ser escolhida e X_{\max} e X_{\min} são o maior e o menor valores de X , respectivamente. Na prática, Regier e Parker (2015), Garcia (2019) sugeriram adotar, para δ o valor 0,2.

Quanto aos valores de p_s ($s = 1, \dots, m$), inicialmente eram considerados com pertencentes ao conjunto dos reais. No entanto, de forma a diminuir a complexidade do modelo este conjunto foi restrito ao intervalo $[-3, 3]$ e posteriormente discretizado (ROYSTON; SAUERBREI, 2008; REGIER; PARKER, 2015). No que diz respeito a essa discretização, Royston e Altman (1994), sugeriram considerar apenas os valores pertencentes ao conjunto $\{-2, -1, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, 2, \text{máx}(3, m)\}$ e três anos depois, Royston e Altman (1997) modificaram-no para

$$\left\{ -\text{máx}(3, m), -2, -1, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, 2, \text{máx}(3, m) \right\}.$$

Logo, para $m = 1, 2$ ou 3 , o conjunto de potências será $p_s \in \{-3, -2, -1, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, 2, 3\}$. Gilmour e Trinca (2005), sugerem, ainda, a inclusão das potências $-\frac{1}{3}$ e $\frac{1}{3}$ nesse conjunto. De acordo com os autores Royston e Altman (1997), a mudança provocada ocorreu para

que as variáveis possam ser transformadas tanto X^3 como para X^{-3} , assim como há a possibilidade de transformação para X^{-1} , $X^{-1/2}$, $X^{1/2}$ e X . Entretanto, os mesmo autores mencionam que o conjunto proposto por Royston e Altman (1994) é suficiente para muitas situações práticas. Para autores Gilmour e Trinca (2005), a motivação de para ampliar o conjunto de potências, se deu pelo fato de incluir a transformação por raiz cúbica e, também seguiram a mesma ideia dos autores Royston e Altman (1997), sendo assim incluíram tanto $\frac{1}{3}$ quanto $-\frac{1}{3}$. O conjunto valores das potências pode ainda ser reduzido de acordo com a problemática (GILMOUR; TRINCA, 2005).

Quanto ao grau do polinômio, os autores Royston e Altman (1994) observaram que polinômios fracionários de no máximo grau 2 ($m \leq 2$) é suficiente para a resolução de diversos contextos práticos, isto é, FP1 e FP2. Portanto, as funções $\phi_1(X)$ ou $\phi_2(X)$, eram mais do que suficientes por apresentarem uma gama vasta de diferentes comportamentos. Como característica distinta das funções polinomiais, pode-se destacar que, se $p_1 < 0$, então a função ϕ_1 tem comportamento assintótico, isto é,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \phi_1(X) = \beta_0,$$

e, portanto, a reta da equação $Y = \beta_0$ é uma assíntota horizontal de seu gráfico.

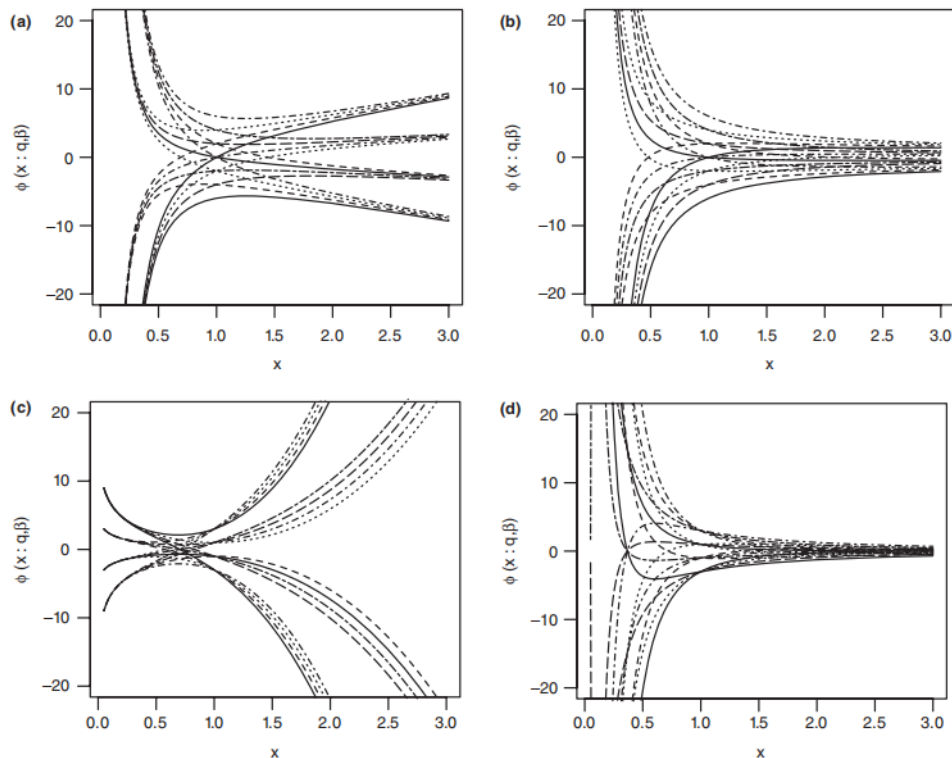


Figura 5. Curvas de um modelo FP2 com potências (a) $\mathbf{p} = \{-2, 1\}$, (b) $\mathbf{p} = \{-2, -0.5\}$, (c) $\mathbf{p} = \{0, 3\}$ e (d) $\mathbf{p} = \{-2, -2\}$. Para cada curva foram especificados distintos valores de β (REGIER; PARKER, 2015).

Considerando os modelos com polinômios fracionários definidos e o conjunto de valores proposto por Royston e Altman (1994), para o FP1 existem oito possíveis funções

a serem ajustadas, enquanto que, para o modelo FP2 são 36 funções, assim como apresentado na Tabela 1. Vale ressaltar que a permutação entre as potências p_1 e p_2 , no caso do FP2, terá o mesmo resultado para os testes da bondade de ajuste.

Tabela 1. Combinações de potências considerando os modelos FP1 e FP2 para apenas uma variável regressora.

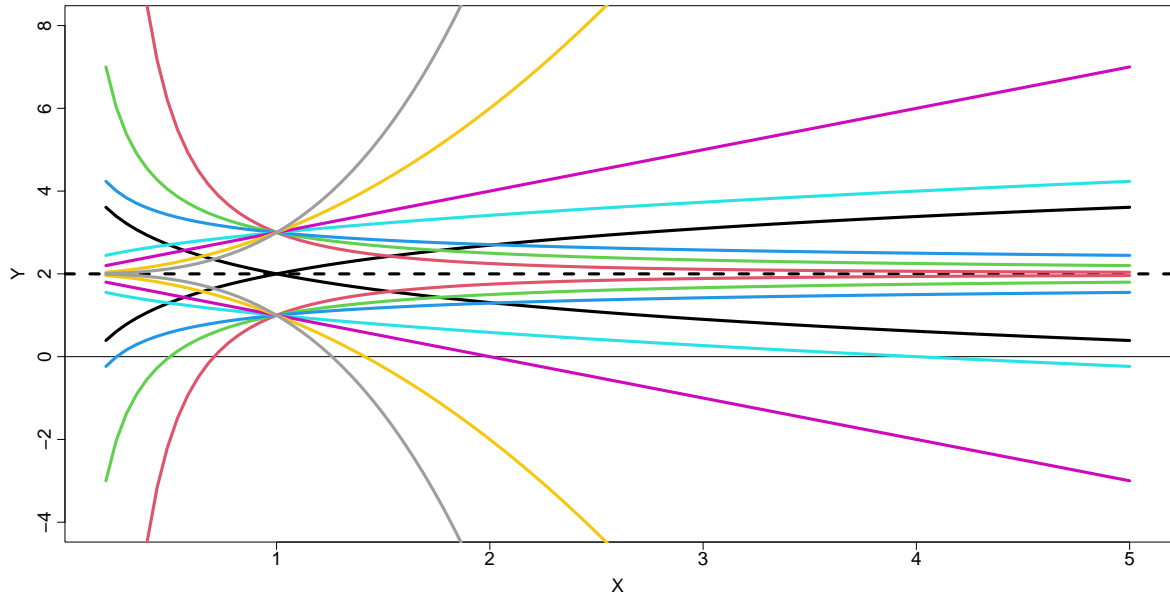
$m = 1$	$m = 2$					
p	p_1	p_2	p_1	p_2	p_1	p_2
-2	-2	-2	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	1
-1		-1		0		2
$-\frac{1}{2}$		$-\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$		3
0		0		1	2	2
$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$		2		3
1		1		3	3	3
2		2	0	0		
3		3		$\frac{1}{2}$		
	-1	-1		1		
		$-\frac{1}{2}$		2		
		0		3		
		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		
		1		1		
		2		2		
		3		3		

Portanto, com base no conjunto de potências e suas combinações, foi exemplificado por meio da Tabela 2, como as funções dos modelos podem ser escritos de acordo com as potências transformação. Além disso, na Figura 6a é apresentado algumas das formas que os modelos FP1 podem assumir de acordo com cada uma das potências e da mesma forma, na Figura 6b, foram exemplificados para o modelo FP2.

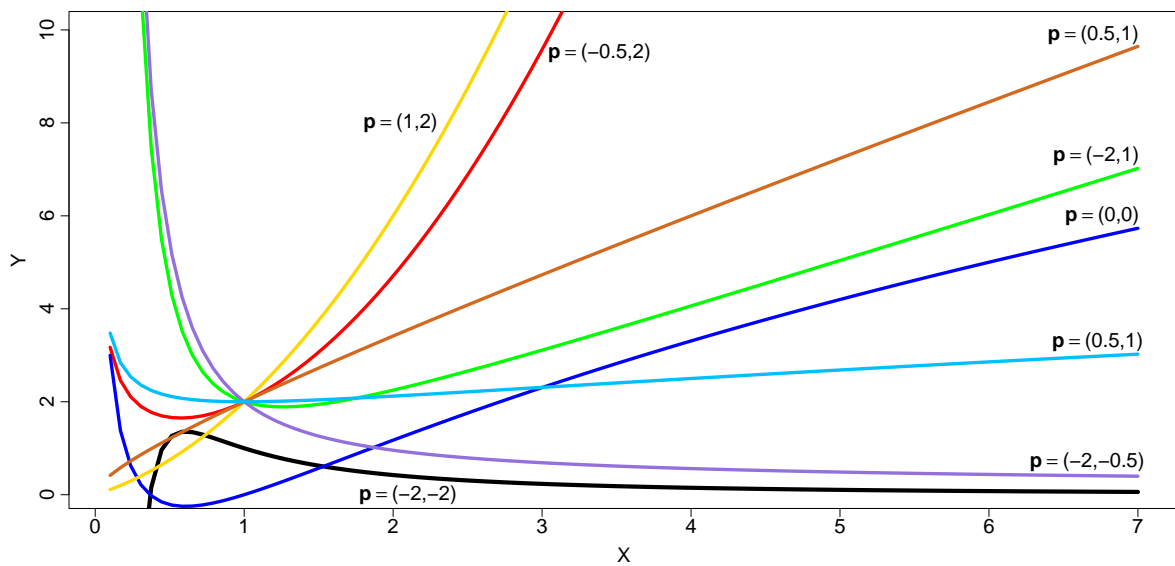
Tabela 2. Exemplos de funções para os modelos FP com $m = 1, 2$.

p	$\phi_1(X, p)$	(p_1, p_2)	$\phi_2(X, \mathbf{p})$
-2	$\beta_0 + \beta_1 \frac{1}{X^2}$	(-2, -2)	$\beta_0 + \beta_1 X^{-2} + \beta_2 X^{-2} \ln X$
$-\frac{1}{2}$	$\beta_0 + \beta_1 \frac{1}{\sqrt{X}}$	$(-\frac{1}{2}, 2)$	$\beta_0 + \beta_1 \frac{1}{\sqrt{X}} + \beta_2 X^2$
0	$\beta_0 + \beta_1 \ln X$	(0, 0)	$\beta_0 + \beta_1 \ln X + \beta_2 \ln X \ln X$
$\frac{1}{2}$	$\beta_0 + \beta_1 \sqrt{X}$	(1, 2)	$\beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2$

No entanto, geralmente, a variável resposta é em função de mais de uma variável regressora. Os modelos com polinômios fracionários para múltiplas variáveis (*Multivariable Fractional Polynomials - MFP*) é um desdobramento dos modelos FP com apenas uma variável regressora (ROYSTON; ALTMAN, 1994). Desta maneira, a função dos Polinômios fracionários para k variáveis regressoras X_i ($i = 1, 2, \dots, k$) e de grau m é dado



(a) Comportamento das curvas para modelos com polinômios fracionários de grau 1 (FP1), $\phi_1(X)$, para X entre 0,2 e 5, considerando $\beta_0 = 2$ e $\beta_1 = \{-1, 1\}$.



(b) Comportamento das curvas para modelos com polinômios fracionários de grau 2 (FP2), $\phi_1(X)$, para X entre 0,2 e 5, considerando $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = \beta_2 = 1$.

Figura 6. Gráficos das funções de polinômios fracionários, $\phi_1(X)$ e $\phi_2(X)$, diversos valores das potências p e diferentes coeficientes de β .

pela seguinte equação (REGIER; PARKER, 2015):

$$\phi_m(X_1, X_2, \dots, X_k) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \sum_{s=1}^m \beta_{is} X_i^{(p_{is})},$$

em que β_0 e β_{is} ($i = 1, 2, \dots, k; s = 1, 2, \dots, m$) são os parâmetros a serem estimados, p_{is} as potências, e

$$X_i^{(p_{i1})} = \begin{cases} X_i^{p_{i1}}, & \text{se } p_{i1} \neq 0 \\ \ln(X_i), & \text{se } p_{i1} = 0 \end{cases}, \quad X_i^{(p_{i2})} = \begin{cases} X_i^{p_{i2}}, & \text{se } p_{i2} \neq p_{i1} \neq 0 \\ \ln(X_i), & \text{se } p_{i2} = 0 \neq p_{i1} \dots \\ X_i^{(p_{i1})} \ln(X_i), & \text{se } p_{i2} = p_{i1} \end{cases}$$

as condições colocadas acima foram expostas para o caso em que a função é FP2, mas estas condições podem ser estendidas até grau m .

