NOVO TIPO DE DELINEAMENTO ORTOGONAL ADEQUADO PARA A REGRESSÃO POLINOMIAL DO SEGUNDO GRAU

F R A N C I S C O   A D E M A R

Orientador: FREDERICO PIMENTEL GOMES

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

PIRACICABA
Estado de São Paulo-Brasil

À minha esposa, Melina
Ao meu pai, Pedro Henrique (em memória)
À minha mãe, Santa.

AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, pela oportunidade a mim concedida.

À Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz e, em especial, ao Departamento de Matemática e Estatística, pelos ensinamentos.

Ao Professor Dr. Frederico Pimentel Gomes, pela amizade, orientação durante o curso e na realização deste trabalho.

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

Ao colega e amigo Lauro Boechat Batista, que esteve sempre presente com sua solidariedade e ajuda durante a realização do curso e deste trabalho.

À Senhora Maria Celeste Augusto Lima, pelos trabalhos datilográficos.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, no Brasil, grande foi a contribuição da Estatística, por intermédio da utilização dos delineamentos experimentais, nas pesquisas de um modo geral e principalmente naquelas voltadas para a agropecuária.

Antes de mais nada, merece destacar o uso, largamente difundido, dos delineamentos fatoriais, cujas vantagens são notórias e não podem ser contestadas para determinados casos. Nos delineamentos fatoriais, quando os fatores ou níveis de cada fator a serem pesquisados são superiores a três, o número de tratamentos resultantes das combinações dos fatores e níveis é muito elevado e torna-se difícil a obtenção de um conjunto de parcelas, que irá constituir o bloco, razoavelmente homogêneo, dando, como consequência, um erro experimental com tendência a ser elevado quando comparado com o de experimentos que envolvam poucos tratamentos.

Recentemente novos delineamentos fatoriais foram introduzidos na experimentação agropecuária e desenvolvidos visando ao estudo de superfícies de resposta polinomiais.

De modo a permitir maior flexibilidade no planejamento de ensaios que tenham como objetivo o ajustamento aos dados de um polinômio do segundo grau, o autor se propõe a apresentar um novo tipo de delineamento com sete níveis para cada fator, no caso de dois fatores, de modo que os coeficientes sejam ortogonais entre si.

REVISÃO DE LITERATURA

Os delineamentos fatoriais têm grande importância para a experimentação de um modo geral, mormente na experimentação agropecuária e principalmente no estudo de fertilidade de solos.

YATES (1937) apresentou pela primeira vez, os delineamentos fatoriais. Em seus trabalhos descreveu numerosos tipos, que, em virtude das grandes vantagens que possuem, foram largamente difundidos. Esses delineamentos têm sido aplicados em outros ramos da ciência.

Quando o número de fatores e de níveis de cada fator é igual ou superior a três, o número de tratamentos a pesquisar torna-se muito elevado, sendo esta uma desvantagem dos delineamentos fatoriais. De modo a contornar tal fato, foram introduzidos na experimentação, por YATES (1937), o delineamento fatorial com confundimento e mais tarde FINNEY (1945) apresentou os delineamentos fatoriais fracionados.

BOX e WILSON (1951) apresentaram os delineamentos compostos centrais, adequados ao estudo de superfícies de respostas polinomiais. Na formulação destes delineamentos, que são fatoriais incompletos, os autores procuraram diminuir o número de combinações entre os níveis dos fatores, em comparação com os fatoriais completos.

BOX e HUNTER (1957) propuseram o critério de rotacionalidade nos delineamentos compostos centrais, sendo que com a adoção deste critério, o erro padrão da estimativa da resposta é igual para todos os pontos que tenham a mesma distância do ponto central.

