

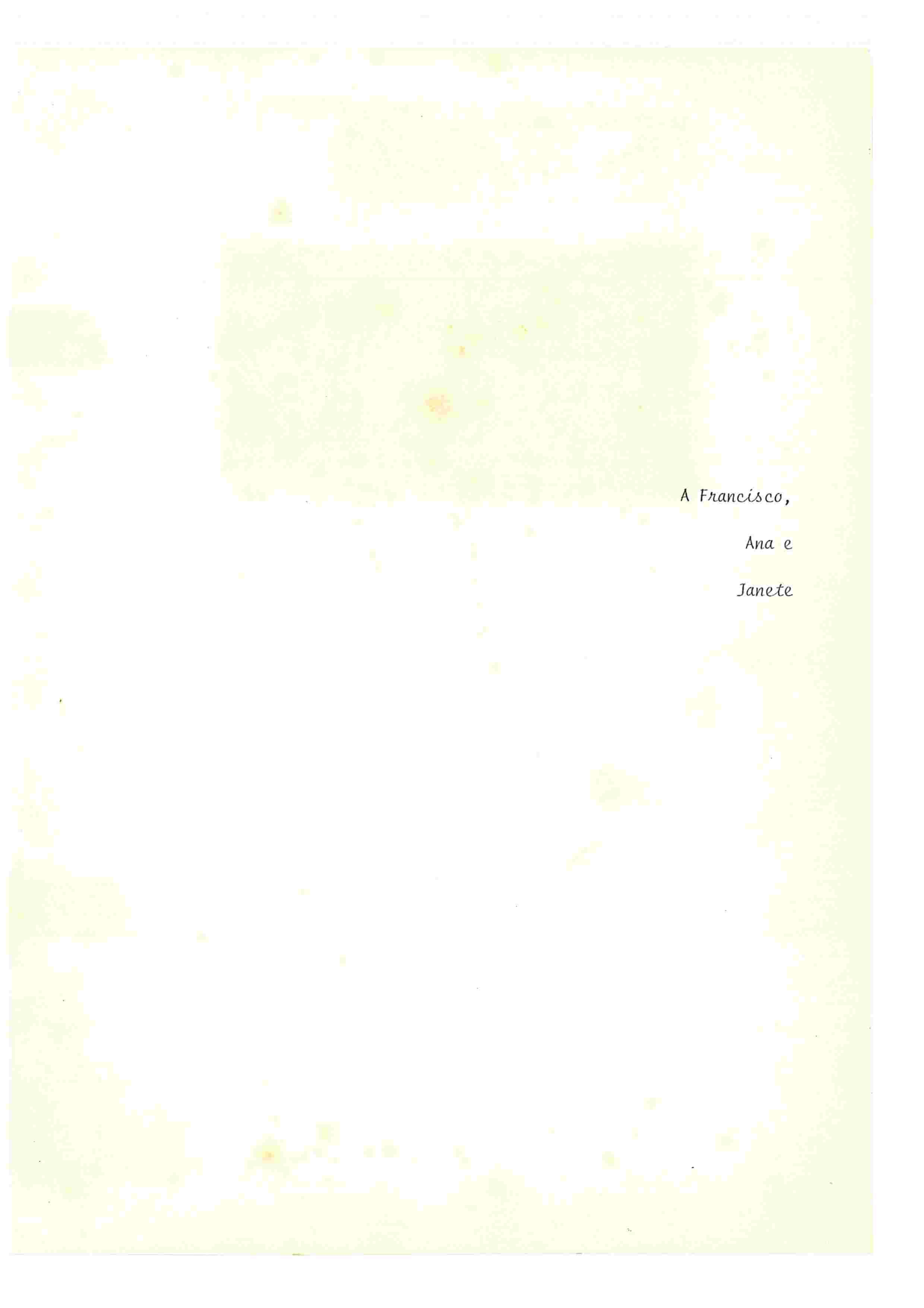
ALGUNS ASPECTOS DA METODOLOGIA
DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA

DALTON FRANCISCO DE ANDRADE

DISSERTAÇÃO APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE
EM
ESTATÍSTICA
ORIENTADOR:
PROF. DR. CLÓVIS DE ARAÚJO PERES

- SÃO PAULO, SETEMBRO DE 1977 -

- o -



A Francisco,

Ana e

Janete

AGRADECIMENTOS

Expressamos os nossos sinceros agradecimentos a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho, em especial

Ao Professor Clóvis de Araújo Peres, que além de orientador, foi um grande amigo em todos os momentos, transmitindo-nos com muita dedicação seus conhecimentos e experiência;

Ao Professor Wilton de Oliveira Bussab, pelo seu apoio constante e pelas sugestões apresentadas durante a elaboração deste trabalho;

Ao Professor José Norberto Walter Dachs pelas sugestões apresentadas na conclusão deste trabalho;

À Maria Iara Azevedo, pela grande colaboração prestada na parte de computação eletrônica, realizada no Centro de Computação Eletrônica da Universidade de São Paulo;

Aos amigos do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo, e

Ao Sr. João Baptista Esteves de Oliveira, pela dedicação prestada no trabalho de datilografia.

Dalton F. de Andrade

PREFÁCIO

Neste trabalho procuramos apresentar um estudo sobre a Metodologia de Superfície de Resposta, no sentido da determinação de condições ótimas, tomando como base os trabalhos desenvolvidos por Box e seus associados.

No capítulo 1 apresentamos uma idéia geral sobre o assunto em estudo, com uma nota histórica e o objetivo principal do trabalho.

No capítulo 2 introduzimos o modelo matemático adequado, alguns resultados estatísticos e a necessidade da separação do estudo da determinação de condições ótimas, em duas etapas.

Nos capítulos 3 e 4 discutimos com detalhes estas duas etapas do processo.

No capítulo 5 apresentamos vários tipos de Planejamentos que podem ser usados na parte experimental e, no capítulo 6, apresentamos um resumo de como o problema pode ser resolvido através do uso dos resultados obtidos nos capítulos 3, 4 e 5. Também mostramos, com um exemplo prático, como o computador eletrônico pode ser usado nos cálculos envolvidos no processo.

Í N D I C E

Cap. 1 - INTRODUÇÃO.	1
1.1 - O Problema.	1
1.2 - O que é Metodologia de Superfície de Resposta?.	1
1.3 - Nota Histórica.	2
1.4 - Objetivo do Trabalho.	5
Cap. 2 - MODELO MATEMÁTICO E CONCEITOS GERAIS.	7
2.1 - A Função de Resposta.	7
2.2 - A Superfície de Resposta.	8
2.3 - A Região Experimental ou de Interesse	10
2.4 - Representação Polinomial de Superfície de Resposta	10
2.5 - O Planejamento.	12
2.6 - Estimacão dos Coeficientes.	14
2.7 - A Natureza de Possível Viés na Estimacão.	16
2.8 - Métodos para Obtenção de Condições Ótimas	18
Cap. 3 - O MÉTODO DE MÁXIMA INCLINAÇÃO ASCENDENTE.	20
3.1 - Introduçãõ.	20
3.2 - O Método de Máxima Inclinaçãõ Ascendente.	20
3.3 - Procedimento Quando Alguns Fatores Produzem Pequenos Efeitos	23
3.4 - Mais de um Pico	24
3.5 - A Técnica de Máxima Inclinaçãõ Ascendente Através de um Exemplo.	24
3.5.1 - O primeiro passo.	25
3.5.2 - O segundo passo	30
CAP. 4 - REGIÃO QUASE-ESTACIONÁRIA	36
4.1 - Introduçãõ.	36
4.2 - Estimacão dos Coeficientes.	38
4.3 - Reduçãõ à Forma Canônica	43
4.4 - Alguns Sistemas de Contornos Gerados por Equações de Segundo Grau em Duas e Três Variáveis	46
4.5 - Um Exemplo Mostrando uma Elevaçãõ Crescente	52
CAP. 5 - O PLANEJAMENTO.	56
5.1 - Introduçãõ.	56
5.2 - Matriz de Momentos.	57
5.3 - Planejamentos Fatoriais	58

5.4 - Planejamentos Compostos	62
5.4.1 - Planejamentos compostos ortogonais.	65
5.4.2 - Planejamentos compostos simétricos não-ortogonais	68
5.5 - Planejamentos Rotacionáveis	68
5.5.1 - A função de variância e planejamento rotacionável	69
5.5.2 - Planejamentos rotacionáveis de primeira ordem	71
5.5.3 - Planejamentos rotacionáveis de segunda ordem.	74
5.6 - Outros Critérios para a Construção de Planejamentos de Primeira e Segunda Ordens.	76
CAP. 6 - COMENTÁRIOS GERAIS.	81
BIBLIOGRAFIA	86

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 - O PROBLEMA

Em muitas áreas, como por exemplo, Biologia, Botânica, Agronomia, Ecologia, Psicologia, Química e outras, o pesquisador frequentemente se depara com o problema de relacionar a influência de muitas variáveis (ou fatores) quantitativas que afetam uma ou mais respostas.

Na maioria das vezes o relacionamento desejado entre resposta e os fatores é aquele que determina a combinação dos níveis dos fatores, que dão uma resposta máxima ou mínima; ou ainda, dependendo do objetivo do pesquisador, o relacionamento entre várias respostas com os mesmos fatores e neste caso ele pode querer maximizar algumas respostas e minimizar outras. Neste caso, a situação mais comum é quando ele está interessado em estudar duas respostas com o objetivo de maximizar uma e minimizar outra.

Recentemente revistas especializadas nas áreas citadas acima, tem dado ênfase ao uso de Metodologia de Superfície de Resposta para estudar este tipo de relacionamento.

1.2 - O QUE É METODOLOGIA DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA?

Metodologia de Superfície de Resposta é uma técnica estatística, composta por planejamento e análise de experimentos, que procura relacionar respostas com os níveis de

fatores quantitativos que afetam as respostas. Por exemplo: em Química a resposta pode ser produção, pureza ou custo de ácido sulfúrico, e os fatores quantitativos que afetam a resposta podem ser pressão, temperatura de reação e quantidade de um determinado solvente utilizado na experiência; em Psicologia a resposta pode ser o resultado de um teste e os fatores, tempo de estudo e grau de Q.I.; em Agronomia, o pesquisador pode ter como resposta a produção de batata e como fatores as quantidades de nitrogênio e de fósforo que entram na composição do adubo a ser utilizado na plantação.

Este relacionamento, entre respostas e níveis de fatores, procura entre outros, atingir um dos objetivos:

- a) estabelecer uma descrição de como uma resposta é afetada por um número de fatores em alguma região de interesse;
- b) estudar e explorar a relação entre várias respostas e extremos obrigatórios. Por exemplo, em terapia de droga pode-se ter três respostas: efeito terapêutico, náusea e toxicidade, e pretende-se localizar o ponto de máximo efeito terapêutico, com náusea e toxicidade mantidos dentro de limites aceitáveis;
- c) localizar e explorar a vizinhança de resposta máxima ou mínima.

Como os problemas em c) frequentemente supõem aqueles em a) e b) só consideraremos esta aplicação em maiores detalhes.

1.3 - NOTA HISTÓRICA

As primeiras idéias de Metodologia de Superfície de Resposta apareceram no século passado, através de trabalhos de

pesquisas práticas.

Estas primeiras idéias de Superfície de Resposta foram ventiladas em estudos que envolviam Curvas de Crescimento, Análise de Próbites (*Probit Analysis*) e relacionamento entre produção e fertilizantes em Agronomia, sendo que o termo Superfície de Resposta apareceu pela primeira vez em estudo do último tipo acima.

Neste desenvolvimento primitivo, o planejamento de experimentos para investigar, especificamente, curvas e superfície de resposta, não foi discutido mas, o desenvolvimento de planejamentos fatoriais complexos, foi claramente sugerido por um interesse em superfície de resposta e forneceu a base sobre a qual, as últimas pesquisas em planejamento de experimentos para superfície de resposta, estão asentadas.

Com base nestas idéias e nos artigos de Hotelling (1941) e Friedman e Savage (1947), sobre o problema de obtenção experimental de condições ótimas, Box e Wilson em 1951 publicaram o artigo *On the Experimental Attainment of Optimum Conditions*, o qual muitos consideram como o marco inicial de Metodologia de Superfície de Resposta.

Neste artigo eles discutiram planejamentos com o propósito de determinar, usando o menor número possível de observações, o ponto de resposta ótima. As performances de alguns planejamentos experimentais foram comparadas e foi introduzido pela primeira vez o conceito de Planejamentos Compostos. Também discutiram o uso, em uma primeira fase, do método de Máxima Inclinação Ascendente (*Steepest Ascent*) na procura de uma região Quase-estacionária (*Near-stationary*) em torno do ótimo e, como uma segunda fase, o estudo da na-

tureza desta região pesquisada reduzindo a equação ajustada na sua forma canônica.

A suposição dominante do artigo é que a resposta pode ser aproximada, em uma região de interesse, por um polinômio nos níveis de vários fatores ou variáveis envolvidos.

Box e Wilson estavam interessados primeiramente em problemas de estimar condições ótimas em investigações químicas, contudo eles expressaram a esperança que os métodos seriam de grande valor em outros campos onde a experimentação é sequencial e o erro razoavelmente pequeno.

As mais proveitosas aplicações dos métodos descritos neste artigo foram em campos da Química e Engenharia Química. Trabalhos em Ciências Bioquímicas e Farmacêuticas têm usado e desenvolvido o método de Máxima Inclinação Ascendente mas tem, de algum modo, ignorado o planejamento de experimento.

Em contraste, as idéias do método de Máxima Inclinação Ascendente não tem sido usadas em trabalhos de pesquisas em Agricultura, talvez pela dificuldade de ter uma experimentação sequencial mas, alguns dos desenvolvimentos em planejamento de experimentos têm suas raízes nas propostas de Box e Wilson.

Este artigo e vários outros escritos por Box e seus associados, depois de 1951, constituem a mais poderosa fonte de idéias na investigação de Superfície de Resposta. Entre os artigos, podemos citar:

- a) Box (1957), que introduziu a idéia de Operação Evolucionária (EVOP);
- b) Box e Hunter (1957), que introduziu o conceito de rotacionalidade, o qual significa que a variância dos coe

ficientes ajustados depende somente da distância do ponto, para o qual a previsão é feita, ao centro do planejamento e não da direção do centro;

- c) Box e Lucas (1959), o primeiro artigo importante na escola de Box para afastar-se do modelo polinomial; e
- d) Box e Draper (1959-1963), onde são discutidas as várias razões para se escolher diferentes planejamentos na investigação de uma Superfície de Resposta.

Tomando como base os artigos em d), Karson, Manson e Hader (1969) sugerem uma modificação para a escolha do planejamento adequado e conseguem melhorar alguns resultados obtidos por Box e Draper.

Neste mesmo período, três outras linhas de pesquisa estatística sobre Metodologia de Superfície de Resposta podem ser distinguidas. São elas, Aproximação Estocástica, Análise e Comparação de Curvas de Crescimento. Estas áreas estão bem separadas dos trabalhos de Box e seus associados e todas manifestam, em diversos graus, a tendência usual em pesquisa estatística de tornar-se cada vez mais teórica e divorciada da prática.

Para finalizar, podemos notar que as duas maiores influências nos mais recentes trabalhos sobre Metodologia de Superfície de Resposta têm sido a ênfase sobre modelos não lineares e o crescente uso do computador eletrônico, o qual tem sido um fator importante na escolha dos métodos de ajustamento.

1.4 - OBJETIVO DO TRABALHO

Neste trabalho o objetivo principal será o de descrever com exemplos práticos tirados da literatura o método

de obtenção de resposta máxima ou mínima descrito pela primeira vez por Box e Wilson (1951). Para isto, tomaremos como base artigos escritos por Box e seus associados, alguns artigos que procuram melhorar estas idéias e também vários livros didáticos sendo o mais importante o de Davies (1960).

Procuraremos fazer com que esta descrição seja a mais didática possível supondo para isto alguns conhecimentos de Planejamento de Experimento e Análise de Regressão.

CAPÍTULO 2

MODELO MATEMÁTICO E CONCEITOS GERAIS

2.1 - A FUNÇÃO DE RESPOSTA

De um modo geral, dizer que uma resposta η depende dos níveis $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_K$ de K fatores quantitativos é o mesmo que supor a existência de alguma função ϕ de $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_K$ tal que

$$\eta = \phi(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_K) \quad (2.1)$$

Esta função ϕ é chamada de função de resposta. Então para a u -ésima combinação dos níveis dos K fatores, podemos escrever que

$$\eta_u = \phi(\zeta_{1u}, \zeta_{2u}, \dots, \zeta_{Ku}), \quad u=1, 2, \dots, N \quad (2.2)$$

onde N é o número de combinações dos níveis dos fatores para termos uma aproximação de ϕ .

Na prática, por causa de um erro experimental e , o qual supomos ser normalmente distribuído com média zero e variância σ^2 , para cada uma das N combinações não observamos o verdadeiro valor da resposta η e sim o valor de uma variável aleatória Y , chamada de resposta observada. Então podemos escrever que

$$Y = \eta + e \quad (2.3)$$

com

$$E(Y) = \eta \quad \text{e} \quad \text{Var}(Y) = \sigma^2, \quad (2.4)$$

$\text{Var}(Y) = \sigma^2$ suposta não dependendo do correspondente valor de $(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_K)$.

2.2 - A SUPERFÍCIE DE RESPOSTA

É conveniente visualizar geometricamente a relação existente entre a resposta e os níveis dos fatores que afetam esta resposta.

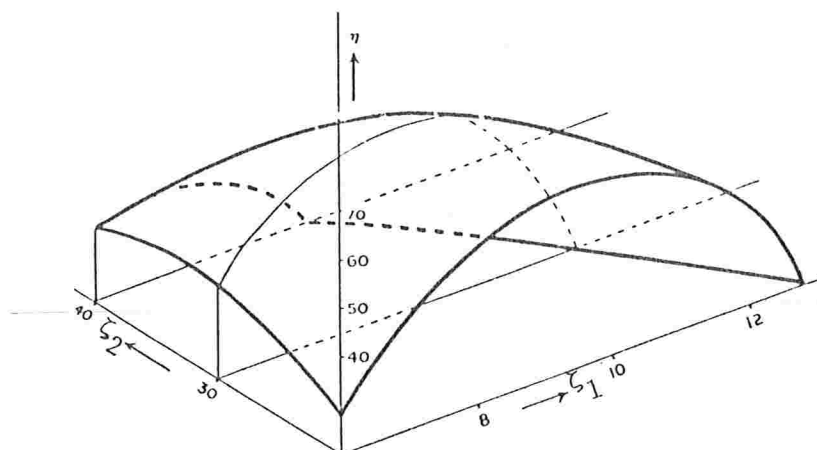


FIG. * 2.1 - Uma Superfície de Resposta

A Superfície de Resposta é uma representação gráfica desta relação. Na figura 2.1 temos um exemplo de uma Superfície de Resposta que representa a relação entre a resposta produção η , medida em porcentagem e os níveis ζ_1 e ζ_2 dos fatores tempo, medido em horas e concentração, medido em porcentagem.

* - Extraída de Davies (1960).