Além dos polinômios fracionários proposto pelos autores Royston e Altman (1994), uma outra abordagem também envolvendo os polinômios fracionários foi proposta pelos autores Gilmour e Trinca (2005). Os autores fazem uso do polinômio fracionário fazendo referência aos modelos de superfície de resposta, modelo polinomial de primeira e segunda ordem. Assim, os autores Gilmour e Trinca (2005) referenciam os modelos como sendo polinômio fracionário de primeira ordem sem interação, com interação e polinômio fracionário de segunda ordem. Na mesma ordem como foram citados, estes modelos são apresentados como sendo (GILMOUR; TRINCA, 2005):

$$\begin{aligned} E(Y) &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i^{(p_i)} \\ E(Y) &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i^{(p_i)} + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{q=i+1}^k \beta_{iq} X_i^{(p_i)} X_q^{(p_q)} \\ E(Y) &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i^{(p_i)} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} [X_i^{(p_i)}]^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{q=i+1}^k \beta_{iq} X_i^{(p_i)} X_q^{(p_q)} \end{aligned}$$

em que β_0 , β_{ii} e β_{iq} são os parâmetros a serem estimados e, p_i e p_q , as potências. As condições de transformação destes modelos são as seguintes,

$$X_i^{(p_i)} = \begin{cases} X_i^{p_i}, & \text{se } p_i \neq 0 \\ \ln(X_i), & \text{se } p_i = 0 \end{cases} \quad [X_i^{(p_i)}]^2 = \begin{cases} X_i^{2p_i}, & \text{se } p_i \neq 0 \\ \ln(X_i)^2, & \text{se } p_i = 0 \end{cases}.$$

Desta maneira, como no MFP há múltiplas variáveis regressoras e é uma abordagem sequencial, a significância da variável e ordem de entrada dessas variáveis no modelo é de suma importância. Então, para determinar quais as variáveis são importantes para o modelo e a ordem de entrada destas, existe alguns algoritmos. O primeiro algoritmo

sugerido foi proposto por Royston e Altman (1994) e também é denominado como MFP. Assim, a partir deste momento, o termo MFP será utilizado para se referir a esse algoritmo.

No algoritmo MFP, a principal etapa é definir os níveis de significância de α_1 e α_2 , em que α_1 é para a seleção de variáveis via método de eliminação passo atrás (*Backward Elimination - BE*) e α_2 para selecionar a função por meio do procedimento de seleção de função (*Function Selection Procedure - FSP*), ou também conhecido como procedimento “RA2” (ROYSTON; SAUERBREI, 2008). Portanto, antes mesmo de apresentar o MFP, será comentado sobre o procedimento de seleção de função.

O FSP é utilizado com o intuito de simplificar a função do modelo. Para selecionar a função final, realiza-se diversos testes de hipóteses, sendo estes um teste conservador e por isso, controla de forma simultânea a probabilidade do erro tipo I (ROYSTON; SAUERBREI, 2008; GARCIA, 2019). De acordo com Sauerbrei et al. (2005), o algoritmo FSP é padrão nos *softwares* STATA (StataCorp, 2023) e SAS (SAS Institute Inc., 2023), como também na linguagem *R* (R Core Team, 2022). Talvez, um fator limitante seja o fato de que foi implementado para no máximo a função FP2, mas como anunciado, na prática raramente são utilizados modelos mais complexos do que este. Este procedimento pode ser aplicado quando se tem uma ou múltiplas variáveis regressoras, mas por simplicidade o procedimento será apresentado quando se tem apenas uma variável regressora. Sendo assim, o FSP pode ser executado em quatro etapas e da seguinte forma (ROYSTON; SAUERBREI, 2008):

1. Selecionar o nível de significância α . Geralmente, usa-se $\alpha = 0,05$
2. Testar o melhor modelo FP2 para X contra o modelo nulo, usando 4 graus de liberdade. Se o teste é não significativo, pare, concluindo que o efeito de X não é significativo com nível α . Caso contrário, continue;
3. Testar o melhor modelo FP2 para X contra o modelo polinomial de primeira ordem, usando 3 graus de liberdade. Se o teste é não significativo, pare, e o modelo final é uma reta. Caso contrário, continue;
4. Testar o melhor modelo FP2 contra o melhor modelo FP1, usando 2 graus de liberdade. Se o teste é não significativo, pare, e o modelo final é o FP1. Caso contrário, o modelo final é o FP2.

No passo 2 é um teste para verificar a associação global de X , no passo 3 busca-se identificar se há evidência de não linearidade, por último, no passo 4 tem interesse na simplificação entre um modelo não-linear simples ou mais complexo.

Assim, após estabelecer o procedimento de seleção de função, podemos então prosseguir com o algoritmo MFP. Este algoritmo é realizado em ciclos, cuja convergência

se dá quando não há diferenças nas variáveis selecionadas, nem mesmo nos valores das potências de transformação em cada uma das variáveis. A convergência, geralmente, é obtida em no máximo quatro ciclos, mas usualmente ocorre no segundo ou terceiro ciclo (ROYSTON; SAUERBREI, 2008). Assim como o FSP, o algoritmo MFP também já está implementado. Desta maneira, Royston e Sauerbrei (2008) descrevem o algoritmo como sendo:

1. Selecionar os níveis de significância α_1 e α_2 .
2. Ajustar um modelo linear com todas as variáveis regressoras, cujas variáveis serão ordenadas pela importância de acordo com o *p-valor*. Esse processo é realizado em cada ciclo.
3. Seja c o número de ciclos e i o número de variáveis no modelo. Defina $c = 0$ e $i = 1$ para inicializar a contagem de ciclos e de variáveis no modelo em cada ciclo.
4. Considerando que as X_i variáveis são contínuas, então o passo 2 do FSP é aplicado para as X_i variáveis regressoras com nível de significância α , se X_i não é significativo então é retirada do modelo. Caso contrário, os passos 3 e 4 do FSP são aplicados para selecionar entre um modelo FP ou linear, com todas as variáveis incluídas no ajuste do modelo.
5. No caso de um modelo FP com potências p selecionada, X_i é representado pelas variáveis transformadas $X_i^{p_s}$ nas etapas subsequentes em que outras variáveis são considerado.
6. Se a variável X_i for incluída ou excluída do modelo, ela será reavaliada no próximo ciclo.
7. Defina $i = i + 1$. Se $i \leq k$, retornar no passo 4, e incluir a próxima variável regressora. Caso contrário vá para o passo 7.
8. Seja $c = c+1$ o c -ésimo ciclo. Se $c > c_{max}$, pare. relate que o algoritmo não convergiu em $c_{max} = 5$ ciclos. Do contrário, verificar se as variáveis e as transformações se mantiveram as mesmas do ciclo $c-1$ para o ciclo c . Se sim, pare e obtém as estimativas do modelo. Caso contrário, volte ao passo 4 e inicie um novo ciclo.

Como desvantagem, o algoritmo MFP não considera a existência da interação entre as variáveis. Para investigar a necessidade do termo de interação entre as variáveis regressoras, Royston e Sauerbrei (2004) estenderam o algoritmo e propuseram um procedimento para investigar a interação entre a variável contínua e uma variável categórica de tratamentos, codificada em $\{0, 1\}$. Este procedimento é denominado como sendo

polinômios fracionários para múltiplas variáveis com interação (*Multivariable Fractional Polynomials Interaction* - MFPI).

No entanto, por vezes, deseja-se investigar a interação entre duas variáveis contínuas. Para isso, Royston e Sauerbrei (2008) descreveram o procedimento polinômios fracionários para múltiplas variáveis com interação geral (*Multivariable Fractional Polynomials Interaction general* - MFPIgen). Este é um procedimento mais geral, mas foi realizado com base no algoritmo MFPI, que por sua vez, foi baseado no algoritmo MFP. Portanto, o MFPIgen se diferencia ao comportar modelos em caso de que ambas as variáveis sejam contínuas e possui interação entre elas. Seja X_1 e X_2 variáveis contínuas, o algoritmo é descrito como (ROYSTON; SAUERBREI, 2008):

1. Selecionar as variáveis X_1 e X_2 que serão incluídas no modelo. Além de contínuas, deve existir evidências de que há interação entre elas.
2. Obter a transformações de X_1 e X_2 por meio dos polinômios fracionários;
3. Obter todas as combinações de interação entre X_1 e X_2 . Por exemplo, caso a função selecionada seja FP2 para ambas as variáveis, então serão quatro combinações possíveis. Para cada uma dessas combinações, ajuste um modelo.

$$X_1^{p_1} X_2^{p_1} \quad X_1^{p_1} X_2^{p_2} \quad X_1^{p_2} X_2^{p_1} \quad X_1^{p_2} X_2^{p_2}$$

4. Selecionar o melhor modelo utilizando alguma medida de qualidade de ajuste, como o critério de informação de Akaike (AIC), análise de resíduos e o teste de falta de ajuste.
5. Caso for identificada mais de uma interação, utiliza-se o método de seleção de variáveis passo à frente para estender o modelo de efeitos principais.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Na seção 3.1 deste trabalho são apresentados os resultados de um experimento com capim-mombaça, utilizados para ilustrar a metodologia estatística desenvolvida e descrita na seção 3.2.

3.1 Materiais. Dados de um ensaio de adubação NK em capim-mombaça

O experimento com a espécie forrageira *Panicum maximum* Jacq. cultivar Mombaça foi conduzido por Lavres Junior (2001) em casa-de-vegetação situada no Departamento de Solos e Nutrição de Plantas da Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” - ESALQ/USP, Piracicaba, São Paulo, de novembro de 2000 a fevereiro de 2001.

Foram utilizadas, para o mesmo, cinco doses de nitrogênio: 28, 112, 210, 336 e 462 mgL^{-1} e cinco doses de potássio: 19,5, 117, 234, 332 e 429 mgL^{-1} , cujas 13 combinações seguiram o esquema fatorial de 5^2 incompleto proposto por Littell e Mott (1975) (ver Figura 7) e foram casualizados em blocos perfazendo quatro repetições de cada uma das combinações.

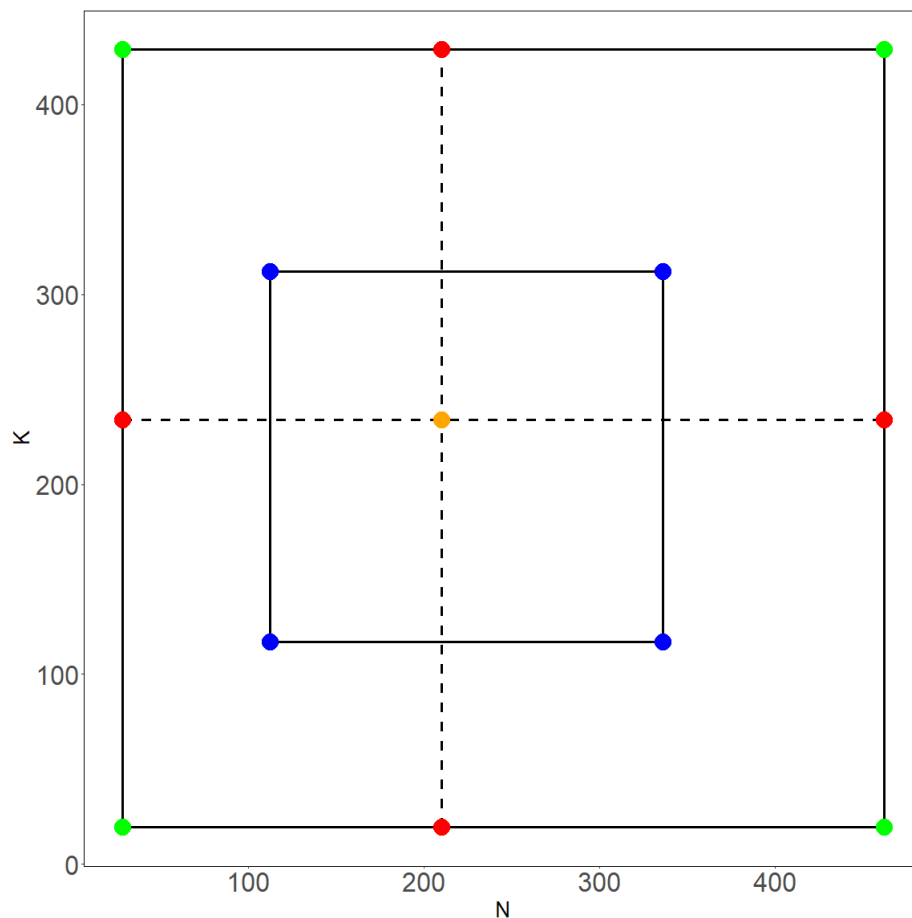


Figura 7. Combinações das doses de nitrogênio (N) e potássio (K), em mgL^{-1} , utilizadas no experimento com capim-mombaça conduzido por Lavres Junior (2001).

Neste experimento, segundo Lavres Junior (2001), as sementes foram semeadas em bandejas de plástico contendo, como substrato, areia lavada com água de torneira e água deionizada, sendo regadas com água deionizada. Após 12 dias, realizou-se o transplante de 15 mudas para cada um dos 52 vasos plástico contendo, como substrato, sílica lavada. Após um dia do transplante, as mudas foram aclimatadas com 1 litro de solução diluída a 25% das respectivas combinações das doses de N e K, cujas soluções nutritivas foram obtidas a partir da solução de Sarruge (1975) modificada para as doses dos nutrientes.

Durante uma semana as soluções permaneceram nos vasos 24h por dia, sendo circuladas através da sílica quatro vezes ao dia e após este período, as soluções foram fornecidas pela manhã e drenadas à noite. Desbastes foram, então, realizados até permanecerem somente cinco plantas por vaso, trocando-se a solução a cada 14 dias.

Embora o autor não tenha descrito o que foram considerados como blocos, acredita-se que tenham sido quatro diferentes bancadas dentro da casa de vegetação, ou seja, em cada bancada foram colocados 13 vasos contendo cada um dos 13 diferentes tratamentos, sendo que em cada bancada estes tratamentos foram dispostos aleatoriamente.

Após 36 dias do transplante realizou-se o primeiro corte da planta, a uma altura de aproximadamente dois centímetros do colo. A parte aérea, material situado acima do colo da planta, foi separada em folhas emergentes (FE), lâminas das duas folhas recém-expandidas (LR), lâminas das folhas maduras (LM) e em colmos mais bainhas (CB).

Após 29 dias do primeiro corte realizou-se o segundo corte, com o mesmo critério utilizado no primeiro corte e as mesmas partes separadas. No entanto, além da parte aérea, as raízes foram também retiradas do vaso plástico e lavadas com água corrente e água deionizada. O material vegetal obtido foi seco em uma estufa com circulação forçada à uma temperatura de 70°C até obter uma massa constante. Esse material foi, então, pesado em uma balança de precisão, moído em um moinho do tipo Wiley e guardado em sacos plásticos.

Como variáveis observadas no experimento, foram consideradas, dentre outras, as produções de massa seca da parte aérea (PMSPA) e da raiz (PMSRaiz), em gramas por vaso, e a estimativa do teor de clorofila por meio do índice SPAD. A primeira foi obtida somando-se as massas de secas de cada um dos componentes, FE, LR, LM e CB, a segunda, somando-se as massas secas dos sistemas radiculares das plantas e a terceira, por meio do equipamento Chlorophyll Meter SPAD-502. Foram obtidos como resultados do experimento, os dados apresentados nas Tabelas 3, 4 e 5.

