

LAURO BOECHAT BATISTA

Engenheiro Agrônomo

Professor Assistente do Departamento de Matemática
do Instituto de Ciências Exatas da Universidade
Federal Rural do Rio de Janeiro

DETERMINAÇÃO DE α PARA TORNAR ORTOGONAL
O DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL (BOX)

Orientador : Prof. Dr. Frederico Pimentel Gomes

Dissertação apresentada à Escola
Superior de Agricultura "Luiz de
Queiroz" da Universidade de São
Paulo, para obtenção do grau de
"Mestre"

PIRACICABA

ESTADO DE SÃO PAULO - BRASIL

1976

Maria da Conceição (esposa)

Kellen (filha)

Tanclides (pai)

Maria (mãe)

Luiz Coutinho (amigo)

dedico

A melhor maneira de se agradecer aos ensinamentos recebidos

é transmitindo-os.

AGRADECIMENTOS

Somos particularmente gratos:

À Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, pela oportunidade do Curso;

Ao Prof. Dr. Frederico Pimentel Gomes, pela orientação certa e de grande valia na realização deste trabalho;

Aos Professores do Departamento de Matemática e Estatística da Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", pelos grandes ensinamentos que nos foi transmitido;

Ao Prof. Homero Roberto Passos Werneck de Carvalho, pelo incentivo que sempre nos proporcionou;

Aos Professores Alberto de Figueiredo Penteado e Dirce Pinto Pacca de Souza Britto, que nos encaminhou no ensino da Estatística;

À Coordenação de Aperfeiçoamento do Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela ajuda concedida;

Finalmente, a todos que diretamente ou indiretamente concorreram para o bom andamento desta dissertação.

Í N D I C E

	<i>página</i>
1 - INTRODUÇÃO	01
2 - REVISÃO DE LITERATURA	03
3 - MATERIAL E MÉTODOS	06
4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO	12
5 - CONCLUSÕES	15
6 - RESUMO	16
7 - SUMMARY	17
8 - BIBLIOGRAFIA	18
9 - APÊNDICE	19
<i>Quadro 1 - Sistema de equações para os 9 tratamentos de um delineamento em composto central ortogonal, quando $k = 2$</i>	<i>20</i>
<i>Matriz X</i>	<i>20</i>
<i>Quadro 2 - Sistema de equações para os 15 tratamentos de um delineamento em composto central ortogonal, quando $k = 3$</i>	<i>21</i>
<i>Matriz X</i>	<i>22</i>
<i>Quadro 3 - Sistema de equações para os 25 tratamentos de um delineamento em composto central ortogonal, quando $k = 4$</i>	<i>23</i>
<i>Matriz X</i>	<i>26</i>

1. INTRODUÇÃO

Os experimentos fatoriais têm sido bastante usados na experimentação agropecuária. Aos dados obtidos, procura-se ajustar uma superfície de resposta, conforme o caso.

Quando nos experimentos fatoriais o número de tratamentos resultantes das combinações dos fatores com os níveis é muito elevado, fica difícil a eliminação de diferenças de fertilidade dentro de uma mesma repetição e, conseqüentemente, o erro padrão por parcela tende a ser alto em comparação com experimentos que envolvam poucos tratamentos. Um dos modos de reduzir o tamanho do bloco sem diminuir o número de tratamentos é o confundimento (YATES, 1937).

PENTEADO e BATISTA (1971), verificaram também que os experimentos fatoriais constituídos por muitos tratamentos proporcionam maior número de graus de liberdade para a estimativa do desvio do modelo, o qual na maioria das vezes não é significativo.

BOX e WILSON (1951), propuseram os delineamentos compostos centrais, cuja finalidade é ajustar aos dados experimentais uma superfície de resposta e que tem a vantagem de usar menor número de tratamentos, como também o número de graus de liberdade para a estimativa do desvio do modelo é menor em relação aos fatoriais completos de igual número de níveis.