Uma alternativa muito útil para a representação geométrica é o chamado gráfico por contornos. Este gráfico é obtido extraíndo-se linhas de mesma resposta de um gráfico cujas coordenadas representam os níveis dos fatores. Estas linhas são os contornos de resposta. Na figura 2.2, construída a partir da figura 2.1, temos um exemplo de um gráfico por contornos.

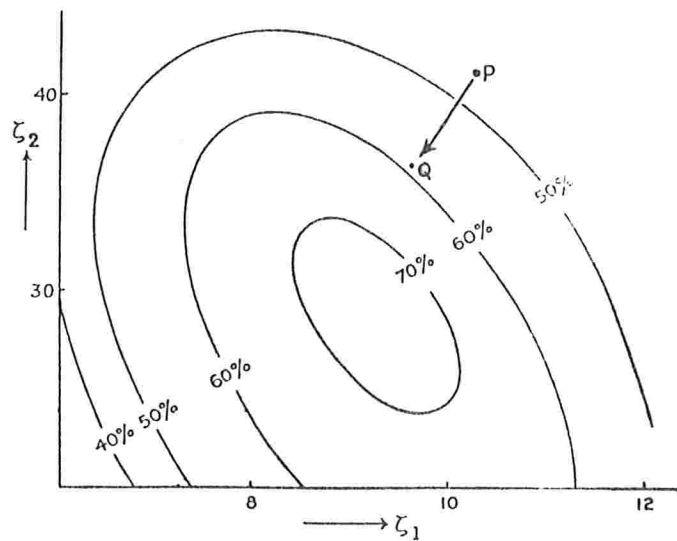


FIG. * 2.2 - Contornos de resposta da figura 2.1

Para uma melhor compreensão da relação existente entre as figuras 2.1 e 2.2, podemos imaginar, na superfície representada na figura 2.1, um plano passando perpendicularmente ao eixo η pelo ponto 50. A intersecção deste plano com a superfície nos dá a linha de contorno correspondente a 50% na figura 2.2. Uma das vantagens deste tipo de representação é que a relação pode ser visualizada no caso de termos

* - Extraída de Davies (1960)

três fatores. Como exemplo, a figura 2.3 mostra uma possível superfície por contornos no espaço tri-dimensional dos fatores.

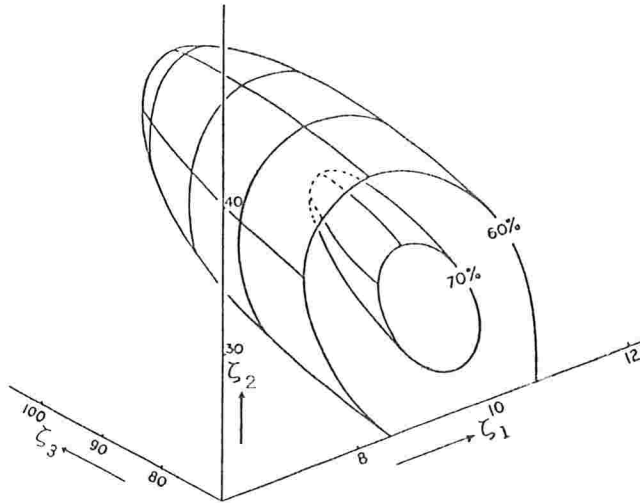


FIG.* 2.3 - Superfície por contornos

2.3 - A REGIÃO EXPERIMENTAL OU DE INTERESSE

Como veremos nos próximos capítulos, estaremos sempre interessados em estudar a relação (2.1), não em toda a região O , chamada de Região de Operabilidade, do espaço K -dimensional dos fatores e sim em uma determinada região R , do espaço dos fatores, correspondente "as combinações de potencial interesse" dos níveis dos K fatores. Esta região R contida em O é chamada de Região Experimental ou de Interesse.

2.4 - REPRESENTAÇÃO POLINOMIAL DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA

Na ausência de um conhecimento a priori da verdade i

* - Extraída de Davies (1960).

ra forma da função de resposta ϕ , uma representação local pode ser obtida ajustando-se um polinômio em $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_K$, no qual todos os termos até uma determinada ordem d estão incluídos. Esta suposição é equivalente a suposição de que a verdadeira função de resposta ϕ pode localmente ser aproximada por sua série de Taylor ignorando-se termos de ordem maiores do que d .

As duas formas mais comuns são:

o polinômio de primeira ordem

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 \zeta_1 + \beta_2 \zeta_2 + \dots + \beta_K \zeta_K \quad (2.5)$$

e o polinômio de segunda ordem

$$\begin{aligned} \eta = \beta_0 + \beta_1 \zeta_1 + \dots + \beta_K \zeta_K + \beta_{11} \zeta_1^2 + \dots + \\ + \beta_{KK} \zeta_K^2 + \beta_{12} \zeta_1 \zeta_2 + \dots + \beta_{K-1, K} \zeta_{K-1} \zeta_K \end{aligned} \quad (2.6)$$

Os elementos dos conjuntos

$$\{\beta_0\}, \{\beta_1, \dots, \beta_K\} \text{ e } \{\beta_{11}, \dots, \beta_{KK}, \beta_{12}, \dots, \beta_{K-1, K}\}$$

são chamados de coeficientes ou efeitos de ordens zero, um e dois, respectivamente. Como exemplo, no caso de termos dois fatores ($K=2$) a relação (2.5) fica reduzida a expressão

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 \zeta_1 + \beta_2 \zeta_2 \quad (2.7)$$

que é a equação do plano, β_1 representando a inclinação do plano na direção do primeiro fator e β_2 a inclinação na direção do segundo fator.

Em algumas situações, nenhuma das duas aproximações descritas em (2.5) e (2.6) representam bem ϕ , nestes casos devemos usar polinômios de ordens maiores do que dois. Por exemplo, o polinômio de terceira ordem, o qual é constituído acrescentando-se os termos

$$\beta_{111} \zeta_1^3, \dots, \beta_{KKK} \zeta_K^3, \beta_{123} \zeta_1 \zeta_2 \zeta_3, \dots, \beta_{K-2, K-1, K} \zeta_{K-2} \zeta_{K-1} \zeta_K$$

*ou fazer transformaç
dos variáveis
e/ou da
resposta.*

na expressão dada por (2.6).

Mead e Pike (1975) discutem outras formas de expressar a função de resposta ϕ só que com uma preocupação toda voltada para experimentos biológicos.

No desenvolvimento deste trabalho sempre usaremos a aproximação polinomial para ϕ .

2.5 - O PLANEJAMENTO

O planejamento do experimento representa uma parte crucial na investigação de Superfície de Resposta. A escolha do planejamento consiste, basicamente, na escolha das N , N não muito grande, combinações dos níveis dos K fatores que fazem com que a aproximação usada para ϕ seja adequada ou que permitam detectarmos uma falta de ajustamento na aproximação utilizada.

No capítulo 5 faremos uma discussão detalhada, de como obter o melhor tipo de planejamento para cada situação. Estas situações surgem quando utilizamos as aproximações (2.5) e (2.6), cujos planejamentos correspondentes chamaremos de planejamentos de primeira e segunda ordens, respectivamente.

Na literatura sobre o assunto, quando a aproximação usada para ϕ é polinomial, podemos notar que planejamentos bastante comuns são os Planejamentos Fatoriais 2^K e 3^K , os Planejamentos Fracionários

$$\frac{1}{2^p} 2^K \text{ e } \frac{1}{3^p} 3^K \quad (K > p)$$

e os Planejamentos Compostos desenvolvidos por Box e Wilson (1951).

Apesar da escolha do planejamento adequado ser uma

fase anterior aos métodos de obtenção de condições ótimas, neste trabalho faremos uma inversão nesta ordem. A justificativa para este procedimento é que o conhecimento dos métodos tornam mais claros os problemas que teremos de enfrentar na escolha do planejamento.

Nos capítulos 3 e 4 aparecerão nos exemplos determinados planejamentos que serão utilizados sem discussão já que os mesmos serão usados apenas para exemplificar os métodos.

Por conveniência, daqui para frente, usaremos em vez de $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_K$ a representação x_1, x_2, \dots, x_K para os níveis dos K fatores. Os valores dos x_i 's ($i=1, \dots, K$) são determinados a partir da relação

$$x_i = \frac{\zeta_i - \zeta_i^0}{S_i}, \quad i=1, \dots, K \quad (2.8)$$

onde ζ_i corresponde ao nível do i-ésimo fator, ζ_i^0 ao nível base do i-ésimo fator, ou seja, o valor do i-ésimo fator correspondente ao centro do planejamento, e S_i é um escalar convenientemente escolhido^(*). Com esta transformação, podemos escrever (2.5) e (2.6) nas formas

$$\eta = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_K x_K \quad (2.9)$$

e

$$\begin{aligned} \eta = & \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_K x_K + \beta_{11} x_1^2 + \dots + \\ & + \beta_{KK} x_K^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \dots + \beta_{K-1, K} x_{K-1} x_K \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde x_0 é uma variável "dummy" igual a 1.

(*) - Nas secções subsequentes iremos nos referir a S_i como "unidade".

2.6 - ESTIMAÇÃO DOS COEFICIENTES

Com o planejamento escolhido, ou seja, conhecendo as N combinações dos níveis dos fatores, podemos observar as respostas Y_u ($u=1, \dots, N$) correspondentes a cada uma das N combinações. Com estes dados, o nosso objetivo será estimar os coeficientes envolvidos na expressão que representará ϕ .

Seja $D_{N \times K}$ uma matriz, chamada de matriz de planejamento cujos elementos são os níveis dos K fatores em cada u ma das N combinações. Os elementos x_{1u}, \dots, x_{Ku} da u -ésima linha de D são as coordenadas do ponto no espaço K -dimensional dos fatores.

Seja $Y_{N \times 1}$ um vetor coluna cujos elementos são as respostas observadas nos N ensaios.

Suponha que a representação polinomial contenha L termos, ou seja

$$Y = \sum_{j=1}^L \beta_j x_j + e_j, \quad (2.11)$$

onde os x_j 's são chamados de variáveis independentes. Denotando por $X_{N \times L}$ a matriz das variáveis independentes, construída a partir de D , podemos escrever que

$$Y = X\beta + e \quad (2.12)$$

sendo $\beta_{L \times 1}$ um vetor coluna, cujos elementos são os coeficientes desconhecidos. Para obtermos as estimativas destes coeficientes usaremos o Método de Mínimos Quadrados.

Com as suposições feitas sobre e e se X tem posto igual a L , é bem conhecido que, por exemplo veja Searle (1971),

- i) estimadores não viesados e de variância mínima dos elementos do vetor β , são dados pelo vetor coluna ($L \times 1$)

$$B = (X'X)^{-1}X'Y; \quad (2.13)$$

ii) a matriz $V_{L \times L}$ de covariância destes estimadores é

$$V = (X'X)^{-1}\sigma^2; \quad (2.14)$$

iii) uma estimativa não viesada de $(N-L)\sigma^2$ é dada pela soma de quadrados residual

$$\begin{aligned} (N-L)S^2 &= (\hat{Y}-Y)'(\hat{Y}-Y) \\ &= Y'Y - B'X'XB. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Em Davies (1960, cap. XI), temos uma forma mais simplificada de estimar os coeficientes pelo Método de Mínimos Quadrados, quando usamos planejamentos fatorial ou fatorial fracionário. A razão desta simplificação se baseia na ortogonalidade do experimento. ^{⇒ Lembrar que X tem posto completo L} Cada estimativa b_j de β_j pode ser calculada separadamente e é dada pela soma, dos produtos das observações com os elementos da apropriada variável independente x_j , dividida pela soma de quadrados dos valores desta variável independente. Também se σ^2 é a variância do erro experimental, a variância dos b_j é dada por σ^2 dividido pela soma dos quadrados dos valores da variável independente, isto é

$$\hat{\beta}_j = b_j = \frac{\sum_{u=1}^N x_{ju} Y_u}{\sum_{u=1}^N x_{ju}^2}, \quad j=1, \dots, L \quad (2.16)$$

e

$$\text{Var}(b_j) = \frac{\sigma^2}{\sum_{u=1}^N x_{ju}^2}, \quad j=1, \dots, L. \quad (2.17)$$

Se conhecermos uma estimativa S^2 de σ^2 , então $\text{Var}(b_j)$ é es-

timada por

$$\widehat{\text{Var}}(b_j) = \frac{S^2}{\sum_{u=1}^N x_{ju}^2}, \quad j=1, \dots, L. \quad (2.18)$$

2.7 - A NATUREZA DE POSSÍVEL VIÉS NA ESTIMAÇÃO

Ao ajustarmos uma expressão como, por exemplo, (2.5) para um conjunto de N pontos experimentais, as estimativas b_j 's dos β_j 's diferem dos verdadeiros valores pelas causas seguintes:

- i) erro experimental na determinação das respostas;
- ii) viés resultante quando ajustamos a função de resposta por uma equação inadequada. Por exemplo, tentar a justar um polinômio de primeira ordem quando a verdadeira aproximação é um polinômio de segunda ordem.

A natureza do viés para qualquer planejamento usado pode ser determinada da seguinte maneira. Suponha que, dentro de uma região do espaço dos fatores, a função de resposta pode ser representada exatamente por uma expressão do tipo (2.11) envolvendo L constantes mas, que o experimentador assume ser possível um ajuste adequado usando uma expressão envolvendo somente $M < L$ destas constantes e, realiza $N \geq M$ ensaios para estimá-las. Então, é errado assumir que

$$\eta = X\beta \quad (2.19)$$

$N \times M$ $M \times 1$

onde X é uma matriz (N×M) e β é um vetor coluna (M×1), quando de fato

$$\eta = X\beta + X_1\beta_1 \quad (2.20)$$

$N \times S$ $S \times 1$

onde X e β são os mesmos de (2.19), X_1 é uma matriz (N×S) e

β_1 é um vetor coluna ($S \times 1$) com $M + S = L$.

Supondo que (2.19) seja verdadeira, os estimadores de mínimos quadrados obtidos são

$$\underset{M \times 1}{B} = \underset{M \times M}{(X'X)^{-1}} \underset{M \times N}{X'} \underset{N \times 1}{Y} \quad (2.21)$$

que em geral são viesados visto que

$$\begin{aligned} E(B) &= (X'X)^{-1} X' \eta \\ &= (X'X)^{-1} X' (X\beta + X_1 \beta_1) \\ &= (X'X)^{-1} X' X \beta + (X'X)^{-1} X' X_1 \beta_1 \\ &= \beta + \underbrace{(X'X)^{-1} X' X_1}_{A} \beta_1 \end{aligned} \quad (2.22)$$

e conseqüentemente

$$\underset{M \times 1}{B} \longrightarrow \beta + A \beta_1, \quad (2.23)$$

sendo que esta notação é usada para indicar que B é um estimador viesado de β . A matriz $A_{M \times S}$ é chamada de matriz de "Aliás". A expressão (2.23) define M relações do tipo

$$b_j \longrightarrow \beta_j + \sum_{t=1}^S \alpha_{jt} \beta_t, \quad (2.24)$$

onde α_{jt} é o elemento da j -ésima linha e t -ésima coluna da matriz A . Então, se os S coeficientes são necessários para descrever a função de resposta, eles podem viesar as estimativas dos M coeficientes que o experimentador supôs serem suficientes. A extensão do viés depende da magnitude dos elementos α_{jt} da matriz A , os quais dependem do planejamento escolhido. No capítulo 5 veremos que uma das condições impostas por Box e Draper (1959) para a escolha do planejamento adequado é justamente a minimização do viés.

2.8 - MÉTODOS PARA OBTENÇÃO DE CONDIÇÕES ÓTIMAS

Como já comentamos na secção 1.2,c), estamos interessados em estudar métodos para localizar e explorar a vizinhança de resposta (ou respostas) máxima ou mínima. As condições ótimas a que nos referimos acima é a combinação (ou combinações) dos níveis dos fatores que nos dará uma resposta máxima ou mínima.

Um possível método pode ser o que chamamos de Método de Rede. Como exemplo, no caso de termos um único fator envolvido, tempo de reação, o nosso problema pode ser resolvido realizando-se uma série de ensaios, usando-se diferentes tempos de reação, de modo a cobrir toda a região experimental. Com as respostas observadas Y , podemos construir um gráfico (resposta \times tempo de reação) e neste gráfico determinar o tempo de reação correspondente a resposta ótima.

Em vez desta solução gráfica, podemos ajustar, pelo Método de Mínimos Quadrados, um polinômio utilizando-se os pontos experimentais. Se usarmos um polinômio de terceira ordem temos

$$\eta = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{111} x_1^3, \quad (2.25)$$

onde x_1 representa o nível do fator tempo de reação. Sejam b_0, b_1, b_{11} e b_{111} os estimadores de mínimos quadrados de $\beta_0, \beta_1, \beta_{11}$ e β_{111} , respectivamente. A expressão ajustada será

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_{11} x_1^2 + b_{111} x_1^3, \quad (2.26)$$

onde \hat{Y} significa a resposta ajustada, que é diferente de η , a verdadeira resposta, e de Y , a resposta observada na realização dos ensaios. Para obtermos as condições ótimas, basta fazer

$$\frac{d\hat{Y}}{dx_1} = b_1 + 2b_{11}x_1 + 3b_{111}x_1^2 = 0 \quad (2.27)$$

e estudar as soluções desta equação.

Quando este procedimento é generalizado para K fatores, ainda podemos utilizar o método descrito acima, só que o número de ensaios necessários para cobrirmos toda a região experimental será muito grande e isto tornará o método inadequado. Por exemplo, se um planejamento fatorial com cinco fatores, cada um com quatro níveis, fosse empregado, seriam necessários $4^5 = 1.024$ ensaios. É claro que este número poderia ser reduzido empregando-se outros tipos de planejamentos (por exemplo: fatorial fracionário) mas, na prática um número mínimo de ensaios seriam necessários para cobrir toda a região de interesse e este número é frequentemente muito grande.

Quando o erro experimental é pequeno, uma pequena sub-região do espaço dos fatores pode ser explorada com poucos pontos experimentais, nestas circunstâncias pequenas mudanças na resposta podem ser detectadas e, dentro da sub-região um polinômio de ordem baixa, contendo uns poucos coeficientes, representará adequadamente a função de resposta. Além disso, desde que os ensaios possam ser conduzidos sequencialmente, a técnica pode ser desenvolvida, de tal modo que os resultados obtidos, examinando-se uma pequena sub-região, podem ser usados para a localização da próxima sub-região, que deve ser estudada ou, em alguns casos, que ensaios adicionais são necessários na presente sub-região.

Na prática o procedimento de obtenção de condições ótimas envolve duas fases. Estas duas fases serão descritas separadamente nos capítulos 3 e 4.

CAPÍTULO 3

O MÉTODO DE MÁXIMA INCLINAÇÃO ASCENDENTE

3.1 - INTRODUÇÃO

Um exemplo dado por Wilde (1964) mostra muito bem a utilidade deste método que foi descrito primeiramente por Box e Wilson (1951).

Considere uma situação na qual desejamos explorar o topo de uma montanha densamente arborizada partindo de uma superfície plana. Mesmo que a densidade da floresta nos impeça de ver o topo, ou mesmo o aspecto geral da montanha, podemos eventualmente atingir o topo (se ela é unimodal) simplesmente ganhando altura a medida que formos andando. Embora qualquer caminho que suba nos leve ao topo, se estamos apressados provavelmente nos moveremos em direções onde a inclinação da montanha é a maior, contanto que não caminhemos em penhascos verticais, nos quais teremos dificuldades em escalar.

