

**O DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL E A SUA
VIABILIDADE DE USO EM ALGUMAS ÁREAS DE
PESQUISA**

NAZARÉ BARATA MATEUS

Licenciada em Matemática

Orientador: Prof. Dr. DÉCIO BARBIN

Dissertação apresentada à Escola Superior de
Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de
São Paulo, para obtenção do título de Mestre em
Agronomia, Área de Concentração: Estatística e
Experimentação Agronômica.

PIRACICABA

Estado de São Paulo – Brasil

Março – 2001

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
DIVISÃO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - Campus "Luiz de Queiroz"/USP

Mateus, Nazaré Barata

O delineamento composto central e a sua viabilidade de uso em algumas áreas de pesquisa / Nazaré Barata Mateus. - - Piracicaba, 2001.
105 p. : il.

Dissertação (mestrado) - - Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, 2001.
Bibliografia.

1. Delineamento de experimento 2. Estatística aplicada 3. Simulação I. Título

CDD 519.5

"Permitida a cópia total ou parcial deste documento, desde que citada a fonte - O autor"

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, a Deus, por permitir a finalização de mais uma tarefa, possibilitando-me estar aqui, vivendo mais este momento importante da minha vida, com muita alegria e satisfação por ver mais este trabalho finalizado, e por tudo de bom que ele tem me reservado.

Ao Dr Décio Barbin, pela orientação valiosa e apoio nos momentos difíceis de minha vida.

Ao Professor Armando Conagin e esposa, pelo carinho com que me receberam em sua casa e pelas sugestões prestadas ao trabalho, que foram fundamentais no seu andamento.

Aos meus pais, Estêvão Braz Mateus e Nazaré Barata Mateus, por todo amor, apoio e incentivo no decorrer do mestrado.

À Dra. Terezinha Aparecida Guedes, do Departamento de Estatística de Universidade Estadual de Maringá, por todo o apoio e amizade.

Ao Dr. Sílvio Sandoval Zocchi, pela atenção com que me atendeu quando precisei.

A todos os professores do curso, pelo esmero e dedicação em sempre ensinar, buscando o aprendizado conjunto, deixando aqui mencionadas a Dra Clarice Borges Demétrio e a Dra. Maria Cristina Stolf Nogueira, que sempre me incentivaram.

À Maria Cristina Neves de Oliveira e seu filho Rodrigo pela amizade e acolhida carinhosa em sua casa.

Aos funcionários do departamento de Ciências Exatas e da Biblioteca Central, que possibilitaram o perfeito andamento do curso, ficando aqui citadas a secretária Solange e Expedita, que se mostraram amigas sinceras.

À Sandra Mara Zara Nemoneze, secretária do Departamento de Estatística da Universidade Estadual de Maringá, que sempre esteve disponível nos momentos que mais precisei, na digitação dos dados e como amiga.

Enfim, agradeço a todos, que direta ou indiretamente propiciaram a realização deste trabalho, muitíssimo obrigada.

SUMÁRIO

	Página
RESUMO.....	iv
SUMMARY.....	v
1 INTRODUÇÃO.....	1
2 REVISÃO DE LITERATURA.....	6
2.1 Definição, aplicações e adaptações do DCC em algumas áreas de pesquisa.....	6
2.1.1 Definição.....	6
2.1.2 Aplicações e adaptações do DCC em algumas áreas de pesquisa.....	9
2.2 DCC: características.....	21
2.3 Tipos de DCC.....	35
2.3.1 DCC ortogonal.....	35
2.3.2 DCC rotacional.....	41
2.3.3 Delineamento cubo de faces centradas (DCC cuboidal).....	46
2.3.4 DCC rotacional e ortogonal ao mesmo tempo.....	48
2.3.5 Divisão do DCC em blocos ortogonalmente.....	51
3 MATERIAIS E MÉTODOS.....	58
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	67
5 CONCLUSÕES.....	83
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	84
APÊNDICES.....	90

O DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL E A SUA VIABILIDADE DE USO EM ALGUMAS ÁREAS DE PESQUISA

Autora: NAZARÉ BARATA MATEUS

Orientador: Prof. DÉCIO BARBIN

RESUMO

Trata-se de um delineamento simétrico, onde a parte central é composta pelo fatorial 2^k com um ou mais pontos centrais que, acrescida da parte axial, composta de pontos chamados “estrelas”, passa a ter a característica de delineamento de segunda ordem. Foram realizadas simulações de experimentos para três tipos de delineamentos compostos centrais (DCC) usando três fatores: rotacional ($\alpha = 1,682$), ortogonal ($\alpha = 1,216$) e com ponto axial igual a um, levando em conta os seguintes coeficientes de variação: 3%, 5%, 10%, 15% e 21%. O objetivo deste trabalho foi o de verificar, através destas simulações, a viabilidade do uso destes DCCs nas áreas de pesquisas de campo, como em Agronomia, em laboratórios de Fitopatologia, Virologia e Entomologia, onde o coeficiente de variação não é superior a 6% e na indústria química, onde o coeficiente de variação é bastante baixo. O uso do DCC para estimativas de respostas e pontos ótimos, através da equação de segundo grau, não é um delineamento bom nas situações onde o coeficiente de variação é muito alto, como em pesquisas de campo em Agronomia, mesmo quando se repetem todos os tratamentos, pois observam-se muitas respostas e pontos bem fora da realidade esperada. Já no caso em que o controle dos fatores que influenciem o experimento é efetivo, como é caso de indústrias química, de fiação, por exemplo, estes delineamentos se tornam uma opção bastante boa, já que são considerados como ótimos, além de possuírem um número bem menor de tratamentos, em relação aos fatoriais completos. Seu uso é, também, conveniente em experimentos cujo coeficiente de variação experimental não atinja mais de 6%, como é o caso de experimentos realizados em laboratórios de Fitopatologia, Virologia e Entomologia.

THE CENTER COMPOSITE DESIGN AND ITS VIABILITY IN SOME AREAS OF RESEARCH

Author: NAZARÉ BARATA MATEUS

Adviser: Prof. DÉCIO BARBIN

SUMMARY

Symmetrical design, where the central part is composed by the factorial 2^k with one or more central points than, added of the axial part, composed of points called "stars" it starts to have the characteristic of a second order design. Simulations of experiments were accomplished for three types of central composed designs (CCD) using three factors: rotacional ($\alpha = 1,682$), ortogonal ($\alpha = 1,216$) and with axial point equal 1, taking into account the following variation coefficients: 3%, 5%, 10%, 15% and 21%. The objective of this work was verify through these simulations, the viability of the use of these CCD in the areas of field researches, as in Agronomy, in laboratories of Plantpatology, Virology and Entomology, where the coefficient of variation is not superior to 6% and in the chemical industry, where the coefficient of variation is plenty low. The use of CCD for estimates of answers and optimum points, through the second equation, is not a good design in the situations where the coefficient of variation is very loud, as in field researches in Agronomy, same when it repeats all the treatments, because it is observed a lot of answers and points well out of the expected reality. Already in the case in that, the control of the factors that influence the experiment it is effective, as it is case of industries chemistry, of spinning, for instance, these designs become a quite good option, since they are considered as optimum, besides they possess a very smaller number of treatments, in relation to the factorial ones complete. Your use is, also, convenient in experiments whose coefficient of experimental variation doesn't reach more than 6%, as it is the case of experiments accomplished in laboratories of Plantpatology, Virology and Entomology.

1. INTRODUÇÃO

Dentro dos delineamentos padrões para superfície de resposta, o Delineamento Composto Central (DCC) é considerado um delineamento ótimo, sendo utilizado na indústria, quando esta trabalha com erro muito pequeno, isto é, onde o controle dos fatores que influenciam na produção seja bem eficaz. Além disso, ele possui características interessantes para a busca do ponto que dê a resposta ótima, que são um número menor de tratamentos em relação aos fatoriais completos e pode ser realizado seqüencialmente.

Esta segunda característica é uma das mais interessantes do delineamento, pois segundo Montgomery & Myers (1995) e Khury & Cornell (1987), a maioria das aplicações da metodologia de superfície de resposta (RSM) são de natureza seqüencial.

Além destas duas características, será visto adiante, que dependendo do ponto axial e do número de pontos centrais (os quais também serão posteriormente definidos) têm-se vários tipos de DCCs.

Inicialmente, num trabalho de pesquisa, buscam-se quais fatores ou variáveis prováveis são importantes no estudo de superfície de resposta. Isto conduz, normalmente, a um delineamento experimental que relacione esses fatores com o objetivo de eliminar as variáveis sem importância. Este tipo de experimento é chamado de experimento de “filtragem” – “screening experiment” (escolha das variáveis que são importantes na análise e descartar as que não têm influência na resposta que se pretende estudar). Além disso, é necessário definir a região que contém o ótimo. É esta a situação que torna o DCC um delineamento bastante interessante.

Duas situações distintas podem ocorrer, segundo Myers (1971):

- (1) o caso em que a região experimental usada é na vizinhança do ótimo, e
- (2) o ótimo real está longe da região experimental.

Na prática, porém, o pesquisador espera que esta última situação não ocorra. Neste caso o pesquisador prudente certamente planejaria sua pesquisa de forma que os ensaios estivessem na região experimental na qual ele acha que o ótimo esteja localizado. Entretanto, ele poderia iniciar seu trabalho com completa ignorância a respeito da região adequada e, então, poderia desenvolver um plano experimental de forma a caminhar de uma região distante do verdadeiro ótimo para a região que contivesse as condições desejáveis. Como muitas pesquisas demandam tempo e muitas vezes o número de ensaios é grande, isto torna na maioria das vezes, essas pesquisas inviáveis em termos econômicos.

De acordo com Davies (1954), nem sempre é possível a pesquisa de uma região completa, principalmente quando o erro experimental é muito grande, pois é necessário um grande número de ensaios para se obter a precisão adequada para a exploração da região completa, a qual é muito grande. Já, no caso em que o erro experimental se torna pequeno, como por exemplo, nas pesquisas em laboratórios ou certos tipos de processos na indústria, onde essas condições que afetam o experimento podem ser controladas dentro de pequenos intervalos, é possível o estudo em uma pequena região. Logo, apresentando-se esta situação (erro experimental pequeno) e o pesquisador não conhecendo a vizinhança do ótimo, não é necessário explorar toda região que contém esse ótimo. Basta, através de experimentos seqüenciais, descobrir a região vizinha que contém esse ponto.

Outra situação que Conagin¹ indica, é a de que na indústria química muitas vezes é preciso mudar a matéria prima ou produto que está sendo usado na produção. Acontece, porém, que a nova matéria prima ou produto a ser utilizado vem com as condições (como por exemplo, temperatura, tempo, etc) de como deve ser usado, mas que nem sempre chegam ao ponto ótimo em termos de produção e economia que a indústria necessita. Além disso, a produção é um processo contínuo numa indústria.

Portanto, é necessário o uso de experimentos com poucos pontos que possam ser usados sem parar a produção e de forma econômica. Partindo das especificações do produto utilizado, pode-se caminhar através de experimentos de

¹CONAGIN, A. Comunicação pessoal, 05/04/2000.

primeira ordem, que permitem análise em estágios, até a região onde estão as condições ótimas e ali estudar a “curvatura do sistema” (termo utilizado por Conagin, 1982b) para indicar o local onde será utilizado um delineamento de maior ordem), localizando assim o ponto que satisfaz quanto à qualidade e economia na produção. É claro que, neste caso, o erro experimental deve ser pequeno, o que geralmente ocorre neste tipo de produção onde todas as condições podem ser mantidas controladas dentro de pequenos intervalos.

A partir de delineamentos de tratamentos mais complexos, que utilizam todas as combinações dos fatores em estudo, várias tentativas têm sido feitas para redução do número de pontos experimentais, através de técnicas como a de confundimento e de repetição fracionada. Além destas técnicas, com o objetivo da redução do número de pontos experimentais, foi criada a técnica que utiliza os delineamentos compostos. Eles foram introduzidos, inicialmente, na pesquisa industrial, em ensaios seqüenciais onde o erro experimental costuma ser pequeno, e, posteriormente, foram adaptados a outros ramos da ciência. Várias modificações têm sido propostas tendo como base os delineamentos compostos centrais ou não centrais.

Segundo Montgomery e Myers (1995), o Delineamento Composto Central (DCC) é o delineamento mais popular da classe de delineamentos de segunda ordem e o mais importante para ajuste de modelos de superfícies de resposta de segunda ordem. O que leva ao seu uso é que o DCC pode ser desenvolvido em experimentações seqüenciais que, segundo Jorge e Freitas (1979), constituem numa das vantagens, pois o mesmo pode ser realizado em estágios a partir do núcleo. Foi introduzido, segundo estes autores, com a finalidade de determinar condições ótimas de pesquisas químicas.

Um outro fato que motiva o seu uso, é que os experimentos fatoriais têm o número muito grande de tratamentos resultantes das combinações dos fatores com os níveis, ficando dessa forma mais difícil a eliminação de diferenças, como ocorre na experimentação agrônômica, em que dentro de uma mesma repetição, quando se trata de experimento em campo, há, por exemplo, gradiente de fertilidade. Se um delineamento for empregado com cinco fatores e cada um com quatro níveis, empregando-se um fatorial completo (4^5), tem-se necessidade de 1024 tratamentos. Em consequência desta situação, o erro padrão por parcela tende a ser alto em comparação com experimentos que

envolvam poucos tratamentos. Este número pode ser reduzido usando-se outros tipos de arranjos experimentais, como os fatoriais fracionários, os delineamentos compostos, além de outros. Além destes, um outro modo de reduzir o tamanho do bloco sem diminuir o número de tratamentos é o confundimento desenvolvido por Yates² (Batista, 1976).

Sabendo-se que o delineamento composto central (DCC) possibilita ao pesquisador, para um determinado número de fatores, escolher entre os tipos ortogonais, não ortogonais e/ou rotacionais permitindo ainda a sua divisão ortogonalmente em blocos, bem como se poder trabalhar com um número bem menor de combinações entre fatores com seus respectivos níveis do que os fatoriais completos, este trabalho tem como um dos objetivos, tentar mostrar, através da revisão bibliográfica, que se trata de um delineamento bastante flexível. Além das qualidades já enumeradas sabe-se que se trata de delineamento seqüencial, pois permite caminhar no sentido da otimização do sistema. isto é, através da execução de uma parte do experimento (aplicando experimentos fatoriais 2^k ou fração - experimento de primeira ordem) através da “técnica do caminhamento ascendente ótimo (*steepest ascent*)”. Isso consiste em chegar à região que contém o ótimo e, então, comparar a parte do delineamento que consiste dos pontos axiais com o objetivo de avaliar a parte curvilínea aí existente, de forma a chegar à solução ótima, que maximiza os resultados do sistema.

Pretende-se, ainda, através da simulação de dados, verificar, nas áreas de pesquisa a seguir relacionadas, em que condições o DCC é um delineamento viável para ajuste de superfície de resposta, levando-se em conta o coeficiente de variação e a procura do ponto de máximo ou mínimo:

- Experimentos Agronômicos de campo, onde o coeficiente de variação é muito alto (maior do que 10% dependendo da cultura, podendo variar acima de 21%), e segundo Miranda (1976) e Conagin³ (consulta verbal), para análise de superfícies de respostas, os delineamentos devem ser aplicados em rede, isto é, a análise deve ser feita em mais de um ano, pois a superfície obtida para os mesmos fatores com os mesmos níveis tende a ser diferente de ano para ano.

²CONAGIN, id.

³YATES, F. Complex experiments. Journal Royal Statistical Society. v.B2. p.181-247, 1951.

- Esta diferença é causada pelas condições climáticas, tipos de solos, de pragas, doenças e outros fatores que influenciam bastante a produção, pois estes fatores não podem ser controlados como seria no caso de um laboratório ou indústria;
- Laboratórios de Biotecnologia, Fitopatologia, Entomologia e Virologia, onde o coeficiente de variação é baixo (em geral é em torno de 6%), pois existe o controle de clima, pragas, doenças, além de outros fatores que fora de um laboratório não poderiam ser controlados;
- Indústria química, em que o processo não pode ser interrompido, mas cujo erro experimental tende a ser bem pequeno já que o controle das condições que influenciam o processo é eficiente.

2. REVISÃO DE LITERATURA

A revisão de literatura deste trabalho, foi dividida em duas partes. Na primeira, defini-se o Delineamento Composto Central (DCC) e citam-se alguns artigos relacionados ao tema sua aplicação em algumas áreas de pesquisa, enquanto na segunda, apresentam-se os tipos tipos de DCC, com suas definições.

2.1 Definição, aplicações e adaptações do DCC em algumas áreas de pesquisa

2.1.1 Definição

Seja k o número de fatores a serem combinados e sejam os níveis codificados de cada variável (fatores) X_i : -1 e $+1$ na parte fatorial. Define-se o DCC como o conjunto constituído dos seguintes tratamentos:

$(1, 1, \dots, 1),$

$(-1, 1, \dots, 1),$

$\dots,$

$(-1, -1, \dots, -1),$

totalizando $F = 2^k$ ou $F = 2^k \cdot p$ (caso se tome um fatorial fracionado)

combinações (tratamentos);

Adicionando-se a estes as $(2k + n_c)$ combinações:

$(0, 0, \dots, 0)$ conjunto com n_c vetores nulos;

e

$(-\alpha, 0, \dots, 0); (\alpha, 0, \dots, 0);$

$(0, -\alpha, \dots, 0); (0, \alpha, \dots, 0);$

$(0 \ 0 \ \dots \ -\alpha)$; $(0 \ 0 \ \dots \ \alpha)$ que são os $2k$ pontos axiais ou estrelas, tem-se um total de F pontos fatoriais, mais $2k$ pontos axiais e mais n_c pontos centrais.

Como visto na definição, o DCC é constituído, basicamente, de uma parte fatorial (ou fração de um fatorial) com dois níveis (que permite estimar todos os efeitos de primeiro grau e os efeitos das interações), e de pontos axiais ou estrela nos níveis $-\alpha$ e $+\alpha$ de cada fator para o nível médio dos demais fatores que partem de um ponto ou mais pontos localizados no centro do delineamento.

Segundo Montgomery e Myers (1995) a natureza sequencial do delineamento torna-se óbvia. Os pontos fatoriais representam um delineamento de variância ótima para o modelo de primeira ordem ou primeira ordem mais interação dupla.

O DCC é um delineamento que foi desenvolvido com o objetivo de permitir encontrar o ponto de resposta máxima ou mínima, em ensaios com k fatores, cada um com cinco níveis, e com um número de pontos inferior a outros tipos de delineamentos utilizados, por exemplo, o fatorial 3^k .

Box e Wilson (1951) desenvolveram o DCC para ajustar superfícies de resposta de segunda ordem. Quando da sua elaboração ele era constituído pela adição de combinações de tratamentos àquelas que são obtidas de um fatorial 2^k , $2k$ pontos axiais e apenas um ponto central. E comparando-se com o número total de combinações do fatorial 3^k , por exemplo, para $k = 2, 3$ e 4 variáveis X , o experimento requer 9, 15 e 25 unidades, respectivamente, no primeiro caso e 9, 27 e 81 combinações no segundo caso.

Como é dos pontos centrais que se obtém a informação sobre a existência de curvatura no sistema, costuma-se repeti-lo de forma conveniente e de acordo com o tipo de DCC que se necessita. Se existe curvatura no sistema, a adição dos pontos axiais permite uma estimação eficiente dos termos quadráticos puros.

Tem-se a seguir a representação gráfica de um DCC para $k = 2$ e $k = 3$ fatores:

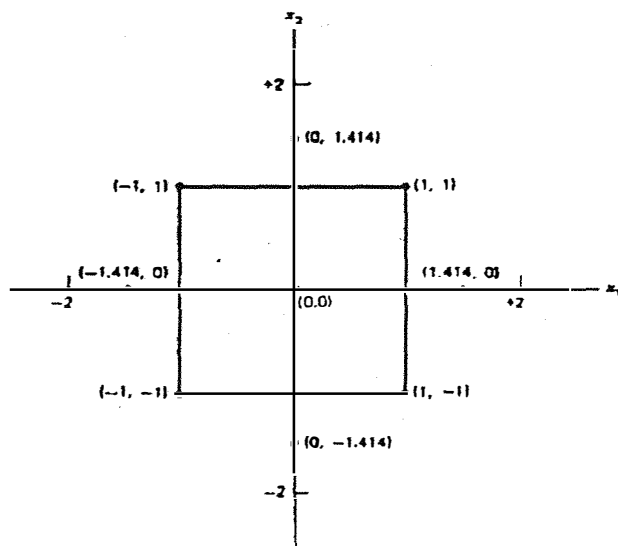


Figura 1 – Representação esquemática do DCC ortogonal para $k=2$.

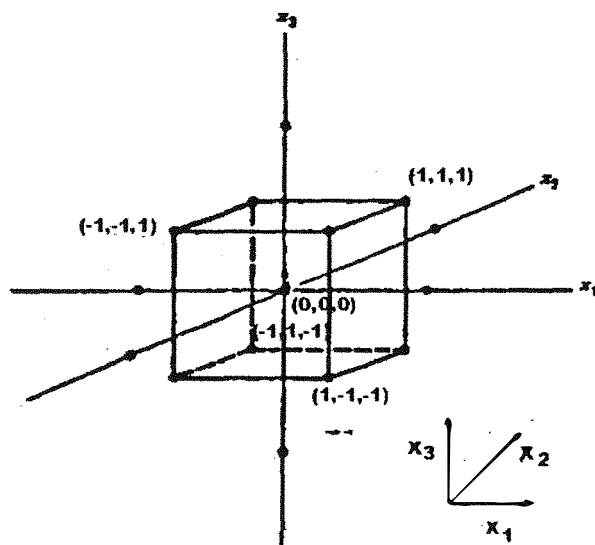


Figura 2 – Representação esquemática do DCC rotacional para $k=3$ fatores.

2.1.2 Aplicações e adaptações do DCC em algumas áreas de pesquisa

Os delineamentos compostos centrais (DCC), segundo Gomes e Conagin (1987), foram desenvolvidos, inicialmente, por Box e Wilson⁴ para estudo de funções polinomiais de resposta na indústria, onde o erro experimental, em geral, é bem pequeno, e as condições do experimento são mais facilmente controláveis. Nessas condições, é comum repetir apenas um tratamento, no caso, o relativo ao ponto central. Segundo esses mesmos autores, já na agricultura é indispensável fazer pelo menos duas repetições, o que se consegue com o uso de dois blocos completos casualizados. Se o pesquisador tiver interesse e se for possível, em cada bloco poderá ser repetido o ponto central, mas isto não é essencial, pois a estimação do erro experimental já está garantida pela repetição de todos os tratamentos.

Outra vantagem, segundo Conagin e Gomes (1987), do uso do DCC na agricultura está que o mesmo permite a experimentação com 5, 7 ou 9 níveis de nutrientes com número relativamente reduzido de tratamentos.

Apesar destas vantagens, Conagin (1982c) diz que na pesquisa agrônômica, na experimentação de campo, onde normalmente, há vários fatores que não podem ser controlados, tais como clima, pragas, tipos de solo, há necessidade da utilização de delineamentos subdivisíveis em blocos, devendo-se colocar o experimento todo de uma vez. Além disso, quando se trata de experimentos com fertilizantes há a necessidade da escolha de uma amplitude adequada para as dosagens de cada um deles. Se não houver esta escolha adequada, as respostas obtidas poderão ser acentuadas e positivas para dosagens mais altas de fertilizantes nos anos favoráveis, ser intermediárias nos anos normais e exibir respostas de menor amplitude e/ou *em platô*, nos anos ruins. Neste último caso, a avaliação dos coeficientes quadráticos puros (β_{ii}) pode ser viesada.

Penteado e Batista (1971), verificaram também que os experimentos fatoriais constituídos por muitos tratamentos proporcionam maior número de graus de

⁴ BOX, G.E.P.; WILSON, K.B. On the experimental attainment of optimum conditions. *Journal Royal Statistical Society*, v.B13, p.1-45, 1951.

liberdade para a estimativa do desvio do modelo, o qual, na maioria das vezes, não é significativo.

Haaland (1989), na área de Biotecnologia, dentro de imunologia, diz que no desenvolvimento de anticorpos monoclonais é comum a escolha do conjunto de variáveis baseada na experiência e preferência pessoal. Contudo, com o fim de viabilidade comercial da produção destes anticorpos é necessária uma aproximação que otimize o processo de produção. Segundo este autor, muitas variáveis com seus níveis, requerem muitas unidades experimentais, devido à complexidade do processo, que no caso, é fisiológica e implica que os resultados experimentais sejam objeto de variabilidade inerente. Quando diz isto, o autor está fazendo referência ao uso de unidades como ratos, por exemplo, os quais devem ser preparados, e isto significa, que muitas vezes, do início do processo até a obtenção do resultado experimental é demandado certo tempo, além da necessidade de alojá-los e alimentá-los adequadamente. Podem decorrer até várias semanas, o que torna caro, o processo de produção de anticorpos, neste tipo de experimento. Portanto, segundo ele, há necessidade, primeiro, de uma “filtragem”, ou seja, da escolha das variáveis realmente importantes para otimização do processo e, segundo, da necessidade de poucos pontos experimentais para análise das respostas. Em suas aplicações, esse autor, indica para escolha de fatores, os fatoriais 2^k ou 2^{k-p} e para análise de superfície de resposta o delineamento composto central, o delineamento cubo de face centrada (o DCC de $\alpha = 1$) e o delineamento Box-Behnken; e para cada um, ele indica o número de pontos centrais adequados.

De acordo com Atkinson & Donev (1992), os delineamentos compostos pertencem a uma família de delineamentos eficientes os quais requerem poucos ensaios para sua realização. Quanto às medidas de eficiência, Lucas⁵ e Donev & Atkinson⁶, citados por esses mesmos autores, mostram que o DCC comporta-se bem de acordo com os critérios D e G de otimização.

⁵LUCAS, J.M. Which response surface design is best. *Technometrics*, n.18, p.411-17, 1976.

⁶DONEV, A. N.; ATKINSON, A.C. Na adjustment algorithm for the construction of exact D-optimum experimental designs. *Technometrics*, n.30, p.429-33, 1988.