Os delineamentos compostos centrais são obtidos a partir de um delineamento fatorial 2^k, onde $\underline{k}$ é o número de fatores e os níveis de cada fator estão codificados em -1 e +1. Adicionam-se (2k + 1) combinações entre os níveis dos fatores, dadas por:

$$
\begin{array}{lll}
(0,\ 0,\ \ldots,\ 0) & (-\alpha,\ 0,\ \ldots,\ 0); & (\alpha,\ 0,\ \ldots,\ 0) \\
 & (0,\ -\alpha,\ \ldots,\ 0); & (0,\ \alpha,\ \ldots,\ 0) \\
 & & \ldots \\
 & (0,\ 0,\ \ldots,\ -\alpha); & (0,\ 0,\ \ldots,\ \alpha)
\end{array}
$$

α é um parâmetro do delineamento composto central, que pode ser escolhido para tornar os coeficientes de regressão do polinômio do segundo grau ortogonais entre si ou para minimizar o vício que é criado se a verdadeira forma da superfície de resposta não for quadrática ou para dar ao delineamento a propriedade de ser rotacional (COCHRAN e COX, 1957).

COCHRAN e COX (1957) citando BOX e HUNTER(1957) relataram a possibilidade de repetição do ponto central no delineamento composto central. Segundo eles, essas repetições do ponto central determinam a precisão da estimativa da resposta da superfície de resposta no centro ou perto do ponto central.

Segundo MYERS (1971), os delineamentos compostos centrais podem ser comparados com os delineamentos fatoriais 3^k ou com quaisquer outros delineamentos que visem ao ajustamento aos dados um polinômio do segundo grau, com base na eficiência. A eficiência é considerada para cada coeficiente do polinômio do segundo grau, podendo portanto um delineamento ser mais eficiente do que outro para determinado coeficiente e ao mesmo tempo ser menos eficiente levando em consideraçao outro coeficiente.

PIMENTEL GOMES (1969) apresentou um estudo da determinação de máximo, mínimo ou ponto de sela nas superfícies polinomiais, através de congruência de matrizes.

PENTEADO *et alii* (1973) estudaram a eficiência do delineamento composto central em comparação com os fatoriais completos de dois fatores e uma das suas conclusões é que o delineamento composto central é menos eficiente do que o delineamento fatorial 5 x 5.

PIMENTEL GOMES e CAMPOS (1972) estudaram a eficiência do delineamento composto central rotativo, com um ponto central, em relação ao fatorial 3^3 e chegaram à conclusão de que o fatorial completo é mais eficiente do que o delineamento composto central rotativo.

BATISTA (1976) estudou a condição de ortogonalidade no delineamento composto central com um máximo de quatro fatores e, após, determinou também as fórmulas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com somente um ponto central. Mais tarde, BATISTA e SILVA(1978) fizeram um estudo semelhante com diversos pontos centrais.

Fundamentando-se nos princípios de que um delineamento deve ter maior número de níveis para cada fator, menor número de combinações entre eles e independência na estimaçao dos coeficientes do polinômio do segundo grau, BATISTA (1978) apresentou o delineamento em círculos.

PIMENTEL GOMES & NOGUEIRA (1977) chegaram a conclusão de que o uso de equações de regressão para extrapolações é extremamente perigoso e pode levar a resultados complementamente fora da realidade.

MATERIAL E MÉTODOS

Suponhamos que se tenha uma idéia da localização do ponto de máximo (ou de mínimo) da resposta, representada por um polinômio do segundo grau, com dois fatores. Nestea região fixamos um ponto no qual os níveis dos fatores estão codificados em (0, 0).

Com centro neste ponto, traçamos uma circunferência de raio $\alpha\sqrt{2}$ e a dividimos em oito partes iguais, começando do ponto $(\alpha\sqrt{2}, 0)$. Em relação a este ponto, adicionamos um fatorial de 2 x 2, no qual os níveis dos fatores estão codificados em -1 e +1. Assim, passamos a ter um novo tipo de delineamento para o estudo do ajustamento aos dados de um polinômio do segundo grau, com dois fatores (Figura 1).

Este delineamento apresenta sete níveis para cada fator e 13 combinações entre eles, sendo uma o ponto central, repetido P vezes.

Embora sejam notórias as vantagens dos fatoriais completos, podemos verificar que este delineamento apresenta vantagem em relação ao fatorial 7 x 7, que requer 49 combinações entre os níveis dos fatores, quando se deseja ajustar aos dados um polinômio do segundo grau, com dois fatores.

