DELINEAMENTO FATORIAL DUPLO

LAURO BOECHAT BATISTA[1]
ELIZA HELENA DE SOUZA FARIA[1]
MARIA EUN1CE O.C. RODRIGUES[2]
KELLEN MOREIRA BATISTA[3]
VANDEIR FRANCISCO GUIMARÃES[4]

BATISTA, L.B.; FARIA, E.H. de S.; RODRIGUES, M.E.O.C.; BATISTA, K.M.; GUIMARÃES, V.F. Delineamento Fatorial Duplo. **Semina:** Ci. Exatas/Tecnol., Londrina, v. 14/15, n. 4, p. 346-359, dez. 1993/dez. 1994.

RESUMO: *Foi desenvolvido um delineamento adequado ao estudo de superfícies de resposta, denominado* ***Delineamento Fatorial Duplo,*** *com duas variáveis. O delineamento é composto de 17 combinações entre os níveis das variáveis, sendo que 9 delas formam um fatorial 3^2, onde os níveis das variáveis X_1 e X_2 estão codificados em -1, O e +1, e as outras 8 combinações, associadas ao ponto central (0, 0), formam o segundo fatorial 3^2, onde os níveis das variáveis X_1 e X_2 estão codificadas em -a, o e +a. Foi verificado que quando a = 0,780776406, o delineamento torna-se ortogonal e, assim, diversas fórmulas foram obtidas, tais como as fórmulas para estimar os coeficientes polinomiais, as variâncias dos coeficientes, etc. O delineamento fatorial duplo mostrou-se menos eficiente do que o fatorial 3^2 e mais eficiente do que os fatoriais 5^2 e 7^2, para todos os coeficientes polinomiais, quando empregamos a técnica de PIMENTEL GOMES & CAMPOS (1972) e no caso de se utilizar a mesma área total para todos os delineamentos comparados.*

PALAVRAS-CHAVE: *Superfícies de resposta, Equações polinomiais de segunda ordem*

1 - INTRODUÇÃO

FISCHER Í1935), YATES (1937) e FINNEY (1945) apud JOHN (1971), foram os pesquisadores que deram início ao estudo dos esquemas fatoriais, necessários ao ajustamento de uma função aos dados.

BOX & WILSON (1951) introduziram os delineamentos compostos centrais, no estudo de superfícies de resposta. Os autores propuseram esses delineamentos, adequados ao ajustamento aos dados um polinômio do segundo grau, com k fatores, de modo a reduzir o número de tratamentos, resultantes entre as combinações dos níveis dos fatores.

O polinômio do segundo grau com k variáveis, utilizado pelos autores, é dado pela expressão:

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

Os delineamentos desenvolvidos, denominados **delineamentos compostos,** são construídos pela adição de outros tratamentos ao delineamento fatorial 2^k.

Os delineamentos compostos são divididos em dois grupos, ou seja, os delineamentos compostos centrais (mais importantes) e os delineamentos compostos não centrais.

Os delineamentos compostos centrais são obtidos adicionando-se ao esquema fatorial 2^k, onde os níveis das variáveis X estão codificados em -1 e +1, as seguintes combinações de tratamentos:

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

1 - Departamento de Matemática da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Itaguai, RJ, Brasil, CEP 23851-970.
2 - Departamento de Saúde da Comunidade do Centro de Ciências Médicas, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ, Brasil, CEP 24220.
3 - Aluna do Curso de Agronomia da UFRRJ.
4 - Aluno do Curso de Agronomia da UFRRJ e ex-bolsista do CNPq.

Assim, o número de tratamentos é dado por $2^k + 2k + 1$, sendo que o ponto central pode ser repetido P vezes e nesse caso o delineamento fica constitufdo de $2^k + 2k + P$ tratamentos.

O valor de pode ser escolhido para fazer os coeficientes do polinômio do segundo grau ortogonais uns aos outros, ou para minimizar os erros que são originados se a verdadeira forma da superfície de resposta não for quadrática ou ainda para dar ao delineamento a propriedade de ser rotacional.

BOX & HUNTER {1957} propuseram o critério de rotacionalidade nos delineamentos compostos centrais, onde a variância da estimativa da resposta do polinômio de segundo grau é a mesma para quaisquer pontos eqüidistantes do ponto central.

TRAMEL (1957) e ROJAS (1963, 1972) apud JORGE (1980) e outros pesquisadores estudaram o assunto referente a superfícies de resposta, onde sugeriram diversos novos delineamentos.

No Brasil, os estudos sobre superfícies de resposta começaram com CAMPOS (1967) que, comparando o delineamento proposto por BOX & HUNTER (1957) e o fatorial 3^3, concluiu que o delineamento fatorial é mais preciso do que o delineamento composto central rotativo. Esta conclusão foi obtida baseando-se nas variâncias das estimativas dos parâmetros, depois de reduzi-las à mesma unidade.

Em 1969, PIMENTEL GOMES fez um estudo detalhado sobre a determinação de ponto de máximo, ponto de mínimo ou ponto de sela nas superfícies de resposta, usando o critério de congruência de matrizes. Naquele trabalho, o autor informou que CAMPOS (1967) encontrou 84% de casos de pontos de sela quando utilizou a técnica de congruência de matrizes, em 50 ensaios fatoriais de 3^3, bem conduzidos, de adubação de milho, com N, P e K.

PENTEADO & BATISTA (1971) estudaram a eficiência do delineamento composto central em comparação com os fatoriais completos de dois fatores e concluíram que o delineamento composto central é menos eficiente do que o fatorial 5 X 5.

PIMENTEL GOMES & CAMPOS (1972) propuseram correções de modo que os intervalos fossem de comprimentos iguais, quando estudaram a eficiência do delineamento composto centrai rotativo, com um ponto central, em relação ao fatorial 3^3. Naquele estudo, o intervalo entre os pontos $(-\sqrt{3}, 0, 0)$ e $(\sqrt{3}, 0, 0)$ é igual a $2\sqrt{3}$ e os autores propuseram correções de maneira que o intervalo fosse igual ao delineamento fatorial 3^3, de comprimento 2. Para que isto fosse possível, os autores multiplicaram as coordenadas dos pontos no delineamento central rotativo por $1/\sqrt{3}$.

BATISTA (1976) estudou a ortogonalidade no delineamento composto central, com um máximo de quatro fatores, e determinou as fórmulas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com somente um ponto central. Nesse trabalho, o autor apresentou uma tabela que torna ortogonal o composto central.

BATISTA & SILVA (1978) estudaram também a ortogonalização do delineamento composto central, com diversos pontos centrais, concluindo que quando são usados oito pontos centrais, a precisão da estimativa do coeficiente quadrático b_{ii} é praticamente igual à precisão da estimativa do coeficiente linear b_i.

BATISTA (1978) apresentou um tipo de delineamento, que recebeu o nome de delineamento "em círculos", que tem por base, na formulação, os princípios de utilização de maior número de níveis para cada fator, menor número de combinações entre eles e independência na estimação dos coeficientes. O delineamento é formado por dois conjuntos de oito pontos com distâncias $\sqrt{2}$ e $a\sqrt{2}$ do centro, e mais P pontos centrais, dando nove níveis diferentes para cada fator.

Com a ortogonalização do delineamento em círculos, o autor determinou fórmulas para estimar as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau. Foi observado que à medida que D valor de P aumenta, as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau diminuem, o que aumenta a precisão das estimativas destes coeficientes.