Diversos estudos já foram realizados sobre os compostos centrais, sendo que em 1972, PIMENTEL GOMES e CAMPOS estudaram a eficiência do composto central rotativo para $k = 3$, com um ponto central, em relação ao fatorial 3^3 , e chegaram à conclusão que para os coeficientes dos termos quadráticos de um polinômio do segundo grau nos fatoriais dão menores variâncias do que para os do delineamento compostos centrais similares.

No composto central rotativo as estimativas dos coeficientes quadráticos de um polinômio do segundo grau não são independentes, o que é uma desvantagem.

Nos compostos centrais ortogonais, as estimativas de todos os coeficientes do polinômio do segundo grau são independentes, o que é vantajoso.

Apresentaremos na presente dissertação um estudo da fórmula de α que permite a ortogonalização do delineamento composto central, como também as determinações das fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes de um polinômio do segundo grau.

2. REVISÃO DA LITERATURA

Para a quase totalidade das culturas e dos solos, a necessidade de adubação é imprescindível. Assim, muitos experimentos são delineados de modo a se pesquisar os efeitos dos fatores em diversos níveis. No entanto, quando o número de fatores pesquisados é elevado, há mais possibilidade de aparecimento de ponto de sela, como também os resultados são de interpretação mais difícil, quando ajustamos aos dados um polinômio do segundo grau.

PIMENTEL GOMES (1969), quando ajustou aos dados de diversos experimentos fatoriais 3^3 um polinômio do segundo grau, encontrou grande quantidade de ponto de sela.

Nos experimentos fatoriais de elevado número de tratamentos fica difícil a eliminação de diferenças de fertilidade dentro de uma mesma repetição e, conseqüentemente, o erro padrão por parcela tende a ser alto em comparação com experimentos que envolvam poucos tratamentos. Um dos modos de reduzir o tamanho do bloco sem diminuir o número de tratamentos é o confundimento (YATES, 1937).

Portanto, procurando reduzir o número de tratamentos, FINNEY (1945) propôs o uso de experimentos fatoriais em repetições fracionárias.

BOX e WILSON (1951), apresentaram os ensaios compostos centrais que tiveram por finalidade ajustar aos dados experimentais um polinômio do segundo grau. Os ensaios compostos centrais têm a vantagem de utilizar menor número de combinações do que os fatoriais completos, tornando conseqüentemente menor o erro experimental.

PENTEADO e BATISTA (1971), estudaram a eficiência do composto central em comparação com os fatoriais completos de dois fatores e uma das suas conclusões foi que o composto central é mais eficiente do que o pequeno fatorial 3×3 e menos eficiente do que os fatoriais 5×5 e 3×3 grande. Mas, os fatoriais 3×3 grande e pequeno estudados por eles, no caso de 2 fatores, são o composto central ortogonal, sendo que no grande fatorial 3×3 as doses eram mais espaçadas. No entanto, o composto

central não ortogonal estudado por PENTEADO e BATISTA (1971), apresentou inconveniência quanto à dependência dos coeficientes quadráticos do polinômio do segundo grau. Porém, o composto central ortogonal não apresentou esta dependência.

PIMENTEL GOMES e CAMPOS (1972), estudaram a eficiência do composto central rotativo para $k = 3$, com um ponto central, em relação ao fatorial 3^3 , e chegaram à conclusão de que para os coeficientes dos termos quadráticos de um polinômio do segundo grau, os fatoriais dão menores variâncias do que os dos delineamentos compostos centrais similares.

Os ensaios compostos centrais descritos por BOX e WILSON (1951) são de 3 tipos, sendo um deles o ortogonal.