Tabela 3. Produções de massa seca da parte aérea, em gramas por vaso, segundo o bloco e as doses de nitrogênio, N , e potássio, K , em mgL^{-1} .

N	K	Blocos			
		1	2	3	4
28	19,5	2,46	2,69	3,05	2,54
	234	3,01	3,47	3,35	2,81
	429	3,53	3,05	2,63	2,97
112	117	14,36	13,54	12,84	14,55
	312	15,16	16,36	16,17	16,69
210	19,5	6,96	6,91	5,95	6,35
	234	21,83	22,74	22,68	22,94
	429	23,78	25,43	27,26	23,87
336	117	18,16	20,03	18,27	19,76
	312	27,40	23,40	25,41	19,69
462	19,5	5,09	5,84	5,29	5,90
	234	25,11	25,60	19,86	19,76
	429	24,18	23,51	21,69	32,55

Tabela 4. Produções de massa seca da raiz, em gramas por vaso, segundo o bloco e as doses de nitrogênio, N , e potássio, K , em mgL^{-1} .

N	K	Blocos			
		1	2	3	4
28	19,5	1,95	2,55	2,31	2,39
	234	2,90	2,58	3,16	2,93
	429	2,78	2,89	2,54	2,90
112	117	9,56	10,44	8,55	8,65
	312	8,55	10,15	8,64	9,86
210	19,5	3,83	4,92	3,52	4,08
	234	12,65	15,06	13,18	15,40
	429	16,30	15,53	11,49	12,38
336	117	17,44	16,74	17,43	16,22
	312	17,43	14,64	13,89	14,65
462	19,5	1,17	2,90	2,58	2,00
	234	19,84	19,53	16,26	18,25
	429	17,31	17,76	19,70	20,08

Tabela 5. Estimativas do teores de clorofila, em unidade SPAD por vaso, segundo o bloco e as doses de nitrogênio, N , e potássio, K , em mgL^{-1} .

N	K	Blocos			
		1	2	3	4
28	19,5	22,70	21,30	21,10	21,30
	234	19,10	20,00	21,70	21,10
	429	19,90	19,90	21,40	21,10
112	117	27,40	29,60	29,50	27,60
	312	27,10	28,60	27,20	27,30
210	19,5	33,80	31,80	29,90	32,20
	234	34,90	31,70	33,60	34,00
	429	31,40	30,00	33,30	34,70
336	117	42,20	44,70	43,80	43,40
	312	42,60	41,20	43,50	45,30
462	19,5	41,80	39,70	33,80	36,70
	234	45,50	45,40	48,40	46,20
	429	47,50	45,50	49,20	44,00

3.2 Métodos

Considere um experimento com dois fatores, X_1 e X_2 , realizado em esquema fatorial 5^2 incompleto de Littell e Mott (1975) e b blocos, cujos 13 tratamentos são formados pelas combinações dos níveis dos fatores. Desta maneira, por meio da Tabela 6, tem-se a estrutura de formação dos tratamentos e da tabulação dos dados coletados do experimento. Desta tabela, seja X_{11}, \dots, X_{15} e X_{21}, \dots, X_{25} os níveis dos respectivos fatores e y_{lb} a resposta do l -ésimo tratamento do b -ésimo bloco.

Tabela 6. Observações de uma variável Y num ensaio de adubação com 2 nutrientes, cujas doses utilizadas, X_1 e X_2 , com 5 níveis cada, seguem o esquema fatorial 5^2 incompleto de Littell e Mott (1975) com total de 13 tratamentos (Trat.), casualizados em b blocos completos.

X_1	X_2	Trat.	Blocos					
			1	2	...	j	...	b
X_{11}	X_{21}	1	y_{11}	y_{12}	...	y_{1j}	...	y_{1b}
X_{11}	X_{23}	2	y_{21}	y_{22}	...	y_{2j}	...	y_{2b}
X_{11}	X_{25}	3	y_{31}	y_{32}	...	y_{3j}	...	y_{3b}
X_{12}	X_{22}	4	y_{41}	y_{42}	...	y_{4j}	...	y_{4b}
X_{12}	X_{24}	5	y_{51}	y_{52}	...	y_{5j}	...	y_{5b}
X_{13}	X_{21}	6	y_{61}	y_{62}	...	y_{6j}	...	y_{6b}
X_{13}	X_{23}	7	y_{71}	y_{72}	...	y_{7j}	...	y_{7b}
X_{13}	X_{25}	8	y_{81}	y_{82}	...	y_{8j}	...	y_{8b}
X_{14}	X_{22}	9	y_{91}	y_{92}	...	y_{9j}	...	y_{9b}
X_{14}	X_{24}	10	y_{101}	y_{102}	...	y_{10j}	...	y_{10b}
X_{15}	X_{21}	11	y_{111}	y_{112}	...	y_{11j}	...	y_{11b}
X_{15}	X_{23}	12	y_{121}	y_{122}	...	y_{12j}	...	y_{12b}
X_{15}	X_{25}	13	y_{131}	y_{132}	...	y_{13j}	...	y_{13b}

Desta forma, os 13 tratamentos elencados na Tabela 6 são organizados espacialmente como apresentado na Figura 8.

Assim, seja Y uma variável resposta quaisquer, X_1 e X_2 a ordem de importância dos fatores. Para determinar as combinações de X_1 e X_2 que produz a mínima ou máxima resposta, faz-se necessário obter um modelo que se ajuste bem aos dados e, consequentemente, obter a relação da variável resposta em função dos níveis destes fatores. Esta relação pode ser representada, genericamente, pela equação

$$y_{lj} = \delta_j + f(X_{1i}, X_{2i}; \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon_{lj}, \quad (2)$$

sendo $l = 1, \dots, 13$ e $j = 1, \dots, b$. Da Equação (2), tem-se que y_{lj} é a observação da variável resposta da unidade experimental, do j -ésimo bloco, que recebeu o l -ésimo tratamento; δ_j é o efeito do j -ésimo bloco; X_{i_i} ($i = 1, 2$) é o valor fixo da variável X_i ,

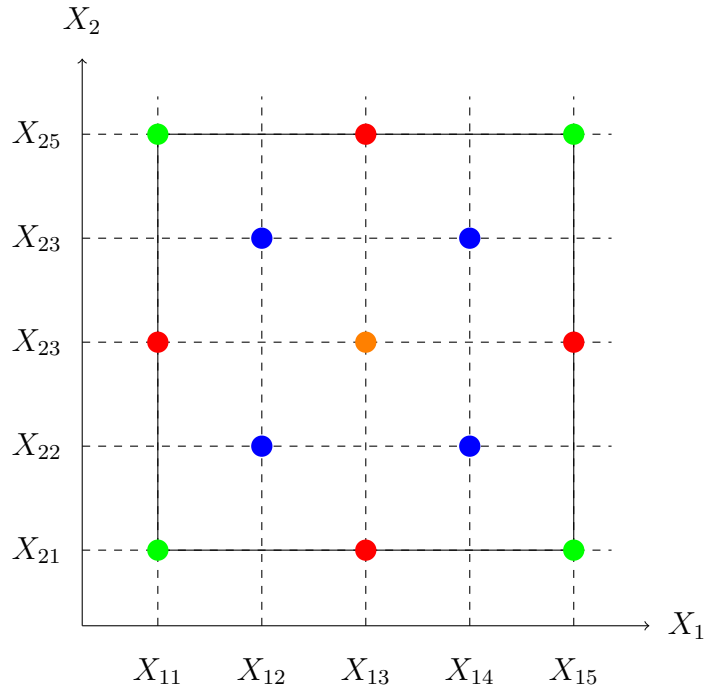


Figura 8. Combinações dos níveis dos fatores, X_1 e X_2 , para um esquema fatorial 5^2 incompleto de Littell e Mott (1975).

correspondente ao l -ésimo tratamento; $\varepsilon_{lj} \stackrel{iid}{\sim} N(0, \sigma^2)$ é o erro aleatório e $\sigma > 0$ é um parâmetro desconhecido.

Antes mesmo de especificar uma determinada função, analisou-se a necessidade de transformação da variável resposta, com intuito de obter uma resposta para a qual a variância de ε seja constante com uma distribuição aproximadamente normal (ATKINSON; RIANI; CORBELLINI, 2021). Com esse objetivo, utilizou-se da metodologia de transformação de Box-Cox proposta por Box e Cox (1964), sendo assim a variável resposta será transformada pelas seguintes condições,

$$y(\lambda) = \begin{cases} \frac{(y^\lambda - 1)^\lambda}{\lambda}, & \text{se } \lambda \neq 0 \\ \ln(y), & \text{se } \lambda = 0, \end{cases}$$

em que $\lambda = 1$ a variável não sofre transformação, $\lambda = 1/2$ sugere a transformação raiz quadrada, $\lambda = 0$ a transformação logarítmica e, assim por diante.

A partir deste modelo 2, pode-se obter diversas funções e dentre elas a mais complexa função com polinômios fracionários de grau 2, pois as demais funções são apenas condições particulares da função FP2. Caso seja necessário, a transformação da variável resposta deve ser considerada. Desta forma, a função FP2, incluindo a interação entre os fatores, é dado pela seguinte expressão,

$$f(X_{1l}, X_{2l}; \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \beta_1 u_{1l} + \beta_2 u_{2l} + \beta_{11} u_{1l}^* + \beta_{22} u_{2l}^* + \beta_{12} u_{1l}^\bullet u_{2l}^\bullet, \quad (3)$$

em que $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{12})$ é o vetor de parâmetros desconhecidos e,

$$u_{i_l} = X_{i_l}^{(p_{i1})} = \begin{cases} X_{i_l}^{p_{i1}}, & \text{se } p_{i1} \neq 0 \\ \ln(X_{i_l}), & \text{se } p_{i1} = 0 \end{cases},$$

$$u_{i_l}^* = X_{i_l}^{(p_{i2})} = \begin{cases} X_{i_l}^{p_{i2}}, & \text{se } p_{i2} \neq p_{i1} \neq 0 \\ \ln(X_{i_l}), & \text{se } p_{i2} = 0 \neq p_{i1} \\ X_{i_l}^{(p_{i1})} \ln(X_{i_l}), & \text{se } p_{i2} = p_{i1} \end{cases},$$

$$u_{i_l}^\bullet = \begin{cases} u_{i_l}, & \text{se } p_i^* = p_{i1} \\ u_{i_l}^*, & \text{se } p_i^* = p_{i2} \end{cases}, \quad p_i^* \in \{p_{i1}, p_{i2}\}$$

no qual o conjunto de potências adotado foi aquele proposto por Littell e Mott (1975) $p_{is} \in \{-2, -1, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, 2, 3\}$.

A partir desta e das demais funções, pode-se reescrever as mesmas de forma matricial como sendo,

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (4)$$

em que \mathbf{y} é o vetor das observações de comprimento n ; \mathbf{X} é a matriz do delineamento de dimensões $n \times (p + b - 1)$, sendo p o total de parâmetros da parte fixa do modelo e b o número de blocos; $\boldsymbol{\theta}$ é o vetor de parâmetros desconhecidos de dimensão $(p + b - 1) \times 1$; e $\boldsymbol{\varepsilon}$ é o vetor dos erros de comprimento n . Estes vetores e matrizes são representadas por,

$$\mathbf{y}^T = \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & \dots & y_{1b} & y_{21} & y_{22} & \dots & y_{2b} & \dots & y_{l1} & y_{l2} & \dots & y_{lb} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \dots & \varepsilon_{1b} & \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \dots & \varepsilon_{2b} & \dots & \varepsilon_{l1} & \varepsilon_{l2} & \dots & \varepsilon_{lb} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\theta}^T = \begin{bmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_b & \beta_1 & \beta_2 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{12} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X} = [\mathbf{A} \mid \mathbf{D} \otimes \mathbf{1}_b]$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{1}_t \otimes \mathbf{I}_b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{D} \otimes \mathbf{1}_b = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{21} & u_{11}^* & u_{21}^* & u_{11}^\bullet u_{21}^\bullet \\ u_{11} & u_{22} & u_{11}^* & u_{22}^* & u_{11}^\bullet u_{22}^\bullet \\ u_{11} & u_{23} & u_{11}^* & u_{23}^* & u_{11}^\bullet u_{23}^\bullet \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ u_{15} & u_{21} & u_{15}^* & u_{21}^* & u_{15}^\bullet u_{21}^\bullet \\ u_{15} & u_{22} & u_{15}^* & u_{22}^* & u_{15}^\bullet u_{22}^\bullet \\ u_{15} & u_{23} & u_{15}^* & u_{23}^* & u_{15}^\bullet u_{23}^\bullet \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

em que \mathbf{A} é a matriz dos blocos de dimensão $n \times b$; \mathbf{D} a matriz contendo as variáveis regressoras e seus níveis, de dimensão $t \times (p - 1)$; $\mathbf{1}_b$ vetor de uns de comprimento b , por

sua vez, $\mathbf{1}_t$ vetor de uns de comprimento t e \mathbf{I}_b é uma matriz identidade de dimensões $b \times b$. A matriz \mathbf{D} , foi explicitada para a função da Equação (3), mas como mencionado as outras funções são casos particulares desta.

Da Equação (4), sob as pressuposições do modelo de regressão, isto é, erros seguem distribuição normal com média zero e variância constante, denotado por $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{I}\sigma^2)$ em que \mathbf{I} é uma matriz identidade de dimensões $n \times n$, a distribuição de \mathbf{y} é dada por,

$$Y \sim N(\mathbf{X}\boldsymbol{\theta}, \mathbf{I}\sigma^2). \quad (5)$$

Dada estas condições, a estimação dos coeficientes de regressão pode ser realizado por meio do método de Mínimos Quadrados Ordinários, o qual tem por objetivo encontrar o vetor $\boldsymbol{\theta}$ que minimizam a soma dos quadrados dos erros. Esta soma é representada por $\sum_{i=1}^n \varepsilon_u^2 = \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon}$ (KHURI; CORNELL, 1996; MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016). A partir da Equação (4), tem-se que a norma euclidiana de $\boldsymbol{\varepsilon}$ é dada por,

$$Z = \|\boldsymbol{\varepsilon}^2\| = \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y} + \boldsymbol{\theta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \boldsymbol{\theta}.$$

Derivando Z em relação à $\boldsymbol{\theta}$ e igualando a zero, tem-se que o estimador de $\boldsymbol{\theta}$ por,

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \quad (6)$$

cuja distribuição do estimador de θ é,

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} \sim N(\boldsymbol{\theta}, (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \sigma^2).$$

e a estimativa de σ^2 é,

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n - b - p + 1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}})' (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \frac{1}{n - b - p + 1} \text{SQ}_{\text{res}}$$

Portanto, a partir da Equação (5) e (6), o valor esperado da variável resposta é dada por,

$$E(Y) = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}.$$

sendo $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ o vetor das estimativas dos coeficientes de regressão com dimensão $(p + b - 1) \times 1$.