Com o tempo e as necessidades de sua aplicação, inclusive na agronomia, principalmente em ensaios de adubação, segundo Jorge (1980), foram desenvolvidas extensões dos DCC, com o objetivo de realizar estudo de superfícies de resposta adaptadas através de modelos polinomiais de segundo grau. As adaptações deste delineamento consistiram, ou do aumento do número de “cubos” (fatoriais 2^k), ou de maior número de pontos centrais, ou ainda, de maior número de pontos axiais. O autor, referindo-se a essas extensões, acrescenta que as mesmas não se restringem a esse campo de pesquisa.

Com relação ainda à experimentação agrônômica, Batista (1976) diz que para quase todas as culturas (referente à agricultura) e para quase todos os solos a necessidade de adubação é imprescindível. Por isso, segundo ele, muitos experimentos são delineados de modo a se pesquisarem os efeitos de fatores em diversos níveis. No caso em que o número de fatores é muito grande há possibilidade de aparecimento de ponto de sela e, além disso, a interpretação dos resultados torna-se mais difícil, quando for ajustado aos dados, um polinômio de segundo grau. Estes fatos foram constatados por Pimentel Gomes (1969), quando ajustou aos dados de diversos experimentos fatoriais 3^3 , polinômio de segundo grau e encontrou um número grande de pontos de sela, um ponto estacionário que não é nem máximo e nem mínimo.

Jorge (1980) cita as seguintes extensões do DCC, encontradas na literatura agrônômica, cujo objetivo é a sua aplicação em ensaios de adubação, e é claro que o uso destes não se restringe apenas a esse campo:

- delineamento “triplo cubo”, para três fatores, com cubos de vértices nas distâncias $\pm 0,4792$, $\pm 0,9584$ e $\pm 1,4376$, mais seis pontos axiais nas distâncias $\pm 1,9168$ e de um ponto central, num total de trinta e um pontos, com nove níveis para cada fator, sugerido por Tramel⁷;

TRAMEL, T. E. A suggested procedure for agronomic-economic fertilizer experiments. In: BAUM, E. L.; HEADY, E. O.; PESEK, J. T.; HILDRETH, C.G. (Ed.) **Economic and Technical Analysis of Fertilizer Innovations and Resource Use**. Ames. The Iowa State College Press. p.168-175, 1957.

- modificação do delineamento de Tramel⁸ com a introdução de dois blocos, apresentada por Stavrou & Cady⁹, que consistiu em colocar em dois blocos os tratamentos de cada cubo, e os pontos axiais repetidos em cada bloco. O ponto central pode ser colocado e se o for, deve-se ter um em cada bloco. Este delineamento é uma tentativa de diminuir o erro experimental, sem modificar a estimação dos parâmetros do modelo de regressão de segunda ordem, e a estimação dos parâmetros continuarem independentes do efeito de blocos;

- delineamento composto central aumentado, com dezenove pontos, onde os quatro tratamentos adicionais correspondem a meio cubo nos níveis ± 2 (aplicado a ensaios de milho, no Estado de Iowa, em 1959), proposto por Voss e Pesek¹⁰. Conduziram em 1960 novos ensaios com acréscimo de mais quatro tratamentos, para remover o efeito de confundimento existente, ficando desta forma, com vinte e três pontos: dois cubos, um nos níveis ± 1 , outro em ± 2 ; seis axiais nos níveis ± 2 de cada fator, para níveis médios dos outros dois fatores, e um ponto central.

- Vanderlip & Pesek¹¹ propuseram uma modificação do delineamento de Voss e Pesek que tem 23 pontos, para sete níveis com o cubo nos níveis ± 3 , outro nos níveis ± 1 , pontos axiais em ± 2 , para níveis médios dos outros fatores, e um ponto central. Já Christians¹² et al. (1979) colocaram 6 repetições do ponto central do delineamento duplo cubo, ficando com cubos nos níveis ± 1 , ± 2 , seis pontos axiais nos níveis ± 3 , num total de vinte e oito pontos experimentais;

- no México, criou-se o delineamento “San Cristóbal”, que é um composto modificado, desenvolvido por Rojas¹³ que diz ter a finalidade de incluir um tratamento

⁸ TRAMEL, id.

⁹ STAVROU, J.; CADY, F. B. Confounding the triple cube response surface design to reduce block size. **Soil Science Society American Proceedings**, n. 31, p. 126-128, 1967.

¹⁰ VOSS, R.; PESEK, J. Yield of corn grain as affected by fertilizer rates and environmental factors. **Agronomy Journal**, n. 59, p.567-572, 1967.

¹¹ VANDERLIP, R.L.; PESEK, J. Nitrate accumulation in smooth brome grass (*Bromus inermis*, Lcyss.): I. Effects of applied N, P, and K. **Agronomy Journal**, n. 62, p.491-494, 1970.

¹² CHRISTIANS, N. E.; MARTIN, D. P.; WILKINSON, J. F. Nitrogen, phosphorus, and potassium effects on quality and growth of Kentucky bluegrass and creeping bentgrass. **Agronomy Journal**, n. 71, p.564-567, 1979.

¹³ ROJAS, B.A. The San Cristóbal designs for fertilizer experiments. In: WILLIAN, J.R., (Ed.) **Proceedings International Society of Sugar Cane Technologists**. Eleventh Congress, Mauritius. Nova York: Elsevier, p.197-203, 1963.

testemunha. Ele consta para k fatores de vértices de um hipercubo nos níveis ± 1 ; de um tratamento no centro do cubo (nível zero), e k pontos em semi-eixos que partem do centro, cada um com nível 2 de um dos fatores e nível zero dos restantes.

Ainda, segundo Jorge (1980), no Brasil, a primeira tentativa de modificação do composto central original, de que se tem conhecimento, foi a proposta em reunião da Região Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria, em 1966. As características do delineamento, segundo a mesma autora, podem ser encontradas em Conagin¹⁴ et al. Foi desenvolvido, inicialmente, para três fatores e consta de dois cubos nos níveis ± 1 e ± 2 ; de um ponto central e de doze pontos axiais nos níveis ± 1 e ± 2 de cada fator, num total de 29 pontos.

Além destes exemplos de modificações, pode-se encontrar na literatura, delineamento central composto Box para três fatores, com os níveis não equidistantes (Jorge & Freitas, 1979 e 1987); delineamentos compostos centrais duplos (Conagin & Jorge, 1979 e Conagin, 1982a); delineamentos compostos centrais com duas estrelas (Conagin, 1982c); delineamentos compostos centrais com três estrelas (Conagin & Jorge, 1983); o delineamento Guadalupe para três fatores e suas variações (descritas por Jorge, 1980 e 1984).

Muitas destas adaptações foram estendidas para o campo agrônomo, onde todos os tratamentos são colocados simultaneamente na área experimental. Como exemplo, de aplicação do DCC no campo agrônomo tem-se: grupos de experimentos que foram instalados no Instituto Agrônomo de Campinas (IAC), com o composto central original, para cultura de milho (Miranda, 1966, e Miranda, 1976), e de algodão (Silva & Nagai, 1974). Uma variação desse delineamento, para três fatores com níveis em escala equidistantes (Jorge e Freitas, 1979), foi aplicada em ensaio de adubação de capim-swannee-bermuda (*Cynodon dactylon* (L.) Pers.), com nitrogênio, fósforo e enxofre, em solo cerrado, e outros.

¹⁴ CONAGIN, A.; JORGE, J. de P.N.; VENTURINI, W. R. Delineamentos experimentais utilizáveis na experimentação de campo. In: REYNAERT, E.E., (Ed.) *La Investigación de fertilidad de Suelos para la Producción Agrícola en la Zona Templada*. Montividéu: IICA-ZC, p.183-201, 1969.

Segundo, Jorge e Freitas (1987), para ensaios agronômicos, a utilização do DCC, em preferência aos fatoriais, foi questionado por Yates¹⁵. Pois, embora concorda-se com as vantagens dos delineamentos de Box sobre os fatoriais, tais como o menor número de unidades experimentais, a adaptabilidade à experimentação seqüencial, a menor sensibilidade a afastamentos do modelo assumido para a superfície de resposta, ele diz, segundo estes autores, que essas vantagens só seriam relevantes na experimentação industrial, onde os erros são pequenos.

Também, Draper e Herzberg¹⁶, citados por Jorge e Freitas (1987), ao se referirem aos muitos delineamentos compostos disponíveis para estudo de superfícies de respostas, comentam que alguns eram já freqüentemente usados, na prática, enquanto outros tinham ainda somente interesse teórico; entretanto, estes poderiam vir a ser úteis, no futuro, pois acreditam na possibilidade de se desenvolverem novas técnicas com o objetivo de se alcançar um maior controle das condições envolvidas no experimento, tornando possível assim, a obtenção do erro experimental o menor possível. E se isso ocorrer, podem-se reformular os conceitos sobre o uso dos delineamentos compostos na pesquisa agronômica. A maior dificuldade de um experimento de campo, em especial, o agronômico, está em controlar as influências de vários fatores externos ao experimento, o que não se verifica na indústria, em especial a química, de fiação, e outras

Para Conagin (1982b), com relação a experimentos como os de adubação, por exemplo, no estudo de N, P e K, cada um com pelo menos cinco níveis, os DCCs poderão ser utilizados. Segundo esse autor, os DCCs são delineamentos bastante flexíveis, pois possibilitam ao pesquisador, para um número determinado de fatores, escolher entre os tipos não-ortogonais e rotacionais. E ainda, podem ser subdivididos em blocos, ortogonalmente, sem perder certas características, como a ortogonalidade e a rotacionalidade. Por isso, segundo o autor, esses delineamentos são aplicáveis sobretudo para aqueles casos em que só uma parte das observações pode ser experimentada de cada

¹⁵ YATES, id.

¹⁶ DRAPER, N. R.; HERZBERG, A.M. Further second order rotatable designs. **Annual Mathematics Statistical**, n.39, p.1995-2001, 1968.

vez (um bloco por vez, como acontece em certos experimentos industriais) ou nos casos, como na agricultura, em que todo o experimento tem que ser executado ao mesmo tempo, pois existem diferenças de fertilidade, havendo vantagem na alocação dos tratamentos em blocos; ainda, em outras áreas, como a experimentação animal, em que os blocos poderiam ser diferentes raças, etc.

Delineamentos compostos centrais ortogonais e rotacionais, ainda segundo esse autor, apresentam vantagens adicionais, principalmente uma uniformidade de variâncias para os pontos que se encontram à mesma distância do centro do delineamento, o que torna o delineamento mais eficiente e aplicável naqueles casos em que possam existir gradientes como o de fertilidade, o que, geralmente, ocorre na experimentação de campo. A partição em dois, três ou cinco blocos é, então, altamente desejável.

É o valor de α que particulariza os delineamentos compostos centrais, pois o mesmo pode ser escolhido para tornar os coeficientes de regressão ortogonais, ou para minimizar o desvio que resulta ser a forma verdadeira da superfície de resposta se esta não for quadrática, ou para dar ao delineamento a propriedade de ser rotacional, isto é, todos os pontos são equidistantes do ponto central. A ortogonalidade propicia a estimação independente para os coeficientes do modelo e a rotacionalidade proporciona variâncias idênticas para pontos situados à mesma distância do centro, em qualquer direção. Batista (1976) calculou o valor de α que torna o DCC, com apenas um ponto central, ortogonal.

Segundo, Conagin (1982b), com relação à eficiência e ao número de pontos centrais tem-se:

“Segundo Lucas¹⁷ (1974), na comparação de vários delineamentos, pelo critério do $|X'X|$ (onde X é a matriz dos coeficientes de regressão) máximo, o critério D de eficiência dos delineamentos compostos centrais decresce à medida que cresce o número de fatores k . Para $n \geq 3$, o aumento de pontos centrais diminui um pouco a eficiência média geral. Não obstante, segundo aquele autor, os pontos centrais continuam a ser usados, na prática, e muitas vezes são repetidos mais pesadamente que outros pontos do delineamento, pelas seguintes razões:

¹⁷ LUCAS, J.M. Optimum composite designs. *Technometrics*, v.16, n. 4, p. 561-7, Nov. 1974.

- a) O pesquisador sabe, **a priori**, que o ponto central do delineamento está próximo da área mais importante das decisões (ponto extremo, ponto de maior rentabilidade econômica no caso de ensaios de fertilizantes, etc.).
- b) A adição de pontos centrais a um delineamento composto central aumenta a informação obtida na região, apesar de que pode diminuir a informação por ponto experimental.”

De acordo com Atkinson (1992), o efeito dos pontos centrais faz diminuir a eficiência dos delineamentos como medida de otimização o critério D. Os delineamentos, que o autor chama de Box-Draper, por terem as características de rotacionalidade e um número de 2 a 4 pontos centrais (na ausência de tornar o delineamento em blocos ortogonais), têm reduzidas as bordas da região experimental, permitindo assim a redução do efeito de viés dos termos de maior ordem que são omitidos do modelo, o que, segundo o autor, apesar de diminuir os custos, reduz a eficiência das medidas de otimalidade D ou G, pois o D-ótimo abrange a região experimental, pelo menos para os modelos lineares.

Haaland (1989) diz que embora haja flexibilidade quanto ao número de pontos centrais, é necessário pelo menos um. Multiplicar este ponto é fortemente recomendado nos três tipos de delineamentos indicados por ele. Ainda, de acordo com este autor, os pontos centrais melhoram as estimativas dos efeitos quadráticos, e eles permitem graus de liberdade adicionais para o erro. Além disso, os pontos centrais permitem informação extra quanto ao centro da região experimental onde os melhores valores resposta estão freqüentemente localizados.

Com relação à parte fatorial, Conagin (1982b), diz que se deve levar em conta a interação ou as interações que melhor proporcionem o melhor confundimento quando se tratar de fracionamento desta parte.

Outro aspecto, que este autor salienta, é que o DCC é uma opção de delineamento ótimo e bastante flexível, porque possibilita ao pesquisador, para um número determinado de fatores, escolher entre os tipos ortogonais, não ortogonais e/ou rotacionais o que atende às necessidades expostas. Além disso, podem ser divididos em blocos, ortogonalmente.

Sanches et al. (1987) em seu trabalho apontam que na análise de um experimento utilizando superfície de resposta, com o objetivo de se conseguirem os níveis dos nutrientes que dão produção máxima, pode ocorrer que a função de produção estimada tenha ponto de sela. Neste trabalho, ele procurou comparar vários delineamentos, todos utilizando apenas três fatores, entre eles o fatorial 3^3 , os DCCs com $\alpha = 1,214$ e $\alpha = 2$, cada um com apenas um ponto central (15 pontos no total), o delineamento central com duas estrelas (α e 2α) e um ponto central ($\alpha = 0,704377838$) e o delineamento duplo central (dois cubos) com 29 pontos, um com $\alpha = 1,51$ e outro com $\alpha = 1$. Concluíram que para os três primeiros delineamentos o ponto máximo experimental (que é o ponto de maior valor da resposta estimada na região experimental) é ligeiramente mais próximo do ponto de máximo real, do que o ponto de máximo estimado (nos casos onde é encontrado).

Com relação ao delineamento duplo central composto onde $\alpha = 1$, em geral, o ponto de máxima fronteira (o ponto de maior valor da resposta estimada por estar situado na fronteira da região experimental) mostra-se mais próximo do máximo real do que o próprio ponto de máximo estimado (avaliados nos caso onde é encontrado); isso é válido também para o fatorial 3^3 .

Em experimentos industriais e ainda em áreas onde o controle experimental é bastante eficiente, com coeficiente de variação baixo e onde os resultados permitem repetições de uma determinação a outra, é conveniente montar o experimento de *forma a caminhar no sentido da otimização do sistema*, isso é feito através da execução de uma parte do experimento, no qual avaliam-se os resultados, chegando desta forma à área de platô ou de pouco progresso, quando, então, se coloca a parte mais importante do delineamento para a avaliação da parte curvilínea aí existente. Assim, é possível chegar-se à solução ótima, que maximiza os resultados do sistema. Cochran e Cox (1957), Myers (1971) e Conagin (1982b) chamam este processo de descobrir o ótimo de “técnica do caminamento ascendente ótimo (steepest ascent)”.

Miranda (1976), faz um estudo de adubação de milho (usa o DCC 15 pontos, com $\alpha = 2$), comparando as superfícies de respostas e seus coeficientes, durante vários anos em cinco regiões diferentes do Estado de São Paulo, e nota as respostas diferentes para os mesmos experimentos e pontos fora da região estudada em

determinados anos em que o experimento foi executado. Segundo este autor e Conagin et al. (1999), isto se deve a fatores, tais como, condições climáticas, propriedades físicas e químicas do solo, do estado de sanidade das plantas, de pragas e das técnicas de cultivos adotadas.

Miranda (1976), também comenta que, Campos¹⁸ dizia que esse método utilizado para o ajuste da função de superfície de resposta apresenta certos inconvenientes, por ter sido desenvolvido para condições industriais, em que as variáveis em estudo eram praticamente as únicas fontes de variação, e na área agrônômica isto já não ocorre, pois em relação às variáveis em estudo, existem outras fontes de variação, geralmente interferindo no efeito das mesmas.

Conagin et al. (1999), por experiência, alertam também para o fato de que os DCCs, embora usados no campo agrônômico, não são apropriados pelas mesmas razões que Campos (1967) levantou, pois na pesquisa agrônômica geralmente não se verifica um coeficiente de variação baixo.

Conagin (em consulta verbal) e Miranda (1976) sugerem, para este caso, a aplicação dos experimentos na forma de “rede”, isto é, para um número razoável de anos repetir o experimento levando em conta cada ano, com o objetivo de possibilitar a elaboração de pareceres de adubação para as culturas, como as de milho por exemplo. Conagin (1982) sugere este tipo de aplicação, porque na Agricultura, principalmente quando se está tratando de pesquisas com fertilizante devido à variabilidade do solo e do clima, como já mencionado em termos de fertilizantes, as respostas obtidas podem ser mais altas, na amplitude estudada, nos anos bons, e, nos anos ruins, de menor magnitude, ascendente e com resposta em uma amplitude menor, apresentando, em certos casos, uma “resposta em platô” para as dosagens mais altas.

Diversos estudos, segundo Batista (1976), foram realizados sobre os DCCs, e um deles é o de Pimentel Gomes e Campos (1972) que estudaram a eficiência do DCC rotacional para $k=3$, com um ponto central, em relação ao fatorial 3^3 , e chegaram à

¹⁸ CAMPOS, H. Aspectos de aplicação das superfícies de resposta a ensaios fatoriais 3^3 de adubação. Piracicaba, 1967, 82p. Tese (Doutorado) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade São Paulo.

conclusão que para os coeficientes dos termos quadráticos de um polinômio do segundo grau nos fatoriais obtêm-se menores variâncias do que para os DCCs similares.

Sanches (1993), estudando dez tipos de delineamentos, concluiu que se o objetivo é a obtenção de doses ótimas (quando se trata de fertilizantes) pelo ponto de máximo deve-se preferir o fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, e ainda, que entre os delineamentos, o de Box (DCC) com $\alpha = 1,2154$ e $\alpha = 2$, ou os duplos centrais com 29 pontos para $\alpha = 1$ ou $\alpha = 1,5$, além do composto central com duas estrelas, apresentaram os piores desempenhos em termos de pontos de máximo.

Mesmo o fatorial 3^3 sendo mais eficiente, Conagin et al. (1999) dizem, referindo-se aos trabalhos de Campos¹⁹ e Malheiros & Percin²⁰, que há a obtenção de pontos de sela o que dificulta a interpretação dos resultados experimentais com superfície de resposta.

Além dos exemplos de aplicação que foram apresentados até aqui, pode-se encontrar os seguintes trabalhos que se utilizam deste delineamento:

- Lugo (1990) utiliza o DCC rotacional dividido em 2 blocos ortogonalmente para análise de superfície de resposta para o estudo de delineamento que ele chama de *Exco* (Planejamento experimental e comercial para ensaios agrícolas), como um opção de delineamento com poucos pontos experimentais, que permite o manejo dos experimentos em nível de campo. A cultura utilizada foi a beterraba (*Beta vulgaris L.*) e o estudo foi feito utilizando quatro fatores (nitrogênio, nas doses 0, 20, 40, 60 e 80 kg/ha; fósforo, nas doses 0, 30, 60, 90 e 120 kg/ha; potássio, nas doses 0, 30, 60, 90 e 120 kg/ha e matéria orgânica nas quantidades de 0, 5, 10, 15 e 20 t/ha). O autor justificou o uso do DCC através de dois estudos apresentados por Chacin (1980 e 1983);

- Souza (1992), que o usa, no estudo da utilização do extrato de soja desengordurado em pó, na produção de queijo de minas frescal;

- Mella (1980), que o utiliza no estudo de resposta de uma mistura de gramínea e leguminosa sub-tropicais sob diferentes sistemas de pastejos;

¹⁹ Campos, idem

²⁰ MALHEIROS, E. B.; PERCIN, D. Posição das doses de nutrientes na análise de uma superfície de resposta à adubação. *Ver. Mat. Esta.*, nº 1, p.69-78, 1983.

- Jones et al. (1970), que o utilizou no estudo de respostas de quatro leguminosas tropicais a fósforo, potássio e calcário num latossolo vermelho-amarelo de campo cerrado adicionando a ele mais seis tratamentos, com o objetivo de melhor caracterizar as respostas a P e calcário;

- Guazzelli et al. (1973) que se utilizam de ensaios exploratórios do tipo fatorial 2^k para testar o efeito da presença e ausência de calcário, nitrogênio, fósforo, potássio e de uma mistura de micronutrientes (Zn, Mo, B e Cu) e, para avaliação das superfícies de resposta, delineamentos centrais compostos rotacionais envolvendo quatro variáveis (calcário, nitrogênio, fósforo e potássio) com cinco níveis cada, sendo usadas duas repetições e testemunha. Usou ao todo 32 pontos.

Segundo Guazzelli et al. (1973) os DCCs

“são aparentemente mais eficientes numa base por parcela do que o arranjo fatorial completo para estimar os coeficientes requeridos para caracterizar uma superfície de resposta quadrática (Box 1954, Box & Wilson 1951), mas os arranjos dos tratamentos não substituem os fatoriais completos em todos os casos. Eles devem ser usados no pressuposto de que medidas simplificadas são feitas para estabelecer a natureza da superfície de resposta na região de interesse (Baird & Mason²¹, 1959)”.

Apesar das tentativas do uso do DCC em áreas de pesquisa, onde o erro experimental é maior do que na área industrial, percebe-se pelos trabalhos com ensaios agronômicos de Miranda (1976), Conagin et al. (1999), Pereira et al. (1985), Pimentel Gomes et al (1972), Sanches et al. (1987), que quando se ajusta uma superfície quadrática com o objetivo de buscar o ótimo, tem-se pouco sucesso, havendo a ocorrência, na maioria das vezes, de pontos de sela, ou até o aparecimento de pontos bem fora da região de interesse na pesquisa, mesmo quando se repete todos os tratamentos. Tanto Miranda (1976), como Pimentel Gomes et al. (1972), utilizaram-se de vários conjuntos de dados experimentais. Os outros trabalhos foram baseados em simulações de experimentos.

¹⁸ BAIRD, B. L.; MASON, D.D. Multi-variable Equations Describing Fertility-Corn Yield Response Surfaces and Their Agronomic and Economic Interpretation. *Agronomy Journal Royal Statistical Society*, n.B13, p.1-45, 1951.

2.2. Delineamento Composto Central (DCC): características

Antes da apresentação das características do DCC, será definido o modelo quadrático.

Para que se possam estimar os coeficientes de regressão da equação

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i < j}^k \sum_{i < j}^k \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon \quad (1)$$

cada variável X_i , deve ter no mínimo três níveis diferentes. Logo, por esta condição o uso de fatoriais do grupo 3^k seria interessante. Se os três níveis de cada variável X forem codificados como $-1, 0$ e $+1$, a superfície de segunda ordem será mais facilmente ajustada aos resultados de um fatorial 3^k . O problema é que, dependendo do número de variáveis, o número de combinações de tratamentos será muito grande o que encareceria o experimento dependendo de onde fosse aplicado.

Para maior facilidade de cálculo, inclusive computacional, o uso de variáveis codificadas se torna interessante neste caso.

Seja, portanto, o modelo (1). reescrito da seguinte forma:

$$y_u = b_0 + \sum_{i=1}^k b_{iu} x_{iu} + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_{iu}^2 + \sum_{i < j}^k \sum_{i < j}^k b_{ij} x_{iu} x_{ju} + \varepsilon_u \quad (2)$$

onde x_{iu} e x_{ju} são variáveis codificadas e $u = 1, \dots, N$ (número de unidades experimentais).

No caso de um delineamento composto central tem-se:

$$x_{iu} = [2X_i - (X_{iL} + X_{iH})] / (X_{iL} - X_{iH}) \quad \text{e} \quad x_{ju} = [2X_j - (X_{jL} + X_{jH})] / (X_{jL} - X_{jH})$$

onde X_i e X_j são as variáveis naturais sem transformação, com níveis equidistantes em relação ao ponto central, e L e H indicam nível menor e o nível maior, respectivamente. Em consequência, no caso do fatorial 2^k , x_i e x_j são iguais a ± 1 . E no caso do nível central o valor é zero.

Segundo Khuri e Cornell (1987), codificar as variáveis remove as unidades de medida ficando as variáveis estandardizadas. Eles apontam duas principais vantagens para seu uso:

1. Facilita a implantação computacional e aumenta a precisão na estimação dos coeficientes estimados no modelo;
2. Valoriza a interpretação dos coeficientes estimados no modelo.

Facilita, ainda, a construção do delineamento experimental e por essa razão, $X'X$ passa a ter uma forma mais simples por ter fora da diagonal muito mais valores zeros ($c_{ij} = 0, i \neq j$) do que a matriz $X'X$ das variáveis originais. Portanto, com uma matriz mais simples há facilidade de inversão, o que amplia a exatidão computacional na estimativa dos parâmetros do modelo. Além disso, há a redução do tempo de computação. Ainda, na matriz $X'X$, em que as variáveis foram codificadas, alguns ou todos os parâmetros não são correlacionados, de modo que, os numeradores dos testes estatísticos associados com testes aos parâmetros individuais são independentes estatisticamente.