Os ensaios compostos centrais são construídos pela adição de $(2k + 1)$ combinações de níveis de fatores, a um fatorial completo 2^k , como descreveram COCHRAN e COX (1971). As $(2k + 1)$ combinações de fatores adicionais são dadas por:

$$\begin{aligned} (0, 0, \dots, 0) ; (-\alpha, 0, \dots, 0) ; (\alpha, 0, \dots, 0) \\ (0, -\alpha, \dots, 0) ; (0, \alpha, \dots, 0) \\ \dots \\ (0, 0, \dots, -\alpha) ; (0, 0, \dots, \alpha) \end{aligned}$$

No caso de $k = 2$, teríamos as seguintes combinações adicionais:

$$(0, 0) ; (-\alpha, 0) ; (\alpha, 0) ; (0, -\alpha) \text{ e } (0, \alpha)$$

Para $k = 3$, as combinações adicionais seriam:

$$\begin{aligned} (0, 0, 0) ; (-\alpha, 0, 0) ; (\alpha, 0, 0) ; (0, -\alpha, 0) ; (0, \alpha, 0); \\ (0, 0, -\alpha) \text{ e } (0, 0, \alpha) \end{aligned}$$

E, no caso de $K = 4$, as combinações adicionais seriam:

$$\begin{aligned} (0, 0, 0, 0) ; (-\alpha, 0, 0, 0) ; (\alpha, 0, 0, 0) ; (0, -\alpha, 0, 0) ; \\ (0, \alpha, 0, 0) ; (0, 0, -\alpha, 0) ; (0, 0, \alpha, 0) ; (0, 0, 0, -\alpha) \text{ e } \\ (0, 0, 0, \alpha) \end{aligned}$$

De acordo com o valor que α pode assumir, teremos um dos 3 tipos de composto central. O valor de α pode ser escolhido para tornar os coeficientes de regressão ortogonais ou para minimizar o desvio que resulta se a forma verdadeira da superfície de resposta não for quadrática ou para dar ao delineamento a propriedade de ser rotativo.

DAVIES (1954), apresentou uma tabela de α que torna ortogonal o composto central. A tabela é dada a seguir:

Composto central ortogonal

Nº de fatores (k)	2	3	4
Valor de α	1,000	1,215	1,414

Porém, nenhuma referência bibliográfica foi encontrada quanto ao cálculo dos valores de α e nem quais as fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, no caso do composto central ortogonal.

3. MATERIAL E MÉTODOS

Como já foi dito, o número de fatores pesquisados conjuntamente não deve ser grande. Ao nosso ver, não deve ultrapassar de 4, devido aos problemas já mencionados. Portanto, somente iremos estudar teoricamente o composto central ortogonal, quando $k = 2, 3$ e 4 .

Partindo de um fatorial 2^k no qual estão codificados os níveis em -1 e $+1$ e adicionando as $(2k + 1)$ combinações mencionadas, teremos o composto central. Assim, o composto central será constituído por $(2^k + 2k + 1)$ combinações.

Procurando ajustar aos dados um polinômio do segundo grau, dado pelo modelo matemático:

$$Y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_{iu} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_{iu}^2 + \sum_{i < j=2}^k \beta_{ij} X_{iu} X_{ju} + e_u,$$

teremos as matrizes $X'X = S$ seguintes:

Para $k = 2$

$$S = \begin{bmatrix} 2^{k+2k+1} & 0 & 0 & 2^{k+2}\alpha^2 & 2^{k+2}\alpha^2 & 0 \\ 0 & 2^{k+2}\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2^{k+2}\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 2^{k+2}\alpha^2 & 0 & 0 & 2^{k+2}\alpha^4 & 2^k & 0 \\ 2^{k+2}\alpha^2 & 0 & 0 & 2^k & 2^{k+2}\alpha^4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k \end{bmatrix}$$