Esta idéia simples e intuitiva de escalar forma a base para uma técnica de pesquisa conhecida como O Método de Gradiente ou O Método de Máxima Inclinação Ascendente.

3.2 - O MÉTODO DE MÁXIMA INCLINAÇÃO ASCENDENTE

Como foi dito no fim do capítulo 2, o procedimento

de obtenção de condições ótimas (maximizar^(*) uma resposta) envolve duas fases, uma supondo que as condições iniciais estão afastadas daquelas que maximizam a resposta, que será discutida agora, e a outra quando estamos próximos das condições ótimas, que será discutida no próximo capítulo.

Então, a utilização do Método de Máxima Inclinação Ascendente depende se as condições iniciais estão ou não afastadas daquelas ótimas. Por exemplo, suponha que as condições iniciais estejam representadas pelo ponto P, conforme figura 2.2. Nestas condições a superfície de resposta pode ser representada localmente por um plano inclinado, ou seja

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 \zeta_1 + \beta_2 \zeta_2. \quad (3.1)$$

Utilizando um conjunto adequado de ensaios em uma pequena sub-região em torno do ponto P, podemos estimar, pelo Método de Mínimos Quadrados - cap. 2, secção 2.6., as inclinações β_1 e β_2 deste plano por b_1 e b_2 , respectivamente e, a partir das magnitudes e sinais destas inclinações, calcular a direção de Máxima Inclinação Ascendente. Esta é a direção em ângulo reto para as linhas de contorno (e mostra as quantidades relativas pelas quais os fatores devem variar para dar um incremento máximo na resposta). Nesta direção caminhamos até que o aumento na resposta seja pequeno ou comece a diminuir, por exemplo o ponto Q, e então, tomando como base as condições neste ponto, redeterminamos as inclinações e repetimos o processo. Deste modo, por um procedimento passo a passo, vamos obtendo respostas cada vez mais altas. Este procedimento sozinho não nos localiza um máximo, mas nos leva rapidamente

(*) - O problema poderia ser também resolvido no sentido de minimizar uma resposta, neste caso teríamos O Método de Máxima Inclinação Descendente (Steepest Descent) que é basicamente igual a este só que caminhando no sentido oposto.

ã uma região a qual chamaremos de Quase-estacionária, onde a aproximação por um plano se torna insatisfatória pelo fato de coeficientes (efeitos) de ordens mais altas, particularmente os de segunda ordem, se tornam relativamente mais importantes. Neste caso teremos então que passar para a segunda fase.

Para ilustrar como calcular esta direção, suponha que foi realizado um conjunto adequado de ensaios e que a resposta estimada \hat{Y} tenha sido

$$\hat{Y} = 6,60 + 0,40x_1 - 0,45x_2. \quad (3.2)$$

Os contornos são dados por

$$x_2 = \frac{6,60 - \hat{Y} + 0,40x_1}{0,45} \quad (3.3)$$

cuja representação gráfica é dada pela figura 3.1.

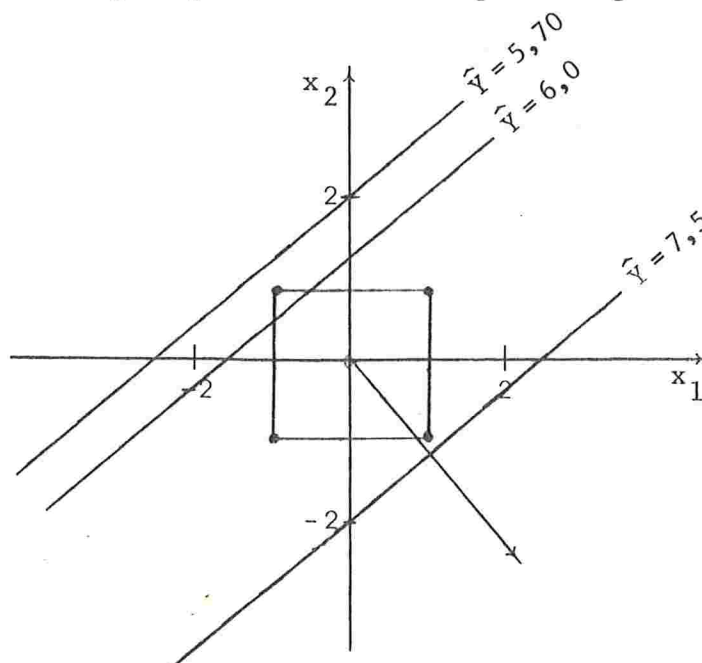


FIG. 3.1 - Contornos da Superfície de Resposta Ajustada com o planejamento fatorial 2^2 utilizado.

Como a inclinação dos contornos é $0,40/0,45 = 8/9$ então a normal terá uma inclinação $-9/8$ e sua equação será

$$\begin{aligned}x_2 - 0 &= -\frac{9}{8}(x_1 - 0) \\x_2 &= -\frac{9}{8}x_1.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Como a maioria de outros procedimentos experimentais, este método não é invariante em relação as escalas nas quais os fatores devem variar. Na prática, estas escalas são fixadas quando escolhermos as quantidades relativas pelas quais os fatores deverão variar no planejamento do experimento. No exemplo dado pela equação (3.2), foi considerado apenas dois fatores, concentração e posição, e utilizou-se as mudanças de $\frac{1}{2}:1$ para $1:1$ na concentração e de 1 polegada para 2 polegadas na posição, ou seja, $S_1=0,25$ e $S_2=0,5$ (Hicks 1966). É claro que a direção de Máxima Inclinação Ascendente calculada será de acordo com estas escalas mas, a falta de invariância para tais mudanças não é uma séria desvantagem, particularmente visto que podemos melhorar a escolha das unidades ao longo do processo, como veremos na próxima seção. Realmente este processo depende bastante da experiência do experimentador, já que uma escolha hábil das unidades, fará com que seja reduzida consideravelmente a quantidade de trabalho necessário ao longo dos passos.

3.3 - PROCEDIMENTO QUANDO ALGUNS FATORES PRODUZEM PEQUENOS EFEITOS

Ao realizarmos o "segundo passo", estamos livres para alterar as unidades escolhidas para a variação dos fatores, se acharmos que isto é necessário. Em particular, se o efeito correspondente a um ou mais fatores é pequeno comparado com os outros efeitos, pode ser que:

- i) O nível base escolhido para este fator é próximo de um máximo condicional, ou seja, um máximo para este fator quando os outros são mantidos constantes, mas, não um máximo para todos os fatores;
- ii) A unidade adotada para este fator é desproporcionalmente pequena;
- iii) O sistema é independente deste fator.

Então, baseado em resultados obtidos no passo anterior, podemos fazer as devidas correções e melhorar a escolha das unidades dos fatores para o próximo passo. Podemos notar também que não só pode ser detectada uma escolha não muito boa das unidades como também a presença ou não de fatores que entraram no estudo. Um exemplo de como estas correções podem ser feitas será dado em 3.5.2.

3.4 - MAIS DE UM PICO

Como foi dito na secção 3.1, quando formos usar este processo devemos ter sempre em mente o fato da montanha ter um ou mais picos. O fato de existir mais de um pico fará com que o processo nos leve a escalar um pico particular, dependendo das condições iniciais estabelecidas para a investigação. Segundo Davies (1960), em investigações de superfícies de resposta, relacionadas com reações químicas, não foi detectada a existência de mais de um pico mesmo onde era suspeitada. Deste fato, parece provável que superfícies que têm mais de um pico indicam uma mudança fundamental no mecanismo da reação.

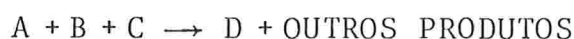
3.5 - A TÉCNICA DE MÁXIMA INCLINAÇÃO ASCENDENTE ATRAVÉS DE UM EXEMPLO

De acordo com os objetivos deste trabalho, mostra-

remos através de um exemplo numérico a técnica de Máxima Inclinação Ascendente.

Como não foi possível a realização de uma parte experimental para o uso desta técnica, foi tirado da literatura este exemplo que pode ser encontrado em Box e Wilson (1951), Davies (capítulo XI, 1960) e em Anderson e McLean (1974, capítulo XIII). Como o objetivo básico, neste capítulo, é relativo ao método de Máxima Inclinação Ascendente, não serão dados detalhes quanto ao tipo de planejamento do experimento utilizado já que este importante tópico será discutido com detalhes no capítulo 5.

O exemplo é relativo a uma reação química do tipo



realizada na presença de um solvente E com o objetivo de maximizar a produção do produto D para uma dada quantidade de A, mantida constante no experimento, o mais caro dos três materiais iniciais. As condições conhecidas davam uma produção de 45% da produção teórica, a produção que poderia ser obtida se tudo de A fosse transformado para D, mas para uma reação desse tipo esperava-se ser possível uma produção de 75%. O erro experimental era esperado ser 1% ou menos. Cinco fatores foram envolvidos: a quantidade ζ_1 de E, a quantidade ζ_2 de C, a concentração ζ_3 de C, o tempo de reação ζ_4 e a quantidade ζ_5 de B.

3.5.1 - O Primeiro Passo

Para a realização do primeiro experimento foram tomados como níveis base, ou condições iniciais, aqueles perto das condições que davam uma produção de 45%. Na tabela

3.1 estão estes níveis e também seus correspondentes valores quando usamos a transformação dada pela relação (2.8).

F A T O R	NÍVEL DE FATOR		
	-1	0	+1
ζ_1 : quantidade de E em C.C.	200	225	250
ζ_2 : quantidade de C em mol/mol de A	4,0	4,25	4,5
ζ_3 : concentração de C em %	90	91,5	93
ζ_4 : tempo de reação em horas	1	1,5	2
ζ_5 : quantidade de B em mol/mol de A	3,0	3,25	3,5

TABELA 3.1 - Níveis dos fatores para o primeiro experimento

Podemos notar que o centro do planejamento (0,0,0,0,0) foi escolhido como sendo (225; 4,25; 91,5; 1,5; 3,25) e que os escalares (S_1, S_2, S_3, S_4, S_5) ou seja, as unidades são (25; 0,25; 1,5; 0,5; 0,25).

Tendo em vista que as condições iniciais estão longe das condições ótimas (máximo), suposição feita anteriormente, podemos então supor que os efeitos de até primeira ordem são dominantes e que os efeitos de ordens maiores podem ser ignorados neste primeiro passo. Como a suposição de considerarmos só efeitos de até primeira ordem implica em se ter que estimar seis constantes, $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5$ e que havia a possibilidade da existência de interação entre os fatores ζ_1 e ζ_3 , foi produzido um experimento com oito ensaios. Estes foram arranjados de modo a formar um planejamento fatorial fracionário $\frac{1}{4} 2^5$ tomando-se como relações definidoras

$$x_4 = x_1 x_2 x_3 \quad \text{e} \quad x_5 = -x_2 x_3,$$

de modo que o efeito relativo a interação entre ζ_1 e ζ_3 não ficasse confundido com nenhum efeito de primeira ordem. O método de construção deste planejamento pode ser encontrado em vários livros, por exemplo Davies (1960, capítulo X).

O planejamento escolhido e as produções (respostas) Y observadas na realização dos ensaios estão dadas na tabela 3.2.

ENSAIOS	COMBINAÇÃO DOS TRATAMENTOS	NÍVEIS DOS FATORES						PRODUÇÃO (%) Y
		x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	
1	(1)	1	-1	-1	-1	-1	-1	34,4
2	cde	1	-1	-1	1	1	1	51,6
3	bde	1	-1	1	-1	1	1	31,2
4	bc	1	-1	1	1	-1	-1	45,1
5	ad	1	1	-1	-1	1	-1	54,1
6	ace	1	1	-1	1	-1	1	62,4
7	abe	1	1	1	-1	-1	1	50,2
8	abcd	1	1	1	1	1	-1	58,6

TABELA 3.2 - O primeiro experimento

Baseado nestas informações e nas relações (2.16) e (2.17), foram obtidas as estimativas dos efeitos, que estão dadas abaixo.

$$\begin{aligned}
 b_0 &\rightarrow \beta_0 + (\beta_{11} + \beta_{22} + \beta_{33} + \beta_{44} + \beta_{55}) = 48,5 \pm 0,4 \\
 b_1 &\rightarrow \beta_1 + (-\beta_{45}) = 7,9 \pm 0,4 \\
 b_2 &\rightarrow \beta_2 + (-\beta_{35}) = -2,2 \pm 0,4 \\
 b_3 &\rightarrow \beta_3 + (-\beta_{25}) = 6,0 \pm 0,4 \\
 b_4 &\rightarrow \beta_4 + (-\beta_{15}) = 0,4 \pm 0,4 \\
 b_5 &\rightarrow \beta_5 + (-\beta_{14} - \beta_{23}) = 0,4 \pm 0,4 \\
 b_{13} &\rightarrow (\beta_{13} + \beta_{24}) = -1,8 \pm 0,4 \\
 b_{12} &\rightarrow (\beta_{12} + \beta_{34}) = 0,2 \pm 0,4
 \end{aligned}$$

As estimativas estão seguidas de seus erros padrões, calculados supondo que $\sigma = 1$. Junto com as estimativas dos efeitos estão colocadas entre parênteses os efeitos de segunda ordem que estão confundidos com os de primeira ordem. Supondo que todos os efeitos de segunda ordem, exceto o relativo a interação entre os fatores ζ_1 e ζ_3 , podem ser desprezados nesta fase e comparando este efeito de segunda ordem com os de primeira ordem, podemos concluir que realmente a suposição inicial estava correta, ou seja, que os efeitos de primeira ordem são dominantes e então a aproximação só com efeitos de até primeira ordem é satisfatória. Uma outra forma de verificarmos este resultado seria obter também algumas medidas no centro (0,0,0,0,0) do planejamento e fazer um teste de ajustamento (Lack of Fit). Duncan (1971, página 826) apresenta um exemplo onde mostra um problema deste tipo.

	ζ_1 C.C.	ζ_2 mol.	ζ_3 %	ζ_4 hora	ζ_5 mol.
(1) nível base	225	4,25	91,5	1,5	3,25
(2) unidade	25	0,25	1,5	0,5	0,25
(3) estimativa das inclinações (b) (mudança na produção por unidade)	7,9	-2,2	6,0	0,4	0,4
(4) unidade \times b	197,5	-0,55	9,0	0,2	0,1
(5) variação no nível conforme variação de 10 C.C. em ζ_1	10	-0,028	0,456	0,010	0,005
(6) o caminho de Máxima Inclinação Ascendente representado por uma série de posíveis ensaios nele	225	4,25	91,5	1,5	3,25
	235	4,22	92,0	1,5	3,25
	245	4,19	92,4	1,5	3,26
	255	4,17	92,9	1,5	3,26
	265	4,14	93,3	1,5	3,27
ensaio (9)	275	4,11	93,8	1,6	3,27
	285	4,08	94,2	1,6	3,28
ensaio (10)	295	4,06	94,7	1,6	3,28
	305	4,03	95,1	1,6	3,29

TABELA 3.3 - Cálculo do caminho de Máxima Inclinação Ascendente e subsequentes ensaios nele

Supondo então que os efeitos de primeira ordem são dominantes, temos na tabela 3.3 o cálculo da direção na qual o ganho máximo seria esperado.

Nesta tabela, linha (1) mostra os níveis base dos fatores, linha (2) a unidade, isto é, a mudança que ocorre nos níveis dos fatores correspondente a uma variação de 0 para 1 no espaço do planejamento e linha (3) mostra as inclinações estimadas na suposição de que efeitos de segunda e ordens maiores podem ser ignorados. Os fatores devem então variar na proporção destas estimativas. Assim, nas unidades do planejamento, para cada 7,9 unidades aumentada em x_1 , x_2 deve ser decrescido de 2,2 unidades, x_3 acrescido de 6,0 unidades, x_4 acrescido de 0,4 unidades e x_5 aumentado de 0,4 unidades.

Em termos das unidades de medida originais, para cada $25 \times 7,9$ C.C. que ζ_1 é mudado, ζ_2 deve ser mudado em $0,25 \times (-2,2)$ moles, e assim por diante. Estas mudanças estão dadas na linha (4) e definem a direção de Máxima Inclinação Ascendente no ponto dado pelos níveis base na linha (1). O caminho principal a partir da origem nesta direção pode ser obtido dando um incremento conveniente em um dos fatores (10 C.C. em ζ_1 neste exemplo) e baseado neste incremento calcular as mudanças proporcionais a serem feitas nos outros fatores. Estas mudanças estão dadas na linha (5). Por exemplo, $-0,028 = 10 \times (-0,55)/197,5$. Estas quantidades devem então ser sucessivamente acrescentadas aos níveis base dando o caminho (6). Por causa do grande ganho teoricamente possível, ensaios (9) e (10) foram realizados a uma distância regular das condições iniciais. As produções obtidas foram 80,0% e 79,4% respectivamente. Apesar do segundo valor ser aparentemente menor do que o primeiro, nenhuma significância real poderia ser atribuída a esta diferença e, um segundo experimento foi realizado usando como condições iniciais

as correspondentes ao ensaio (10), como veremos mais adiante.

Como observação podemos dizer que talvez tivesse sido melhor que o ensaio (9) tivesse sido realizado mais próximo das condições iniciais e depois sim, ir se afastando um pouco mais já que a aproximação da verdadeira superfície por um plano é local, ou seja, em torno das condições base.

Antes de passarmos ao segundo passo deve ser notado que o curso das investigações é decidido pelos resultados experimentais. A suposição feita inicialmente sobre a dominância dos efeitos de primeira ordem foi confirmada. Se a análise do primeiro experimento tivesse mostrado que esta suposição fosse insustentável, então deveríamos utilizar o método que irá ser descrito no capítulo 4 onde os efeitos de segunda ordem são levados em conta. De qualquer maneira se a suposição não fosse verdadeira, respostas tão altas não teriam sido obtidas.

Por outro lado, com relação ao problema das unidades escolhidas, podemos notar que tanto o quarto como o quinto fatores apresentaram efeitos não apreciáveis, então com as idéias da secção 3.3, os níveis base e as unidades relativas a estes fatores foram alteradas no segundo passo. Assim, se 3.3 (iii) for verdade, os fatores continuarão tendo pequenos efeitos, ao passo que se 3.3 (i) ou (ii) for verdade, um efeito real poderá ser descoberto.

3.5.2 - O Segundo Passo

Neste segundo passo, não deve existir a preocupação só com os fatores que produziram pequenos efeitos e sim também com os outros. Por exemplo, no problema em discussão deve ser levado em conta que provavelmente estamos próximos de

um ponto estacionário e então os efeitos de primeira ordem vão tornar-se menores fazendo com que progressos, por este método, tornam-se mais difíceis. Isto porque:

- i) As estimativas dos efeitos de primeira ordem seriam relativamente maiores em erro;
- ii) As estimativas dos efeitos de primeira ordem devem ser mais viesadas por "aliasés" de segunda ordem.