CONAGIN (1979) estudou os delineamentos compostos centrais duplos que constam de dois conjuntos fatoriais, completos ou fracionários, nos níveis ± 1 e ± B, de um número duplo de pontos axiais (nos níveis $\pm a$ e $\pm ia$ para cada um dos fatores) e por um certo número de pontos centrais. Os valores i e B representam os níveis da parte fatorial, enquanto que a e ia representam os níveis da parte axial. Tais delineamentos apresentam maior flexibilidade do que os compostos centrais pois permitem o estudo de k fatores em vários níveis (cinco ou mais) e a partição ortogonal em blocos.

COSTA (1980) desenvolveu um novo delineamento para permitir o ajuste aos dados um polinômio de segundo grau com duas variáveis independentes, de modo a oferecer maior flexibilidade na escolha dos delineamentos fatoriais. Naquele trabalho, o autor usou dois fatores, cada um com sete níveis. O delineamento apresentado é composto por dois fatoriais 2 X 2, sendo que no primeiro os níveis estão codificados em -1 e +1 e no segundo em $-a$ e $+a$, acrescido pelos pontos $(0, a\sqrt{2})$, $(0, -a\sqrt{2})$, $(a\sqrt{2}, 0)$, $(-a\sqrt{2}, 0)$ e o ponto central é repetido até 8 vezes. O autor pesquisou também a eficiência do delineamento em função do número de repetições do ponto centra], chegando à conclusão que se deve, de preferência, utilizar somente um ponto central com o valor de a igual a 0.716332 a fim de que o delineamento seja mais eficiente.

JORGE (1980) estudou o delineamento Guadalupe para três fatores, analisado através do modelo de regressão polinomial quadrática e concluiu que para ensaios de adubação, o delineamento Guadalupe é menos eficiente que o fatorial 3^3 e mais eficiente que o composto central original. Foi também constatado que para ensaios no campo industrial, o delineamento Guadalupe é mais eficiente que o fatorial 3^3 e o composto central original.

CONAGIN (1982) apresentou um novo tipo de delineamento próprio para o estudo de superfícies de resposta, denominado delineamento composto com duas estrelas. Segundo o autor, trata-se de um delineamento simétrico, da "família do composto central", caracterizado pela presença de duas estrelas.

PERECIN et al. (1982) construíram as 155 frações regulares dos fatoriais fracionários $(1/5)5^3$, geradas pelo confundimento de componentes ortogonais, derivadas da teoria do "Corpo de Galois", mostrando que as três frações de CONAGIN & JORGE (1977) e outras 37 apresentam propriedades semelhantes para serem utilizadas como delineamento para superfícies de resposta de experimentos de adubação.

RODRIGUES (1984) desenvolveu um novo tipo de delineamento, denominado "delineamento em ângulos", que teve por finalidade o ajustamento aos dados um polinômio do segundo grau, com duas variáveis. Nesse delineamento, foram considerados oito novos pontos em relação ao delineamento composto central, escolhidos de modo a ortogonalizá-lo. Segundo o autor, o delineamento estudado mostrou-se mais eficiente que o fatorial 3^2 e menos eficiente que os fatoriais 5^2 e 7^2 na estimação dos coeficientes. Quando o autor considerou a mesma área total a ser gasta, para efeito de comparação entre os delineamentos, o delineamento em ângulos é mais preciso quando se usa um ponto centrai e neste caso ele é mais preciso do que os fatoriais 5^2 e 7^2 na estimação dos coeficientes b_i e b_{12} e menos preciso que os fatoriais 3^2 5^2 e 7^2 na estimação do coeficiente b_{ii}.

SILVA et al. (1985) estudaram um novo tipo de delineamento o qual tem por objetivo o ajustamento de superfícies de resposta, com duas variáveis. O delineamento foi denominado "delineamento de três parâmetros", sendo constituído por P pontos centrais, um fatorial 2^2 onde os níveis codificados das variáveis são $\pm$ 1, e os pontos codificados $(d, 0)$, $(-d, 0)$, $(0,g)$ e $(0,-g)$. Os autores determinaram fórmulas que permitem a ortogonalização deste delineamento. No caso de $d = g$, o delineamento torna-se um composto central ortogonal, com P pontos centrais.

PEREIRA & PERECIN (1985a) estudaram a máxima partição ortogonal em frações regulares $(1/5)5^3$, para análise de uma superfície de resposta e chegaram à conclusão que as frações que apresentaram melhores estruturas de "aliases" são classificadas como tipo W, conforme classificação das frações em tipos Y, Z e W sugerida por PERECIN et al. (1982).

PEREIRA & PERECIN (1985b) apresentaram um estudo da eficiência de delineamento $(1/5)5^3$, em relação ao delineamento composto central (15 pontos), quando usados para estimar uma superfície de resposta de modelo polinomial de segunda ordem. Os autores compararam as frações Y, Z e W com o composto central ortogonal e chegaram às seguintes conclusões: (i) as frações Y, Z e W estimam os coeficientes lineares com a mesma precisão; (ii) as frações do tipo W são mais eficientes na estimação das interações b_{ij}, (iii) as frações do tipo Y são mais eficientes na estimação dos coeficientes quadráticos b_{ii}; e (iv) as frações do tipo Z são menos eficientes na estimação dos coeficientes b_{ii} e b_{ij}.

ANDRADE & NOLETO (1985) apresentaram exemplos de fatoriais fracionários $(1/2)4^3$ e $(1/2)4^4$ para o ajuste de modelos polinomiais quadráticos. Os dois esquemas fatoriais foram desenvolvidos para serem usados por um grupo de pesquisadores do Sistema Cooperativo Agropecuário, o qual pretendeu iniciar uma rede de experimentos para estudar o problema da fertilidade dos solos de cerrados.

PIMENTEL GOMES & CONAGIN (1987) escreveram um livro sobre Planejamento e Análises Estatísticas em Experimentos de Adubação onde discutem, com exemplos, as superfícies de resposta e os delineamentos a elas apropriados, ensinando, inclusive, como interpretar a superfície quando tem ponto de sela ou quando o ponto de máximo matemático não convém às condições experimentais.

BATISTA et al. (1991) apresentaram um novo delineamento objetivando o estudo de superfícies de resposta, de maneira a oferecer maior flexibilidade na escolha dos níveis dos fatores. O delineamento estudado pelos autores é composto de 13 combinações entre os níveis das variáveis X_1 e X_2. Foi verificado que o delineamento obteve eficiência máxima quando $a = 1$ e $g = 1{,}0483413$. Com relação aos delineamentos fatoriais 3^2, 5^2 e 7^2, o novo delineamento é mais eficiente do que estes fatoriais, para alguns valores menores ou iguais a 1,2, em relação aos coeficientes b_i e b_{12} Considerando o coeficiente b_{ii}, este delineamento é mais eficiente do que o fatorial 7^2 e menos eficiente do que os fatoriais 3^2 e 5^2.