Sendo assim, para obter as estimativas de $\boldsymbol{\theta}$ do modelo, utilizou-se do método de mínimos quadrados, mas para validar o ajuste do modelo selecionado verificou-se as pressuposições do modelo de regressão. O algoritmo utilizado estabeleceu como conjunto dos valores das potências aquele adotado pelos autores Royston e Altman (1994) e assumiu que as variáveis regressoras são positivas e contínuas.

1. Para cada uma das variáveis regressoras, atribuir as potências transformação p_1 para X_1 e p_2 para X_2 .

$$u_1 = \begin{cases} X_1^{p_1}, & \text{se } p_1 \neq 0 \\ \log(X_1), & \text{se } p_1 = 0 \end{cases}$$

$$u_2 = \begin{cases} X_2^{p_2}, & \text{se } p_2 \neq 0 \\ \ln(X_2), & \text{se } p_2 = 0 \end{cases}$$

2. Ajustar os possíveis modelos. Para cada modelo ajustado, armazenar o valor do AIC e das respectivas potências.
3. Definindo p_{11}, p_{22} a segunda potência de X_1 e X_2 para compor um modelo FP2. Obter todas as possíveis combinações para cada uma das variáveis regressoras presentes no modelo. Dado que já tem informações sobre p_1 e p_2 , as transformações de X_1 e X_2 será pelas seguintes condições:

$$u_1^* = \begin{cases} \ln(X_1) \ln(X_1), & \text{se } p_{11} = 0 \quad \wedge \quad p_1 = 0 \\ \ln(X_1), & \text{se } p_{11} = 0 \quad \wedge \quad p_1 \neq 0 \\ X_1^{p_{11}} \ln(X_1), & \text{se } p_{11} = p_1 \neq 0 \\ X_1^{p_{11}}, & \text{se } p_{11} \neq p_1 \neq 0 \end{cases}$$

$$u_2^* = \begin{cases} \ln(X_2) \ln(X_2), & \text{se } p_{22} = 0 \quad \wedge \quad p_2 = 0 \\ \ln(X_2), & \text{se } p_{22} = 0 \quad \wedge \quad p_2 \neq 0 \\ X_2^{p_{22}} \ln(X_2), & \text{se } p_{22} = p_2 \neq 0 \\ X_2^{p_{22}}, & \text{se } p_{22} \neq p_2 \neq 0 \end{cases}$$

4. Ajustar os possíveis modelos. Para cada um dos modelos armazenar o valor do AIC e das respectivas potências.
5. Seja $p_1^* \in \{p_1, p_{11}\}$ e $p_2^* \in \{p_2, p_{22}\}$. Ajustar o modelo FP2 para cada combinação do termo multiplicativo entre as variáveis. De acordo com as condições de u_1^\bullet e u_2^\bullet , serão quatro combinações possíveis, sendo $u_1 u_2$, $u_1 u_2^*$, $u_1^* u_2$ e $u_1^* u_2^*$. Para cada modelo armazenar o valor do AIC e das respectivas potências.

$$u_1^\bullet = \begin{cases} u_1, & \text{se } p_1^* = p_1 \\ u_1^*, & \text{se } p_1^* = p_{11} \end{cases}$$

$$u_2^\bullet = \begin{cases} u_2, & \text{se } p_2^* = p_2 \\ u_2^*, & \text{se } p_2^* = p_{22} \end{cases}$$

6. Obter uma lista contendo as informações de cada um dos modelos ajustados.

Com base na lista obtida, ordenar cada um dos modelos em ordem crescente dos valores do AIC para identificar o modelo cujas estimativas dos coeficientes apresentaram o menor valor do AIC. Após obter o modelo, realiza-se a análise dos resíduos graficamente por meio dos resíduos pelos valores preditos, gráfico quantil quantil e o $\sqrt{|\text{resíduos padronizados}|}$ pelos valores preditos. Como também, o gráfico meio normal com envelope simulado, sendo que para gerar o envelope realizou-se 999 simulações. Como análise dos resíduos, por meio dos testes hipóteses, de forma categórica, permite verificar estatisticamente se há violação dos pressupostos. Dentre os testes de normalidade e homogeneidade de variância, está a estatística dos testes de Shapiro-Wilk e Breush-Pagan, cujas hipóteses são respectivamente,

$$\begin{aligned} \text{Hipóteses: } & \begin{cases} H_0 : \text{ Os resíduos seguem uma distribuição normal} \\ H_1 : \text{ Os resíduos não seguem uma distribuição normal,} \end{cases} \\ \text{Hipóteses: } & \begin{cases} H_0 : \text{ Há homogeneidade de variâncias} \\ H_1 : \text{ Não há homogeneidade de variâncias.} \end{cases} \end{aligned}$$

Após selecionar o modelo e verificar as pressuposições, um fator preponderante para obter um modelo adequado, é investigar a falta de ajuste, na qual ocorre quando o modelo ajustado não se ajusta bem aos dados. Para ilustrar a falta de ajuste, considere um modelo hipotético ajustado conforme a Equação (7), entretanto, o modelo adequado é o apresentado na Equação (8). Portanto, ao comparar o modelo hipotético com o verdadeiro, o estimador de β apresentará um viés, conseqüentemente, não terá variância mínima (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016).

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

$$Y = \mathbf{X}\beta + \varepsilon \quad E(Y) = \mathbf{X}\beta \quad (7)$$

$$Y = \mathbf{X}\beta + \mathbf{X}_2\beta_2 + \varepsilon \quad E(Y) = \mathbf{X}\beta + \mathbf{X}_2\beta_2 \quad (8)$$

em que $\mathbf{X}\beta$ são os termos referentes ao modelo ajustado e $\mathbf{X}_2\beta_2$ aos termos ausentes em $\mathbf{X}\beta$. Desta maneira, o viés que é causado em $\hat{\beta}$ e no valor predito da variável resposta, pode ser obtido por meio das seguintes expressões (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016),

$$\begin{aligned}
E(\hat{\beta}) &= E \left[(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \right] = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T E(\mathbf{y}) \\
&= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T E(\mathbf{X}\beta + \mathbf{X}_2\beta_2) \\
&= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X}\beta + \underbrace{(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X}_2}_{\mathbf{A}} \beta_2 \\
&= \beta + \mathbf{A}\beta_2
\end{aligned}$$

$$E(\hat{Y}) = E[\mathbf{X}\beta] = \mathbf{X}E(\beta) = \mathbf{X}E(\beta + \mathbf{A}\beta_2) = \mathbf{X}\beta + \mathbf{X}\mathbf{A}\beta_2.$$

Portanto, as hipóteses para o teste da falta de ajuste do modelo é constituída pela diferença entre o valor médio da resposta observada e do valor predito do verdadeiro modelo. Assim, o interesse deste teste é verificar se o viés é igual ou diferente de zero. Desta forma, as hipóteses são apresentadas na Equação (9).

$$E(\hat{Y}) - E(\hat{Y}) = \mathbf{X}\beta + \mathbf{X}_2\beta_2 - (\mathbf{X}\beta + \mathbf{X}\mathbf{A}\beta_2) = (\mathbf{X}_2 - \mathbf{X}\mathbf{A})\beta_2$$

$$\begin{cases} (\mathbf{X}_2 - \mathbf{X}\mathbf{A})\beta_2 = \mathbf{0}; \\ (\mathbf{X}_2 - \mathbf{X}\mathbf{A})\beta_2 \neq \mathbf{0}; \end{cases} \quad (9)$$

A estatística da falta de ajuste é obtida pelo desdobramento da soma de quadrados dos resíduos (SQ_{res}), na qual resulta na soma de quadrados da falta de ajuste (SQ_{fa}) e, por diferença, a soma de quadrados do erro puro (SQ_{ep}) (KHURI; CORNELL, 1996; MONTGOMERY, 2012). Ou seja,

$$SQ_{\text{ep}} = \underbrace{\mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}}_{SQ_{\text{res}}} - \underbrace{\left[\frac{(\mathbf{y}^T \boldsymbol{\tau})(\boldsymbol{\tau}^T \mathbf{y})}{b} - \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} \right]}_{SQ_{\text{fa}}} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \frac{1}{b} (\mathbf{y}^T \boldsymbol{\tau})(\boldsymbol{\tau}^T \mathbf{y}),$$

em que $\boldsymbol{\tau}$ é a matriz dos tratamentos de dimensão $n \times t$ e $\mathbf{1}_n$ vetor de uns com comprimento n .

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{I}_t \otimes \mathbf{1}_b = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{1}_n = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}.$$

A partir dessas somas de quadrados, pode-se obter então a estatística do teste da falta de ajuste, qual é dado por (KHURI; CORNELL, 1996; MONTGOMERY, 2012),

$$F_{\text{calc}} = \frac{SQ_{\text{fa}}/t - p}{SQ_{\text{ep}}/n - b - t + 1}$$

em que, neste caso, F_{calc} segue distribuição $F_{t-p, n-b-t+1}$ com $t - P$ graus de liberdade do numerador e $n - b - t + 1$ graus de liberdade do denominador. A hipótese H_0 será rejeitada a um nível de significância α quando $F_{\text{calc}} > F_{\alpha, t-p, n-b-t+1}$ e se isso ocorre, logo o viés é diferente de zero e pode-se dizer que o modelo hipotético apresenta falta de ajuste.

Tabela 7. Tabela da Análise de Variância - ANOVA

Fonte de variação	gl	Somas de Quadrados	Quadrado Médio	F_{calc}
Blocos	$b - 1$	$SQ_{\text{bloc}} = \frac{(\mathbf{y}^T \boldsymbol{\delta})(\boldsymbol{\delta}^T \mathbf{y})}{t} - \frac{(\mathbf{1}_n^T \mathbf{y})^2}{n}$	$QM_{\text{bloc}} = \frac{SQ_{\text{bloc}}}{b-1}$	$\frac{QM_{\text{bloc}}}{QM_{\text{res}}}$
Regressão	$p - 1$	$SQ_{\text{reg}} = \hat{\boldsymbol{\beta}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} - \frac{(\mathbf{1}_n^T \mathbf{y})^2}{n}$	$QM_{\text{reg}} = \frac{SQ_{\text{reg}}}{p-1}$	$\frac{QM_{\text{reg}}}{QM_{\text{res}}}$
Resíduo	$n - b - p + 1$	$SQ_{\text{res}} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}$	$QM_{\text{Res}} = \frac{SQ_{\text{res}}}{n-b-p+1}$	
Falta de Ajuste	$t - p$	$SQ_{\text{fa}} = \frac{(\mathbf{y}^T \boldsymbol{\tau})(\boldsymbol{\tau}^T \mathbf{y})}{b} - \hat{\boldsymbol{\beta}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}$	$QM_{\text{fa}} = \frac{SQ_{\text{fa}}}{t-p}$	$\frac{QM_{\text{fa}}}{QM_{\text{ep}}}$
Erro Puro	$n - b - t + 1$	Por diferença	$QM_{\text{ep}} = \frac{SQ_{\text{ep}}}{n-t}$	
Total	$n - 1$	$SQ_{\text{tot}} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \frac{(\mathbf{1}_n^T \mathbf{y})^2}{n}$		

Além dos testes de hipóteses, como medidas de ajuste, pode-se utilizar o coeficiente de determinação ajustado (R_A^2) e as estatísticas AIC, *deviance* e entre outros. O R_A^2 mostra a proporção de Y que é explicado pelo modelo penalizando-o pelos números de graus de liberdade. No entanto, a estatística deve ser utilizada com cautela, pois a adição de termos no modelos poderá aumentar a estatística R_A^2 e por isso, não deve ser utilizada com uma única medida de ajuste para selecionar um modelo. A estatística é dada por,

$$R^2 = \frac{SQ_{\text{reg}}}{SQ_{\text{tot}}} \quad R_A^2 = 1 - (1 - R^2) \left(\frac{n-1}{n-p} \right).$$

O AIC pressupõe que todos os modelos são incorretos ou existe no máximo um modelo correto e o BIC assume que existe um modelo correto dentre os testados que descreve a verdadeira relação entre a variável resposta e as variáveis regressoras (CHAKRABARTI; GHOSH, 2011). Seja \hat{L} o máximo da função de verossimilhança do modelo, então o AIC é descrito por (BURNHAM; ANDERSON, 2004; AHO; DERRYBERRY; PETERSON, 2014),

$$\text{AIC} = 2p - 2 \ln(\hat{L}).$$

Ao concluir que o modelo selecionado é adequado, caso seja um modelo de polinômios fracionários, para o modelo FP1 as potências deste modelo será denotada por $\tilde{\mathbf{p}} = \{p_1, p_2\}$, em que p_1 e p_2 são as potências para X_1 e X_2 , respectivamente. Já para o

modelo FP2, $\tilde{\mathbf{p}} = \{\tilde{\mathbf{p}}_1, \tilde{\mathbf{p}}_2\}$, sendo que $\tilde{\mathbf{p}}_1 = \{p_1, p_{11}\}$ e $\tilde{\mathbf{p}}_2 = \{p_2, p_{22}\}$. Caso contrário, se este é um modelo polinomial, pela notação, pode-se denotar por $\tilde{\mathbf{p}} = \{1, 1\}$.

Assim, a partir deste modelo pode-se realizar o processo de otimização da função com o objetivo de obter o ponto de máximo deste modelo. Para esse propósito, buscou minimizar esta função e para esse processo foi utilizado o método de Nelder-Mead proposto por Nelder e Mead (1965), em que baseia-se que cada iteração é um simplex, uma figura que possui $k + 1$ vértices de um espaço n -dimensional. Este é um método simples e amplamente utilizado em diversas situações, além de não utilizar o gradiente para o processo de otimização (COSTA, 2019). Para descrever o algoritmo do método Nelder-Mead, faz necessário definir quatro coeficientes. Sendo eles, reflexão (ρ), expansão (χ), contração (γ) e redução (ξ) que devem satisfazer as seguintes condições,

$$\rho > 0, \quad \chi > 1, \quad \chi > \rho, \quad 0 < \gamma < 1 \quad \text{e} \quad 0 < \xi < 1,$$

sendo que geralmente são utilizados $\rho = 1$, $\chi = 2$, $\gamma = \xi = \frac{1}{2}$. Portanto, o algoritmo pode ser descrito como (NELDER; MEAD, 1965; GENTLE, 2010; GIVENS; HOETING, 2012; COSTA, 2019):

1. **Ordenação:** Escolher um simplex com $k+1$ pontos, sendo k o número de incógnitas. Ordenar os $k + 1$ pontos:

$$f(x_1) \leq f(x_2) \leq \dots \leq f(x_{k+1});$$

2. **Centroide:** Calcular o centroide excluindo o vértice x_{k+1} .

