SUPERFÍCIES DE RESPOSTA EM EXPERIMENTOS DE ADUBAÇÃO: O PROBLEMA DOS PONTOS DE SELA

ADHEMAR SANCHES

Orientador: Prof. Dr. IZAIAS RANGEL NOGUEIRA

Tese apresentada à Escola Superior de
Agricultura "Luiz de Queiroz" da Uni-
versidade de São Paulo, para obtenção
do título de Doutor em Agronomia. Área
de Concentração: Estatística e Experi-
mentação Agronômica.

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
Outubro, 1986

Aos meus pais

FRANCISCO AMBROSIO SANCHES e
MARIA JOSÉ DE JESUS SANCHES

DEDICO

À minha esposa ELIZETE e
aos meus filhos ESTEVÃO e LETICIA

OFEREÇO

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Dr. Izaias Rangel Nogueira, pela orientação, incentivo e amizade.

Aos professores e funcionários do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ-USP, pelos ensinamentos, amizade e apoio.

Ao Professor Dr. Dilermando Perecin, pela sugestão do assunto da pesquisa e pelas valiosas sugestões apresentadas durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Professor Dr. Euclides Braga Malheiros, pela elaboração do programa para o computador.

Ao Professor Dr. José Carlos Barbosa, pela disponibilidade na troca de idéias sobre a parte de computação.

Aos professores e funcionários do Departamento de Ciências Exatas da Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias - UNESP, Campus de Jaboticabal, pela colaboração e pelo ótimo ambiente de trabalho.

Aos funcionários da Unidade de Processamento de Dados da Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias - UNESP, Campus de Jaboticabal, pela colaboração.

À Maria de Lourdes Moretto, pelo esmero e dedicação nos trabalhos de datilografia.

Ao CNPq, à CAPES e à Fundação "Judith A. Buzaid", pelo apoio financeiro.

A todos que, de uma forma ou de outra, contribuíram para a realização deste trabalho.

ÍNDICE

	Página
RESUMO.....	v
SUMMARY.....	vii
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. Considerações gerais.....	1
1.2. O problema dos pontos de sela.....	3
1.3. Objetivos do trabalho.....	4
2. REVISÃO DE LITERATURA.....	7
2.1. A metodologia de superfície de resposta em ensaios de adu bação.....	7
2.2. A ocorrência de pontos de sela.....	8
2.3. Formas de se aumentar a eficiência na obtenção de pontos de máximo.....	10
2.3.1. O agrupamento de experimentos.....	10
2.3.2. O posicionamento adequado de doses.....	11
3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	14
3.1. Modelo linear e estimação de parâmetros.....	14
3.2. O modelo de regressão polinomial quadrático em três variá veis.....	15
3.3. A determinação e a análise do ponto crítico.....	16
3.4. A forma canônica da superfície de resposta.....	17
3.5. Construção de um modelo de superfície polinomial quadráti ca em X_1 , X_2 e X_3 , a partir de uma forma canônica dada....	19
3.6. O ponto de máximo fronteira.....	23
3.6.1. Definição.....	23
3.6.2. Considerações importantes na determinação do ponto de máximo fronteira.....	24
3.7. Comparação de delineamentos.....	38
3.8. Delineamentos de tratamentos com três fatores.....	41
3.8.1. Delineamento fatorial 3^3	41
3.8.1.1. Delineamento fatorial 3^3 com níveis igual mente espaçados.....	42
3.8.1.2. Delineamento fatorial com níveis do tipo 0, q e 3q, q > 0.....	42

	Página
3.8.2. Delineamento de Box com 15 pontos.....	43
3.8.2.1. Delineamento de Box com 15 pontos com $\alpha = 1,21541169$	44
3.8.2.2. Delineamento de Box com 15 pontos com $\alpha = 2$	44
3.8.3. Delineamento $(1/5)5^3$	45
3.8.3.1. Delineamento $(1/5)5^3$ tipo I, III, IV ou ti po Y.....	45
3.8.3.2. Delineamento $(1/5)5^3$ tipo W.....	46
3.8.4. Delineamento composto central com duas estrelas....	47
3.8.5. Delineamento duplo central composto com 29 pontos..	49
3.8.5.1. Delineamento duplo central composto com $\alpha = 1,51$	50
3.8.5.2. Delineamento duplo central composto com $\alpha = 1$	51
4. METODOLOGIA.....	52
4.1. O método utilizado.....	52
4.2. Os modelos de resposta para simulação.....	53
4.3. Critério para a escolha de um λ_i pequeno.....	61
4.4. O material utilizado e a obtenção dos resultados.....	63
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	65
5.1. Porcentagens de pontos de máximo.....	65
5.2. Porcentagens de pontos de sela.....	68
5.3. O ponto de máximo estimado.....	70
5.4. O ponto de sela.....	70
5.5. O ponto de máximo fronteira.....	73
5.6. O ponto de máximo experimental.....	75
5.7. Discussões finais.....	75
6. CONCLUSÕES.....	85
7. LITERATURA CITADA.....	88
APÊNDICE.....	91

SUPERFÍCIES DE RESPOSTA EM EXPERIMENTOS DE ADUBAÇÃO: O PROBLEMA DOS PONTOS DE SELA

Autor: ADHEMAR SANCHES

Orientador: IZAIAS RANGEL NOGUEIRA

RESUMO

A determinação da combinação de doses de nutrientes que dá a produção máxima, é um problema de interesse em ensaios de adubação. Assim, quando a superfície de resposta tem um ponto de sela ao invés de um ponto de máximo esperado, é de grande importância a obtenção de soluções alternativas para esse problema.

Neste trabalho, estudou-se a possibilidade de se substituir o ponto de máximo não encontrado pelo próprio ponto de sela ou pelo ponto de máximo fronteira ou pelo ponto de máximo experimental. Foi feita também uma comparação entre alguns delineamentos de tratamentos.

No estudo, foram utilizados nove delineamentos com três fatores que são: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados e tipo 0, q e $3q$, $q > 0$; Box com $\alpha = 1,215$ e $\alpha = 2$; $(1/5)5^3$ tipo Y e tipo W; composto central com duas estrelas; duplo central composto com 29 pontos com $\alpha = 1,51$ e $\alpha = 1$. Em todos os delineamentos, os níveis de cada fator foram tomados num mesmo intervalo com o extremo inferior igual ao nível mais baixo e o extremo superior igual ao nível mais alto.

Os dados experimentais foram obtidos por simulação em diversas situações teóricas, segundo modelos de resposta do tipo polinomial quadrático e com máximo. A posição de cada coordenada do ponto de máximo real foi colocada a 80% à direita do extremo inferior do intervalo dos níveis.

Foram obtidas as seguintes conclusões:

a) O ponto de máximo fronteira e o ponto de máximo experimental podem ser utilizados como bons substitutos do ponto de máximo não encontrado. O primeiro é indicado para os seguintes delineamentos: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, $(1/5)5^3$ tipo Y ou tipo W e duplo

central composto com 29 pontos e $\alpha = 1$; o segundo é indicado para os seguintes delineamentos: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, Box com 15 pontos e $\alpha = 2$, $(1/5)5^3$ tipo Y ou tipo W e composto central com duas estrelas;

b) O ponto de sela não é um bom substituto para o ponto de máximo não encontrado;

c) O delineamento fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados foi o que apresentou maior eficiência na obtenção de pontos de máximo.

RESPONSE SURFACES IN FERTILIZER EXPERIMENTS:
THE PROBLEM OF SADDLE POINT

Author: ADHEMAR SANCHES

Adviser: IZAIAS RANGEL NOGUEIRA

SUMMARY

The determination of nutrients combination dosis that gives maximum yield is an interesting problem in fertilizer trials. When the response surface has a saddle point instead of an expected point of maximum, it is of great importance to obtain alternative solutions for this problem.

In this work it was studied the possibility to substitute the unfounded point of maximum by the saddle point or by the frontier point of maximum or by the experimental point of maximum. It was also made a comparison among some treatments designs.

The following nine designs with three factors were studied: the 3^3 factorial with equally spaced levels and type 0, q, and 3q, $q > 0$; Box with $\alpha = 1.215$ and $\alpha = 2$; $(1/5)5^3$ type Y and type W; central composite with two stars; double central composite with 29 points with $\alpha = 1.51$ and $\alpha = 1$. In all designs the levels of each factor were considered in a same interval with the lower extreme equal to the lowest level and the upper extreme equal to the highest.

The experimental data were obtained by simulation in many theoretical situations according to response models of the polynomial quadratic type with a maximum. The position of each coordinate of a true point of maximum was situated 80% to the right of the lower extreme of the interval of levels.

The following conclusions were obtained:

a) The frontier point of maximum and the experimental point of maximum may be used as good substitutes of the unfounded point of maximum. The first is suitable to the following designs: the 3^3 factorial

with equally spaced levels, $(1/5)5^3$ type Y ou type W and the double central composite with 29 points and $\alpha = 1$; the latter is suitable to the following designs: the 3^3 factorial with equally spaced levels, Box with 15 points and $\alpha = 1,215$ ou $\alpha = 2$, $(1/5)5^3$ type Y or type W and the central composite with two stars;

b) The saddle point is not a good substitute to the unfounded point of maximum;

c) The 3^3 factorial design with equally spaced levels was the one that presented more efficiency in obtaining points of maximum.

1. INTRODUÇÃO

1.1. Considerações gerais

Dados de produção, obtidos em experimentos de adubação, são freqüentemente analisados através de superfícies de resposta, principalmente após o trabalho de BOX e WILSON (1951). Para isso, admite-se a existência de uma relação funcional entre a produção η e k fatores, $k \geq 1$ e inteiro, os quais se supõe que exerçam influência sobre essa produção.

A produção η é a resposta e os k fatores são representados por variáveis reais, quantitativas e contínuas $X_1, X_2, \dots, X_k$, onde X_i representa o nível considerado do fator i , $i = 1, 2, \dots, k$. Uma suposição que é feita sobre essas variáveis é que as mesmas possam ser controladas pelo experimentador, com um erro desprezível. No campo agrônomo e em um ensaio de adubação onde se tem $k = 3$ fatores, por exemplo, as variáveis X_1, X_2 e X_3 podem ser as doses de três diferentes fertilizantes aplicados numa cultura de milho e a resposta η pode ser a produção de grãos em quilogramas por hectare.

Em alguns estudos dentro da literatura de superfícies de resposta, são utilizadas variáveis padronizadas (ou codificadas) $x_1, x_2, \dots, x_k$ em lugar das variáveis $X_1, X_2, \dots, X_k$, onde x_i é uma função linear de X_i , $i = 1, 2, \dots, k$. De qualquer modo, porém, o que é mais comum na prática é o desconhecimento da relação funcional entre a resposta η e as variáveis. Nesse caso, o que usualmente se faz é considerar, de modo aproximado, que

$$\eta = h(\tilde{X}; \tilde{\beta}), \quad (1.1)$$

onde $X = (X_1, X_2, \dots, X_k)'$, $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_\ell)'$ é um vetor de ℓ parâmetros a serem estimados e h é uma função real de uma forma matemática especificada.

Do ponto de vista prático, o que se espera é que $h(X; \beta)$ seja uma boa representação de η dentro de uma região A de interesse, contida no espaço euclidiano k -dimensional R^k . A região A de interesse é denominada a região experimental e é a região onde são tomados os valores das variáveis $X_1, X_2, \dots, X_k$. Após o trabalho de BOX e WILSON (1951), tem sido muito utilizada em diversas aplicações a função polinomial quadrática, que em três variáveis X_1, X_2 e X_3 é dada por

$$h(X; \beta) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3$$

onde $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}, \beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{23})'$ é o vetor dos $\ell = 10$ parâmetros reais.

Num experimento de adubação, a produção Y observada para um vetor particular X na região experimental A não coincide necessariamente com o valor da verdadeira resposta η neste vetor. O que se pode escrever é que

$$Y = \eta + e$$

onde e é o erro aleatório que representa a diferença entre o valor da produção observada e o valor da produção verdadeira.

Considerando-se, então, N combinações de níveis

$$X_u = (X_{1u}, X_{2u}, \dots, X_{ku})', \quad u = 1, 2, \dots, N$$

na região experimental A , pode-se obter um conjunto de observações $Y_1, Y_2, \dots, Y_N$, onde

$$Y_u = \eta_u + e_u$$

ou seja,

$$Y_u = h(X_u; \beta) + e_u, \quad u = 1, 2, \dots, N$$

utilizando-se a relação (1.1). A partir daí, considerando-se que os erros $e_1, e_2, \dots, e_N$ tenham média zero, sejam não correlacionados, de mesma va

riância σ^2 e distribuição normal, pode-se obter, pelo método dos mínimos quadrados, as estimativas $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_\ell$ dos parâmetros $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_\ell$, respectivamente, com qualidades "ótimas". Com isso, obtêm-se a função de produção estimada

$$\hat{E}(\tilde{Y}) \text{ ou } \hat{\eta} \text{ ou } \hat{\eta}(\tilde{X}) = h(\tilde{X}; \tilde{\beta}) = h(X_1, X_2, \dots, X_k; \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_\ell) \quad (1.2)$$

A equação (1.2) define a superfície de resposta que será utilizada na análise e uma de suas aplicações está na determinação dos níveis ótimos, isto é, aquela combinação particular de valores das variáveis $X_1, X_2, \dots, X_k$ para os quais se obtém a produção máxima ou então, a máxima renda líquida. Um problema que tem trazido preocupações na prática é que, com bastante frequência, tem-se encontrado um ponto de sela em lugar de um ponto de máximo que era esperado devido a natureza do problema.

1.2. O problema dos pontos de sela

Se numa análise estatística de um ensaio de adubação, através de superfície de resposta, não for encontrado o ponto de máximo esperado, então não serão determinados os níveis ótimos dos nutrientes. Assim sendo, o pesquisador poderá deixar de utilizar alguns resultados de interesse.

A ocorrência de pontos de sela é um fato bastante comum em problemas práticos e muitas podem ser as causas, segundo os pesquisadores. Analisando a questão sob o ponto de vista geométrico, uma possível explicação para a ocorrência de falsos pontos de sela pode estar na inversão da concavidade da função de resposta com um ou dois fatores (nutrientes) em algum subconjunto S da região experimental.

No caso de três fatores, a inversão de concavidade para um fator, por exemplo na variável X_1 , pode ser consequência de uma situação teórica, onde a resposta η é de pouca sensibilidade na região experimental, na direção do eixo X_1 . Isto é, mantidos valores fixos de X_2 e X_3 e variando-se X_1 , a diferença entre as respostas é relativamente pequena mesmo para dois valores de X_1 bem afastados um do outro. Chamando de η_{23} a função de resposta teórica para valores fixos de X_2 e X_3 , a situação teórica descrita corresponde a dizer que essa função, somente de X_1 , é aproximadamente constante.

Considere-se, então, a situação real, onde o problema é de máximo, isto é, a função de resposta verdadeira e desconhecida tem máximo. A concavidade de η_{23} tem, então, um sentido determinado, indicando que η_{23} tem máximo. Seja, agora, a função estimada $\hat{\eta}_{23}$, obtida de $\hat{\eta} = h(\tilde{X}; \hat{\beta})$ colocando-se X_2 e X_3 iguais aos valores anteriormente fixados.

A função $\hat{\eta}_{23}$, por ter sido determinada a partir de observações experimentais e, portanto, sujeita à flutuações casuais, pode perfeitamente ter uma concavidade de sentido inverso da função teórica η_{23} na região experimental. Se isso ocorre, diz-se então que ocorre uma inversão de concavidade com um fator.

Uma inversão de concavidade com dois fatores é uma generalização do caso de inversão de concavidade com um fator. Se a situação teórica é de máximo, a inversão de concavidade com um ou dois fatores leva o pesquisador a obter ponto de sela em lugar do ponto de máximo esperado. Se ocorrer uma inversão com os três fatores, isso levará à obtenção de um ponto de mínimo.

1.3. Objetivos do trabalho

A partir de dados experimentais obtidos por simulação, são estudadas algumas questões relativas à superfícies de resposta em ensaios de adubação com três fatores, quando se está interessado na determinação do ponto de máximo. Os objetivos do presente trabalho são os seguintes:

1º) analisar formas alternativas de interpretação dos resultados quando se encontra um ponto de sela em lugar do ponto de máximo esperado;

2º) investigar formas de se aumentar a eficiência na obtenção de pontos de máximo;

3º) indicar delineamentos mais apropriados para se obter maior eficiência na obtenção de pontos de máximo.

Quanto as formas alternativas de interpretação dos resultados quando se encontra um ponto de sela em lugar do ponto de máximo esperado, serão analisadas as possibilidades de se utilizar como substitutos do ponto de máximo não encontrado, os seguintes pontos: a) o ponto de sela; b) o ponto de maior valor de $\hat{\eta}$ na região experimental A que será chamado o ponto de máximo fronteira, pelo fato de estar situado na fronteira

de A e c) o ponto experimental de maior resposta observada que será chamado o ponto de máximo experimental.

No que se refere às formas de se aumentar a eficiência na obtenção de pontos de máximo, podem ser sugeridas: a) a redução da variância residual através do aumento do número de repetições ou de análise de grupos de experimentos; b) o posicionamento mais adequado das doses e c) o aumento do número de níveis dos fatores. Com relação aos itens (a) e (b) existem conclusões já estabelecidas, por exemplo, nos trabalhos de MALHEIROS e PERECIN (1983) e DEPIZZOLATTI (1983). No presente trabalho será investigado o aumento do número de níveis como uma possível forma de se aumentar a eficiência na obtenção de pontos de máximo e isso será feito pela consideração de alguns delineamentos com 3, 5, 7 e 9 níveis mais comumente empregados em estudos de ensaios de adubação.

Para se indicar delineamentos de modo a atender ao 3º objetivo proposto, será utilizada uma medida de eficiência na obtenção de pontos de máximo que é igual a porcentagem obtida de ocorrência de um evento de interesse. Com essa medida, um delineamento ou mesmo um método de análise será mais eficiente ou melhor que outro, se exibir uma porcentagem maior de ocorrência do evento de interesse. No caso específico da comparação de dois delineamentos quanto a eficiência na obtenção de pontos de máximo, a ocorrência de um evento de interesse será a ocorrência de um ponto de máximo.

As hipóteses básicas sob as quais o presente trabalho será desenvolvido são as seguintes:

i) é conhecida a região experimental A a ser pesquisada. Assim, para cada fator, é conhecido o intervalo de variação das doses;

ii) as coordenadas do ponto de máximo real estão situadas numa posição a 80% à direita do extremo inferior do intervalo de variação das doses;

iii) a função polinomial quadrática em três variáveis X_1 , X_2 e X_3 é uma representação adequada da função de produção η na região experimental. Isto é, a função polinomial quadrática em X_1 , X_2 e X_3 é utilizada como o modelo matemático para a estimação da função de resposta verdadeira que, por sua vez, é também polinomial quadrática em X_1 , X_2 e X_3 .

Do ponto de vista das aplicações, as hipóteses (i) e (ii) definem situações que podem ser perfeitamente encontradas em ensaios de

adubação. De fato, a experiência passada e o conhecimento de ensaios de adubação, pode perfeitamente fazer com que o pesquisador delimite o intervalo de doses a ser pesquisado. Além disso, pode-se ter também uma idéia ao menos aproximada da posição mais provável da dose ótima.

A hipótese (iii), contudo, não é de fácil verificação num problema prático, pois a forma matemática da função de resposta verdadeira, se existe, é no geral desconhecida. No entanto, essa hipótese é utilizada como uma hipótese de trabalho, para poder caracterizar uma situação onde não há discrepância, quanto ao tipo, entre o modelo matemático da função de resposta verdadeira e o modelo matemático utilizado para a estimação.

A interação entre todos os três fatores ou entre dois quaisquer deles, pode estar presente ou não num problema prático. Por isso, são estudadas situações onde tais interações aparecem ou não, com o objetivo de se verificar se têm ou não influência nas comparações de delineamentos, dentro das hipóteses de trabalho estabelecidas.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1. A metodologia de superfície de resposta em ensaios de adubação

A literatura existente sobre a metodologia de superfícies de resposta é vasta, mostrando as aplicações à diferentes campos de pesquisa, bem como o desenvolvimento na área de construção de delineamentos ótimos na análise estatística de superfície. Até o ano de 1975, duas revisões de literatura interessantes são apresentadas, uma por HILL e HUNTER (1966) e outra por MEAD e PIKE (1975).