BATISTA et al. (1992) desenvolveram um novo tipo de delineamento, denominado delineamento em a e g, o qual é constituído por um fatorial 2^2, onde os níveis estão codificados em -1 e +1, acrescido dos pontos axiais (0, 0), $(-a, 0)$, $(a, 0)$, $\{-2a, 0)$, $(2a, 0\}$, $(0, -g)$, $(0,g)$, $(0, -2g)$ e $(0, 2g)$, Os autores desenvolveram diversas fórmulas, levando em consideração a ortogonalização do mesmo. O delineamento em a e 7 mostrou a máxima eficiência quando o valor de a é igual a 0,5, no caso da estimação dos coeficientes b_1, b e b_{12}. A máxima eficiência no caso da estimação dos coeficientes b_2, b_{22} e b_{12} é obtida quando o valor de $g = 0{,}5$.

Os autores do delineamento em a e g compararam a eficiência desse delineamento com os delineamentos fatoriais de 3X3, 5X5 e 7X7, levando em consideração o mesmo intervalo de comprimento e a mesma área a ser gasta na experimentação, chegando às seguintes conclusões: a) o delineamento em a e g é mais eficiente do que os delineamentos fatoriais 3^2, 5^2 e 7^2 na estimação de b_{12}, quando $a = 0{,}5$ ou $g = 0{,}5$; b) o delineamento apresentado é tão eficiente quanto o delineamento fatorial 3^2, na estimação de (b_{11} quando $a = 0{,}5$ ou na estimação de b_{22} quando $g = 0{,}5$. Com relação aos delineamentos fatoriais de 5X5 e 7X7, o delineamento desenvolvido é mais eficiente do que ambos, na estimação de β_{11} (α = 0,5) e na estimação de β_{22} (γ = 0,5); c) com relação aos coeficientes lineares, este delineamento é menos eficiente do que o delineamento fatorial 3X3 e mais eficiente do que o delineamento fatorial 7X7, para α = 0,5 e γ = 0,5, considerando respectivamente os coeficientes lineares β_1 e β_2. Com relação ao delineamento fatorial 5X5, a eficiência é a mesma quando consideramos isoladamente cada coeficiente linear, para α = 0,5 e γ = 0,5, respectivamente, nos casos da estimação de β_1 e β_2.

MATERIAL E MÉTODOS

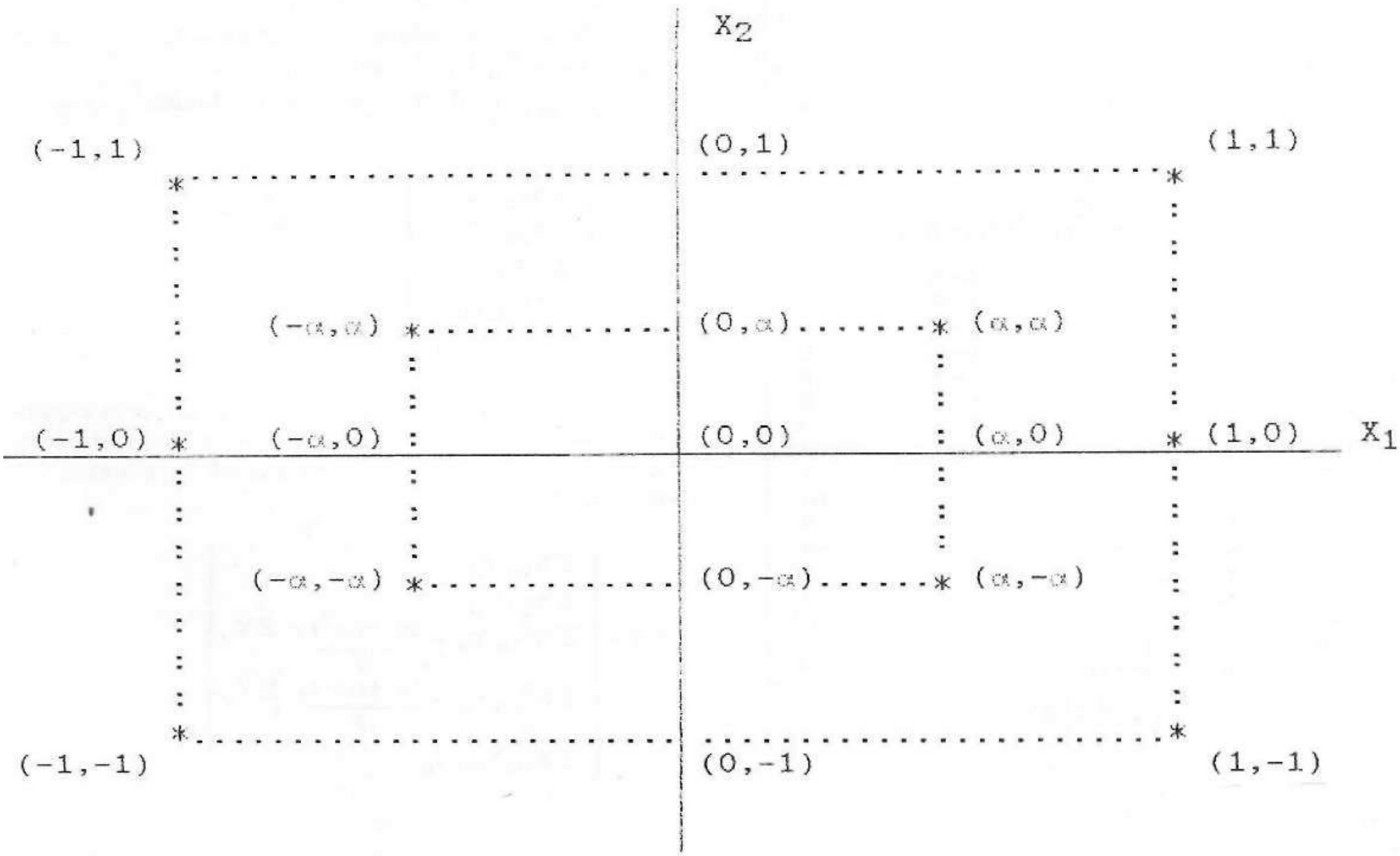
DELINEAMENTO

No estudo do novo delineamento, denominado pelos autores de Delineamento Fatorial Duplo, tomou-se por ponto de partida o ponto central {0, 0), onde espera-se ser um ponto próximo do ponto de máximo (ou mínimo) da resposta polinomial. Assim, um fatorial 3^2, onde os níveis codificados das variáveis X_1 e X_2 são - 1 , 0 e +1, faz parte do presente delineamento, sendo que a combinação (0, 0) entre os níveis das variáveis X_1 e X_2 é o ponto central, perfazendo 9 combinações. As outras oito, mais o ponto central (0, 0), formam o segundo fatorial 3^2, onde os níveis codificados das variáveis X_1 e X_2 são *-a,* 0 e +a. Portanto, o Delineamento Fatorial Duplo tem 17 combinações entre os níveis das variáveis (Figura 1).

O delineamento em estudo tem 5 níveis para cada variável, sendo que a cada nível de uma delas existem 3 ou 5 níveis da outra variável.

O valor de *a* pode ser escolhido de maneira a ortogonalizar o presente delineamento. Para que isto ocorra, devemos fazer com que a matriz X'X, proveniente do modelo matemático, seja diagonal.