Escrevendo a equação (2) de forma matricial tem-se:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{XB} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

onde \mathbf{Y} é o vetor dos valores de y ;

\mathbf{X} é a matriz $N \times [1 + 2k + k(k-1)/2]$ composta de um vetor de uns e dos vetores x_i, x_i^2 e $x_i x_j (i < j)$;

\mathbf{B} é o vetor dos coeficientes da equação e

$\boldsymbol{\varepsilon}$ é o vetor de erro experimental, com distribuição independente e normal com $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$ e $\text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon}) = E(\boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{I}_N \sigma^2$

E como \mathbf{X} é de posto completo, isto é, $[1 + 2k + k(k-1)/2] < N$, isto implica que $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ também é de posto completo e assim, existe $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$

Com isto, os estimadores de mínimos quadrados de \mathbf{B} são dados por:

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{Y} \quad \text{e} \quad \text{Var}(\mathbf{b}) = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \sigma^2$$

O modelo apresentado na equação (1) e (2) contem $1 + 2k + k(k-1)/2$ parâmetros. Deve, por essa razão, ter pelo menos este número de pontos distintos no delineamento e cada variável do delineamento deve ter pelo menos três níveis, como já mencionado. Agora, é claro, isto representa as condições mínimas e ainda devem-se levar em conta as 10 características desejáveis neste caso, que segundo Montgomery e Myers (1995), são:

1. Resultar num bom ajuste do modelo aos dados;
2. Dar suficiente informação que permita um teste de falta de ajuste;
3. Permitir modelo de ordem crescente que possa ser construído seqüencialmente;
4. Permitir uma estimativa do erro experimental puro;
5. Ser insensível (robusto) para a presença de “outliers” nos dados;
6. Ser robusto a erros em controle dos níveis do delineamento;
7. Ter custo efetivo;
8. Permitir que os experimentos possam ser feitos em blocos;
9. Permitir uma verificação da suposição de variância homogênea;
10. Permitir uma boa distribuição de $\text{Var} [\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$.

Nos casos de delineamentos de primeira ordem (ou primeira ordem com interação), a propriedade dominante é a ortogonalidade. No caso de delineamentos de segunda ordem a ortogonalidade deixa de ser um assunto importante; e a estimação de coeficientes individuais, embora importante, torna-se secundária na escala da predição da variância $v(\mathbf{x}) = N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$. Isto tem origem no fato de que há menos preocupação com variáveis que pertençam ao modelo, mas é colocada mais ênfase na qualidade de $\hat{y}(\mathbf{x})$ como uma predição, ou melhor, um estimador para $E[y(\mathbf{x})]$.

Como já referido anteriormente, o DCC pode ser ajustado através de uma programação seqüencial de experimentação. Após o pesquisador ter já certo, quais variáveis deve utilizar e ainda qual a região que contém o verdadeiro ótimo, o programa seqüencial inicia-se com um delineamento fatorial 2^k (ou fração) exploratório para o qual é ajustada uma superfície de resposta de primeira ordem:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon \text{ (sem interação) ou}$$

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i < j}^k \sum_{i < j}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \text{ (com interação).}$$

Supõe-se, ainda, que o centro do primeiro experimento é realmente próximo do ponto de resposta máxima. O resultado do primeiro experimento pode indicar para o termos de “falta de ajuste”, que a superfície é curva, e pode sugerir que o centro é próximo de um máximo. Adicionando-se os $2^k + n_c$ combinações de tratamentos necessários para criar o DCC, o pesquisador aproveita o resultado do experimento realizado com o delineamento fatorial 2^k inicial e novamente quando for ajustar a superfície quadrática. Este procedimento requer a suposição de que o tempo não influencie (no sentido de que pode ocorrer considerável tempo entre o primeiro e o segundo experimento) de forma a mudar o nível da variável y . Segundo Montgomery (1991), quando o tempo tem influência, os delineamentos preferíveis são aqueles realizados em blocos incompletos.

Caso não se verifique a falta de ajuste, e não se conheça a região que contenha o ótimo, pode-se, desde que o erro experimental seja pequeno, usar o método “steepst ascent”, de forma a caminhar até a região que possua um indício de que ali há uma “curvatura”.

Myers (1971) descreve da seguinte forma este método:

1º passo: Realizar um experimento de primeira ordem com o fatorial 2^k ou fração e ajustar uma superfície de primeira ordem. Se for constatado que não há falta de ajuste, vá para o 2º passo;

2º passo: Neste passo pretende-se caminhar do centro do primeiro delineamento até a região que contém o verdadeiro ótimo. Para se obter a direção da região de interesse, parte-se do ponto central $((0, 0, \dots, 0)$, variável codificada), r unidades. Neste caso é necessário encontrar o valor (x_1, x_2, \dots, x_k) , também codificado,

que maximize $y = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \varepsilon$ sujeita a restrição $\sum_{i=1}^k x_i^2 = r^2$. Para isso foi utilizado

o Multiplicador de Lagrange, e através das derivadas parciais em relação x_j e μ igualadas a zero, obteve-se o valor $x_j = b_j/2\mu$ ($j = 1, 2, \dots, k$), onde μ é o Multiplicador de Lagrange e b_j é o coeficiente j -ésimo da equação de primeiro grau. O procedimento é mais fácil de aplicar, quando o pesquisador seleciona valores convenientes de μ . Mas, em lugar de determinar o valor de μ que corresponde a um r particular, estes autores sugerem, que é melhor selecionar valores que correspondam a um incremento particular, Δ_j , para uma das variáveis a ser escolhida, por exemplo X_j , incremento este que corresponderá ao acréscimo (ou diminuição) na resposta. Baseado neste incremento calcula-se a variável codificada:

$$x_j = \Delta_j / [(X_{jL} - X_{jH})/2].$$

A seguir calcula-se o valor de

$$\mu = b_j / 2x_j.$$

Tabela 1. Obtenção dos pontos que conduzirão à região que contém provavelmente o ótimo utilizando o Método "Steepest Ascent"

Base*	$X_1 = (X_{1L} - X_{1H})/2$	$X_2 = (X_{2L} - X_{2H})/2$...	$X_i = (X_{iL} - X_{iH})/2$...	$X_k = (X_{kL} - X_{kH})/2$
Δ	$(b_1/2 \cdot \mu) \cdot [(X_{1L} - X_{1H})/2]$	$(b_2/2 \cdot \mu) \cdot [(X_{2L} - X_{2H})/2]$...	Δ_j	...	$(b_k/2 \cdot \mu) \cdot [(X_{kL} - X_{kH})/2]$
ponto						
1	$X_1 + \Delta_1$	$X_2 + \Delta_2$...	$X_i + \Delta_j$...	$X_k + \Delta_k$
2	$X_1 + 2\Delta_1$	$X_2 + 2\Delta_2$...	$X_i + 2\Delta_j$...	$X_k + 2\Delta_k$
...
n	$X_1 + n\Delta_1$	$X_2 + n\Delta_2$...	$X_i + n\Delta_j$...	$X_k + n\Delta_k$

Nota.: *Nada mais é que o nível central, ou seja, o nível igual a zero quando as variáveis estão codificadas.

Calculados x_j e μ , os quais em conjunto fornecerão os incrementos Δ_j ($j \neq i = 1, 2, \dots, j-1, j+1, \dots, k$), que fornecerão a direção a ser tomada, até encontrar a região que provavelmente contém o verdadeiro ótimo. Calculados estes valores obtêm-se os pontos, como descrito na Tabela 1. A cada ponto (x_1, x_2, \dots, x_k) calculado desta forma,

será aplicado o experimento, obtendo-se assim, a resposta neste ponto. Desta forma esta-se aplicando o método “steepst ascent” propriamente dito.

Para-se em certo n, quando perceber que a resposta que tendia a crescer começa a diminuir (ver Figura 3 e Tabela 2) ou vice versa, pois é aí que está provavelmente a região que contém o ótimo procurado;

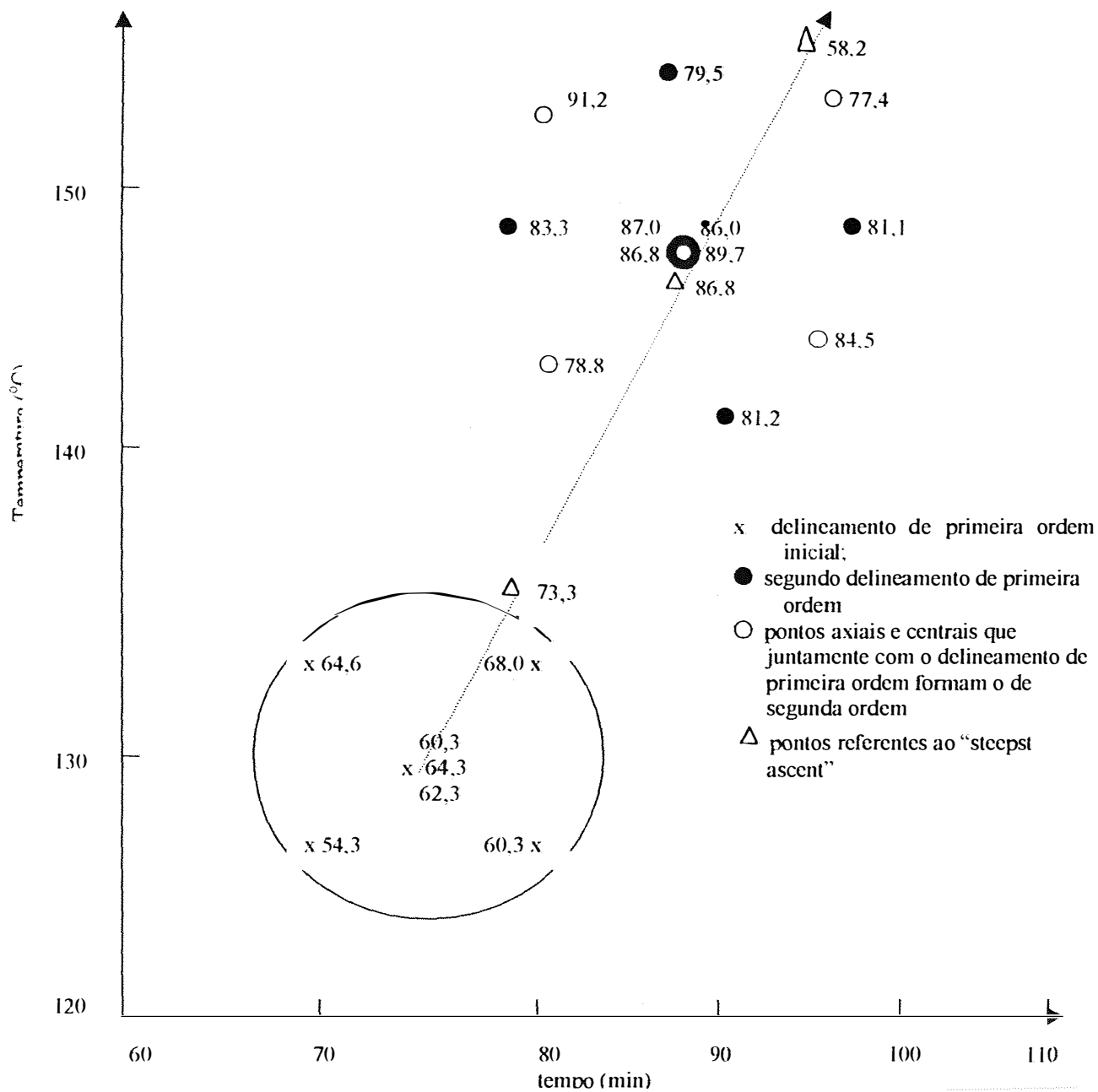


Figura 3 – Exemplo de aplicação em química do método de “steepst ascent”

3º Passo: Ajusta-se primeiro uma curva de primeiro grau. Constatando-se que há falta de ajuste, será interessante ajustar uma curva de maior grau, portanto, acrescentando os pontos axiais quando for de interesse o DCC e uma curva de segundo grau.

Tabela 2. Resultados da aplicação do experimento de primeira ordem inicial com três pontos centrais, exemplo em química

Tratamento*	Tempo (min)	temperatura (°C)	resposta (g)
1	70	127,5	54,3
2	80	127,5	60,3
3	70	132,5	64,6
4	80	132,5	68,0
5	75	130,0	60,3
6	75	130,0	64,3
7	75	130,0	62,3
Δ_1	5	4,8	
8	80	134,8	73,3
9	85	139,6	77,9
10	90	144,4	86,8
11	95	149,1	83,5
12	100	153,9	58,2

Nota: A ordem aleatória de aplicação do experimento é a seguinte: 5, 4, 2, 6, 1, 7, 3.

Fonte: Exemplo retirado de Box; Hunter e Hunter, p. 514-515.

Embora o DCC tenha origem na experimentação sequencial, ele é um delineamento muito eficiente em situações em que experimentos pedem superfície de resposta não sequencial. Com efeito, os três componentes que fazem este delineamento ter um papel importante e diferente são, segundo Montgomery e Myers (1995):

1. Os pontos fatoriais contribuem como meio principal da estimação dos termos lineares e das interações duplas. Se for usado, ao invés do fatorial 2^k completo, apenas fração deste, recomenda-se usar a de resolução V ou maior, pois, por definição, são delineamentos construídos de forma que os efeitos principais ou os efeitos das interações duplas não ficam confundidos com qualquer efeito principal ou com qualquer dos efeitos de interações duplas, embora as interações duplas

possam ser confundidas com as interações triplas. Também fornece a variância ótima para estes termos. Os pontos fatoriais são os únicos pontos que contribuem para estimação dos termos de interação

2. Os pontos axiais contribuem bastante para a estimação dos termos quadráticos. Sem os pontos axiais, somente as somas dos termos quadráticos $\sum_{i=1}^k \beta_{ii}$ podem ser estimadas. Os pontos axiais não contribuem na estimação dos termos de interação.
3. Os pontos centrais permitem a estimativa interna do erro (erro puro) e contribuem na estimação dos termos quadráticos. Por esses pontos passam eixos sobre os quais se apoiam os pontos axiais de coordenadas $+\alpha$ e $-\alpha$, simétricos em relação ao centro;

A área de flexibilidade no uso do DCC reside na seleção de α , a distância axial, e n_c , o número de pontos centrais. A escolha destes dois parâmetros pode ser muito importante. A escolha de α depende em grande parte da região de operacionalidade e de interesse. A escolha de n_c freqüentemente tem impacto na distribuição de $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ na região de interesse.

E segundo Conagin e Gomes (1987), nos delineamentos compostos centrais, o valor do parâmetro α e também o número de pontos centrais são importantes, pois em certos casos eles podem ser escolhidos de modo a:

- a) tornar ortogonais os estimadores dos coeficientes da equação de regressão, isto é, tornar independentes entre si duas estimativas;
- b) dar ao delineamento a propriedade de que a pontos equidistantes do centro correspondem estimadores de Y (variável independente) de mesma variância (delineamentos rotacionais);
- c) tornar o delineamento divisível em blocos.

Com relação ainda a α , Conagin (1987) diz que o mesmo pode ser escolhido de forma a minimizar o viés que é criado, se a verdadeira forma não for a utilizada (como por exemplo, quando se usa a forma quadrática quando deveria ser uma cúbica).

Quanto ao número de pontos centrais, dependendo de sua quantidade e fazendo-se uma distribuição conveniente, segundo Conagin (1982), é possível dividir o delineamento em dois, três ou mais blocos, ortogonalmente, sem perder as características de rotacionalidade, ortogonalidade, ou ambas.

Antes de comentar sobre os critérios de eficiência D e G, aplicados ao DCC, os mesmos serão a seguir definidos.

A otimização, segundo Montgomery e Myers(1995), é um conceito útil para comparação de delineamentos. E o critério de otimização D, em particular, segundo esses autores e Khuri e Cornell (1987), tem sido o mais usado, principalmente porque torna mais simples a sua aplicação em pacotes computacionais, pois o algoritmo deste critério foi desenvolvido para ser utilizado neste caso.

Os critérios de delineamento ótimo são caracterizados por letras do alfabeto e, como um resultado, são freqüentemente chamados de critérios de delineamentos ótimos.

O delineamento dito ótimo, segundo o critério D, é baseado na noção de que esse delineamento seria escolhido levando em conta a matriz de momentos:

$$M = (X'X)/N.$$

A importância dos elementos da matriz de momentos está na determinação da rotacionalidade de um delineamento e, também na inversa de M, a qual é dada por:

$$M^{-1} = N(X'X)^{-1},$$

chamada matriz de dispersão, pois ela contém as variâncias e covariâncias dos coeficientes de regressão, as quais estão multiplicados por N/σ^2 . E o determinante da matriz M é dado por:

$$|M| = (|X'X|)/N^p$$

onde p é o número de parâmetros no modelo. Sob a suposição de que o erro no modelo é normal e independente com variância constante, o determinante de $X'X$ é

inversamente proporcional ao quadrado do volume da região de confiança dos coeficientes de regressão. O volume da região de confiança é relevante porque reflete o quanto os coeficientes estão bem estimados. O determinante $|X'X|$ pequeno indica $|X'X|^{-1} = 1/|X'X|$ grande, o que pode significar uma estimação pobre para β , vetor dos parâmetro do modelo.

Um delineamento chamado D-ótimo é aquele no qual $|M|$ é maximizado, isto é,

$$\text{Max}_{\xi} |M(\xi)|$$

onde Max significa que o máximo é assumido sobre todo o delineamento. Como um resultado, é natural definir a eficiência de um delineamento ξ^* como

$$D_{\text{ef}} = (|M(\xi)| / \text{Max}_{\xi} |M(\xi)|)^{1/p}$$

Aqui, $1/p$ é o valor da força para os p parâmetros estimados a serem avaliados, quando se calcula o determinante da matriz de variância e covariância. Esta definição do critério de eficiência D , permite comparar delineamentos que têm diferentes tamanhos de amostras.

Quanto ao critério de eficiência G , já foi feita referência sobre o uso da escala de predição da variância $v(\mathbf{x}) = \text{NVar} [\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ com uma medida importante de performance do delineamento. Montgomery e Myers (1995), comentam que os pesquisadores não fazem uso desta medida como deveriam. Segundo eles, observa-se uma clara desvantagem, pois ao contrário do cálculo de $\text{tr}(M^{-1})$ ou $|M|$, $v(\mathbf{x})$ não é um número simples, porque ele depende da localização de \mathbf{x} , para o qual é uma predição, sendo isso o que torna esse critério interessante.

$v(\mathbf{x})$ é definida da seguinte forma:

$$v(\mathbf{x}) = \text{NVar} [\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2 = \mathbf{x}'^{(m)}(X'X)^{-1}\mathbf{x}^{(m)}$$

onde x^m reflete a localização do delineamento no espaço, bem como, a natureza do modelo.

Segundo esses autores, uma tentativa de se obter um delineamento apropriado é aquela em que se possa estabilizar $v(x) = N\text{Var} [\hat{y}(x)]/\sigma^2$. Para isso, estes autores indicam o critério de otimização G de delineamento como o mais interessante neste caso.

Ainda, segundo estes autores, tanto o critério de otimização G como o seu correspondente, o de eficiência G, enfatizam o uso de delineamentos para os quais o valor $v(x)$ máximo na região do delineamento não é muito grande.

Um delineamento G ótimo é aquele no qual se tem

$$\text{Min}_{\xi} [\text{Max}_{x \in R} v(x)]$$

que é equivalente a

$$\text{Min}_{\xi} [\text{Max}_{x \in R} \{x^{(m)} [M(\xi)]^{-1} x^m\}]$$

porque $N\text{Var} \hat{y}(x)/\sigma^2$ é apenas uma forma quadrática em $[M(\xi)]^{-1}$. E neste caso a seleção natural de regiões para R é a esfera ou o cubo. Sob a suposição de que o erro no modelo tem variância independente e homogênea tem-se que

$$\text{Max}_{x \in R} [v(x)] \geq p$$

e com isso a eficiência G é determinada por

$$G_{\text{ef}} = p / [\text{Max}_{x \in R} v(x)]$$

Contudo, devem-se ter em mente as dez ou mais propriedades para um delineamento experimental com o fim de se obter uma boa análise através da Metodologia de Superfície de Resposta. Montgomery e Myers (1995) sugerem que é necessário na prática, que os delineamentos possuam as várias propriedades importantes e não devem ser escolhidos apenas porque são ótimos, com respeito a um único critério, pois, segundo estes autores, o que se quer são bons delineamentos, que produzam resultados fidedignos sob uma ampla variedade de circunstâncias possíveis. Pois neste caso, vendo apenas os critérios de otimização e eficiência, os modelos de primeira ordem com ou sem interações são delineamentos padrões ótimos. Já no caso dos delineamentos de segunda ordem padrão com objetivo de análise de superfície de resposta, estes autores concordam, que eles são delineamentos raramente ótimos.

Ainda, Lucas²¹ e Conagin (1982c), usando-se para comparar delineamentos, o critério $|X'X|$ máximo, ou seja, o critério de eficiência D dos delineamentos compostos centrais tem-se que: a eficiência decresce à medida que cresce o número de fatores k . Para $k \geq 3$, o aumento dos pontos centrais diminui um pouco a eficiência média geral.

Conagin (1982c) diz que segundo recomendação de Davies (1954), para o delineamento composto central com fracionamento da parte fatorial, em metade ou quarta parte, deve-se escolher a interação ou interações que proporcionem o melhor confundimento

Observando-se a Tabela 2 nota-se que a eficiência é mais alta para os delineamentos centrais compostos com $n_c = 2$ pontos centrais. Embora se tenham esses resultados, de acordo com Conagin (3/1982) e Montgomery e Myers (1995) estes resultados não devem ser vistos como uma indicação de que não é vantajoso usar mais pontos centrais adicionais. Montgomery e Myers (1995) recomendam o uso de 3 a 5 pontos centrais, porque os mesmos influenciam a estabilidade $v(\mathbf{x}) = N\text{var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ e são “influentes” nos graus de liberdade do erro puro.

¹⁹LUCAS. id.

No caso em que o DCC tem apenas um ponto central observa-se falta de eficiência G. E no caso de $n_c = 0$ e a região de interesse sendo esférica, $X'X$ é singular ou aproximadamente singular. Logo, o uso de apenas um ponto central resulta em valores grandes de $v(\mathbf{x}) = \text{Nvar}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ no centro do delineamento. Portanto, segundo Montgomery e Myers (1995), adicionando-se pontos centrais no centro do delineamento os valores de $v(\mathbf{x})$ tendem à condição de estabilidade.

Observando os delineamentos na Tabela 2, quanto à eficiência pelos critérios D e G, o DCC e o delineamento Box-Behnken (BBD) são os mais eficientes

Agora no caso em que o DCC ($\alpha = 1,0$) é considerado, segundo Montgomery e Myers (1995) bastante eficiente em termos de eficiência D. No caso em que $k=3, 4$ e 5 , sem pontos centrais o critério de eficiência D é de 97%. Quando se adicionam pontos centrais, a eficiência diminui para 87%. Neste caso os pontos centrais reduzem a eficiência D e torna G muito pequeno.

Gomes e Conagin (1987) também falam sobre a eficiência, como um ponto importante a considerar na comparação de delineamentos apropriados ao uso de curvas ou superfícies de resposta. O método utilizado por eles é aquele utilizando a variância dos estimadores, em igualdade de condições.

A comparação entre delineamentos pode, ainda, ser feita tendo por base a eficiência na estimação dos coeficientes para determinada função de superfície de resposta, ou o vício dos coeficientes do modelo, na presença de termos de ordem mais elevada (Myers, 1971).

Tabela 2. Valores de eficiência D e G para alguns delineamentos de segunda ordem padrão para uma região esférica.

numero de fatores	N	Delineamento	Eficiência D(%)	Eficiência G(%)
2	9	DCC($n_c = 1$)	98,62	66,67
2	10	DCC($n_c = 2$)	99,64	96,00
2	11	DCC ($n_c = 3$)	96,91	87,27
3	15	DCC($n_c = 1$)	99,14	66,67
3	16	DCC($n_c = 2$)	99,61	94,59
3	17	DCC($n_c = 3$)	97,63	89,03
3	13	BBD($n_c = 1$)*	97,00	76,92
3	16	BBD($n_c = 2$)*	96,53	71,43
3	15	BBD($n_c = 3$)*	93,82	66,67
3	10	310**	72,80	47,40
3	11	311A**	79,10	78,60
3	11	311A**	83,10	90,90
4	25	DCC($n_c = 1$)	99,23	60,00
4	26	DCC($n_c = 2$)	99,92	98,90
4	27	DCC($n_c = 3$)	98,86	95,24
4	25	BBD ($n_c = 1$)*	99,23	60,00
4	26	BBD ($n_c = 2$)*	99,92	98,70
4	27	BBD ($n_c = 3$)*	98,86	95,24
4	16	416A**	81,70	88,00
4	17	416A ($n_c = 1$)**	90,60	74,30
4	16	416B**	96,70	63,10
4	17	416B($n_c = 1$)**	95,10	70,10
4	16	416C**	96,90	78,00
5	43	DCC($n_c = 1$)	98,60	48,84
5	44	DCC($n_c = 2$)	99,60	87,63
5	45	DCC($n_c = 3$)	99,28	85,56
5	27	DCC($1/2\text{frac}$)($n_c = 1$)	98,43	77,78
5	28	DCC($1/2\text{frac}$)($n_c = 2$)	98,10	87,64
5	29	DCC($1/2\text{frac}$)($n_c = 3$)	96,57	84,62
5	41	BBD ($n_c = 1$)*	97,93	51,22
5	42	BBD ($n_c = 2$)*	98,83	90,91
5	43	BBD ($n_c = 3$)*	98,41	88,79

Fonte: Montgomery e Myers (1995), pg. 372.

* Delineamento Box-Bhenken baseado na construção de delineamentos divididos em blocos incompletos balanceados.

** São delineamentos híbridos, os quais são criados a partir de um DCC para $k-1$ variáveis, e os níveis do k -ésima variável são de forma a dar uma certa simetria no delineamento. Eles formam uma classe de delineamentos econômicos e rotáveis (ou aproximadamente rotáveis) para $k=3,4,5,6$, e 7.

2.3. Tipos de DCC

2.3.1. DCC ortogonal

O DCC, usando-se a equação 2 e o modelo com as variáveis codificadas tem-se como $X'X$ a seguinte matriz, quando a parte fatorial for completa:

$$X'X = \begin{bmatrix} 2^t + 2k + n & 0 & \dots & 0 & 2^t + 2\alpha^2 & \dots & 2^t + 2\alpha^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2^t + 2\alpha^2 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 2^t + 2\alpha^2 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 2^t + 2\alpha^2 & 0 & \dots & 0 & 2^t + 2\alpha^2 & \dots & 2^t & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 2^t + 2\alpha^2 & 0 & \dots & 0 & 2^t & \dots & 2^t + 2\alpha^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 2^t & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 2^t \end{bmatrix}$$

Caso contrário, quando a parte fatorial for fracionada, usa-se o valor 2^{k-p} e não o valor 2^k .