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^k \frac{x_i}{k};$$

3. **Reflexão:** Calcular o vértice refletido,

$$x_r = \bar{x} + \rho(\bar{x} - x_{k+1});$$

Se $f(x_1) \leq f(x_r) < f(x_{k+1})$ substituir x_{k+1} por x_r e aceitar como um novo vértice e encerrar iteração. Se $f(x_r) > f(x_1)$, prosseguir para expansão e caso contrário, ir para contração.

4. **Expansão:** Se $f(x_r) < f(x_1)$, calcular o vértice expandido,

$$x_e = \bar{x} + \chi(x_r - \bar{x});$$

Se $f(x_e) < f(x_r)$, substituir x_{k+1} por x_e e encerrar a iteração. Caso contrário, se $f(x_e) \geq f(x_r)$ substituir x_{k+1} por x_r e encerrar a iteração.

5. **Contração:** Se $f(x_r) \geq f(x_{k+1})$:

a) Se $f(x_n) \geq f(x_r) < f(x_{k+1})$, calcular o vértice de contração externa,

$$x_{ce} = \bar{x} + \gamma(x_r - \bar{x});$$

Se $f(x_{ce}) \leq f(x_r)$, substituir x_{k+1} por x_{ce} e encerrar iteração. Caso contrário, ir para o passo 6.

b) Se $f(x_r) \geq f(x_{k+1})$, calcular o vértice de contração interna,

$$x_{ci} = \bar{x} - \gamma(\bar{x} - x_{k+1});$$

Se $f(x_{ci}) < f(x_{k+1})$, substituir x_{k+1} por x_{ci} e encerrar a iteração. Caso contrário, ir para o passo 6.

6. **Redução:** Calcular os vetores $\mathbf{v}_i = x_1 + \xi(x_i - x_1)$, em que $i = 2, \dots, n + 1$. Para a próxima iteração os vértices ainda não ordenados são:

$$x_1, v_2, \dots, v_{k+1}.$$

7. **Convergência:** Como critério ocorre quando a diferença entre o vértices encontrados e o valor da função no centroide é menor que um determinado valor.

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{k+1} \frac{(f(x_i) - f(\bar{x}))^2}{k}} < \Delta_{tol},$$

sendo Δ_{tol} uma tolerância adotada. Geralmente, utiliza-se $1e^8$.

Sendo assim, quanto à localização ponto ótimo, existem algumas situações que podem ser analisadas, dentre elas: i) o ponto é um ponto de sela, ii) o ponto é de mínimo ou de máximo e está dentro da região experimental e iii) o ponto é de mínimo ou de máximo e está fora da região experimental. Dentre todas as situações possíveis, o ponto de máximo absoluto somente estará dentro da região experimental caso o ponto máximo relativo esteja dentro da região, caso contrário, o ponto de máximo absoluto estará nas fronteiras da região experimental.

Desta maneira, para situação i) e iii), seja $E(Y) = f(X_1, X_2)$, sendo $f(\cdot)$ a função do modelo selecionado. Para obter o valores esperado em função dos valores de X_1 e X_2 , caso este máximo esteja nas arestas, basta atribuir valores máximo e mínimo dos fatores, $f(\min\{X_1\}, \min\{X_2\})$, $f(\min\{X_1\}, \max\{X_2\})$, $f(\max\{X_1\}, \min\{X_2\})$ e $f(\max\{X_1\}, \max\{X_2\})$. Mas caso o ponto de máximo absoluto esteja na fronteira, mas não nas arestas, uma forma é deve-se atribuir o valor máximo ou mínimo para uma das variáveis e derivar a função em relação da outra. Esta operação facilitará o processo de obtenção das coordenadas, principalmente para modelos mais complexos.

Sendo assim, seja \hat{X}_1 a estimativa de X_1 ao atribuir um valor de X_2 para a função e \hat{X}_2 a estimativa de X_2 ao atribuir um valor de X_1 para a função. Com isso, obter os valores de Y para para uma dessas situações.

$$f\left(\min\{X_1\}, \hat{X}_2\right); f\left(\max\{X_1\}, \hat{X}_2\right); f\left(\hat{X}_1, \min\{X_2\}\right); f\left(\hat{X}_1, \max\{X_2\}\right).$$

Portanto, as coordenadas do ponto de máximo máximo absoluto dentro da região experimental será o valor máximo de Y dado os X_1 e X_2 .

Uma outra maneira é por meio dos gráficos de superfície de resposta e as curvas de nível. A visualização destes gráficos, fornecerá informações aproximadas da localização do ponto ótimo dentro da região experimental. Sendo assim, estes gráficos podem serem utilizados como auxiliar na obtenção das coordenadas deste ponto.

O gráfico de superfície de resposta é uma representação tridimensional usada na área de estatística experimental, que possibilita determinar os valores das respostas desejáveis em função das condições do experimento, isto é, como a variável resposta é influenciada pelas variáveis regressoras. O gráfico contendo as curvas de nível é uma representação bidimensional utilizada para ilustrar a forma da superfície de resposta. As curvas de nível são linhas que conectam pontos com o mesmo valor da variável de resposta, criando um mapa de contorno fornecendo as regiões com valores que se espera dada as condições das variáveis regressoras. Ambas ilustrações, são obtidas a partir do modelo adequado e a cada duas variáveis regressoras. Caso o modelo seja inadequado, induzirá à conclusões incoerentes e imprecisas.

Para obter estes gráficos, assim como em outros *softwares*, na linguagem e ambiente R já existem funções implementadas que permitem obter a superfície de resposta e as curvas de nível. Para isso, pode-se utilizar as funções **persp** e **contour**, sendo estas nativas do R, ou seja, não é necessário nenhum pacote. Além disso, para obter um gráfico base, basta fornecer apenas três argumentos, sendo X_1 , X_2 e Y . Os dois primeiros argumentos, são sequências de valores das variáveis regressoras X_1 e X_2 de tamanho n e Y uma matriz de dimensão $n \times n$ contendo os valores preditos obtidos por meio da função do modelo $Y = f(X_1, X_2)$.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com base nos resultados apresentados na Tabela 8, observa-se que as médias mais altas de massa seca, isto é, maiores do que 23 g, foram obtidas com doses de N e K superiores a 234 mg de N e 112 mg de K por litro, respectivamente. A partir das Tabelas 9 e 10, por outro lado, observa-se que as mais altas de massa seca das raízes, isto é, maiores do que 18 g, e de teores de clorofila nas folhas, isto é, maiores do que 45 unidades SPAD, foram obtidas com doses de N e K superiores a 117 mg de N e 336 mg de K por litro, respectivamente. Assim, caso o pesquisador deseje obter os níveis médios mais altos para todas as variáveis, poderia pensar, de início, em utilizar doses de N e K superiores a 312 mg de N e 336 mg de K por litro, respectivamente.

Tabela 8. Médias de massa seca da parte aérea, em g, segundo as doses dos nutrientes N e K, em mg.L⁻¹.

K	N				
	28	112	210	336	462
19,5	2,69		6,54		5,53
117		13,82		19,06	
234	3,16		22,55		22,58
312		16,10		23,98	
429	3,05		25,09		25,48

Tabela 9. Médias de massa seca das raízes, em g, segundo as doses dos nutrientes N e K, em mg.L⁻¹.

K	N				
	28	112	210	336	462
19,5	2,30		4,08		2,16
117		9,30		16,96	
234	2,89		14,07		18,47
312		9,30		15,15	
429	2,78		13,93		18,71

Tabela 10. Médias de teor de clorofila, em unidades SPAD, segundo as doses dos nutrientes N e K, em mg.L⁻¹.

K	N				
	28	112	210	336	462
19,5	21,60		31,18		38,00
117		28,53		43,53	
234	20,48		33,55		46,38
312		27,55		43,15	
429	20,58		32,35		46,55

Para os dados deste experimento, foi verificada a necessidade de transformação das variáveis resposta por meio do modelo de Box e Cox (1964), na qual foi sugerido

as transformações logarítmica para a produção de massa seca da parte aérea e teor de clorofila, e raiz quadrada para a produção de massa seca da raiz.

Foram ajustadas todas as possíveis funções para este, na qual perfez o total 11 funções, sendo elas elencadas na tabela abaixo, Tabela 11.

Tabela 11. Possíveis funções de modelo com duas variáveis regressoras, considerando os modelos polinomiais e com polinômios fracionários, com e sem a interação entre as variáveis.

Modelo	$f(X_{1i}, X_{2i}; \beta)$
1	β_0
2	$\beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i}$
3	$\beta_0 + \beta_1 u_{1i} + \beta_2 u_{2i}$
4	$\beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \beta_{12} X_{1i} X_{2i}$
5	$\beta_0 + \beta_1 u_{1i} + \beta_2 u_{2i} + \beta_{12} u_{1i} u_{2i}$
6	$\beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \beta_{11} X_{1i}^2 + \beta_{22} X_{2i}^2$
7	$\beta_0 + \beta_1 u_{1i} + \beta_2 u_{2i} + \beta_{11} u_{1i}^2 + \beta_{22} u_{2i}^2$
8	$\beta_0 + \beta_1 u_{1i} + \beta_2 u_{2i} + \beta_{11} u_{1i}^* + \beta_{22} u_{2i}^*$
9	$\beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \beta_{11} X_{1i}^2 + \beta_{22} X_{2i}^2 + \beta_{12} X_{1i} X_{2i}$
10	$\beta_0 + \beta_1 u_{1i} + \beta_2 u_{2i} + \beta_{11} u_{1i}^2 + \beta_{22} u_{2i}^2 + \beta_{12} u_{1i} u_{2i}$
11	$\beta_0 + \beta_1 u_{1i} + \beta_2 u_{2i} + \beta_{11} u_{1i}^* + \beta_{22} u_{2i}^* + \beta_{12} u_{1i}^* u_{2i}^*$

4.1 Produção de massa seca da parte aérea

Seja Y a produção de massa seca da parte aérea em gramas, X_1 e X_2 as variáveis regressoras, sendo nitrogênio e potássio em mgL^{-1} , respectivamente. Para os modelos ajustados, considerando $\alpha = 0,05$, não houve diferença significativa entre os blocos, mas a interação mostrou ser significativa entre os nutrientes para o peso da massa seca. Com base na Tabela 12, para o logaritmo da produção de massa seca da parte aérea, o melhor modelo ajustado foi o modelo 11. Este que é um modelo com polinômios fracionários de grau 2, cujas potências transformação foram $\{-1/2, 1\}$ para X_1 , $\{-1/2, -1/2\}$ para X_2 e para interação a primeira transformação potência das respectivas variáveis.

Sendo assim, o modelo 11 ajustado para o logaritmo da produção de massa seca da parte aérea é dado por,

$$\begin{aligned}
 \ln(\hat{y}) &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1^{-1/2} + \hat{\beta}_2 X_2^{-1/2} + \hat{\beta}_{11} X_1 + \hat{\beta}_{22} X_2^{-1/2} \ln(X_2) + \hat{\beta}_{12} X_1^{-1/2} X_2^{-1/2} \\
 &= 5,2583 - 22,2796 X_1^{-1/2} - 12,8858 X_2^{-1/2} - 0,0016 X_1 + \\
 &\quad 0,8445 X_2^{-1/2} \ln(X_2) + 54,6076 X_1^{-1/2} X_2^{-1/2}
 \end{aligned}$$

Tabela 12. Valores de AIC e p-valor dos testes para falta de ajuste e pressuposições dos modelos com interação.

Modelo	AIC	Falta de ajuste	Normalidade	Homogeneidade
4	107,96	< 0,01	0,0001	0,1062
5	-66,78	0,0147	0,0820	0,5626
9	21,07	< 0,01	0,3852	0,0507
10	-79,78	0,3732	0,9842	0,0185
11	-87,00	0,9463	0,6052	0,0654

Em relação aos demais modelos que há a presença da interação, é possível verificar que os modelos polinomiais de primeira e segunda ordem, modelos 4 e 9, apresentaram falta de ajuste e o mesmo ocorre para o modelo com polinômios fracionários de grau 1, modelo 5. Sendo assim, estes modelos não se ajustam bem para explicar a variabilidade da raiz quadrada da produção de massa seca da raiz. Por outro lado, para modelo 10, polinômio fracionário de segunda ordem, não há evidências para dizer que há falta de ajuste, mas uma das pressuposições foi violada.

Além do teste da falta de ajuste, foi verificada a adequação do modelo final por meio do gráfico de probabilidade meio-normal com envelope simulado, Figura 9. Por meio

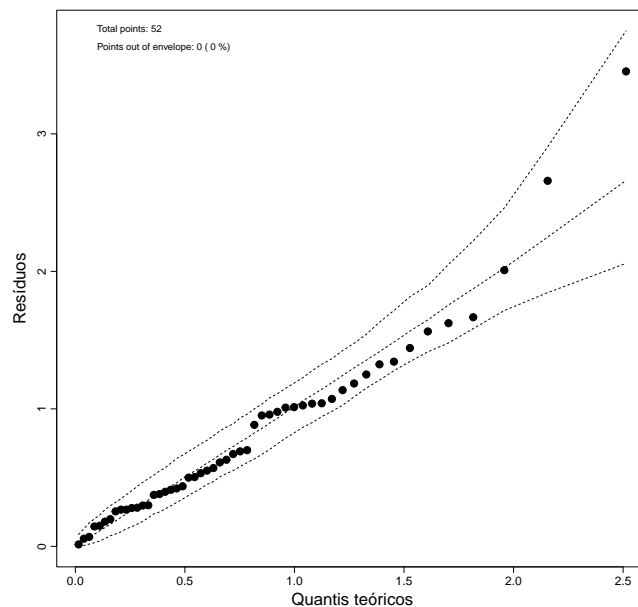


Figura 9. Gráfico de envelope simulado do modelo FP2 para a variável resposta peso de massa seca da parte aérea.

do teste da falta de ajuste e pelo envelope simulado, conclui-se que não há evidências para afirmar que o modelo é inadequado. Sendo assim, esta é uma função bem ajustada que descreve a relação entre as variáveis regressoras e a resposta.