FIGURA 1 - DELINEAMENTO FATORLAL DUPLO



MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático de um polinômio do segundo grau, com duas variáveis independentes, adotado no presente estudo, é dado por:

$$y_u = Y_u - \bar{Y}_u = \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_{11}(X^2_{1u} - \bar{X}^2_{1u}) + \\ + \beta_{22}(X^2_{2u} - \bar{X}^2_{2u}) + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + e_u$$

A utilização deste modelo matemático tem por objetivo facilitar os cálculos. Este modelo simplifica a diagonalização da matriz X'X, quando procura-se ortogonalizar o delineamento.

Do modelo matemático obtemos, em forma matricial, o sistema de equações $Y = X\beta + \in$, onde:

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \\ y_9 \\ y_{10} \\ y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \\ y_{14} \\ y_{15} \\ y_{16} \\ y_{17} \end{bmatrix} \qquad \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_{11} \\ \beta_{22} \\ \beta_{12} \end{bmatrix} \qquad E = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \\ e_7 \\ e_8 \\ e_9 \\ e_{10} \\ e_{11} \\ e_{12} \\ e_{13} \\ e_{14} \\ e_{15} \\ e_{16} \\ e_{17} \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} x_{1u} & x_{2u} & (X^2_{1u} - \bar{X}^2_{1u}) & (X^2_{2u} - \bar{X}^2_{2u}) & X_{1u}X_{2u} \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1-A & 1-A & 1 \\ 1 & 0 & 1-A & 0-A & 0 \\ 1 & -1 & 1-A & 1-A & -1 \\ 0 & 1 & 0-A & 1-A & 0 \\ 0 & 0 & 0-A & 0-A & 0 \\ 0 & -1 & 0-A & 1-A & 0 \\ -1 & 1 & 1-A & 1-A & -1 \\ -1 & 0 & 1-A & 0-A & 0 \\ -1 & -1 & 1-A & 1-A & 1 \\ \alpha & \alpha & \alpha^2-A & \alpha^2-A & \alpha^2 \\ \alpha & 0 & \alpha^2-A & 0-A & 0 \\ \alpha & -\alpha & \alpha^2-A & \alpha^2-A & -\alpha^2 \\ 0 & \alpha & 0-A & \alpha^2-A & 0 \\ 0 & -\alpha & 0-A & \alpha^2-A & 0 \\ -\alpha & \alpha & \alpha^2-A & \alpha^2-A & -\alpha^2 \\ -\alpha & 0 & \alpha^2-A & 0-A & 0 \\ -\alpha & -\alpha & \alpha^2-A & \alpha^2-A & \alpha^2 \end{bmatrix} \end{array}$$

onde $A = \bar{X}^2_{1u} = \bar{X}^2_{2u}) = \dfrac{(6 + 6\alpha^2)}{17}$ e $y_u = Y_u - \bar{Y}_u$

EQUAÇÕES NORMAIS

As equações normais são obtidas, por meio da teoria dos quadrados mínimos, minimizando a soma dos quadrados dos erros. Então, obtemos $X'X\hat{\beta} = X'Y$, que é o sistema de equações normais. Deste modo, no delineamento fatorial duplo, tem-se:

$$X'X = \begin{bmatrix} 6+6\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6+6\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F & G & 0 \\ 0 & 0 & G & F & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4+4\alpha^4 \end{bmatrix}$$

Onde

$$F = 6 + 6\alpha^4 - \frac{(6 + 6\alpha^2)^2}{17} \longrightarrow F = (2 + 2\alpha^4) + G$$

$$G = 4 + 4\alpha^4) - \frac{(6 + 6\alpha^2)^2}{17}$$

A matriz X'Y é dada por:

$$X'Y = \begin{bmatrix} \Sigma X_{1u} y_u \\ \Sigma X_{2u} y_u \\ \Sigma X^2_{1u} y_u - \dfrac{(6 + 6\alpha^2)}{17} \cdot \Sigma y_u \\ \Sigma X^2_{2u} y_u - \dfrac{(6 + 6\alpha^2)}{17} \cdot \Sigma y_u \\ \Sigma X_{1u} X_{2u} y_u \end{bmatrix}$$

Quando se adota a transformação dos dados $y_u = Y_u - \bar{Y}_u$, logicamente $\Sigma y_u = 0$.

Portanto, $\dfrac{(6 + 6\alpha^2)}{17} \cdot \Sigma y_u = 0$. Então,

$$X'Y = \begin{bmatrix} \Sigma X_{1u} y_u \\ \Sigma X_{2u} y_u \\ \Sigma X^2_{1u} y_u \\ \Sigma X^2_{2u} y_u \\ \Sigma X_{1u} X_{2u} y_u \end{bmatrix}$$

Se no modelo matemático do polinômio do segundo grau não tivesse sido adotada a transformação $y_u = Y_u - \bar{Y}_u$, mas sim o valor original Y_u, a matriz X'Y seria dada por:

$$X'Y = \begin{bmatrix} \Sigma X_{1u} Y_u \\ \Sigma X_{2u} Y_u \\ \Sigma X^2_{1u} Y_u - \dfrac{(6 + 6\alpha^2)}{17} \cdot \Sigma Y_u \\ \Sigma X^2_{2u} Y_u - \dfrac{(6 + 6\gamma^2)}{17} \cdot \Sigma Y_u \\ \Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u \end{bmatrix}$$

SOLUÇÃO DO SISTEMA

Das equações normais $X'X\hat{\beta} = X'Y$, obtém-se a solução do sistema por meio da matriz inversa $(X'X)^{-1}$, pois a matriz X'X é não singular. Então,

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

Pode-se notar que a matriz X'X não é diagonal. Para que a mesma passe a ser diagonal, torna-se necessário fazer G = 0. Portanto, como $F = (2 + 2\alpha^4) + G$, tem-se $F = 2 + 2\alpha^4$. Com este procedimento, teremos:

$$X'X = \begin{bmatrix} 6+6\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6+6\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2+2\alpha^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2+2\alpha^4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4+4\alpha^4 \end{bmatrix}$$

Desta maneira, a inversa da matriz X'X é facilmente obtida, como a seguir:

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{(6+6\alpha^4)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{(6+6\alpha^4)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(2+2\alpha^4)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{(2+2\alpha^4)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{(4+4\alpha^4)} \end{bmatrix}$$

Portanto, pode-se determinar independentemente os coeficientes polinomiais, quando G = 0. Então,

$$\hat{\beta}_1 = \frac{1}{(6+6\alpha^4)} \cdot \Sigma X_{1u} Y_u$$

$$\hat{\beta}_2 = \frac{1}{(6+6\alpha^4)} \cdot \Sigma X_{2u} Y_u$$

$$\hat{\beta}_{11} = \frac{\Sigma X^2_{1u} Y_u - \frac{(6+6\alpha^2)}{17} \Sigma Y_u}{(2+2\alpha^4)}$$

$$\hat{\beta}_{22} = \frac{\Sigma X^2_{2u} Y_u - \frac{(6+6\alpha^2)}{17} \Sigma Y_u}{(2+2\alpha^4)}$$

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

SOMA DE QUADRADOS

Sabe-se pela teoria de modelos lineares que a soma de quadrados devida aos erros é dada por:

$$SQ\ erro = Y'Y - \hat{\beta}'X'Y$$

Da expressão da SQ erro, pode-se tirar a SQ devida aos parâmetros, como se segue:

$$SQ\ Parâmetros = \hat{\beta}'X'Y, \text{ onde:}$$

$\hat{\beta} = [\hat{\beta}_1\ \hat{\beta}_2\ \hat{\beta}_{11}\ \hat{\beta}_{22}\ \hat{\beta}_{12}]$ e X'Y já foi citada.