O grande impulso dado na análise de dados experimentais através de superfícies de resposta, foi dado pelo trabalho de pesquisa de BOX e WILSON (1951), onde os autores desenvolveram métodos de determinação de condições ótimas em pesquisas industriais. Nesse trabalho, os autores introduziram a função polinomial com duas ou mais variáveis independentes como uma boa aproximação da função de resposta e apresentaram delineamentos de tratamentos com o objetivo de se encontrar um ponto na região experimental de interesse onde a resposta é máxima, utilizando para isso o menor número possível de pontos.

No campo agronômico, a função polinomial de resposta tem sido largamente empregada em ensaios de adubação. Além da função polinomial, há ainda outros modelos matemáticos de curvas e superfícies de resposta que podem ser empregados como, por exemplo, a função polinomial da raiz quadrada, a polinomial inversa, curvas com "platô" e curvas exponenciais, como pode se ver nos trabalhos de VIEIRA (1970), CONAGIN e JORGE (1977), NELDER (1966), ANDERSON e NELSON (1975) e outros.

Quanto aos delineamentos de tratamentos, utilizados no estudo de superfícies de resposta em ensaios de adubação, muitos desses têm suas raízes nos delineamentos compostos introduzidos no trabalho de BOX e WILSON (1951). O próprio delineamento de Box com 15 pontos e outros tipos que são pequenas variações dos delineamentos compostos, propostos por Box e Wilson, têm sido utilizados neste estudo, como pode-se ver, por exemplo, nos trabalhos de TRAMEL (1957), MIRANDA (1966), VOSS e PESEK (1967), CONAGIN *et alii* (1969), PAEZ e SILVA (1975), CONAGIN e JORGE (1979) e CONAGIN (1982). Outros delineamentos não pertencentes a classe dos delineamentos compostos também têm sido sugeridos e utilizados, como pode-se ver nos trabalhos de CONAGIN e JORGE (1977), DÁVILA (1979), PERECIN *et alii* (1982) e ROJAS (1982).

2.2. A ocorrência de pontos de sela

A ocorrência de pontos de sela, que é a motivação do presente trabalho, tem sido referida em vários trabalhos de pesquisa e por diversos pesquisadores.

CAMPOS (1967) utilizou em seus estudos o modelo de regressão polinomial quadrática para a produção Y como

$$Y = a_0 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{14}x_1 + a_{24}x_2 + a_{34}x_3 + e$$

aplicado a ensaios fatoriais 3^3 de adubação, com o objetivo de apresentar uma discussão sobre a determinação das doses econômicas da equação da receita líquida. O autor utilizou dados experimentais de produção de milho de ARRUDA (1959) e, entre as conclusões de interesse na pesquisa, observou a ocorrência de pontos de sela da função receita líquida na maioria dos 50 ensaios individuais estudados. Em 42 desses ensaios ocorreram pontos de sela, havendo apenas 7 pontos de máximo e até mesmo 1 ponto de mínimo.

Em vista disso, o autor fez uma distribuição dos 50 ensaios em grupos. Na discussão da máxima receita líquida, o autor observou uma tendência de aparecimento de maior número de pontos de máximo quando se faz o agrupamento de ensaios.

VIEIRA (1970) estendeu o trabalho de CAMPOS (1967), utilizando o modelo polinomial de segundo grau em $\sqrt{x}$ (polinomial da raiz quadrada) dado por

$$Y = a_0 + a_{11}\sqrt{x_1} + a_{22}\sqrt{x_2} + a_{33}\sqrt{x_3} + a_{12}\sqrt{x_1x_2} + a_{13}\sqrt{x_1x_3} + \\ + a_{23}\sqrt{x_2x_3} + a_{12}x_1 + a_{24}x_2 + a_{34}x_3 + e$$

e o modelo com $x^{3/2}$ dado por

$$Y = a_0 + a_{11}x_1^{3/2} + a_{22}x_2^{3/2} + a_{33}x_3^{3/2} + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + \\ + a_{23}x_2x_3 + a_{14}x_1 + a_{24}x_2 + a_{34}x_3 + e$$

Com relação aos 50 ensaios individuais estudados por CAMPOS (1967), observa-se a ocorrência de 40 pontos de sela para o modelo em $\sqrt{x}$ e 39 pontos de sela para o modelo com $x^{3/2}$. Entre os resultados e a discussão a respeito da máxima renda líquida, a autora também observou o aparecimento de maior número de pontos de máximo quando se considera o agrupamento de ensaios, para ambos os modelos.

Ainda, neste trabalho, a autora observou que cada um dos 4 grupos de ensaios anuais (com 13, 14, 11 e 12 ensaios individuais), constituídos por CAMPOS (1967), apresenta maior número de pontos de máximo do que cada um dos 5 grupos compostos de 10 ensaios sorteados ao acaso, com os três modelos em x , $\sqrt{x}$ e $x^{3/2}$. A explicação da autora é que nos ensaios anuais os fatores climáticos são controlados, enquanto que nos grupos de 10 ensaios sorteados ao acaso, a clima aparece como um erro sistemático não controlado.

CONAGIN (1978) cita outros trabalhos onde foram realizados estudos em experimentos fatoriais 3^3 de adubação em milho, por MIRANDA (1971), em algodão, por FUZATTO *et alii* (1970) e em feijão, por IGUE *et alii* (1971). Esses estudos revelaram um número variável de pontos de sela. Segundo Conagin, alguns especialistas acreditam que esses fatos sejam normais, isto é, devam acontecer com certa frequência na natureza.

Na opinião de Conagin, a ocorrência de pontos de sela pode ser conseqüência de causas diversas, duas das quais são apontadas a seguir, quais sejam:

a) A análise conjunta de áreas ecológicas não homogêneas pode levar a reunir em um mesmo grupo, resultados que deveriam ser agrupa

dos em duas ou três áreas mais homogêneas, confundindo em uma mesma superfície, duas ou três superfícies de resposta distintas;

b) A reunião de resultados experimentais de dois ou três anos de pesquisa (grupos de experimentos) provenientes da mesma ou de várias áreas ecológicas, pode levar à determinação de um resultado médio menos satisfatório quando, na realidade, o comportamento nos vários anos seria diferente.

2.3. Formas de se aumentar a eficiência na obtenção de pontos de máximo

Um dos objetivos do presente trabalho é investigar formas de se aumentar a eficiência na obtenção de pontos de máximo em problemas onde realmente se espera um máximo. Sobre isso, existem alguns trabalhos de pesquisa que fazem referência a agrupamentos de experimentos e posicionamento adequado de doses.

2.3.1. O agrupamento de experimentos

CAMPOS (1967) e VIEIRA (1970) destacam que o agrupamento de experimentos aumenta a tendência de aparecimento de pontos de máximo. Ao falar sobre agrupamento de experimentos, CONAGIN (1978) observa que, quando se tem uma rede de experimentos representando várias áreas ecológicas e conduzidos por dois ou três anos, deve-se efetuar a análise dos experimentos reunindo em um grupo aqueles resultados que efetivamente podem caracterizar determinada área ecológica (de fertilidade equivalente). Além disso, esse agrupamento deve ser feito ano por ano.

JORGE e CONAGIN (1977) analisaram as propriedades de um grupo especial de delineamentos $(1/5)^5$ por meio de simulação de experimentos individuais. Para gerar os dados, os autores utilizaram duas equações fundamentais particulares de produção de milho em quilogramas por hectare, sendo uma delas a função polinomial quadrática e a outra a função polinomial da raiz quadrada, ambas com três variáveis independentes.

Entre as conclusões estão as seguintes:

a) Independentemente do modelo linear utilizado para gerar os dados, o agrupamento de 10 ensaios é suficiente para se obter 100% de

pontos de máximo quando a superfície adaptada aos dados é o modelo polinomial quadrático. Quando a superfície adaptada é o modelo polinomial da raiz quadrada, são suficientes 20 ensaios para se obter 100% de pontos de máximo;

b) Aumentando o tamanho do agrupamento, tende a aumentar a frequência dos resultados de lucro máximo, cujas coordenadas caem dentro do intervalo de níveis dos fatores, utilizados no experimento.

2.3.2. O posicionamento adequado de doses

O posicionamento adequado de doses é uma forma de escolha de um delineamento dentro de um conjunto de delineamentos de um mesmo tipo, segundo algum critério estabelecido. Por exemplo, no caso de três variáveis X_1 , X_2 e X_3 , pode-se estar interessado em escolher um delineamento dentro do tipo fatorial 3^3 , pelo posicionamento de doses que dá a maior porcentagem de pontos de máximo da função receita líquida.

NOGUEIRA (1960) considerou a lei de Mitscherlich aplicada a ensaios de adubação com três níveis de um fertilizante, onde o primeiro nível é a testemunha (sem fertilizante) e o terceiro é uma dose fixa igual ao triplo de uma dose padrão q , previamente estabelecida. O nível intermediário é igual a xq , onde $0 < x < 3$.

Utilizando a melhor precisão das estimativas obtidas como um critério para a escolha das doses, o autor concluiu que:

a) Sendo $r = 10^{-cq}$, são ótimos os delineamentos do tipo 0, 0,5 e 3 para $0,2 < r < 0,4$; 0, 1 e 3 para $0,5 < r < 0,7$ e 0, 1,5 e 3 para $0,8 < r < 0,9$;

b) Considerando as doses padrões à base de P_2O_5 , K_2O e N , o delineamento do tipo 0, 1 e 3 é melhor que qualquer outro, sendo que para N , o delineamento usual do tipo 0, 1,5 e 3 não é muito menos eficiente do que 0, 1 e 3;

c) Os parâmetros da equação de Mitscherlich ficarão melhor estimados se forem adotados os esquemas do tipo 0, 1 e 3.

Mais recentemente, MALHEIROS e PERECIN (1983) simularam 5000 ensaios em um computador e estudaram os efeitos da posição das doses em relação às coordenadas do ponto de máximo de uma superfície de resposta, no sentido de se conseguir uma maior eficiência (maior porcentagem) na ob

tenção de pontos de máximo. O modelo utilizado foi o polinomial quadrático de superfície de resposta com três variáveis e as combinações de níveis foram escolhidas num delineamento fatorial fracionado $(1/5)^3$ do tipo I, III, IV, segundo a classificação de CONAGIN e JORGE (1977).

Para gerar os dados, os autores tomaram como base a equação de produção particular estabelecida por JORGE e CONAGIN (1977), como função de resposta à adubação NPK (nitrogênio, fósforo e potássio) em milho (em kg/ha). Em termos das doses reais x_1 , x_2 e x_3 , a equação considerada foi

$$\begin{aligned} Y_u = & 480,0000 + 22,4400 x_{1u} + 27,6400 x_{2u} + 25,2000 x_{3u} - \\ & - 0,0671 x_{1u}^2 - 0,0879 x_{2u}^2 - 0,1244 x_{3u}^2 - 0,0400 x_{1u} x_{2u} - \\ & - 0,0480 x_{1u} x_{3u} - 0,0319 x_{2u} x_{3u} + e_u \end{aligned}$$

e foram analisados os seguintes casos:

- a) Coordenadas do ponto de máximo entre as quartas e quintas doses, nas mesmas condições do estudo de JORGE e CONAGIN (1977);
- b) Coordenadas do ponto de máximo pouco maiores que as quintas doses;
- c) Coordenadas de pontos de máximo aproximadamente no ponto médio das doses e com amplitude entre as doses consideravelmente grande;
- d) Coordenadas do ponto de máximo aproximadamente no ponto médio das doses e com amplitude entre as doses consideravelmente pequena;
- e) Coordenadas do ponto de máximo entre as segundas e terceiras doses.

Nos 5000 ensaios individuais, houve reprodução de pontos de máximo em 64, 44, 83, 14 e 64 por cento dos ensaios para os casos (a), (b), (c), (d) e (e), respectivamente. Descartados os casos (c) e (e), pois entre outros inconvenientes apontados esses podem não ser de interesse econômico em ensaios de adubação, os autores concluíram que o caso (a) é melhor. Considerando grupos de $k = 1, 2, \dots, 1000$ ensaios e verificando a convergência das estimativas para os verdadeiros valores dos parâmetros, eles concluíram que o caso (b) tem comportamento bem próximo ao do caso (a), sugerindo que certas restrições (menor número de pontos de máximo e diferenças grandes entre as estimativas e os verdadeiros valores dos coeficientes) que se têm na análise de ensaios individuais, tendem a desaparecer quando se agrupam ensaios.

DEPIZZOLATTI (1983) considerou o modelo polinomial da raiz quadrada como função de produção e por simulação de dados experimentais a partir da equação particular

$$Y = 2000 + 32\sqrt{X_1} + 32\sqrt{X_2} + 32\sqrt{X_3} - 20X_1 - 20X_2 - 20X_3 + \\ + 18\sqrt{X_1X_2} + 18\sqrt{X_1X_3} + 18\sqrt{X_2X_3} + 3$$

pesquisou o melhor posicionamento das doses X_1 , X_2 e X_3 num ensaio fatorial 3^3 . O objetivo foi o de investigar o tipo e o comportamento dos pontos críticos das superfícies ajustadas para as diferentes combinações de valores (doses) das variáveis X_1 , X_2 e X_3 .

As doses utilizadas foram do tipo 0, q_{i1} , q_{i2} ($i = 1, 2, 3$) e entre suas conclusões podem ser destacadas as seguintes:

a) as doses onde os valores de q_{i2} ($i = 1, 2, 3$) eram altos e $q_{i2} = 3q_{i1}$, apresentaram os melhores resultados. Nesses casos obteve-se um menor número de pontos de sela e as coordenadas do ponto de máximo foram mais concentradas em torno de seu valor real;

b) As doses onde q_{i2} ($i = 1, 2, 3$) eram baixos, ou então a diferença entre q_{i1} e q_{i2} era pequena, forneceram maior número de pontos de sela e grande dispersão das coordenadas do ponto de máximo obtidas, mesmo para pequenos valores tomados para o coeficiente de variação.

Diante das conclusões obtidas, o autor sugere os seguintes procedimentos:

i) Se ao ser planejado um experimento, possuir-se um conhecimento prévio de valores aproximados das coordenadas do ponto de máximo, a sugestão seria colocar os níveis intermediários q_{i1} , $i = 1, 2, 3$, nas proximidades do valor conhecido e o nível q_{i2} como sendo $2q_{i1}$ ou, de preferência, $3q_{i1}$;

ii) Quando não se tem nenhuma informação, o mais aconselhável seria definir o nível máximo $2q_{i1}$ ou $3q_{i1}$, $i = 1, 2, 3$, como sendo o máximo que as condições reais permitirem.

3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3.1. Modelo linear e estimação de parâmetros

Seja o modelo linear de regressão dado por

$$\underline{Y} = \underline{X}\underline{\beta} + \underline{e}$$

onde $\underline{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N)'$ é o vetor coluna de N observações, $\underline{X}$ é uma matriz de ordem $N \times \ell$ de números reais dados, $\underline{\beta}$ é o vetor coluna de ℓ parâmetros reais e $\underline{e} = (e_1, e_2, \dots, e_N)'$ é o vetor coluna dos N erros aleatórios correspondentes às N observações. Sejam ainda o vetor de médias $\underline{\mu}$ e a matriz de variâncias e covariâncias de $\underline{e}$ dadas por

$$E(\underline{e}) = \underline{0} \quad \text{e} \quad \text{Var}(\underline{e}) = \underline{I}_N \sigma^2$$

respectivamente, onde $\underline{0}$ é o vetor nulo de ordem $N \times 1$, $\underline{I}_N$ é a matriz identidade de ordem N e σ^2 é um número real positivo.

Nestas condições, utilizando-se o método dos mínimos quadrados, obtêm-se o estimador $\hat{\underline{\beta}}$, do vetor $\underline{\beta}$, dado por

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

onde $(\underline{X}'\underline{X})^{-1}$ é a matriz inversa de $\underline{X}'\underline{X}$. Tem-se que

$$E(\hat{\underline{\beta}}) = \underline{\beta} \quad \text{e} \quad \text{Var}(\hat{\underline{\beta}}) = (\underline{X}'\underline{X})^{-1} \sigma^2$$

Agora, se o vetor $\underline{e}$ tem distribuição multinormal, então $\underline{Y}$ tem distribuição multinormal com vetor média $\underline{X}\underline{\beta}$ e matriz de variâncias e

covariâncias $I_N \sigma^2$ e $\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y$ tem distribuição multinormal com vetor média β e matriz de variâncias e covariâncias (ou matriz de dispersão) $\text{Var}(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1} \sigma^2$.

3.2. O modelo de regressão polinomial quadrático em três variáveis

Como já foi dito, a função polinomial quadrática em três variáveis X_1 , X_2 e X_3 será considerada como uma representação da função de produção verdadeira η , dentro da região experimental de interesse. Considerando-se então as produções observadas $Y_1, Y_2, \dots, Y_N$ nos N tratamentos (combinações de níveis)

$$\tilde{X}_u = (X_{1u}, X_{2u}, X_{3u})', \quad u = 1, 2, \dots, N$$

escolhidos pelo experimentador, o modelo matemático de regressão para Y_u será dado por

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

onde e_u é o erro aleatório correspondente à observação Y_u , com as suposições habituais que e_u , $u = 1, 2, \dots, N$, são não correlacionados e de mesma variância σ^2 . Assim sendo, no modelo

$$\tilde{Y} = X\tilde{\beta} + \tilde{e}$$

os vetores $\tilde{Y}$, $\tilde{\beta}$, $\tilde{e}$ e a matriz X são dados por

$$\tilde{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N)'$$

$$\tilde{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}, \beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{23})'$$

$$\tilde{e} = (e_1, e_2, \dots, e_N)'$$

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

A submatriz de X formada pelas colunas dois, três e quatro, é a matriz D de ordem $N \times 3$, onde a u -ésima linha representa o tratamento $X'_u = (X_{1u}, X_{2u}, X_{3u})$, $u = 1, 2, \dots, N$. A matriz D é denominada a matriz do delineamento.

3.3. A determinação e a análise do ponto crítico

Uma vez obtido o vetor

$$\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3, \hat{\beta}_{11}, \hat{\beta}_{22}, \hat{\beta}_{33}, \hat{\beta}_{12}, \hat{\beta}_{13}, \hat{\beta}_{23})'$$

como a estimativa do vetor β , tem-se então a superfície de resposta $\hat{\eta}$ dada por

$$\begin{aligned} \hat{\eta} = & \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1 + \hat{\beta}_2 X_2 + \hat{\beta}_3 X_3 + \hat{\beta}_{11} X_1^2 + \hat{\beta}_{22} X_2^2 + \hat{\beta}_{33} X_3^2 + \\ & + \hat{\beta}_{12} X_1 X_2 + \hat{\beta}_{13} X_1 X_3 + \hat{\beta}_{23} X_2 X_3 \end{aligned}$$

Colocando-se

$$\underline{b} = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3)', \quad X = (X_1, X_2, X_3)' \quad \text{e}$$

$$B = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \frac{1}{2} \hat{\beta}_{12} & \frac{1}{2} \hat{\beta}_{13} \\ \text{sim.} & \hat{\beta}_{22} & \frac{1}{2} \hat{\beta}_{23} \\ \text{sim.} & \text{sim.} & \hat{\beta}_{33} \end{bmatrix}$$

tem-se que

$$\hat{\eta} = \hat{\beta}_0 + \underline{X}' \underline{b} + \underline{X}' B \underline{X}$$

A diferencial primeira da $\hat{\eta}$ é dada por

$$d\hat{\eta} = [\underline{b}' + 2\underline{X}' B] d\underline{X}$$

onde $d\underline{X} = (dX_1, dX_2, dX_3)'$. Para se obter o ponto crítico considera-se a identidade $d\hat{\eta} \equiv 0$, o que equivale dizer que

$$\underline{b}' + 2\underline{X}' B = 0' \quad (3.3.1)$$

Assim, $\underline{X}^* = (X_1^*, X_2^*, X_3^*)'$ é um ponto crítico do domínio da função $\hat{\eta}$ se é solução do sistema de equações (3.3.1).