Escolhendo adequadamente o valor de α, este delineamento poderá ser ortogonal. Se a matriz X'X obtida do modelo matemático, dado por

$$Y_u - \overline{Y} = \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_{11}(X_{1u}^2 - \overline{X_{1u}^2}) + \beta_{22}(X_{2u}^2 - \overline{X_{2u}^2}) + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + e_u$$

for diagonal, então o delineamento será ortogonal. Assim, ajustando-se aos dados provenientes deste delineamento o modelo matemático descrito anteriormente, teremos a matriz X (Tabela 1). Através desta matriz obtemos facilmente a matriz X'X (Tabela 2).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Se a matriz X'X (Tabela 2) for diagonal, entao as estimativas dos coeficientes serão independentes. Portanto, igualando a zero os elementos não nulos fora da diagonal (N=0), teremos uma matriz diagonal e, consequentemente, as estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau tornam-se independentes entre si.

Assim,

$$4 + 4\alpha^4 \frac{(4 + 8\alpha^2)^2}{12 + P} = 0.$$

Desenvolvendo, fica:

$$(P-4)\ \alpha^4 - 16\alpha^2 + (8 + P) = 0.$$

Temos 3 casos distintos para a resolução desta equação:

a) P = 4. Neste caso, verificamos que

$$\alpha = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

b) P > 4. Neste caso, verificamos que

$$\alpha = \left[\frac{8 \pm \sqrt{96 - (P + 4)\ P}}{P - 4}\right]^{1/2}$$

Pode-se facilmente verificar que o maior valor que P pode atingir é oito,pois senão os valores de α serão complexos.

c) $1 \leq P < 4$

Neste caso, verificamos que a expresssão de α é dada por:

$$\alpha = \left[\frac{-8 + \sqrt{96 - (P + 4)\ P}}{P - 4}\right]^{1/2}$$

Atribuindo valores a P, obtemos uma tabela de valores de α que tornam ortogonal o presente delineamento, com P pontos centrais (Tabela 3).

Com seis pontos centrais e o valor de α igual a um (α=1), o delineamento ortogonal passa a ter somente cinco níveis para cada fator, além das combinações resultantes do fatorial 2 x 2 ficarem repetidas (Tabela 3 e Figura 2).

Podemos ainda notar pela Tabela 3 que o valor de α está compreendido no intervalo de 0,716332 a 3,891199 para que o delineamento seja ortogonal.

Quando N=0, a matriz X'X torna-se diagonal e os elementos correspondentes aos termos quadráticos se reduzem a $8\alpha^4$ (Tabela 4). No entanto, os cálculos foram efetuados para uma repetição. Se fizermos para r repetições, os elementos X'X ficarão multiplicados por r (Tabela 5).

Sabemos, pela teoria dos quadrados mínimos, que as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau são dadas pelos elementos correspondentes da matriz de dispersão, multiplicados por σ^2. Assim, podemos facilmente verificar que as variâncias das estimativas dos coeficientes são dadas por:

$$V(\hat{\beta}_1) = \frac{1}{r(4 + 8\alpha^2)}\sigma^2, \quad V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{1}{r(4 + 4\alpha^4)}\sigma^2,$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{8r\alpha^4}\sigma^2.$$

Atribuindo os valores de α que tornam ortogonal o delineamento, teremos uma tabela que possibilita a determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio de segundo grau (Tabela 6).

Podemos notar pela Tabela 6 que, quando é usado somente um ponto central, as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau são maiores do que as mesmas variâncias quando são usados mais de um ponto central, levando-nos a crer, à primeira vista, que se obtêm maior precisão das variâncias no caso de mais de um ponto central. No entanto, o número de tratamentos difere quando são usados diferentes valores para P. Assim, se fizermos as comparações levando em consideração que na experimentação a ser efetuada tenhamos os mesmos gastos (mesma área total do experimento), podemos, para tornar a comparação possível, repetir os conjuntos de combinações com mais de um ponto central tantas vezes quanto for o resultado da razão $\frac{13}{12 + P}$, para P maior do que um. Assim, considerando a mesma variância para os diversos conjuntos de combinações, teremos uma tabela das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau (Tabela 7).