No caso das unidades serem aumentadas com a finalidade de reduzir a primeira dificuldade, a segunda seria agravada. Assim, se progresso adicional for possível, sem levar em conta os efeitos de segunda ordem, deve ser feita uma redução nas unidades relativas a estes fatores. Na tabela 3.4 temos os níveis dos fatores para a realização do segundo experimento. Apesar de ter havido uma redução nas unidades dos três primeiros fatores, a relação entre elas ficou quase a mesma daquela do primeiro experimento. Como tínhamos dito anteriormente, uma parte importante deste procedimento é o julgamento do experimentador já que a escolha das unidades não é governada por nenhuma regra.

F A T O R	NÍVEL DO FATOR	
	-1	+1
ζ_1 : quantidade de E	280	310
ζ_2 : quantidade de C, mol/mol de A	3,85	4,15
ζ_3 : concentração de C, %	94	96
ζ_4 : tempo de reação, horas	2	4
ζ_5 : quantidade de B, mol/mol de A	3,5	5,5

TABELA 3.4 - Níveis dos fatores para o segundo experimento

Podemos então notar nesta tabela que o centro do planejamento (0,0,0,0,0) é agora (295; 4; 95; 3; 4,5) sendo que os três primeiros valores correspondem aos valores do ensaio (10) do primeiro experimento e os dois últimos foram afastados daqueles dados no mesmo ensaio e ainda que as unidades (S_1, S_2, S_3, S_4, S_5) são agora (15; 0,15; 1; 1; 1), as três primeiras reduzidas e as duas últimas aumentadas.

O planejamento escolhido e as produções obtidas estão na tabela 3.5.

ENSAIOS	COMBINAÇÃO DOS TRATAMENTOS	NÍVEIS DOS FATORES						PRODUÇÃO (%) Y
		x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	
11	e	1	-1	-1	-1	-1	1	77,1
12	cde	1	-1	-1	1	1	1	69,0
13	bd	1	-1	1	-1	1	-1	75,5
14	bc	1	-1	1	1	-1	-1	72,6
15	ad	1	1	-1	-1	1	-1	67,9
16	ac	1	1	-1	1	-1	-1	68,4
17	abe	1	1	1	-1	-1	1	71,5
18	abcde	1	1	1	1	1	1	63,4

TABELA 3.5 - O planejamento usado no segundo experimento e as produções obtidas

O planejamento é similar ao usado no primeiro experimento só que as relações definidoras são

$$x_4 = x_1 x_2 x_3 \quad \text{e} \quad x_5 = x_1 x_2.$$

Novamente foi tomada a precaução de não confundir nenhum efeito de primeira ordem com o da interação entre ζ_1 e ζ_3 . Também como no primeiro experimento, o efeito relativo a interação entre ζ_1 e ζ_2 foi pequeno (ainda que β_{12} e β_{14} poderiam, é claro, terem se cancelado), neste segundo experimen

to este efeito ficou confundido com o relativo ao quinto fator, já que com isto teremos uma idéia melhor sobre o efeito do quinto fator.

Abaixo temos as estimativas, calculadas usando as relações (2.16) e (2.17) e ainda a suposição $\sigma = 1$.

$$\begin{aligned} b_0 &\rightarrow \beta_0 + (\beta_{11} + \beta_{22} + \beta_{33} + \beta_{44} + \beta_{55}) = 70,7 \pm 0,4 \\ b_1 &\rightarrow \beta_1 + (\beta_{25}) = -2,9 \pm 0,4 \\ b_2 &\rightarrow \beta_2 + (\beta_{15}) = 0,1 \pm 0,4 \\ b_3 &\rightarrow \beta_3 + (\beta_{45}) = -2,3 \pm 0,4 \\ b_4 &\rightarrow \beta_4 + (\beta_{35}) = -1,7 \pm 0,4 \\ b_5 &\rightarrow \beta_5 + (\beta_{12} + \beta_{34}) = -0,4 \pm 0,4 \\ b_{13} &\rightarrow (\beta_{13} + \beta_{24}) = 0,4 \pm 0,4 \\ b_{23} &\rightarrow (\beta_{23} + \beta_{14}) = -0,4 \pm 0,4 \end{aligned}$$

Comparando-se estas estimativas com as obtidas no primeiro experimento podemos notar que:

- i) A produção média b_0 é muito maior, ainda que não tão alta como o valor 79,9% do ensaio (10). Uma causa disto é a curvatura da superfície. As medidas de curvatura β_{11} , β_{22} , etc., são todas negativas perto de um máximo e então b_0 , a média, será em consequência um estimador negativamente viesado de β_0 , a produção no centro do planejamento.
- ii) Os efeitos b_1 , b_2 e b_3 mudaram todos de sinal, isto sugere que os níveis destes fatores foram movidos para muito longe das primeiras condições iniciais e que é necessário retrocedê-los.
- iii) Como já foi dito anteriormente, tanto o nível base como a unidade relativa ao quarto fator foi mudado e isto acarretou um grande valor negativo para a estimativa de β_4 o que indica que o pequeno valor encontrado no primeiro experimento foi devido a sua proximidade

dade com um máximo condicional. O sinal desta estimativa indica também que devemos retroceder, em relação ao nível base, para este fator.

- iv) Apesar das mudanças feitas tanto na unidade quanto no nível base do quinto fator, o valor encontrado para a estimativa de β_5 ainda é pequeno, o que sugere que o quinto fator não parece importante nesta região do espaço dos fatores.

Na tabela 3.6, temos o caminho de Máxima Inclinação Ascendente e subsequentes ensaios nele.

	ζ_1 C.C.	ζ_2 mol.	ζ_3 %	ζ_4 hora	ζ_5 mol.
(1) nível base	295,0	4,0	95,0	3,0	4,5
(2) unidade	15	0,15	1	1	1
(3) estimativa das inclinações (b) (mudança na produção por unidade)	-2,9	0,1	-2,3	-1,7	-0,4
(4) unidade \times b	-43,5	0,015	-2,3	-1,7	-0,4
(5) variação no nível conforme variação de -10 C.C. em ζ_1	-10	0,003	-0,529	-0,391	-0,092
(6) O caminho de Máxima Inclinação Ascendente representado por uma série de possíveis ensaios nele	295	4,0	95,0	3,0	4,5
ensaio (19)	285	4,0	94,5	2,6	4,4
	275	4,0	93,9	2,2	4,3
ensaio (20)	265	4,0	93,4	1,8	4,2
ensaio (21)	255	4,0	92,8	1,4	4,1

TABELA 3.6 - Cálculo do caminho de Máxima Inclinação Ascendente e subsequentes ensaios nele.

Ensaio (19), (20) e (21) realizados ao longo do caminho de

ram produções de 80%, 84% e 81,5% respectivamente. Segundo este método, o próximo passo seria considerar as condições do ensaio (20) como condições iniciais para um próximo passo, mas ainda segundo Davies (1960), isto foi feito considerando só como fatores de interesse ζ_1 e ζ_3 , provavelmente pelo fato de terem dado, anteriormente, os maiores efeitos. Foi usado um planejamento fatorial 2^2 e os efeitos de primeira ordem encontrados foram valores muito próximos de zero e assim foi concluído que nesta altura, efeitos de ordens maiores deveriam ser levados em conta, o que implicaria, em fazer não mais a suposição de que a superfície possa ser representada só por efeitos de até primeira ordem e sim por uma outra representação, que envolva também efeitos de segunda ordem, por exemplo. Este tipo de análise constitui, a segunda fase do procedimento de obtenção de condições ótimas que será estudada no próximo capítulo.

CAPÍTULO 4

REGIÃO QUASE-ESTACIONÁRIA

4.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo assumiremos que as condições iniciais, obtidas ou através do Método de Máxima Inclinação Ascendente ou já no início da investigação, estão localizadas numa sub-região do espaço dos fatores, dentro da qual os efeitos de primeira ordem são pequenos comparados com os de segunda ordem e o nosso objetivo será o de estudarmos a natureza da superfície de resposta, aproximada agora por um polinômio de segunda ordem^(*).

O fato de uma região ser Quase-estacionária, isto é, a superfície de resposta estar localmente próxima de um patamar, não significa necessariamente que estamos próximos de um máximo, conforme figura 4.1,c. É claro que se a região foi pesquisada através do Método de Máxima Inclinação Ascendente, não podemos estar próximos de um mínimo, mas frequentemente acontece que a superfície contém uma elevação a qual pode ser estacionária, como na figura 4.1,b ou lentamente crescente, como na figura 4.1,c. Outra possibilidade é que as condições iniciais pesquisadas estão próximas de um minimax (ponto de sela) na qual a resposta é um mínimo para uma direção e um máximo para outra, como na figura 4.1,d.

(*) - Box e Youle (1955) citam dois artigos onde foi usada uma aproximação envolvendo efeitos de terceira ordem.

A descoberta da existência e a natureza de elevações, é de grande importância prática, não somente porque em exemplos tais como figura 4.1,c é possível seguir uma elevação crescente para condições de resposta mais alta, mas também porque quando uma "elevação estacionária" como na figura 4.1,b ocorre, não existe um único processo ótimo mas uma série de processos produzindo aproximadamente respostas iguais.

Então, quando estamos em uma região Quase-estacionária desejamos saber se estamos na vizinhança de:

- i) um máximo verdadeiro como na figura 4.1a, e neste caso estimar a sua posição;
- ii) uma elevação como na figura 4.1b ou 4.1c, e neste caso determinar sua direção e inclinação;
- iii) um minimax como na figura 4.1,d, e neste caso saber em qual direção devemos seguir para sair dela a fim de obtermos melhores respostas.

Para o estudo da natureza da superfície de resposta, um polinômio de segunda ordem, pelo menos, deve ser ajustado. Neste trabalho só usaremos o de segunda ordem.

Dois problemas surgem: primeiro, são necessários arranjos experimentais adequados que nos darão eficientes estimativas de todos os efeitos de até segunda ordem, estudaremos isto no capítulo 5 e, segundo, são necessários métodos adequados para que torne possível reconhecer a natureza e as características da superfície ajustada. Para este segundo problema, uma solução muito útil, é a obtenção da forma canônica da equação ajustada, a qual veremos na seção 4.3. Antes disso discutiremos algumas idéias sobre como obter as estimativas dos coeficientes do polinômio de segundo grau.

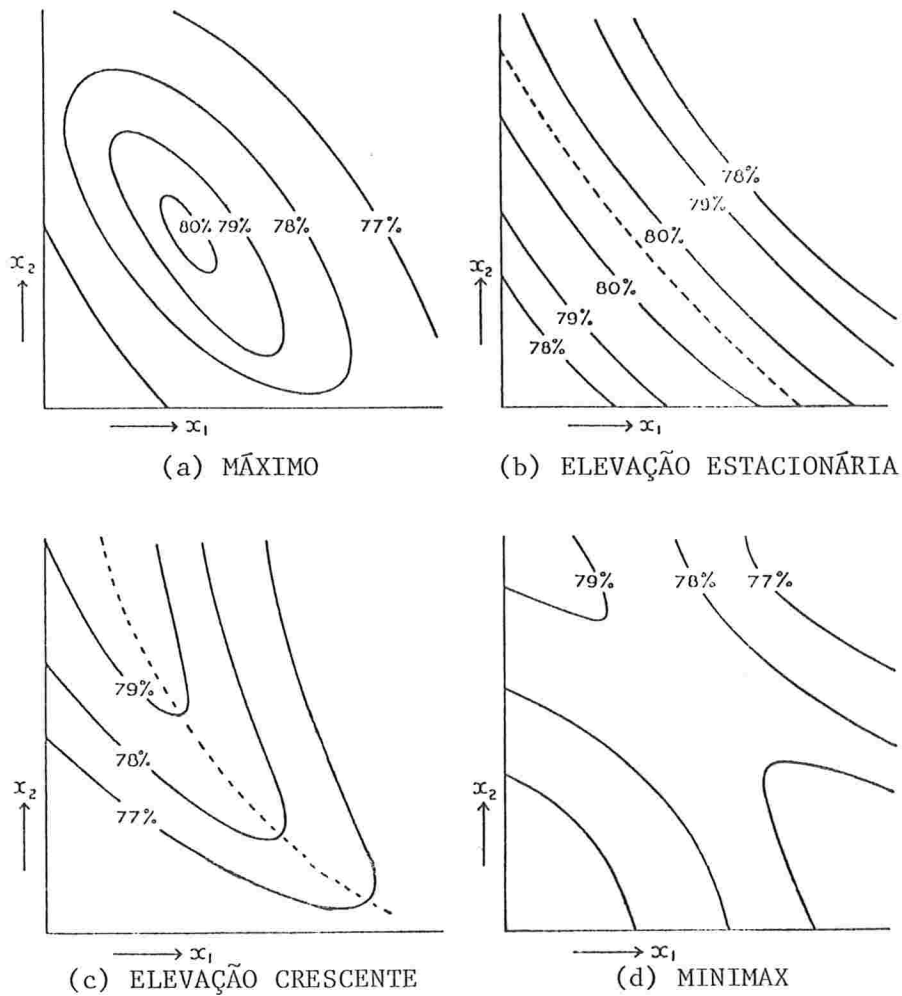


FIGURA 4.1 - Tipos de superficies em uma regiao Quase-estacionaria para dois fatores
Extraida de Davies, 1960.

4.2 - ESTIMAAO DOS COEFICIENTES

Como dissemos no capitulo 2, seccao 2.6, quando usamos planejamento fatorial, o modo de estimar os coeficientes fica simplificado por causa da ortogonalidade do planejamento. No caso de termos que estimar os coeficientes

$\beta_{11}, \beta_{22}, \dots, \beta_{KK}$, não podemos usar este fato e calcular separadamente a estimativa de cada efeito, sem antes fazer uma modificação, porque a coluna relativa a x_K^2 não será ortogonal a coluna relativa a $x_{K'}^2$, ($K \neq K'$). Por exemplo, suponha que desejamos aproximar a verdadeira superfície por uma expressão do tipo

$$\eta = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 \quad (4.1)$$

envolvendo dois fatores e que para isto utilizaremos um planejamento fatorial 3^2 . Na tabela 4.1 temos o planejamento e as produções obtidas.

ENSAIOS	NÍVEL DO FATOR		RESPOSTA (%) Y
	x_1	x_2	
1	-1	-1	71,7
2	0	-1	79,2
3	1	-1	80,1
4	-1	0	75,2
5	0	0	81,5
6	1	0	79,1
7	-1	1	76,3
8	0	1	80,2
9	1	1	75,8

TABELA 4.1 - Um planejamento fatorial 3^2 e as produções obtidas

O planejamento dado na tabela 4.1, tem as seguintes propriedades:

$$\sum_{u=1}^9 \frac{x_{1u}}{9} = \sum_{u=1}^9 \frac{x_{2u}}{9} = \sum_{u=1}^9 \frac{x_{1u} x_{2u}}{9} = 0$$

e

$$\sum_{u=1}^9 \frac{x_{1u}^2}{9} = \sum_{u=1}^9 \frac{x_{2u}^2}{9} = \frac{2}{3}.$$

Usando a equação 4.1 e η_0 como a média dos η 's, para este planejamento podemos notar que

$$\eta_0 = \sum_{u=1}^9 \frac{\eta_u}{9} = \beta_0 + \frac{2}{3}\beta_{11} + \frac{2}{3}\beta_{22}. \quad (4.2)$$

Subtraindo esta equação da equação 4.1, temos

$$\eta = \eta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} \left(x_1^2 - \frac{2}{3}\right) + \beta_{22} \left(x_2^2 - \frac{2}{3}\right) + \beta_{12} x_1 x_2. \quad (4.3)$$

Esta é a forma alternativa da equação 4.1. As estimativas obtidas são as mesmas qualquer que seja a equação estimada exceto que uma estimativa \bar{Y} de η_0 substitui uma estimativa b_0 de β_0 ; conseqüentemente, uma estimativa b_0 de β_0 pode facilmente

ENSAIOS	x_0	x_1	x_2	$x_1^2 - 2/3$	$x_2^2 - 2/3$	$x_1 x_2$	RESPOSTA (%) Y
1	1	-1	-1	1/3	1/3	1	71,7
2	1	0	-1	-2/3	1/3	0	79,2
3	1	1	-1	1/3	1/3	-1	80,1
4	1	-1	0	1/3	-2/3	0	75,2
5	1	0	0	-2/3	-2/3	0	81,5
6	1	1	0	1/3	-2/3	0	79,1
7	1	-1	1	1/3	1/3	-1	76,3
8	1	0	1	-2/3	1/3	0	80,2
9	1	1	1	1/3	1/3	1	75,8

TABELA 4.2 - Valores das variáveis independentes correspondente a equação (4.2) e as respostas obtidas

ser obtida a partir da relação

$$b_0 = \bar{Y} - \frac{2}{3}b_{11} - \frac{2}{3}b_{22}. \quad (4.4)$$

Na tabela 4.2 temos os valores das variáveis independentes correspondente a equação 4.2 e as produções obtidas.

Então, a soma dos produtos para qualquer duas colunas na tabela das variáveis independentes é zero; por causa desta ortogonalidade, obtida após uma modificação na equação 4.1, podemos usar as relações dadas em (2.16) e (2.17), as mesmas usadas em 3.6.1 e 3.6.3, para a obtenção das estimativas dos coeficientes.

A estimativa b_0 usando a equação (4.4) é

$$\begin{aligned} b_0 &= \frac{1}{9} \sum_{u=1}^9 Y_u - \frac{2}{3} \times \frac{\sum_{u=1}^9 (x_1^2 - 2/3)_u Y_u}{\sum_{u=1}^9 (x_1^2 - 2/3)_u^2} - \frac{2}{3} \times \frac{\sum_{u=1}^9 (x_2^2 - 2/3)_u Y_u}{\sum_{u=1}^9 (x_2^2 - 2/3)_u^2} \\ &= 77,68 - \frac{2}{3} \times \frac{-7,87}{2} - \frac{2}{3} \times \frac{-2,77}{2} \\ &= 81,22. \end{aligned}$$

Também como as estimativas são não correlacionadas

$$\begin{aligned} \text{Var}(b_0) &= \text{Var}(\bar{Y}) + \frac{4}{9}\text{Var}(b_{11}) + \frac{4}{9}\text{Var}(b_{22}) \\ &= \frac{\sigma^2}{9} + \frac{4\sigma^2}{18} + \frac{4\sigma^2}{18} = 0,55\sigma^2. \end{aligned}$$

Este procedimento nos dá as seguintes estimativas e seus desvios padrões supondo $\sigma = 0,6$:

$$\begin{aligned}b_0 &= 81,22 \pm 0,58 \\b_1 &= 1,97 \pm 0,32 \\b_2 &= 0,22 \pm 0,32 \\b_{11} &= -3,93 \pm 0,55 \\b_{22} &= -1,38 \pm 0,55 \\b_{12} &= -2,22 \pm 0,39.\end{aligned}$$

Logo, a equação 4.1 ajustada é

$$\hat{Y} = 81,22 + 1,97x_1 + 0,22x_2 - 3,93x_1^2 - 1,38x_2^2 - 2,22x_1x_2. \quad (4.5)$$

A próxima etapa seria estudarmos a natureza da superfície ajustada. Podemos pensar em representá-la graficamente por um gráfico de contornos. Para isto basta fazermos os contornos para valores de \hat{Y} fixados. Por exemplo, o contorno relativo a uma resposta de 80% é o conjunto de todos os pontos que satisfazem a equação

$$80 = 81,22 + 1,97x_1 + 0,22x_2 - 3,93x_1^2 - 1,38x_2^2 - 2,22x_1x_2.$$

Este tipo de representação dará uma família de cônicas concêntricas. No caso de $4b_{11}b_{22} - b_{12}^2 > 0$ estas cônicas serão elipses e no caso de ser negativo serão hipérbolas. Na figura 4.2, temos a representação para a equação 4.5 junto com as respostas observadas. Note que neste caso

$$4b_{11}b_{22} - b_{12}^2 = 4(-3,93)(-1,38) - (-2,22)^2 = 16,76 > 0$$

logo, serão elipses.