Teoricamente, dependendo do vetor $\underline{b}$ e da matriz B , esse sistema pode não ter solução, pode ter uma única solução ou ter infinitas soluções. No caso de uma única solução $\underline{X}^*$, existe a matriz inversa B^{-1} de B e, então, a solução é dada por

$$\underline{X}^* = -\frac{1}{2} B^{-1} \underline{b}$$

Na prática, onde $\underline{b}$ e B são obtidos através de dados experimentais, é muito raro ter-se uma situação exata de não existência de solução ou mesmo de infinitas soluções.

A natureza de um ponto crítico $\underline{X}^*$ é estudada pela diferencial segunda $d^2\hat{\eta}$ de $\hat{\eta}$. Tem-se

$$d^2\hat{\eta} = 2(d\underline{X})' B (d\underline{X})$$

e então a natureza (se de máximo, mínimo, de sela ou indeterminação) de $\underline{X}^*$ será determinada por uma forma diagonalizada da matriz B .

Uma forma diagonalizada da matriz B é uma matriz Δ de mesma ordem que B , obtida de modo que cada operação elementar efetuada nas linhas de B é seguida da mesma operação elementar efetuada nas colunas da matriz obtida na etapa anterior. Isso equivale a pré-multiplicar B por uma matriz M' (resultante das aplicações das operações elementares sucessivas nas linhas) e pós-multiplicar $M'B$ por M , obtendo-se

$$M'BM = \Delta = \text{diag} \{d_1, d_2, d_3\}$$

Assim, têm-se:

- a) Se d_1, d_2 e d_3 são positivos, então $\underline{X}^*$ é ponto de mínimo;
- b) Se d_1, d_2 e d_3 são negativos, então $\underline{X}^*$ é ponto de máximo;
- c) Se d_1, d_2 e d_3 têm sinais diferentes, então $\underline{X}^*$ é ponto de sela;
- d) Se algum dos $d_i, i = 1, 2, 3$, for nulo, então tem-se uma indeterminação.

Quando ocorre uma indeterminação, isto significa que o sistema (3.3.1) tem infinitas soluções. No presente trabalho, quando numa análise ocorrer uma indeterminação, o procedimento será apenas registrar e contar tal ocorrência para controle, passando-se então, para a análise seguinte com um novo conjunto de dados.

3.4. A forma canônica da superfície de resposta

Seja $\hat{\eta}$ a superfície de resposta e $\tilde{X}^*$ um ponto crítico. Como pode ser visto em MYERS (1971, pág. 72-74), pode-se escrever

$$\hat{\eta} = Y_0 + (\tilde{X} - \tilde{X}^*)' B (\tilde{X} - \tilde{X}^*)$$

onde Y_0 é o valor de $\hat{\eta}$ em $\tilde{X}^*$. Agora, sendo B uma matriz real e simétrica, existe uma transformação ortogonal definida por

$$\tilde{X} - \tilde{X}^* = M \tilde{W} \quad (3.4.1)$$

onde $\tilde{W} = (W_1, W_2, W_3)'$, tal que

$$(\tilde{X} - \tilde{X}^*)' B (\tilde{X} - \tilde{X}^*) = \tilde{W}' M' B M \tilde{W} = \tilde{W}' \Lambda \tilde{W} = \lambda_1 W_1^2 + \lambda_2 W_2^2 + \lambda_3 W_3^2$$

onde λ_1, λ_2 e λ_3 são os autovalores da matriz B . Os autovalores são números reais e a matriz M é de ordem 3×3 , tal que $M' M = I_3$.

Assim, pode-se escrever

$$\hat{\eta} = Y_0 + \lambda_1 W_1^2 + \lambda_2 W_2^2 + \lambda_3 W_3^2$$

que é denominada a forma canônica da superfície de resposta polinomial quadrática.

A transformação ortogonal dada pela equação (3.4.1) define uma mudança de coordenadas de $\tilde{X}$ para $\tilde{W}$, onde o novo sistema de coordenadas retangulares $\tilde{W}$ tem origem $\tilde{W} = \tilde{0}$ em $\tilde{X} = \tilde{X}^*$. A posição dos eixos do novo sistema é obtida por uma rotação (definida por M) dos eixos X_1, X_2 e X_3 e por uma translação dos mesmos, caracterizada por uma mudança de origem de $\tilde{X} = \tilde{0}$ para $\tilde{X} = \tilde{X}^*$.

A matriz

$$\Lambda = M' B M = \text{diag} \{ \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \}$$

para a obtenção da forma canônica é uma forma particular da matriz $\Lambda = \text{diag} \{ d_1, d_2, d_3 \}$ da seção 3.3. Assim, para se determinar a natureza do ponto crítico pela forma canônica, pode-se utilizar a mesma regra anteriormente estabelecida, bastando considerar λ_1, λ_2 e λ_3 em lugar de d_1, d_2 e d_3 .

Além de indicarem a natureza do ponto crítico, os autovalores λ_1, λ_2 e λ_3 , ainda permitem a avaliação da diferença de sensibilidade

de da resposta $\hat{\eta}$ nas direções dos eixos W_1 , W_2 e W_3 . Por exemplo, num caso onde se tem um ponto de máximo e λ_2 tem valor absoluto muito maior que λ_1 e λ_3 , a direção do eixo W_2 é aquela onde a resposta $\hat{\eta}$ decresce mais rapidamente quando se afasta da origem $\tilde{W} = \tilde{0}$, em qualquer sentido.

3.5. Construção de um modelo de superfície polinomial quadrática em X_1 , X_2 e X_3 , a partir de uma forma canônica dada

Um problema, cuja solução é aplicada neste trabalho, é o da obtenção de uma forma particular polinomial quadrática em X_1 , X_2 e X_3 , a partir de uma forma canônica dada. É claro que esse problema, em sua forma geral, tem infinitas soluções, mas o interesse aqui é na solução obtida por uma rotação particular dos eixos canônicos W_1 , W_2 e W_3 , e uma transformação destes, de modo que a origem $\tilde{W} = \tilde{0}$ coincida com um ponto dado $\tilde{X}_0$ no sistema em $\tilde{X}$.

De modo analítico, isso pode ser obtido por uma transformação linear ortogonal definida por

$$\tilde{X} = M\tilde{W} + \tilde{X}_0 \quad (3.5.1)$$

ou, de modo equivalente,

$$\tilde{W} = M'(\tilde{X} - \tilde{X}_0)$$

onde M é uma matriz tal que $MM' = M'M = I_3$. A matriz M é de ordem 3×3 cuja linha i é o vetor de ordem 1×3 dado por

$$(\cos \alpha_{i1}, \cos \alpha_{i2}, \cos \alpha_{i3}), \quad i = 1, 2, 3$$

onde α_{ij} é igual ao ângulo que o eixo X_i forma com o eixo W_j , $j = 1, 2, 3$.

Neste trabalho, essa técnica é utilizada na construção de modelos particulares de superfície de resposta polinomial quadrática que tenham máximo e cujo ponto de máximo seja um ponto dado $\tilde{X}_0 \in A$. O problema é, então, realizar a volta de uma forma econômica dada para uma forma polinomial quadrática, dentro de condições particulares de interesse. Como será visto, essas condições são tais que garantem uma solução única para o problema e os modelos obtidos serão assumidos como os modelos verdadeiros de resposta, sendo então utilizados para a simulação de dados de produção.

Seja, então, a forma canônica

$$\eta = Y_0 + \lambda_1 W_1^2 + \lambda_2 W_2^2 + \lambda_3 W_3^2$$

onde λ_1 , λ_2 e λ_3 são números reais negativos dados. Então, $Y_0 = \max \eta$ que é atingido em $\tilde{W} = \tilde{0}$. Lembrando que

$$\Lambda = \text{diag} \{ \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \}$$

tem-se

$$\eta = Y_0 + \tilde{W}' \Lambda \tilde{W}$$

Para que $Y_0 = \max \eta$ seja atingido em $\tilde{X}_0 = (X_{01}, X_{02}, X_{03})'$ nas novas coordenadas, considera-se, então, a transformação linear (3.5.1), onde M é uma matriz de rotação escolhida. Com isso, tem-se

$$\tilde{W} = M' (\tilde{X} - \tilde{X}_0)$$

e a equação de produção fica

$$\eta = Y_0 + (\tilde{X} - \tilde{X}_0)' M \Lambda M' (\tilde{X} - \tilde{X}_0)$$

Colocando-se

$$Q = M \Lambda M'$$

tem-se

$$\eta = Y_0 + (\tilde{X} - \tilde{X}_0)' Q (\tilde{X} - \tilde{X}_0) = Y_0 + \tilde{X}' Q \tilde{X} - \tilde{X}' Q \tilde{X}_0 - \tilde{X}_0' Q \tilde{X} + \tilde{X}_0' Q \tilde{X}_0$$

isto é,

$$\eta = [Y_0 + \tilde{X}_0' Q \tilde{X}_0] - 2 \tilde{X}_0' Q \tilde{X} + \tilde{X}' Q \tilde{X} \quad (3.5.2)$$

Para atender aos interesses do presente trabalho foi tomado o vetor $\tilde{X}_0 = (4, 4, 4)'$ e considerada a matriz M igual a M_1 ou M_2 , onde

$$M_1 = I_3 \quad \text{e}$$

$$M_2 = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{3}{\sqrt{17}} & \frac{2}{\sqrt{17}} & \frac{2}{\sqrt{17}} \\ -\frac{2}{\sqrt{153}} & -\frac{10}{\sqrt{153}} & \frac{7}{\sqrt{153}} \end{bmatrix}$$

Com isso, pode-se estabelecer dois resultados de verificação imediata que facilitam a determinação da equação de produção (3.5.2) para λ_1 , λ_2 e λ_3 dados.

Resultado 1: Se $M = M_1 = I_3$ e $\tilde{X}_0 = (4, 4, 4)'$, então

a) $Q = \Lambda$

b) $-2\tilde{X}_0'Q = (-8\lambda_1, -8\lambda_2, -8\lambda_3)$

c) $\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)$

Resultado 2: Se $M = M_2$ e $\tilde{X}_0 = (4, 4, 4)'$, então

$$a) Q = \begin{bmatrix} \frac{4\lambda_1 + \lambda_2 + 4\lambda_3}{9} & \frac{-6\lambda_1 + 2\lambda_2 + 4\lambda_3}{\sqrt{153}} & \frac{-4\lambda_1 - 10\lambda_2 + 14\lambda_3}{\sqrt{1377}} \\ \text{sim.} & \frac{9\lambda_1 + 4\lambda_2 + 4\lambda_3}{17} & \frac{6\lambda_1 - 20\lambda_2 + 14\lambda_3}{\sqrt{2601}} \\ \text{sim.} & \text{sim.} & \frac{4\lambda_1 + 100\lambda_2 + 49\lambda_3}{153} \end{bmatrix}$$

$$b) -2\tilde{X}_0'Q = (-8 \sum_{i=1}^3 q_{i1}, -8 \sum_{i=1}^3 q_{i2}, -8 \sum_{i=1}^3 q_{i3})$$

$$c) \tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 q_{ij}$$

onde q_{ij} = elemento da linha i e coluna j da matriz q .

A consideração da matriz $M = M_1 = I_3$ na transformação (3.5.1) permite que se obtenha modelos em X_1 , X_2 e X_3 onde os coeficientes β_{12} , β_{13} e β_{23} são nulos, o que caracteriza uma situação onde não há interação entre os fatores. Por outro lado, a consideração de $M = M_2$ permite que se obtenha modelos de produção em X_1 , X_2 e X_3 com β_{12} , β_{13} e β_{23} não todos nulos, criando-se assim uma situação onde há interação entre os fatores, no caso onde λ_1 , λ_2 e λ_3 não são todos iguais. Quando $M = M_1 = I$, a transformação (3.5.1) equivale a realizar apenas uma translação dos eixos,

ou melhor, uma translação dos eixos e uma rotação de ângulos $\alpha_{ij} = 0, \forall i, j$ e quando $M = M_2$, essa transformação equivale a realizar uma translação e uma rotação de ângulos α_{ij} , dados aproximadamente por:

$$\begin{aligned}\alpha_{11} &= 48,19^\circ, & \alpha_{12} &= 70,53^\circ, & \alpha_{13} &= 48,19^\circ \\ \alpha_{21} &= 136,69^\circ, & \alpha_{22} &= 60,98^\circ, & \alpha_{23} &= 60,98^\circ \\ \alpha_{31} &= 99,31^\circ, & \alpha_{32} &= 143,94^\circ, & \alpha_{33} &= 55,53^\circ\end{aligned}$$

Para concluir esta seção, vale apresentar aqui a justificativa da escolha da matriz $M = M_2$, bem como a sua determinação. Essa matriz foi escolhida porque atende aos interesses da pesquisa, ou seja, possibilita a obtenção dos eixos X_1, X_2 e X_3 numa posição conveniente em relação aos eixos W_1, W_2 e W_3 , tendo em vista a se obter um modelo de produção η em X_1, X_2 e X_3 com β_{12}, β_{13} e β_{23} não todos nulos, caracterizando assim uma situação teórica com interação entre os fatores. Na realidade, existe um número infinito de matrizes M que poderiam ser utilizadas com a mesma finalidade.

Para a obtenção de $M = M_2$ foram determinados primeiramente, três vetores ortogonais com origem em $\tilde{W} = 0$ e em posições convenientes, tendo em vista a posição que se queria para os eixos X_1, X_2 e X_3 . Esses vetores são:

$$\tilde{v}_1 = (t, \frac{t}{2}, t)', \quad \tilde{v}_2 = (-\frac{3}{2}t, t, t)' \text{ e } \tilde{v}_3 = (-\frac{2}{7}t, -\frac{10}{7}t, t)'$$

onde t é um número real positivo. Sendo α_{ij} igual ao ângulo que o vetor

$$\tilde{v}_i = (v_{i1}, v_{i2}, v_{i3})'$$

forma com o eixo W_j , tem-se

$$\cos \alpha_{ij} = \frac{v_{ij}}{\|\tilde{v}_i\|}, \quad i, j = 1, 2, 3$$

onde $\|\tilde{v}_i\|$ é a norma euclidiana do vetor $\tilde{v}_i$. A matriz $M = M_2$ de rotação foi, então, tomada como sendo

$$M = (m_{ij})_{3 \times 3}$$

onde $m_{ij} = \cos \alpha_{ij}$, $i, j = 1, 2, 3$.

3.6. O ponto de máximo fronteira

3.6.1. Definição

A região experimental A de interesse é um subconjunto de R^3 definido por

$$A = \{(X_1, X_2, X_3) \in R^3; a_1 \leq X_1 \leq b_1, a_2 \leq X_2 \leq b_2, \\ a_3 \leq X_3 \leq b_3, \text{ onde } a_i, b_i \text{ são reais, } i = 1, 2, 3\}$$

A representação gráfica no espaço R^3 é um paralelepípedo retangular como indicado na Figura 3.6.1, no caso particular em que $a_1 = a_2 = a_3 = 0$ e $b_1 = b_2 = b_3 = b$.

FIGURA 3.6.1 - Representação gráfica da região experimental.

A fronteira de A é a reunião das seis faces

$$F_1 = \{(a_1, X_2, X_3); a_2 \leq X_2 \leq b_2 \text{ e } a_3 \leq X_3 \leq b_3\}$$

$$F_2 = \{(b_1, X_2, X_3); a_2 \leq X_2 \leq b_2 \text{ e } a_3 \leq X_3 \leq b_3\}$$

$$F_3 = \{(X_1, a_2, X_3); a_1 \leq X_1 \leq b_1 \text{ e } a_3 \leq X_3 \leq b_3\}$$

$$F_4 = \{(X_1, b_2, X_3); a_1 \leq X_1 \leq b_1 \text{ e } a_3 \leq X_3 \leq b_3\}$$

$$F_5 = \{(X_1, X_2, a_3); a_1 \leq X_1 \leq b_1 \text{ e } a_2 \leq X_2 \leq b_2\}$$

$$F_6 = \{(X_1, X_2, b_3); a_1 \leq X_1 \leq b_1 \text{ e } a_2 \leq X_2 \leq b_2\}$$

onde a variável fixa é X_i nas faces F_{2i-1} e F_{2i} , sendo $X_i = a_i$ na face F_{2i-1} e $X_i = b_i$ na face F_{2i} , $i = 1, 2, 3$.

Quando o ponto crítico de $\hat{\eta}$ é um ponto de sela, um problema de interesse neste trabalho é encontrar o ponto $\tilde{X}$ em A de maior valor para $\hat{\eta}$. Esse ponto será encontrado na fronteira de A e, por essa razão, será denominado o ponto de máximo fronteira.

Para se determinar esse ponto, a procura deverá ser feita nas seis faces do paralelepípedo. Denominando-se por M_s o maior valor de $\hat{\eta}$ na face F_s , isto é

$$M_s = \max_{F_s} \hat{\eta}, \quad s = 1, 2, 3, 4, 5, 6,$$

o valor máximo $\hat{Y}_{MF}$ de $\hat{\eta}$ na fronteira de A será, então,

$$\hat{Y}_{MF} = \max \{M_1, M_2, M_3, M_4, M_5, M_6\}$$

O ponto $\tilde{X} = (X_1, X_2, X_3)'$ em A , onde $\hat{\eta} = \hat{Y}_{MF}$, é o ponto de máximo fronteira procurado.

O valor M_s poderá ser atingido num ponto interior da face F_s ou num ponto da fronteira dessa face. Quando é atingido na fronteira da face, isto é, num dos quatro lados (arestas) da face, deve-se fazer a pesquisa nesses segmentos. Aí, serão encontrados quatro valores reais que serão os máximos de $\hat{\eta}$ nesses quatro lados, sendo, então, M_s igual ao máximo desses valores.

3.6.2. Considerações importantes na determinação do ponto de máximo fronteira

A procura do ponto de máximo fronteira envolve a pesquisa em faces e arestas do paralelepípedo que é a região experimental A . Para se estar numa face é necessário fixar uma das variáveis X_1 ou X_2 ou X_3 em um dos valores extremos de seu intervalo de variação na região experimental. Por outro lado, para se estar numa aresta é preciso fixar duas variáveis em tais valores extremos. Assim, na pesquisa do maior valor de $\hat{\eta}$ numa face ou numa aresta, tem-se que trabalhar com funções obtidas de $\hat{\eta}$ fixando-se uma ou duas das variáveis, respectivamente.

Sejam, então, as variáveis X_1, X_2 e X_3 denominadas genericamente por X_i, X_j e X_k , $i, j, k = 1, 2, 3$, $j \neq i$, $k \neq i$, $j < k$. Com isso, define-se as funções

$\hat{\eta}_i$ = função obtida de $\hat{\eta}$ quando se fixa a variável X_i

$\hat{\eta}_{ij}$ = função obtida de $\hat{\eta}$ quando se fixam as variáveis X_i e X_j

$\hat{\eta}_{ik}$ = função obtida de $\hat{\eta}$ quando se fixam as variáveis X_i e X_k

Tem-se:

$$\hat{\eta}_i = [\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_i X_i + \hat{\beta}_{ii} X_i^2] + [\hat{\beta}_j + \hat{\beta}_{ij} X_i] X_j + [\hat{\beta}_k + \hat{\beta}_{ik} X_i] X_k + \hat{\beta}_{jj} X_j^2 + \hat{\beta}_{kk} X_k^2 + \hat{\beta}_{jk} X_j X_k$$

$$\hat{\eta}_{ij} = [\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_i X_i + \hat{\beta}_j X_j + \hat{\beta}_{ii} X_i^2 + \hat{\beta}_{jj} X_j^2 + \hat{\beta}_{ij} X_i X_j] + [\hat{\beta}_k + \hat{\beta}_{ik} X_i + \hat{\beta}_{jk} X_j] X_k + \hat{\beta}_{kk} X_k^2$$

$$\hat{\eta}_{ik} = [\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_i X_i + \hat{\beta}_k X_k + \hat{\beta}_{ii} X_i^2 + \hat{\beta}_{kk} X_k^2 + \hat{\beta}_{ik} X_i X_k] + [\hat{\beta}_j + \hat{\beta}_{ij} X_i + \hat{\beta}_{jk} X_k] X_j + \hat{\beta}_{jj} X_j^2$$

onde os termos agrupados entre colchetes são constantes determinadas para os valores fixados de X_i, X_j e X_k . Tem-se também que $\hat{\eta}_{ij} = \hat{\eta}_{ji}$ e $\hat{\eta}_{ik} = \hat{\eta}_{ki}$.