Percebe-se que as colunas relativas aos termos quadráticos puros não são ortogonais entre si.

Embora em termos computacionais isso não seja problema hoje em dia, encontram-se na literatura, referências à constante $c = (F + 2\alpha^2)/N$ que é acrescida aos termos quadráticos, a qual representa o valor médio dos coeficientes quadráticos. Esta constante é chamada, por esses autores, de constante de correção (ver Conagin, 1982, Batista, 1976, Oliveira, 1974, etc.). A equação 2 fica representada da seguinte forma

$$y = b'_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k (b_{ii} x_i^2 - c) + \sum_{i < j}^k \sum_{i < j}^k b_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (3)$$

onde

$$b'_0 = b_0 + k[(F + 2\alpha^2)/N].$$

Seja a matriz X, a seguir, obtida através do modelo 2, usando-se um DCC qualquer

$$X = [\mathbf{1} \mid D \mid C_1 \ C_2 \ \dots \ C_k \mid C_{12} \ C_{13} \ \dots \ C_{(k-1)k}]$$

onde $\mathbf{1}$ é a coluna de uns, D é a matriz do delineamento, C_i são as colunas referentes aos termos quadráticos e C_{ij} ($i \neq j$) são as colunas referentes aos termos quadrados mistos.

Seja $C_i' = (1 - c, 1 - c, \dots, 1 - c, -c, \dots, \alpha^2 - c, \alpha^2 - c, \dots, -c, -c, \dots, -c)$, que multiplicado por $\mathbf{1}$ resulta no seguinte escalar:

$$\mathbf{1}'C_i = 2^k(1 - c) + 2(\alpha^2 - c) - (2k - 2)c - n_c c \tag{4}$$

Igualando-se a expressão 4 a zero e resolvendo a equação originada, tem-se:

$$2^k(1 - c) + 2(\alpha^2 - c) - (2k - 2)c - n_c c = 0$$

$$2^k + 2\alpha^2 = c(2^k + 2k + n_c)$$

$$F + 2\alpha^2 = cN$$

$$c = (F + 2\alpha^2)/N$$

Essa correção faz com que as k colunas dos termos quadráticos puros fiquem ortogonais a coluna de uns.

A nova matriz $X'X$ é dada por:

$$X'X = \begin{bmatrix} N & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2^k + 2\alpha^2 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 2^k + 2\alpha^2 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & A & B & \dots & B & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & B & A & \dots & B & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & B & B & \dots & B & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & B & B & \dots & A & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 2^k & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 2^k & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

onde N é o número de pontos do delineamento.

Logo os momentos do delineamento até ordem quatro serão dados por:

$$[i] = (1/N) \sum x_{iu}$$

$$[ii] = (1/N) \sum x_{iu}^2$$

$$[ij] = (1/N) \sum x_{iu} x_{ju}$$

$$[iii] = (1/N) \sum x_{iu}^3$$

$$[iijj] = (1/N) \sum x_{iu}^2 \sum x_{ju}^2$$

$$[iiii] = (1/N) \sum x_{iu}^4$$

e assim por diante.

onde $i, j = 1, 2, \dots, k$ e $u = 1, 2, \dots, N$.

Estes momentos caracterizam a forma na qual os pontos do delineamento estão distribuídos no espaço k -dimensional. De certo modo os momentos do delineamento ajudam a caracterizar a geometria do delineamento, a qual é muito importante. No caso do DCC, todos os momentos ímpares do delineamento até a ordem quatro são iguais a zero, isto é, $[i]$, $[ij]$, $[iij]$, $[iii]$, $[ijk]$, $[iijj]$, e $[iijk]$ são iguais a zero (para todo $i \neq j \neq k$). Os momentos ímpares sugerem simetria no delineamento.

A idéia de momentos do delineamento pode simplificar bastante a propriedade importante de ortogonalidade para os delineamentos de primeira ordem. Um delineamento de primeira ordem é dito ser ortogonal se $X'X$ é matriz diagonal. Isto é,

$$N^{-1}(XX) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & [11] & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & [22] & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & [kk] \end{bmatrix}$$

A matriz de momentos contém os momentos até a ordem dois, e o delineamento é ortogonal quando $[ij] = 0$ para todo $i \neq j$.

Por definição, um delineamento ortogonal é aquele cuja matriz $X'X$ (ou matriz de momentos) é diagonal. No caso de delineamentos de segunda ordem a matriz de momentos diagonal é impossível de ser obtida, porque os momentos $[ii]$ e $[iijj]$ (os quais representam somas dos valores referentes aos produtos das colunas 1 e x_i^2 e x_i^2 e x_j^2 , respectivamente) são necessariamente positivos.

No entanto, os delineamentos de segunda ordem podem ser obtidos se as variáveis do modelo da equação 2 forem expressos em termos de polinômios ortogonais (ver Box e Hunter, 1957):

Seja $P_m(x_{ui})$ um polinômio ortogonal de grau m ($m \geq 0$) relacionado à i -ésima variável x_i ($i = 1, 2, \dots, k$). Então,

$$P_m(x_{ui}) = x_{ui}^m + a_{m-1,m} x_{ui}^{m-1} + \dots + a_{1,m} x_{ui} + a_{0,m} \quad (5)$$

onde os valores de a são escolhidos de modo que:

$$\sum_{u=1}^N P_m(x_{ui}) P_{m-j}(x_{ui}) = 0 \quad \sum_{u=1}^N P_0(x_{ui}) = 1 \quad j = 1, 2, \dots, m$$

O modelo original de segunda ordem pode ser agora expresso em termos destes polinômios ortogonais com

$$Y = (XP)(P^{-1}B) + \varepsilon = X^*B^* + \varepsilon$$

onde P é a matriz não singular que transforma os termos x_{ui}^m na matriz $P_m(x_{ui})$, e $B^* = P^{-1}B$.

Usando as variáveis centradas tem-se

$$P_1(x_{ui}) = x_{ui}, \quad P_2(x_{ui}) = x_{ui}^2 + [iii] x_{ui} - 1, \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (6)$$

onde $x_{ui} = (X_{ui} - \bar{X}_i)/s_{Xi}$, $u = 1, 2, \dots, N$ e $i = 1, 2, \dots, k$.

E o modelo 3 pode ser reescrito como

$$Y_u = (b_0 + \Sigma b_{ii}) + \Sigma (b_i + [iii] b_{ii}) P_1(x_{iu}) + b_{ii} P_2(x_{iu}) + \Sigma \Sigma b_{ij} P_1(x_{iu}) P_2(x_{iu}) + \varepsilon_u \quad (7)$$

Desde que

$$\sum_{u=1}^N P_m(x_{ui}) = 0 \quad e \quad \sum_{u=1}^N P_1(x_{ui}) P_2(x_{ui}) = 0$$

para $m = 1, 2$, e $i = 1, 2, \dots, k$, então o momento da matriz $N^{-1} X'X$ é diagonal se

$$\begin{aligned} [ij] &= [ijj] = [iij] = 0 \text{ para } i < j \\ [iijj] &= 1 \text{ para } i < j \\ [iijn] &= [ijjn] = [ijn] = 0 \text{ para } i < j < n \\ [iijj] &= [ijjj] = 0 \text{ para } i < j \\ [ijns] &= [ijn] = 0 \text{ para } i < j < n < s \end{aligned} \quad (8)$$

Um DCC é ortogonal se o momento misto de ordem quatro, $[iijj]$, for igual à unidade. Usando as variáveis do delineamento em estudo obtém-se:

$$[iijj] = Fg^4/N = FN/(F + 2\alpha^2)^2 \quad (9)$$

onde $g = [N/(F + 2\alpha^2)]^{1/2}$.

E para que $[iijj] = 1$, então

$$(F + 2\alpha^2)^2 = FN. \quad (10)$$

Resolvendo a equação 10 para α tem-se que o DCC será ortogonal se a escolha do valor do ponto axial for igual a

$$\alpha = [((FN)^{1/2} - F)/2]^{1/2}. \quad (11)$$

Na Tabela 3, estão os valores de α que tornam o DCC, com $2^k + k + 1$ pontos, ortogonal:

Tabela 3 – Valores de α que tornam os DCCs ortogonais

k	α
2	1,0000
3	1,216
4	1,414
5	1,596

2.3.2. DCC rotacional

Para os modelos de segunda ordem, os momentos que influenciam a rotacionalidade são os momentos até a ordem quatro. As condições necessárias e suficientes para que o DCC torne-se rotacional são:

1. Todos os momentos ímpares até ordem quatro devem ser iguais a zero;
2. $[iiii]/[iijj] = 3 \quad (i \neq j)$

As condições acima não são simples, mas elas podem ser obtidas facilmente, quando se trata do DCC.

Esta propriedade é importante para os delineamentos de segunda ordem, por possuir uma distribuição razoavelmente estável de $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ ao longo da região do delineamento experimental. Deve ficar bem claro, que o pesquisador muitas vezes não conhece, no início da pesquisa, qual o espaço do delineamento, onde estaria o verdadeiro ótimo. Então, $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ razoavelmente estável dá a segurança que a qualidade de $\hat{y}(\mathbf{x})$ como uma predição dos valores resposta futura é a mesma em toda a região de

interesse. Com este fim, Box e Hunter (1957) desenvolveram a noção de delineamento rotacional:

“Um delineamento rotacional é aquele para o qual $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ tem o mesmo valor para quaisquer duas localizações que estão à mesma distância do centro do delineamento. Em outras palavras, $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ é constante na esfera.”

A razão da rotacionalidade é que para duas localizações no espaço de delineamento \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 para as quais a distância do centro do delineamento é a mesma (isto é, $(\mathbf{x}_1' \mathbf{x}_1)^{1/2} = (\mathbf{x}_2' \mathbf{x}_2)^{1/2}$), os valores preditos de $\hat{y}(\mathbf{x}_1)$ e $\hat{y}(\mathbf{x}_2)$ deverão ser igualmente bons, isto é, terem a mesma variância. A propriedade de rotacionalidade não assegura estabilidade ou mesmo a quase estabilidade em toda região do delineamento. Em muitos casos dá algumas diretrizes úteis para a escolha de parâmetros, que no caso do DCC, são a escolha de α e n_c . A importância da rotacionalidade como uma propriedade do delineamento, depende de muitos fatores, sendo dois deles referentes à região de interesse e da região na qual tem sentido executar um experimento (região de operabilidade).

É importante verificar que a rotacionalidade ou a quase rotacionalidade é freqüentemente muito fácil de se alcançar sem o sacrifício de outras propriedades importantes do delineamento.

As condições 1 e 2 são fáceis de serem obtidas para várias classes de delineamentos, e no caso do DCC basta fazer a escolha apropriada de α , a distância axial. A condição 1 estará assegurada se a porção fatorial for um fatorial 2^k completo ou uma fração do fatorial 2^k com resolução V ou maior. O equilíbrio entre + 1 e - 1 na colunas do fatorial e a ortogonalidade entre certas colunas na matriz X para o DCC resultaria em todos os momentos ímpares o valor zero. Para a condição 2 tem-se que buscar apenas um α para o qual

$$[\text{iiii}]/[\text{ijij}] = (F + 2\alpha^4)/F = 3. \quad (12)$$

Resolvendo a equação 12 tem-se como resultado

$$\alpha = (F)^{1/4} \quad (13)$$

onde, F é o número de pontos do fatorial ($F = 2^k$ se é um fatorial completo).

É importante notar que, a rotacionalidade é facilmente obtida usando-se α como na equação 13, o qual é independente do número de pontos centrais. A Tabela 4 dá os valores de α para um delineamento rotacional para diferentes números de variáveis do delineamento.

Tabela 4. Valores de α (ponto axial), que torna um DCC rotacional para diferentes números de variáveis (k)

k	F	N	α
2	4	$8 + n_c$	1,414
3	8	$14 + n_c$	1,682
4	16	$24 + n_c$	2,000
5	32	$42 + n_c$	2,378
5(1/2 fração)	16	$26 + n_c$	2,000
6	64	$76 + n_c$	2,828
5(1/2 fração)	32	$44 + n_c$	2,378
7	128	$8 + n_c$	3,364
5(1/2 fração)	64	$8 + n_c$	2,828

F é número de pontos da parte fatorial, n_c é número de pontos centrais e N é o total de pontos do delineamento

Fonte: Tabela dada por Montgomery e Myers (1995), pg. 310

Note que para $k=2$ e $k=4$ o DCC rotacional contém 8 e 24 pontos, respectivamente (independente do número de pontos centrais), os quais são equidistantes do centro do delineamento. Para $k=2, 3$ e 4 o DCC rotacional é exatamente, ou quase, um delineamento esférico; isto é, todos os pontos (exceto os pontos centrais) estão exatamente (ou aproximadamente no caso de $k=3$) a uma distância de $(k)^{1/2}$ do centro do delineamento.

A propriedade de rotacionalidade é uma tentativa de produzir uma certa “sensação”, segundo Montgomery e Myers (1995), de estabilidade de $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$. A “sensação” neste caso, claro, é que $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ seja constante na esfera. Contudo, segundo Montgomery e Myers (1995), a presença de um delineamento rotacional não implica em estabilidade em toda a região do delineamento. De fato, mostra-se que um delineamento esférico (todos os pontos num raio comum) usado para ajustar um modelo de segunda ordem tem $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ infinito, desde que o delineamento seja singular,

isto é, $(X'X)$ seja uma matriz singular [ver Box e Hunter (1957), Box e Draper (1985) e Myers (1976)]. O uso de pontos centrais permite uma estabilidade razoável de $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ na região do delineamento. Como um resultado disso, alguns pontos centrais para o DCC rotacional são muito benéficos. Por essa razão, o uso de DCC rotacional ou quase rotacional, com um número pequeno de pontos centrais, não é uma boa prática. Pode-se verificar isso através das Figuras 4 e 5, que mostram os contornos de $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ para o DCC com dois fatores e $\alpha = (2)^{1/2}$, com 1 e 5 pontos centrais, respectivamente. A predição da variância no centro do delineamento na Figura 4 é 3,5 vezes maior que na Figura 5. Com isso o DCC esférico, em que o número de pontos centrais é igual a 5 é preferível ao DCC esférico com n_c igual a unidade.

Montgomery e Myers (1995) recomendam que o delineamento esférico ou quase esférico requerem 3 a 5 pontos centrais para evitar um desequilíbrio severo no valor de $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ na região do delineamento. Esta idéia, segundo estes autores, pode ser estendida para um número de fatores (k) maior que dois.

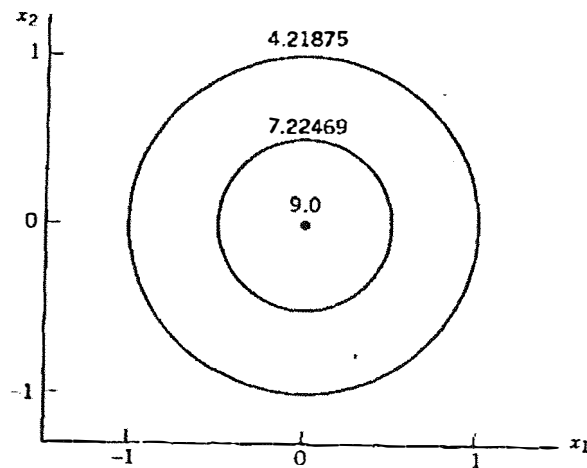


Figura 4 – $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ para um DCC ($k=2$ fatores) com $\alpha = (2)^{1/2}$ e um ponto central.

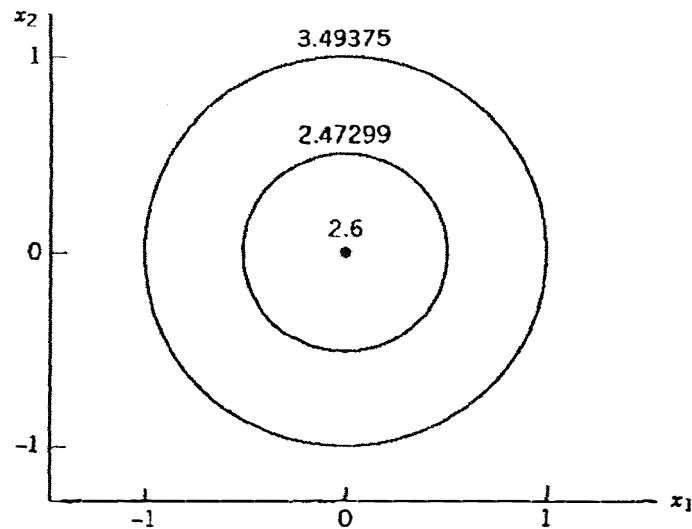


Figura 5 – $N\text{Var} [\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ para um DCC ($k=2$ fatores) com $\alpha = (2)^{1/2}$ e cinco pontos centrais.

Os DCC rotacionais têm um papel importante em estudos de superfície de resposta, tanto do ponto de vista histórico como operacional. Contudo, é importante para o analista entender que não é necessário ter rotacionalidade no delineamento de segunda ordem. De fato, se a região desejada do delineamento é esférica, o DCC é muito mais efetivo do ponto de vista da variância usando-se $\alpha = (k)^{1/2}$ e 3 até 5 pontos centrais que é quase rotacional. A recomendação, segundo Montgomery e Myers (1995), é baseada na estabilidade e tamanho de $N\text{Var} [\hat{y}(\mathbf{x})]/\sigma^2$ na região do delineamento esférico (Figura 4 e 5). Por exemplo, para $k=3$ e $\alpha = (3)^{1/2} = 1,732$ não produz um delineamento rotacional. Contudo, dizem que a perda de rotacionalidade é realmente insignificante, e o valor grande de α , comparado com o valor rotacional de $\alpha = 1,682$, resulta em um delineamento que é ligeiramente preferível. Box e Draper (1987), Khuri e Cornell (1987), Lucas (1976), Giovannitti-Jensen e Myers (1989), e Myers et al (1992b) comentam mais sobre o uso prático do DCC.

2.3.3. Delineamento Cubo de Faces Centradas (DCC com $\alpha = 1$)

Há muitas situações práticas na qual o cientista ou engenheiro especificam níveis nas variáveis do delineamento, pois as amplitudes são muito difíceis de serem modificadas. Isto é, a região de interesse e a região de operabilidade são a mesmas, e obviamente a região deste delineamento é um cubo, onde os pontos estrelas ou axiais, localizam-se nos centros das faces do cubo, e não de fora das faces como no caso da região esférica.

Como exemplo disso, seja o interesse em se estudar um organismo em Biologia (exemplo retirado de Montgomery e Myrers, 1995, p. 312). As variáveis do delineamento e suas amplitudes são porcentagem de glicose [2%, 4%], porcentagem de levedura [0,4 ; 0,6], e o tempo, em segundos, [30, 60]. Supor que o pesquisador tem interesse em construir um modelo de superfície de segunda ordem, com o objetivo de prever o crescimento do organismo. Mas por razões biológicas, o experimento não pode ser realizado fora de um cubo, e também, a experimentação nos extremos da região é permitida e desejável. Esta situação pode ocorrer em várias áreas científicas, e neste caso um DCC no qual os oito “cantos” do cubo são centrados e representados por $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ e os pontos não podem exceder a 1,0 e nem ser inferior a $-1,0$, seria interessante. O delineamento final é dado (na forma codificada) por

-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1
-1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	
1	0	0	0	0	1	0	0	1	
0	0	0							

onde o $(0, 0, 0)$ é um vetor de pontos centrais.

Este delineamento em que a região formada tem a forma de um cubo ou hipercubo é um delineamento de segunda ordem e é um DCC. Segundo esses autores, quando o pesquisador determina que a região em forma de cubo é a natural, é importante

que os pontos sejam “empurrados para o extremo” da região experimental. Isto resulta na mais atrativa distribuição de $N\text{Var}[\hat{y}(x)]/\sigma^2$. Isto é importante para a região a ser “coberta” de uma maneira simétrica.

O delineamento cubo de faces centradas é um delineamento útil para qualquer número de variáveis do delineamento. Novamente, uma fração de resolução cinco é usada para a porção fatorial. A recomendação para pontos centrais é bastante diferente do que para as regiões esféricas. Neste caso para os delineamento esféricos, os pontos centrais são uma necessidade para se alcançar uma distribuição razoável de $N\text{Var}[\hat{y}(x)]/\sigma^2$, com 3 a 5 pontos centrais dando bons resultados. No caso a região experimental é um cubo (isto é, com $\alpha = 1,0$), 1 ou 2 pontos centrais são suficientes para produzir uma estabilidade razoável de $N\text{Var}[\hat{y}(x)]/\sigma^2$. Embora tenha sido dito sobre o impacto dos pontos centrais na determinação de $N\text{Var}[\hat{y}(x)]/\sigma^2$, tanto para o delineamento cuja região experimental é um cubo ou hipercubo e aquele, em que a região experimental é uma esfera, segundo Montgomery e Myers (1995), é bom notar que os pontos centrais múltiplos e a repetição de pontos exteriores podem, em muitos casos, requerer substancial número de graus de liberdade para o erro puro.

Ainda, segundo estes autores, sobre o DCC, cuja região experimental é um cubo ou hipercubo, este só é apropriado quando a região de operabilidade também for um cubo ou hipercubo. Claramente, o problema pode sugerir níveis nos fatores que podem definir os cantos onde os pontos fatoriais deveriam residir. Então, a questão relativa à região do delineamento deveria depender de saber se os pontos axiais fora dos níveis pré-determinados são cientificamente permitidos e se deveriam ser incluídos na região de interesse. Por exemplo, no caso de um produto alimentício, níveis altos de farinha, gordura, e tempo de cozimento, são conhecidos por dar como resultado um produto inaceitável.

É importante, ao se planejar um experimento, entender que em muitas situações a região de interesse (ou talvez até a região de operabilidade) não é nenhum corte claro. É freqüentemente bastante difícil uma forma de compromisso de um cientista ou engenheiro sobre quais são as amplitudes interessantes ou permissíveis nos fatores. Segundo Montgomery e Myers (1995), enganos são freqüentemente cometidos e

retificações adotadas em experimentos futuros, portanto, “confusão quanto ao tipo de delineamento nunca deveria ser um desculpa para não usar deleitamentos experimentais”. Usar uma região esférica quando é mais natural uma cuboidal, por exemplo, ainda assim se teria importante informação que levaria a seleção mais adequada região para experiências futuras.

2.3.4. DCC rotacional e ortogonal ao mesmo tempo

Pode-se, se houver interesse, tornar o DCC ortogonal e rotacional ao mesmo tempo. Isto é possível com a escolha de α e n_c . Para fazer isto acontecer basta tomar $\alpha^4 = F$, que é a condição para tornar o DCC rotacional, e substituí-lo na equação 9:

$$(F + 2(F)^{1/2})^2 = F(F + 2k + n_c), \quad (14)$$

de onde se obtém,

$$n_c \approx 4 (F)^{1/2} + 4 - 2k, \quad (15)$$

sendo no lado direito da equação 15 de valor inteiro, em alguns casos. Por exemplo, se $k = 2$ e $F = 2^2 = 4$, então $n_c = 4 (4)^{1/2} + 4 - 2 \cdot 2 = 8$ é o número de pontos centrais que são necessários para o DCC rotacional ser ortogonal. O número de repetições do ponto central pode também ser escolhido de forma que o DCC seja rotacional e tenha a propriedade de precisão uniforme (ou quase uniforme).

Box e Hunter²², citados por Khuri e Cornell (1987), mostraram que para qualquer delineamento de segunda ordem rotacional a variância da resposta predita em

²⁰BOX, G.E.P; HUNTER, J. S. A conference Region for the Solution of a Set of Simultaneous Equations with na Application to Experimental Design. *Biometrika*, nº 41, p. 190-199, 1954.

qualquer ponto \mathbf{x} na região experimental é dada por

$$\text{Var} [\hat{f}(\mathbf{x})] = A \{ 2(k+2)\lambda_4^2 + 2\lambda_4(\lambda_4 - 1)(k+2)\rho^2 + [(k+1)\lambda_4 - (k-1)]\rho^4 \} \quad (16)$$

onde $\mathbf{x}' = (x_1, x_2, \dots, x_k)$, $\rho^2 = \mathbf{x}'\mathbf{x}$, $\lambda_4 = [iijj]$ e $A = \sigma^2 \{ 2N\lambda_4[(k+2)\lambda_4 - k] \}^{-1}$

Para o caso particular de delineamento rotacional ortogonal de segunda ordem, quando $[iijj] = \lambda_4 = 1$ a equação 16 torna-se

$$\text{Var} [\hat{f}(\mathbf{x})] = \sigma^2(k+2+\rho^4)/2N. \quad (17)$$

E no centro do delineamento, isto é, quando $\rho = 0$, a variância de $\hat{f}(\mathbf{x})$ calculada através da equação 16 é:

$$\text{Var} [\hat{f}(\mathbf{0})] = \sigma^2\lambda_4 \{ N[\lambda_4 - k/(k+2)] \}^{-1} \quad (18)$$

Da equação 18, nota-se que a $\text{Var} [\hat{f}(\mathbf{0})]$ é uma função decrescente para valores de $\lambda_4 > k/(k+2)$. Como λ_4 aproxima-se de ou excede a unidade, a precisão uniforme no centro do delineamento cresce. Neste caso, os vieses das estimativas dos parâmetros do modelo na presença de termos de terceira ordem (se ocorrer de a verdadeira resposta média ser um polinomial de terceiro grau) serão altos também.

Para N fixo e $\rho \neq 0$, a qualidade da precisão como medida do tamanho da função precisão $W(\rho) = \{ N \text{Var} [\hat{f}(\mathbf{x})] / \sigma^2 \}^{-1}$ depende, no caso do delineamento rotacional, dos valores de λ_4 . A precisão pode decrescer drasticamente quando se aproxima de zero. Como a precisão no centro do delineamento pode ser alta para valores grandes de λ_4 , grande também poderá ser a variação da precisão na vizinhança no centro do delineamento. Com o objetivo de manter a distribuição da precisão uniforme na vizinhança no centro do delineamento, deve-se, segundo Khuri e Cornell (1987), escolher o delineamento no qual o valor de $\text{Var} [\hat{f}(\mathbf{x})]$ para $\rho = 0$ é igual ao valor de $\rho = 1$. O delineamento de segunda ordem rotacional satisfazendo esta propriedade é chamado de delineamento de precisão uniforme. Esta propriedade faz com que um valor da predição da variância seja aproximadamente uniforme dentro de uma esfera de raio um. A

finalidade desta propriedade é fazer com que haja estabilidade na predição da variância na vizinhança do centro do delineamento.