Como as estimativas dos coeficientes polinomiais são determinadas independentemente, quando G = 0, isto é, quando o delineamento ê ortogonal, então a soma de quadrados devida aos parâmetros pode ser decomposta em:

$$SQ\,\hat{\beta}_1 = \hat{\beta}_1\ \Sigma X_{1u} Y_u\ , SQ\,\hat{\beta}_2 = \hat{\beta}_2\ \Sigma X_{2u} Y_u$$

$$SQ\,\hat{\beta}_{11} = \hat{\beta}_{11}\ \Sigma X^2_{1u} Y_u - \frac{(6+6\alpha^2)}{17}\ \Sigma Y_u$$

$$SQ\,\hat{\beta}_{22} = \hat{\beta}_{22}\ \Sigma X^2_{2u} Y_u - \frac{(6+6\alpha^2)}{17}\ \Sigma Y_u$$

$$SQ\,\hat{\beta}_{12} = \hat{\beta}_{12}\ X_{1u} X_{2u} Y_u$$

VARIÂNCIAS DAS ESTIMATIVAS

As variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais são obtidas através da matriz de dispersão, que é a matriz das variâncias e covariâncias. Esta matriz é dada por:

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

No presente estudo, quando fazemos G = 0, as variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais são dadas por:

$$V(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{6+6\alpha^2)}$$

$$V(\hat{\beta}_2) = \frac{\sigma^2}{6+6\alpha^2)}$$

$$V(\hat{\beta}_{11}) = \frac{\sigma^2}{2+2\alpha^2)}$$

$$V(B_{22}) = \frac{\sigma^2}{2+2\alpha^2)}$$

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

TESTES DE SIGNIFICÂNCIA

O valor do "t" de Student para testar a hipótese de que H_0: $\hat{\beta}_i = 0$ versus H_1: $\hat{\beta}_i \neq 0$ é dado por:

$$t = \frac{\hat{\beta}_i}{\sqrt{(\hat{\beta}_i)}}$$

ESTUDO DO PONTO DE MÁXIMO, MÍNIMO OU DE SELA

Por meio do estudo da matriz $\begin{bmatrix} 2\hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12} \\ \hat{\beta}_{12} & 2\hat{\beta}_{22} \end{bmatrix}$ pode-se estudar o máximo, o mínimo ou o ponto de sela do polinômio do segundo grau, por meio de congruência de matrizes.

Se a matriz for definida positiva, então haverá ponto de mínimo e, se for definida negativa, então o ponto será de máximo. Se a matriz não for definida, então haverá ponto de sela.

Para saber se a matriz é definida ou não, através de congruência de matrizes, necessitamos diagonalizar a matriz descrita anteriormente. Se na matriz diagonal os termos da diagonal principal forem positivos, a matriz será definida positiva; se forem negativos, a matriz será definida negativa; e em outro caso, onde os termos forem positivos e negativos, a matriz não será definida.

EFICIÊNCIA DO DELINEAMENTO

A eficiência do delineamento será estudada tendo por base os valores de a, como também comparando este delineamento com os delineamentos fatoriais de 3X3, 5X5 e 7X7.

A técnica preconizada por PIMENTEL GOMES & CAMPOS (1972), consiste em comparar as variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais, quando igualados os comprimentos dos intervalos das variáveis.

ND cálculo de comparação de eficiência, também será usada a correção necessária de modo que a área a ser utilizada na experimentação seja a mesma, para que a comparação seja exequível. Esta técnica foi proposta por PENTEADO & BATISTA (1971).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Primeiramente, iremos ajudar aos dados extraídos do Delineamento Fatorial Duplo, o seguinte modelo matemático:

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

Deste modo, tem-se, através da forma matricial, a matriz X, a qual foi descrita em MATERIAL E MÉTODOS.

Como é notório, se a matriz X'X do delineamento for diagonal, então as estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau serão independentes. Portanto, para ortogonalizar o presente delineamento, deve-se diagonalizar a matriz X'X, isto é, deve-se igualar G a zero (G = 0). Então,

$$4 + 4\alpha^4 - \frac{(6 + 6\alpha^2)^2}{17} = 0$$

Desenvolvendo a expressão, obtemos:

$$4\alpha^4 - 9\alpha^2 + 4 = 0$$

Resolvendo, vem:

$$\alpha^2 = \frac{9 \pm \sqrt{17}}{8}, \text{ isto é,}$$

$$\alpha_1 = 0{,}780776406 \text{ e } \alpha_2 = 1{,}280776406$$

Pode-se observar que $\frac{1}{\alpha_1} = \alpha_2$, ou seja, α_1 é o inverso de α_2. Portanto, somente adotaremos o valor de $\alpha_1 = 0{,}780776406$ para ortogonalizar o Delineamento Fatorial Duplo.

Como já foi visto, quando G = 0, isto é, $\alpha = 0{,}780776406$, a matriz X'X torna-se diagonal (Tabela 1). Para r repetições, a matriz X'X (Tabela 2) será dada por:

TABELA 1 – MATRIZ DIAGONAL X'X

$$\begin{bmatrix} 9{,}6576708 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9{,}6576708 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2{,}743253 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2{,}743253 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5{,}486506 \end{bmatrix}$$

TABELA 2 – MATRIZ DIAGONAL X'X, COM r REPETIÇÕES

$$\begin{bmatrix} 9{,}6576708\ r & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9{,}6576708\ r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2{,}743253\ r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2{,}743253\ r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5{,}486506\ r \end{bmatrix}$$

No estudo de modelos lineares, aprendemos que as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau são dadas pelos elementos correspondentes da matriz $(X'X)^{-1}\sigma^2$. Como é fácil a inversão da matriz X'X, pois a mesma é diagonal, tem-se:

TABELA 3 – MATRIZ $(X'X)^{-1}$

$$\begin{bmatrix} 0,1035446/r & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,1035446/r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,3645307/r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,3645307/r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,1822653/r \end{bmatrix}$$

Portanto, vem:

$$V(\hat{\beta}_1) = V(\hat{\beta}_2) = 0{,}1035446\,\sigma^2 / r$$

$$V(\hat{\beta}_{11}) = V(\hat{\beta}_{22}) = 0{,}3645307\,\sigma^2 / r$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = 0{,}1822653\,\sigma^2 / r$$

Para que se possa comparar a eficiência deste delineamento com as dos delineamentos fatoriais 3^2, 5^2 e 7^2, onde os níveis dos fatores estão codificados em -1, 0, +1; -1, -1/2, 0, +1/2, +1; e -1, -2/3, -1/3, 0, +1/3, +2/3 e +1, respectivamente, é necessário ajustar aos dados provenientes destes delineamentos fatoriais o seguinte modelo matemático:

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

Desta maneira, facilmente são obtidas as matrizes X'X (Tabelas 4, 5 e 6):

TABELA 4 – MATRIZ X'X DO DELINEAMENTO FATORIAL 3^2

$$\begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

TABELA 5 – MATRIZ X'X DO DELINEAMENTO FATORIAL 5^2

$$\begin{bmatrix} 12.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4.375 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4.375 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6.25 \end{bmatrix}$$