Como pode-se ver, para cada valor considerado de X_i , obtém-se uma função $\hat{\eta}_i$ correspondente. No entanto, como será visto a seguir, a natureza do ponto crítico é a mesma para qualquer função $\hat{\eta}_i$ obtida. Fato semelhante ocorre com as diferentes funções $\hat{\eta}_{ij}$ e $\hat{\eta}_{ik}$ obtidos de $\hat{\eta}$ valores particulares de X_i, X_j e X_k .

Seja, então, $d\hat{\eta}_i$ a diferencial primeira de $\hat{\eta}_i$, isto é,

$$d\hat{\eta}_i = [\hat{\beta}_j + \hat{\beta}_{ij} X_i + \hat{\beta}_{jk} X_k + 2\hat{\beta}_{jj} X_j] dX_j + [\hat{\beta}_k + \hat{\beta}_{ik} X_i + \hat{\beta}_{jk} X_j + 2\hat{\beta}_{kk} X_k] dX_k$$

Então,

$$d\hat{\eta}_i \equiv 0 \iff \begin{cases} \hat{\beta}_j + \hat{\beta}_{ij} X_i + \hat{\beta}_{jk} X_k + 2\hat{\beta}_{jj} X_j = 0 \\ \hat{\beta}_k + \hat{\beta}_{ik} X_i + \hat{\beta}_{jk} X_j + 2\hat{\beta}_{kk} X_k = 0 \end{cases}$$

e o ponto crítico de $\hat{\eta}_i$ é solução do sistema

$$\begin{bmatrix} \hat{\beta}_{jj} & \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} \\ \text{sim.} & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_j \\ X_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\hat{\beta}_j}{2} & -\frac{\hat{\beta}_{ij}}{2} X_i \\ -\frac{\hat{\beta}_k}{2} & -\frac{\hat{\beta}_{ik}}{2} X_i \end{bmatrix} \quad (3.6.2.1)$$

A diferencial segunda fica

$$\begin{aligned} d^2 \hat{\eta}_i &= 2\hat{\beta}_{jj} dX_j^2 + 2\hat{\beta}_{jk} dX_j dX_k + 2\hat{\beta}_{kk} dX_k^2 \\ &= 2 \begin{bmatrix} dX_j & dX_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{jj} & \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} \\ \text{sim.} & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dX_j \\ dX_k \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Como se vê, a natureza do ponto crítico não depende do valor fixado de X_i e será dada pela forma diagonal

$$\Delta_i = \text{diag} \{ \hat{d}_{jj}, \hat{d}_{kk} \}$$

da matriz

$$B_i = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{jj} & \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} \\ \text{sim.} & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$

do seguinte modo:

- Se $\hat{d}_{jj}$ e $\hat{d}_{kk}$ são positivos, o ponto é de mínimo;
- Se $\hat{d}_{jj}$ e $\hat{d}_{kk}$ são negativos, o ponto é de máximo;
- Se $\hat{d}_{jj}$ e $\hat{d}_{kk}$ têm sinais contrários, o ponto é de sela;
- Se algum desses elementos diagonais é nulo, tem-se uma indeterminação.

Uma indeterminação como em (d) será denominada de indeterminação numa face e equivale à situação onde o sistema (3.6.2.1) tem infinitas soluções. Tal situação é muito particular e, embora teoricamente pos

sível, é difícil de ocorrer nos problemas práticos de superfície polinomial quadrática. Em vista disso, se numa análise ocorrer uma tal situação, esta será apenas registrada e contada para efeito de controle no presente trabalho, não se determinando o ponto de máximo fronteira nessa análise.

Considerando-se agora a diferencial primeira de $\hat{\eta}_{ij}$ tem-se

$$d\hat{\eta}_{ij} = [\hat{\beta}_k + \hat{\beta}_{ik}X_i + \hat{\beta}_{jk}X_j + 2\hat{\beta}_{kk}X_k]dX_k$$

Então,

$$d\hat{\eta}_{ij} = 0 \Leftrightarrow \hat{\beta}_k + \hat{\beta}_{ik}X_i + \hat{\beta}_{jk}X_j + 2\hat{\beta}_{kk}X_k = 0$$

e o ponto crítico de $\hat{\eta}_{ij}$ é solução da equação

$$\hat{\beta}_{kk}X_k = - \left[\frac{\hat{\beta}_k}{2} + \frac{\hat{\beta}_{ik}}{2}X_i + \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2}X_j \right] \quad (3.6.2.2)$$

A diferencial segunda fica

$$d^2\hat{\eta}_{ij} = 2\hat{\beta}_{kk}dX_k^2$$

e como também pode-se ver, a natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}_{ij}$ não depende dos valores fixados de X_i e X_j e será dada pelo valor de $\hat{\beta}_{kk}$, do seguinte modo:

- a) Se $\hat{\beta}_{kk} > 0$, o ponto é de mínimo;
- b) Se $\hat{\beta}_{kk} < 0$, o ponto é de máximo.

De modo análogo ao que foi feito para a função $\hat{\eta}_{ij}$, o ponto crítico de $\hat{\eta}_{ik}$ é solução da equação

$$\hat{\beta}_{jj}X_j = - \left[\frac{\hat{\beta}_j}{2} + \frac{\hat{\beta}_{ij}}{2}X_i + \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2}X_k \right] \quad (3.6.2.3)$$

e a natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}_{ik}$ será dada pelo valor de $\hat{\beta}_{jj}$, isto é,

- a) Se $\hat{\beta}_{jj} > 0$, o ponto é de mínimo;
- b) Se $\hat{\beta}_{jj} < 0$, o ponto é de máximo.

Como também pode-se ver, a natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}_{ik}$ não depende dos valores de X_i e X_k fixados.

Observações:

i) Na denominação genérica dos coeficientes $\hat{\beta}_{ij}$ e $\hat{\beta}_{ik}$, deve-se entender que $\hat{\beta}_{ij} = \hat{\beta}_{ji}$ sempre que se tiver $i > j$ e $\hat{\beta}_{ik} = \hat{\beta}_{ki}$, quando $i > k$;

ii) A matriz B_i , onde i é o índice da variável fixada, pode ser facilmente obtida como uma submatriz de B , suprimindo-se a linha i e a coluna i ;

iii) Se $\hat{\beta}_{kk} = 0$, então $\hat{\eta}_{ij}$ é uma função linear da variável X_k . Nesse caso, se $\hat{\eta}_{ij}$ é constante, então, todo valor de X_k é tanto ponto de máximo como ponto de mínimo; se $\hat{\eta}_{ij}$ não é constante, não existe valor de X_k , onde a derivada primeira de $\hat{\eta}_{ij}$ se anula. Fato análogo é válido para a função $\hat{\eta}_{ik}$, no caso que $\hat{\beta}_{jj} = 0$.

3.6.3. O método

Seja a equação de produção

$$\hat{\eta} \text{ ou } \hat{\eta}(X) \text{ ou } \hat{\eta}(X_1, X_2, X_3) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1 + \hat{\beta}_2 X_2 + \hat{\beta}_3 X_3 + \hat{\beta}_{11} X_1^2 + \hat{\beta}_{22} X_2^2 + \hat{\beta}_{33} X_3^2 + \hat{\beta}_{12} X_1 X_2 + \hat{\beta}_{13} X_1 X_3 + \hat{\beta}_{23} X_2 X_3$$

para a qual se tenha obtido um ponto de sela. Para maior clareza na apresentação do método, sejam também as Figuras 3.6.3.1 e 3.6.3.2, que são representações gráficas típicas das faces F_{2i-1} e F_{2i} nos planos paralelos determinados por $X_i = a_i$ e $X_i = b_i$, respectivamente.

FIGURA 3.6.3.1 - Representação gráfica de F_{2i-1} .

FIGURA 3.6.3.2 - Representação gráfica de F_{2i} .

O método a ser descrito consiste em se pesquisar nas faces F_{2i-1} e F_{2i} , considerando-se sucessivamente $i = 1, 2, 3$. Para cada i considerado, toma-se $j, k = 1, 2, 3, j \neq i, k \neq i$ e $j < k$, realizando-se os passos adequados a cada situação, conforme os itens e subitens seguintes:

1) Determina-se a natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}_i$ pela forma diagonal

$$\Delta_i = \text{diag} \{ \hat{d}_{jj}, \hat{d}_{kk} \}$$

da matriz

$$B_i = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{jj} & \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} \\ \text{sim.} & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$

A natureza é a mesma, tanto para $X_i = a_i$ como para $X_i = b_i$.

2) Pesquisa na face $F_{2i-1}: X_i = a_i$

2.1) Se $\hat{\eta}_i$ tem máximo, obtém-se a solução $(\bar{X}_j, \bar{X}_k)$ do sistema

$$\begin{bmatrix} \hat{\beta}_{jj} & \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} \\ \text{sim.} & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_j \\ X_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\hat{\beta}_j}{2} & -\frac{\hat{\beta}_{ij}}{2} a_i \\ -\frac{\hat{\beta}_k}{2} & -\frac{\hat{\beta}_{ik}}{2} a_i \end{bmatrix}$$

e se $(\bar{X}_j, \bar{X}_k) \in [a_j, b_j] \times [a_k, b_k]$, calcula-se

$$\max_{F_{2i-1}} \hat{\eta} = M_{2i-1} = \hat{\eta}(a_i, \bar{X}_j, \bar{X}_k)$$

2.2) Se $\hat{\eta}_i$ tem máximo e $(\bar{X}_j, \bar{X}_k) \notin [a_j, b_j] \times [a_k, b_k]$ ou se $\hat{\eta}_i$ tem mínimo ou ponto de sela, faz-se:

2.2.1) Pesquisa no lado PS: $X_j = a_j$

Se $\hat{\eta}_{ij}$ tem máximo ($\hat{\beta}_{kk} < 0$), calcula-se

$$\bar{X}_k = -\frac{1}{\hat{\beta}_{kk}} \left[\frac{\hat{\beta}_k}{2} + \frac{\hat{\beta}_{ik}}{2} a_i + \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} a_j \right]$$

obtendo-se

$$\begin{aligned}\frac{\max}{PS} \hat{\eta} &= m_{(2i-1)j1} = \hat{\eta}(a_i, a_j, \bar{X}_k) \text{ se } \bar{X}_k \in [a_k, b_k] \\ &= \max\{\hat{\eta}(a_i, a_j, a_k), \hat{\eta}(a_i, a_j, b_k)\} \text{ se } \bar{X}_k \notin [a_k, b_k]\end{aligned}$$

Se $\hat{\eta}_{ij}$ tem mínimo ($\hat{\beta}_{kk} > 0$) ou se $\hat{\beta}_{kk} = 0$, calcula-se:

$$\frac{\max}{PS} \hat{\eta} = m_{(2i-1)j1} = \max\{\hat{\eta}(a_i, a_j, a_k), \hat{\eta}(a_i, a_j, b_k)\}$$

2.2.2) Pesquisa no lado $\overline{QR}$: $X_j = b_j$

Se $\hat{\eta}_{ij}$ tem máximo ($\hat{\beta}_{kk} < 0$), calcula-se

$$\bar{X}_k = -\frac{1}{\hat{\beta}_{kk}} \left[\frac{\hat{\beta}_k}{2} + \frac{\hat{\beta}_{ik}}{2} a_i + \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} b_j \right]$$

obtendo-se

$$\begin{aligned}\frac{\max}{QR} \hat{\eta} &= m_{(2i-1)j2} = \hat{\eta}(a_i, b_j, \bar{X}_k) \text{ se } \bar{X}_k \in [a_k, b_k] \\ &= \max\{\hat{\eta}(a_i, b_j, a_k), \hat{\eta}(a_i, b_j, b_k)\} \text{ se } \bar{X}_k \notin [a_k, b_k]\end{aligned}$$

Se $\hat{\eta}_{ij}$ tem mínimo ($\hat{\beta}_{kk} > 0$) ou se $\hat{\beta}_{kk} = 0$, calcula-se:

$$\frac{\max}{QR} \hat{\eta} = m_{(2i-1)j2} = \max\{\hat{\eta}(a_i, b_j, a_k), \hat{\eta}(a_i, b_j, b_k)\}$$

2.2.3) Pesquisa no lado $\overline{PQ}$: $X_k = a_k$

Se $\hat{\eta}_{ik}$ tem máximo ($\hat{\beta}_{jj} < 0$), calcula-se

$$\bar{X}_j = -\frac{1}{\hat{\beta}_{jj}} \left[\frac{\hat{\beta}_j}{2} + \frac{\hat{\beta}_{ij}}{2} a_i + \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} a_k \right]$$

obtendo-se

$$\begin{aligned}\frac{\max}{PQ} \hat{\eta} &= m_{(2i-1)k1} = \hat{\eta}(a_i, \bar{X}_j, a_k) \text{ se } \bar{X}_j \in [a_j, b_j] \\ &= \max\{\hat{\eta}(a_i, a_j, a_k), \hat{\eta}(a_i, b_j, a_k)\} \text{ se } \bar{X}_j \notin [a_j, b_j]\end{aligned}$$

Se $\hat{\eta}_{ik}$ tem mínimo ($\hat{\beta}_{jj} > 0$) ou se $\hat{\beta}_{jj} = 0$, calcula-se:

$$\max_{\overline{PQ}} \hat{\eta} = m_{(2i-1)k1} = \max\{\hat{\eta}(a_i, a_j, a_k), \hat{\eta}(a_i, b_j, a_k)\}$$

2.2.4) Pesquisa no lado $\overline{SR}$: $X_k = b_k$

Se $\hat{\eta}_{ik}$ tem máximo ($\hat{\beta}_{jj} < 0$), calcula-se

$$\overline{X}_j = -\frac{1}{\hat{\beta}_{jj}} \left[\frac{\hat{\beta}_{j}}{2} + \frac{\hat{\beta}_{ij}}{2} a_i + \frac{\hat{\beta}_{jk}}{2} b_k \right]$$

obtendo-se

$$\begin{aligned} \max_{\overline{SR}} \hat{\eta} &= m_{(2i-1)k2} = \hat{\eta}(a_i, \overline{X}_j, b_k) \text{ se } \overline{X}_j \in [a_j, b_j] \\ &= \max\{\hat{\eta}(a_i, a_j, b_k), \hat{\eta}(a_i, b_j, b_k)\} \text{ se } \overline{X}_j \notin [a_j, b_j] \end{aligned}$$

Se $\hat{\eta}_{ik}$ tem mínimo ($\hat{\beta}_{jj} > 0$) ou $\hat{\beta}_{jj} = 0$, calcula-se

$$\max_{\overline{SR}} \hat{\eta} = m_{(2i-1)k2} = \max\{\hat{\eta}(a_i, a_j, b_k), \hat{\eta}(a_i, b_j, b_k)\}$$

2.2.5) Cálculo de M_{2i-1}

Tem-se

$$\max_{F_{2i-1}} \hat{\eta} = M_{2i-1} = \max\{m_{(2i-1)j1}, m_{(2i-1)j2}, m_{(2i-1)k1}, m_{(2i-1)k2}\}$$

3) Pesquisa na face F_{2i} : $X_i = b_i$

Faz-se de modo análogo ao que está descrito no item 2 e subitens, com b_i , $2i$, $\overline{TZ}$, $\overline{UV}$, $\overline{TU}$ e $\overline{ZV}$, no lugar de a_i , $2i-1$, $\overline{PS}$, $\overline{QR}$, $\overline{PQ}$ e $\overline{SR}$, respectivamente, obtendo-se

$$\begin{aligned} \max_{F_{2i}} \hat{\eta} &= M_{2i} = \hat{\eta}(b_i, \overline{X}_j, \overline{X}_k) \text{ se } \hat{\eta}_i \text{ tem máximo e } (\overline{X}_j, \overline{X}_k) \in [a_j, b_j] \times [a_k, b_k] \\ &= \max\{m_{(2i)j1}, m_{(2i)j2}, m_{(2i)k1}, m_{(2i)k2}\} \\ &\text{se } (\overline{X}_j, \overline{X}_k) \notin [a_j, b_j] \times [a_k, b_k] \\ &\text{ou se } \hat{\eta}_i \text{ tem mínimo ou ponto de sela} \end{aligned}$$

Observações:

i) Na notação m_{srt} para o máximo de $\hat{\eta}$ numa aresta do paralelepípedo, o índice s indica a face, o índice r indica a segunda variável fixada e o índice t indica o valor fixado da segunda variável. Assim, $s = 2i-1$ ou $2i$, $r = j$ ou k e $t = 1$ ou 2 (1 se $X_r = a_r$ e 2 se $X_r = b_r$);

ii) Teoricamente, é possível ocorrer a igualdade entre dois valores m_{srt} de uma mesma face ou mesmo a igualdade entre dois M_s nas seis faces. No entanto, tais situações dificilmente ocorrem em problemas práticos.

3.6.4. Um exemplo

Seja

$$\hat{\eta} = 5 + 8X_1 + 6X_2 + 4X_3 - 6X_1^2 - 4X_2^2 + 4X_3^2 + X_1X_2$$

onde $0 \leq X_1 \leq 2$, $0 \leq X_2 \leq 2$ e $0 \leq X_3 \leq 2$. Tem-se, então, $\hat{\beta}_0 = 5$, $\hat{\beta}_1 = 8$, $\hat{\beta}_2 = 6$, $\hat{\beta}_3 = 4$, $\hat{\beta}_{11} = -6$, $\hat{\beta}_{22} = -4$, $\hat{\beta}_{33} = 4$, $\hat{\beta}_{12} = 1$, $\hat{\beta}_{13} = 0$ e $\hat{\beta}_{23} = 0$. Assim, a matriz B é

$$B = \begin{bmatrix} -6 & 0,5 & 0 \\ 0,5 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Em B , trocando-se a 2ª linha por $12 \times (2ª \text{ linha}) + (1ª \text{ linha})$ e a 2ª coluna da matriz obtida por $12 \times (2ª \text{ coluna}) + (1ª \text{ coluna})$, obtém-se uma forma diagonalizada Δ de B onde

$$\Delta = \text{diag} \{-6, -570, 4\}$$

Logo, $\hat{\eta}$ tem ponto de sela. Passando-se, então, à procura do maior valor de $\hat{\eta}$ na fronteira da região experimental, tem-se:

1) Natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}_1$:

Tem-se

$$B_1 = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Logo, $\hat{\eta}_1$ tem ponto de sela para $X_1 = 0$ e $X_1 = 2$.