Então, a partir deste modelo, além de determinar as doses de nitrogênio e potássio que maximizaram Y , foi possível obter o gráfico da superfície de resposta, Figura 10,

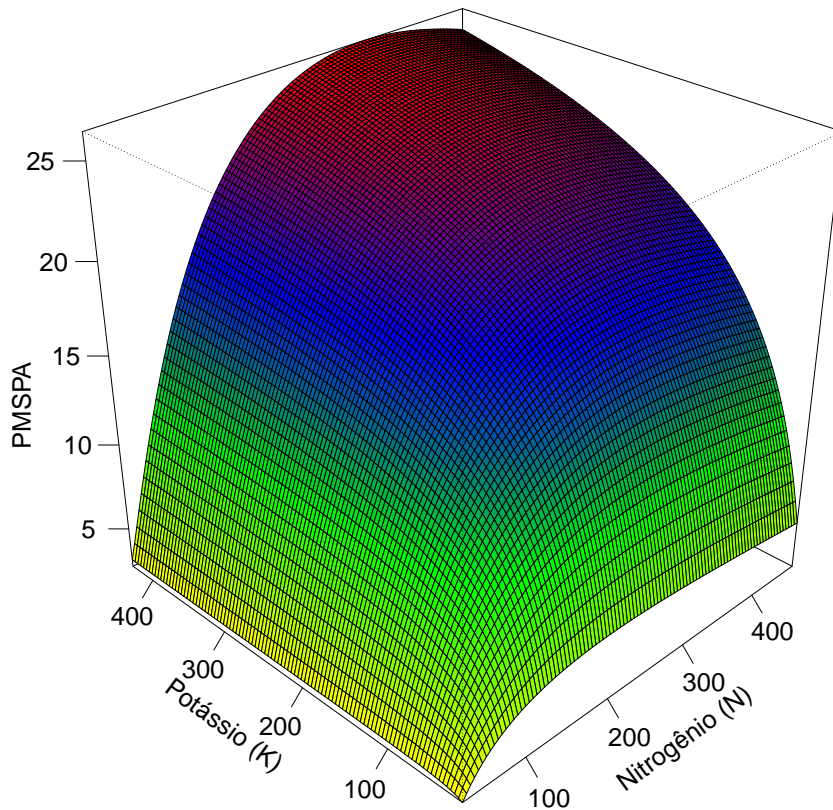


Figura 10. Superfície de resposta da produção de massa seca da parte aérea do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1} .

e as curvas de nível, Figura 11. Pelas Figuras, em específico pelas curvas de nível, é possível observar que o aumento da produção se estende para além das doses estudadas no experimento. Para determinar o máximo absoluto na região do experimento, analisou-se as curvas de nível e a função do modelo. Como resultado, obteve-se que o máximo na região ocorre para as doses 335 mgL^{-1} de nitrogênio e 429 mgL^{-1} de potássio, produzindo aproximadamente 26 gramas. As coordenadas do ponto de máximo está indicada pelo ponto vermelho.

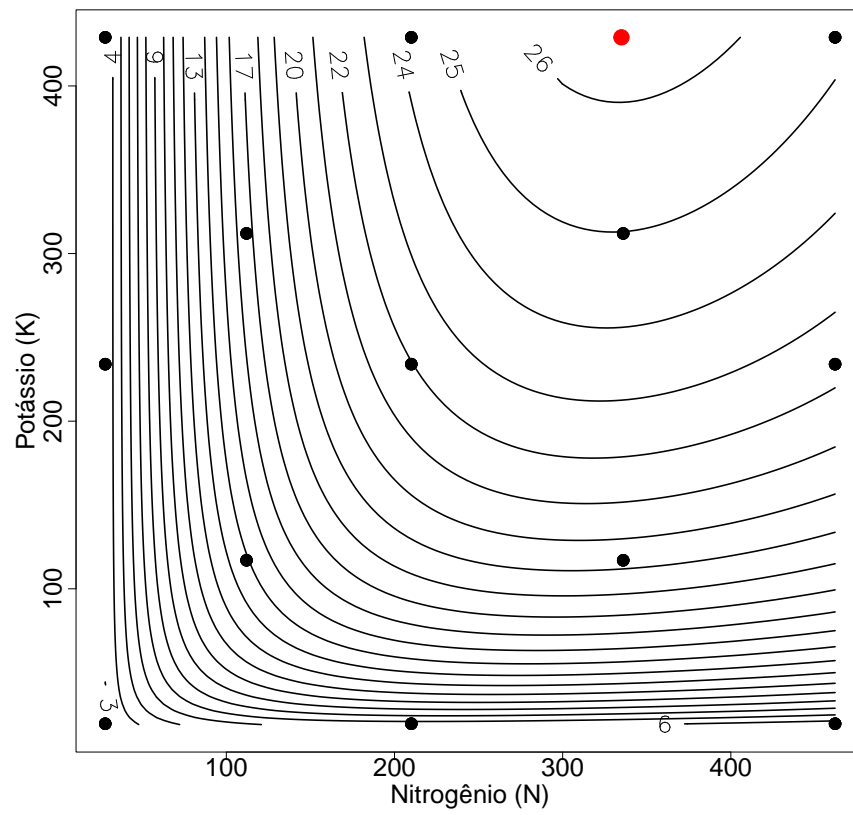


Figura 11. Curvas de nível da produção de massa seca da parte aérea do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL⁻¹.

4.2 Produção de massa seca da raiz

Seja Y o peso da massa seca da raiz em gramas, X_1 e X_2 as variáveis regressoras, nitrogênio e potássio em mgL^{-1} , respectivamente. Para os modelos ajustados, considerando $\alpha = 0,05$, não houve diferença significativa entre os blocos, mas a interação mostrou ser significativa entre os nutrientes para o peso da massa seca da raiz. Pela Tabela 13, para a raiz quadrada da produção de massa seca da raiz, o melhor modelo ajustado foi o modelo 11. Este é um modelo com polinômios fracionários de grau 2, cujas potências transformação foram $\{1/2, 1/2\}$ para X_1 , $\{-2, -2\}$ para X_2 e para interação a primeira potência das respectivas variáveis.

Tabela 13. Valores de AIC e p-valor dos testes para falta de ajuste e pressuposições dos modelos com interação.

Modelo	AIC	Falta de ajuste	Normalidade	Homogeneidade
4	125,87	< 0,01	0,2061	0,0285
5	-3,43	< 0,01	0,4697	0,0102
9	65,73	< 0,01	0,5124	0,2245
10	-26,61	0,3494	0,9303	0,1462
11	-28,25	0,4711	0,9925	0,1491

Analisando os demais modelos constantes na Tabela 13, tem-se que os modelos polinomiais de primeira e segunda ordem, como o modelo com polinômios fracionários de grau 1, modelos 4, 9 e 5, respectivamente, apresentam evidência de que há falta de ajuste. Em contrapartida, os modelos com polinômios fracionários de segunda ordem e o com polinômios fracionários de grau 2, modelos 10 e 11, são candidatos a serem selecionados. Entretanto, pelos valores de AIC o último modelo é mais parcimonioso.

Sendo assim, o modelo 11 ajustado para a raiz quadrada da produção de massa seca da raiz é dado por,

$$\begin{aligned}\sqrt{\hat{y}} &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1^{1/2} + \hat{\beta}_2 X_2^{-2} + \hat{\beta}_{11} X_1^{1/2} \ln(X_1) + \hat{\beta}_{22} X_2^{-2} \ln(X_2) + \hat{\beta}_{12} X_1^{1/2} X_2^{-2} \\ &= -1,2507 + 0,8950 X_1^{1/2} - 1552,106 X_2^{-2} - 0,1041 X_1^{1/2} \ln(X_1) + \\ &\quad 615,8117 X_2^{-2} \ln(X_2) - 62,6191 X_1^{1/2} X_2^{-2}.\end{aligned}$$

Além do teste da falta de ajuste, foi verificada a adequação do modelo final por meio do gráfico de probabilidade meio-normal com envelope simulado, Figura 12. Por meio do teste e pelo envelope simulado, conclui-se que o modelo selecionado se ajusta bem aos dados e pode explicar a variabilidade da raiz quadrada da variável repostada em função das variáveis regressoras.

Então, a partir do modelo selecionado, além de determinar as doses de nitrogênio e potássio que maximizaram Y , foi possível obter os gráfico da superfície de resposta, Figura

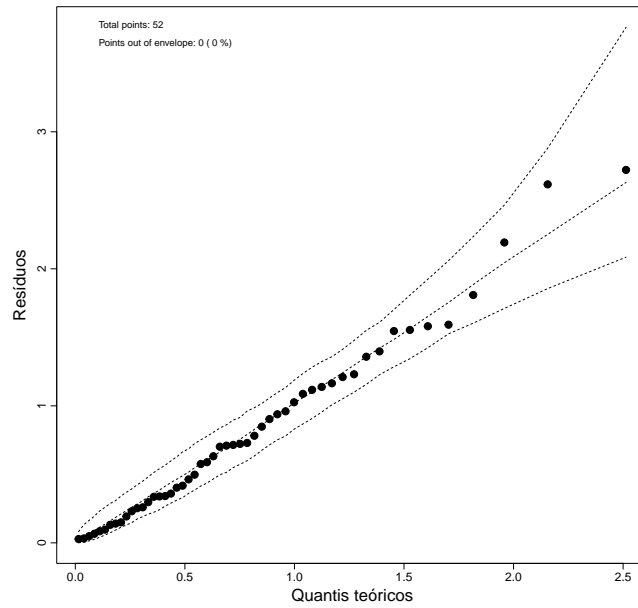


Figura 12. Gráfico de envelope simulado do modelo FP2 para a variável resposta peso de massa seca da raiz.

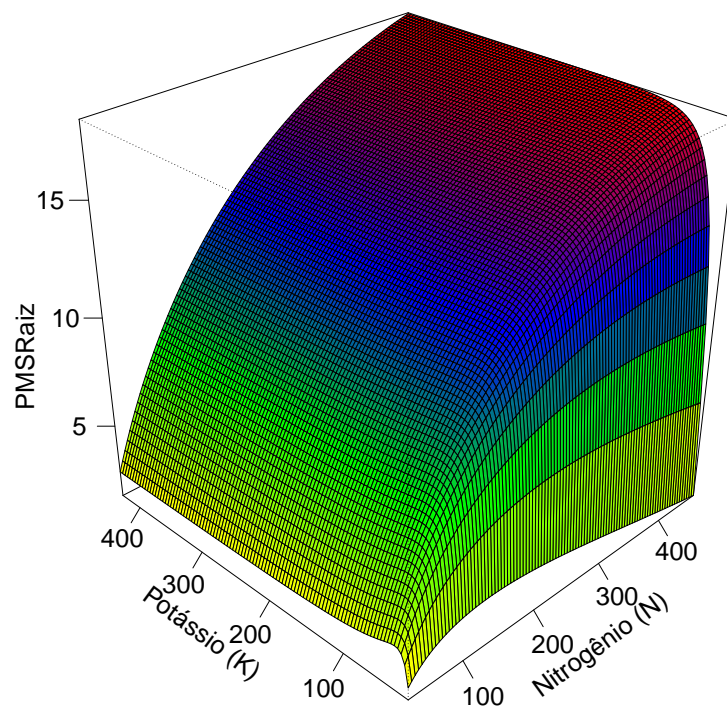


Figura 13. Superfície de resposta da produção de massa seca da raiz do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1} .

13, e as curvas de nível, Figura 14. Por ambas as ilustrações, em específico pelas curvas de nível, é possível observar que há um aumento da produção para além das doses estudadas no experimento, mas acredita-se que este acréscimo é mínimo. Para obter as doses que propiciaram a produção máxima dentro da região do experimento, analisou-se as curvas de nível e a função do modelo. Como resultado, obteve-se que o máximo absoluto na região ocorreu para as doses 462 mgL^{-1} de nitrogênio e 184 mgL^{-1} de potássio, produzindo aproximadamente 18 gramas de massa seca da raiz. As coordenadas do ponto de máximo está indicada pelo ponto vermelho.

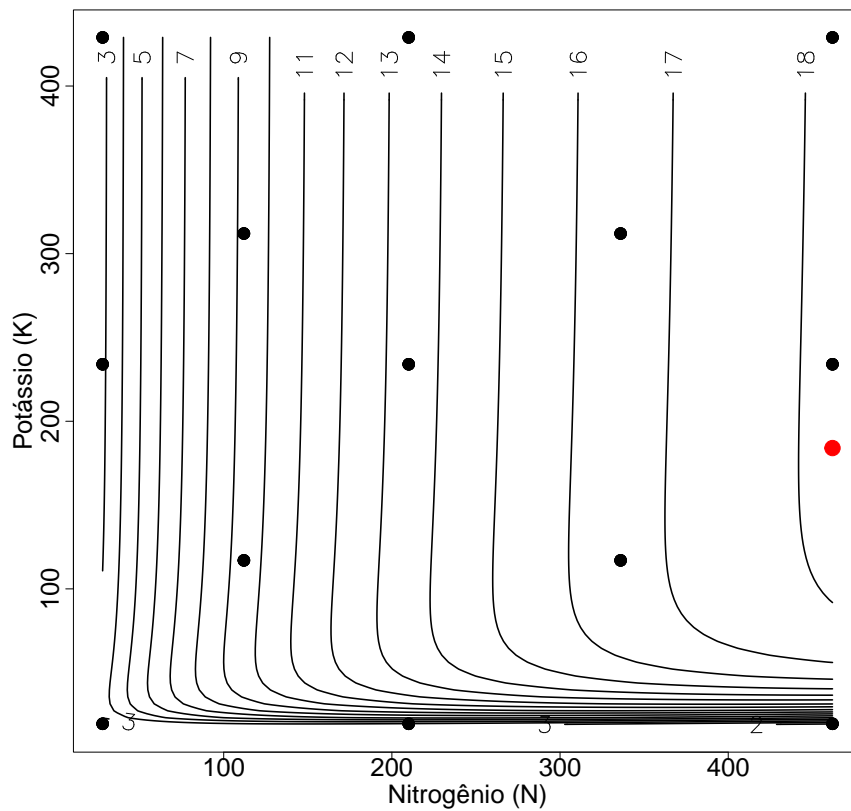


Figura 14. Curvas de nível da produção de massa seca da raiz do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1} .

4.3 Estimativa do teor de clorofila

Seja Y o teor de clorofila, X_1 e X_2 as variáveis regressoras, nitrogênio e potássio em mgL^{-1} , respectivamente. Para os modelos ajustados, considerando $\alpha = 0,05$, não houve diferença significativa entre os blocos, mas a interação entre os nutrientes mostrou ser significativa para o teor de clorofila na planta. Pela Tabela 14, para o logaritmo do teor de clorofila, existe mais de um modelo candidato para ajustar a estes dados. Portanto pela bondade de ajuste e pressuposições do modelo, estes candidatos são os modelos 5, 10 e 11, na qual são os modelos com polinômios fracionários de grau 1 (FP1), de segunda ordem e de grau 2 (FP2), respectivamente.

Tabela 14. Valores de AIC e p-valor dos testes para falta de ajuste e pressuposições dos modelos com interação.