Valores de λ_4 requeridos para um delineamento rotacional ter a propriedade de precisão uniforme é dada na Tabela 5:

Tabela 5. Valores de λ_4 que tornam a Variância de $\hat{f}(x)$, quando $\rho = 1$, igual também para $\rho = 0$ quando se trata de delineamento de segunda ordem rotacional.

K	2	3	4	5	6	7	8
λ_4	0,7844	0,8385	0,8704	0,8918	0,9070	0,9184	0,9274

Fonte: Khuri e Cornell (1987), pg. 111.

No caso do DCC, o momento de ordem mista $\lambda_4 = [ijjj]$ é igual a,

$$\lambda_4 = FN/(F + 2\alpha^2)^2. \quad (19)$$

Se substituir α^2 por $(F)^{1/2}$ na equação 19 e resolvê-la para determinar n_c , então é possível se determinar o número de pontos centrais que correspondem aos valores de λ_4 para um delineamento rotacional ter também precisão uniforme de acordo com a fórmula :

$$n_c \approx \lambda_4 [(F)^{1/2} + 2] - F - 2k \quad (20)$$

Por exemplo para $k = 3$ variáveis, $F = 2^3 = 8$ e $\lambda_4 = 0,8385$ da Tabela 5, tem-se que $n_c = 6$, número de pontos centrais necessários para produzir um DCC rotacional com precisão uniforme.

Usando-se as equações 15 e 20 e a Tabela 5, tem-se a Tabela 6 com os valores de n_c necessários para se obter um DCC rotacional com k variáveis de forma a serem aproximadamente ortogonais ou aproximadamente com a propriedade de precisão uniforme (PU). Nesta tabela também estão listados os valores correspondentes a F , N e n_a (número de pontos axiais):

Tabela 6. DCC rotacional ortogonal ou DCC de precisão uniforme

K	2	3	4	5	5(1/2)	6	6(1/2)	7	7(1/2)	8	8(1/2)
F	4	8	16	32	16	64	32	128	64	256	128
n_c	4	6	8	10	10	12	12	14	14	16	16
n_0 (ortog.) Eq. 13	8	9	12	17	10	24	15	35	22	52	33
n_0 (UP) Eq. 18	5	6	7	10	6	15	9	21	14	28	20
N(ortog.)	16	23	36	59	36	100	59	177	100	324	177
N(UP)	13	20	31	52	32	91	53	163	92	300	164

Fonte: Khuri e Cornell (1987), pg. 121.

Além dos critérios para a escolha de n_c adequado, que Khuri e Cornell (1987) forneceram, segundo eles Draper (1983) listou vários outros para escolha deste número no caso do DCC se tornar ortogonal e com precisão uniforme.

Ainda, segundo Khuri e Cornell (1987), se k é grande, a porção fatorial do DCC pode ser substituída por uma fração de um delineamento 2^k . Se a fração 2^{-m} de um delineamento fatorial 2^k é usada na porção fatorial, então $2^m + 1$ efeitos são sacrificados.

2.3.5. Divisão do DCC em blocos, ortogonalmente

Ao se empregarem delineamentos de segunda ordem para ajustar superfícies de resposta é necessário, muitas vezes, considerar a formação de blocos a fim de eliminar variáveis inconvenientes. Uma situação em que dividir um experimento em blocos pode ocorrer, é quando um delineamento de segunda ordem é executado seqüencialmente a partir de um de primeira ordem. Uma outra situação bastante freqüente, ocorre devido à limitações físicas, em que todos os pontos (tratamentos) requeridos pelo delineamento não podem ser usados sob condições homogêneas. Por exemplo, diferentes grupos de matéria prima podem ser usados num experimento, onde esses grupos são diferentes considerando a origem, composição e outras características. Ainda, há situações em que se usar o fatorial completo 2^k torna o delineamento muito grande para ser aplicado

com todos os tratamentos ao mesmo tempo. Sob tais circunstâncias o experimento pode ocorrer em grupos ou blocos, numa tentativa de se obter o delineamento completo. Portanto, supondo que se possa executar completamente os tratamentos com um total de b blocos de forma a ajustar um modelo de segunda ordem:

$$y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{ui} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_{ui}^2 + \sum_{i < j}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_{ui} x_{uj} + \sum_{l=1}^b \delta_l z_{ul} + \varepsilon_u, \quad (21)$$

$$u = 1, 2, \dots, N$$

onde δ_l é o efeito do l -ésimo bloco e

z_{ul} é uma variável “dummy”:

$z_{ul} = 1$ se o u -ésimo ensaio é executado no l -ésimo bloco, e

$z_{ul} = 0$ caso contrário.

Geralmente, os efeitos lineares e quadráticos (efeitos polinomiais) na equação 21 não são independentes dos efeitos de blocos. Seria desejável, neste caso, que os efeitos polinomiais fossem determinados independentemente dos efeitos de blocos. Para se atingir este objetivo, o delineamento de segunda ordem para ajustar a equação 21 deve ser escolhido apropriadamente.

Um delineamento que resulta nos estimadores de mínimos quadrados dos valores de β (vetor dos parâmetros associados aos efeitos polinomiais), na equação 21, os quais são independentes dos efeitos de bloco (δ_l), é dito delineamento em blocos ortogonais.

A equação 21 pode ser escrita como na forma abaixo com o objetivo de facilitar a procura de um delineamento adequado:

$$y_u = \beta_0' + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{ui} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_{ui}^2 + \sum_{i < j}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_{ui} x_{uj} + \sum_{l=1}^b \delta_l (z_{ul} - \bar{z}_l) + \varepsilon_u, \quad (22)$$

$$u = 1, 2, \dots, N$$

onde $\beta_0' = \beta_0 + \sum_{l=1}^b \delta_l \bar{z}_l$ e $\bar{z}_l = \sum_{u=1}^N z_{ul} / N$, $l = 1, 2, \dots, b$

As condições para que se obtenha um delineamento em blocos ortogonais são:

$$\sum_{u=1}^N x_{ui}(z_{ul} - \bar{z}_l) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k \text{ e } l = 1, 2, \dots, b \quad (23)$$

$$\sum_{u=1}^N x_{ui} x_{uj}(z_{ul} - \bar{z}_l) = 0, \quad i \neq j, \quad i \text{ e } j = 1, 2, \dots, k \quad (24)$$

$$\sum_{u=1}^N x_{ui}^2(z_{ul} - \bar{z}_l) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k \text{ e } l = 1, 2, \dots, b \quad (25)$$

Caso se queiram delineamentos com blocos ortogonais e também rotacionais, os momentos de primeira ordem e os mistos de segunda ordem devem ser iguais a zero.

$$\sum_{u=1}^N x_{ui} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (26)$$

$$\sum_{u=1}^N x_{ui} x_{uj} = 0, \quad i \neq j, \quad i \text{ e } j = 1, 2, \dots, k \quad (27)$$

Das condições 23 a 27, levando em conta a natureza da variável z , obtêm-se as seguintes condições sobre os x_{ui} dentro de cada bloco para que os mesmos sejam ortogonais:

$$\sum_{u(l)} x_{ui} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (28)$$

$$\sum_{u(l)} x_{ui} x_{uj} = 0, \quad i \neq j, \quad i \text{ e } j = 1, 2, \dots, k \quad (29)$$

$$\left(\sum_{u(l)} x_{ui}^2 / \sum_{u=1}^N x_{ui}^2 \right) = n_l/N, \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (30)$$

onde $\sum_{u(l)}$ é o somatório apenas para os valores de u dentro do bloco l e n_l é o número de tratamentos no l -ésimo bloco ($l = 1, 2, \dots, l$). Então, as condições para que se tenha a divisão do experimento em blocos ortogonais se baseiam nas equações 28 a 30.

1. As condições 28 e 29 implicam que as colunas associadas às variáveis x_1, x_2, \dots, x_k , são ortogonais e a soma dos valores de cada coluna dentro de cada bloco é igual a zero. Portanto, cada bloco deve consistir de delineamento de primeira ordem ortogonal.
2. A condição 30 implica que a fração do total da soma de quadrados para a variável x_i ($i = 1, 2, \dots, k$) em cada bloco deve ser igual a fração do total do número de ensaios pertencentes a este bloco.

A porção fatorial e a porção axial do delineamento formam cada uma, um delineamento de primeira ordem ortogonal. Estas duas porções tornam-se bases para a primeira divisão do DCC em dois blocos. O número de pontos centrais deverá ser determinados de forma a satisfazer a condição 30. A composição destes dois blocos pode ser descrita da seguinte forma:

Bloco 1. Uma porção fatorial consistindo de $F = 2^k$ ou 2^{k-m} pontos, onde m é um inteiro positivo, e a adição de n_{cF} pontos centrais;

Bloco 2. A porção axial consistindo de $2k$ pontos mais n_{cA} pontos centrais.

Da equação 30 o valor de α deve ser:

$$\alpha = [F(2k + n_{cA}) / (2(F + n_{cF}))]^{1/2} \quad (31)$$

Além disso, se o delineamento também exigir a propriedade de rotacionalidade, a qual pede a condição de que $\alpha = (F)^{1/4}$, tem-se da equação 31 a seguinte relação:

$$(F)^{1/2} = 2(F + n_{cF}) / (2k + n_{cA}), \quad (32)$$

ou equivalentemente, a seguinte relação:

$$2F - (F)^{1/2}(2k + n_{cA}) + 2n_{cF} = 0. \quad (33)$$

Observando a equação 33 nota-se que para alguns valores de k nem sempre é possível encontrar um DCC rotacional e com blocos ortogonais. Uma condição necessária para satisfazer a equação 33 é que:

$$(2k + n_{cA})^2 - 16n_{cF} \geq 0.$$

Mas, para o valores de k onde a equação 33 não é satisfeita, pode-se conseguir um DCC dividido em blocos ortogonalmente e que tenha rotacionalidade aproximada. Por exemplo, para $k = 3$, $F = 8$, $n_{cF} = 4$ e $n_{cA} = 2$, tem-se como valor de $\alpha = 1,633 \cong (8)^{1/4} = 1,68$, o qual torna o DCC aproximadamente rotacional.

Contudo, a subdivisão da porção axial em mais de um bloco, não é possível sem a violação de que cada bloco, deve ser formado de um delineamento ortogonal de primeira ordem. A porção fatorial, no entanto, pode ser subdividida em mais de um bloco, usando a replicação fracional como resultado de um delineamento fracional que é de resolução 3 ou resolução de grau maior, e o número de pontos centrais é o mesmo em todos os blocos de fatorial fracional. A última condição é necessária para que a condição 30 seja satisfeita.

No caso dos delineamentos esféricos, existem muitos delineamentos práticos. Uma lista de DCC rotacional e próxima de rotacional com o número de blocos e pontos centrais necessários para se ter os blocos ortogonais é dada na Tabela 7.

Em todos os casos nos quais há mais de um bloco para a porção fatorial, os contrastes definidos escolhidos para interações triplas ou mais altas estão confundidos com os blocos.

A divisão do delineamento em blocos ortogonais, neste caso, resulta na independência dos efeitos polinomiais dos efeitos de blocos na equação 22. As estimativas dos parâmetros β neste modelo podem então ser obtidas de maneira usual ignorando-se os efeitos de bloco, isto é, como se os valores de δ da equação 22 fossem zero. Em consequência, a soma de quadrados da regressão (SSR), para equação 22, consiste de $SSR(\beta)$, a soma de quadrados da regressão atribuídos aos efeitos polinomiais (os quais são

também obtidos de maneira usual ignorando os blocos), e SSB, a soma de quadrados devida aos efeitos blocos, dada pela fórmula 34.

$$SSB = \sum_{l=1}^b (B_l^2/n_l) / [(\sum_{u=1}^N y_u)^2/N] \quad (34)$$

onde B_l é o total para o l -ésimo bloco e n_l é o número de ensaios no l -ésimo bloco ($l = 1, 2, \dots, b$). A soma de quadrados do erro experimental puro é a soma de quadrados entre os pontos centrais num mesmo bloco, conjuntamente em todos os blocos.

Tabela 7 - Valor dos parâmetros para alguns delineamentos úteis subdivididos em blocos, ortogonalmente

K	2	3	4	5	5(1/2 fr)*	6	6(1/2 fr)*	7	7(1/2 fr)*
Porção fatorial									
F	4	8	16	32	16	64	32	128	64
nº de blocos da porção fatorial	1	2	2	4	1	8	2	16	8
nº de pontos por bloco	4	4	8	8	16	8	16	8	8
nº de pontos centrais em cada bloco da porção fatorial	3	2	2	2	2	1	4	1	1
Total de pontos em cada Bloco	7	6	10	10	22	9	20	9	9
Porção axial									
nº de pontos axiais	4	6	8	10	10	12	12	14	14
nº de pontos centrais	3	2	2	4	1	6	2	11	4
nº de pontos no bloco	7	8	10	14	11	18	14	25	18
total de pontos	14	20	30	54	33	90	54	169	90
Valor de α /bloco ortogonal	1,4142	1,6330	2,000	2,3664	2,000	2,8284	2,3664	3,3636	2,8384
Valor de $\alpha=(F)^{1/4}$ /Rotacionalidade	1,4242	1,6818	2,000	2,3784	2,000	2,8284	2,3784	3,3333	2,8284

Fonte: Montgomery e Myers (1995)

* 1/2 fr indica que se trata da meia fração da porção fatorial 2^k

A Tabela.8 dá o esquema de análise de variância do modelo de segunda ordem utilizando um DCC dividido em blocos.

Tabela 8 – Esquema de Análise de Variância para um modelo de segunda ordem ajustado através de um delineamento dividido em blocos, ortogonalmente

Causa de Variação	G.L.	Soma de Quadrados
Regressão	$(k^2 + 3k)/2$	SSR(β)
Blocos	b-1	SSB
Resíduo		
Falta de Ajuste	v_{fa}	SSFA
Erro Puro	v_{ep}	SSEP
Total	N-1	SST

Na Tabela 8, $v_{ep} = \sum_{l=1}^b (n_{cl} - 1)$ é o número de graus de liberdade do erro puro, sendo n_{cl} o número de pontos centrais no l-ésimo bloco; $v_{fa} = N = (k^2 + 3k)/2 - b - v_{ep}$ é o número de graus de liberdade para a falta de ajuste do modelo; SSEP é a soma de quadrados conjunta dos pontos centrais; e SSFA é obtido subtraindo-se SSEP do SSE, soma de quadrados do resíduo, onde $SSE = SST - SSR(\beta) - SSB$.

Montgomery e Myers (1995) recomendam ao se usar o DCC, que produz região na forma de cubo ou hipercubo, especial atenção. Os blocos para serem ortogonais num DCC ($\alpha = 1,0$) têm de ser desproporcionais, o que, segundo estes autores, é um problema. Por exemplo, seja um DCC ($\alpha = 1,0$) com $k = 2$ e seja o lado esquerdo da fórmula 30 reescrito da seguinte forma:

$$\left(\sum_{u(l)} x_{ui}^2 / \sum_{u=1}^N x_{ui}^2 \right) = (2k + n_{cA}) / (F + n_{cF}) = 2\alpha^2 = F \quad (35)$$

Este DCC pode ser dividido em dois blocos da seguinte forma:

$$D = \begin{array}{cc|l} \begin{array}{c} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \text{Bloco 1} \\ \hline \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{array} & \text{Bloco 2} \end{array}$$

Na parte fatorial foram acrescentados quatro pontos centrais de forma a satisfazer a equação 35:

$$(2 \cdot 2 + 0)/(2^2 + 4) = (2 \cdot 1^2)/(2^2)$$

$$4/8 = 2/4$$

Já para $k = 3$ variáveis e um DCC, cuja região formada é um cubo, se houver a necessidade da divisão do experimento em três blocos, os dois blocos com as porções fatoriais fracionadas necessitam de oito pontos centrais cada um, totalizando 16 pontos centrais, de forma a satisfazer a equação 35:

$$(2 \cdot 3)/(2^3 + 16) = (2 \cdot 1^2)/(2^3)$$

$$6/24 = 2/8$$

E essa quantidade de pontos centrais torna o delineamento grande, pois a quantidade de tratamentos é igual a 24. Sendo por isso, segundo esses autores, interessante, embora o experimento sugira uma região em forma de cubo, considerar-se um delineamento esférico com a finalidade de melhor acomodar os blocos, pois para $k = 3$, e um DCC esférico ($\alpha = 3^{1/2}$), dividido em três blocos, tem-se um total de 20 pontos (ver Tabela 7).

3. MATERIAL E MÉTODOS

Como o objetivo deste trabalho é a busca dos níveis ótimos para uma determinada produção ou pesquisa, será feito um estudo do comportamento do DCC em relação ao modelo de segunda ordem para $k = 3$, descrito a seguir, com referência aos pontos extremos (de máximo, de sela e de mínimo) sob níveis de variabilidade experimental. Seja

$$Y_u = \beta_0 + \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_3 X_{3u} + \beta_{11} X_{1u}^2 + \beta_{22} X_{2u}^2 + \beta_{33} X_{3u}^2 + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + \beta_{13} X_{1u} X_{3u} + \beta_{23} X_{2u} X_{3u} + \varepsilon_u \quad (1)$$

onde X_{1u} , X_{2u} e X_{3u} são as variáveis referentes aos fatores;

β_0 (ponto de interseção),

$\beta_1, \beta_2, \beta_3$ (referentes aos efeitos lineares).

$\beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}$ (referentes aos efeitos quadráticos),

$\beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{23}$ (referentes aos efeitos de interações duplas),

são os coeficientes de regressão obtidos pelo método de mínimos quadrados;

e

ε_u ($u = 1, \dots, 15$) é o erro experimental correspondente a Y_u , com distribuição $N(0, \sigma^2)$ e são não correlacionados.

Para isso, serão utilizados os seguintes DCCs, cada um com um ponto central:

- DCC com $\alpha = 1$;
- DCC ortogonal com $\alpha = 1,216$;
- DCC rotacional com $\alpha = 1,682$.

A simulação, de cada um dos experimentos, será feita utilizando um programa do SAS, o qual usa a função RANNOR, na geração dos efeitos aleatórios ε_u ($u = 1, \dots, 15$), obtendo-se, desta forma, os valores de Y_u com distribuição normal, com

$$E(Y_u) = \beta_0 + \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_3 X_{3u} + \beta_{11} X_{1u}^2 + \beta_{22} X_{2u}^2 + \beta_{33} X_{3u}^2 + \\ + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + \beta_{13} X_{1u} X_{3u} + \beta_{23} X_{2u} X_{3u}$$

e

$$V(Y_u) = \sigma^2$$

A função RANNOR produz valores de uma variável aleatória, normalmente distribuída com média zero e variância igual a um, usando a transformação de Box & Muller (1958):

$$X_i = [-2 \ln(U_i)]^{1/2} \text{sen}(2\pi U_j)$$

$$X_j = [-2 \ln(U_i)]^{1/2} \text{sen}(2\pi U_j)$$

onde U_i e U_j são variáveis aleatórias independentes e uniformemente distribuídas no intervalo (0,1) e o par (X_i, X_j) é um par de variáveis aleatórias com mesma distribuição normal, com média zero e variância igual a zero.

Na simulação de dados serão considerados os coeficientes de variação de 3%; 6%; 10%; 15% e 21%, de forma a abranger as áreas já citadas anteriormente. Para cada um desses coeficientes de variação serão gerados experimentos utilizando os três delineamentos já mencionados.

Para cada combinação coeficiente de variação e tipo de delineamento serão gerados cem experimentos, totalizando desta forma, para cada coeficiente de variação, 300 experimentos. Portanto, serão gerados um total de 1500 experimentos.

Utilizando a função RANNOR em conjunto com o comando DO, serão utilizadas “sementes” com cinco Algarismos (sorteada com reposição), que em função do coeficiente de variação e média fixados gerará quinze erros aleatórios ε_u , os quais serão diminuídos dos Y 's obtidos a partir da curva escolhida e do delineamento fixado (em consequência os X_i 's serão fixos dependendo apenas do delineamento).

Para o modelo em estudo serão adotados os seguintes coeficientes paramétricos referentes aos efeitos lineares, quadráticos e das interações:

Efeitos	X_1	X_2	X_3
Linear	200	220	180
Quadrático	-160	-180	-170

Em relação a X_1X_2 , X_1X_3 e X_2X_3 , os coeficientes paramétricos serão, respectivamente, - 51, - 40 e - 44. Coeficientes estes que dão origem a um elipsóide.

Nesta simulação de dados, será utilizado o valor 4000 como média do experimento.

Usando os resultados desta simulação, serão calculadas as porcentagens de pontos críticos que estavam dentro ou fora do campo pesquisado e os tipos de pontos críticos. Serão ainda calculadas as porcentagens de respostas significativas de cada componente do modelo, nas combinações delineamento com coeficiente de variação.

A análise de superfície de resposta (RS) será feita utilizando o método de análise canônica descrito a seguir, através de programa realizado no SAS que utiliza o comando PROC RSREG (ver programa no Apêndice I).

Seja o modelo de superfície de resposta dado pela equação 1 e considere este modelo ajustado conforme notação matricial:

$$\hat{y} = b_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x} \quad (2)$$

onde b_0 , é o coeficiente do intercepto;

$$\mathbf{x}' = [x_1, x_2, x_3],$$

$$\mathbf{b} = [b_1, b_2, b_3]$$

e

\mathbf{B} é a matriz $k \times k$ simétrica:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12}/2 & b_{13}/2 \\ & b_{22} & b_{23}/2 \\ & & b_{33} \end{bmatrix}.$$

O cálculo do ponto estacionário é feito derivando-se a função 2 em relação a x_1 , x_2 e x_3 e igualando-se as derivadas parciais, dada em 3, a zero:

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b} + 2\mathbf{B}\mathbf{x} . \quad (3)$$

Obtém-se como solução:

$$\mathbf{x}_s = -\mathbf{B}^{-1} \mathbf{b}/2 \quad (4)$$

vetor que leva ao ponto estacionário.

A natureza do ponto estacionário será determinada pelos sinais do autovalores da matriz \mathbf{B} . Além disso, a magnitude deste autovalores pode ser útil na interpretação do ponto estacionário (\mathbf{x}_s) e da curva estimados. Por exemplo, seja a matriz \mathbf{P} , a matriz que contem as colunas normalizadas do autovetores associados com os autovalores de \mathbf{B} . Sabe-se que:

$$\mathbf{P}'\mathbf{B}\mathbf{P} = \Lambda$$

onde Λ é a matriz que contem os autovalores de \mathbf{B} como principais elementos da diagonal. Agora se for feita uma translação do modelo da equação 1 para um novo centro, isto é, para o ponto estacionário, e fazer a rotação dos eixos correspondentes aos principais eixos do sistema de contorno, tem-se como novas variáveis:

$$\begin{aligned} \mathbf{z} &= \mathbf{x} - \mathbf{x}_s \\ \mathbf{w} &= \mathbf{P}'\mathbf{z}. \end{aligned} \quad (5)$$

Reescrevendo a equação 2 usando a primeira variável de 5, isto é, fazendo a translação, obtém-se a equação:

$$\begin{aligned} \hat{y} &= \mathbf{b}_0 + (\mathbf{z} + \mathbf{x}_s)' \mathbf{b} + (\mathbf{z} + \mathbf{x}_s)' \mathbf{B}(\mathbf{z} + \mathbf{x}_s) \\ &= [\mathbf{b}_0 + \mathbf{x}_s' \mathbf{b} + \mathbf{x}_s' \mathbf{B} \mathbf{x}_s] + \mathbf{z}' \mathbf{b} + \mathbf{z}' \mathbf{B} \mathbf{z} + 2\mathbf{x}_s' \mathbf{B} \mathbf{z} \\ &= \hat{y}_s + \mathbf{z}' \mathbf{B} \mathbf{z} \end{aligned}$$

porque da equação 4 tem-se que $2\mathbf{x}_s'\mathbf{B}\mathbf{z} = -\mathbf{z}'\mathbf{b}$. E fazendo-se a rotação, tem-se a equação a seguir:

$$\begin{aligned}\hat{y} &= \hat{y}_s + \mathbf{w}'\mathbf{P}'\mathbf{B}\mathbf{P}\mathbf{w} \\ &= \hat{y}_s + \mathbf{w}'\Lambda\mathbf{w}\end{aligned}\tag{6}$$

Os eixos relativos à variável \mathbf{w} são os principais eixos. E a equação 6 pode ser escrita como a seguir:

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2\tag{7}$$

onde \hat{y}_s é a estimativa da resposta do ponto estacionário e λ_1 , λ_2 e λ_3 são os autovalores de \mathbf{B} .

A equação 7 descreve a natureza do ponto estacionário e a natureza do sistema em torno do ponto estacionário. Os sinais dos λ 's determinam a natureza de \mathbf{x}_s , e a magnitude relativa dos autovalores ajudam o pesquisador a entender melhor o sistema de resposta:

1. Se λ_1 , λ_2 e λ_3 são todos negativos, o ponto estacionário é ponto de resposta máxima;
2. Se λ_1 , λ_2 e λ_3 são todos positivos, o ponto estacionário é ponto de resposta mínima;
3. Se λ_1 , λ_2 e λ_3 diferem quanto aos sinais, o ponto estacionário é um ponto de sela.

Como exemplo para o caso 3, sejam tomadas duas variáveis, em que $\lambda_1 < 0$ e $\lambda_2 > 0$. Quando um ponto se move sobre o eixo w_1 partindo do ponto estacionário, para qualquer direção sobre esse eixo, observa-se uma diminuição na estimativa da resposta, e sobre o eixo w_2 , observa-se o contrário. Este tipo de ocorrência pode implicar a existência de um sistema contendo dois picos, onde há dois máximos ocorrendo em duas regiões. Portanto, no caso de ocorrer um ponto estacionário de sela deve-se buscar outras formas alternativas de análise.

A análise dos pontos estacionários, como foi descrita, é chamada, por Montgomery e Myers (1995) e Myers (1971), de Análise Canônica.

Quando um dos $|\lambda_i|$ é muito próximo de zero, podem ocorrer duas situações: na primeira, o ponto estacionário estimado \mathbf{x}_s pode estar muito próximo, ou até mesmo dentro da região experimental, e na segunda situação, ele pode estar longe da região experimental.