Verificamos pela Tabela 7 que a variância da estimativa de $\hat{\beta}_i$, com somente um ponto central, é menor em diversos casos do que quando são usados mais de um ponto central. Tam bém pode ser verificado que a estimativa da variância de $\hat{\beta}_{12}$, para um ponto central, foi menor do que quando são usados dois ou três pontos centrais e maior nos demais casos. Finalmente, pode ser observado que com mais de um ponto central, a variância de $\hat{\beta}_{ii}$ é menos do que quando se usa somente um ponto central.

Se quisermos comparar a eficiência das variâncias das estimativas dos coeficientes, levando em consideração a mesma área a ser utilizada no experimento como também o mesmo comprimento dos intervalos, devemos multiplicar cada variância da estimativa do coeficiente do polinômio do segundo grau (Tabela 7) pelas expressões α^2, α^4 e α^4, correspondentes a $V(\hat{\beta}_i)$, $V(\hat{\beta}_{12})$ e $V(\hat{\beta}_{ii})$, respectivamente (Tabela 8).

Assim, verificamos pela Tabela 6 que o uso de somente um ponto central leva-nos à conclusão de que as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo - grau são maiores do que as obtidas quando são usados mais de um ponto central. Também verificamos pela Tabela 7 que com o uso de somente um ponto central, estas estimativas não são as menores. Entretanto, levando em consideração o mesmo intervalo entre os pontos estudados, chega-se a conclusão de que estas estimativas são mais eficientes quando é usado somente um ponto central (Tabela 8).

Sabemos pela teoria dos quadrados mínimos que os coeficientes são estimados matricialmente por:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y$$

Assim, podemos facilmente determinar as fórmulas que permitem os cálculos das estimativas dos coeficientes, no presente delineamento, visto que X'X é diagonal. Portanto, teremos:

$$\hat{\beta}_i = \frac{\Sigma X_{iu} Y_u}{r\ (4 + 8\alpha^2)},$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{\Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u}{r(4 + 4\alpha^4)}$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \frac{\Sigma X_{iu}^2 Y_u - \frac{(4 + 8\alpha^2)\Sigma Y_u}{12 + P}}{8r\alpha^4}$$

onde X_{iu}, X_{iu}^2 e $X_{1u} X_{2u}$ são os valores encontrados nas colunas da matriz X (Tabela 1).

Pelo modelo matemático, podemos verificar que $\hat{\beta}_o$ é dado pela expressão:

$$\hat{\beta}_o = \bar{Y} - \frac{4 + 8\alpha^2}{12 + P}(\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{22})$$

As somas dos quadrados referentes aos coeficientes são dadas por:

$$SQ(\hat{\beta}_i) = \hat{\beta}_i \ \Sigma X_{iu} Y_u,$$

$$SQ(\hat{\beta}_{ii}) = \beta_{ii}\left[\Sigma X_{iu} Y_u - \frac{(4 + 8\alpha^2)\Sigma Y_u}{12 + P}\right],$$

$$SQ(\hat{\beta}_{12}) = \beta_{12} \ \Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u.$$

Devemos levar em consideração como o experimento será instalado. Assim, podemos ter 2 casos:

Caso 1: Com blocos,

Caso 2: Sem blocos.

No primeiro caso, recomenda-se o uso de um só ponto central, isto é P=1, e os 13 tratamentos deverão ser repetidos r vezes. A escolha de P = 1 com r repetições dos 13 tratamentos tem como objetivo principal facilitar a determinação da tabela de análise de variância como podemos notar (Tabela 9). Por outro lado, o delineamento com 1 ponto central é mais eficiente.

No segundo caso, pode-se usar somente um conjunto de combinações, isto é, 12 + P tratamentos, sendo P = 8, pois assim têm-se sete graus de liberdade para o resíduo, o máximo que se pode alcançar, neste caso (Tabela 10).

Após ajustada a equação do polinômio do segundo grau aos dados obtidos, pode-se aplicar a técnica de congruência de matrizes para verificar se a função tem máximo ou mínimo ou ponto de sela (PIMENTEL GOMES, 1969).