Uma ilustração geométrica da superfície ajustada também é possível quando existe três fatores mas, isto é muito trabalhoso. Felizmente não é necessário tentar isto já que a equação de segundo grau pode ser reduzida a uma forma

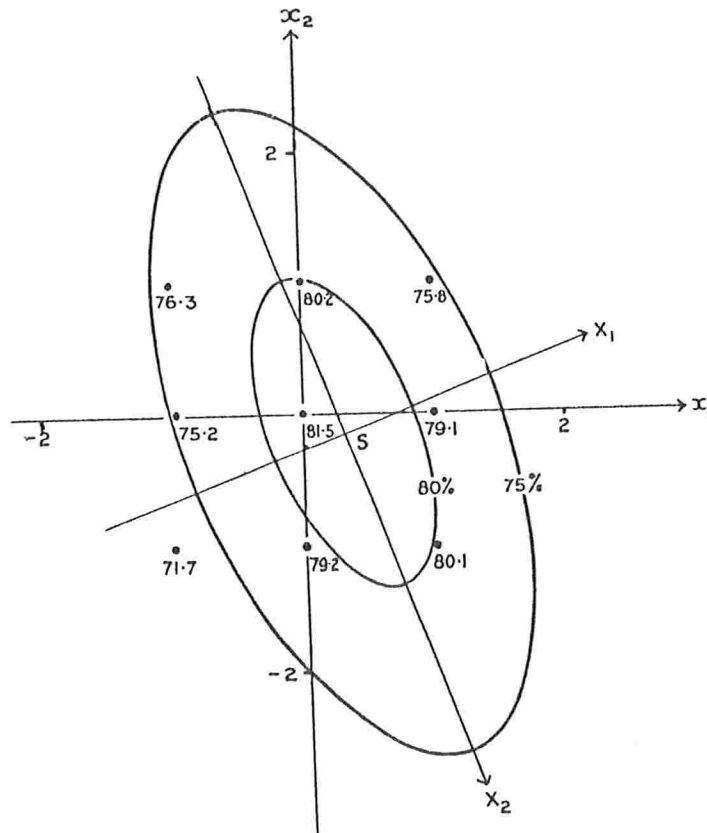


FIGURA 4.2 - Contornos da superfície ajustada e respostas observadas
Extraída de Davies, 1960.

padrão (forma canônica), a qual torna possível apreciar rapidamente a natureza da superfície ajustada, mesmo quando muitos fatores estão envolvidos, e construir as linhas de contorno muito facilmente em duas ou três dimensões.

4.3 - REDUÇÃO À FORMA CANÔNICA

Considere a equação 4.5 e sua representação dada na figura 4.2. Suponha que em vez de medirmos as variáveis a partir do ponto 0, centro do planejamento, uma nova origem seja considerada no centro do sistema em S, isto é, no ponto estacionário e, suponha também que em vez de medirmos as

variáveis nas direções x_1 e x_2 elas sejam medidas nas direções dos eixos principais denotados por X_1 e X_2 . Então nestas novas coordenadas a equação da superfície é da forma

$$\hat{Y} = \hat{Y}_S + B_{11}X_1^2 + B_{22}X_2^2 \tag{4.6}$$

onde \hat{Y}_S representa a resposta estimada no ponto estacionário S. Note que podemos facilmente generalizar para o caso onde mais de dois fatores estão envolvidos. O procedimento é calcular:

- i) a posição de S, isto é, o centro do sistema de contornos e o valor \hat{Y}_S da resposta estimada neste ponto;
- ii) os valores de B_{11} , B_{22} , ..., B_{KK} ;
- iii) as direções dos eixos X_1 , X_2 , ..., X_K .

Faremos então o cálculo destes três itens citados anteriormente para a equação 4.5. O procedimento é o mesmo quando tivermos mais de dois fatores envolvidos. Um estudo mais detalhado deste assunto pode ser encontrado em Éfimov (1976).

4.3.1 - O primeiro passo é então determinar S, o ponto no qual a resposta é estacionária, ou seja, no qual

$$\frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_1} \text{ e } \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_2}$$

são ambas iguais a zero. Então para a equação 4.5

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_1} = 1,97 - 7,96x_1 - 2,22x_2 = 0 \\ \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_2} = 0,22 - 2,22x_1 - 2,76x_2 = 0 \end{cases}$$

Resolvendo este sistema, temos que as coordenadas do ponto S

$\frac{d\hat{y}}{dx_1}$ $\bar{y} = 81,22 + 1,97x_1 + 0,22x_2 + 3,93x_1^2 - 11,38x_2^2 - 2,22x_1x_2$
 $\frac{d\hat{y}}{dx_2} = 0,22 - 2,22x_1 - 2,76x_2 = 0$

são:

$$x_{1S} = 0,30 \quad \text{e} \quad x_{2S} = -0,16.$$

Substituindo estes valores na equação (4.5) temos que

$$\hat{Y}_S = 81,49.$$

4.3.2 - O segundo passo é determinar os valores dos coeficientes B_{11} e B_{22} . Para isto precisamos determinar as raízes características da matriz dos coeficientes de segunda ordem. Esta é a matriz

$$C = (C_{ij}) \quad \text{onde} \quad C_{ii} = b_{ii} \quad \text{e} \quad C_{ij} = \frac{1}{2}b_{ij} \quad (i \neq j)$$

onde b_{ii} e b_{ij} são os coeficientes de segunda ordem da equação ajustada. Então para a equação (4.5)

$$C = \begin{bmatrix} -3,93 & -1,11 \\ -1,11 & -1,38 \end{bmatrix}$$

e as raízes características são $\lambda_1 = -4,35$ e $\lambda_2 = -0,96$. Estes são os valores dos coeficientes $B_{11} = -4,35$ e $B_{22} = -0,96$. A outra alternativa $B_{11} = -0,96$ e $B_{22} = -4,35$ pode igualmente ser tomada. A única alteração será na notação (o eixo X_1 passará a ser o eixo X_2 e vice-versa).

A forma canônica da equação de segundo grau ajustada (4.5) é então

$$\hat{Y} = 81,49 - 4,35X_1^2 - 0,96X_2^2. \quad (4.7)$$

4.3.3 - O terceiro passo é determinar as direções dos eixos X_1 e X_2 em função de x_1 e x_2 . Os vetores característicos de

comprimento unitário correspondentes são

$$X_1 = \begin{bmatrix} 0,936 \\ 0,352 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad X_2 = \begin{bmatrix} 0,352 \\ -0,936 \end{bmatrix}.$$

Conseqüentemente a mudança de variáveis reduzindo a equação (4.5) em sua forma canônica, equação (4.7), é dada por

$$X_1 = 0,936(x_1 - 0,30) + 0,352(x_2 + 0,16)$$

$$X_2 = 0,352(x_1 - 0,30) - 0,936(x_2 + 0,16).$$

A equação do eixo X_1 será dada por $X_2 = 0$, ou seja

$$0,352(x_1 - 0,30) - 0,936(x_2 + 0,16) = 0$$

e, a equação do eixo X_2 será dada por $X_1 = 0$, ou seja

$$0,936(x_1 - 0,30) + 0,352(x_2 + 0,16) = 0.$$

Então com todos estes dados obtidos, teremos condições de estudar a natureza da superfície ajustada dada pela equação (4.5). Antes de passarmos a um exemplo onde usaremos todas as informações obtidas até aqui, veremos, para $K = 2$ e $K = 3$, algumas situações envolvendo esta "transformação canônica".

4.4 - ALGUNS SISTEMAS DE CONTORNOS GERADOS POR EQUAÇÕES DO SEGUNDO GRAU EM DUAS E TRÊS VARIÁVEIS

A equação (4.6) pode ser interpretada como segue. A mudança na resposta, quando nos afastamos do centro do siste

ma S para algum ponto cujas coordenadas são X_1 e X_2 , é dada pela expressão do lado direito da equação

$$\hat{Y} - \hat{Y}_S = B_{11}X_1^2 + B_{22}X_2^2. \quad (4.8)$$

No exemplo representado pela equação (4.7), os coeficientes B_{11} e B_{22} são ambos negativos, e conseqüentemente existirá sempre uma perda na resposta, qualquer que seja a direção pega a partir de S ; B_{11} mede a diminuição na resposta na dire

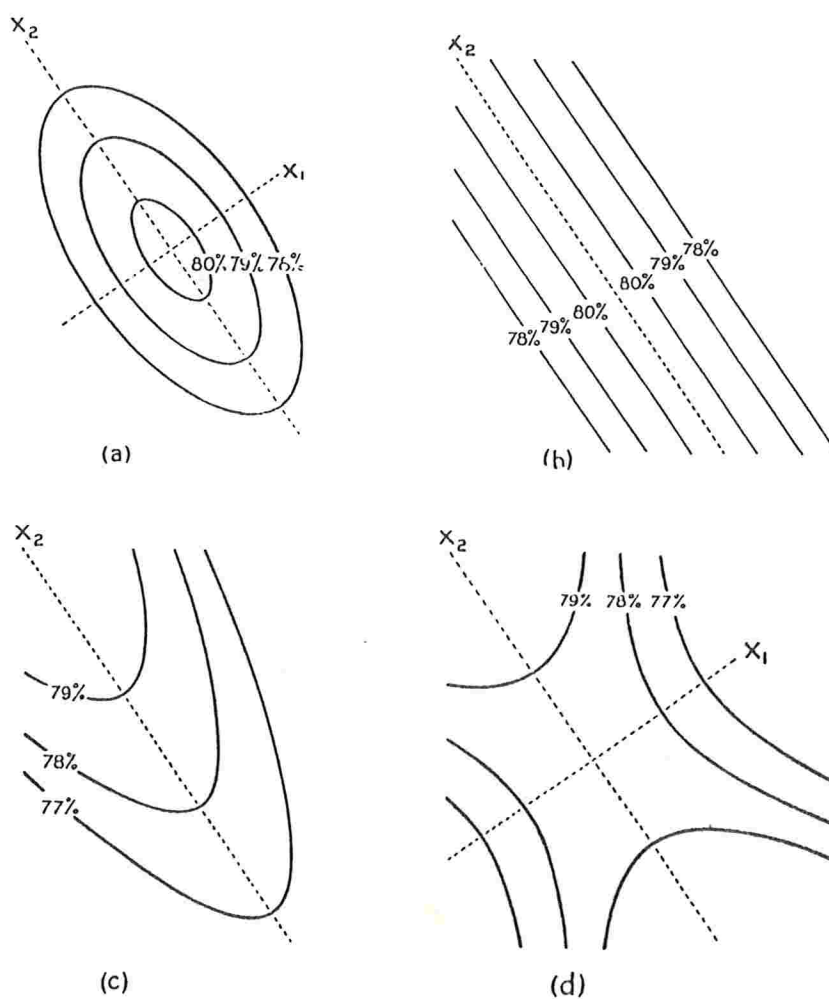


FIGURA 4.3 - Sistemas de contornos gerados por equações do segundo grau em duas variáveis
Extraída de Davies, 1960.

ção X_1 , e B_{22} na direção X_2 . Consequentemente para este exemplo S é um máximo real. Na Figura 4.3 estão mostrados exemplos de sistemas de contornos que são gerados por equações do segundo grau em duas variáveis e que podem ser encontrados em uma região Quase-estacionária. Quatro tipos de sistemas podem ser distinguidos, os quais podem ser usados para representar um máximo, uma elevação estacionária, uma elevação crescente e um minimax.

Tipo (a) foi o que discutimos anteriormente; os coeficientes B_{11} e B_{22} são ambos negativos e os contornos ajustados são elipses. Quando B_{22} é menor em valor absoluto do que B_{11} , os contornos serão prolongados ao longo do eixo X_2 , como na ilustração.

Tipo (d) ilustra o sistema obtido quando B_{11} é negativo e B_{22} é positivo; os contornos ajustados são hipérbolas. Como no caso anterior, as magnitudes relativas destas constantes mostram o grau de prolongamento destes contornos; no exemplo ilustrado B_{22} seria menor em valor absoluto do que B_{11} .

Tipo (b) ilustra o sistema quando B_{11} é negativo e B_{22} é zero, e pode ser considerado como um tipo limite ou de (a) ou de (d) quando o prolongamento na direção do eixo X_2 é infinito. Este tipo realmente representa, matematicamente, um estágio transitório entre (a) e (d). Não existe um único centro, mas uma linha de centros sobre o eixo X_2 . A equação é da forma

$$\hat{Y} - \hat{Y}_S = B_{11} X_1^2$$

onde \hat{Y}_S é a resposta em qualquer ponto do eixo X_2 .

Tipo (c) ilustra o sistema obtido quando o centro está sobre o eixo X_2 no infinito e B_{11} é negativo; os con-

tornos ajustados são parábolas. Pegando como origem algum ponto conveniente sobre o eixo X_2 , a equação é da forma

$$\hat{Y} - \hat{Y}_S = B_{11}X_1^2 + B_2X_2$$

onde B_2 mede a razão de incremento na produção, isto é, a inclinação ao longo do eixo X_2 . Este tipo pode ser considerado como um caso limite ou de (a) ou de (d) quando o centro é no infinito. Na próxima secção discutiremos um exemplo que se aproxima a este tipo.

Na prática, é muito pouco provável encontrarmos exatamente ou tipo (b) ou tipo (c). Em vez de encontrarmos $B_{22} = 0$, indicando tipo (b), provavelmente encontraremos um pequeno valor positivo ou negativo. Os contornos resultantes serão exemplos ou do tipo (a) ou do tipo (d) prolongados ao longo do eixo X_2 . Localmente para o planejamento, os contornos parecerão ser do tipo (b) mas com linhas ligeiramente curvadas. Similarmente, exemplos do tipo (c) não ocorrerão. Em vez do centro do sistema ser encontrado no infinito, quando os contornos são parábolas, os contornos serão ou do tipo (a) ou do tipo (d), com o centro bem fora da região do planejamento. Deve ser notado que a existência de uma elevação, ou do tipo (b) ou do tipo (c), é indicada quando um dos coeficientes B_{11} ou B_{22} tem um pequeno valor.

É importante lembrar que a equação ajustada pode ser considerada como uma aproximação adequada da superfície de resposta somente na vizinhança em torno do centro do planejamento. A equação ajustada não é de interesse em outras regiões. Por exemplo, é comum encontrar na análise da equação de segundo grau ajustada, que um máximo está indicado longe da região do planejamento, mas que a superfície está prolongada ao longo de um eixo que passa perto do planejamento. Isto indica que a experimentação prévia levou o expe

rimentador não a um máximo, mas perto de uma elevação crescente. Nenhuma conclusão a respeito da posição ou mesmo a existência do máximo afastado pode ser tirada, mas a atenção deve ser focalizada na elevação local e ensaios adicionais devem ser realizados ao longo deste eixo.

Com relação ao fato de termos três fatores ($K = 3$) envolvidos no estudo de uma determinada resposta, teremos então sistemas de contornos tri-dimensionais, os quais podem ser considerados como sendo produzidos a partir daqueles em duas dimensões. Reciprocamente, sistemas em duas dimensões são "secções cruzadas" daqueles em três dimensões. Na figura 4.4 temos alguns exemplos de sistemas tri-dimensionais produzidos por equações de segunda ordem.

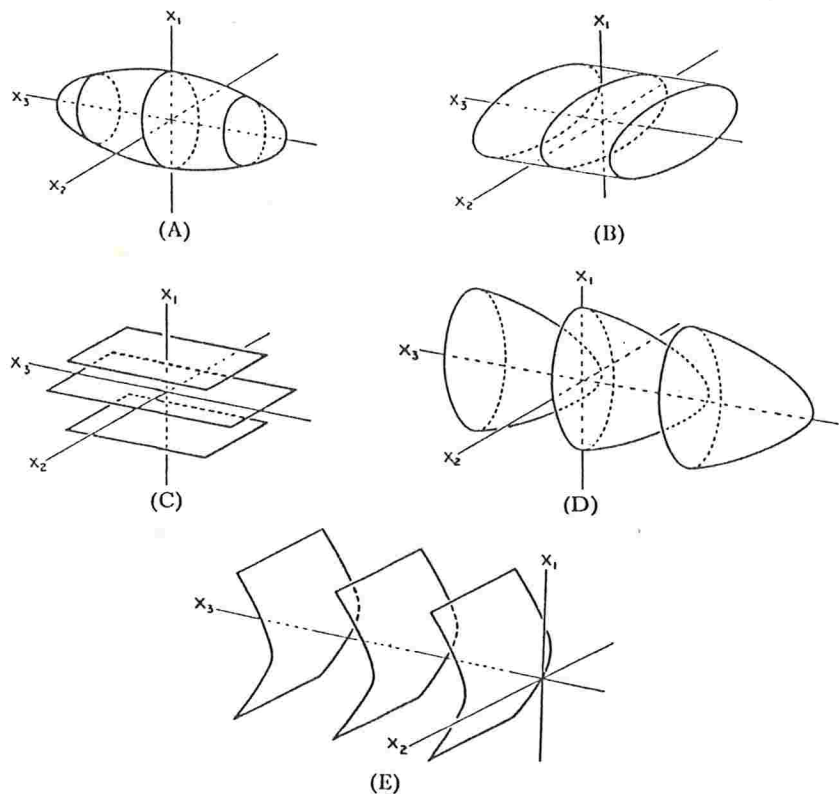


FIGURA 4.4 - Alguns possíveis sistemas de contornos tri-dimensionais em uma região Quase Estacionária. Extraída de Davies, 1960.

A figura 4.4 (A) mostra uma superfície na qual B_{11} , B_{22} e B_{33} são todos negativos, os contornos são elipsóides e existe um ponto de máximo. Em (B), B_{11} e B_{22} são ambos negativos e B_{33} é zero, os contornos são cilindros elípticos, e o eixo X_3 é uma "linha máxima" (isto é, uma linha estacionária). Sobre esta linha uma resposta máxima "seria" obtida, e partindo dela em qualquer direção resultaria em decréscimo na resposta.

Em (C), B_{22} e B_{33} são ambos zero, a superfície contém um plano máximo e os contornos são planos paralelos ao plano que contém os eixos X_2 e X_3 .

Em (D), os contornos são parabolóides elípticos. O centro está no infinito e B_{33} é zero. Pegando a origem no eixo X_3 , a equação do segundo grau pode ser reduzida à forma

$$\hat{Y} - \hat{Y}_S = B_{11}X_1^2 + B_{22}X_2^2 + B_3X_3$$

onde B_{11} e B_{22} são negativos, B_{33} é zero e B_3 mede a inclinação do eixo X_3 . O sistema é uma linha elevada como (B), mas a elevação é crescente em vez de estacionária. O sistema correspondente a (C), mas representando uma subida em vez de uma elevação estacionária, está mostrado em (E).