Modelo	AIC	Falta de ajuste	Normalidade	Homogeneidade
4	-75,41	< 0,01	0,2952	0,2017
5	-133,73	0,0549	0,8015	0,0976
9	-131,38	< 0,01	0,0089	0,3803
10	-143,37	0,5191	0,2821	0,1093
11	-143,37	0,5191	0,2821	0,1093

Entretanto, pelo critério do valor do AIC, para esta variável resposta, o melhor modelo apresenta duas possibilidades de ajuste, modelo 10 e 11. Ou seja, devido as potências transformação e as estruturas dos modelos resultaram em serem iguais. Para o modelo 10, as potências foram $\{1\}$ para X_1 e $\{-1\}$ para X_2 . Já para o modelo 11, o modelo selecionado apresentou as potências $\{1, 2\}$ para X_1 , $\{-1, -2\}$ para X_2 e para interação a primeira potência das respectivas variáveis. Sendo assim, o modelo ajustado para o logaritmo do teor de clorofila é dado por,

$$\begin{aligned} \ln(\hat{y}) &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1 + \hat{\beta}_2 X_2^{-1} + \hat{\beta}_{11} X_1^2 + \hat{\beta}_{22} X_2^{-2} + \hat{\beta}_{12} X_1 X_2^{-1} \\ &= 2,8925 + 0,0035 X_1 + 15,6339 X_2^{-1} - 3,15 \cdot 10^{-6} X_1^2 - \\ &\quad 266,7951 X_2^{-2} - 0,0120 X_1 X_2^{-1} \end{aligned}$$

Além do teste da falta de ajuste do modelo, foi verificada a adequação do modelo final por meio do gráfico de probabilidade meio-normal com envelope simulado, Figura 15. Por meio do teste e pelo envelope simulado, conclui-se que o modelo selecionado se ajusta bem aos dados e pode explicar a variabilidade do logaritmo da variável resposta em função das variáveis regressoras.

Então, a partir do modelo selecionado, além de determinar as doses de nitrogênio e potássio que maximizaram Y , foi possível obter os gráfico da superfície de resposta, Figura 16, e as curvas de nível, Figura 17. Por ambas as ilustrações, em específico pelas

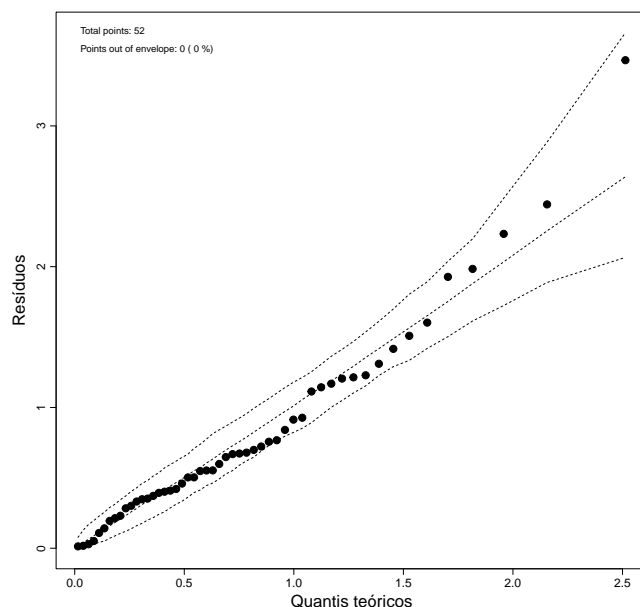


Figura 15. Gráfico de envelope simulado do modelo FP2 para a variável resposta estimativa do teor de clorofila.

curvas de nível, é possível observar que o aumento da produção se estende para além das doses estudadas no experimento, mas que este máximo não está tão distante desta região. Por meio do método otimização de Nelder-Mead, a o teor de clorofila máximo da planta ocorre para as doses 515 mgL^{-1} de nitrogênio e 56 mgL^{-1} de potássio, produzindo aproximadamente 50 unidades SPAD.

Para obter as doses que propiciaram o máximo absoluto na região do experimento, analisou-se as curvas de nível e a função do modelo. Como resultado, obteve-se que o máximo na região ocorreu para as doses 462 mgL^{-1} de nitrogênio e 53 mgL^{-1} de potássio, produzindo aproximadamente 50 unidades SPAD. As coordenadas do ponto de máximo está indicada pelo ponto vermelho.

4.4 Considerações gerais

A produtividade de forragem está associada diretamente com o desenvolvimento da planta. Como um dos indicativos do crescimento vegetal, pode-se averiguar o porte da parte aérea da planta e a dimensão do seu sistema radicular. As raízes desempenham as principais funções para o vegetal, sendo responsável pela fixação da planta no substrato, absorção e transporte de água e nutrientes (LAVRES JUNIOR, 2001). Em diversas plantas, inclusive em forrageiras, o sistema radicular poderá fornecer informações sobre o desenvolvimento máximo da planta. Já a parte aérea, é o principal objetivo em se cultivar as plantas forrageiras, pois desta parte que se extrai o alimento para os animais. Um fator preponderante, além das raízes, para o aumento da forragem é o teor de clorofila

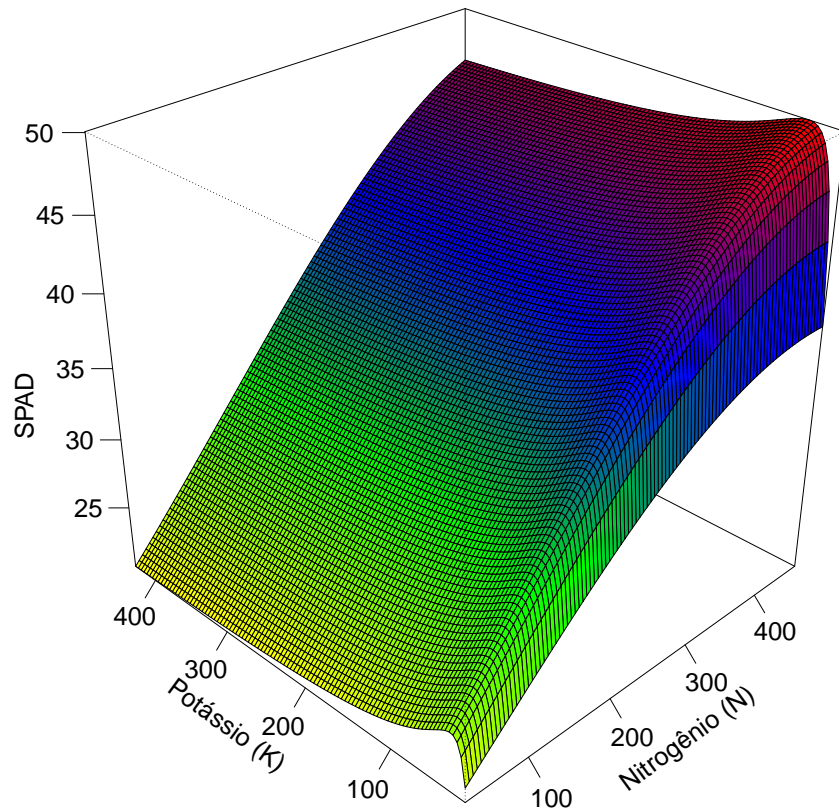


Figura 16. Superfície de resposta da estimativa do teor de clorofila do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1} .

que existe nas folhagens, pois a clorofila é o principal agente da fotossíntese. Por esses motivos foi de suma importância avaliar estas características do capim-Mombaça, além de determinar as doses que maximizaram as mesmas neste experimento.

Assim, atrelado a produtividade, o desenvolvimento vegetal é influenciado por diversos fatores, incluindo a disponibilidade de nutrientes essenciais, sendo estes divididos em macronutrientes e micronutrientes. Os macronutrientes são aqueles que a planta requer em maior quantidade, dentre estes, destaca-se o nitrogênio e o potássio, os mais requeridos dentro desta classificação. O nitrogênio serve como constituinte de diversos componentes celulares vegetais, incluindo clorofila, aminoácidos e ácidos nucleicos (TAIZ et al., 2015). Além de estimular o crescimento de folhas, caules e raízes (LAVRES JUNIOR, 2001). O potássio é o principal nutriente no estabelecimento da turgescência celular e no transporte dos nutrientes da raiz para as plantas (TAIZ et al., 2015).

Considerando as importantes funções estes nutrientes desempenham nas plantas, então, para o experimento apresentado era esperado que houvesse interação significativa entre estes nutrientes para todas as variáveis resposta analisadas. O mesmo comporta-

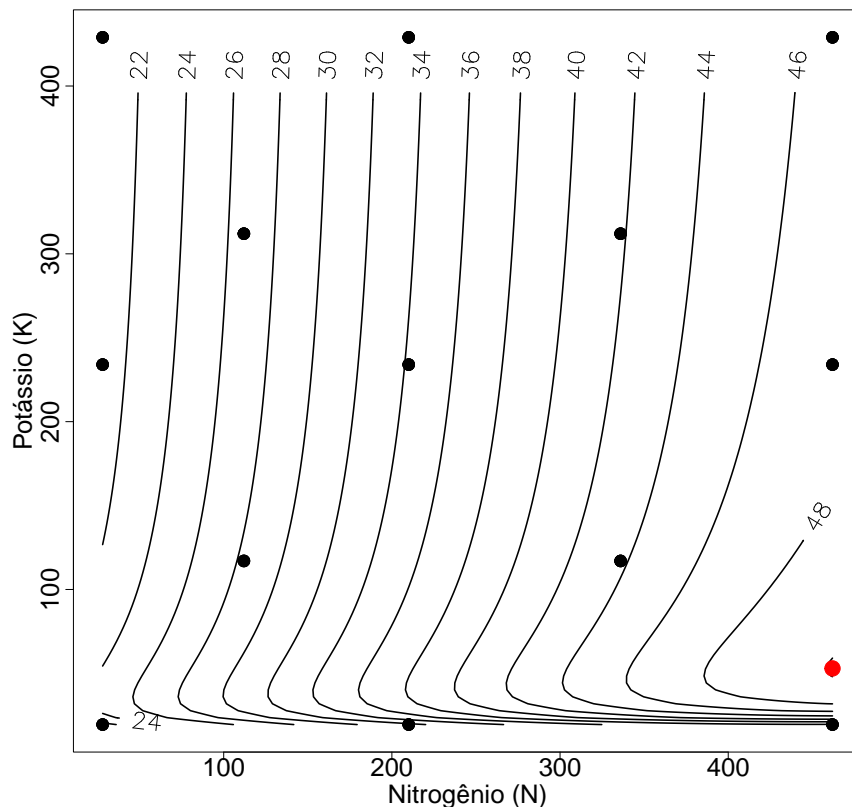


Figura 17. Curvas de nível da estimativa do teor de clorofila do capim-Mombaça, segundo das doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1} .

mento entre os nutrientes foram observados em trabalhos de diversos autores, dentre eles, Viana (2007) que identificou interação positiva para produção de fitomassa e nitrogênio na espiga de trigo, Megda e Monteiro (2015) mostrou que a interação entre nitrogênio e potássio é essencial para o crescimento do capim Marandu, Bonfim-Silva et al. (2018) concluiu que a interação entre os nutrientes foi significativa para características produtivas de *Urochloa brizantha* e Almeida et al. (2022) concluiu que interação foi significativa para o desenvolvimento para três cultivares de *Panicum maximum*.

Quanto aos modelos ajustados para análise dos dados, foi possível verificar pelas tabelas 12, 13 e 14, que os modelos polinomiais de primeira e segunda ordem, geralmente, apresentaram falta de ajuste. Esta característica também foi observada para os dados utilizado na ilustração da metodologia deste trabalho e, portanto, o modelos com polinômios fracionários realmente é uma alternativa para os casos em que o modelos polinomiais não se ajustam bem.

Como uma forma de estender as análises das curvas de nível obtidas para cada uma das variáveis de forma isolada, foram sobrepostas as curvas de nível da produção de massa seca da raiz e da parte aérea e, do teor de clorofila, com objetivo de determinar as doses que maximizam as produções do capim-Mombaça (ver Figura 18). Com base nesta

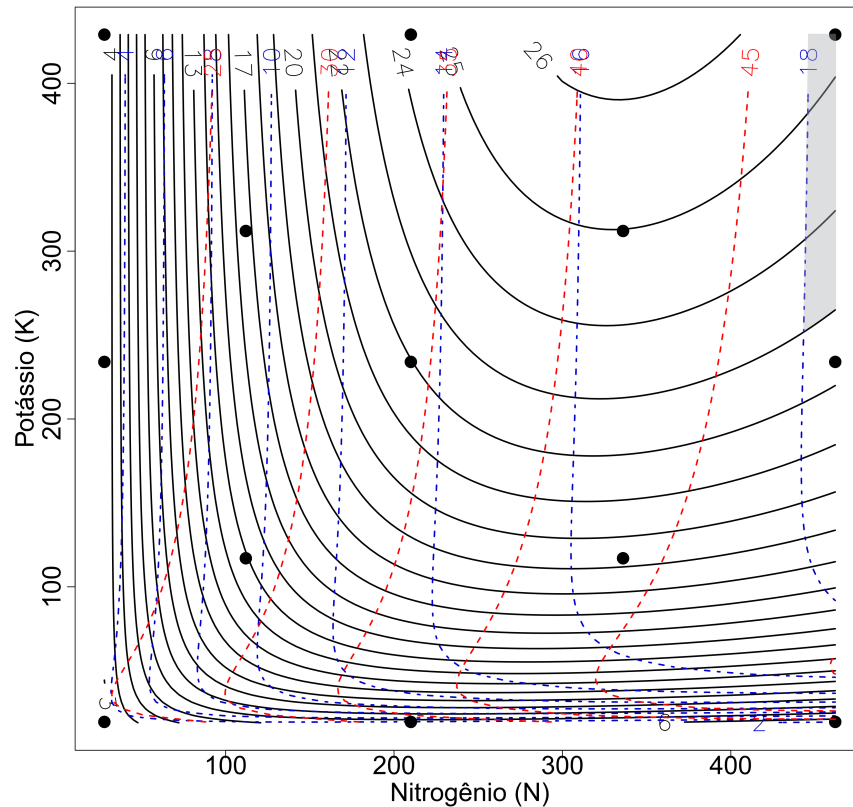


Figura 18. Sobreposição das Curvas de nível da produção de massa seca da parte aérea (linhas pretas), produção de massa seca da raiz (linhas azuis) e estimativa do teor de clorofila (linhas vermelhas), segundo as doses de nitrogênio e potássio, em mgL^{-1} .

Figura, é possível identificar de forma conjunta as doses que maximizaram as respostas. Sendo assim, considerando a produção de massa seca da parte aérea acima de 24 gramas, massa seca da raiz acima de 18 gramas e teor de clorofila maior do que 45 unidades SPAD, é sugerido utilizar as doses de nitrogênio e potássio que pertencente à região hachurada, ou seja, doses superiores à 444 mgL^{-1} de nitrogênio e 252 mgL^{-1} de potássio, respectivamente. Portanto, considerando os pontos do experimento, as dose que maximizaram as características do capim-mombaça foram as doses máximas de ambos os nutrientes, isto é, 462 mgL^{-1} de nitrogênio e 429 mgL^{-1} de potássio.