CONCLUSÕES

Das pesquisas apresentadas podemos tirar as seguintes conclusões:

1 - As fórmulas de α que tornam ortogonal o delineamento proposto, são dadas pelas expressões

a) Para P > 4: $$\alpha = \left[\frac{8 \pm \sqrt{96 - (P + 4) P}}{P - 4}\right]^{1/2}$$

b) Para P = 4: $$\alpha = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

c) Para 1 < P < 4: $$\alpha = \left[\frac{-8 + \sqrt{96 - (P + 4) P}}{P - 4}\right]^{1/2}$$

sendo P o número de pontos centrais.

2 - As fórmulas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, para o delineamento proposto, são as seguintes:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r\,(4 + 8\,\alpha^2} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{8\ r\ \alpha\ 4} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{1}{r\ (4 + 4\ \alpha^4)} \cdot \sigma^2$$

3 - O uso de um só ponto central proporcionou uma melhor eficiência para a estimação das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau.

4 - As estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau são dadas pelas seguintes expressões:

$$\hat{\beta}_i = \frac{\Sigma\ X_{iu}\ \ Y_u}{r\ (4 + 8\alpha^2)}$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \frac{\Sigma\ X_{iu}^2\ \ Y_u - \dfrac{(4 + 8\alpha^2)\ \Sigma\ \ Y_u}{12 - P}}{8r\alpha^4}$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{\Sigma\ X_{iu}\ \ X_{2u}Y_u}{r\ (4 + 4\ \alpha^4)}$$

$$\hat{\beta}_o = \bar{Y} - \frac{(4 + 8\ \alpha^2)}{12 + P} \quad (\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{22})$$

5 - As somas dos quadrados referentes aos coeficientes são dadas pelas expressões:

$$SQ\ (\hat{\beta}_i) = \hat{\beta}_i\ \ \Sigma\ \ X_{iu}\ Y_u$$

$$SQ\ (\hat{\beta}_{ii}) = \hat{\beta}_{ii} \left[\Sigma\ \ X_{iu}\ Y_u - \frac{(4 + 8\ \alpha^2)\ \ \Sigma\ \ Y_u}{12 + P} \right.$$

$$SQ\ (\hat{\beta}_{12}) = \hat{\beta}_{12}\ \Sigma\ X_{1u}\ X_{2u}\ Y_u$$

RESUMO

Um novo tipo de delineamento foi desenvolvido a ra permitir o ajuste aos dados de um polinômio do segundo com duas variáveis independentes, de modo a oferecer maior flexibilidade na escolha dos delineamentos fatoriais. Foram usados dois fatores, cada um com sete níveis.

O delineamento é composto por dois fatoriais de 2 x 2, sendo que no primeiro os níveis estão codificados em -1 e +1 e no segundo em $-\alpha$ e $+\alpha$, acrescido pelos pontos $(0; \alpha\sqrt{2})$, $(0; -\alpha\sqrt{2})$, $(\alpha\sqrt{2}; 0)$, $(-\alpha\sqrt{2}; 0)$ e o ponto central é repetido até 8 vezes.

Pesquisando-se a eficiência do delineamento em função do número de repetições do ponto central, chegamos à conclusão de que se deve de preferência utilizar somente um ponto central com α igual a 0,716332 de modo que o delineamento seja mais eficiente.

ABSTRACT - A new type of orthogonal design applied to second degree polynomial regression.

A new design was developed specifically for fitting to data a second degree polynomial with two factors. Criteria in constructing the design were: higher numbei of levels of each factor, limited number of treatment combinations, and orthogonality of regression coefficients.

Treatment combinations (except for the central point) are either at a distance of $\sqrt{2}$ or $\alpha\sqrt{2}$ from the center.

What interests is the value of α, which makes the design orthogonal as well as the efficiency of the design when more than one central point are used.

Formulas were determined which estimate the variances, the estimates, and the sums of squares of the polynomial equation coefficients.

It was verified that the variances of the polynomial regresssion coefficients are smaller when only one central point is used. In this case, α becomes equal to 0.716332.

LITERATURA CITADA

BOX, G.E.P. e K.B. WILSON, 1951. On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. Journal of the Royal Statistical Society, série B, 13: 1 - 45.

BOX, G.E.P. e J.S. HUNTER, 1957. Multifactor Experimental Designs for Exploring Response Surface. Ann. Math.Stat.28: 195-241.