TABELA 6 – MATRIZ X'X DO DELINEAMENTO FATORIAL 7^2

$$\begin{bmatrix} 196/9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 196/9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 588/81 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 588/81 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 784/81 \end{bmatrix}$$

Assim, as variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais, nos três esquemas fatoriais, são dadas pelas seguintes expressões:

TABELA 7 - VARIÂNCIAS DAS ESTIMATIVAS DOS COEFICIENTES POLINOMIAIS, NOS ESQUEMAS FATORIAIS 3^2, 5^2 E 7^2

Fatorial	$V(\hat{\beta}_i)$	$V(\hat{\beta}_{ii})$	$V(\hat{\beta}_{12})$
3^2	$0,1667\ \sigma^2/r$	$0,5000\ \sigma^2/r$	$0,2500\ \sigma^2/r$
5^2	$0,0800\ \sigma^2/r$	$0,2286\ \sigma^2/r$	$0,1600\ \sigma^2/r$
7^2	$0,0459\ \sigma^2/r$	$0,1378\ \sigma^2/r$	$0,1033\ \sigma^2/r$

Comparando-se estas variâncias (Tabela 7) com as encontradas no delineamento fatorial duplo, ajustadas para o mesmo intervalo de comprimento, verifica-se que o presente delineamento é mais eficiente do que o fatorial 3^2 e menos eficiente do que os fatoriais 5^2 e 7^2, para todos os coeficientes polinomiais.

Nas comparações anteriores não se levou em consideração que na experimentação a ser efetuada se deve ter mesmo custo em termos de área total. Portanto, considerando o mesmo número de parcelas, nos delineamentos citados, é necessário considerar um delineamento como referencial e, se adotarmos o fatorial 7^2 com 49 parcelas como referencial, tem-se que repetir os esquemas fatoriais tantas vezes quantos forem os resultados das razões 49/9; 49/25; 49/49; e 49/17, respectivamente, aos esquemas fatoriais 3^2 5^2, 7^2 e o delineamento em estudo (Tabela 8).

TABELA 8 - VARIÂNCIAS DAS ESTIMATIVAS DOS COEFICIENTES POLINOMIAIS, NOS ESQUEMAS FATORIAIS 3^2. 5^2 E 7^2 E O FATORIAL DUPLO. CONSIDERANDO A MESMA ÁREA TOTAL E O MESMO INTERVALO DE COMPRIMENTO

Fatorial	$V(\hat{\beta}_i)$	$V(\hat{\beta}_{ii})$	$V(\hat{\beta}_{12})$
3^2	$0,030618\ \sigma^2$	$0,091837\ \sigma^2$	$0,045918\ \sigma^2$
5^2	$0,040816\ \sigma^2$	$0,116633\ \sigma^2$	$0,081633\ \sigma^2$
7^2	$0,045918\ \sigma^2$	$0,137755\ \sigma^2$	$0,103316\ \sigma 2$
Duplo	$0,035924\ \sigma^2$	$0,126470\ \sigma^2$	$0,063235\ \sigma^2$

Comparando as variâncias dos coeficientes polinomiais do delineamento fatorial duplo, com as respectivas variâncias dos coeficientes dos delineamentos fatoriais, considerando a mesma área total e o mesmo intervalo de comprimento, verifica-se que o delineamento fatorial duplo é menos eficiente do que o fatorial 3^2 e mais eficiente do que os fatoriais 5^2 e 7^2.

Por meio dos estudos de modelos lineares, sabe-se que as estimativas dos coeficientes polinomiais são dadas, matricialmente, por:

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

Como $(X'X)^{-1}$ é diagonal, facilmente se determinam as fórmulas que permitem calcular as estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, no presente delineamento. Assim, tem-se:

$$\hat{\beta}_i = \frac{0,1035446}{r} . \Sigma X_{iu} Y_u$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \frac{0,3645307}{r} . [\Sigma X^2_{iu} Y_u - 0,5680982 \Sigma Y_u$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{0,1822653}{r} . [\Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u$$

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

Comparando-se o modelo matemático adotado por BOX & WILSON (1951) com o adotado no presente delineamento, pode-se obter a estimativa de B_o, isto é,

$$\hat{\beta}_o = \overline{Y} - 0,5680982 (\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{22})$$

A soma de quadrados devida à regressão, segundo a teoria dos modelos lineares, é dada por $\hat{\beta}'X'Y$. Então, as somas de quadrados referentes aos coeficientes polinomiais são dadas por:

$$SQ(\hat{\beta}_i) = \hat{\beta}_i \Sigma X_{iu} Y_u$$
$$SQ(\hat{\beta}_{ii}) = \hat{\beta}_{ii} [\Sigma X^2_{iu} Y_u - 0,5680982 \Sigma Y_u]$$
$$SQ(\hat{\beta}_{12}) = \hat{\beta}_{12} \Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u$$

Neste Delineamento Fatorial Duplo, a análise da variância é obtida conforme a Tabela 9. Pode-se facilmente verificar que cada nível da variável X_1 tem 3 ou 5 níveis da variável X_2, ou vice-versa. Desta maneira, caso não seja possível a determinação do máximo ou do mínimo da função polinomial, isto é, caso haja ponto de sela, pode-se aproveitar os dados e ajustar aos mesmos uma equação do segundo grau, dada pelo modelo matemático a seguir, com uma só variável, em cada nível da outra variável, determinando as respectivas análises das variâncias (Tabelas 10 e 11).

TABELA 9 – QUADRO DA ANÁLISE DA VARIÂNCIA, EM BLOCOS AO ACASO

F.V.	G.L.	S.Q.
Total	17r - 1	$\Sigma Y^2_u - (\Sigma Y_u)^2 / (17r)$
Blocos	r - 1	$\Sigma B^2_j / 17 - (\Sigma Y_u)^2 / (17r)$
$\hat{\beta}_1$	1	$\hat{\beta}_1 \Sigma X_{1u} Y_u$
$\hat{\beta}_2$	1	$\hat{\beta}_2 \Sigma X_{2u} Y_u$
$\hat{\beta}_{11}$	1	$\hat{\beta}_{11} [\Sigma X^2_{1u} Y_u - 0,5680982 \Sigma Y_u]$
$\hat{\beta}_{22}$	1	$\hat{\beta}_{22} [\Sigma X^2_{2u} Y_u - 0,5680982 \Sigma Y_u]$
$\hat{\beta}_{12}$	1	$\hat{\beta}_{12} X_{1u} X_{2u} Y_u$
Falta de ajuste	11	SQ Trats $- SQ\hat{\beta}_1 - SQ\hat{\beta}_2 - SQ\hat{\beta}_{11} - SQ\hat{\beta}_{22} - SQ\hat{\beta}_{12}$
Erro	16 (r-1)	SQ Total - SQ Demais