2) Pesquisa em $F_1: X_1 = 0$

Para X_1 e X_2 fixos, tem-se:

$$\hat{\beta}_{33} = 4 > 0 \Rightarrow \hat{\eta}_{12} \text{ tem ponto de m\u00ednimo. Ent\u00e3o,}$$

$$m_{121} = \max\{\hat{\eta}(0, 0, 0), \hat{\eta}(0, 0, 2)\} = \max\{5; 29\} = 29$$

$$m_{122} = \max\{\hat{\eta}(0, 2, 0), \hat{\eta}(0, 2, 2)\} = \max\{1; 25\} = 25$$

Por outro lado, para X_1 e X_3 fixos, tem-se:

$$\hat{\beta}_{22} = -4 < 0 \Rightarrow \hat{\eta}_{13} \text{ tem ponto de m\u00e1ximo. Ent\u00e3o,}$$

para $X_3 = 0$, tem-se

$$\bar{\bar{X}}_2 = -\frac{1}{\hat{\beta}_{22}} \left[\frac{\hat{\beta}_2}{2} + \frac{\hat{\beta}_{12}}{2} 0 + \frac{\hat{\beta}_{23}}{2} 0 \right] = \frac{1}{4} \frac{6}{2} = 0,75$$

Como $\bar{\bar{X}}_2 = 0,75 \in [0, 2]$, tem-se

$$m_{131} = \hat{\eta}(0; 0,75; 0) = 7,25$$

Para $X_3 = 2$, tem-se

$$\bar{\bar{X}}_2 = -\frac{1}{\hat{\beta}_{22}} \left[\frac{\hat{\beta}_2}{2} + \frac{\hat{\beta}_{12}}{2} 0 + \frac{\hat{\beta}_{23}}{2} 2 \right] = \frac{1}{4} \frac{6}{2} = 0,75$$

Como $\bar{\bar{X}}_2 = 0,75 \in [0, 2]$, tem-se

$$m_{132} = \hat{\eta}(0; 0,75; 2) = 31,25$$

Portanto,

$$M_1 = \max_{F_1} \hat{\eta} = \max\{29; 25; 7,25; 31,25\} = 31,25$$

3) Pesquisa em $F_2: X_1 = 2$

Como para X_1 e X_2 fixos, $\hat{\eta}_{12}$ tem ponto de m\u00ednimo, tem-se:

$$m_{221} = \max\{\hat{\eta}(2, 0, 0), \hat{\eta}(2, 0, 2)\} = \max\{-3; 21\} = 21$$

$$m_{222} = \max\{\hat{\eta}(2, 2, 0), \hat{\eta}(2, 2, 2)\} = \max\{-3; 21\} = 21$$

Como para X_1 e X_3 fixos, $\hat{\eta}_{13}$ tem ponto de máximo, tem-se:

$$\begin{aligned} X_3 = 0 \Rightarrow \bar{X}_2 &= -\frac{1}{\hat{\beta}_{22}} \left[\frac{\hat{\beta}_2}{2} + \frac{\hat{\beta}_{12}}{2} 2 + \frac{\hat{\beta}_{23}}{2} 0 \right] = \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{6}{2} + 1 \right] = 1 \in [0, 2] \end{aligned}$$

Logo,

$$m_{231} = \hat{\eta}(2, 1, 0) = 1$$

$$\begin{aligned} X_3 = 2 \Rightarrow \bar{X}_2 &= -\frac{1}{\hat{\beta}_{22}} \left[\frac{\hat{\beta}_2}{2} + \frac{\hat{\beta}_{12}}{2} 2 + \frac{\hat{\beta}_{23}}{2} 2 \right] = \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{6}{2} + 1 \right] = 1 \in [0, 2] \end{aligned}$$

Logo,

$$m_{232} = \hat{\eta}(2, 1, 2) = 25$$

Portanto,

$$M_2 = \max_{F_2} \hat{\eta} = \max \{21; 21; 1; 25\} = 25$$

4) Natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}_2$

Tem-se:

$$B_2 = \begin{bmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Logo, $\hat{\eta}_2$ tem ponto de sela para $X_2 = 0$ e $X_2 = 2$.

5) Pesquisa em F_3 : $X_2 = 0$

Para X_2 e X_1 fixos, obtém-se $\hat{\eta}_{21}$ (igual a $\hat{\eta}_{12}$) que, como já foi visto, tem ponto de mínimo, pois $\hat{\beta}_{33} = 4 > 0$. Então,

$$m_{311} = \max\{\hat{\eta}(0, 0, 0), \hat{\eta}(0, 0, 2)\} = \max\{5; 29\} = 29$$

$$m_{312} = \max\{\hat{\eta}(2, 0, 0), \hat{\eta}(2, 0, 2)\} = \max\{-3; 21\} = 21$$

Para X_2 e X_3 fixos, obtêm-se $\hat{\eta}_{23}$ que tem ponto de máximo, pois $\hat{\beta}_{11} = -6 < 0$. Então, para $X_3 = 0$, tem-se

$$\bar{X}_1 = -\frac{1}{\hat{\beta}_{11}} \left[\frac{\hat{\beta}_1}{2} + \frac{\hat{\beta}_{21}}{2} 0 + \frac{\hat{\beta}_{13}}{2} 0 \right] = \frac{1}{6} \cdot \frac{8}{2} \approx 0,6667$$

Como $\bar{X}_1 \in [0, 2]$, tem-se

$$m_{331} = \hat{\eta}(0,6667; 0; 0) = 7,6667$$

Para $X_3 = 2$, tem-se

$$\bar{X}_1 = -\frac{1}{\hat{\beta}_{11}} \left[\frac{\hat{\beta}_1}{2} + \frac{\hat{\beta}_{21}}{2} 0 + \frac{\hat{\beta}_{13}}{2} 2 \right] = \frac{1}{6} \cdot \frac{8}{2} = 0,6667$$

Como $\bar{X}_1 \in [0, 2]$, tem-se

$$m_{332} = \hat{\eta}(0,6667; 0; 2) = 31,6667$$

Portanto,

$$M_3 = \max_{F_3} \hat{\eta} = \max \{29; 21; 7,6667; 31,6667\} = 31,6667$$

6) Pesquisa em F_4 : $X_2 = 2$

Como para X_2 e X_1 fixos, $\hat{\eta}_{21}$ tem ponto de mínimo ($\hat{\beta}_{33} = 4 > 0$), tem-se

$$m_{411} = \max\{\hat{\eta}(0; 2; 0), \hat{\eta}(0; 2; 2)\} = \max\{1; 25\} = 25$$

$$m_{412} = \max\{\hat{\eta}(2; 2; 0), \hat{\eta}(2; 2; 2)\} = \max\{-3; 21\} = -1$$

Para X_2 e X_3 fixos, já foi visto que $\hat{\eta}_{23}$ tem ponto de máximo, pois $\hat{\beta}_{11} = -6 < 0$. Então, para $X_3 = 0$, tem-se

$$\bar{X}_1 = -\frac{1}{\hat{\beta}_{11}} \left[\frac{\hat{\beta}_1}{2} + \frac{\hat{\beta}_{21}}{2} 2 + \frac{\hat{\beta}_{13}}{2} 0 \right] = \frac{1}{6} \left[\frac{8}{2} + \frac{1}{2} 2 \right] \approx 0,8333$$

Como $\bar{X}_1 \in [0, 2]$, tem-se

$$m_{431} = \hat{\eta}(0,8333; 2; 0) \approx 5,1667$$

Para $X_3 = 2$, tem-se

$$\bar{\bar{X}}_1 = -\frac{1}{\hat{\beta}_{11}} \left[\frac{\hat{\beta}_1}{2} + \frac{\hat{\beta}_{21}}{2} 2 + \frac{\hat{\beta}_{13}}{2} 2 \right] = \frac{1}{6} \left[\frac{8}{2} + \frac{1}{2} 2 \right] \approx 0,8333$$

Como $\bar{\bar{X}}_1 \in [0, 2]$, tem-se

$$m_{432} = \hat{\eta}(0,8333; 2; 2) = 29,1667$$

Portanto,

$$M_4 = \max_{F_4} \hat{\eta} = \max \{25; 21; 5,1667; 29,1667\} = 29,1667$$

7) Natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}_3$

Fixando-se a variável X_3 , tem-se

$$B_3 = \begin{bmatrix} -6 & 0,5 \\ 0,5 & -4 \end{bmatrix}$$

Substituindo-se a 2ª linha de B_3 por (1ª linha) + 12×(2ª linha) e substituindo-se, na matriz obtida, a 2ª coluna por (1ª coluna) + 12×(2ª coluna), obtém-se a forma diagonalizada

$$\Delta_3 = \text{diag} \{-6; -570\}$$

Logo, $\hat{\eta}_3$ tem ponto de máximo para $X_3 = 0$ e $X_3 = 2$.

8) Pesquisa em F_5 : $X_3 = 0$

Como a variável fixada é X_3 , ou seja, $i = 3$, tem-se $j = 1$ e $k = 2$, conforme o método descrito. Então, resolvendo-se o sistema

$$\begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \frac{\hat{\beta}_{12}}{2} \\ \text{sim.} & \hat{\beta}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\hat{\beta}_1}{2} & -\frac{\hat{\beta}_{31}}{2} & 0 \\ -\frac{\hat{\beta}_2}{2} & -\frac{\hat{\beta}_{32}}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

isto é,

$$\begin{bmatrix} -6 & 0,5 \\ 0,5 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 \\ -3 \end{bmatrix}$$

obtem-se

$$\bar{X}_1 = \frac{\begin{vmatrix} -4 & 0,5 \\ -3 & -4 \end{vmatrix}}{23,75} = \frac{17,5}{23,75} \approx 0,7368$$

$$\bar{X}_2 = \frac{\begin{vmatrix} -6 & -4 \\ 0,5 & -3 \end{vmatrix}}{23,75} = \frac{20}{23,75} \approx 0,8421$$

Como $(\bar{X}_1, \bar{X}_2) \in [0, 2] \times [0, 2]$, tem-se

$$M_5 = \max_{F_5} \hat{\eta} = \hat{\eta}(0,7368; 0,8421; 0) \approx 10,4737$$

9) Pesquisa em F_6 : $X_3 = 2$

Resolvendo-se o sistema

$$\begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \frac{\hat{\beta}_{12}}{2} \\ \text{sim.} & \hat{\beta}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\hat{\beta}_1}{2} & -\frac{\hat{\beta}_{31}}{2} 2 \\ -\frac{\hat{\beta}_2}{2} & -\frac{\hat{\beta}_{32}}{2} 2 \end{bmatrix}$$

isto é,

$$\begin{bmatrix} -6 & 0,5 \\ 0,5 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 \\ -3 \end{bmatrix}$$

obtem-se

$$\bar{X}_1 \approx 0,7368 \text{ e } \bar{X}_2 \approx 0,8421$$

Como $(\bar{X}_1, \bar{X}_2) \in [0, 2] \times [0, 2]$, obtem-se

$$M_6 = \max_{F_6} \hat{\eta} = \hat{\eta}(0,7368; 0,8421; 2) \approx 34,4737$$

10) Ponto de máximo fronteira

Tem-se

$$\begin{aligned}\hat{Y}_{MF} &= \max \{M_1, M_2, M_3, M_4, M_5, M_6\} = \\ &= \max \{31,25; 25; 31,6667; 29,1667; 10,4737; 34,4737\} \\ &= 34,4737\end{aligned}$$

Assim, o ponto de máximo fronteira em A é

$$\tilde{X} = (X_1, X_2, X_3)' = (0,7368; 0,8421; 2)$$

onde $\hat{\eta}(\tilde{X}) = \hat{Y}_{MF} = 34,4737$

3.7. Comparação de delineamentos

Na literatura sobre superfícies de resposta existem muitos trabalhos de pesquisa que tratam da construção de delineamentos de tratamentos (ou delineamento de regressão, segundo alguns autores), principalmente após o trabalho de BOX e WILSON (1951). Foram, então, propostos muitos critérios para se obter os chamados delineamentos ótimos, como pode-se ver em MEAD e PIKE (1975), JOHN e DRAPER (1975), JORDAN (1979) e ROJAS (1982), entre outros.

Como se sabe da literatura, a matriz $V = \text{Var}(\tilde{\beta}) = (X'X)^{-1} \sigma^2$ depende somente dos N pontos experimentais (tratamentos) e não de qualquer conjunto particular de observações $Y_1, Y_2, \dots, Y_N$ feitas nesses pontos. Portanto, a matriz V fornece uma base concreta para se definir critérios visando a otimização de delineamentos ou mesmo para comparar delineamentos.

Uma maneira de se comparar dois delineamentos E_1 e E_2 é pelo critério da eficiência por parâmetro. Considerando-se os parâmetros $\beta_i, \beta_{ii}, i = 1, 2, 3$ e $\beta_{ij}, i, j = 1, 2, 3, j > i$ da superfície de resposta polinomial quadrática, define-se a eficiência (por parâmetro) do delineamento E_2 em relação ao delineamento E_1 como

$$\begin{aligned}
E_f(\hat{\beta}_i) &= \frac{\text{Var}_1(\hat{\beta}_i)}{\text{Var}_2(\hat{\beta}_i)} \times \frac{s_i(E_1) N_1}{s_i(E_2) N_2} \\
E_f(\hat{\beta}_{ii}) &= \frac{\text{Var}_1(\hat{\beta}_{ii})}{\text{Var}_2(\hat{\beta}_{ii})} \times \frac{[s_i(E_1)]^2 N_1}{[s_i(E_2)]^2 N_2} \\
E_f(\hat{\beta}_{ij}) &= \frac{\text{Var}_1(\hat{\beta}_{ij})}{\text{Var}_2(\hat{\beta}_{ij})} \times \frac{s_i(E_1) s_j(E_2) N_1}{s_i(E_2) s_j(E_2) N_2}
\end{aligned} \tag{3.7.1}$$

onde $\text{Var}_d(\hat{\beta}_i)$, $\text{Var}_d(\hat{\beta}_{ii})$ e $\text{Var}_d(\hat{\beta}_{ij})$ são as variâncias das estimativas $\hat{\beta}_i$, $\hat{\beta}_{ii}$ e $\hat{\beta}_{ij}$, respectivamente, no delineamento E_d , N_d = número de tratamentos do delineamento E_d e

$$s_t(E_d) = \left\{ \frac{1}{N_d} \sum_{u=1}^N (X_{tu} - \bar{X}_t)^2 \right\}^{1/2}$$

que é denominada a variação da variável X_t , $t = 1, 2, 3$, no delineamento E_d , $d = 1, 2$. Diz-se, então, que E_2 é melhor do que E_1 para se estimar um parâmetro genérico β , quando se obtém um valor maior que 1 para $E_f(\hat{\beta})$, onde $\hat{\beta}$ é uma estimativa de β .

O segundo fator que aparece multiplicando a razão das variâncias nas fórmulas (3.7.1) é um fator de correção que é colocado sempre que os delineamentos E_1 e E_2 têm $N_1 \neq N_2$ ou $s_t(E_1) \neq s_t(E_2)$. Isso fundamenta-se nas idéias de BOX e WILSON (1951) sobre a comparação de dois delineamentos com base na precisão das estimativas e, por essa razão, o critério da eficiência por parâmetro é denominado por muitos autores como o critério de Box.

Um outro modo de comparar dois delineamentos E_1 e E_2 foi apresentado por CAMPOS (1967), também com base na precisão das estimativas. Na comparação das variâncias das estimativas leva-se em conta o número de tratamentos dos delineamentos e a redução à mesma escala é feita reduzindo-se os níveis das variáveis à intervalos de mesma amplitude para ambos os delineamentos.

CAMPOS (1967) apresentou o método na comparação do delineamento fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados com o delineamento de Box com 15 pontos e $\alpha = \sqrt{3}$. Em termos mais gerais, o método pode ser des

critério assim: Sejam a e b dois números reais positivos e $a < b$. Se em E_1 os níveis variam de $-a$ até a e em E_2 de $-b$ até b , deve-se comparar as variâncias corrigidas

$$\begin{aligned} \text{Var}_1(\hat{\beta}_i) &\text{ com } \frac{N_2}{N_1} \left(\frac{b}{a}\right)^2 \text{Var}_2(\hat{\beta}_i) \\ \text{Var}_1(\hat{\beta}_{ii}) &\text{ com } \frac{N_2}{N_1} \left(\frac{b}{a}\right)^4 \text{Var}_2(\hat{\beta}_{ii}) \\ \text{Var}_1(\hat{\beta}_{ij}) &\text{ com } \frac{N_2}{N_1} \left(\frac{b}{a}\right)^4 \text{Var}_2(\hat{\beta}_{ij}) \end{aligned} \quad (3.7.2)$$

Diz-se, então, que o delineamento E_2 é melhor do que o delineamento E_1 para se estimar um parâmetro genérico β quando a variância corrigida de $\hat{\beta}$ for menor para E_2 .

Tanto o critério de Box como o outro apresentado por CAMPOS (1967), não são critérios globais, isto é, não define, no geral, uma preferência completa por um ou outro entre dois delineamentos E_1 e E_2 sob comparação. Assim, por exemplo, E_2 pode ser melhor do que E_1 para se estimar os coeficientes β_i e β_{ii} e E_1 pode ser melhor do que E_2 para se estimar os coeficientes β_{ij} . Entre os critérios globais mais conhecidos da literatura, podem ser citados o critério do $|V|$ (determinante de V), do $\text{tr } V$ (traço de V) e o critério da variância máxima da resposta estimada $\hat{\eta}(\tilde{X})$, $\tilde{X} \in A$.

Com base nesses critérios globais, pode-se definir outros critérios para se comparar dois delineamentos. Sejam, então, V_1 e V_2 as matrizes de dispersão de $\hat{\beta}$, $\text{Var}_1[\hat{\eta}(\tilde{X})]$ e $\text{Var}_2[\hat{\eta}(\tilde{X})]$ as variâncias da resposta estimada em um ponto qualquer $\tilde{X} \in A$, para os delineamentos E_1 e E_2 , respectivamente. Assim, a preferência de E_2 sobre E_1 (E_2 melhor que E_1) pode ser determinada por um dos critérios seguintes:

- 1) $|V_2| < |V_1|$
- 2) $\text{tr } V_2 < \text{tr } V_1$
- 3) $\max_{\tilde{X} \in A} \text{Var}_2[\hat{\eta}(\tilde{X})] < \max_{\tilde{X} \in A} \text{Var}_1[\hat{\eta}(\tilde{X})]$

Neste trabalho, a comparação de delineamentos será feita pelo critério da porcentagem de ocorrência de um evento de interesse. Por exemplo, se o que se deseja num problema é encontrar a combinação de níveis que dá a produção máxima, então, a ocorrência do evento de interesse pode ser a ocorrência de um máximo da função de produção. Sendo assim, dentro das hipóteses básicas do presente trabalho, um delineamento será dito melhor, dentre dois ou em um conjunto de delineamentos utilizáveis na prática, se produz maior porcentagem de pontos de máximo, sempre que a situação real é de máximo.

3.8. Delineamentos de tratamentos com três fatores

Neste trabalho são utilizados para estudo, delineamentos de tratamentos com 3 fatores em 3, 5, 7 e 9 níveis que têm sido utilizados em pesquisas em ensaios de adubação. A região experimental será previamente fixada como

$$A = \{(X_1, X_2, X_3) \in R^3 \text{ tal que } 0 \leq X_i \leq 5, i = 1, 2, 3\}$$

e a definição dos níveis dos fatores em todos os delineamentos, será feita de modo que ao nível mais baixo corresponda o valor 0 (zero) e ao nível mais alto corresponda o valor 5. Desse modo, todos os delineamentos terão os níveis dos fatores (variáveis) reduzidos a intervalos de mesma amplitude.

A composição de cada delineamento, bem como a matriz D' (a matriz transposta da matriz D do delineamento) são apresentadas a seguir.