BATISTA, L.B., 1976. Determinação de α para tornar Ortogonal o Delineamento Composto Central. Piracicaba, ESALQ/USP, 26 p. (Tese de Mestrado).

BATISTA, L.B. e S.C. e SILVA, 1978. Determinação de Fórmulas no Delineamento Composto Central (Box). Pesq. Agropec.Bras. 13 (nº 2): 39-47.

BATISTA, L.B., 1978. Delineamento em Circulos. Pesq. Agropec. Bras. 13 (nº 4): 9-15.

COCHRAN, W.G. e G.M. COX, 1971. Experimental Design, 2a. edição. John Wiley 335-375.

FINNEY, D.J., 1945. The Fractional Replication of Factorial

Arrangements. Ann. Eugen. 12: 291-301.

MYERS. R.H., 1971. Response Surface Methodology. Allyn and Bacon, 126-175.

PIMENTEL GOMES, F., 1969. Novos Aspectos de Estudo Econômico de Ensaio de Adubação. Fertilitê, 34: 3-9.

PIMENTEL GOMES, F. e H. CAMPOS, 1972. The Efficiency of Factorial 3^3 Designs ao Compared to a Central Composite Rotatable Designs. Potash Review, Fevereiro.

PIMENTEL GOMES, F. e I.R. NOGUEIRA, 1977. Extrapolação ou Projeção: Uma Têcnica Difícil e Perigosa. Ciência e Cultura, 29 (12): 1386-1389 p.

PENTEADO et alii, 1971. Eficiência do Ensaio Composto Central (Box) em Comparação com os Fatoriais Completos de Dois Fatores. XIII Congresso Brasileiro de Ciência do Solo. Vitória, ES.

YATES, F., 1937. The design and Analysis of Foctorial Experiments. Tch. Commun Bur. Soil Sci. Harpenden, 35: 77p.

APÊNDICE

Figura 1. Novo tipo de delineamento ortogonal adequado para regressao polinomial do segundo grau.

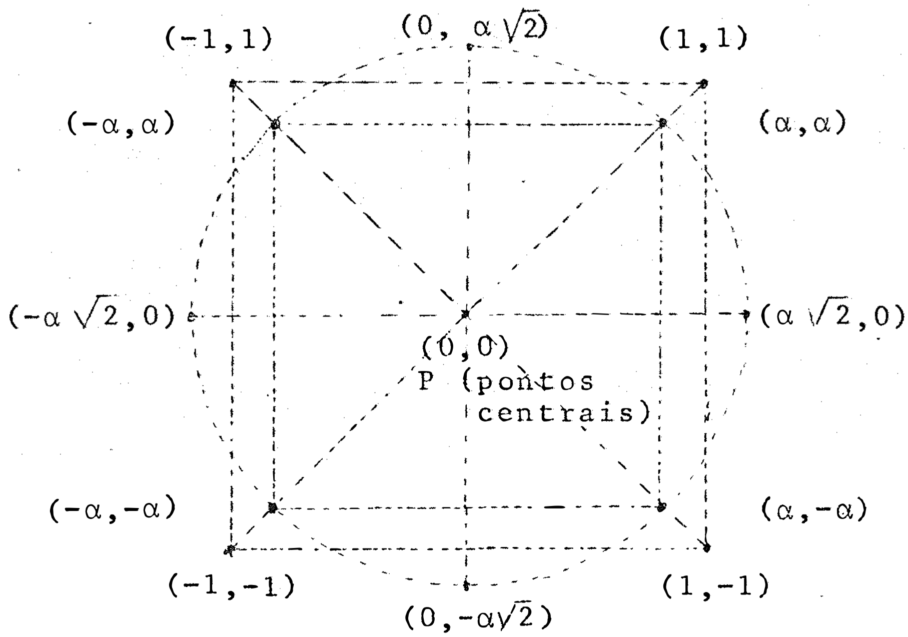

Figura 2. Novo tipo de delineamento ortogonal adequado para regressão polinomial do segundo grau quando P=6 e $\alpha=1$.