TABELA 10 - QUADRO DA ANÁLISE DA VARIÂNCIA, EM BLOCOS AO ACASO, COM REGRESSÕES DE X_2 DENTRO DOS NÍVEIS DE X_1

F.V.	G.L.	S.Q.
Total	$17r - 1$	$\Sigma Y^2_u - (\Sigma Y_u)^2 / (17r)$
Blocos	$r - 1$	$\Sigma B^2_j / 17 - (\Sigma Y_u)^2 / (17r)$
Variável X_1	4	$\frac{T^2_{-1,1}}{3r} + \frac{T^2_{-\alpha,1}}{3r} + \frac{T^2_{0,1}}{5r} + \frac{T^2_{\alpha,1}}{3r} + \frac{T^2_{1,1}}{3r}$
R.L. de X_2 dentro nível -1 de X_1	1	$[T_{X-1,1} - T_{X-1,-1}]^2 / 2r$
R.Q. de X_2 dentro nível -1 de X_1	1	$[T_{X-1,1} - 2T_{X-1,0} + T_{X-1,-1}]^2 / 6r$
R.L. de X_2 dentro nível $-\alpha$ de X_1	1	$[T_{X-\alpha,1} - T_{X-\alpha,-1}]^2 / 2r$
R.Q. de X_2 dentro nível $-\alpha$ de X_1	1	$[T_{X-\alpha,1} - 2T_{X-\alpha,0} + T_{X-\alpha,-1}]^2 / 6r$
R.L. de X_2 dentro nível 0 de X_1	1	$\frac{[-T_{X0,-1} - \alpha T_{X0,-\alpha} + \alpha T_{X0,\alpha} + T_{X0,1}]^2}{3{,}2192236\, r}$
R.Q. de X_2 dentro nível 0 de X_1	1	$\frac{[0{,}356155\, T_{X0,-1} - 0{,}034233\, T_{X0,-\alpha} -}{0{,}670573\, r} + \frac{-0{,}643845\, T_{X0,0} - 0{,}034233\, T_{X0,\alpha} + 0{,}356155\, T_{X0,1}]^2}{0{,}670573\, r}$
Desvio de X_2 dentro nível 0 de X_1	2	$SQ\ X_{2/0} - SQ\ RL\ X_{2/0} - SQ\ RQ\ X_{2/0}$
R.L. de X_2 dentro nível α de X_1	1	$[T_{X\alpha,1} - T_{X\alpha,-1}]^2 / 2r$
R.Q. de X_2 dentro nível α de X_1	1	$[T_{X\alpha,1} - 2T_{X\alpha,0} + T_{X\alpha,-1}]^2 / 6r$
R.L. de X_2 dentro nível 1 de X_1	1	$[T_{X1,1} - T_{X1,-1}]^2 / 2r$
R.Q. de X_2 dentro nível 1 de X_1	1	$[T_{X1,1} - 2T_{X1,0} + T_{X1,-1}]^2 / 6r$
Erro	$16(r-1)$	SQ total - SQ demais

TABELA 11 – QUADRO DA ANÁLISE DA VARIÂNCIA, EM BLOCOS AO ACASO, COM REGRESSÕES DE X_1 DENTRO DOS NÍVEIS DE X_2

F.V.	G.L.	S.Q.
Total	$17r - 1$	$\Sigma Y^2_u - (\Sigma Y_u)^2 / (17r)$
Blocos	$r - 1$	$\Sigma B^2_j / 17 - (\Sigma Yu)^2 / (17r)$
Variável X_2	4	$\frac{T^2_{i,-1}}{3r} + \frac{T^2_{i,-\alpha}}{3r} + \frac{T^2_{i,0}}{5r} + \frac{T^2_{i,\alpha}}{3r} + \frac{T^2_{i,1}}{3r}$
R.L. de X_1 dentro nível -1 de X_2	1	$[T_{X1,-1} - T_{X-1,-1}]^2 / 2r$
R.Q. de X_1 dentro nível -1 de X_2	1	$[T_{X1,-1} - 2T_{X0,-1} + T_{X-1,-1}]^2 / 6r$
R.L. de X_1 dentro nível $-\alpha$ de X_2	1	$[T_{X1,-\alpha} - T_{X-1,-\alpha}]^2 / 2r$
R.Q. de X_1 dentro nível $-\alpha$ de X_2	1	$[T_{X1,-\alpha} - 2T_{X0,-\alpha} + T_{X-1,-\alpha}]^2 / 6r$
R.L. de X_1 dentro nível 0 de X_2	1	$\frac{[-T_{X-1,0} - \alpha T_{X-\alpha,0} + \alpha T_{X\alpha,0} + T_{X1,0}]^2}{3,2192236\ r}$
R.Q. de X_1 dentro nível 0 de X_2	1	$\frac{[0,356155\ T_{X-1,0} - 0,034233\ T_{X-\alpha,0} -}{0,670573\ r} + \frac{-0,643845\ T_{X0,0} - 0,034233\ T_{X\alpha,0} + 0,356155\ T_{X1,0}]^2}{0,670573\ r}$
Desvio de X_1 dentro nível 0 de X_2	2	$SQ\ X_{1/0} - SQ\ RL\ X_{1/0} - SQ\ RQ\ X_{1/0}$
R.L. de X_1 dentro nível α de X_2	1	$[T_{X1,\alpha} - T_{X-1,\alpha}]^2 / 2r$
R.Q. de X_1 dentro nível α de X_2	1	$[T_{X1,\alpha} - 2T_{X0,\alpha} + T_{X-1,\alpha}]^2 / 6r$
R.L. de X_1 dentro nível 1 de X_2	1	$[T_{X1,1} - T_{X-1,1}]^2 / 2r$
R.Q. de X_1 dentro nível 1 de X_2	1	$[T_{X1,1} - 2T_{X0,1} + T_{X-1,1}]^2 / 6r$
Erro	$16(r-1)$	SQ total - SQ demais

Modelo matemático:

$$Y_u = \beta_o + \beta_1 X_{1u} + \beta_{11} (X^2_{1u} - \overline{X}^2_{1u}) + e_u$$

Com a adoção deste modelo matemático, os coeficientes linear e quadrático ficam independentes, independendo dos valores de α.

CONCLUSÕES

No presente estudo, podem ser obtidas as seguintes conclusões:

1. O valor de α, que torna ortogonal o delineamento fatorial duplo é igual a 0,780776406.

2. No caso do delineamento fatorial duplo ser ortogonal, os estimadores dos coeficientes polinomiais são:

$$\hat{\beta}_i = \frac{0,1035446}{r} . \Sigma X_{iu} Y_u$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \frac{0,3645307}{r} . [\Sigma X^2_{iu} Y_u - 0,5680982 \Sigma Y_u$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{0,1822653}{r} . \Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u$$

3. As somas de quadrados referentes às estimativas dos coeficientes polinomiais são dadas por:

$$SQ \hat{\beta}_i = \hat{\beta}_i \Sigma X_{1u} Y_u$$
$$SQ \hat{\beta}_{ii} = \hat{\beta}_{ii} [\Sigma X^2_{iu} Y_u - 0,5680982 \Sigma Y_u]$$
$$SQ \hat{\beta}_{12} = \hat{\beta}_{12} \Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u$$

4. As variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais são expressas por:

$$V(\hat{\beta}_i) = 0,1035446 \sigma^2 / r$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = 0,3645307 \sigma^2 / r$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = 0,1822653 \sigma^2 / r$$

5. Comparando os valores das variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais do delineamento fatorial duplo, quando o mesmo é ortogonal, com os valores das variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais dos delineamentos fatoriais 3^2 5^2 e 7^2, para o meso intervalo de comprimento e a mesma área total a ser utilizada, verifica-se que o delineamento em estudo é mais eficiente do que os delineamentos fatoriais 5^2 e 7^2 e menos eficiente do que o delineamento fatorial 3^2.