Em geral quando um ou mais dos coeficientes, B_{11} , B_{22}, \dots, B_{KK} na forma canônica são pequenos, comparados com os outros, alguma forma de "sistema elevado" é indicada. Quando o centro do sistema está longe da vizinhança do centro do planejamento, o "sistema elevado" será aproximadamente estacionário. Mesmo quando o centro do sistema está longe da vizinhança do planejamento, quase sempre será descoberto que uma elevação crescente passa perto da vizinhança do planejamento e para determinar sua natureza, uma nova origem é escolhida na elevação. Por exemplo, se o coefi-

ciente B_{tt} é pequeno comparado com os outros, então o eixo X_t define uma "linha elevada". Uma nova origem é tomada neste eixo perto do planejamento, e então a correspondente equação conterá um coeficiente B_t o qual, se o centro está longe do planejamento, mede a "inclinação da elevação". Quando dois coeficientes B_{tt} e B_{ss} são pequenos comparados com os outros, o plano contendo os eixos X_t e X_s define um "plano elevado" o qual, normalmente, passará perto do planejamento. Uma nova origem é pega neste plano perto do planejamento, e então a equação correspondente conterá coeficientes B_t e B_s . Se estes coeficientes não são pequenos, uma elevação crescente é indicada e, a direção de maior incremento sobre "ela", será encontrada pelo método de Máxima Inclinação Ascendente.

4.5 - UM EXEMPLO MOSTRANDO UMA ELEVACÃO CRESCENTE

Considere a equação do segundo grau ajustada

$$\hat{Y} = 60,64 - 3,672x_1 + 11,661x_2 - 3,514x_1^2 - 0,924x_2^2 + 2,220x_1x_2. \quad (4.9)$$

Usando os resultados da secção 4.4, temos que

$$x_{1S} = 2,370; \quad x_{2S} = 9,157; \quad \hat{Y}_S = 109,68\%$$

e (4.10)

$$\lambda_1 = -3,952 \quad \text{e} \quad \lambda_2 = -0,513.$$

Então a forma canônica da equação (4.9) será

$$\hat{Y} - 109,68 = -3,925X_1^2 - 0,513X_2^2 \quad (4.11)$$

e a transformação para as novas coordenadas será dada por

$$X_1 = 0,938(x_1 - 2,370) - 0,348(x_2 - 9,157)$$

$$X_2 = 0,348(x_1 - 2,370) + 0,938(x_2 - 9,157). \quad (4.12)$$

A partir da equação (4.11) os contornos ajustados são elipses prolongadas ao longo do eixo X_2 e o ponto estacionário S é um máximo. Das coordenadas do centro dadas em (4.10), temos que S está longe do centro do planejamento e conclusões a respeito da natureza da superfície na vizinhança de S não podem ser tiradas, visto que é muito pouco provável que um ponto longe do planejamento terá alguma relevância. Em particular, a resposta estimada neste ponto é aproximadamente 110%, obviamente um valor impossível. Contudo, a parte da equação ajustada, a qual está próxima do planejamento, deve fornecer uma aproximação satisfatória para a superfície local, e é esta parte da superfície que é de interesse. Considerando o problema agora em termos de coordenadas X_1 e X_2 em vez de x_1 e x_2 e substituindo os valores

$$x_1 = 0, \quad x_2 = 0$$

em (4.12), o centro 0 do planejamento está em

$$X_1 = 0,964 \quad \text{e} \quad X_2 = -9,414.$$

Então $0,964$ e $|-9,414|$ são as menores distâncias de 0 (centro do planejamento) para os eixos X_2 e X_1 respectivamente, e isto mostra que o eixo X_2 passa perto de 0 . Agora, por causa do tamanho relativamente pequeno de B_{22} , é conhecido que os contornos são tirados ao longo deste eixo. Então concluímos que o planejamento foi realizado perto de uma elevação crescente, a direção da qual é ao longo do eixo X_2 . A forma canônica da equação (4.11) é "transferida" para uma origem local sobre esta elevação próxima, e esta pode ser convenientemente tomada em

$$X_1 = 0 \quad \text{e} \quad X_2 = -9,414$$

o ponto mais próximo de 0 sobre a elevação, o qual é denotado por S' . Escrevendo então

$$X'_1 = X_1 \quad \text{e} \quad X'_2 = X_2 + 9,414$$

e substituindo em (4.11), a equação em relação à origem S' é

$$\hat{Y} - 64,22 = -3,925X_1'^2 - 0,513X_2'^2 + 9,659X_2'$$

onde 9,659 mede a "inclinação da elevação". A elevação é vista como sendo fortemente crescente, e o próximo experimento deve explorar o eixo X'_2 desta elevação na direção de respos

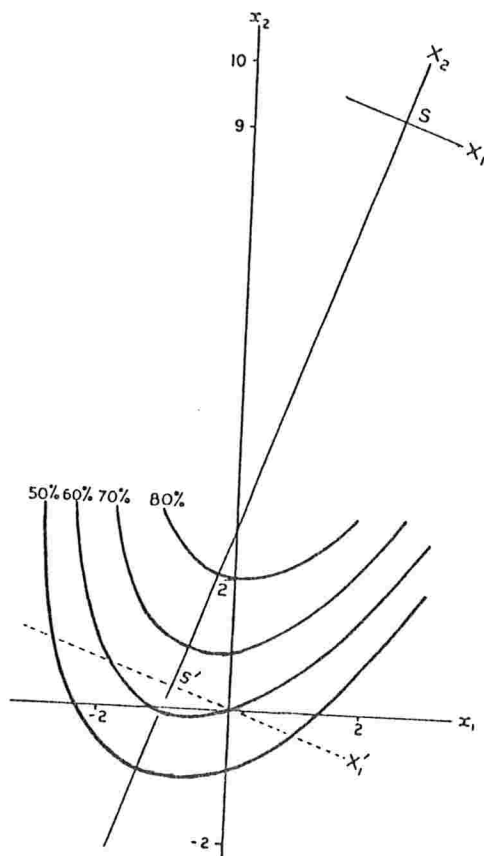


FIGURA 4.5 - Redução canônica na vizinhança de uma elevação crescente em duas variáveis. Extraída de Davies, 1960.

ta "aumentada". Como já tínhamos dito anteriormente, este exemplo se aproxima do tipo (c) na figura 4.3,c.

A situação está ilustrada na figura 4.5. Deve ser notado que, a natureza do sistema pode ser completamente apreciada sem recorrer a ilustração geométrica. Isto é muito importante porque nem sempre é possível fazer esta representação.

CAPÍTULO 5

O PLANEJAMENTO

5.1 - INTRODUÇÃO

Como já foi dito anteriormente no capítulo 2, seção 2.5, o planejamento do experimento representa uma parte crucial na investigação de Superfície de Resposta visto que, os métodos desenvolvidos nos capítulos 3 e 4 dependem basicamente dos polinômios ajustados representarem adequadamente ou não a verdadeira função de resposta ϕ . Por exemplo, o sucesso no uso do Método de Máxima Inclinação Ascendente de pende muito do fato de ϕ poder ser representada localmente por um polinômio de primeira ordem, então, o planejamento a ser usado neste caso, deve ser de tal forma que nos permita estimar todos os coeficientes de até primeira ordem e ainda verificar se a representação polinomial usada é adequada ou não.

Então, neste capítulo apresentaremos e discutiremos alguns tipos de planejamentos mais usuais e também alguns critérios usados na construção de planejamentos adequados ao nosso problema, ou seja, ao problema de representar a verdadeira função de resposta ϕ por um polinômio ajustado pelo Método de Mínimos Quadrados. Os planejamentos de interesse serão chamados planejamentos de primeira ordem e segunda ordem quando desejarmos representar ϕ por um polinômio de primeira e segunda ordens, respectivamente. Neste capítulo usaremos os re-

sultados de Mínimos Quadrados apresentados no capítulo 2, secções 2.6 e 2.7 e também o conceito de Matriz de Momentos, o qual veremos agora.

5.2 - MATRIZ DE MOMENTOS

As equações (2.13), (2.14), (2.15), (2.21) e (2.22) das secções 2.6 e 2.7 do capítulo 2, contém a matriz $X'X$ de somas de quadrados e produtos das variáveis independentes. Notamos que $N^{-1}X'X$, onde N é o número de pontos que compõe o planeamento, pode ser vista como uma Matriz de Momentos do planeamento. Por exemplo, se existem $K = 2$ variáveis e estamos considerando um planeamento de segunda ordem, a equação a ser ajustada é

$$\eta = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 \quad (5.1)$$

e a matriz $N^{-1}X'X$ é

$$\begin{array}{c} x_0 \quad x_1 \quad x_2 \quad x_1^2 \quad x_2^2 \quad x_1 x_2 \\ \left[\begin{array}{cccccc} 1 & [1] & [2] & [11] & [22] & [12] \\ [1] & [11] & [12] & [111] & [122] & [112] \\ [2] & [12] & [22] & [112] & [222] & [122] \\ [11] & [111] & [112] & [1111] & [1122] & [1112] \\ [22] & [122] & [222] & [1122] & [2222] & [1222] \\ [12] & [112] & [122] & [1112] & [1222] & [1122] \end{array} \right] \end{array}$$

As quantidades entre colchetes denotam os momentos do planeamento. Por exemplo,

$$N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{1u} = [1], \quad N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 x_{2u} = [112]$$

e assim por diante. Chamaremos $N^{-1}X'X$ de Matriz de Momentos.

5.3 - PLANEJAMENTOS FATORIAIS

Tipos de planejamentos bastante utilizados para a aproximação polinomial de primeira e segunda ordens são os planejamentos fatoriais completos 2^K e 3^K e os fatoriais fracionários

$$\frac{1}{2^p} 2^K \quad \text{e} \quad \frac{1}{3^p} 3^K, \quad K > p.$$

A utilização de um destes tipos de planejamentos depende do número K de fatores envolvidos e da ordem do polinômio que desejamos ajustar. Por exemplo, no capítulo 3 apresentamos um exemplo para discussão do Método de Máxima Inclinação Ascendente que envolvia 5 fatores e conseqüentemente 6 coeficientes ($\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_5$) para estimarmos. Logo, o planejamento a ser utilizado naquele exemplo precisava ter, pelo menos, 6 pontos experimentais, de modo a ser possível a estimação dos coeficientes. Como sempre existe o problema do custo operacional, o ideal então seria usarmos um planejamento que tivesse um número de pontos experimentais não muito maior do que 6 e, ao mesmo tempo, permitisse de algum modo verificarmos se o modelo proposto era adequado ou não, um outro requisito muito importante como já dissemos. Então, o planejamento fatorial fracionário $\frac{1}{2^2} 2^5$, o planejamento utilizado no exemplo, do modo como foi construído satisfaz estas condições, pois com os seus 8 pontos experimentais foi possível a estimação dos 6 coeficientes de até primeira ordem e ainda a estimação de 2 coeficientes de segunda ordem (2 interações) de modo a permitir verificarmos a adequação ou não do polinômio de primeira ordem ajustado. Com relação ao exemplo apresentado no capítulo 4, como tínhamos só 2 fatores envolvidos e desejávamos ajustar um polinômio de segunda ordem (6 coeficientes a serem estimados), o uso do planejamento fato

rial 2^2 não seria adequado já que ele só fornece 4 pontos experimentais. Para a solução do problema, usou-se então um planejamento fatorial com três níveis para cada fator (3^2) em vez de dois níveis como no exemplo anterior.

Este planejamento forneceu 9 pontos experimentais os quais possibilitaram a estimação dos 6 coeficientes envolvidos e ainda uma análise de variância para a verificação do modelo utilizado. A análise de variância está mostrada em Davies (1960, página 521).

Quando precisamos utilizar a aproximação polinomial de segunda ordem, os planejamentos fatoriais que envolvem 3 níveis de cada um dos fatores podem ser empregados. O problema que surge é que quando K é maior do que 2 o número de ensaios que tais planejamentos requerem, frequentemente excedem em muito o número de coeficientes que precisamos estimar. Por exemplo, para $K = 4$, o planejamento fatorial 3^4 requer $3^4 = 81$ ensaios, mas o número de coeficientes envolvidos é somente 15. Embora o número de ensaios a ser realizado possa ser reduzido usando-se réplica fracionária, este esquema é muito menos eficiente na produção de arranjos adequados em planejamentos que envolvem três níveis de cada um dos fatores do que em planejamentos que envolvem só 2 níveis, estes últimos usados com bastante sucesso para a aproximação polinomial de primeira ordem. Por esta razão planejamentos alternativos tem sido procurados de modo a ser possível a estimação de todos os coeficientes de até segunda ordem sem a necessidade de um número de ensaios muito maior do que o número de coeficientes a ser estimados. Alguns planejamentos deste tipo, os quais são particularmente importantes para a experimentação sequencial, são chamados de Planejamentos Compostos e serão discutidos na próxima secção.

Ainda com relação aos planejamentos fatoriais, no

capítulo 2, secção 2.6, nos referimos a simplificação nos cálculos da estimação dos coeficientes, quando usamos planejamentos fatoriais completos ou fracionários, dizendo que isto ocorria por causa da ortogonalidade do experimento, ortogonalidade no sentido de que a soma de produtos para qualquer duas colunas da matriz X é zero, ou seja, que as colunas da matriz X são ortogonais entre si. Este fato está diretamente ligado com o fato da matriz de momentos $N^{-1}(X'X)$ ser diagonal ou não, condição usada por Box e Hunter (1957) na construção de planejamentos ortogonais. Por exemplo, no caso do ajuste de um polinômio de primeira ordem em 3 variáveis temos

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{31} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{32} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & x_{2N} & x_{3N} \end{bmatrix}$$

e conseqüentemente

$$N^{-1}(X'X) = \begin{bmatrix} 1 & [1] & [2] & [3] \\ [1] & [11] & [12] & [13] \\ [2] & [12] & [22] & [23] \\ [3] & [13] & [23] & [33] \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

Então, ao usarmos um planejamento fatorial 2^3 ou uma réplica fracionária deste planejamento, teremos que todos os elementos (momentos) que não pertencem à diagonal principal são iguais a zero e conseqüentemente uma simplificação no cálculo de

$$B = (X'X)^{-1}X'Y$$

o vetor das estimativas dos β 's e também de

$$V = (X'X)^{-1}\sigma^2$$

a matriz de covariância dos estimadores. Esta simplificação nos leva às fórmulas (2.16) e (2.17) dadas no capítulo 2. Já no caso do ajuste de um polinômio de segunda ordem, os planejamentos fatoriais não permitem, diretamente, este tipo de simplificação. No exemplo dado no capítulo anterior, $K=2$, a matriz X é da forma

$$X_{N \times 6} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{11}^2 & x_{21}^2 & x_{121} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{12}^2 & x_{22}^2 & x_{122} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & x_{2N} & x_{1N}^2 & x_{2N}^2 & x_{12N} \end{bmatrix}$$

e conseqüentemente $N^{-1}(X'X)$ é exatamente igual a matriz dada por (5.2). Neste caso, as quantidades $x_0, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2$ e x_{12} correspondentes ao modelo

$$\eta = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_1 x_1^2 + \beta_2 x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2$$

não são todas funcionalmente independentes e uma matriz de momentos diagonal é impossível de ser obtida visto que, certas somas de produtos tais como aquelas entre x_1^2 e x_0 e entre x_i^2 e x_j^2 são necessariamente positivas a menos que os x_{iu} sejam todos iguais a zero.

Box e Hunter (1957) construíram planejamentos ortogonais de segunda ordem redefinindo as variáveis independen

tes em termos dos polinômios ortogonais. Um dos exemplos dados é o utilizado por nós no capítulo anterior quando usamos um planejamento fatorial 3^2 para o ajuste de um polinômio de segunda ordem. Ainda com referência a esta citação bibliográfica, os autores apresentam uma classe de planejamentos de primeira ordem ortogonais na qual, os planejamentos fatoriais, fracionários ou não, estão incluídos, concluindo que os planejamentos fatoriais são de especial valor porque são fáceis de serem executados, permitem que a adequação da representação de primeira ordem possa ser verificada e formam um núcleo natural que pode ser ampliado para formar planejamentos de ordens maiores, como veremos na construção de Planejamentos Compostos.

5.4 - PLANEJAMENTOS COMPOSTOS

Planejamentos compostos para estimar coeficientes de até segunda ordem são construídos a partir de planejamentos do tipo

$$2^K \quad \text{ou} \quad \frac{1}{2^P} 2^K.$$

O procedimento é, primeiro escolher um planejamento do tipo acima, tal que todos os efeitos de primeira ordem (efeitos principais) e todos os de interação (de 2 fatores) de segunda ordem possam ser estimados. Este planejamento é então suplementado com pontos adicionais de modo a permitir a estimação dos efeitos quadráticos β_{11} , β_{22} , ...

Como um exemplo, considere um problema que envolva 3 fatores. Neste caso o planejamento fatorial 2^3 fornece o núcleo para o planejamento de segunda ordem. Se pudermos supor que os efeitos de ordens maiores do que dois possam ser ignorados, b_0 fornecerá uma estimativa de $\beta_0 + \beta_{11} + \beta_{22} + \beta_{33}$; b_1 ,

b_2, b_3, b_{12}, b_{13} e b_{23} fornecerão estimativas dos correspondentes β 's e b_{123} fornecerá uma estimativa do erro experimental. Um eficiente arranjo para permitir a estimação em separado de β_{11}, β_{22} e β_{33} é obtido através da adição de sete pontos ao planejamento, um no centro e os outros seis em pares ao longo dos eixos coordenados em $\pm\alpha_1, \pm\alpha_2$ e $\pm\alpha_3$, respectivamente (figura 5.1). A matriz de planejamento está dada na tabela 5.1.

ENSAIOS	NÍVEL DO FATOR		
	x_1	x_2	x_3
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	$-\alpha_1$	0	0
10	α_1	0	0
11	0	$-\alpha_2$	0
12	0	α_2	0
13	0	0	$-\alpha_3$
14	0	0	α_3
15	0	0	0

TABELA 5.1 - Um Planejamento Composto com três fatores

Os primeiros oito pontos correspondem ao planejamento fatorial 2^3 , os próximos seis são os pontos sobre os eixos, en-

quanto o último é o ponto no centro. O arranjo resultante dos pontos experimentais está mostrado na figura 5.1.

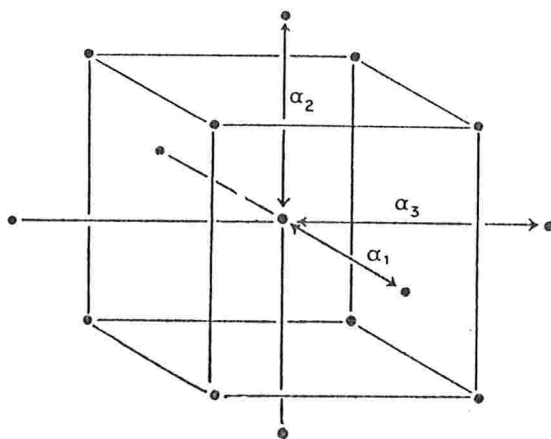


FIGURA (*) 5.1 - Um Planejamento Composto com 3 fatores

Este modo de construir um planejamento composto demonstrado para três fatores pode ser aplicado para K fatores. Ao apropriado planejamento fatorial

$$2^K \text{ ou } \frac{1}{2^p} 2^K$$

são acrescentados $(2K+1)$ pontos adicionais; um no centro e os outros $2K$ em pares ao longo dos eixos coordenados em $\pm\alpha_1, \dots, \pm\alpha_K$ respectivamente. Outros tipos de planejamentos compostos estão descritos em Box e Wilson (1951) e na secção 5.5.