3.8.1. Delineamento fatorial 3^3

Denominando por 0 = nível baixo, 1 = nível intermediário e 2 = nível alto, o delineamento fatorial 3^3 é composto pelos 27 tratamentos seguintes:

(0,0,0) (0,1,0) (0,2,0) (1,0,0) (1,1,0) (1,2,0) (2,0,0) (2,1,0) (2,2,0)
 (0,0,1) (0,1,1) (0,2,1) (1,0,1) (1,1,1) (1,2,1) (2,0,1) (2,1,1) (2,2,1)
 (0,0,2) (0,1,2) (0,2,2) (1,0,2) (1,1,2) (1,2,2) (2,0,2) (2,1,2) (2,2,2)

3.8.1.1. Delineamento fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados

Fazendo-se 0, 1 e 2 corresponder a 0, 2,5 e 5, respectivamente, tem-se

$$D' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 \\ 0 & 0 & 0 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 5 & 5 & 5 & 0 & 0 & 0 & 2,5 & 2,5 \\ 0 & 2,5 & 5 & 0 & 2,5 & 5 & 0 & 2,5 & 5 & 0 & 2,5 & 5 & 0 & 2,5 \\ \\ 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 \\ 2,5 & 5 & 5 & 5 & 0 & 0 & 0 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 5 & 5 & 5 & 5 \\ 5 & 0 & 2,5 & 5 & 0 & 2,5 & 5 & 0 & 2,5 & 5 & 0 & 2,5 & 5 & 5 \end{bmatrix}$$

3.8.1.2. Delineamento fatorial com níveis do tipo 0, q e 3q, q > 0

Fazendo-se 0, 1 e 2 corresponder a 0, $\frac{5}{3}$ e 5, respectivamente, tem-se:

$$D' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & 5 & 5 & 5 & 0 & 0 & 0 & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} \\ 0 & \frac{5}{3} & 5 & 0 & \frac{5}{3} & 5 & 0 & \frac{5}{3} & 5 & 0 & \frac{5}{3} & 5 & 0 & \frac{5}{3} \\ \\ \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 \\ \frac{5}{3} & 5 & 5 & 5 & 0 & 0 & 0 & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & \frac{5}{3} & 5 & 5 & 5 & 5 \\ 5 & 0 & \frac{5}{3} & 5 & 0 & \frac{5}{3} & 5 & 0 & \frac{5}{3} & 5 & 0 & \frac{5}{3} & 5 & 5 \end{bmatrix}$$

3.8.2. Delineamento de Box com 15 pontos

Este delineamento, também denominado de composto central, é obtido a partir do delineamento fatorial 2^3 , pela adição de 7 outros tratamentos, totalizando 15 tratamentos. Denominando os níveis do fatorial 2^3 por -1 (nível baixo) e 1 (nível alto), os tratamentos são os seguintes:

(-1,-1,-1) (-1, 1,-1) (1,-1,-1) (1, 1,-1)

(-1,-1, 1) (-1, 1, 1) (1,-1, 1) (1, 1, 1)

(0, 0, 0)

(-α, 0, 0) (0,-α, 0) (0, 0,-α)

(α, 0, 0) (0, α, 0) (0, 0, α)

Os 8 primeiros são do fatorial 2^3 , o tratamento (0, 0, 0) é o ponto central do delineamento e os últimos são denominados os pontos axiais.

O valor de α é um número real escolhido pelo experimentador e uma das escolhas possíveis é α = 2, obtendo-se, então, cinco níveis igualmente espaçados para cada variável. Outra escolha possível é aquela que satisfaz a condição de ortogonalidade

$$N.n_f = (n_f + 2\alpha^2)^2$$

como pode-se ver em JOHN (1971, pág. 204), onde N = número de tratamentos do delineamento e n_f = número de tratamentos do fatorial. No caso, como se tem N = 15 e n_f = 8, encontra-se α = 1,21541169, obtendo-se o chamado delineamento composto central ortogonal.

3.8.2.1. Delineamento de Box com 15 pontos com $\alpha = 1,21541169$

Fazendo-se $-\alpha$, -1 , 0 , 1 e α corresponder a 0 ; $0,443083796$; $2,5$; $4,556916204$ e 5 , respectivamente, tem-se:

$$D' = \begin{bmatrix} 0,443083796 & 0,443083796 & 0,443083796 & 0,443083796 \\ 0,443083796 & 0,443083796 & 4,556916204 & 4,556916204 \\ 0,443083796 & 4,556916204 & 0,443083796 & 4,556916204 \\ 4,556916204 & 4,556916204 & 4,556916204 & 4,556916204 \\ 0,443083796 & 0,443083796 & 4,556916204 & 4,556916204 \\ 0,443083796 & 4,556916204 & 0,443083796 & 4,556916204 \\ 2,5 & 0 & 5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 \\ 2,5 & 2,5 & 2,5 & 0 & 5 & 2,5 & 2,5 \\ 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

3.8.2.2. Delineamento de Box com 15 pontos com $\alpha = 2$

Fazendo-se $-\alpha$, -1 , 0 , 1 e α corresponder a 0 ; $1,25$; $2,5$; $3,75$ e 5 , respectivamente, tem-se:

$$D' = \begin{bmatrix} 1,25 & 1,25 & 1,25 & 1,25 & 3,75 & 3,75 & 3,75 & 3,75 \\ 1,25 & 1,25 & 3,75 & 3,75 & 1,25 & 1,25 & 3,75 & 3,75 \\ 1,25 & 3,75 & 1,25 & 3,75 & 1,25 & 3,75 & 1,25 & 3,75 \\ 2,5 & 0 & 5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 \\ 2,5 & 2,5 & 2,5 & 0 & 5 & 2,5 & 2,5 \\ 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

3.8.3. Delineamento $(1/5)5^3$

Com o objetivo de obter delineamentos para o estudo de su perfícies de resposta em experimentos com fertilizantes, com maior número de níveis ou maior distância entre os níveis de cada fator, CONAGIN e JORGE (1977) construíram três fatoriais fracionários $(1/5)5^3$ gerados pela su perposição de três quadrados latinos ortogonais. As frações foram desig nada de tipo I, II, III, tipo I, II, IV e tipo I, III, IV e os autores des tacam que esses delineamentos têm um tamanho bastante adequado e apresen tam um número suficiente de níveis para pesquisa com fertilizantes.

Com esse mesmo objetivo, PERECIN *et alii* (1982) construíram as 155 frações regulares $(1/5)5^3$, geradas pelo confundimento de componen tes ortogonais, derivados da teoria de "Corpos de Galois", mostrando que as 3 frações de CONAGIN e JORGE (1977) e outras 37 apresentam proprieda des semelhantes para serem utilizadas como delineamentos para superfície de resposta em experimentos de adubação. Nesse trabalho, os autores clas sificaram essas 40 frações em três tipos denominados tipos Y, Z e W, em quantidades assim distribuídas: 12 no tipo Y, 4 no tipo Z e 24 no tipo W. As três frações estudadas por CONAGIN e JORGE (1977) são do tipo Y, segun do a classificação de PERECIN *et alii* (1982).

Um delineamento $(1/5)5^3$ é um delineamento fatorial fracionário e é constituído de 25 tratamentos dos 125 do fatorial completo 5^3 . Cada fator é considerado em cinco níveis igualmente espaçados que serão de nominados por 0, 1, 2, 3 e 4.

3.8.3.1. Delineamento $(1/5)5^3$ tipo I, III, IV ou tipo Y

Este delineamento é composto dos 25 tratamentos seguintes:

(0,0,0)	(1,3,4)	(2,1,3)	(3,4,2)	(4,2,1)
(1,1,1)	(2,4,0)	(3,2,4)	(4,0,3)	(0,3,2)
(2,2,2)	(3,0,1)	(4,3,0)	(0,1,4)	(1,4,3)
(3,3,3)	(4,1,2)	(0,4,1)	(1,2,0)	(2,0,4)
(4,4,4)	(0,2,3)	(1,0,2)	(2,3,1)	(3,1,0)

Fazendo-se 0, 1, 2, 3 e 4 corresponder a 0; 1,25; 2,5; 3,75 e 5, respectivamente, tem-se:

$$D' = \begin{bmatrix} 0 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 \\ 0 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 & 3,75 & 5 & 0 & 1,25 \\ 0 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 & 5 & 0 & 1,25 & 2,5 \\ \\ 0 & 2,5 & 3,75 & 5 & 0 & 1,25 & 3,75 & 5 \\ 2,5 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 & 0 & 5 & 0 \\ 3,75 & 3,75 & 5 & 0 & 1,25 & 2,5 & 2,5 & 3,75 \\ \\ 0 & 1,25 & 2,5 & 5 & 0 & 1,25 & 2,5 & 3,75 \\ 1,25 & 2,5 & 3,75 & 2,5 & 3,75 & 5 & 0 & 1,25 \\ 5 & 0 & 1,25 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 & 0 \end{bmatrix}$$

3.8.3.2. Delineamento $(1/5)5^3$ tipo W

Este delineamento é constituído dos 25 tratamentos seguintes:

(0,0,0)	(1,0,2)	(2,0,4)	(3,0,1)	(4,0,3)
(0,1,2)	(1,1,4)	(2,1,1)	(3,1,3)	(4,1,0)
(0,2,4)	(1,2,1)	(2,2,3)	(3,2,0)	(4,2,2)
(0,3,1)	(1,3,3)	(2,3,0)	(3,3,2)	(4,3,4)
(0,4,3)	(1,4,0)	(2,4,2)	(3,4,4)	(4,4,1)

Sendo 0, 1, 2, 3 e 4, correspondentes a 0; 1,25; 2,5; 3,75 e 5, respectivamente, tem-se:

$$D' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1,25 & 1,25 & 1,25 & 1,25 \\ 0 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 & 0 & 1,25 & 2,5 & 3,75 \\ 0 & 2,5 & 5 & 1,25 & 3,75 & 2,5 & 5 & 1,25 & 3,75 \\ 1,25 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 3,75 & 3,75 \\ 5 & 0 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 & 0 & 1,25 \\ 0 & 5 & 1,25 & 3,75 & 0 & 2,5 & 1,25 & 3,75 \\ 3,75 & 3,75 & 3,75 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 \\ 2,5 & 3,75 & 5 & 0 & 1,25 & 2,5 & 3,75 & 5 \\ 0 & 2,5 & 5 & 3,75 & 0 & 2,5 & 5 & 1,25 \end{bmatrix}$$

3.8.4. Delineamento composto central com duas estrelas

Este delineamento, na sua forma geral para k fatores, foi proposto por CONAGIN (1982) como sendo um delineamento do tipo simétrico, com um número N de pontos (tratamentos) dado por

$$N = 2^{k-f} + 2k + 2k + n$$

onde: 2^{k-f} = número de pontos da parte fatorial, sendo f o índice de fracionamento;

$2k+2k$ = número de pontos axiais;

n = número de pontos centrais.

Os pontos axiais estão situados nos eixos coordenados dos fatores nas distâncias $\pm\alpha$ e $\pm\gamma\alpha$ do centro do delineamento. CONAGIN (1982) mostrou que para se ter o delineamento ortogonal deve-se ter a relação

$$\alpha^4(1+\gamma^2)^2 + W^2 F \alpha^2(1+\gamma^2) - W^4 \frac{F}{4}(N-F) = 0$$

onde F é o número de pontos de fatorial e W é tal que $\pm W$ são os níveis do fatorial.

No caso de $k = 3$ fatores e valores de $f = 0$, $n = 1$, $\gamma = 2$ e $W = 1$, o autor obteve o delineamento composto central com duas estrelas ortogonal. Esse delineamento é constituído de $N = 21$ pontos que são:

$$\begin{array}{llll}
(-1, -1, -1) & (-\alpha, 0, 0) & (-2\alpha, 0, \bullet) & (0, 0, 0) \\
(-1, -1, 1) & (\alpha, 0, 0) & (2\alpha, 0, 0) & \\
(-1, 1, -1) & (0, -\alpha, 0) & (0, -2\alpha, \bullet) & \\
(-1, 1, 1) & (0, \alpha, \bullet) & (0, 2\alpha, 0) & \\
(1, -1, -1) & (0, 0, -\alpha) & (0, 0, -2\alpha) & \\
(1, -1, 1) & (\bullet, 0, \alpha) & (\bullet, 0, 2\alpha) & \\
(1, 1, -1) & & & \\
(1, 1, 1) & & &
\end{array}$$

onde $\alpha = 0,704377838$. Cada fator é, portanto, considerado em 7 níveis.

Fazendo-se -2α , -1 , $-\alpha$, 0 , α , 1 e 2α corresponder a 0 ; $0,725384257$; $1,25$; $2,5$; $3,75$; $4,274615743$ e 5 , respectivamente, tem-se:

$$D' = \begin{bmatrix}
0,725384257 & 0,725384257 & 0,725384257 & 0,725384257 & 4,274615743 \\
0,725384257 & 0,725384257 & 4,274615743 & 4,274615743 & 0,725384257 \\
0,725384257 & 4,274615743 & 0,725384257 & 4,274615743 & 0,725384257 \\
4,274615743 & 4,274615743 & 4,274615743 & 2,5 & 1,25 & 3,75 & 2,5 \\
0,725384257 & 4,274615743 & 4,274615743 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 1,25 \\
4,274615743 & 0,725384257 & 4,274615743 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 \\
2,5 & 2,5 & 2,5 & 0 & 5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 \\
3,75 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 0 & 5 & 2,5 & 2,5 \\
2,5 & 1,25 & 3,75 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 0 & 5
\end{bmatrix}$$

3.8.5. Delineamento duplo central composto com 29 pontos

CONAGIN *et alii* (1969) propuseram o uso do delineamento duplo central composto com 29 pontos, visando obter melhor estimativa da curvatura da função de resposta. Este delineamento compõe-se dos 8 pontos do fatorial 2^3 com níveis -1 e 1, mais 8 pontos do fatorial 2^3 com níveis -2 e 2, mais 1 ponto central, mais 12 pontos axiais, sendo 6 nas distâncias $\pm\alpha$ e outros 6 nas distâncias $\pm 2\alpha$ do centro do delineamento. Logo, os 29 tratamentos são:

$(-1, -1, -1)$	$(-2, -2, -2)$	$(0, 0, 0)$	$(-2\alpha, 0, 0)$
$(-1, -1, 1)$	$(-2, -2, 2)$	$(-\alpha, 0, 0)$	$(2\alpha, 0, 0)$
$(-1, 1, -1)$	$(-2, 2, -2)$	$(\alpha, 0, 0)$	$(0, -2\alpha, 0)$
$(-1, 1, 1)$	$(-2, 2, 2)$	$(0, -\alpha, 0)$	$(0, 2\alpha, 0)$
$(1, -1, -1)$	$(2, -2, -2)$	$(0, \alpha, 0)$	$(0, 0, -2\alpha)$
$(1, -1, 1)$	$(2, -2, 2)$	$(0, 0, -\alpha)$	$(0, 0, 2\alpha)$
$(1, 1, -1)$	$(2, 2, -2)$	$(0, 0, \alpha)$	
$(1, 1, 1)$	$(2, 2, 2)$		

Segundo CONAGIN e JORGE (1979), esse delineamento foi considerado, em sua forma original, com $\alpha = 1$ e, nesse caso, cada fator era analisado em cinco níveis, a saber, -2, -1, 0, 1 e 2. O tipo ortogonal é obtido considerando-se $\alpha = 1,5100$ e nesse caso, cada um dos três fatores é analisado em nove níveis, quais sejam:

-3,02; -2; -1,5100; -1; 0; 1; 1,5100; 2; 3,02

3.8.5.1. Delineamento duplo central composto com $\alpha = 1,51$

Fazendo-se -3,02; -2; -1,51; -1; 0; 1, 1,51; 2 e 3,02 cor
responder a 0; 0,844370862; 1,25; 1,672185431; 2,5; 3,327814569; 3,75;
4,155629138 e 5, tem-se:

$$D' = \begin{bmatrix} 1,672185431 & 1,672185431 & 1,672185431 & 1,672185431 & 3,327814569 \\ 1,672185431 & 1,672185431 & 3,327814569 & 3,327814569 & 1,672185431 \\ 1,672185431 & 3,327814569 & 1,672185431 & 3,327814569 & 1,672185431 \end{bmatrix}$$

3,327814569 3,327814569 3,327814569 0,844370862 0,844370862

1,672185431 3,327814569 3,327814569 0,844370862 0,844370862

3,327814569 1,672185431 3,327814569 0,844370862 4,155629138

0,844370862 0,844370862 4,155629138 4,155629138 4,155629138

4,155629138 4,155629138 0,844370862 0,844370862 4,155629138

0,844370862 4,155629138 0,844370862 4,155629138 0,844370862

4,155629138 2,5 1,25 3,75 2,5 2,5 2,5 2,5 0

4,155629138 2,5 2,5 2,5 1,25 3,75 2,5 2,5 2,5

4,155629138 2,5 2,5 2,5 2,5 2,5 1,25 3,75 2,5

$$\begin{bmatrix} 5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 & 2,5 \\ 2,5 & 0 & 5 & 2,5 & 2,5 \\ 2,5 & 2,5 & 2,5 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

3.8.5.2. Delineamento duplo central composto com $\alpha = 1$

Fazendo-se -2, -1, 0, 1 e 2 corresponder a 0, 1,25, 2,5, 3,75 e 5, tem-se:

$$D' = \begin{bmatrix} 1,25 & 1,25 & 1,25 & 1,25 & 3,75 & 3,75 & 3,75 & 3,75 \\ 1,25 & 1,25 & 3,75 & 3,75 & 1,25 & 1,25 & 3,75 & 3,75 \\ 1,25 & 3,75 & 1,25 & 3,75 & 1,25 & 3,75 & 1,25 & 3,75 \end{bmatrix}$$

0	0	0	0	5	5	5	5	2,5	1,25	3,75	2,5
0	0	5	5	0	0	5	5	2,5	2,5	2,5	1,25
0	5	0	5	0	5	0	5	2,5	2,5	2,5	2,5

2,5	2,5	2,5	0	5	2,5	2,5	2,5	2,5	2,5
3,75	2,5	2,5	2,5	2,5	0	5	2,5	2,5	
2,5	1,25	3,75	2,5	2,5	2,5	2,5	0	5	

4. METODOLOGIA

4.1. O método utilizado

Para atender aos objetivos da pesquisa, foi utilizado o método de simulação. Todo o trabalho de simulação e análise dos dados foi executado num microcomputador eletrônico EGO XT, compatível com o IBM-PC, na Unidade de Processamento de Dados da Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias - UNESP, Campus de Jaboticabal.

Os dados foram simulados para os delineamentos de tratamentos com três fatores em 3, 5, 7 e 9 níveis, descritos na seção 3.8, utilizando-se funções de resposta que tem máximo. As funções de resposta utilizadas para a simulação dos dados foram as mesmas para todos os delineamentos e constituíram um conjunto de 21 funções de produção em três variáveis X_1 , X_2 e X_3 do tipo

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \\ + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3$$

Nas 21 funções, os valores dos coeficientes foram determinados de modo a produzir diferentes situações reais de interesse, sob as quais a pesquisa seria desenvolvida. A técnica utilizada na construção desses modelos de resposta, admitidos como verdadeiros na simulação, foi desenvolvida na seção 3.5 e o ponto de partida é uma forma canônica

$$\eta = Y_0 + \lambda_1 W_1^2 + \lambda_2 W_2^2 + \lambda_3 W_3^2 \quad (4.1)$$

onde $\lambda_i < 0$, $i = 1, 2, 3$ e $Y_0 = \max \eta$ em R^3 .

4.2. Os modelos de resposta para simulação

Com o objetivo de se definir modelos de resposta próximos daqueles que podem ser obtidos na prática, foi feito, inicialmente, um estudo sobre a função de produção polinomial quadrática utilizada por JORGE e CONAGIN (1977) que nas variáveis X_1 , X_2 e X_3 é

$$\eta = 480 + 561X_1 + 691X_2 + 378X_3 - 42X_1^2 - 55X_2^2 - 28X_3^2 - 25X_1X_2 - 18X_1X_3 - 12X_2X_3$$

Com esse modelo, segundo os autores, procura-se caracterizar uma situação de produção de milho, em quilogramas por hectare, suscetível de ser encontrada para os ensaios de adubação dessa cultura no Estado de São Paulo. Nos estudos realizados pelos autores, trabalhou-se com um coeficiente de variação de 8,5% para uma produção média de milho em torno de 3500 kg/ha, aproximadamente, o que dá um valor aproximado $\sigma = 300$ para o desvio padrão do erro em cada observação.

Os autovalores da matriz B desse modelo são iguais a -65,2, -36,2 e -23,6, aproximadamente, sendo então, $\sum_{i=1}^3 \lambda_i = -125$, que é igual a tr B . Essa função de produção η tem máximo aproximadamente igual a 4176,60 no ponto $(X_1, X_2, X_3) = (4,31, 4,83, 4,33)$.