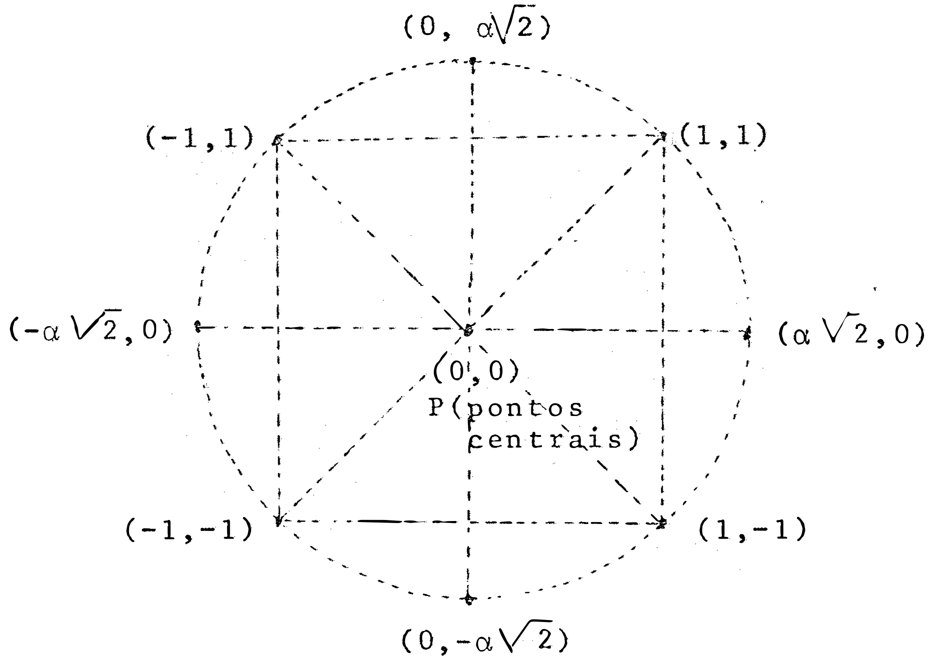

Tabela 1. Matriz X

X_{1u}	X_{2u}	$(X^2_{1u} - \bar{X}^2_{1u})$	$(X^2_{2u} - \bar{X}^2_{2u})$	$X_{1u}\ X_{2u}$	
1	1	1-D	1-D	1	
1	-1	1-D	1-D	-1	
-1	1	1-D	1-D	-1	
-1	-1	1-D	1-D	1	
α	α	α^2-D	α^2-D	α^2	
α	$-\alpha$	α^2-D	α^2-D	$-\alpha^2$	
$-\alpha$	α	α^2-D	α^2-D	$-\alpha^2$	
$-\alpha$	$-\alpha$	α^2-D	α^2-D	α^2	
0	$\alpha\sqrt{2}$	0-D	$2\alpha^2-D$	0	
0	$-\alpha\sqrt{2}$	0-D	$2\alpha^2-D$	0	
$\alpha\sqrt{2}$	0	$2\alpha^2-D$	0-D	0	
$-\alpha\sqrt{2}$	0	$2\alpha^2-D$	0-D	0	
0	0	0-D	0-D	0	P (pontos centrais)
.	.	.	.	.	
.	.	.	.	.	
.	.	.	.	.	
0	0	0-D	0-D	0	

onde $\bar{X}_{1u} = \bar{X}_{2u} = D = \dfrac{4 + 8\alpha^2}{12 + P}$

Tabela 2. Matriz X'X

$$\begin{bmatrix} 4+8\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4+8\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M & N & 0 \\ 0 & 0 & N & M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4+4\alpha^4 \end{bmatrix}$$

onde $M = 4 + 12\alpha^4 - \dfrac{(4 + 8\alpha^2)^2}{12 + P}$

$$N = 4 + 4\alpha^4 - \frac{(4 + 8\alpha^2)^2}{12 + P}$$

Tabela 3. Valores de α que tornam ortogonal o presente delineamento.

P	α
1	0,716332
2	0,763267
3	0,812561
4	0,866026
5	3,891199
5	0,926592
6	2,645752
6	1
7	2,029688
7	1,101681
8	1,414214

Tabela 4. Matriz diagonal X'X

$$\begin{bmatrix} 4+8\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4+8\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8\alpha^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8\alpha^4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4+4\alpha^4 \end{bmatrix}$$

Tabela 5. Matriz diagonal X'X para r repetições

$$\begin{bmatrix} r(4+8\alpha^2) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & r(4+8\alpha^2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8r\alpha^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8r\alpha^4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r(4+4\alpha^4) \end{bmatrix}$$

Tabela 6. Variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau.