Os resultados encontrados neste trabalho são similares aos encontrados por autores que analisaram a relação de nitrogênio e potássio para algumas dessas características. Para a produção de massa seca da parte aérea, segundo Bonfim-Silva et al. (2018) a produção máxima do capim piatã ocorreu para doses 287 mgL^{-1} de nitrogênio e para a dose máxima de potássio utilizada no experimento, 360 mgL^{-1} . Segundo Sarmiento et al. (2008) a deficiência de nitrogênio prejudica o crescimento radicular do *Panicum maximum* e, concluíram que o aumento do sistema se dá linearmente na presença deste nutriente.

De acordo com Almeida et al. (2022), que realizou um ensaio de adubação para

avaliar o comportamento do nitrogênio em cinco doses de nitrogênio ao fixar a dose de potássio em 200 mgL^{-1} , observaram que a concentração de clorofila aumentou linearmente na medida que aumentou-se as doses de nitrogênio. Corroborando com os autores, Megda e Monteiro (2015) os autores realizaram um ensaio de adubação com cinco doses de cada um dos nutrientes, nitrogênio e potássio, e observaram que doses que maximizam as características produtivas do capim Marandu são as doses máximas utilizadas no experimento, sendo 462 mgL^{-1} de nitrogênio e 430 mgL^{-1} de potássio.

5 CONCLUSÕES

Para o presente trabalho concluímos que os objetivos foram alcançados, pois por meio dos modelos com polinômios fracionários foi possível obter um modelo adequado que representou a relação entre as doses de nitrogênio e potássio para a produção de massa seca, tanto para a parte aérea e raiz, como também para o teor de clorofila. Por consequência, determinar as doses dos nutrientes que maximizaram a produção do capim-Mombaça.

Pela metodologia proposta, os modelos com polinômios fracionários podem ser utilizados com a mesma estrutura dos modelos polinomiais, desde a análise das pressuposições até o ajuste e seleção do modelo. Por esse motivo é de suma importância para os pesquisadores, pois foi possível obter a estimação por meio de mínimos quadrados, assim como realizado para os modelos polinomiais. Além disso, a proposta foi apresentada a facilidade para realizar a seleção dos modelos, não sendo necessário realizar diversos processos até chegar ao modelo que se ajusta bem aos dados.

Por final, os resultados obtidos, tem-se que os modelos com polinômios fracionários pode ser uma alternativa para analisar os dados quando os modelos polinomiais apresentam falta de ajuste, em especial, para ensaios de adubação em que foi empregado o esquema fatorial 5^k incompleto de Littell e Mott (1975).

REFERÊNCIAS

- AHO, K.; DERRYBERRY, D.; PETERSON, T. Model selection for ecologists: the worldviews of AIC and BIC. **Ecology**, JSTOR, v. 95, n. 3, p. 631–636, 2014.
- ALMEIDA, E. M. de; MONTAGNER, D. B.; DIFANTE, G. d. S.; ARAÚJO, A. R. de; SANTANA, J. C. S.; GURGEL, A. L. C.; SCARIOT, C. Growth dynamics and nutrient uptake of panicum maximum under nitrogen fertilisation. **New Zealand Journal of Agricultural Research**, Taylor & Francis, p. 1–15, 2022.
- ATKINSON, A. C.; RIANI, M.; CORBELLINI, A. The box–cox transformation: Review and extensions. 2021.
- BONFIM-SILVA, E. M.; MONTEIRO, F. A. Nitrogênio e enxofre na adubação e em folhas diagnósticas e raízes do capim-braquiária em degradação. **Revista Brasileira de Zootecnia**, SciELO Brasil, v. 39, p. 1641–1649, 2010.
- BONFIM-SILVA, E. M.; MONTEIRO, F. A.; SILVA, T. J. A. da. Nitrogênio e enxofre na produção e no uso de água pelo capim-braquiária em degradação. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, SciELO Brasil, v. 31, p. 309–317, 2007.
- BONFIM-SILVA, E. M.; MORAIS, L. P. V. Xavier Correa de; PACHECO, A. B.; SILVA, T. J. A. da; SOUSA, H. H. de F.; SANTO, E. S. do E. Interaction between nitrogen and potassium in fertilization of the piatã grass (*urochloa brizantha*): productive and phytometric characteristics. **Australian Journal of Crop Science**, Southern Cross Publishers, Lismore, N.S.W., v. 12, n. 7, p. 1122–1128, 2018.
- BOX, G. E.; COX, D. R. An analysis of transformations. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)**, Wiley Online Library, v. 26, n. 2, p. 211–243, 1964.
- BOX, G. E.; DRAPER, N. R. A basis for the selection of a response surface design. **Journal of the American Statistical Association**, Taylor & Francis, v. 54, n. 287, p. 622–654, 1959.
- BOX, G. E.; HUNTER, J. S. Multi-factor experimental designs for exploring response surfaces. **The Annals of Mathematical Statistics**, JSTOR, p. 195–241, 1957.
- BOX, G. E.; TIDWELL, P. W. Transformation of the independent variables. **Technometrics**, Taylor & Francis, v. 4, n. 4, p. 531–550, 1962.
- BOX, G. E.; WILSON, K. B. On the experimental attainment of optimum conditions. **Journal of the Royal Statistical Society, Series B**, v. 13, p. 1–45, 1951.
- BURNHAM, K. P.; ANDERSON, D. R. Multimodel inference: understanding AIC and BIC in model selection. **Sociological Methods & Research**, Sage Publications Sage CA: Thousand Oaks, CA, v. 33, n. 2, p. 261–304, 2004.
- CANTO, M. W. do; NETO, A. B.; PANCERA JÚNIOR, E. J.; GASPARINO, E.; BOLETA, V. S. Produção e qualidade de sementes do capim-mombaça em função da adubação nitrogenada. **Bragantia**, SciELO Brasil, v. 71, p. 430–437, 2012.

CHAKRABARTI, A.; GHOSH, J. K. AIC, BIC and recent advances in model selection. **Philosophy of Statistics**, Elsevier, p. 583–605, 2011.

CONAGIN, A. Delineamentos “compostos centrais ortogonais, rotacionais e divisíveis em blocos”. **Bragantia**, SciELO Brasil, v. 41, p. 49–56, 1982.

COSTA, E. da. **Otimização de múltiplas respostas por meio do método de Nelder-Mead**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Maringá (UEM), 2019.

EDMONDSON, R. Agricultural response surface experiments based on four-level factorial designs. **Biometrics**, JSTOR, p. 1435–1448, 1991.

EMBRAPA. **Panicum maximum cv. Mombaça**. 2023. Acesso em: 04 abril 2023. Disponível em: <<https://www.embrapa.br/busca-de-solucoes-tecnologicas/-/produto-servico/882/panicum-maximumcv-mombaca>>.

FERREIRA, I. E.; ZOCCHI, S. S.; BARON, D. Reconciling the Mitscherlich’s law of diminishing returns with Liebig’s law of the minimum. Some results on crop modeling. **Mathematical Biosciences**, Elsevier, v. 293, p. 29–37, 2017.

GARCIA, E. P. **Uso de polinômios fracionários nos modelos mistos**. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2019.

GARRONE, R. F.; CAMPOS, A. G. de; SILVEIRA, C. P.; LAVRES JUNIOR, J. Produção de biomassa, diagnose nutricional e absorção de nitrogênio e cálcio durante crescimento inicial do pinhão-manso. **Revista Ciência Agronômica**, SciELO Brasil, v. 47, p. 22–31, 2016.

GENTLE, J. E. **Computational statistics**. [S.l.]: Springer, 2010.

GILMOUR, S. G.; TRINCA, L. A. Fractional polynomial response surface models. **Journal of Agricultural, Biological, and Environmental Statistics**, Springer, v. 10, n. 1, p. 50–60, 2005.

GIVENS, G. H.; HOETING, J. A. **Computational statistics**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2012. v. 703.

HILL, W. J.; HUNTER, W. G. A review of response surface methodology: a literature survey. **Technometrics**, Taylor & Francis, v. 8, n. 4, p. 571–590, 1966.

JANK, L.; BARRIOS, S. C.; VALLE, C. B. do; SIMEÃO, R. M.; ALVES, G. F. The value of improved pastures to brazilian beef production. **Crop and Pasture Science**, CSIRO Publishing, v. 65, n. 11, p. 1132–1137, 2014.

KHURI, A. I. Response surface methodology and its applications in agricultural and food sciences. **Biometrics & Biostatistics International Journal**, v. 5, n. 5, p. 1–11, 2017.

KHURI, A. I.; CORNELL, J. A. **Response Surfaces: Designs and Analyses**. [S.l.]: CRC Press, 1996. v. 152.

LAVRES JUNIOR, J. **Combinações de doses de nitrogênio e potássio para o capim-mombaça**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2001.

LAVRES JUNIOR, J.; MONTEIRO, F. A. Perfilhamento, área foliar e sistema radicular do capim-mombaça submetido a combinações de doses de nitrogênio e potássio. **Revista Brasileira de Zootecnia**, SciELO Brasil, v. 32, p. 1068–1075, 2003.

LITTELL, R.; MOTT, G. Computer assisted design and analysis of response surface experiments in agronomy. In: **Proceedings of the Soil and Crop Science Society of Florida**. [S.l.: s.n.], 1975.

MEAD, R.; PIKE, D. J. A review of response surface methodology from a biometrics viewpoint. **Biometrics**, v. 31, p. 803–851, 1975.

MEGDA, M. M.; MONTEIRO, F. A. Marandu palisadegrass mineral nutrition and production related to nitrogen and potassium supply. **Journal of Plant Nutrition**, Taylor & Francis, v. 38, n. 2, p. 277–294, 2015.

MONTGOMERY, D. C. **Design and analysis of experiments**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2012.

MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. **Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016.

NELDER, J. A.; MEAD, R. A simplex method for function minimization. **The computer journal**, Oxford University Press, v. 7, n. 4, p. 308–313, 1965.

PALADINES, O.; LASCANO, C. E. **Forage germplasm under small-plot grazing: evaluation methodologies**. [S.l.]: CIAT, 1993.

R Core Team. **R: A Language and Environment for Statistical Computing**. Vienna, Austria, 2022. Disponível em: <<https://www.R-project.org/>>.

REGIER, M. D.; PARKER, R. D. Smoothing using fractional polynomials: an alternative to polynomials and splines in applied research. **Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics**, Wiley Online Library, v. 7, n. 4, p. 275–283, 2015.

ROYSTON, P.; ALTMAN, D. G. Regression using fractional polynomials of continuous covariates: parsimonious parametric modelling. **Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)**, Wiley Online Library, v. 43, n. 3, p. 429–453, 1994.

ROYSTON, P.; ALTMAN, D. G. Approximating statistical functions by using fractional polynomial regression. **Journal of the Royal Statistical Society: Series D (The Statistician)**, Wiley Online Library, v. 46, n. 3, p. 411–422, 1997.

ROYSTON, P.; SAUERBREI, W. A new approach to modelling interactions between treatment and continuous covariates in clinical trials by using fractional polynomials. **Statistics in Medicine**, Wiley Online Library, v. 23, n. 16, p. 2509–2525, 2004.

ROYSTON, P.; SAUERBREI, W. Improving the robustness of fractional polynomial models by preliminary covariate transformation: a pragmatic approach. **Computational Statistics & Data Analysis**, Elsevier, v. 51, n. 9, p. 4240–4253, 2007.

ROYSTON, P.; SAUERBREI, W. **Multivariable model-building: a pragmatic approach to regression analysis based on fractional polynomials for modelling continuous variables**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.

SALES, M. F. L.; VALENTIM, J. F.; ANDRADE, C. M. S. de. **Capim mombaça: formação e manejo de pastagens no Acre**. [S.l.]: EMBRAPA Acre, 2002. Folder.

SARMENTO, P.; RODRIGUES, L. R. d. A.; LUGÃO, S. M. B.; CRUZ, M. C. P. d.; CAMPOS, F. P. d.; FERREIRA, M. E.; OLIVEIRA, R. F. d. Sistema radicular do panicum maximum jacq. cv. ipr-86 milênio adubado com nitrogênio e submetido à lotação rotacionada. **Revista Brasileira de Zootecnia**, SciELO Brasil, v. 37, p. 27–34, 2008.

SARRUGE, J. Nutrient solutions. **Summa Phytopathologica (Brazil)**, v. 1, p. 231–233, 1975.

SAS Institute Inc. **SAS/STAT Software**. 2023. Acesso em: 24 maio 2023. Disponível em: <https://www.sas.com/en_us/software/stat.html>.

SAUERBREI, W.; MEIER-HIRMER, C.; BENNER, A.; ROYSTON, P. Multivariable regression model building by using fractional polynomials: description of SAS, STATA and R programs. **Computational Statistics & Data Analysis**, Elsevier, v. 50, n. 12, p. 3464–3485, 2005.

SILVA, A. O. d.; SILVA, D. J.; BASSOI, L. H.; CHAVES, A. R. d. M. NO_3^- , K^+ , and chlorophyll index in fertigated grapevines in the semi-arid region of Brazil. **Scientia Agricola**, SciELO Brasil, v. 80, 2022.

SILVA, J. N. D.; NETO, F. B.; LIMA, J. S. S. D.; CHAVES, A. P.; SANTOS, E. C. D.; NUNES, R. L. C. Agro-economic indicators for carrot under green manure in a semi-arid environment. **Revista Caatinga**, SciELO Brasil, v. 34, p. 257–265, 2021.

SILVA, T. J. da; PACHECO, A. B.; BONFIM-SILVA, E. M.; DUARTE, T. F. Water availability and potassium doses in cherry tomato quality. **Engenharia Agrícola**, SciELO Brasil, v. 38, p. 657–664, 2018.

SILVEIRA, C. P.; MONTEIRO, F. A. Macronutrientes em folhas diagnósticas do capim-tanzânia adubado com nitrogênio e cálcio. **Revista Brasileira de Zootecnia**, SciELO Brasil, v. 39, p. 736–745, 2010.

SILVEIRA, C. P.; MONTEIRO, F. A. Influência da adubação com nitrogênio e cálcio nas características morfológicas e produtivas das raízes de capim-tanzânia cultivado em solução nutritiva. **Revista Brasileira de Zootecnia**, SciELO Brasil, v. 40, p. 47–52, 2011.

StataCorp. **Stata Statistical Software: Release 18**. 2023. Acesso em: 24 maio 2023. Disponível em: <<https://www.stata.com>>.

TAIZ, L.; ZEIGER, E.; MÖLLER, I. M.; MURPHY, A. et al. **Plant physiology and development**. [S.l.]: Sinauer Associates Incorporated, 2015.

VIANA, E. M. **Interação de nitrogênio e potássio na nutrição, no teor de clorofila e na atividade da redutase do nitrato de plantas de trigo**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2007.