Com base nesses resultados, foi tomado para toda a pesquisa, o valor $\sigma = 300$ e os 21 modelos de produção foram obtidos a partir da forma canônica 4.1, nas seguintes condições:

1) Condições sobre $\sum_{i=1}^3 \lambda_i$:

$$1.1) \sum_{i=1}^3 \lambda_i = -0,5\sigma = -150$$

$$1.2) \sum_{i=1}^3 \lambda_i = -0,3\sigma = -90$$

$$1.3) \sum_{i=1}^3 \lambda_i = -0,85\sigma = -255$$

2) Condições sobre λ_1 , λ_2 e λ_3 :

Para cada uma das condições sobre $\sum_{i=1}^3 \lambda_i$ foram consideradas as seguintes outras condições:

$$2.1) \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$$

$$2.2) \lambda_1 \text{ grande e } \lambda_2 = \lambda_3 \text{ pequenos}$$

$$2.3) \lambda_1 = \lambda_2 \text{ grandes e } \lambda_3 \text{ pequeno}$$

$$2.4) \lambda_1 \text{ grande, } \lambda_2 \text{ médio e } \lambda_3 \text{ pequeno}$$

Observação: A caracterização de um autovalor pequeno, médio ou grande é em termos do valor absoluto.

3) Condições sobre o máximo de $\eta(\underline{X})$

Para todas as funções $\eta(\underline{X})$ o interesse foi em se ter

$$\max \eta(\underline{X}) = 4100 \text{ no ponto } \underline{X}_0 = (X_{01}, X_{02}, X_{03})' = (4, 4, 4)'$$

O ponto $\underline{X}_0$ foi escolhido assim porque se desejava estudar uma situação onde $\underline{X}_0$ estivesse dentro da região experimental A e tal que as coordenadas estivessem próximas do maior nível possível. No caso, a variação de cada X_i , $i = 1, 2, 3$ é no intervalo $[0, 5]$ e com $X_{01} = X_{02} = X_{03} = 4$, tem-se essas doses situadas 80% à direita da menor dose, o que é uma situação fácil de ser encontrada em ensaios de adubação.

Os 21 modelos de produção, as condições sob as quais foram determinados, bem como o cálculo de cada um, conforme a seção 3.5, são apresentados a seguir, sendo os modelos de números 1 a 7 com a condição $\sum_{i=1}^3 \lambda_i = -150$, os modelos de números 8 a 14 com a condição $\sum_{i=1}^3 \lambda_i = -90$ e os modelos de números 15 a 21 com a condição $\sum_{i=1}^3 \lambda_i = -255$. A matriz M é a matriz de rotação e como foi visto na seção 3.5, será $M = I$ para se obter um modelo sem interação e $M = M_2$ para se obter um modelo com interação. O valor pequeno para λ_i foi tomado como -18, o médio como a média aritmética dos três e o grande por diferença, já que a soma dos três é fixa.

MODELO 1: $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = -50$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-50, -50, -50\}$$

$$-2\underline{X}_0'Q = (400; 400; 400)$$

$$\underline{X}_0'Q\underline{X}_0 = 16(-150) = -2400$$

Portanto,

$$\eta = 1700 + 400X_1 + 400X_2 + 400X_3 - 50X_1^2 - 50X_2^2 - 50X_3^2$$

MODELO 2: $\lambda_1 = -114$, $\lambda_2 = -18$, $\lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-114, -18, -18\}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (912; 144; 144)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-150) = -2400$$

Então,

$$\eta = 1700 + 912X_1 + 144X_2 + 144X_3 - 114X_1^2 - 18X_2^2 - 18X_3^2$$

MODELO 3: $\lambda_1 = -114$, $\lambda_2 = -18$, $\lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -60,67 & 46,57 & 10,35 \\ \text{sim.} & -68,82 & -11,29 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -20,51 \end{bmatrix}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (30; 268,32; 171,6)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-58,74) = -939,84$$

Logo,

$$\begin{aligned} \eta = & 3160,16 + 30X_1 + 268,32X_2 + 171,6X_3 - 60,67X_1^2 \\ & - 68,82X_2^2 - 20,51X_3^2 + 93,14X_1X_2 + 20,7X_1X_3 - 22,58X_2X_3 \end{aligned}$$

MODELO 4: $\lambda_1 = -66$, $\lambda_2 = -66$, $\lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-66, -66, -18\}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (528; 528; 144)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-150) = -2400$$

Então,

$$\eta = 1700 + 528X_1 + 528X_2 + 144X_3 - 66X_1^2 - 66X_2^2 - 18X_3^2$$

MODELO 5: $\lambda_1 = -66$, $\lambda_2 = -66$, $\lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -44,67 & 15,52 & 18,11 \\ \text{sim.} & -54,70 & 13,18 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -50,63 \end{bmatrix}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (88,32; 208; 154,72)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-56,38) = -902,08$$

Portanto,

$$\eta = 3197,92 + 88,32X_1 + 208X_2 + 154,72X_3 - 44,67X_1^2 - 54,70X_2^2 - 50,63X_3^2 + 31,04X_1X_2 + 36,22X_1X_3 + 26,36X_2X_3$$

MODELO 6: $\lambda_1 = -82$, $\lambda_2 = -50$, $\lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-82, -50, -18\}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (656; 400; 144)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-150) = -2400$$

Logo,

$$\eta = 1700 + 656X_1 + 400X_2 + 144X_3 - 82X_1^2 - 50X_2^2 - 18X_3^2$$

MODELO 7: $\lambda_1 = -82$, $\lambda_2 = -50$, $\lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -50 & 25,87 & 15,52 \\ \text{sim.} & -59,41 & 5,02 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -40,49 \end{bmatrix}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (68,88; 228,16; 160,4)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-57,18) = -914,88$$

Assim,

$$\eta = 3185,12 + 68,88x_1 + 228,16x_2 + 160,4x_3 - 50x_1^2 - 59,41x_2^2 - 40,59x_3^2 + 51,74x_1x_2 + 31,04x_1x_3 + 10,04x_2x_3$$

MODELO 8: $\lambda_1 = -30, \lambda_2 = -30, \lambda_3 = -30$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-30, -30, -30\}$$

$$-2\tilde{x}_0'Q = (240; 240; 240)$$

$$\tilde{x}_0'Q\tilde{x}_0 = 16(-90) = -1440$$

Então,

$$\eta = 2660 + 240x_1 + 240x_2 + 240x_3 - 30x_1^2 - 30x_2^2 - 30x_3^2$$

MODELO 9: $\lambda_1 = -54, \lambda_2 = -18, \lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-54, -18, -18\}$$

$$-2\tilde{x}_0'Q = (432; 144; 144)$$

$$\tilde{x}_0'Q\tilde{x}_0 = 16(-90) = -1440$$

Logo,

$$\eta = 2660 + 432x_1 + 144x_2 + 144x_3 - 54x_1^2 - 18x_2^2 - 18x_3^2$$

MODELO 10: $\lambda_1 = -54, \lambda_2 = -18, \lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -34 & 17,46 & 3,88 \\ \text{sim.} & -37,06 & -4,24 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -18,94 \end{bmatrix}$$

$$-2\tilde{x}_0'Q = (101,28; 190,72; 154,4)$$

$$\tilde{x}_0'Q\tilde{x}_0 = 16(-55,8) = -892,8$$

Logo,

$$\eta = 3207,2 + 101,28X_1 + 190,72X_2 + 154,4X_3 - 34X_1^2 - 37,06X_2^2 - 18,94X_3^2 + 34,92X_1X_2 + 7,76X_1X_3 - 8,48X_2X_3$$

MODELO 11: $\lambda_1 = -36$, $\lambda_2 = -36$, $\lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-36, -36, -18\}$$

$$-2X_0'Q = (288; 288; 144)$$

$$X_0'QX_0 = 16(-90) = -1440$$

Então,

$$\eta = 2660 + 288X_1 + 288X_2 + 144X_3 - 36X_1^2 - 36X_2^2 - 18X_3^2$$

MODELO 12: $\lambda_1 = -36$, $\lambda_2 = -36$, $\lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -28 & 5,82 & 6,79 \\ \text{sim.} & -31,76 & 4,94 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -30,24 \end{bmatrix}$$

$$-2X_0'Q = (123,12; 168; 148,08)$$

$$X_0'QX_0 = 16(-54,9) = -878,4$$

Portanto,

$$\eta = 3221,6 + 123,12X_1 + 168X_2 + 148,08X_3 - 28X_1^2 - 31,76X_2^2 - 30,24X_3^2 + 11,64X_1X_2 + 13,58X_1X_3 + 9,88X_2X_3$$

MODELO 13: $\lambda_1 = -42$, $\lambda_2 = -30$, $\lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-42, -30, -18\}$$

$$-2X_0'Q = (336; 240; 144)$$

$$X_0'QX_0 = 16(-90) = -1440$$

Logo,

$$\eta = 2660 + 336X_1 + 240X_2 + 144X_3 - 42X_1^2 - 30X_2^2 - 18X_3^2$$

MODELO 14: $\lambda_1 = -42$, $\lambda_2 = -30$, $\lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -30 & 9,70 & 5,82 \\ \text{sim.} & -33,53 & 1,88 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -26,47 \end{bmatrix}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (115,84; 175,6; 150,16)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-55,2) = -883,2$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \eta = & 3216,8 + 115,84X_1 + 175,6X_2 + 150,16X_3 - 30X_1^2 - \\ & - 33,53X_2^2 - 26,47X_3^2 + 19,4X_1X_2 + 11,64X_1X_3 + 3,76X_2X_3 \end{aligned}$$

MODELO 15: $\lambda_1 = -85$, $\lambda_2 = -85$, $\lambda_3 = -85$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-85, -85, -85\}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (680; 680; 680)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-255) = -4080$$

Então,

$$\eta = 20 + 680X_1 + 680X_2 + 680X_3 - 85X_1^2 - 85X_2^2 - 85X_3^2$$

MODELO 16: $\lambda_1 = -219$, $\lambda_2 = -18$, $\lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-219, -18, -18\}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (1752; 144; 144)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-255) = -4080$$

Assim,

$$\eta = 20 + 1752X_1 + 144X_2 + 144X_3 - 219X_1^2 - 18X_2^2 - 18X_3^2$$

MODELO 17: $\lambda_1 = -219$, $\lambda_2 = -18$, $\lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -107,33 & 97,50 & 21,67 \\ \text{sim.} & -124,21 & -23,65 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -23,26 \end{bmatrix}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (-94,72; 404,48; 201,92)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-63,96) = -1023,36$$

Logo,

$$\begin{aligned} \eta = & 3076,64 - 94,72X_1 + 404,48X_2 + 201,92X_3 - 107,33X_1^2 - \\ & - 124,41X_2^2 - 23,26X_3^2 + 195X_1X_2 + 43,34X_1X_3 - 47,3X_2X_3 \end{aligned}$$

MODELO 18: $\lambda_1 = -118,5$, $\lambda_2 = -118,5$, $\lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-118,5; -118,5; -18\}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (948; 948; 144)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-255) = -4080$$

Logo,

$$\eta = 20 + 948X_1 + 948X_2 + 144X_3 - 118,5X_1^2 - 118,5X_2^2 - 18X_3^2$$

MODELO 19: $\lambda_1 = -118,5$, $\lambda_2 = -118,5$, $\lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -73,83 & 32,50 & 37,92 \\ \text{sim.} & -94,86 & 27,60 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -86,31 \end{bmatrix}$$

$$-2\tilde{X}_0'Q = (27,28; 278,08; 166,32)$$

$$\tilde{X}_0'Q\tilde{X}_0 = 16(-58,96) = -943,36$$

Portanto,

$$\eta = 3156,64 + 27,28x_1 + 278,08x_2 + 166,32x_3 - 73,83x_1^2 - 94,86x_2^2 - 86,31x_3^2 + 65x_1x_2 + 75,84x_1x_3 + 55,2x_2x_3$$

MODELO 20: $\lambda_1 = -152$, $\lambda_2 = -85$, $\lambda_3 = -18$ e $M = I$

Tem-se:

$$Q = \text{diag} \{-152, -85, -18\}$$

$$-2\tilde{x}_0'Q = (1216; 680; 144)$$

$$\tilde{x}_0'Q\tilde{x}_0 = 16(-255) = -4080$$

Então,

$$\eta = 20 + 1216x_1 + 680x_2 + 144x_3 - 152x_1^2 - 85x_2^2 - 18x_3^2$$

MODELO 21: $\lambda_1 = -152$, $\lambda_2 = -85$, $\lambda_3 = -18$ e $M = M_2$

Tem-se:

$$Q = \begin{bmatrix} -85 & 54,17 & 32,50 \\ \text{sim.} & -104,71 & 10,51 \\ \text{sim.} & \text{sim.} & -65,29 \end{bmatrix}$$

$$-2\tilde{x}_0'Q = (-13,36; 320,24; 178,24)$$

$$\tilde{x}_0'Q\tilde{x}_0 = 16(-60,64) = -970,24$$

Então,

$$\eta = 3129,76 - 13,36x_1 + 320,24x_2 + 178,24x_3 - 85x_1^2 - 104,71x_2^2 - 65,29x_3^2 + 108,34x_1x_2 + 65x_1x_3 + 21,02x_2x_3$$

4.3. Critério para a escolha de um λ_i pequeno

Numa forma canônica

$$\eta = Y_0 + \lambda_1 W_1^2 + \lambda_2 W_2^2 + \lambda_3 W_3^2$$

de um modelo de resposta, pode-se observar que para um λ_i pequeno em valor absoluto, tem-se pouca sensibilidade na resposta na direção do eixo canô

nico W_i , isto é, as alterações na resposta η são relativamente pequenas quando se desloca no eixo canônico W_i , afastando-se da origem em qualquer sentido. Com isso em mente, considerou-se uma posição particular dos eixos e utilizou-se a variação da resposta η na direção do eixo W_i , dentro da região experimental, para se definir o que poderia ser um λ_i pequeno para a construção de alguns dos modelos da seção 4.2.

Para isso, tomou-se os eixos canônicos W_1, W_2 e W_3 paralelos aos eixos X_1, X_2 e X_3 , respectivamente e de mesmas orientações que estes. A seguir, considerou-se a curva

$$\eta^* = Y_0 + \lambda_i W_i^2 \quad (4.3.1)$$

obtida da forma canônica de η quando se coloca 0 (zero) para as outras variáveis canônicas.

Definiu-se, então, como sendo um λ_i pequeno, aquele que satisfaz a condição

$$\max_{W_i} \eta^* - \min_{W_i} \eta^* \leq \sigma \quad (4.3.2)$$

para W_i dentro da região experimental. Considerando-se a posição relativa particular dos eixos W_i e X_i e que $\underline{x}_0 = (x_{01}, x_{02}, x_{03})' = (4, 4, 4)'$ corresponde à origem $\underline{w} = \underline{0}$ do sistema canônico, uma ilustração gráfica típica da curva (4.3.1) na condição (4.3.2) é dada pela Figura 4.1.

FIGURA 4.1 - A função η^* na condição $\max_{W_i} \eta^* - \min_{W_i} \eta^* \leq \sigma$.

Conforme se nota na Figura 4.1, a variação de W_i dentro da região experimental é de -4 até 1, pois se está considerando que $X_i \in [0, 5]$. Isso não é difícil de se concluir porque na situação particular já descrita, dos eixos, a relação entre $\tilde{X}$ e $\tilde{W}$ é dada por

$$\tilde{X} = \tilde{X}_0 + I\tilde{W}$$

onde I é a matriz (de rotação) identidade de ordem 3. Sendo assim, para $i = 1, 2, 3$, tem-se

$$W_i = X_i - X_{0i}$$

e, portanto,

$$0 \leq X_i \leq 5 \iff -4 \leq W_i \leq 1$$

Como a função η^* é simétrica em relação a $W_i = 0$, pode-se concluir que $\min_{W_i} \eta^* = Y_0 + 16\lambda_i$, isto é, o mínimo de η^* para $W_i \in [-4, 1]$ é atingido em $W_i = -4$. Sendo $\max_{W_i} \eta^* = Y_0$ nesse intervalo, tem-se

$$0 \leq \max_{W_i} \eta^* - \min_{W_i} \eta^* \leq \sigma \iff 0 \leq -16\lambda_i \leq \sigma$$

isto é,

$$-\frac{\sigma}{16} \leq \lambda_i \leq 0$$

Portanto, para $\sigma = 300$, tem-se que λ_i é um valor pequeno em valor absoluto se satisfaz $-18,75 \leq \lambda_i \leq 0$.

Em princípio, qualquer valor de λ_i nesse intervalo poderia ser utilizado como pequeno, pois todos satisfazem a condição (4.3.2). No entanto, para não se criar situações quase extremas, isto é, de muito pouca sensibilidade na resposta, optou-se por um valor de λ_i o mais próximo possível do extremo inferior desse intervalo. Sendo assim, para simplificar os cálculos, tomou-se o valor inteiro $\lambda_i = -18$.

4.4. O material utilizado e a obtenção dos resultados

O material utilizado na pesquisa constituiu-se de dados experimentais obtidos por simulação, utilizando-se a sub-rotina indicada no

Apêndice, onde o método utilizado para a simulação de variáveis aleatórias com distribuição normal unidimensional é fundamentado no trabalho de BOX (1958). Para cada delineamento d com N_d tratamentos, $d = 1, 2, \dots, 9$ e para cada um dos 21 modelos de resposta, foram simulados 1000 ensaios inteiramente casualizados de N_d tratamentos com $\sigma = 300$, o desvio padrão do erro em cada observação.

O programa para o computador foi elaborado de modo que quando um delineamento era informado, através da matriz D , os resultados eram obtidos para o conjunto dos 21 modelos, num total de 21000 ensaios gerados, sendo 1000 a partir de cada modelo de resposta. Para cada ensaio, de cada conjunto de 1000, foi obtida pelo método dos mínimos quadrados, a superfície de resposta

$$\begin{aligned}\hat{\eta} = & \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1 + \hat{\beta}_2 X_2 + \hat{\beta}_3 X_3 + \hat{\beta}_{11} X_1^2 + \hat{\beta}_{22} X_2^2 + \hat{\beta}_{33} X_3^2 + \\ & + \hat{\beta}_{12} X_1 X_2 + \hat{\beta}_{13} X_1 X_3 + \hat{\beta}_{23} X_2 X_3\end{aligned}$$

A seguir foi feito o estudo da natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}$, sendo este classificado em um dos quatro tipos possíveis que são: ponto de máximo, de mínimo, de sela e indeterminação.

As ocorrências de máximo, mínimo, sela ou indeterminação foram contadas e depois apresentadas em porcentagens sobre 1000 ensaios. Em cada ensaio, quando o ponto crítico era de máximo ou de sela, eram calculadas as coordenadas desse ponto e o valor de $\hat{\eta}$ nesse ponto. Os casos de mínimo ou indeterminação eram apenas contados, não se efetuando nenhum outro cálculo nesses casos.

Nos ensaios onde o ponto crítico era de sela e, somente nesses, eram calculados também o ponto de máximo experimental e o ponto de máximo fronteira na região experimental, bem como o valor de $\hat{\eta}$ nesses pontos. O ponto de máximo experimental é o ponto na região experimental, caracterizado pela combinação de níveis $\underline{X} = (X_1, X_2, X_3)'$ do delineamento que corresponde à maior observação Y do ensaio simulado.

Conforme foi dito na seção 3.6.2, existe a possibilidade de ocorrer uma indeterminação numa face quando se vai calcular o ponto de máximo fronteira. Num caso desses, o programa elaborado encerrava o processo de cálculo do ponto de máximo fronteira e registrava tal ocorrência para efeito de controle.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos estão apresentados nas tabelas numeradas de 1 a 12. Nas tabelas foram utilizadas siglas para designar os delineamentos que foram as seguintes:

FIE: Fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados

FN: Fatorial 3^3 com níveis do tipo 0, q e 3q

BO: Box com 15 pontos e $\alpha = 1,21541169$

BN: Box com 15 pontos e $\alpha = 2$

Y: $(1/5)5^3$ tipo I, III, IV ou tipo Y

W: $(1/5)5^3$ tipo W

CC: Composto central com duas estrelas

DCO: Duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1,51$

DCN: Duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1$

Os resultados foram obtidos em duas etapas. Na primeira foram utilizados todos os 21 modelos descritos na seção 4.2 e os resultados de interesse estão nas tabelas numeradas de 1 a 6. Na segunda etapa foram utilizados apenas os modelos de resposta de números 6, 14 e 18 e os resultados estão nas tabelas numeradas de 7 a 12.