O primeiro caso, tomando como exemplo, duas variáveis e λ_1 e λ_2 negativos, mas $|\lambda_2|$ sendo muito maior que $|\lambda_1|$. Tem-se aqui que o ponto estacionário é de máximo. Porém, uma característica importante neste sistema é a diferença de sensibilidade da resposta com respeito às duas variáveis w_1 e w_2 . A medida que se move do ponto estacionário para qualquer direção ao longo do eixo w_1 , observam-se pequenas mudanças na resposta estimada, comparado com o que ocorre se fosse sobre o eixo w_2 , onde as respostas decrescem mais rapidamente. Em outras palavras, os contornos de respostas, são alongados em relação ao eixo w_1 , como pode ser visto na Figura 1.

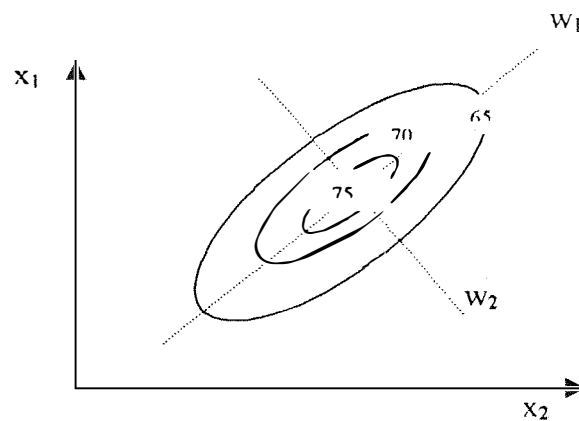


Figura 1 – Superfícies de respostas quadrática com λ_1 e λ_2 maiores que zero e λ_1 muito menor que λ_2 .

Esta situação pode ocorrer tanto para ponto de mínimo como de sela. Na prática, se um dos λ 's é muito pequeno, então o sistema se aproxima de um cume estacionário (“stationary ridge”)

O extremo desta situação é mostrado na Figura 2 em que um dos $|\lambda_i|$ é igual a zero.

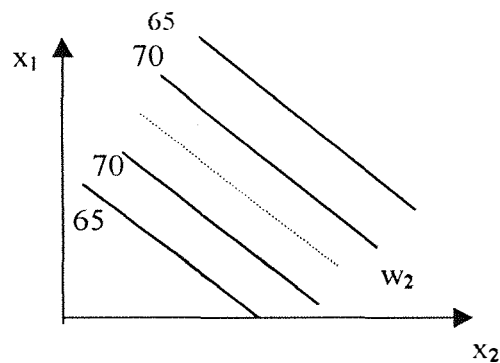


Figura 2 – Sistema de cume estacionário (“stationary ridge”) em uma superfície ajustada, onde $\lambda_1 < 0$ e $\lambda_2 = 0$.

Para Myers (1971), embora seja improvável que uma condição de cume estacionário (“stationary ridge”) exato ocorra na prática, as implicações da ocorrência aproximada deste tipo de condição são muito importante. Por exemplo, se o ponto estacionário encontrado é de máximo, e λ_1 é próximo de zero, então na prática para o máximo, o ponto estacionário obtido não é o único, isto é, o pesquisador tem a sua disposição um intervalo de condições possíveis ao longo do eixo w_1 , todas as quais dão respostas ótimas aproximadas. Situação similar pode ocorrer quando se ajustam funções quadráticas para três ou mais variáveis.

Até agora considerou-se a situação onde as magnitudes dos λ 's são bastante diferentes e o ponto estacionário estimado é na vizinhança ou na própria região experimental.

O segundo caso é quando o ponto estacionário estimado está bem longe da vizinhança da região experimental. Seja por exemplo, para $k = 2$ variáveis, com $\lambda_1 < 0$ e λ_2 próximo de zero e o ponto estacionário estimado não está na vizinhança da região experimental. A condição aproximada que descreve este sistema é chamado de cume ascendente (“resing ridge”). E no caso em que $\lambda_1 > 0$ e λ_1 e λ_2 são próximos de zero tem-se o cume cadente (“falling ridge”). O extremo ocorre quando $\lambda_1 < 0$ e λ_2 é igual a zero, por exemplo. Neste caso o ponto estacionário estará no infinito e esta condição chama-se cume ascendente exato (como mostrado na Figura 3). Segundo, Myers (1971), o extremo dificilmente ocorre na prática.

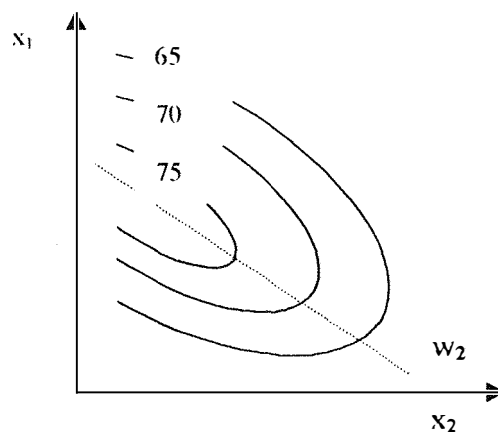


Figura 3 – Superfície de resposta quadrática no caso em que ocorre situação de cume ascendente (“rising ridge”)

Na Figura 3, os eixos w_1 e w_2 interceptam-se no infinito, representando o extremo de uma situação onde \mathbf{x}_s está bastante distante da região do delineamento. Segundo Myers (1971), para um pesquisador experiente seria uma prática muito pobre tirar alguma conclusão a partir deste resultado obtido, por ele estar muito longe da região experimental. Isso se deve, porque, muitas vezes para o pesquisador, a resposta y_s obtida é irreal. Por exemplo, a obtenção de um rendimento excedendo a 100% é completamente absurdo.

Mas apesar disto, uma inferência pode ser feita sobre a região experimental. Por exemplo, no caso da Figura 3, há um crescimento da resposta que seria certamente esperada ao longo do eixo w_2 na direção onde estaria o ponto estacionário. Segundo, Myers (1971), isto dá a indicação quanto a possível localização para futuras observações com o objetivo de buscar o máximo. E a equação 5, relativa as variáveis w 's, pode ser usada para se obter uma localização de uma região experimental através da escolha adequada dos níveis dos fatores.

A interpretação de condições onde aparece o cume estacionário ascendente ou cadente vale para k maior que duas variáveis. Agora, em relação ao ponto estacionário estimado, nenhuma inferência pode ser feita na vizinhança deste.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na simulação, admitiu-se 4000 como valor médio do experimento e fez-se variar a precisão experimental, considerando-se coeficientes de variação populacional de 3, 6, 10, 15 e 21%.

Foram simulados, para cada tipo de delineamento, 100 experimentos por coeficiente de variação populacional, totalizando 500 experimentos por delineamento. Portanto, um total de 1500 experimentos.

Esses experimentos foram divididos em intervalos de coeficiente do experimento por delineamento em [0%;3%], (3%;6%], (6%;10%], (10%;15%], (15%;21%] e maior que 21%. Também foi feita a análise usando os seguintes intervalos de coeficiente do experimento: [0%;4%), [4%;7%), [7%;11%), [11%;16%), [16%;22%) e maior ou igual a 22%.

As tabelas e os gráficos foram construídos usando-se o Excel 7.0 e o pacote “Statistica”. O cálculo dos testes estatísticos foram feitos usando-se o SAS.

Os testes de qui-quadrado foram realizados cruzando os dados de frequência observada em cada um dos delineamentos dentro de cada intervalo de coeficiente experimental: de ponto de máximo total com a de pontos que não são de máximo; de ponto de máximo dentro dos níveis -1 e 1 com a de pontos que estão fora; do total de pontos críticos dentro dos níveis -1 e 1 com a de pontos que estão fora e do total de regressões que foram significativas com as que não foram significativas, como mostrado no esquema a seguir:

Delineamento	Freq. de A	Freq. de B
DCC Rotacional		
DCC Ortogonal		
DCC com $\alpha=1$ (Cub.)		

Nota: A refere-se, por exemplo, ponto de máximo total e B refere-se aos pontos que não são de máximo

O teste para verificar se há diferença entre duas proporções foi o teste de significância, como dado a seguir:

$$z_c = (p_1 - p_2) / [p(1-p)(1/n_1 + 1/n_2)]^{1/2}$$

onde p_1 e p_2 são as proporções dos dois conjuntos de dados a serem testados;

n_1 e n_2 o tamanho das amostras dos dois conjuntos de dados a serem testados

p a proporção amostral combinada:

$$p = (p_1 n_1 + p_2 n_2) / (n_1 + n_2)$$

As hipóteses a serem estudadas são:

H_0 : as duas proporções são iguais.

H_1 : $p_1 < p_2$ ou $p_1 > p_2$.

Tomando o coeficiente de variação igual a zero para os três delineamentos foram obtidos os seguintes resultados através do método de análise canônica de superfície de resposta: ponto estacionário de máximo: $\mathbf{x}'_s = (0,496; 0,491; 0,408)$ e a resposta estacionária $y_s = 4140,274$, para os três delineamentos.

As tabelas 1 a 6 mostram as porcentagens de pontos estacionários (de máximo, de mínimo e de sela) dentro de cada intervalo de coeficiente experimental, e também dentro dos níveis $(-1, 1)$, $[-1,618; 1,618]$ e fora desses níveis. Mostra também a porcentagem de experimentos em que a regressão foi significativa dentro de cada intervalo de coeficiente experimental..

Observando as tabelas de 1 a 6, nota-se que a medida que o coeficiente experimental aumenta, o número de experimentos em que a regressão foi significativa e o número de pontos de máximo diminuem. Por outro lado, aumentam os pontos de mínimo e de sela.

Tabela 1. Quantidade de experimentos por intervalo de coeficiente experimental do DCC

Rotacional com $\alpha = 1,682$

Intervalos de coef. exper. (%)	Quantidade de experimentos simulados dentro de cada intervalo (%)							
	[0;3]	(3;6]	(6;10]	(10;15]	(15;21]	>21	>15	
Pto de máximo	94	89	72	54	44	35	39	
Pto de sela	6	10	26	42	48	59	54	
s--*	4	6	17	29	32	40	36	
s- **	2	4	9	13	16	19	18	
Pto de mínimo		1	2	4	8	6	7	
(-1;1)***	Total	82	75	48	45	50	51	51
	máximo	82	72	38	34	29	25	27
	sela		3	8	10	16	22	19
	mínimo			2	1	5	4	5
[-1,618;1,618]***	Total	10	16	24	18	14	22	18
	máximo	8	12	21	6	4	5	4
	sela	2	4	3	12	7	16	12
	mínimo					3	1	2
Fora****	Total	8	9	29	38	36	27	31
	máximo	3	5	14	14	11	5	8
	sela	3	4	15	21	25	21	22
	mínimo	2			2		1	1
Reg. sign.	Total	100	95	44	9	4		2
	máximo	94	85	29	7	3		1
	sela	6	9	13	2	1		1
	mínimo		1	2				

Nota: * s--: ponto de sela em que dois dos autovalores são negativos;

** s- : ponto de sela em que apenas um dos autovalores é negativo.

*** nível mínimo e máximo por fator;

**** fora dos níveis [-1,618; 1,618].

Com relação aos experimentos simulados com o DCC rotacional, no intervalo de coeficiente experimental (10;11)%, ocorreu apenas um ponto em que um dos autovalores estava próximo de zero ($w_1 = 0,97$); tem-se neste caso uma situação de “rising ridge”.

Tabela 2. Quantidade de experimentos por intervalo de coeficiente experimental do DCC Rotacional com $\alpha = 1,682$

Intervalos de coef. exper. (%)		Quantidade de experimentos simulados dentro de cada intervalo (%)						
		[0;4)	[4;7)	[7;11)	[11;16)	[16;22)	≥ 22	≥ 16
Pto de máximo		94	81	71	53	44	31	37
Pto de sela		6	17	27	43	49	61	56
s--*		4	12	18	30	32	41	37
s- **		2	5	9	13	17	20	19
Pto de mínimo			2		4	7	7	7
(-1;1)***	Total	86	65	45	43	48	53	50
	Máximo	85	59	37	30	29	23	26
	Sela	1	5	7	10	15	26	20
	Mínimo		1	1	3	4	4	4
[-1,618;1,618]***	Total	8	18	26	14	22	19	20
	Máximo	6	14	21	5	6	5	5
	Sela	2	4	5	9	13	13	13
	Mínimo					3	1	2
Fora****	Total	6	17	29	43	30	28	30
	Máximo	3	8	13	17	9	4	7
	Sela	3	8	15	25	21	23	22
	Mínimo		1	1	1		1	1
Reg. sign.	Total	100	84	31	6	4		2
	Máximo	94	68	22	5	3		1
	Sela	6	14	8	1	1		1
	Mínimo		2	1				

Nota: * s--: ponto de sela em que dois dos autovalores são negativos;

** s- : ponto de sela em que apenas um dos autovalores é negativo.

*** nível mínimo e máximo por fator;

**** fora dos níveis [-1,618; 1,618].

Tabela 3. Quantidade de experimentos por intervalo de coeficiente experimental do DCC Ortogonal com $\alpha = 1,216$

		Quantidade de experimentos simulados dentro de cada intervalo (%)						
Intervalos de coef. exper. (%)		[0;3]	(3;6]	(6;10]	(10;15]	(15;21]	>21	>15
Pto de máximo		96	78	51	37	24	14	19
Pto de sela		4	22	49	63	75	86	80
s--*		4	22	40	46	53	65	58
s- **				9	17	22	21	22
Pto de mínimo						1		1
(-1;1)***	Total	69	56	47	37	33	49	40
	Máximo	69	50	32	18	13	8	10
	sela		6	15	19	20	41	30
	mínimo							
[-1,618;1,618]***	Total	16	25	18	28	27	27	27
	máximo	16	18	9	6	5	1	3
	sela		7	9	22	22	26	24
	mínimo							
Fora****	Total	15	19	35	35	40	24	33
	máximo	11	10	10	14	7	4	6
	sela	4	9	25	21	32	20	26
	mínimo					1		1
Reg. Sign.	Total	100	85	29	11	2		2
	máximo	96	76	13	3	1		1
	sela	4	9	16	8	1		1
	mínimo							

Nota: * s--: ponto de sela em que dois dos autovalores são negativos;
 ** s- : ponto de sela em que apenas um dos autovalores é negativo.
 *** nível mínimo e máximo por fator;
 **** fora dos níveis [-1,618; 1,618].

Tabela 4. Quantidade de experimentos por intervalo de coeficiente experimental do DCC Ortogonal com $\alpha = 1,216$

Intervalos de coef. exper. (%)		Quantidade de experimentos simulados dentro de cada intervalo (%)						
		[0;4)	[4;7)	[7;11)	[11;16)	[16;22)	≥ 22	≥ 16
Pto de máximo		93	66	48	34	24	12	17
Pto de sela		7	34	52	66	76	88	82
s--*		7	33	41	49	52	64	58
s- **		0	1	11	17	24	24	24
Pto de mínimo								1
(-1;1)***	Total	66	54	44	35	36	49	42
	Máximo	64	44	27	16	12	8	10
	Sela	2	10	17	19	24	41	32
	Mínimo							
[-1,618;1,618]***	Total	22	20	18	29	21	27	24
	Máximo	20	11	8	4	1	2	2
	Sela	2	9	10	25	20	25	22
	Mínimo							
Fora****	Total	12	26	38	36	43	24	34
	Máximo	9	11	13	14	9	2	6
	Sela	3	15	25	22	32	22	27
	mínimo					2		1
Reg. sign.	Total	100	78	24	7	2		1
	máximo	93	53	10	2			
	sela	7	25	14	5	2		1
	mínimo							

Nota: * s--: ponto de sela em que dois dos autovalores são negativos;

** s- : ponto de sela em que apenas um dos autovalores é negativo.

*** nível mínimo e máximo por fator;

**** fora dos níveis [-1,618; 1,618].

Para os experimentos simulados usando-se o DCC ortogonal, não houve a ocorrência de autovalores muito próximos de zero. Já no caso do DCC em que o ponto axial é um, houve a ocorrência de um ponto, onde um dos autovalores foi igual a 0,02.

Tabela 5. Quantidade de experimentos por intervalo de coeficiente experimental do DCC com $\alpha = 1$

		Quantidade de experimentos simulados dentro de cada intervalo (%)						
Intervalos de coef. exper. (%)		[0;3]	(3;6]	(6;10]	(10;15]	(15;21]	>21	>15
Pto de máximo		88	65	36	16	11	3	7
Pto de sela		12	35	64	84	89	97	93
s--*		12	32	54	65	69	71	69
s- **			3	10	19	20	26	24
Pto de mínimo								
(-1;1)***	Total	65	45	42	51	53	53	53
	máximo	60	35	21	12	3	3	3
	sela	5	10	21	39	50	50	50
	mínimo							
[-1,618;1,618]***	Total	21	24	17	20	18	25	22
	máximo	15	16	8	18	3		2
	sela	6	8	9	2	15	25	20
	mínimo							
Fora****	Total	14	31	41	29	29	22	25
	máximo	12	14	8	2	5		23
	sela	2	17	33	27	24	22	2
	mínimo							
reg. Sign.	Total	100	92	27	9	2		1
	máximo	88	61	8				
	sela	12	31	19	9	2		1
	mínimo							

Nota: * s--: ponto de sela em que dois dos autovalores são negativos;
 ** s- : ponto de sela em que apenas um dos autovalores é negativo.
 *** nível mínimo e máximo por fator;
 **** fora dos níveis [-1,618; 1,618].

Tabela 6. Quantidade de experimentos por intervalo de coeficiente experimental do DCC com $\alpha = 1$

Intervalos de coef. exper. (%)	Quantidade de experimentos simulados dentro de cada intervalo (%)							
	[0;4)	[4;7)	[7;11)	[11;16)	[16;22)	≥ 22	≥ 16	
Pto de máximo	81	58	35	11	9	3	6	
Pto de sela	19	42	65	89	91	97	94	
s--*	19	38	53	70	69	70	69	
s- **		4	12	19	22	27	25	
Pto de mínimo								
(-1;1)***	Total	58	44	48	42	58	54	56
	máximo	54	30	21	6	4	3	3
	sela	4	14	27	36	54	51	53
	mínimo							
[-1,618;1,618]***	Total	21	26	15	23	16	24	20
	máximo	15	16	7	2	2		1
	sela	6	10	8	21	15	24	19
	mínimo							
fora****	Total	21	30	36	35	26	22	24
	máximo	12	12	7	4	4		2
	sela	9	18	30	31	22	22	22
	mínimo							
reg. sign.	Total	100	76	24	7			
	máximo	81	49	4				
	sela	19	27	20	7			
	mínimo							

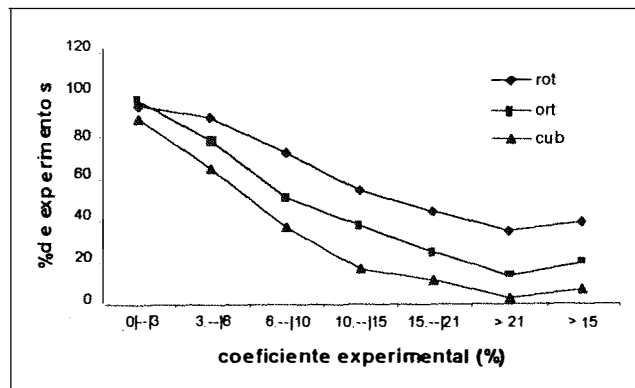
Nota: * s--: ponto de sela em que dois dos autovalores são negativos;

** s- : ponto de sela em que apenas um dos autovalores é negativo.

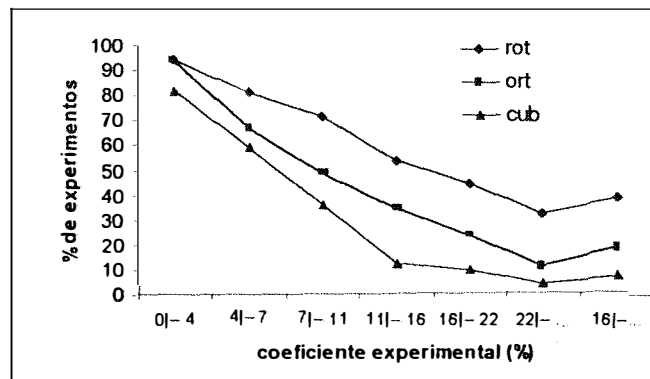
*** nível mínimo e máximo por fator;

**** fora dos níveis [-1,618; 1,618].

As Figuras 1(a) e 2(b) confirmam o resultado do teste qui-quadrado e teste para verificar a diferença entre proporção de pontos de máximo por delineamento (ver Tabelas de 1 a 5 no Apêndice 2). Apenas no intervalo de coeficiente experimental [0;3]% não se verificou diferença significativa no número de pontos de máximo total por delineamento.

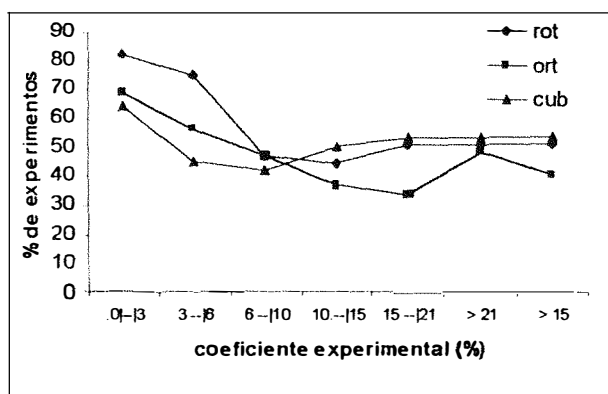


(a)

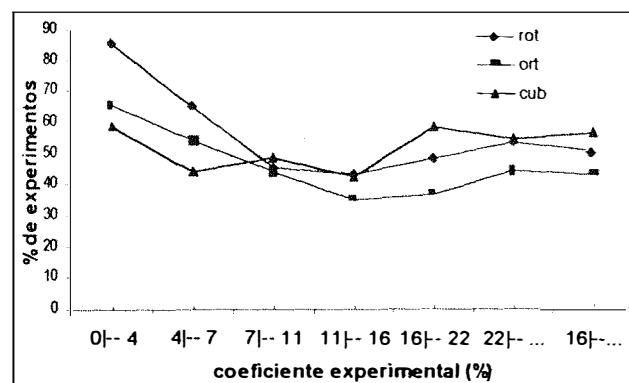


(b)

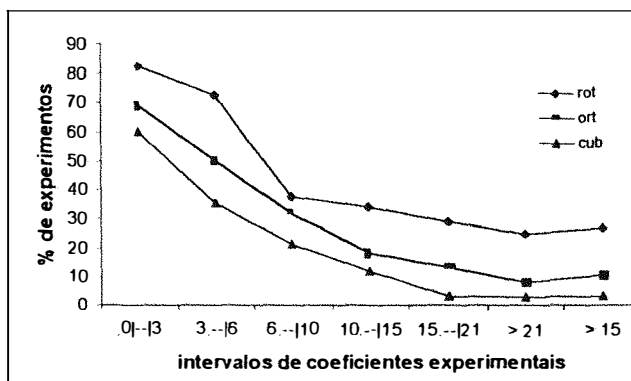
Figura 1 – Mostra a percentagem de pontos de máximo obtidos em cada intervalo de coeficiente experimental por delineamento



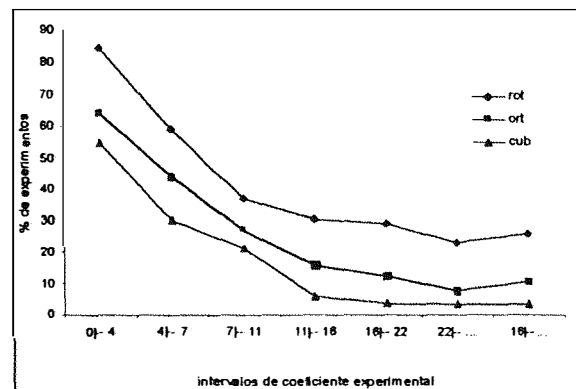
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 2 – Em (a) e (b) comparam a percentagem de pontos estacionários dentro dos níveis -1 e 1 por delineamento e em (c) e (d) comparam a percentagem de pontos de máximo por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental dentro dos níveis -1 e 1.

As Figuras (c) e (d) confirmam os testes de diferença de proporção de máximo dentro dos níveis -1 e 1 , isto é, há diferença significativa entre os delineamentos. Quando se trata do total de pontos estacionários, tanto com relação as Tabelas de 8 a 11 do Apêndice 2, as proporções de máximo em cada intervalo de coeficiente experimental se verificaram significativamente diferentes, principalmente com relação ao DCC rotacional, isto é, o DCC rotacional sempre obteve um maior número de experimentos em que os pontos de máximo ficaram entre os níveis -1 e 1 .

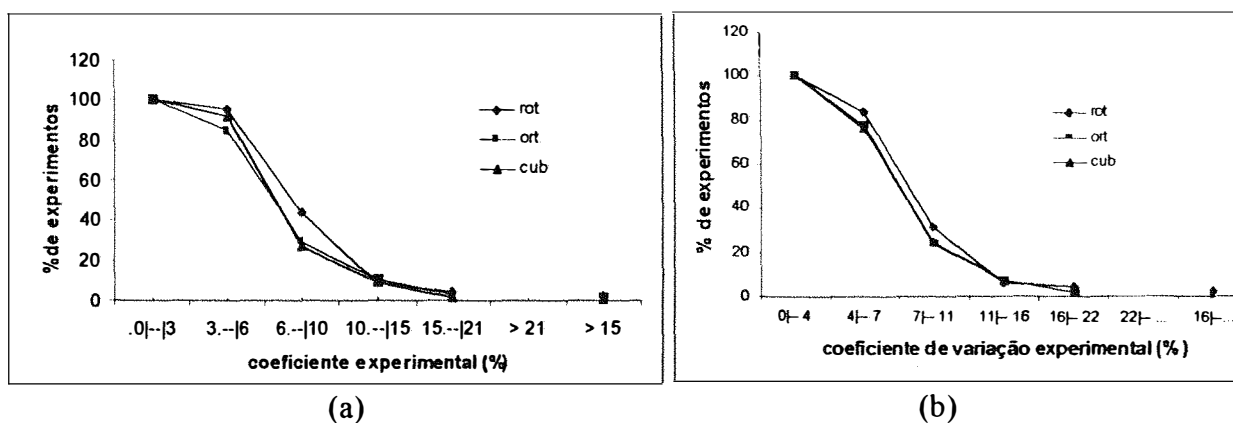


Figura 3 – Comparação dos três delineamentos quanto a porcentagem de regressões significativas

Com relação ao número de regressões significativas, como pode ser verificado na Figura 3, em (a) e (b), que dentro de cada intervalo de coeficiente experimental não houve diferença significativa no número de experimentos por delineamento que obtiveram regressão significativa. Só foi significativa no intervalo de coeficiente experimental $(6;10]\%$ apenas para dos DCC rotacional e ortogonal (Tabela 6 e 7 do Apêndice 2).