Uma vantagem dos planejamentos compostos é que eles podem ser realizados em estágios. O planejamento de primeira ordem pode primeiro ser completado. Então, se descobrirmos que os efeitos de primeira ordem são razoavelmente gran

(*) - Estraída de Davies (1960).

des e os efeitos de segunda ordem (das interações) são pequenos, podemos seguir para uma nova base através do Método de Máxima Inclinação Ascendente. No caso deste fato não acontecer, basta então acrescentar os pontos extras para completar o planejamento composto.

O tipo particular de planejamento composto depende da localização dos pontos extremos. Muitas vezes a palavra "central" é incluída no título destes planejamentos para indicar que existe um ponto central.

5.4.1 - Planejamentos Compostos Ortogonais

A partir dos planejamentos compostos construídos anteriormente para K fatores, tomando-se $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_K = \alpha$, podemos construir planejamentos compostos ortogonais através de uma escolha adequada do valor de α . O valor de α deve ser escolhido de modo que a distância (α) do ponto central a cada um dos pontos axiais seja tal que todos os efeitos e interações estimados no modelo de segunda ordem sejam ortogonais. Para que isto seja possível, a distância α é dada pela expressão^(*)

$$\alpha = \left\{ \frac{[(F+T)^{1/2} - F^{1/2}]^2 \cdot F}{4n^2} \right\}^{1/4}$$

onde F = o número de combinação tratamento no planejamento fatorial tomado como núcleo; e T = o número de pontos adicionais multiplicado pelo número de observações por combinação tratamento (n).

Por exemplo, no caso de termos K = 3; F = 2³ = 8 e

(*) - O leitor poderá ver a demonstração em Box e Wilson (1951).

$T = \overbrace{(2 \cdot 3 + 1)}^{\text{numero de pontos adicionais}} \cdot 1 = 7$ se existe somente uma observação para cada combinação tratamento ($n = 1$). Então, segue que

$$\alpha = \left\{ \frac{[(8+7)^{1/2} - 8^{1/2}]^2 \cdot 8}{4} \right\}^{1/4} = 1,215.$$

Na tabela 5.2 temos os valores de α quando o número de fatores K é igual a 2, 3, 4 e 5.

NÚMERO DE FATORES (K)	2	3	4	5
Planejamento básico	2^2	2^3	2^4	$\frac{1}{2} 2^5$
Número de pontos extra ($2K+1$)	5	7	9	11
Distância dos pontos axiais ao centro $(\alpha)^{n-1}$	1,000	1,215	1,414	1,547

TABELA 5.2 - Planejamentos Compostos Ortogonais

Na segunda linha da tabela estão mostrados os planejamentos que formam o núcleo dos planejamentos compostos. Estes planejamentos são todos fatoriais completos exceto o usado para 5 fatores, o qual é o planejamento fatorial fracionário $\frac{1}{2} 2^5$ tendo como relação definidora $x_1 x_2 x_3 x_4 x_5 = 1$. Na quarta linha temos os valores de α . Podemos notar que o planejamento composto ortogonal para $K = 2$ coincide com o planejamento fatorial completo 3^2 .

Com relação ao problema de estimação dos coeficientes, precisamos, como já foi dito na secção anterior, redefinir as variáveis independentes, já que agora estamos usando um modelo de segunda ordem. Por exemplo, em termos de 3 fatores, este procedimento é perfeitamente geral e pode ser

aplicado aos planejamentos com diferentes números de fatores, a equação de segunda ordem a ser ajustada é

$$\eta = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{33} x_3^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3. \quad (5.3)$$

Cada uma das variáveis independentes $x_1, x_2, x_3, x_1 x_2, x_1 x_3$ e $x_2 x_3$ da equação (5.3), quando somadas sobre os pontos do planejamento, dados na tabela 5.2, dão zero. Consequentemente, pelo mesmo argumento utilizado na secção 4.5 do capítulo anterior, uma forma diferente da equação (5.3) pode ser obtida, de modo a ser mais conveniente para o nosso propósito. Esta forma é

$$\eta = \eta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{11} x_{11} + \beta_{22} x_{22} + \beta_{33} x_{33} + \beta_{12} x_{12} + \beta_{13} x_{13} + \beta_{23} x_{23}. \quad (5.4)$$

onde $x_{ii} = x_i^2 - [ii]$, $i=1,2,3$ e η_0 , a média dos η 's, é da forma

$$\eta_0 = \sum_{u=1}^N \eta_u / N = \beta_0 + \beta_{11} [11] + \beta_{22} [22] + \beta_{33} [33]. \quad (5.5)$$

As estimativas obtidas ajustando-se a equação (5.4) são as mesmas que as obtidas ajustando-se a equação (5.3), exceto que β_0 não é estimado diretamente, mas a partir da relação

$$b_0 = \bar{Y} - b_{11} [11] - b_{22} [22] - b_{33} [33], \quad (5.6)$$

determinada a partir da relação (5.5).

Na tabela de variáveis independentes (Matriz X) correspondente a equação (5.4) e ao planejamento dado na tabe-

la 5.2, a soma de produtos entre quaisquer duas colunas é zero. Consequentemente os coeficientes podem ser estimados simplesmente pegando-se somas de produtos das respostas observadas (os Y's) com os elementos da variável independente apropria e dividindo pela soma de quadrados dos elementos das variáveis independentes, como já fizemos anteriormente na secção 4.5 do capítulo 4, só que para $K = 2$.

5.4.2 - Planejamentos Compostos Simétricos Não-ortogonais

No planejamento composto descrito na secção anterior, não é essencial escolher os α 's de modo a satisfazer as condições de ortogonalidade ou ter todos os α 's iguais. Quanto maior for o valor dos α 's menores serão as variâncias das estimativas dos efeitos quadráticos ($\beta_{11}, \beta_{22}, \dots$), mas as estimativas são correlacionadas e o perigo de possível viés de efeitos de ordens maiores é aumentado. No sentido de obter maior precisão para as estimativas dos efeitos quadráticos, maiores valores para os α 's podem ser pegos, mas seria insensato pegá-los maiores do que 3, visto que a magnitude de possível viés tornar-se-ia séria.

No caso geral, quando os α 's não são escolhidos para dar ortogonalidade, os estimadores de Mínimos Quadrados dos β 's e os erros padrões destes estimadores não são encontrados tão rapidamente. Por outro lado, um grau de ortogonalidade ainda permanece e as estimativas são obtidas sem muita dificuldade. Em Davies (1960) o leitor encontrará como proceder a fim de obter estas estimativas e seus erros padrões.

5.5 - PLANEJAMENTOS ROTACIONÁVEIS

No sentido de encontrar planejamentos adequados para

ra o ajuste de Superfícies de Resposta, Box e Hunter (1957) introduziram o conceito de função de variância $V(\mathbf{x})$,

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k),$$

para um planejamento do experimento. Este conceito é introduzido de modo a não ser considerado, na construção do planejamento adequado, só a precisão de cada uma das estimativas em separado mas também a precisão conjunta destas estimativas.

5.5.1 - A Função de Variância e Planejamento Rotacionável

Suponha que \hat{Y}_x seja a resposta estimada no ponto x usando um polinômio ajustado por Mínimos Quadrados para N observações feitas em concordância com algum planejamento. A variância $V(\hat{Y}_x)$ deste valor estimado é uma função de x e σ^2 e podemos reduzi-la aumentando N (por exemplo, repetindo-se os pontos). A quantidade $V(x) = \frac{NV(\hat{Y}_x)}{\sigma^2}$ é então uma medida padronizada da precisão que o planejamento atribui à resposta a ser estimada no ponto x e é chamada de função de variância do planejamento. O leitor encontrará em Box e Hunter (1957) como calcular $V(\hat{Y}_x)$. Por exemplo, suponha que tivéssemos usado os nove pontos do planejamento fatorial 3^2 co-

$$X = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & x_2 & x_1^2 & x_2^2 & x_1x_2 \\ 1 & -\sqrt{3}/2 & -\sqrt{3}/2 & 3/2 & 3/2 & 3/2 \\ 1 & 0 & -\sqrt{3}/2 & 0 & 3/2 & 0 \\ 1 & \sqrt{3}/2 & -\sqrt{3}/2 & 3/2 & 3/2 & -3/2 \\ 1 & -\sqrt{3}/2 & 0 & 3/2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \sqrt{3}/2 & 0 & 3/2 & 0 & 0 \\ 1 & -\sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 & 3/2 & 3/2 & -3/2 \\ 1 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 3/2 & 0 \\ 1 & \sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 & 3/2 & 3/2 & 3/2 \end{bmatrix}$$

mo um planejamento bidimensional de segunda ordem. Considerando que a origem e as unidades foram escolhidas tal que

$$[1] = [2] = 0 \quad \text{e} \quad [11] = [22] = 1,$$

ou seja, com a matriz X apresentada acima.

A função de variância será

$$V(x) = 5 - 3x_1^2 - 3x_2^2 + 2x_1^4 + 2x_2^4 + x_1^2x_2^2.$$

Os contornos para esta função de variância estão mostrados na figura 5.2,(i).

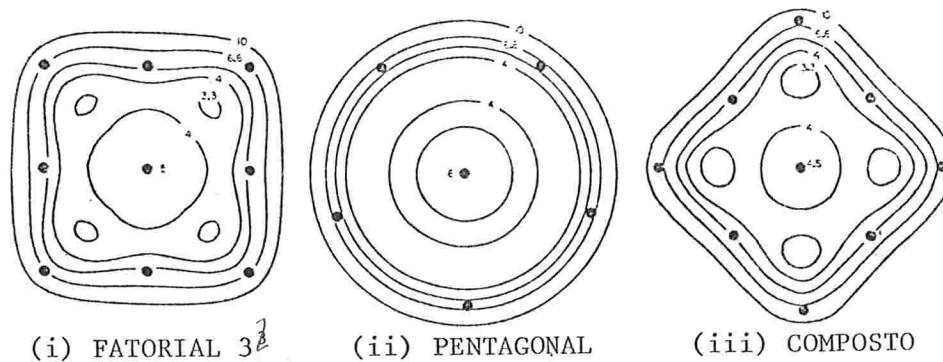


FIGURA (*) 5.2 - Contornos de variância para alguns planejamentos bidimensionais ($K=2$)

Nas figuras 5.2,(ii) e 5.2,(iii) estão mostradas funções de variância para outros planejamentos de segunda ordem bidimensionais, mencionados em Box e Wilson (1951). O arranjo na figura 5.2,(ii) é o "planejamento pentagonal" e o arranjo na figura 5.2,(iii) é um exemplo de uma classe de planejamentos, nos quais as estimativas dos efeitos quadráticos e das interações são todas determinadas com a mesma precisão.

(*) - Extraída de Box e Hunter (1957)

Se, como foi suposto no início deste trabalho, nada é conhecido a respeito da orientação da superfície, parece mais apropriado adotar planejamentos que possuem funções de variância, como as do planejamento pentagonal, ou seja, planejamentos que permitam que a resposta seja estimada com variância constante em todos os pontos equidistantes do centro do planejamento.

Em geral, para qualquer planejamento k -dimensional, se a variância da resposta estimada por um ajuste polinomial é uma função somente de

$$V(\hat{Y}_x) \propto \rho^2 = \sum_{i=1}^K x_i^2$$

tal que os contornos de variância no espaço das variáveis são círculos, esferas ou hiperesferas centrados na origem, o planejamento é chamado de Planejamento Rotacionável. Por esta definição, podemos notar que o planejamento dado anteriormente não é um planejamento rotacionável.

5.5.2 - Planejamentos Rotacionáveis de Primeira Ordem

Neste caso, o valor estimado de Y no ponto x pode ser escrito como

$$\hat{Y}_x = \bar{Y} + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_K x_K$$

onde os b 's são calculados de acordo com as fórmulas de Mínimos Quadrados. Então a variância de \hat{Y}_x é

$$V(\hat{Y}_x) = \sigma^2 \left[\frac{1}{N} + \sum_i \sum_j x_i x_j \text{Cov}(b_i, b_j) \right] = \sigma^2 \left[\frac{1}{N} + x(X'X)^{-1}x' \right]$$

onde $X'X$ é a matriz $K \times K$ com o (i, j) -ésimo elemento igual a

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju},$$

N é o tamanho do planejamento e x é o vetor (x_1, x_2, \dots, x_K) .

Para que o planejamento seja rotacionável sua variância deve depender somente de

$$\sum_{i=1}^K x_i^2,$$

como já dissemos anteriormente. Isto significa que $(X'X)^{-1}$ deve ser um múltiplo da matriz identidade e consequentemente $(X'X)$ deve ser também proporcional à matriz identidade. Logo, o planejamento deve ser tal que

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} = 0 \text{ para todo } i=1, \dots, K,$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} = 0 \text{ se } i \neq j \quad e$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 \text{ não dependa de } i \text{ (} i=1, \dots, K \text{)}.$$

Portanto, para planejamentos de primeira ordem, as condições para rotacionalidade são equivalentes às condições que cada coeficiente do modelo deve ser estimado com a mesma variância e que os estimadores dos diferentes coeficientes devem ser não correlacionados. Os planejamentos fatoriais com dois níveis para cada fator e muitos fatoriais fracionários são exemplos; mas existem muitos outros que também satisfazem as condições dadas acima. Por exemplo: para dois fatores, um planejamento rotacionável de primeira ordem pode ser construído, pegando-se os vértices de um polígono regular. Nas figuras 5.3,a e 5.3,b temos um exemplo de um pla

neejamento pentagonal e de um planejamento hexagonal, respectivamente.

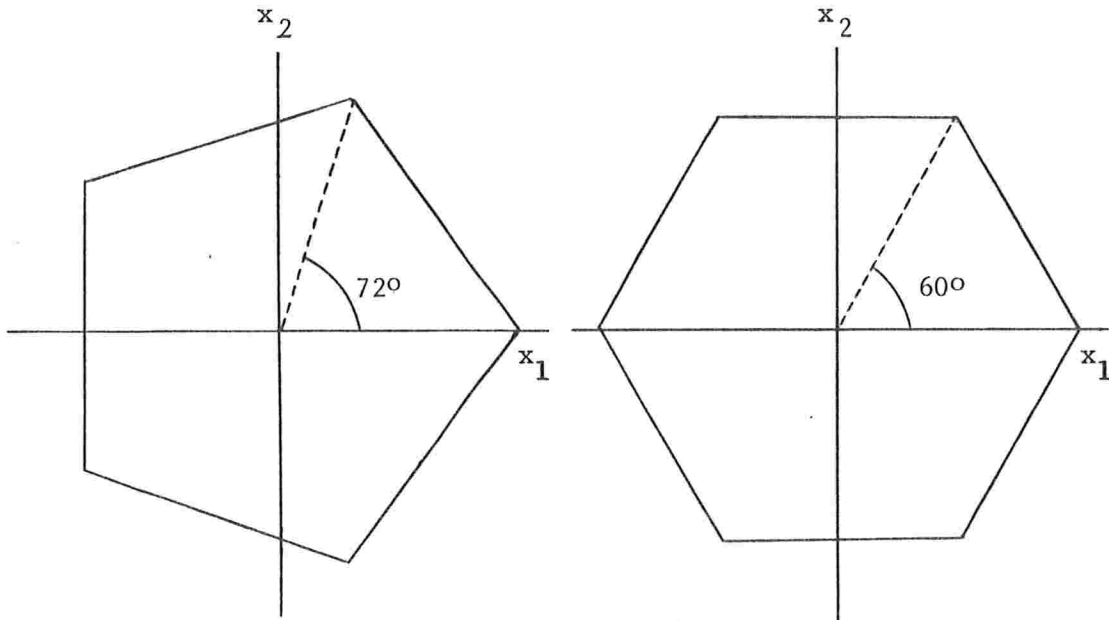


FIGURA (*) 5.3,a - Planejamento Pentagonal

FIGURA (*) 5.3,b - Planejamento Hexagonal

Os pontos dos planejamentos estão na tabela 5.3. Pontos adicionais podem ser acrescentados no centro (0,0).

PENTÁGONO		HEXÁGONO	
x_1	x_2	x_1	x_2
1,000	0	1,000	0
0,309	0,951	0,500	0,866
-0,809	0,588	-0,500	0,866
-0,809	-0,588	-1,000	0
0,309	-0,951	-0,500	-0,866
		0,500	-0,866

TABELA 5.3 - Planejamentos usando coordenadas de um Pentágono e de um Hexágono. (Quaisquer números proporcionais a estes podem ser usados)

(*) - Extraídas de Johnson & Leone, 1964.

Para $K = 3$, podemos usar os vértices do tetraedro regular com o centro na origem e qualquer orientação.

5.5.3 - Planejamentos Rotacionáveis de Segunda Ordem

No caso de $K = 2$, como vimos anteriormente, planejamentos rotacionáveis de primeira ordem podem ser construídos, pegando-se combinações de valores (níveis) das duas variáveis correspondendo a pontos nos vértices de polígonos regulares. Para planejamentos de segunda ordem, eles podem ser suplementados por observações na origem (o centro do planejamento). Muitas vezes é recomendado que devemos ter mais de uma observação na origem porque elas podem ser usadas para a obtenção de uma estimativa da variância residual.

Podemos também construir planejamentos rotacionáveis de segunda ordem para $K = 2$, pegando-se valores das variáveis correspondendo a pontos igualmente espaçados sobre 2 círculos centrados na origem. (Os planejamentos discutidos acima podem ser considerados como casos especiais, com o círculo menor tendo raio igual a zero). Para que os planejamentos também sejam ortogonais, os raios dos círculos devem estar numa razão que depende do número de pontos em cada círculo. Na tabela 5.4 mostram-se alguns valores para a construção destes planejamentos.

Número de Pontos sobre o círculo interno	6	7	8	7	8	8
Número de Pontos sobre o círculo externo	5	5	5	6	6	7
Razão entre os raios	0,204	0,267	0,304	0,189	0,250	0,176

TABELA 5.4 - Planejamentos Rotacionáveis Ortogonais de segunda ordem

Por exemplo, se desejarmos construir um planejamento rotacionável ortogonal de segunda ordem com 12 pontos (excluindo os pontos centrais), basta pegar 7 pontos equidistantes sobre o círculo interno e 5 pontos equidistantes sobre o círculo externo, com os raios numa razão igual a 0,267, conforme tabela 5.4. Na figura 5.4, temos a representação gráfica dos valores cujas coordenadas estão na tabela 5.5.