BATISTA, L.B.; FARIA, E.H. de S.; RODRIGUES, M.E.O.C.; BATISTA, K.M.; GUIMARÃES, V.F. Double Factorial Design. **Semina:** Ci. Exatas/Tecnol., Londrina, v. 14/15, n. 4, p. 346-359, Dec. 1993/Dec. 1994.

ABSTRACT: *This design was developed for fitting to data a second-degree polynomial equation with two variables, denominated Double Factorial Design. The purpose was to make it orthogonal when five levels of each of the factors were involved. In this design there are 17 treatment combinations, and 9 of them belong to a 3^2 factorial design where the coded levels of the X-variables were -1, 0, and +1, and the others added to the (0, 0) central point make a 3^2 factorial design where the coded levels of the X-variables were $-\alpha$, 0, and $+\alpha$. It was verified that if α= 0,780776406, the design becomes orthogonal. In this design, each level of the X_1-variable must have 3 or 5 different levels of the other X_2-variable and vice-versa. Several formulas were determinated, like the formulas to make the design orthogonal, to estimate the polynomial equation coefficients, to estimate the variances of the polynomial regression coefficients, and so on. It was verified that the Double Factorial Design is less efficient than the 3^2 Factorial Design and more efficient than the 5^2 and 7^2 Factorial Designs, for all regression coefficients, when adopting PIMENTEL GOMES & CAMPOS'S METHOD, and in case of using the same total area for all the compared designs.*

KEY-WORDS: *Response surface, Second-order polynomial equations*

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDRADE, D.F.; NOLETO, A. de Q. Exemplos de fatoriais fracionários $(1/2)4^3$ e $(1/2)4^4$ para o ajuste de modelos polinomiais quadráticos. In: SIMPÓSIO DE ESTATÍSTICA APLICADA À EXPERIMENTAÇÃO AGRONÔMICA, 1, 1985, Piracicaba. *Anais...* Piracicaba: Fundação Cargil, 1985.

BATISTA, L.B. *Determinação de α para tornar ortogonal o delineamento composto central (Box).* Piracicaba, 1976. 26 p. Dissertação (Mestrado) - ESALQ/USP.

BATISTA, L.B. Delineamento em círculos. *Pesq. Agropec. Bras.*, v. 13, n. 4, p. 9-12, 1978.

BATISTA, L.B.; SILVA, S.C. Determinação de Fórmulas no Delineamento Composto Central (Box). *Pesq. Agropec. Bras.*, v. 13, n. 2, p. 39-47, 1978.

BATISTA, L.B.; RODRIGUES, M.E.O.C.; SILVA, R.M.; MOREIRA, R.L.C.D. Superfícies de Resposta: Um novo delineamento. *Arq. Univ. Fed. Rural do Rio de Janeiro*, v. 14, n. 2, p. 105-125, 1991.

BATISTA, L.B.; RODRIGUES, M.E.O.C.; SOLEY, N.; AZEVEDO, J.H. Delineamento em α e γ. *Arq. Univ. Fed. Rural do Rio de Janeiro*, v. 15, n. 1, p. 39-60, 1992.

BOX, G.E.P.; WILSON, K.B. On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. *Journal of the Royal Statistical Society*, Série B, v. 13, p. 1-45, 1951.

BOX, G.E.P.; HUNTER, J.S. Multifactor Experimental Designs for Exploring Response Sufarce. *Ann. Math. Stat*, v. 28, p. 195-241, 1957.

CAMPOS, H. *Aspectos da Aplicação das Superfícies de Resposta a Ensaios Fatoriais* 3^3 *de adubação*. Piracicaba, 1967. 82 p. Tese (Doutorado) - ESALQ/USP.

CONAGIN, A.; JORGE, J.P.N. Delineamento (1/5) (5^3). *Bragantia*, Campinas, v. 36, p. 23-58, 1977.

CONAGIN, A. Delineamentos Compostos Centrais Duplos. In: CONFERÊNCIA INTERNACIONAL DE BIOMETRIA, 10., 1979, Guarujá. *Anais...* Guarujá: EMBRAPA, 1979. p. 195-204.

CONAGIN, A. Delineamento Composto Central com duas Estrelas. *Pesq. Agropec. Bras.*, v. 17, n. 9, p. 1261-9, 1982.

COSTA, F.A. *Novo tipo de delineamento ortogonal adequado para a regressão polinomial do segundo grau*. Piracicaba, 1980. 32 p. Dissertação (Mestrado) - ESALQ/USP.

FISHER, R.A. *The Design of Experiments*. Edinburgh: Oliver and Boyd, 1935.

JOHN, P.W.M. *Statistical Design and Analysis of Experiments*. New York: The Macmillan Co., 1945. Cap. 8, p. 148-150.

JORGE, J.P.N. *Delineamento Guadalupe para três fatores, analisado através de modelo de regressão polinomial quadrática*. Piracicaba, 1980. 56 p. Dissertação (Mestrado) - ESALQ/USP.

PENTEADO, A.F.; BATISTA, L.B. *Eficiência do ensaio composto central (Box) em comparação com os fatoriais completos de dois fatores*. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE CIÊNCIAS DO SOLO, 13., 1971, Vitória.

PERECIN, D.; MALHEIROS, E.B.; BANZATTO, D.A. Tipos de delineamentos (1/5) 5^3 e superfícies de resposta. *Científica*, São Paulo, v. 10, p. 193-201, 1982.

PEREIRA, G.T.; PERECIN, D. Máxima partição ortogonal em frações regulares (1/5) 5^3, para análise de uma superfície de resposta. In: SIMPÓSIO DE ESTATÍSTICA APLICADA À EXPERIMENTAÇÃO AGRONÔMICA, 1., 1985a, Piracicaba. *Anais...* Piracicaba: Fundação Cargil, 1985a. p. 25-43.

PEREIRA, G.T.; PERECIN, D. Eficiência de delineamentos (1/5) 5^3, em relação ao delineamento composto central (15 pontos). In: SIMPÓSIO DE ESTATÍSTICA APLICADA À EXPERIMENTAÇÃO AGRONÔMICA, 1., 1985b, Piracicaba. *Anais...* Piracicaba: Fundação Cargil, 1985b. p. 183-196.

PIMENTEL GOMES, F. Novos aspectos de estudo econômico de ensaios de adubação. *Fertilité*, v. 34, p. 3-9, 1969.

PIMENTEL GOMES, F.; CAMPOS, H. The efficiency of factorial 3^3 designs as compared as to a central composite rotable designs. *Potash Review*, fevereiro, 1972.

PIMENTEL GOMES, F.; CONAGIN, A. *Experimentos de Adubação:* Planejamento e Análise Estatísticas. 102 p. Londrina: UEL, 1987.

RODRIGUES, M.E.O.C. *Delineamento em ângulos*. Piracicaba, 1984. 82 p. Tese (Mestrado) - ESALQ/USP.

SILVA, S.C.; CORRÊA, E.H.F.S.; BATISTA, L.B.; RODRIGUES, M.E.O.C. Delineamento em Três Parâmetros. *Arq. Univ. Fed. Rural do Rio de Janeiro*, v. 8, n. 1/2, p. 33-49, 1985.

YATES, F. The Design and Analysis of Factorial Experiments. *Tech. Commun. Bur. Soil. Sci.*, Harpenden, v. 38, p. 77, 1937.

Recebido para publicação em 10/09/93