Para que a estimação dos coeficientes do polinômio do segundo grau seja independente, isto é, para que o composto central seja ortogonal, é necessário que os elementos fora da diagonal principal sejam nulos.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Verificamos que nas matrizes corrigidas todos os elementos fora da diagonal principal são nulos, exceto os representados pela letra A. Portanto, para que as matrizes se tornem diagonais, é necessário que os elementos representados por A sejam igualados a zero. Assim, quando as matrizes passam a ser diagonais, as estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau ficam independentes e teremos, conseqüentemente, o composto central ortogonal. Então, para que o composto central seja ortogonal, temos de ter $A = 0$, isto é,

$$2^k - \frac{(2^k + 2\alpha^2)^2}{2^k + 2k + 1} = 0$$

Desenvolvendo, fica:

$$2^k (2^k + 2k + 1) = (2^k + 2\alpha^2)^2$$

$$4\alpha^4 + 2^{k+2} \cdot \alpha^2 - 2^k (2k + 1) = 0$$

Fazendo $\alpha^2 = D$, vem

$$4D^2 + 2^{k+2} \cdot D - 2^k (2k + 1) = 0,$$

logo:

$$D = \frac{-2^{k+2} \pm \sqrt{(2^{k+2})^2 + 16 \cdot 2^k (2k + 1)}}{8}$$

$$D = \frac{-2^{k+2}}{2^3} \pm \sqrt{\frac{2^{2k+4}}{64} + \frac{16 \cdot 2^k (2k + 1)}{64}}$$

$$D = -2^{k+2} \cdot 2^{-3} \pm \sqrt{2^{2k+4} \cdot 2^{-6} + 2^k (2k+1) \cdot 2^{-2}}$$

$$D = -2^{k-1} \pm \sqrt{2^{2k-2} + 2^{k-2} \cdot 2k + 2^{k-2}}$$

$$D = -2^{k-1} + \sqrt{2^{2k-2} + k 2^{k-1} + 2^{k-2}}$$

Como D não pode ser negativo, temos:

$$D = -2^{k-1} + (2^{2k-2} + k 2^{k-1} + 2^{k-2})^{1/2}$$

Mas, $D = \alpha^2$, logo a fórmula que torna ortogonal o delineamento composto central é dada pela expressão:

$$\alpha = \left[-2^{k-1} + (2^{2k-2} + k 2^{k-1} + 2^{k-2})^{1/2} \right]^{1/2}$$

Substituindo k por 2, 3 e 4 na fórmula, chegamos à mesma tabela publicada por DAVIES (1954), com uma precisão bem maior.

Tabela de α para que seja ortogonal o delineamento composto central

Valor de k	2	3	4
Valor de α	1,000000	1,215412	1,414214

Quando $A=0$, as matrizes corrigidas ficam diagonais e é bem simples a inversão delas. No entanto, os cálculos efetuados foram para uma repetição. Se fizermos para r repetições, os elementos das matrizes corrigidas ficarão multiplicados por r . Pode-se assim notar que os elementos correspondentes aos coeficientes $\hat{\beta}_i$, $\hat{\beta}_{ij}$ e $\hat{\beta}_{ii}$ são, respectivamente nas 3 matrizes corrigidas,

$$r(2^k + 2\alpha^2), r(2^k), r \left[2^k + 2\alpha^4 - \frac{(2^k + 2\alpha^2)^2}{2^k + 2k + 1} \right]$$

Porém, a inversa de uma matriz S corrigida (S_c^{-1}) é a matriz de dispersão dividida por σ^2 . Logo, as estimativas das variâncias

das estimativas dos coeficientes serão dadas pelos elementos correspondentes de S_c^{-1} , multiplicados por $\hat{\sigma}^2$. Então,

$$\hat{v}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(2^k + 2\alpha^2)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{v}(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{r2^k} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{v}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r} \left[2^k + 2\alpha^4 - \frac{(2^k + 2\alpha^2)^2}{2^k + 2k + 1} \right]^{-1} \cdot \hat{\sigma}^2$$

5. CONCLUSÕES

Do presente estudo, podemos tirar as seguintes conclusões:

1. A constante α que torna ortogonal o delineamento composto central é dada pela expressão:

$$\alpha = \left[-(2^{k-1}) + (2^{2k-2} + k 2^{k-1} + 2^{k-2})^{1/2} \right]^{1/2}$$

2. As fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, quando utilizamos dados provenientes de um composto central ortogonal, são dadas pelas expressões:

$$\hat{V}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(2^k + 2\alpha^2)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{r 2^k} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r} \left[2^k + 2\alpha^4 - \frac{(2^k + 2\alpha^2)^2}{2^k + 2k + 1} \right]^{-1} \cdot \hat{\sigma}^2$$

6. RESUMO

No presente trabalho foi feito um estudo teórico visando as determinações da fórmula de α que torna ortogonal o delineamento composto central (Box) e das fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes de um polinômio do segundo grau, quando ajustamos o polinômio aos dados provenientes de um delineamento composto central ortogonal, com um máximo de 4 fatores.

Verificou-se que a fórmula de α , que torna ortogonal o delineamento composto central é dada pela expressão:

$$\alpha = \left[-(2^{k-1}) + (2^{2k-2} + k 2^{k-1} + 2^{k-2}) 1/2 \right]^{1/2}$$

Foi também verificado que as fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, no caso do delineamento composto central ortogonal, são dadas pelas expressões:

$$\hat{v}(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{r 2^k} \cdot \hat{\sigma}^2 \quad ; \quad \hat{v}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r (2^k + 2 \alpha^2)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{v}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r} \cdot \left[2^k + 2 \alpha^4 - \frac{(2^k + 2 \alpha^2)^2}{2^k + 2k + 1} \right]^{-1} \cdot \hat{\sigma}^2$$

7. SUMMARY

AN α EXPRESSION WHICH TURNS ORTHOGONAL THE
CENTRAL COMPOSITE DESIGN (BOX)

A theoretical study was devised to determine the formula of α which turns orthogonal the central composite design (Box). The following expression of α was obtained

$$\alpha = \left[- (2^{k-1}) + (2^{2k-2} + k \cdot 2^{k-1} + 2^{k-2})^{1/2} \right]^{1/2}$$

It was equally verified that in the case of the orthogonal central composite, the formulas which estimated the variances of the estimates of the polynomial equation coefficients, could be calculated through the following expressions:

$$\hat{v}(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{r \cdot 2^k} \cdot \hat{\sigma}^2 \quad ; \quad \hat{v}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(2^k + 2\alpha^2)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{v}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r} \left[2^k + 2\alpha^4 - \frac{(2^k + 2\alpha^2)^2}{2^k + 2k + 1} \right]^{-1} \cdot \hat{\sigma}^2$$

8. BIBLIOGRAFIA

1. BOX, G. E. P. & WILSON, K. B., 1951. *On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. Journal of the Royal Statistical Society, série B, 13 (1): 1-45.*
2. COCHRAN, W. G. & COX, G. M., 1971. *Diseños Experimentales, 2a. edição. Centro Regional de Ayuda Técnica, Agência para el Desarrollo Internacional (A. I. D.), México, D. F..*
3. DAVIES, O. L., 1954. *Design and analysis of industrial experiments, 637 pags.*
4. FINNEY, D. J., 1945, *The fractional application of factorial arrangements. Ann. Eugen., 12: 291-301.*
5. LI, J. C. R., 1964. *Statistical Inference II. 1a. edição. Edwards Brothers, Inc., 575 pags.*
6. PENTEADO, A. F. & BATISTA, L. B., 1971. *Eficiência do Ensaio Composto Central (Box) em Comparação com os Fatoriais Completos de Dois Fatores. XIII Congresso Brasileiro de Ciência do Solo. Vitória, E. S.*
7. PIMENTEL GOMES, F., 1969. *Novos aspectos de estudo econômico de ensaio de adubação. Fertilité, 34: 3-9.*
8. PIMENTEL GOMES, F. & CAMPOS, H., 1972. *The Efficiency of Factorial 3^3 Designs as Compared to a Central Composite Rotatable Design. Potash Review, Fevereiro.*
9. YATES, F., 1937. *The Design and Analysis of Factorial Experiments, Tech. Commun. Bur. Soil Sci., Harpenden, 35: 77pp.*