Nas Figuras 4 a 6 estão representados os gráficos “Box Plot” dos três primeiros intervalos de coeficientes experimentais referentes às respostas estacionárias y_s . Observa-se que, a medida que o valor do coeficiente experimental aumenta, para todos os três delineamentos, o intervalo de respostas estacionárias y_s tende a aumentar e constata-se

o aparecimento de valores muito longe do valor real, que seria neste caso 4140,274, como pode ser visto nas Tabelas 7 a 9.

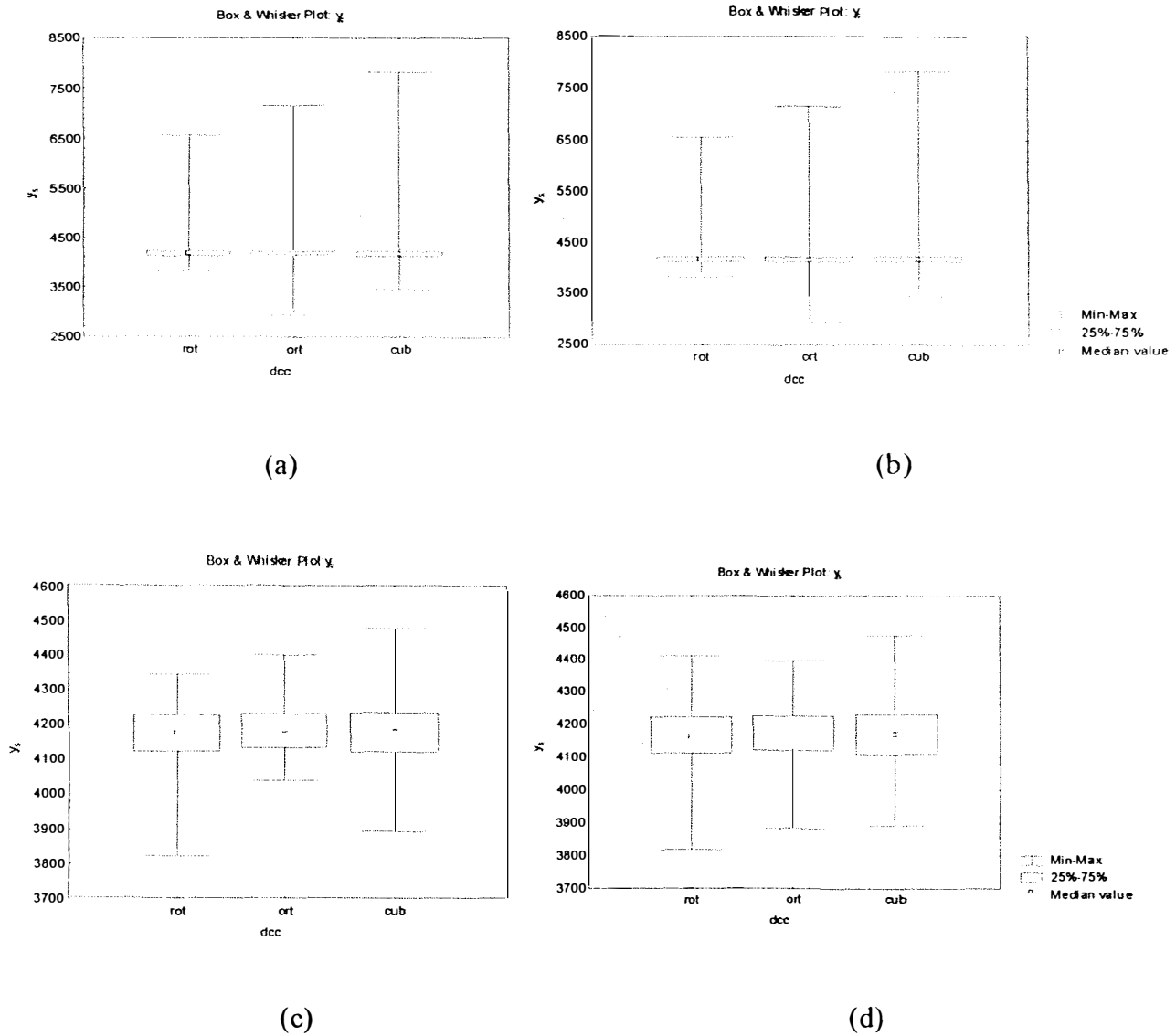


Figura 4 – Em (a) respostas estacionárias obtidas dentro do intervalo $[0;3]$. Em (b) respostas estacionárias obtidas dentro do intervalo $[0;4]$. Em (c) e (d), usando os mesmos intervalos, respectivamente, incluindo apenas os pontos entre 3800 e 4480.

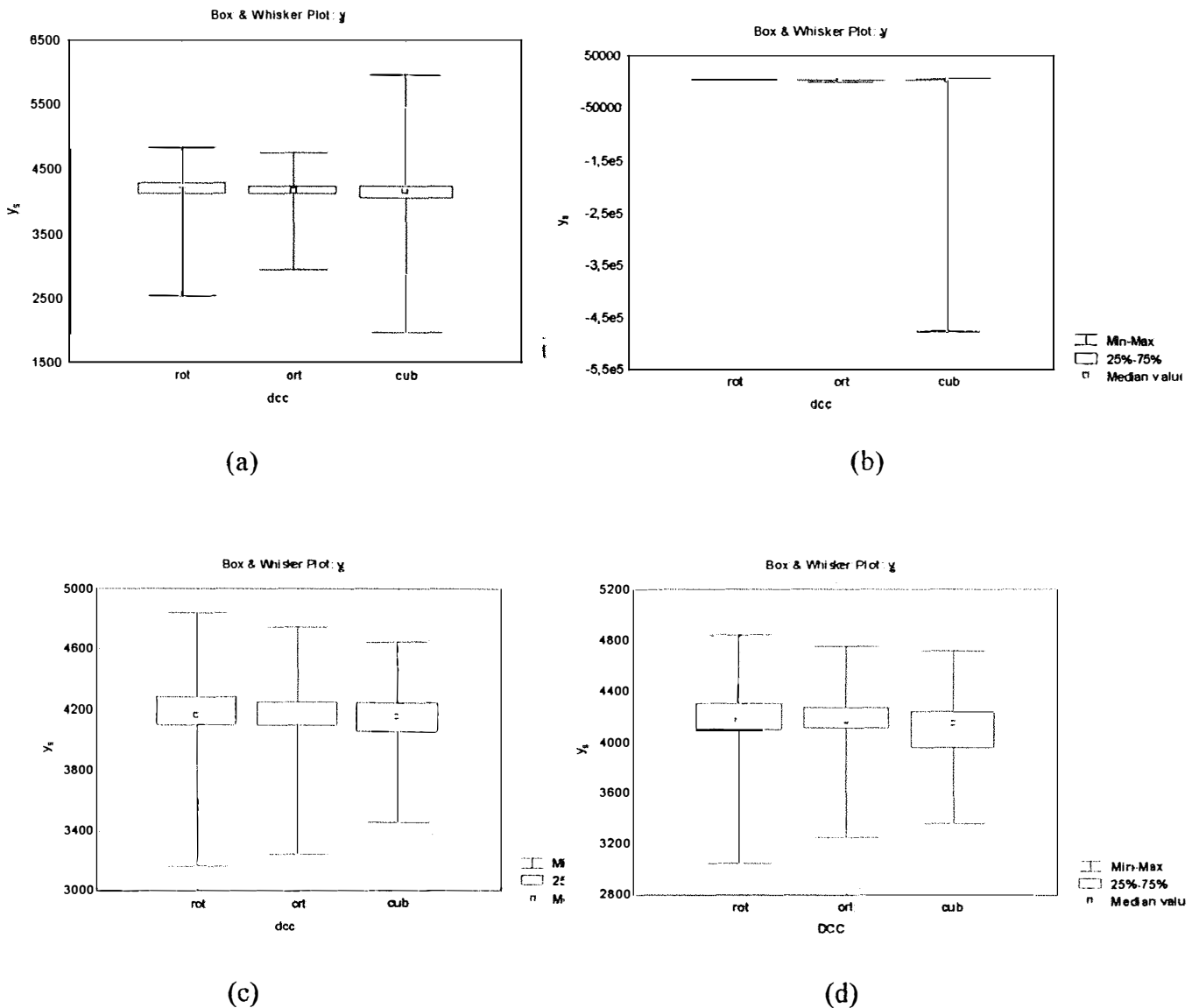


Figura 5 – Em (a) respostas estacionárias obtidas dentro do intervalo (3;6]. Em (b) respostas estacionárias obtidas dentro do intervalo [4;7). Em (c) e (d), usando os mesmos intervalos, respectivamente, incluindo apenas os pontos entre 3000 e 5000.

As Tabelas 7 a 9 mostram os dados de máximo e mínimo e a mediana usados na construção dos gráficos de “Box Plot” das Figuras 4 a 6, respectivamente.

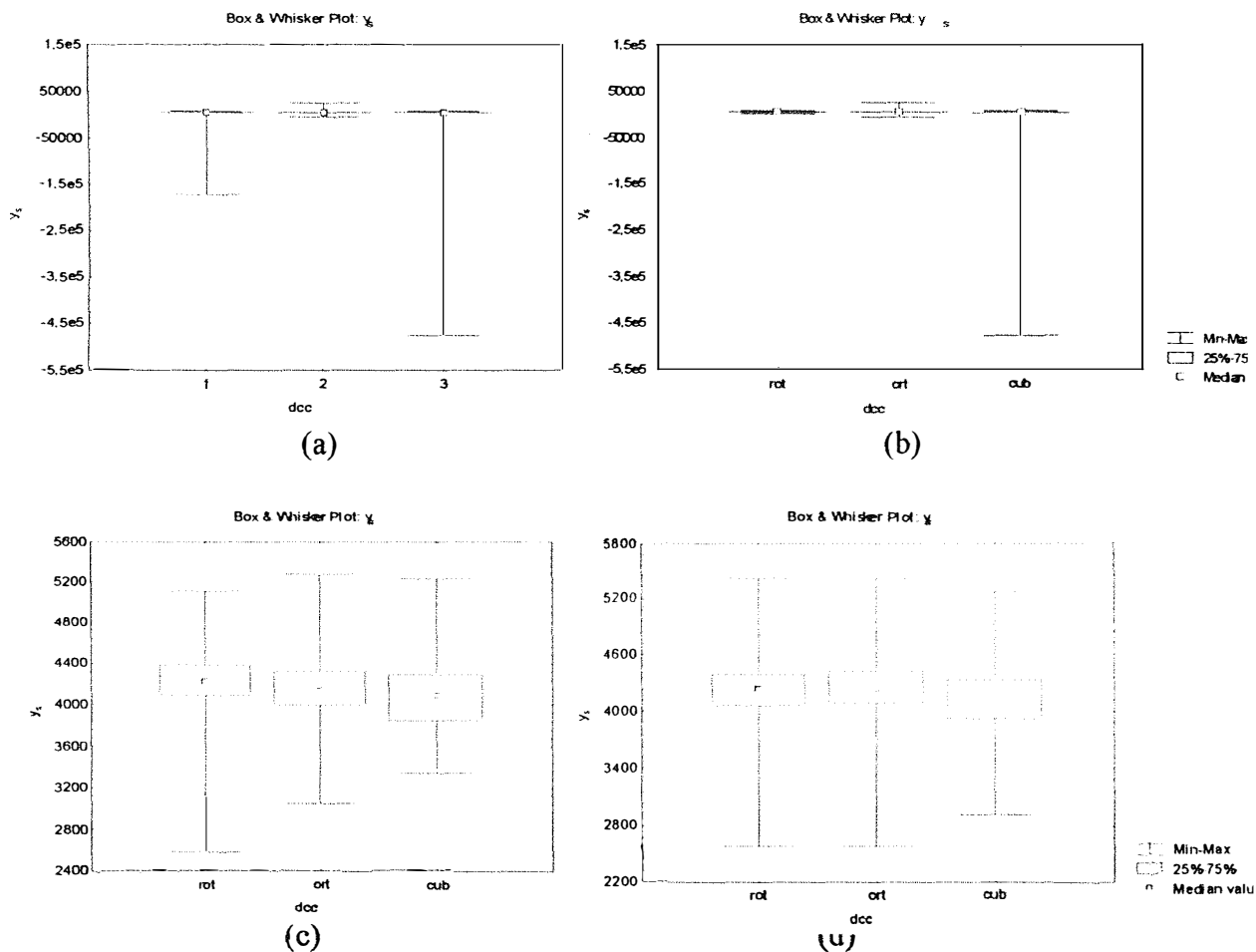


Figura 6 – Em (a) respostas estacionárias obtidas dentro do intervalo (6;10]. Em (b) respostas estacionárias obtidas dentro do intervalo [7;11). Em (c) e (d), usando os mesmos intervalos, respectivamente, incluindo apenas os pontos entre 2500 e 5500.

A Tabela 10 mostra a proporção de delineamentos dentro do intervalo de resposta estacionária y_s de 3800 a 3480, comparando os três delineamento. Como já constatado nas Figuras de 4 a 6, o número de respostas estacionárias tende a diminuir em proporção a medida que o coeficiente experimental cresce.

Também, comparando-se as proporções de ponto de máximo e ponto de máximo dentro dos níveis -1 e 1 , através do teste de significância para duas proporções (ver Tabelas 12 e 13 no Apêndice 2) verifica-se que a diferença da proporção de pontos de

máximo e ponto de máximo entre os níveis -1 e 1 entre os dois primeiros intervalos da Tabela 1, para o DCC rotacional não foi significativa.

Tabela 7 – Valores dos pontos que formam os gráficos “Box Plot” na Figura 4

Intervalo	DCC	ys mínimo	ys máximo	25 ^o percentil	75 ^o percentil	Mediana
[0;3]	Rotacional	3820,617	6574,438	4115,741	4228,566	4173,208
	Ortogonal	2940,150	7163,397	4125,591	4241,037	4189,975
	Cub - $\alpha=1$	3451,118	7843,769	4112,976	4232,311	4171,942
[0;4]	Rotacional	3820,617	6574,438	4111,565	4230,358	4167,373
	Ortogonal	2940,150	7163,397	4117,563	4241,357	4172,649
	Cub - $\alpha=1$	3451,118	7843,769	4104,752	4231,523	4169,027
[0;3]	Rotacional	3820,617	4338,862	4115,741	4221,395	4170,290
	Ortogonal	4035,321	4397,047	4125,591	4226,163	4181,658
	Cub - $\alpha=1$	3891,953	4475,048	4112,976	4232,311	4171,942
[0;4]	Rotacional	3820,617	4411,328	4110,383	4221,027	4163,628
	Ortogonal	3885,642	4397,047	4117,563	4228,649	4163,893
	Cub - $\alpha=1$	3891,953	4475,048	4106,005	4229,821	4169,518

Tabela 8 - Valores dos pontos que formam os gráficos “Box Plot” na Figura 5

Intervalo	DCC	ys mínimo	ys máximo	25 ^o percentil	75 ^o percentil	Mediana
(3;6]	rotacional	2523,312	4840,162	4096,333	4287,248	4161,917
	ortogonal	2940,150	4748,663	4096,369	4250,188	4162,352
	cub - $\alpha=1$	1966,180	5948,033	4044,288	4245,039	4156,819
[4;7)	rotacional	1998,594	4840,162	4091,528	4296,388	4177,034
	ortogonal	322,278	4748,663	4064,673	4265,328	4162,921
	cub - $\alpha=1$	-475992,	7305,458	3953,921	4245,039	4152,240
(3;6]	rotacional	3171,448	4840,162	4097,446	4287,329	4165,814
	ortogonal	3251,885	4748,663	4097,933	4255,259	4162,380
	cub - $\alpha=1$	3463,040	4649,664	4050,531	4243,667	4156,819
[4;7)	rotacional	3049,477	4840,162	4096,333	4303,259	4177,575
	ortogonal	3251,885	4748,663	4098,093	4270,603	4171,671
	Cub - $\alpha=1$	3365,375	4716,215	3954,953	4243,667	4152,240

Tabela 9 - Valores dos pontos que formam os gráficos “Box Plot” na Figura 6)

Intervalo	DCC	ys mínimo	ys máximo	25 ^o percentil	75 ^o percentil	Mediana
(6;10]	rotacional	-171567,	7203,462	3963,240	4399,708	4227,876
	ortogonal	-5249,96	25842,00	3938,954	4323,070	4162,064
	cub - $\alpha=1$	-475992,	7305,458	3834,159	4299,621	4087,190
[7;11)	rotacional	1427,349	7203,462	4042,120	4396,440	4219,060
	ortogonal	-5249,96	25842,00	3914,125	4331,708	4176,114
	cub - $\alpha=1$	-475992,	7305,458	3828,458	4309,669	4087,190
(6;10]	Rotacional	2589,524	5105,458	4090,812	4389,623	4220,404
	ortogonal	3056,563	5274,789	3988,019	4326,072	4194,419
	cub - $\alpha=1$	3346,103	5226,024	3846,005	4305,046	4092,701
[7;11)	Rotacional	2161,693	5413,613	4004,892	4398,180	4234,005
	ortogonal	2161,693	5413,613	4004,892	4425,463	4239,472
	Cub - $\alpha=1$	2041,360	5274,789	3861,647	4315,962	4176,754

Tabela 10

Intervalo cv experimental (%)	DCC rotacional	DCC ortogonal	DCC com $\alpha=1$
[0;3]	98	91	97
[0;4)	97	90	93
(3;6]	90	90	84
[4;7)	77	87	75
(6;10]	61	62	64
[7;11)	65	57	64

Os resultados mostram que nenhum dos três delineamentos são indicados para serem utilizados em pesquisas de campo, como na agronomia e outras áreas de pesquisa, onde não é possível um controle da influência de fatores externos ao experimento, isto é, onde o coeficiente de variação experimental é muitas vezes superior a 10%.

Mesmo utilizando-se a repetição de todos os tratamentos, constata-se através dos dados utilizados por Miranda (1976) de adubação de milho (pesquisa de campo), que o DCC (com $\alpha = 2$ e $k=3$) mostrou-se pouco indicado para se chegar a conclusão das

melhores doses de fertilizantes, pois as respostas obtidas foram consideradas muitas vezes absurdas.

Já no caso, onde o coeficiente de variação experimental é de no máximo de 6%, os três delineamentos são considerados bons. E o DCC rotacional foi o melhor em termos de respostas esperadas, pois os resultados estavam mais próximos do verdadeiro valor. Logo, em laboratórios de Fitopatologia, Virologia, Entomologia, ou outras áreas de pesquisas, realizadas em ambiente fechado, onde o controle é maior que no de campo (em geral que não ultrapasse o coeficiente de variação de 6%), os três são indicados, sendo que o DCC rotacional será o melhor delineamento.

E, como esperado, os três delineamentos são ideais no caso onde o coeficiente de variação não ultrapasse a 4%, como é o caso de pesquisas em química e para alguns produtos industriais (onde o controle dos fatores externos ao processo de produção é efetivo), como a confecção de fios de tecido, por exemplo.

5.CONCLUSÕES

De acordo com os resultados obtidos da simulação de dados, pode-se chegar as seguintes conclusões:

- 1) O uso dos três delineamentos estudados só é recomendado, enquanto a variação experimental chegar até 6% no máximo, pois acima deste valor, as respostas e pontos estacionários próximos da verdadeira resposta terão poucas chances de ocorrer. Logo, o uso destes delineamentos é indicado nas áreas de pesquisas realizadas em laboratórios, como é o caso
- 2) DCC rotacional apresentou as melhores respostas que os outros dois, pois foi construído visando a estabilidade em toda região do delineamento;
- 3) pior foi o DCC em que $\alpha=1$;
- 4) Quando o coeficiente de variação experimental maior que 6% será necessário usar repetições por tratamento para que se possa diminuir a variação e isso torna o experimento muito vezes inviável em termos de tempo e economia.
- 5) Os três delineamentos estudados são só viáveis, quando não repetidos seus tratamentos, dentro de situações onde há um bom controle dos fatores que possam influenciar o experimento.
- 6) Confirma os trabalhos realizados buscando uma opção de experimento com poucos pontos, isto é, há necessidade de se buscar o controle efetivo dos fatores que possam influenciar os experimento, de forma a diminuir a variação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N. **Optimum Experimental Designs**. Oxford: Clarendon Press, 1992. 324p. (Oxford Statical Science Series 8)
- BARROS NETO, B. de; SCARMINIO, I.S.; BRUNS, R.E. **Planejamento e otimização de experimentos**. Campinas: Editora da UNICAMP, 1996. 299p. (Série Manuais).
- BATISTA, L.B. Determinação de α para tornar ortogonal o delineamento composto central (box). Piracicaba, 1976. 26p. Dissertação (Mestrado) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo.
- BOX, G.E.P.; DRAPER, N.R. A note on the geration of randon normal deviates. **Annais Mathematical Statistics**, n. 29, p. 610-611, 1958.
- BOX, G.E.P.; DRAPER, N.R. **Empirical Model-Building and Response Surfaces**. New York: John Wiley, 1986. (Wiley series in probability and Mathematical Statistics).
- BOX, G.E.P.; HUNTER, W.G.; HUNTER, J.S. **Statistics for experimenters**. New York: John Wiley, 1978. 597p.
- BOX, G.E.P.; WILSON, K.B. On the experimental attainment of optium conditions. **Journal Royal Statistical Society**, v.B13, p.1-45, 1951.

- CAMPOS, H. Aspectos de aplicação das superfícies de resposta a ensaios fatoriais 3^3 de adubação. Piracicaba, 1967, 82p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo.
- CARVALHO, J.F. de **Tópicos em planejamento de experimentos: desenvolvimento de planos experimentais assistido por computador.** Concórdia: Embrapa; CNPSA-Centro Nacional de Pesquisa em Suínos e Aves, Mar. 1996. 38p.
- CASTELLARI, A. Eficiência do delineamento composto central ortogonal com 15 pontos em relação ao delineamento duplo composto central ortogonal com 29 pontos. Piracicaba, 1984. 76p. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo.
- CHACIN L., F. El diseño compuesto central rotable y su utilización em ensayos de fertilización. Venezuela, 1980. Trabajo de Ascenso - Facultad de Agronomia, Universidade Central de Venezuela.
- CHACIN L., F. Comparación de algunos diseños de segunda ordem utilizados em la exploración de superficies de resposta em experimentos agrícolas. Venezuela, 1983, 89p. Dissertação (M.S.) – Facultad de Agronomia, Universidade Central de Venezuela.
- CHRISTIANS, N. E.; MARTIN, D. P.; WILKINSON, J. F. Nitrogen, phosphorus, and potassium effects on quality and growth of Kentucky bluegrass and creeping bentgrass. **Agronomy Journal**, n. 71, p. 564-567, 1979.
- COCHRAN, W.G.; COX, G.M. **Experimental Designs.** New York: John Wiley, 1957, 597p.
- CONAGIN, A. ~~Delineamentos Experimentais Utilizados nos Estudos de Fertilidade do Solo.~~ Campinas: s. ed., s.d., 1v. (Texto Datilografado.)

- CONAGIN, A. Delineamentos Compostos Centrais Duplos. **Bragantia**, v. 41, n. 4, p.35-47, mar. 1982a.
- CONAGIN, A. Delineamentos “Compostos Centrais Ortogonais, Rotacionais e Divisíveis em Blocos”. **Bragantia**, v. 41, n. 5, p.48-56, mar. 1982b.
- CONAGIN, A. Delineamento Composto Central com duas estrelas. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**. v.17, n.9, p.1261-1269, set. 1982c.
- CONAGIN, A.; JORGE, J. P.N. Delineamento duplo central composto com 29 pontos. **Bragantia**, v. 38, n. 23, p.217-235, dez. 1979.
- CONAGIN, A.; JORGE, J.P.N. Delineamento composto central com três estrelas. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**. v.18, n.9, p.949-957, set. 1983.
- CONAGIN, A.; JORGE, J. de P.N.; VENTURINI, W. R. Delineamentos experimentais utilizáveis na experimentação de campo. In: REYNAERT, E.E., (Ed.) **La Investigación de fertilidad de Suelos para la Producción Agrícola en la Zona Templada**. Montividéu, IICA-ZC, p.183-201, 1969.
- CONAGIN, A.; NAGAI, V.; IGUE, T. **Delineamentos experimentais para as áreas tecnológicas**. Campinas: Instituto Agrônomo, jun. 1995. 33p. (IAC, Boletim Técnico n. 156).
- CONAGIN, A.; NAGAI, V.; IGUE, T. **Sensibilidade dos delineamentos fatoriais 3^3 , $(\frac{1}{2})4^3$ e $(1/5)5^3$ na definição dos pontos crítico**. Campinas: Instituto Agrônomo de Campinas, mar. 1999. 20p. (IAC, Boletim Científicos n. 39).
- DAVIES, O.L. **Design and analysis of industrial experiments**. Edinburgh: Oliver and Boyd. 1954. 636p.