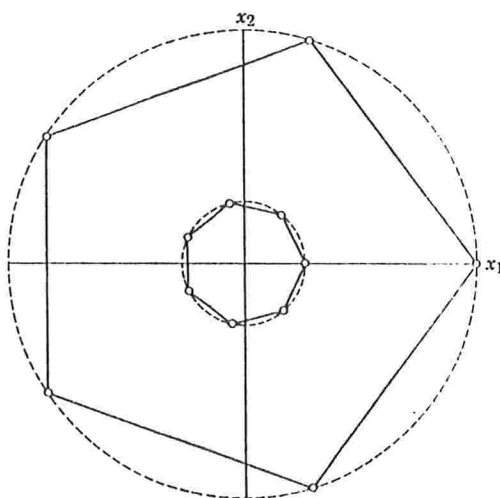


FIGURA 5.4 - Um Planejamento Rotacionável Ortogonal de segunda ordem com 12 pontos
Extraída de Johnson & Leone (1964).

CÍRCULO INTERNO							
x_1	0,267	0,166	-0,059	-0,241	-0,241	-0,059	0,166
x_2	0	0,209	0,260	0,115	-0,115	-0,260	-0,209

CÍRCULO EXTERNO					
x_1	1,000	0,309	-0,809	-0,809	0,309
x_2	0	0,951	0,588	-0,588	-0,951

TABELA 5.5 - Coordenadas dos pontos equidistantes sobre círculos concêntricos do planejamento rotacionável ortogonal de segunda ordem.

As idéias discutidas na secção 5.4 podem também ser usadas aqui para a construção de Planejamentos Compostos Rotacionáveis, os quais são muito úteis porque, como já foi visto anteriormente, permitem verificarmos se devemos usar a aproximação polinomial de primeira ou segunda ordens. A construção é a mesma, só que o valor de α é determinado pela expressão^(*)

$$\alpha = n_c^{1/4}$$

onde n_c é o número de pontos que formam o núcleo do planejamento composto (2^K ou uma fração adequada). Na tabela 5.5 temos vários exemplos destes planejamentos. O número de observações no centro do planejamento foi escolhido de modo que a variância da resposta estimada ($V(\hat{Y})$) é a mesma, tanto para $\rho = 1$ quanto para $\rho = 0$.

NÚMERO DE FATORES (K)	2	3	4	5	5	6	6	7	7	8	8	8
Planejamento Básico	2^2	2^3	2^4	2^5	$\frac{1}{2}2^5$	2^6	$\frac{1}{2}2^6$	2^7	$\frac{1}{2}2^7$	2^8	$\frac{1}{2}2^8$	$\frac{1}{4}2^8$
Número de Pontos no centro (n_0)	8	9	12	17	10	24	15	35	22	52	33	20
Número total de pontos extra ($2K+n_0$)	12	15	20	27	20	36	47	49	36	68	49	36
Valor de α	1,414	1,682	2,000	2,378	2,000	2,828	2,378	3,364	2,828	4,000	3,364	2,828

TABELA 5.5 - Planejamentos Compostos rotacionáveis

Outros tipos de planejamentos rotacionáveis de primeira e segunda ordens podem ser encontrados em, por exemplo, Box & Hunter (1957), John (1971) e Anderson & McLean (1974).

5.6 - OUTROS CRITÉRIOS PARA A CONSTRUÇÃO DE PLANEJAMENTOS DE PRIMEIRA E SEGUNDA ORDENS

Em 1959, Box & Draper consideraram dois requisitos

(*) - A demonstração encontra-se em Box & Hunter (1957).

como básicos para a construção do planejamento:

- a) O polinômio nas K variáveis contínuas $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_K$ ajustado pelo Método de Mínimos Quadrados deve representar o mais aproximadamente possível a verdadeira função ϕ em alguma região de interesse R;
- b) subordinado a satisfazer (a), deve existir uma alta chance de que a adequação da representação polinomial representar ϕ seja detectada.

No sentido de satisfazer o requisito (a) o planejamento é escolhido de modo a minimizar

$$J = \frac{N}{\sigma^2} \int_R E \left[\hat{Y}_x - \eta_x \right]^2 dx \Big/ \int_R dx \quad (5.7)$$

o desvio médio quadrático da verdadeira resposta, ponderado sobre a região R e normalizado com respeito ao número de observações e a variância. Na expressão (5.7) temos que

$$dx = dx_1, dx_2, \dots, dx_K,$$

\hat{Y}_x a resposta estimada e η_x a resposta verdadeira no ponto x.

Como, quando as observações estão sujeitas a erro, discrepâncias entre o polinômio ajustado e a verdadeira função ocorrem devido ao erro de amostragem (chamado de "erro de variância") e devido a inadequação do polinômio representar exatamente ϕ (chamado de "erro de viés"), podemos então usar a minimização de J como um critério para a escolha do planejamento tendo em vista que J pode ser escrito como

$$\begin{aligned} J &= V + B \\ &= \frac{N\Omega}{\sigma^2} \int_R V(\hat{Y}_x) dx + \frac{N\Omega}{\sigma^2} \int_R [E(\hat{Y}_x) - \eta_x]^2 dx \end{aligned}$$

onde

$$\Omega^{-1} = \int_R dx$$

ou seja, J é composto do "erro de variância" e do "erro de viés". Podemos notar também que a expressão V é a função de variância usada na secção anterior, ponderada sobre a região R .

Com relação ao requisito (b), é suposto que um teste de falta de ajustamento será feito pelo uso de uma análise de variância na qual a soma de quadrados residual

$$S_R = \sum_{u=1}^N (\hat{Y}_u - Y_u)^2$$

é comparada com a variância do erro experimental. Este teste pode envolver a comparação de S_R ou com um valor a priori σ^2 da variância do erro experimental suposto ser conhecido ou com alguma estimativa independente s^2 . Em qualquer um dos casos, um parâmetro que determina o poder do teste de ajustamento será a quantidade

$$\sum_{u=1}^N [E(\hat{Y}_u) - \eta_u]^2 = E(S_R) - \nu\sigma^2$$

onde ν é o número de graus de liberdade da soma de quadrados residual. Supondo que ν é assumido fixado, o planejamento deve ser escolhido de modo a fazer $E(S_R)$ grande, ou seja, fazer com que o poder do teste seja o maior possível.

Em resumo, deve-se considerar o requisito (a) como sendo de maior importância de modo que na prática procura-se primeiro a classe de planejamentos que minimizam J e então, seleciona-se desta classe, uma sub-classe de planejamen

tos que tornam grande o valor de $E(S_R)$.

Tendo em mente estes requisitos, os autores mostram que determinados planejamentos fatoriais fracionários, com 2 níveis para cada fator, satisfazem estes requisitos no caso de querermos determinar planejamentos de primeira ordem. Para isto, foi suposto que a resposta estimada \hat{Y}_x é dada por

$$\hat{Y}_x = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_Kx_K$$

um polinômio de primeira ordem, e que a resposta verdadeira η é dada por

$$\eta_x = \beta_0 + \beta_1x_1 + \dots + \beta_Kx_K + \beta_{11}x_1^2 + \dots + \beta_{KK}x_K^2 \\ + \beta_{12}x_1x_2 + \dots + \beta_{(K-1)K}x_{K-1}x_K$$

um polinômio de segunda ordem. É mostrado também que os planejamentos determinados satisfazem a condição de rotacionalidade. Um outro resultado importante que foi tirado, é que a escolha do planejamento depende muito mais do efeito do "erro do viés" do que do "erro de variância".

Com relação a escolha do planejamento de segunda ordem, Box & Draper (1963) supõem que

$$\hat{Y}_x = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_Kx_K + b_{11}x_1^2 + b_{KK}x_K^2 \\ + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{(K-1)K}x_{K-1}x_K$$

enquanto que a verdadeira resposta η_x é dada por um polinômio de terceira ordem. Neste caso, os autores restringem os seus estudos somente aos planejamentos rotacionáveis. Neste artigo são apresentados planejamentos de segunda ordem para $K=1$ e $K=2$ que satisfazem os requisitos (a) e (b) discuti-

dos anteriormente.

Karson, Manson & Hader (1969), consideram o mesmo problema de minimizar J só que considerando primeiro a minimização de B e depois, subordinado a isto, a minimização de V , conseguindo com isto valores de J menores do que os encontrados por Box & Draper.

Nesta linha iniciada por Box & Draper (1959) estão sendo escritos os artigos mais recentes para a escolha do planejamento ótimo para o problema que estudamos neste trabalho. Outras referências podem ser encontradas em Hunter (1966) e Mead & Pike (1975).

CAPÍTULO 6

COMENTÁRIOS GERAIS

Com o objetivo de fornecer um resumo do que foi discutido neste trabalho, podemos dizer que

i) para a aplicação deste processo de determinação de condições ótimas, os tipos de planejamentos mais adequados são os Planejamentos Compostos Rotacionáveis. A razão desta escolha surge do fato de que, como não conhecemos a verdadeira função de resposta ϕ , devemos usar um planejamento que permita verificarmos qual o grau mais adequado do polinômio a ser ajustado pelo Método de Mínimos Quadrados e também que faça com que as variâncias das respostas estimadas, por pontos equidistantes do centro do planejamento, sejam iguais. Com relação ao primeiro item, os Planejamentos Compostos são mais adequados pois a sua construção é baseada em duas etapas, em coincidência com o processo descrito neste trabalho. Na primeira etapa, usando-se os pontos experimentais que formam o seu núcleo, podemos estimar todos os efeitos de até primeira ordem e os efeitos das interações (entre dois fatores) e, a partir destes efeitos, verificar se devemos ou não usar a aproximação polinomial de primeira ordem. Se concluirmos que esta aproximação é boa, aplicamos então, usando todos os efeitos de primeira ordem, o Método de Máxima Inclinação Ascendente, conforme descrito no capítulo 3. Caso a aproximação de primeira ordem não seja adequada, acrescentamos então os outros pontos experimentais para que possamos

estimar todos os outros efeitos de segunda ordem envolvidos. Então, com todos os efeitos de até segunda ordem, passamos a usar os resultados do capítulo 4. Uma outra vantagem dos Planejamentos Compostos é que eles são bastante econômicos pelo fato de serem constituídas de poucos pontos experimentais. Com relação ao segundo item, esta é a própria condição imposta a um planejamento de modo que ele seja Rotacionável;

ii) apesar do processo ter sido desenvolvido em pesquisas ligadas à Química, temos observado que outras ciências tem usado, com bastante sucesso, este processo. Por exemplo, o uso deste processo é defendido por Miller (1974) em um artigo escrito sobre o estudo de influência de fatores, tais como tipos de drogas, em tratamentos terapêuticos. Um outro campo onde encontramos várias aplicações, é o de Ecologia Marinha (ver Alderdice (1972)) onde a influência de fatores, tais como salinidade e temperatura, é estudada na resposta porcentagem de sobrevivência de animais, entre outras respostas. Aqui na USP, mais especificamente, no Departamento de Fisiologia Geral do Instituto de Biociências, está sendo usado, em várias teses, a aproximação polinomial de segunda ordem para o estudo da natureza da superfície ajustada. Como são dois fatores são considerados, salinidade e temperatura, este estudo está sendo feito através de gráficos por contornos;

iii) para a estimação dos efeitos, através do Método de Mínimos Quadrados, vimos que, dependendo do planejamento utilizado, os cálculos não são muito complicados. Agora, dependendo da situação podemos ter um número muito grande de respostas observadas, como veremos mais para a frente em um exemplo prático, e aí o trabalho para a estimação dos efeitos será muito grande. Neste caso, podemos recorrer ao uso do computador eletrônico para o qual existem vários "paco-

tes" prontos que podem ser utilizados para a solução deste problema. Por exemplo, no computador do C.C.E. (Centro de Computação Eletrônica) da USP, temos implantado os "pacotes", SPSS (Statistical Package for the Social Sciences), ESP (Economic Software Package) e BMD (Biomedical Computer Programs). Também podemos utilizar o computador, para a construção de gráficos por contornos de polinômios em uma ou duas variáveis. Atualmente estamos trabalhando no ajuste de polinômios de segunda ordem e na construção dos gráficos por contornos correspondentes a cada um dos polinômios ajustados, em uma das teses citadas em ii). Como ilustração, e com a autorização da autora da tese, apresentaremos uma das partes deste trabalho. O experimento consistiu em estudar, para diversas fases (idade), a influência da temperatura e da salinidade na resposta, taxa de sobrevivência após 24 ho-

SALINIDADE TEMPERATURA	SALINIDADE				
	15 ^o /oo	25 ^o /oo	35 ^o /oo	45 ^o /oo	55 ^o /oo
15 ^o	100	100	95	100	95
	95	100	100	100	100
	95	90	95	95	100
20 ^o	100	100	100	100	100
	95	100	100	100	100
	75	90	100	95	80
25 ^o	100	90	95	90	90
	80	95	90	90	80
	75	100	95	80	65
30 ^o	95	95	100	95	80
	95	95	95	90	90
	89	100	95	100	90
35 ^o	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0

TABELA 6.1 - Níveis dos fatores e as respostas observadas

ras, da *Euterpina acutifrons* (Dana). Foram tomadas amostras em Santos e em São Sebastião. Na tabela 6.1 estão mostrados os resultados obtidos com animais de São Sebastião em águas de São Sebastião na fase de 6 dias.

Os fatores temperatura (ζ_1), medido em °C e salinidade (ζ_2), expresso como proporção de 1.000 unidades, foram considerados cada um com cinco níveis e cada resposta observada, medida em porcentagem, é a porcentagem de sobrevivência de um conjunto de 20 animais, da fase 6 dias, em um período de 24 horas. Da literatura, especializada no assunto, foi tirada a informação de que o melhor ajuste seria dado pelo polinômio de segunda ordem. E também, como as respostas foram tratadas como medidas percentuais calculadas de dados de populações binomiais foi usada, para a análise, a variável

$$Y = \text{arc sen } \sqrt{x},$$

onde x é a resposta observada. Então, o polinômio usado, como uma aproximação de ϕ foi

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 \zeta_1 + \beta_2 \zeta_2 + \beta_{11} \zeta_1^2 + \beta_{22} \zeta_2^2 + \beta_{12} \zeta_1 \zeta_2.$$

Através do uso do "pacote" SPSS, calculamos as estimativas de todos os efeitos, determinando assim o polinômio ajustado

$$\hat{Y} = -1,6594 + 0,2671\zeta_1 + 0,3289\zeta_2 - 0,0065\zeta_1^2 - 0,0004\zeta_2^2 - 0,0001\zeta_1\zeta_2. \quad (6.1)$$

Usando-se um programa escrito, especialmente para este fim, em linguagem Fortran, construímos os gráficos por contornos (Figura 6.1) correspondente ao ajuste dado em (6.1). Na Figura 6.1, as letras A, B, C, D e E representam, respectivamente, respostas de 100%, 99%, 98%, 97% e 96%.

52

.5500E+02	D	C	B	B	B	C	E
.4950E+02	C	B	A	A	B	B	C
.4400E+02	C	B	A	A	B	B	C
.3850E+02	B	A	A	A	A	B	D
.3300E+02	B	A	A	A	A	B	C
.2750E+02	B	A	A	A	A	B	C
.2200E+02	B	A	A	A	A	B	C
.1650E+02	B	A	A	A	A	B	C
.1100E+02	B	A	A	A	A	B	C
.5500E+01	B	A	A	A	A	B	C
.3492E-09	B	A	A	A	A	B	C
1500E+02	B	A	A	A	A	B	C
.1740E+02	B	A	A	A	A	B	C
.1980E+02	B	A	A	A	A	B	C
.2220E+02	B	A	A	A	A	B	C
.2460E+02	B	A	A	A	A	B	C
.2700E+02	B	A	A	A	A	B	C

FIGURA 6.1 - Contornos da superfície ajustada por (6.1)

BIBLIOGRAFIA

- [1] - Alderdice, D.F. (1972), Factors combinations - response of marine poikilotherms to environment factors acting in concert, pp. 1659-1722. In O. Kinne (ed.) *Marine Ecology*, Vol. 1, (Parte 3), Wiley-Interscience, New York.
- [2] - Anderson, V.L. & McLean, R.A. (1974), *Design of Experiments: A Realistic Approach*, Marcel Dekker, Inc., New York.
- [3] - Box, G.E.P. (1957), Evolutionary Operation: a method for increasing industrial productivity, *Applic. Statist.*, 6, pp. 81-101.
- [4] - Box, G.E.P. (1964), An introduction to response surface methodology, *Technical Report n° 33*, University of Wisconsin.
- [5] - Box, G.E.P. & Draper, N.R. (1959), A basis for the selection of a response surface design, *J. Amer. Statist. Assoc.*, 54, pp. 622-54.
- [6] - Box, G.E.P. & Draper, N.R. (1963), The choice of a second order rotatable design, *Biometrika*, 50, pp. 335-52.
- [7] - Box, G.E.P. & Hunter, J.S. (1957), Multifactor experimental designs for exploring response surfaces, *Ann. Math. Statist.*, 28, pp. 195-241.
- [8] - Box, G.E.P. & Lucas, H.L. (1959), Designs of experiments in nonlinear situations, *Biometrika*, 46, pp. 77-90.
- [9] - Box, G.E.P. & Youle, P.V. (1955), The exploration and exploitation of response surfaces: an example of the link between the fitted surface and the basic mechanism of the system, *Biometrics*, 11, pp. 287-322.
- [10] - Box, G.E.P. & Wilson, K.B. (1951), On the experimental attainment of optimum conditions (with discussion), *J. R. Statist. Soc.*, B 13, pp. 1-45.
- [11] - Davies, O.L. (Ed.) (1960), *Design and Analysis of Industrial Experiments*, Oliver and Boyd, Eddinburgh.

- [12] - Duncan,A.J.(1965), *Quality Control and Industrial Statistics*, 3^a ed., Inc. Homewood, Illinois.
- [13] - Éfimov,N.(1976), *Formes Quadratiques et Matrices*, Ed. Mir.
- [14] - Friedman,M. & Savage,L.J.(1947), *Selected Techniques os Statistical Analysis*, McGraw-Hill, New York.
- [15] - Hicks,C.R.(1964), *Fundamental Concepts in the Design of Experiments*, Holt, Rinehart and Winston, Inc., New York.
- [16] - Hill,W.J. & Hunter,W.G.(1966), A review of response surface methodology: a literature survey, *Tecnometrics*, 8, pp. 571-90.
- [17] - Hotteling,H.(1941), *Ann. Math. Statist.*, 12,20.
- [18] - John,P.W.M.(1971), *Statistical Design and Analysis of Experiments*, The Macmillan Company, New York.
- [19] - Johnson,N.L & Leone,F.C.(1964), *Statistics and Experimental Design: In Engineering and the Physical Sciences*, Vol. II,John Wiley And Sons, New York.
- [20] - Karson,M.J., Manson,A.R. & Hader,R.J.(1969), Minimum bias estimation and experimental design for response surfaces,*Technometrics*, 11, pp. 461-75.
- [21] - Mead,R. & Pike,D.J.(1975), A review of response surface methodology from a biometric viewpoint, *Biometrics*, 31, pp.803-51.
- [22] - Miller,I.(1974), Statistical designs for experiments in combination therapy, *Cancer Chemotherapy Reports*, 4, pp. 151-6.
- [23] - Searle,S.R.(1971), *Linear Models*, John Wiley and Sons, N.York.
- [24] - Wilde,D.J.(1964), *Optimum Seeking Methods*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.