9. APÊNDICE

Quadro 1 - Sistema de equações para os 9 tratamentos de um delineamento em composto central ortogonal, quando K=2.

$$\begin{aligned}
 (-1, -1) Y_1 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{12} X_1 X_2 \\
 (-1, 1) Y_2 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 - \beta_{12} X_1 X_2 \\
 (1, -1) Y_3 &= \beta_0 + \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 - \beta_{12} X_1 X_2 \\
 (1, 1) Y_4 &= \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{12} X_1 X_2 \\
 (0, 0) Y_5 &= \beta_0 \\
 (-\alpha, 0) Y_6 &= \beta_0 - \alpha \beta_1 X_1 + \alpha^2 \beta_{11} X_1^2 \\
 (\alpha, 0) Y_7 &= \beta_0 + \alpha \beta_1 X_1 + \alpha^2 \beta_{11} X_1^2 \\
 (0, -\alpha) Y_8 &= \beta_0 - \alpha \beta_2 X_2 + \alpha^2 \beta_{22} X_2^2 \\
 (0, \alpha) Y_9 &= \beta_0 + \alpha \beta_2 X_2 + \alpha^2 \beta_{22} X_2^2
 \end{aligned}$$

matriz X

$$\begin{bmatrix}
 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\
 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\
 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\
 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\
 1 & 0 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\
 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0
 \end{bmatrix}$$

Quadro 2 - Sistema de equações para os 15 tratamentos de um delineamento em composto central ortogonal, quando $k=3$.

$$\begin{aligned}
 (-1, -1, -1) Y_1 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 \\
 (-1, -1, 1) Y_2 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{12} X_1 X_2 - \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{23} X_2 X_3 \\
 (-1, 1, -1) Y_3 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{23} X_2 X_3 \\
 (-1, 1, 1) Y_4 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 - \beta_{12} X_1 X_2 - \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 \\
 (1, -1, -1) Y_5 &= \beta_0 + \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 - \beta_{12} X_1 X_2 - \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 \\
 (1, -1, 1) Y_6 &= \beta_0 + \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{23} X_2 X_3 \\
 (1, 1, -1) Y_7 &= \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{23} X_2 X_3 \\
 (1, 1, 1) Y_8 &= \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 \\
 (0, 0, 0) Y_9 &= \beta_0 \\
 (-\alpha, 0, 0) Y_{10} &= \beta_0 - \alpha \beta_{11} X_1^2 + \alpha^2 \beta_{11} X_1^2 \\
 (\alpha, 0, 0) Y_{11} &= \beta_0 + \alpha \beta_{11} X_1^2 + \alpha^2 \beta_{11} X_1^2 \\
 (0, -\alpha, 0) Y_{12} &= \beta_0 - \alpha \beta_{22} X_2^2 + \alpha^2 \beta_{22} X_2^2 \\
 (0, \alpha, 0) Y_{13} &= \beta_0 + \alpha \beta_{22} X_2^2 + \alpha^2 \beta_{22} X_2^2 \\
 (0, 0, -\alpha) Y_{14} &= \beta_0 - \alpha \beta_{33} X_3^2 + \alpha^2 \beta_{33} X_3^2 \\
 (0, 0, \alpha) Y_{15} &= \beta_0 + \alpha \beta_{33} X_3^2 + \alpha^2 \beta_{33} X_3^2
 \end{aligned}$$