- DÁVILA, L.E.R. Algunos diseños para estudios de la superficie de respuesta a la aplicación de fertilizantes. In: REUNIÃO INTERNACIONAL DE BIOMETRIA., Piracicaba, 1975. **Anais.** Piracicaba: Fundação Cargil, p.131-156, 1975.
- GOMES, F.P.; CONAGIN, A. **Experimentos de Adubação: Planejamento e Análise Estatística. Separata.** In: SIMPÓSIO DE ESTATÍSTICA APLICADA A EXPERIMENTAÇÃO AGONÔMICA 2.; In: REUNIÃO ANUAL DA REGIÃO BRASILEIRA DA SOCIEDADE INTERNACIONAL DE BIOMETRIA, 32., Londrina, 1987. **Anais.** Londrina: UEL, 1987. 102 p.
- GUAZZELI, R.J.; MENDES, J.F.; BAUWIN, G.R; MILLER, S.F. Efeitos agronômicos e econômicos do calcário, nitrogênio, fósforo, potássio, enxofre e micronutrientes nos rendimentos de soja, feijão e arroz em Uberaba, Minas Gerais. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v.8, n.6, p.29-37, 1973. (Série Agronômica).
- HAALAND, P.D. **Experimental Design in Biotechnology.** New York: Marcel Dekker, 1989. 250p.
- JORGE, J.P.N. Delineamento Guadalupe para três fatores, analisado através do modelo de regressão polinomial quadrática. Piracicaba, 1980. 56p. Dissertação (Mestrado) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo.
- JORGE, J.P.N. Variações a partir do delineamento Guadalupe. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**. v.19, n.6, p.739-753, jun. 1984.
- JORGE, J.P.N.; FREITAS, L.M.M. **O delineamento Box, modificado, em ensaio de correção e fertilização de um latossolo vermelho-amarelo.** Campinas: Instituto Agronômico, dez. 1987. 25p. (IAC, Boletim Técnico n. 12).
- JORGE, J.P.N.; FREITAS, L.M.M. Análise de um delineamento Box para três fatores, com níveis não equidistantes. **Bragantia**, v. 38, n. 24, p.237-250, dez. 1979.

- KHURI, A.J.; CORNELL, J.A. **Response Surfaces: Designs and Analyses**. New York: Marcel Dekker, 1987. 405p.
- LUCAS, J.M. Optimum composite designs. **Technometrics**, v.16, n. 4, p. 561-7, nov. 1974.
- LUCAS, J.M. Which Response Surface Design is Best. **Technometrics**, v. 18, n. 4, p.411-417, nov. 1976.
- LUGO, F. C. Planificación Experimental y Comercial (diseño exco) para Ensayos Agrícolas. In: REUNIÃO ANUAL DA REGIÃO BRASILEIRA DA SOCIEDADE INTERNACIONAL DE BIOMETRIA, 36., São Paulo, 1990. **Anais**. São Paulo: s. d., 1990, p.14.
- MIRANDA, L. E. C. de. Avaliação do efeito residual de fertilizantes através de coeficientes da superfície de resposta ajustada a ensaios de adubação de milho (*zea mays L.*). Piracicaba, 1976. 131 p. Dissertação (Mestrado) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo.
- MONTGOMERY, D.C. **Diseño y Analisis de Experimentos**. Trad. de Jaime Delgado Salvidar. Argentina: Grupo Editorial Iberoamérica, 1991. 586p.
- MONTGOMERY, D.C. MYERS, R.H. **Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments**. New York: John Wiley, 1995. 700p.
- MYER, R.H. **Response surface methodology**. Boston: Allyn and Bacon. 1971. 246 p.
- MELLA, S.C. Resposta de uma gramínea e leguminosa sub-tropicais a diferentes sistemas de pastejo. Porto alegre, 1980. 166p. Dissertação (M.S.) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

- PEREIRA, G. T.; PRECIN, D. Eficiência de delineamentos $(1/5) 5^3$, em relação ao delineamento composto central (15 pontos). In: SIMPÓSIO DE ESTATÍSTICA APLICADA À EXPERIMENTAÇÃO AGRONÔMICA, 1.; REUNIÃO ANUAL DA REGIÃO BRASILEIRA DA SOCIEDADE INTERNACIONAL DE BIOMETRIA, 30., Piracicaba, 1987. **Anais**. Campina: Fundação Cargill, 1985. p. 183-196.
- PIMENTEL GOMES, F; CAMPOS, H. The efficiency of factorial 3^3 designs ascomparad to a central composite rotatable design. **Potash Review**, v.72, Feb. 72. 3p.
- SANCHES, A. Delineamentos e soluções alternativas para os níveis ótimos em experimentos de adubação. **Revista de Matemática Estatística**, São Paulo, n. 11, p.143-154. 1993.
- SANCHES, A; NOGUEIRA, I.R.; PERECIN, D. Ponto de sela e níveis ótimos em experimentos de adubação. In: SEAGRO 2; SIMPÓSIO DE ESTATÍSTICA APLICADA À EXPERIMENTAÇÃO AGRONÔMICA 2; REUNIÃO ANUAL DA REGIÃO BRASILEIRA DA SOCIEDADE INTERNACIONAL DE BIOMETRIA 32, Londrina, 1987. **Anais**. Londrina: UEL, 1987. p. 132-146.
- SAS INSTITUTE, SAS/IML SOFTWARE: version 6. Cary, 1989. p.1070.
- SOUZA, R.D.N. Utilização do extrato de soja desengordurado em pó na produção de queijo Minas frescal: desenvolvimento tecnológico e caracterização do produto. Londrina, 1992. 115p. Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Londrina.

ANEXO I

Tabelas dos parâmetros e matriz X referentes a superfície de resposta adotada e programas utilizados para a simulação de dados usando o SAS

Tabela 1. Parâmetros e matriz X da superfície de resposta adotada referentes ao DCC com $\alpha = 1$

Tabela 2. Parâmetros e matriz X da superfície de resposta adotada referentes ao DCC ortogonal com $\alpha = 1,216$

Tabela 3. Parâmetros e matriz X da superfície de resposta adotada referente ao DCC rotacional com $\alpha = 1,682$

Programa do SAS para gerar o erro aleatório

Programas para análise de superfície de resposta para os três delineamentos

Modelo e Delineamento

Tabela 1. Parâmetros e matriz X da superfície de resposta adotada referentes ao DCC com $\alpha = 1$

i	M	A	B	C	AB	AC	BC	A ²	B ²	C ²	Y(i)
	4000	200	220	180	-51	-40	-44	-160	-180	-170	
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	2755
2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	3337
3	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	1	3385
4	1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	3763
5	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	3705
6	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	3283
7	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	3737
8	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	3955
9	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4000
10	1	-1	0	0	0	0	0	1	0	0	3640
11	1	1	0	0	0	0	0	1	0	0	4040
12	1	0	-1	0	0	0	0	0	1	0	3600
13	1	0	1	0	0	0	0	0	1	0	4040
14	1	0	0	-1	0	0	0	0	0	1	3650
15	1	0	0	1	0	0	0	0	0	1	4010

Tabela 2. Parâmetros e matriz X da superfície de resposta adotada referentes ao DCC ortogonal com $\alpha = 1,216$

i	M	A	B	C	AB	AC	BC	A**2	B**2	C**2	Y(i)
	4000	200	220	180	-51	-40	-44	-160	-180	-170	
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	2755
2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	3337
3	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	1	3385
4	1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	3763
5	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	3705
6	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	3283
7	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	3737
8	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	3955
9	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4000
10	1	-1,216	0	0	0	0	0	1,4786	0	0	3520,215
11	1	1,216	0	0	0	0	0	1,4786	0	0	4006,615
12	1	0	-1,216	0	0	0	0	0	1,4786	0	3466,321
13	1	0	1,216	0	0	0	0	0	1,4786	0	4001,361
14	1	0	0	-1,216	0	0	0	0	0	1,4786	3529,748
15	1	0	0	1,216	0	0	0	0	0	1,4786	3967,508

Tabela 3 Parâmetros e matriz X da superfície de resposta adotada referente ao DCC rotacional com $\alpha = 1,682$

	M	A	B	C	AB	AC	BC	A**2	B**2	C**2	Y(i)
i	4000	200	220	180	-51	-40	-44	-160	-180	-170	
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	2755
2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	3337
3	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	1	3385
4	1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	3763
5	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	3705
6	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	3283
7	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	3737
8	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	3955
9	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4000
10	1	-1,682	0	0	0	0	0	2,8291	0	0	3210,940
11	1	1,682	0	0	0	0	0	2,8291	0	0	3883,740
12	1	0	-1,682	0	0	0	0	0	2,8291	0	3120,717
13	1	0	1,682	0	0	0	0	0	2,8291	0	3860,797
14	1	0	0	-1,682	0	0	0	0	0	2,8291	3216,288
15	1	0	0	1,682	0	0	0	0	0	2,8291	3821,808

Programa para gerar o erro aleatório (ϵ_u)

```

Com CV de 3%
Data ccd;
Drop n;
do n=1 to 15;
x= CV*4000*rannor(seed);
output;
end;
run;
proc print;
run
;

```

Programas para análise de superfície de resposta

```

(DCC  $\alpha=1$ )
data dcc;
input n e;
cards;

;

run;
data dccl;
input n y;
cards;
1 2755
2 3337
3 3385
4 3763
5 3705
6 3283
7 3737
8 3955
9 4000
10 3640
11 4040
12 3600
13 4040
14 3650
15 4010
;

run;
proc sort data=dcc; by n;
proc sort data=dccl; by n;
run;
data dcc2;
merge dcc dccl;
by n;
z=y-e;
run;
data dcc3;
input n x1-x3;
label n="posição"

x1="FAT1"
x2="FAT2"
x3="FAT3";

cards;
1 -1 -1 -1
2 1 -1 -1
3 -1 1 -1
4 1 1 -1
5 1 -1 1
6 -1 -1 1
7 -1 1 1
8 1 1 1
9 0 0 0
10 -1 0 0
11 1 0 0
12 0 -1 0
13 0 1 0
14 0 0 -1
15 0 0 1
;

proc sort data=dcc2; by
n;
proc sort data=dcc3; by n;
run;
data dcc4;
merge dcc2 dcc3;
by n;
proc rsreg;
model z=x1-x3 /
lackfit;
run;
proc print data=dcc4;
run;

```

(DCC ortogonal)

```

data DCC;
input n e;
cards;

;
proc print data=DCC;
run;
data DCC1;
input n y;
cards;
1 2755
2 3337
3 3385
4 3763
5 3705
6 3283
7 3737
8 3955
9 4000
10 3520
11 4006
12 3467
13 4001
14 3530
15 3968
;
proc print data=DCC1;
run;
proc sort data=DCC; by n;
proc sort data=DCC1; by n;
run;
data DCC2;
merge DCC DCC1;
by n;
z=y-e;
proc print data=DCC2;
run;
data DCC3;
input n x1-x3;
label n="posição"
x1="FAT1"
x2="FAT2"
x3="FAT3";
cards;
1 -1 -1 -1
2 1 -1 -1
3 -1 1 -1
4 1 1 -1
5 1 -1 1
6 -1 -1 1
7 -1 1 1
8 1 1 1
9 0 0 0
10 -1.216 0 0
11 1.216 0 0
12 0 -1.216 0
13 0 1.216 0
14 0 0 -1.216
15 0 0 1.216
;
proc sort data=DCC2; by
n;
proc sort data=DCC3; by n;
run;
data DCC4;
merge DCC2 DCC3;
by n;
proc rsreg;
model z=x1-x3 /
lackfit;
run;
proc print data=DCC4;
run;

```

(DCC rotacional)

```

data dcc;
input n e;
cards;

;
run;
data dcc1;
input n y;
cards;
1 2755
2 3337
3 3385
4 3763
5 3705
6 3283
7 3737
8 3955
9 4000
10 3211
11 3883
12 3121
13 3861
14 3216
15 3822
;
run;
proc sort data=dcc; by n;
proc sort data=dcc1; by n;
run;
data dcc2;
merge dcc dcc1;
by n;
z=y-e;
run;
data dcc3;
input n x1-x3;
label n="posição"
x1="FAT1"
x2="FAT2"
x3="FAT3";
cards;
1 -1 -1 -1
2 1 -1 -1
3 -1 1 -1
4 1 1 -1
5 1 -1 1
6 -1 -1 1
7 -1 1 1
8 1 1 1
9 0 0 0
10 -1.682 0 0
11 1.682 0 0
12 0 -1.682 0
13 0 1.682 0
14 0 0 -1.682
15 0 0 1.682
;
proc sort data=dcc2; by n;
proc sort data=dcc3; by n;
run;
data dcc4;
merge dcc2 dcc3;
by n;
proc rsreg;
model z=x1-x3 / lackfit;
run;
proc print data=dcc4;
run;

```

APÊNDICE 2

Tabelas de resultados dos testes de qui-quadrado e diferença de duas proporções por delineamento e intervalo de coeficiente experimental

Tabela 1	Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos que obtiveram ponto de máximo por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental (primeira opção)	91
Tabela 2.	Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos que obtiveram ponto de máximo por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental (segunda opção)	91
Tabela 3.	Resultado do teste para verificar se há diferença entre as proporções de experimentos que obtiveram ponto de máximo por delineamento nos intervalos de coeficiente experimental entre 0 a 4%	91
Tabela 4.	Resultado do teste para verificar se há diferença entre as proporções de pontos de máximo por delineamento nos intervalos de coeficiente experimental entre 3 a 7%	92
Tabela 5	Resultado do teste para verificar se há diferença entre as proporções de pontos de máximo por delineamento nos intervalos de coeficiente experimental entre 6 a 11%	92
Tabela 6	Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos em que a regressão foi significativa por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental	92
Tabela 7	Teste verificando se há diferença entre proporções de regressão significativas no intervalo de coeficiente experimental (6;10)% entre os três delineamentos	93
Tabela 8	Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos que obtiveram ponto de máximo dentro dos níveis (-1;1) por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental	93
Tabela 9	Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos que obtiveram ponto de máximo dentro dos níveis (-1;1) por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental de 0 a 16%	93

Tabela 10	Teste da diferença de proporção de número de máximo e ponto estacionário total, respectivamente, obtidos dentro dos limites -1 e 1 entre delineamentos dentro dos intervalos de coeficiente experimental	94
Tabela 11	Teste da diferença de proporção de número de máximo e ponto estacionário total, respectivamente, obtidos dentro dos limites -1 e 1 entre delineamentos dentro dos intervalos de coeficiente experimental	95
Tabela 12	Teste da diferença de duas proporções de número de máximo por delineamento entre intervalos de coeficiente experimental	96
Tabela 13	Teste da diferença de duas proporções de número de máximo entre os níveis -1 e 1 por delineamento entre intervalos de coeficiente experimental	96

Tabela 1. Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos que obtiveram ponto de máximo por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental (primeira opção)

Intervalo (%)	(3;6]	(6;10]	(10;15]	(15;21]	> 15
valor de χ^2	18,305	26,620	26,247	18,433	44,245
g.l.	2	2	2	2	2
p-valor	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
Resultado	s**	s**	s*	s**	s**

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.
s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 2. Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos que obtiveram ponto de máximo por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental (segunda opção)

Intervalo (%)	[0;4)	[4;7)	[7;11)	[11;16)	[16;22)	≥ 22
Valor de χ^2	8,103	10,814	24,448	34,983	19,335	39,293
g.l.	2	2	2	2	2	2
p-valor	0,017	0,004	0,001	0,001	0,001	0,001
Resultado	s*	s*	s**	s**	s**	s**

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.
s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 3. Resultado do teste para verificar se há diferença entre as proporções de experimentos que obtiveram ponto de máximo por delineamento nos intervalos de coeficiente experimental entre 0 a 4%

Delineamento	rot.x ort.	rot.x ort.	ort.x cub.	ort.x cub.	cub.x rot.	cub.x rot.
Intervalo (%)	[0;3]	[0;4)	[0;3]	[0;4)	[0;3]	[0;4)
Valor de z	-0,54	0,15	1,71	2,55	-1,17	-2,62
p-valor	0,2928	0,4386	0,0434	0,0054	0,1205	0,0438
Resultado	Ns	Ns	s*	s**	ns	s*

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.
s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 4. Resultado do teste para verificar se há diferença entre as proporções de pontos de máximo por delineamento nos intervalos de coeficiente experimental entre 3 a 7%

Delineamento	rot.x ort.	rot.x ort.	ort.x cub.	ort.x cub.	cub.x rot.	cub.x rot.
Intervalo (%)	(3;6]	[4;7)	(3;6]	[4;7)	(3;6]	[4;7)
Valor de z	2,16	2,15	2,19	1,12	-4,24	-3,28
p-valor	0,0155	0,0156	0,0142	0,1323	$1,19 \times 10^{-5}$	$5,2 \times 10^{-4}$
Resultado	s*	s*	s*	ns	s**	s**

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.
s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 5. Resultado do teste para verificar se há diferença entre as proporções de pontos de máximo por delineamento nos intervalos de coeficiente experimental entre 6 a 11%

Delineamento	rot.x ort.	Rot.x ort.	Ort.x cub.	ort.x cub.	cub.x rot.	cub.x rot.
Intervalo (%)	(6;10]	[7;11)	(6;10]	[7;11)	(6;10]	[7;11)
Valor de z	3,15	3,07	2,00	1,80	-5,13	-4,90
p-valor	$8,23 \times 10^{-4}$	0,001	0,0228	0,0358	$1,42 \times 10^{-7}$	42×10^{-7}
Resultado	s**	s**	s*	s*	s**	s**

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.
s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 6. Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos em que a regressão foi significativa por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental

Intervalo (%)	(3;6]	(6;10]	(10;15]	[4;7)	[7;11)	[11;16)
Valor do χ^2	1,157	23,521	0,103	1,849	1,903	0,073
g.l.	2	2	2	2	2	2
p-valor	0,561	0,001	0,950	0,397	0,386	0,964
Resultado	ns	s**	ns	ns	ns	ns

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.
s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 7. Teste verificando se há diferença entre proporções de regressão significativas no intervalo de coeficiente experimental (6;10)% entre os três delineamentos

Delineamento	rot. x ort.	ort. x cub.	cub. x rot
Valor de z	2,15	0,31	-1,07
p-valor	0,0158	0,3794	0,14238
Resultado	s*	ns	ns

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.

s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 8. Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos que obtiveram ponto de máximo dentro dos níveis -1 e 1 por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental

Intervalo	[0;3]	(3;6]	(6;10]	(10;15]
valor de χ^2	6,757	31,136	6,828	13,560
g.l.	2	2	2	2
p-valor	0,034	0,001	0,033	0,001
Resultado	s*	s**	s*	s**

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.

s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 9. Resultado do teste qui-quadrado para proporção de experimentos que obtiveram ponto de máximo dentro dos níveis -1 e 1 por delineamento dentro de cada intervalo de coeficiente experimental de 0 a 16%

Intervalo (%)	[0;4)	[4;7)	[7;11)	[11;16)
Valor de χ^2	20,44	15,472	5,949	17,811
g.l.	2	2	2	2
p-valor	0,001	0,001	0,051	0,001
Resultado	s**	s**	ns	s**

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.

s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 10 Teste da diferença de proporção de número de máximo e pto estacionário total, respectivamente, obtidos dentro dos limites -1 e 1 entre delineamentos dentro dos intervalos de coeficiente experimental

Intervalo de de coeficiente de variação experimental (%)	Ponto	DCCa xDCCb	z crítico	p-valor	Resultado
[0,3)	Máximo	rot-ort	1,59	0,112827	ns
	Pto estacionário		1,59	0,112827	ns
	Máximo	ort-cub	1,03	0,300762	ns
	Pto estacionário		0,52	0,604319	ns
	Máximo	cub-rot	-2,60	0,009232	ns
	Pto estacionário		-2,12	0,033877	s*
(3,6]	Máximo	rot-ort	3,41	0,000643	s**
	Pto estacionário		2,94	0,003265	s**
	Máximo	ort-cub	2,23	0,025427	s*
	Pto estacionário		1,68	0,09242	ns
	Máximo	cub-rot	-5,55	2,81x10 ⁰⁸ -	s**
	Pto estacionário		-4,57	4,9E-06	s**
(6,10]	Máximo	rot-ort	0,84	0,402989	ns
	Pto estacionário		0,01	0,988528	ns
	Máximo	ort-cub	1,74	0,082349	ns
	Pto estacionário		0,73	0,466171	ns
	Máximo	cub-rot	-2,59	0,009567	s**
	Pto estacionário		-0,75	0,452749	ns
(10,15]	Máximo	rot-ort	2,45	0,014234	s*
	Pto estacionário		1,02	0,309719	ns
	Máximo	ort-cub	1,18	0,238045	ns
	Pto estacionário		-1,80	0,071967	ns
	Máximo	cub-rot	-3,47	0,000529	s**
	Pto estacionário		0,77	0,442597	ns
(15,21]	Máximo	rot-ort	2,42	0,015336	s*
	Pto estacionário		2,16	0,030707	s*
	Máximo	ort-cub	2,01	0,043969	s*
	Pto estacionário		-2,37	0,017899	s*
	Máximo	cub-rot	-3,93	8,37x10 ⁵	s**
	Pto estacionário		0,29	0,768419	ns
> 21	Máximo	rot-ort	2,75	0,006008	s**
	Pto estacionário		0,26	0,797024	ns
	Máximo	ort-cub	1,30	0,192934	ns
	Pto estacionário		-0,58	0,560707	ns
	Máximo	cub-rot	-3,89	0,000101	s**
	Pto estacionário		0,35	0,727705	ns
> 15	Máximo	rot-ort	3,58	0,000345	s**
	Pto estacionário		1,80	0,072454	ns
	Máximo	ort-cub	2,47	0,013520	s*
	Pto estacionário		-2,18	0,028915	s*
	Máximo	cub-rot	-5,53	3,12x10 ⁻⁸	s**
	Pto estacionário		0,46	0,648663	ns

Nota: ns - teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.
s* s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 11. Teste da diferença de proporção de número de máximo e pto estacionário total, respectivamente, obtidos dentro dos limites (-1 e 1) entre delineamentos dentro dos intervalos de coeficiente experimental

Intervalo de de coeficiente de variação experimental (%)	Ponto	DCCa xDCCb	z crítico	p-valor	Resultado
[0;4)	Máximo	rot-ort	3,26	0,001116	s**
	Pto estacionário		3,18	0,001492	s**
	Máximo	ort-cub	1,34	0,179187	ns
	Pto estacionário		1,07	0,285779	ns
	Máximo	cub-rot	-4,50	6,91x10 ⁻⁶	s**
	Pto estacionário		-4,16	3,21x10 ⁻⁵	s**
[4;7)	Máximo	rot-ort	2,00	0,045309	s*
	Pto estacionário		1,55	0,121813	ns
	Máximo	ort-cub	1,92	0,055033	ns
	Pto estacionário		1,38	0,166207	ns
	Máximo	cub-rot	-3,93	8,42x10 ⁻⁵	s**
	Pto estacionário		-2,95	0,003142	s**
[7;11)	Máximo	rot-ort	1,43	0,151470	ns
	Pto estacionário		0,20	0,843991	ns
	Máximo	ort-cub	0,92	0,355898	ns
	Pto estacionário		-0,64	0,521877	ns
	Máximo	cub-rot	-2,40	0,016322	s*
	Pto estacionário		0,45	0,653075	ns
[11;16)	Máximo	rot-ort	2,30	0,021573	s*
	Pto estacionário		1,12	0,262560	ns
	Máximo	ort-cub	2,14	0,032537	s*
	Pto estacionário		-1,05	0,294091	ns
	Máximo	cub-rot	-4,14	3,45 x10 ⁻⁵	s**
	Pto estacionário		-0,09	0,929382	ns
[16;22)	Máximo	rot-ort	2,42	0,015701	s*
	Pto estacionário		1,35	0,177692	ns
	Máximo	ort-cub	1,69	0,091444	ns
	Pto estacionário		-2,40	0,016543	s*
	Máximo	cub-rot	-3,67	0,000242	s**
	Pto estacionário		1,15	0,251326	ns
≥ 22	Máximo	rot-ort	2,20	0,027498	s*
	Pto estacionário		0,42	0,674966	ns
	Máximo	ort-cub	1,26	0,208422	ns
	Pto estacionário		-0,53	0,594786	ns
	Máximo	cub-rot	-3,31	0,000923	s**
	Pto estacionário		0,13	0,897946	ns
≥ 16	Máximo	rot-ort	3,23	0,001220	s**
	Pto estacionário		1,29	0,195495	ns
	Máximo	ort-cub	2,14	0,032261	s*
	Pto estacionário		-2,11	0,034942	s*
	Máximo	cub-rot	-4,96	7,04 x10 ⁻⁷	s**
	Pto estacionário		0,89	0,372462	ns

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.

s* e s** - significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 12. Teste da diferença de duas proporções de número de máximo por delineamento entre intervalos de coeficiente experimental

DCC – intervalos de coeficiente de variação experimental (%)	z crítico	p-valor	Resultado
Rotacional [0;3]x(3x6)	1,04	0,299849	ns
Rotacional [0;4]x(4;7)	2,71	0,006766	s**
Rotacional [3,6]x(6;10)	3,08	0,002058	s**
Rotacional [4;7]x(7;11)	1,57	0,115748	ns
Ortogonal [0;3]x(3x6)	3,02	0,002513	s**
Ortogonal [0;4]x(4;7)	4,68	$2,83 \times 10^{-6}$	s**
Ortogonal [3,6]x(6;10)	4,17	$3,04 \times 10^{-5}$	s**
Ortogonal [4;7]x(7;11)	2,42	0,015329	s*
DCC $\alpha=1$ [0;3]x(3x6)	3,30	0,000955	s**
DCC $\alpha=1$ [0;4]x(4;7)	3,50	0,000464	s**
DCC $\alpha=1$ [3,6]x(6;10)	4,15	$3,29 \times 10^{-5}$	s**
DCC $\alpha=1$ [4;7]x(7;11)	3,22	0,001301	s**

Nota: ns – teste não significativo ao nível de significância 1% e 5%.

s* e s** – significativo, respectivamente, ao nível de 1% e 5%.

Tabela 13. Teste da diferença de duas proporções de número de máximo entre os níveis –1 e 1 por delineamento entre intervalos de coeficiente experimental

DCC – intervalos de de coeficiente de variação experimental (%)	z crítico	p-valor	Resultado
Rotacional [0;3]x(3x6)	1,36	0,1751	ns
Rotacional [0;4]x(4;7)	3,87	0,0001	s**
Rotacional [3,6]x(6;10)	5,08	$3,77 \times 10^{-7}$	s**
Rotacional [4;7]x(7;11)	2,99	0,0028	s**
Ortogonal [0;3]x(3x6)	2,33	0,0197	s*
Ortogonal [0;4]x(4;7)	2,76	0,0058	s**
Ortogonal [3,6]x(6;10)	2,63	0,0085	s**
Ortogonal [4;7]x(7;11)	2,35	0,0187	s**
DCC $\alpha=1$ [0;3]x(3x6)	3,20	0,001352	s**
DCC $\alpha=1$ [0;4]x(4;7)	3,44	0,000583	s**
DCC $\alpha=1$ [3,6]x(6;10)	2,27	0,023051	s*
DCC $\alpha=1$ [4;7]x(7;11)	1,44	0,150338	ns