Valor de P	Valor de α	$V(\hat{\beta}_i)$	$V(\hat{\beta}_{12})$	$V(\hat{\beta}_{ii})$
1	0,716332	0,123380	0,197894	0,474735
2	0,763267	0,115465	0,186652	0,368302
3	0,812561	0,107735	0,174103	0,286738
4	0,866026	0,091507	0,160000	0,222222
5	3,891199	0,007992	0,001086	0,000545
5	0,926592	0,092008	0,143914	0,169572
6	2,645752	0,016667	0,005000	0,002551
6	1	0,083334	0,125000	0,125000
7	2,029688	0,027058	0,013911	0,007366
7	1,101681	0,072942	0,101089	0,084857
8	1,414214	0,050000	0,050000	0,031250

Nota: A estes valores deve-se multiplicar a fração $\frac{\sigma^2}{r}$.

Tabela 7. Variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, levando em consideração o mesmo número de parcelas

Valor de P	Valor de α	$V(\hat{\beta}_i)$	$V(\hat{\beta}_{12})$	$V(\hat{\beta}_{ii})$
1	0,716332	0,123380	0,197894	0,474735
2	0,763267	0,124347	0,201010	0,396633
3	0,812561	0,124310	0,200888	0,330852
4	0,866026	0,112624	0,196923	0,273504
5	3,891199	0,010451	0,000112	0,000713
5	0,926592	0,120318	0,188195	0,221748
6	2,645752	0,023077	0,006923	0,003532
6	1	0,115386	0,173077	0,173077
7	2,029688	0,039546	0,020331	0,010766
7	1,101681	0,106608	0,147745	0,124022
8	1,414214	0,076923	0,076923	0,048077

Nota: a este valores multiplica-se $\frac{\sigma^2}{r}$.

Tabela 8. Variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grua, levando em consideração a mesma área a ser utilizada e o mesmo intervalo.

Valor de P	Valor de α	$V(\hat{\beta}_i)$	$V(\hat{\beta}_{12})$	$V(\hat{\beta}_{ii})$
1	0,716332	0,063310	0,052106	0,125000
2	0,763267	0,072442	0,068222	0,134616
3	0,812561	0,082076	0,087575	0,144231
4	0,866026	0,084468	0,110770	0,153847
5	3,891199	0,158243	0,025677	0,163464
5	1,926592	0,103302	0,138728	0,163461
6	2,645752	0,161539	0,339227	0,173068
6	1	0,115386	0,173077	0,173077
7	2,029688	0,162915	0,345045	0,182714
7	1,101681	0,016802	0,217639	0,182693
8	1,414214	0,153846	0,307692	0,192308

Nota: A estes valores deve-se multiplicar a fração $\frac{\sigma^2}{r}$.

Tabela 9 - Análise de variância com P = 1 e r repetições

Fontes de Variação	G.L.	S Q
Total	13r-1	(a) da maneira usual
Repetições	r-1	(b) da maneira usual
$\hat{\beta}_1$	1	(c) pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_2$	1	(d) pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{11}$	1	(e) pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{22}$	1	(f) pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{12}$	1	(g) pela fórmula apresentada
Falta de ajuste	7	(h) SQ tratamentos - (c + d + e + f + g)
Erro	12(r-1)	(i) a - (b + c + d + e + f + g + h)

Tabela 10 - Análise de variância, com 12 + P tratamentos e r = 1.

Fontes de Variação	G.L.	SQ
Total	12+ P-1	(a) da maneira usual
$\hat{\beta}_1$	1	(b) pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_2$	1	(c) pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{11}$	1	(d) pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{22}$	1	(e) pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{12}$	1	(f) pela fórmula apresentada
Falta de ajuste	7	(g) a - (b + c + d + e + f)
Erro	P - 1	(h) $\Sigma (Y_p - \bar{Y}_p)^2$