Quadro 2 - continuação

matriz X									
1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1
1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1
1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1
1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1
1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1
1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	$-\alpha$	0	0	α^2	0	0	0	0	0
1	α	0	0	α^2	0	0	0	0	0
1	0	$-\alpha$	0	0	α^2	0	0	0	0
1	0	α	0	0	α^2	0	0	0	0
1	0	0	$-\alpha$	0	0	α^2	0	0	0
1	0	0	α	0	0	α^2	0	0	0

Quadro 3 - Sistema de equações para os 25 tratamentos de um delineamento em composto central ortogonal, quando k=4.

$$\begin{aligned}
 (-1, -1, -1, -1, -1) Y_1 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 - \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &+ \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4 + \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (-1, -1, -1, 1, 1) Y_2 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &+ \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 - \beta_{24} X_2 X_4 - \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (-1, -1, 1, 1, -1) Y_3 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 - \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &- \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 - \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4 - \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (-1, -1, 1, 1, 1) Y_4 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &- \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{14} X_1 X_4 - \beta_{23} X_2 X_3 - \beta_{24} X_2 X_4 + \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (-1, 1, -1, -1) Y_5 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 - \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &+ \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 - \beta_{23} X_2 X_3 - \beta_{24} X_2 X_4 + \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (-1, 1, -1, 1) Y_6 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &+ \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{14} X_1 X_4 - \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4 - \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (-1, 1, 1, -1) Y_7 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 - \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &- \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 - \beta_{24} X_2 X_4 - \beta_{34} X_3 X_4
 \end{aligned}$$

Quadro 3 - continuação

$$\begin{aligned}
 (-1, 1, 1, 1, 1) Y_8 &= \beta_0 - \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &\quad - \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4 + \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (1, -1, -1, -1, -1) Y_9 &= \beta_0 + \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 - \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &\quad - \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4 + \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (1, -1, -1, 1, 1) Y_{10} &= \beta_0 + \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &\quad - \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 - \beta_{24} X_2 X_4 - \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (1, -1, 1, -1, -1) Y_{11} &= \beta_0 + \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 - \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &\quad + \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{14} X_1 X_4 - \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4 - \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (1, -1, 1, 1, 1) Y_{12} &= \beta_0 + \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 - \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &\quad + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 - \beta_{23} X_2 X_3 - \beta_{24} X_2 X_4 + \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (1, 1, -1, -1, -1) Y_{13} &= \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 - \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &\quad - \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{14} X_1 X_4 - \beta_{23} X_2 X_3 - \beta_{24} X_2 X_4 + \beta_{34} X_3 X_4 \\
 (1, 1, -1, -1, 1) Y_{14} &= \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 - \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \\
 &\quad - \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 - \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4 - \beta_{34} X_3 X_4
 \end{aligned}$$

Quadro 3 - continuação

(1 , 1 , 1 , -1)	$Y_{15} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 - \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 - \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 - \beta_{24} X_2 X_4 - \beta_{34} X_3 X_4$
(1 , 1 , 1 , 1)	$Y_{16} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{44} X_4^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4 + \beta_{34} X_3 X_4$
(0 , 0 , 0 , 0)	$Y_{17} = \beta_0$
(- α , 0 , 0 , 0)	$Y_{18} = \beta_0 - \alpha \beta_1 X_1$
(α , 0 , 0 , 0)	$Y_{19} = \beta_0 + \alpha \beta_1 X_1$
(0 , - α , 0 , 0)	$Y_{20} = \beta_0 - \alpha \beta_2 X_2$
(0 , α , 0 , 0)	$Y_{21} = \beta_0 + \alpha \beta_2 X_2$
(0 , 0 , - α , 0)	$Y_{22} = \beta_0 - \alpha \beta_3 X_3$
(0 , 0 , α , 0)	$Y_{23} = \beta_0 + \alpha \beta_3 X_3$
(0 , 0 , 0 , - α)	$Y_{24} = \beta_0 - \alpha \beta_4 X_4$
(0 , 0 , 0 , α)	$Y_{25} = \beta_0 + \alpha \beta_4 X_4$