5.1. Porcentagens de pontos de máximo

A Tabela 1 contém as porcentagens de pontos de máximo em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento. Em cada linha, correspondente a cada modelo de resposta, aparecem os delineamentos

seguidos das porcentagens de pontos de máximo, colocadas entre parênteses. A sequência de delineamentos, em cada linha, está colocada em ordem de crescente quanto a porcentagem de pontos de máximo.

Como se pode notar, os resultados na Tabela 1 mostram uma nítida vantagem dos dois delineamentos fatoriais 3^3 sobre os demais, quanto à capacidade de produzir pontos de máximo quando a situação real é de máximo. Entre os dois delineamentos 3^3 há uma ligeira vantagem para o delineamento fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados.

Na comparação dos nove delineamentos entre si, através dos resultados da Tabela 1, deve-se destacar o excelente desempenho dos dois delineamentos 3^3 em confronto, principalmente, com os delineamentos de 7 e 9 níveis que são o composto central com duas estrelas e o duplo central composto com 29 pontos do tipo ortogonal, respectivamente. De modo geral, considerando-se as 21 situações estudadas através dos 21 modelos de resposta, os resultados na Tabela 1 indicam uma classificação conjunta dos nove delineamentos, em ordem decrescente de preferência, da seguinte forma: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, fatorial 3^3 com níveis tipo 0, q e 3q, $(1/5)5^3$ tipo W, $(1/5)5^3$ tipo Y, duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1$, Box com 15 pontos e $\alpha = 1,215$, composto central com estrelas, duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1,51$ e Box com 15 pontos e $\alpha = 2$.

Conforme se nota por essa classificação, o número maior de níveis não é causa que por si só determina uma maior porcentagem de pontos de máximo. Uma afirmativa que se sugere aqui, e que pode ser investigada, é que o aumento do número de níveis dos três fatores pouco resolve, se isso não resultar em uma distribuição adequada de pontos na região experimental.

A possível influência da interação entre os fatores nos resultados, foi referida na introdução deste trabalho como um ponto a ser investigado. Isso pode ser feito, analisando-se os resultados da Tabela 1 correspondentes a cada par de modelos de resposta, entre os pares (2,3), (4, 5), (6,7), (9, 10), (11,12), (13, 14), (16,17), (18, 19) e (20, 21), onde o primeiro elemento do par indica o número do modelo sem interação e o segundo elemento indica o número do modelo com interação.

TABELA 1 - Porcentagens de pontos de máximo de superfície polinomial quadrática, ocorridos em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

MODELO	DELINEAMENTO (PORCENTAGEM DE PONTOS DE MÁXIMO)									
1	FIE(97,90)	FN(94,40)	W(92,70)	Y(88,80)	DCN(84,90)	BO(71,40)	CC(64,20)	DCO(61,90)	BN(39,80)	
2	FIE(60,10)	FN(56,90)	Y(49,80)	W(47,80)	DCN(44,00)	BO(41,80)	CC(39,50)	DCO(34,40)	BN(28,40)	
3	FIE(61,20)	FN(56,20)	W(52,20)	Y(49,40)	DCN(43,10)	BO(40,50)	CC(33,30)	DCO(33,00)	BN(29,70)	
4	FIE(81,10)	FN(76,00)	DCN(70,90)	W(70,70)	Y(69,20)	BO(59,00)	CC(55,30)	DCO(51,40)	BN(38,20)	
5	FIE(80,70)	FN(78,90)	W(69,70)	Y(68,30)	DCN(67,00)	BO(54,30)	CC(51,80)	DCO(49,80)	BN(36,50)	
6	FIE(77,70)	FN(75,10)	W(69,20)	Y(67,80)	DCN(66,10)	BO(55,80)	CC(51,50)	DCO(46,20)	BN(37,20)	
7	FIE(81,20)	FN(78,90)	W(68,90)	Y(64,00)	DCN(60,80)	BO(56,40)	CC(51,80)	DCO(49,80)	BN(34,80)	
8	FIE(75,10)	FN(68,20)	W(60,10)	Y(56,00)	DCN(48,50)	BO(42,20)	CC(34,30)	DCO(31,20)	BN(28,50)	
9	FIE(57,30)	FN(55,10)	W(47,10)	Y(43,70)	DCN(39,00)	BO(32,30)	CC(30,40)	DCO(27,40)	BN(27,00)	
10	FIE(58,80)	FN(56,20)	Y(45,00)	W(44,20)	DCN(36,50)	BO(31,90)	CC(28,70)	DCO(27,00)	BN(26,00)	
11	FIE(69,00)	FN(65,90)	W(53,00)	Y(51,70)	DCN(44,10)	BO(37,00)	CC(32,70)	DCO(30,50)	BN(25,10)	
12	FIE(68,80)	FN(61,90)	W(50,40)	Y(48,50)	DCN(44,30)	BO(34,50)	CC(32,70)	DCO(29,80)	BN(26,90)	
13	FIE(69,60)	FN(64,00)	W(54,40)	Y(53,30)	DCN(44,60)	BO(36,70)	CC(33,80)	DCO(28,60)	BN(27,90)	
14	FIE(66,30)	FN(58,70)	W(54,00)	Y(50,10)	DCN(42,00)	BO(37,30)	CC(32,50)	BN(29,20)	DCO(26,90)	
15	FIE(100,00)	FN(99,90)	W(99,90)	DCN(99,80)	Y(99,70)	CC(97,70)	BO(97,60)	DCO(95,30)	BN(66,50)	
16	FIE(61,30)	FN(57,20)	W(52,80)	Y(49,80)	DCN(45,10)	BO(39,90)	CC(36,90)	DCO(35,00)	BN(31,00)	
17	FIE(65,30)	FN(62,50)	Y(52,20)	W(49,40)	DCN(48,90)	BO(43,40)	CC(36,90)	DCO(36,80)	BN(34,30)	
18	FIE(79,90)	FN(78,60)	W(76,30)	Y(71,80)	DCN(69,60)	BO(66,90)	CC(63,20)	DCO(60,40)	BN(49,10)	
19	FIE(84,40)	FN(82,40)	Y(81,50)	DCN(79,80)	W(79,10)	BO(66,90)	CC(61,60)	DCO(60,70)	BN(51,70)	
20	FIE(80,00)	FN(78,70)	Y(75,30)	W(73,90)	DCN(68,50)	BO(66,10)	CC(64,20)	DCO(58,20)	BN(44,80)	
21	FIE(85,00)	FN(81,40)	W(78,70)	DCN(78,00)	Y(77,50)	BO(65,00)	CC(60,10)	DCO(58,50)	BN(48,80)	

Pode-se notar que para cada um desses pares, as alterações na ordem de preferência (pela maior porcentagem de máximos) são poucas. Há pares, por exemplo (6, 7) e (11, 12) que não exibiram alterações na ordem de preferência dos delineamentos. Os pares que apresentaram alterações na ordem de preferência foram os seguintes:

- (2, 3): alterações entre W e Y
- (4, 5): alterações entre W, Y e DCN
- (9, 10): alterações entre W e Y
- (13, 14): alterações entre DCO e BN
- (16, 17): alterações entre W e Y
- (18, 19): alterações entre W, Y e DCN
- (20, 21): alterações entre W, Y e DCN

Conforme se pode ver pela Tabela 1, essas poucas alterações ocorreram por pequenas diferenças de porcentagens. Sendo assim, essas diferenças na ordem de preferência podem ser simplesmente explicadas por variações casuais e não seriam, então, consequência da existência ou não da interação entre os fatores.

5.2. Porcentagens de pontos de sela

A Tabela 2 apresenta as porcentagens de pontos de sela em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento. A finalidade desta tabela é completar as informações sobre a natureza dos pontos críticos das funções de produção estimadas $\hat{\eta}$ nos 189000 ensaios gerados, bem como auxiliar na construção de outras tabelas. Para que essas informações fiquem completas, é necessário salientar que não ocorreram interminações nos 189000 ensaios gerados. Sendo assim, as diferenças entre os 100 por cento e as somas dos totais de porcentagens das Tabelas 1 e 2 para cada modelo e delineamento, correspondem às porcentagens de pontos de mínimo em 1000 ensaios.

Conforme se pode deduzir, foram baixas as porcentagens de mínimo. O delineamento que mais produziu pontos de mínimo, ainda que poucos, foi o delineamento de Box com 15 pontos e $\alpha = 2$.

TABELA 2 - Porcentagens de pontos de sela de superfície polinomial quadrática, ocorridos em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

MODELO	DELINEAMENTO (PORCENTAGEM DE PONTOS DE SELA)									
1	BN(58,20)	DCO(38,10)	CC(35,80)	BO(28,60)	DCN(15,10)	Y(11,20)	W(7,30)	FN(5,60)	FIE(2,10)	
2	BN(71,00)	DCO(65,60)	CC(60,50)	BO(58,20)	DCN(56,00)	W(52,20)	Y(50,20)	FN(43,10)	FIE(39,90)	
3	BN(69,40)	DCO(67,00)	CC(66,70)	BO(59,50)	DCN(56,90)	Y(50,60)	W(47,80)	FN(43,80)	FIE(38,80)	
4	BN(60,60)	DCO(48,60)	CC(44,70)	BO(41,00)	Y(30,80)	W(29,30)	DCN(29,10)	FN(24,00)	FIE(18,90)	
5	BN(61,80)	DCO(50,20)	CC(48,20)	BO(45,70)	DCN(33,00)	Y(31,70)	W(30,30)	FN(21,10)	FIE(19,30)	
6	BN(61,80)	DCO(53,80)	CC(48,50)	BO(44,20)	DCN(33,90)	Y(32,20)	W(30,80)	FN(24,90)	FIE(22,30)	
7	BN(63,40)	DCO(50,20)	CC(48,20)	BO(43,60)	DCN(39,20)	Y(35,20)	W(31,10)	FN(21,10)	FIE(18,80)	
8	DCO(68,80)	BN(66,00)	CC(65,70)	BO(57,70)	DCN(51,50)	Y(44,00)	W(39,90)	FN(31,80)	FIE(24,90)	
9	DCO(72,60)	CC(69,40)	BN(68,90)	BO(67,40)	DCN(61,00)	Y(56,20)	W(52,90)	FN(44,90)	FIE(42,70)	
10	DCO(72,90)	CC(71,30)	BN(69,50)	BO(68,10)	DCN(63,50)	W(55,80)	Y(55,00)	FN(43,80)	FIE(41,20)	
11	BN(70,00)	DCO(69,50)	CC(67,20)	BO(63,00)	DCN(55,90)	Y(48,30)	W(46,90)	FN(34,10)	FIE(31,00)	
12	DCO(70,10)	BN(68,10)	CC(67,30)	BO(65,40)	DCN(55,70)	Y(51,50)	W(49,60)	FN(38,00)	FIE(31,20)	
13	DCO(71,40)	BN(67,20)	CC(66,00)	BO(63,20)	DCN(55,40)	Y(46,70)	W(45,50)	FN(36,00)	FIE(30,30)	
14	DCO(73,00)	BN(66,70)	CC(66,40)	BO(62,60)	DCN(58,00)	Y(49,90)	W(46,00)	FN(41,30)	FIE(33,70)	
15	BN(33,40)	DCO(4,70)	BO(2,40)	CC(2,30)	Y(0,30)	DCN(0,20)	W(0,10)	FN(0,10)	FIE(0,00)	
16	BN(69,00)	DCO(65,00)	CC(63,10)	BO(60,10)	DCN(54,90)	Y(50,20)	W(47,20)	FN(42,80)	FIE(38,70)	
17	BN(65,70)	DCO(63,20)	CC(63,10)	BO(56,60)	DCN(51,10)	W(50,60)	Y(47,80)	FN(37,50)	FIE(34,70)	
18	BN(50,70)	DCO(39,60)	CC(36,80)	BO(33,10)	DCN(30,40)	Y(28,20)	W(23,70)	FN(21,40)	FIE(20,10)	
19	BN(48,20)	DCO(39,30)	CC(38,40)	BO(33,10)	W(20,90)	DCN(20,20)	Y(18,50)	FN(17,60)	FIE(15,60)	
20	CC(55,80)	BN(55,00)	DCO(41,80)	BO(33,90)	DCN(31,50)	W(26,10)	Y(24,70)	FN(21,30)	FIE(20,00)	
21	BN(51,20)	DCO(41,50)	CC(39,90)	BO(35,00)	Y(22,50)	DCN(22,00)	W(21,30)	FN(18,60)	FIE(15,00)	

5.3. O ponto de máximo estimado

A Tabela 3 contém as porcentagens relativas de pontos de máximo $(X_1^*, X_2^*, X_3^*, \hat{Y}_M)$ da superfície de resposta $\hat{\eta}$ em algumas condições de interesse, onde X_i^* , $i = 1, 2, 3$, são as coordenadas do ponto de máximo e $\hat{Y}_M$ é o valor numérico de $\hat{\eta}$ em $X_1 = X_1^*$, $X_2 = X_2^*$ e $X_3 = X_3^*$. As condições de interesse que foram consideradas são que $|X_i^* - 4| \leq 0,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_M - 4100| \leq 0,5\sigma$, onde $\sigma = 300$. As porcentagens que constam dessa tabela são relativas aos totais de pontos de máximo, isto é, foram calculadas para cada modelo e delineamento, como o quociente entre o total de pontos de máximo obtidos nas condições de interesse e o total de pontos de máximo obtidos nos 1000 ensaios gerados.

Os resultados contidos nesta tabela refletem a proximidade entre o ponto de máximo estimado e o ponto de máximo real (4, 4, 4, 4100) da função de resposta η , para cada modelo e delineamento. Conforme se nota, as porcentagens relativas são bem pequenas, indicando que, no geral, o ponto de máximo estimado não é muito próximo do ponto de máximo real. As maiores porcentagens, ainda que pequenas, ocorreram para os modelos de números 15, 18, 19, 20 e 21. Estes modelos são aqueles que representam situações reais de maiores curvaturas.

5.4. O ponto de sela

Na Tabela 4 estão as porcentagens relativas de pontos de sela $(X_1^*, X_2^*, X_3^*, \hat{Y}_S)$ da superfície de resposta $\hat{\eta}$ tais que $|X_i^* - 4| \leq 0,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_S - 4100| \leq 0,5\sigma$, com $\sigma = 300$, onde X_i^* , $i = 1, 2, 3$ são as coordenadas do ponto de sela e $\hat{Y}_S$ é o valor numérico de $\hat{\eta}$ em $\underline{X}^* = (X_1^*, X_2^*, X_3^*)'$. Estas porcentagens foram calculadas para cada modelo e delineamento, como o quociente entre o total de pontos de sela nas condições especificadas e o total de pontos de sela obtidos nos 1000 ensaios gerados.

Como se pode observar na Tabela 4, as porcentagens relativas são excessivamente pequenas, havendo uma grande quantidade de porcentagens nulas. Isso mostra que o ponto de sela obtido na superfície de resposta $\hat{\eta}$ não é muito próximo do ponto de máximo real não encontrado.

Numa comparação com as porcentagens relativas correspondentes da Tabela 3, as porcentagens da Tabela 4 são, no geral, ainda muito

TABELA 3 - Porcentagens relativas de pontos de máximo (X_1^* , X_2^* , X_3^* , $\hat{Y}_M$), tais que $|X_i^* - 4| \leq 0,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_M - 4100| \leq 0,5\sigma$, $\sigma = 300$, ocorridos em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delinea-
mento.

MODELO	DELINEAMENTO									
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN	
1	9,60	8,36	2,24	1,25	5,06	5,28	2,02	3,23	5,41	
2	4,65	2,63	0,47	0,00	1,20	5,23	1,51	1,16	2,50	
3	2,77	4,44	1,23	0,67	2,42	3,83	1,50	2,42	3,48	
4	7,27	5,39	9,83	0,78	4,62	6,08	2,53	3,69	3,94	
5	7,31	5,19	2,02	0,54	3,51	4,16	1,15	2,00	5,07	
6	8,62	5,85	2,68	0,26	2,80	3,03	2,52	1,73	4,08	
7	8,25	4,18	1,24	0,57	3,24	4,78	2,50	2,00	3,94	
8	3,06	2,78	0,94	0,00	1,60	2,99	0,29	1,92	1,64	
9	2,61	1,45	0,30	0,37	2,28	2,12	0,32	0,72	1,02	
10	1,53	2,66	0,62	0,38	1,11	1,13	1,39	1,48	2,73	
11	3,18	2,27	0,54	0,00	1,16	1,13	1,83	0,32	1,13	
12	3,34	3,06	0,57	0,37	0,61	1,78	1,52	0,00	3,61	
13	2,87	2,18	1,36	0,71	1,31	2,38	0,88	2,09	1,79	
14	2,26	3,23	0,26	1,02	1,19	1,85	0,00	0,74	1,90	
15	32,90	26,90	9,50	2,70	18,70	21,00	8,00	8,60	20,00	
16	4,73	3,67	0,75	0,32	4,01	3,03	0,81	2,00	2,21	
17	5,66	3,68	1,61	0,29	3,06	3,84	1,89	1,35	3,47	
18	13,76	13,35	4,48	1,83	9,33	10,48	5,06	5,29	10,63	
19	13,98	11,16	5,08	1,35	10,67	11,37	5,35	3,62	11,40	
20	14,50	10,16	4,23	1,78	8,10	8,79	4,98	4,29	7,88	
21	13,05	12,40	4,76	0,61	8,38	10,67	5,49	4,61	10,64	

TABELA 4 - Porcentagens relativas de pontos de sela (X_1^* , X_2^* , X_3^* , $\hat{Y}_S$), tais que $|X_i^* - 4| \leq 0,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_S - 4100| \leq 0,5\sigma$, $\sigma = 300$, ocorridos em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delinea-
mento.

MODELO	DELINEAMENTO									
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN	
1	0,00	0,00	0,34	0,17	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
2	0,00	0,23	0,68	0,28	0,19	0,38	1,15	0,30	0,53	
3	0,25	0,00	0,00	0,28	0,59	0,41	0,29	0,44	0,00	
4	0,52	0,83	0,48	0,16	0,00	0,00	0,44	0,41	0,34	
5	0,00	0,00	0,00	0,32	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
6	0,00	0,00	0,45	0,16	0,00	0,64	1,23	0,00	0,58	
7	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,41	0,00	0,00	
8	0,00	0,00	0,17	0,15	0,00	0,25	0,00	0,58	0,00	
9	0,00	0,22	0,29	0,29	0,00	0,18	0,43	0,82	0,00	
10	0,00	0,22	0,00	0,00	0,18	0,00	0,56	0,41	0,15	
11	0,32	0,00	0,15	0,00	0,20	0,00	0,44	0,43	0,00	
12	0,00	0,26	0,00	0,00	0,00	0,00	0,29	0,00	0,00	
13	0,00	0,27	0,00	0,14	0,00	0,65	0,00	0,42	0,36	
14	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14	0,27	0,00	
15	*	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
16	0,51	0,46	0,83	0,86	0,19	0,21	1,10	1,07	0,54	
17	0,00	0,00	0,00	0,30	0,00	0,59	0,00	0,79	0,19	
18	0,49	0,00	1,51	0,98	0,35	1,26	1,63	1,26	0,98	
19	0,00	0,00	0,00	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
20	0,50	0,93	0,58	0,36	0,80	1,91	1,67	2,39	0,63	
21	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	

* Porcentagem relativa não definida porque não ocorreu ponto de sela.

menores. Este fato, sugere que não é aconselhável se utilizar o ponto de sela como substituto do ponto de máximo não encontrado. Os resultados obtidos na segunda etapa reforçam essa conclusão.

5.5. O ponto de máximo fronteira

A Tabela 5 contém as porcentagens relativas de pontos de máximo fronteira ($X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{MF}$), tais que $|X_i - 4| \leq 1,0$ e $|\hat{Y}_{MF} - 4100| \leq 0,5\sigma$ com $\sigma = 300$. Como foi dito na seção 4.4, o ponto de máximo fronteira foi calculado somente nos casos onde a superfície de resposta $\hat{\eta}$ apresentou ponto de sela. Sendo assim, as porcentagens relativas foram calculadas para cada modelo e delineamento, como o quociente entre o total de pontos de máximo fronteira nas condições dadas e o total de pontos de sela obtidos nos 1000 ensaios gerados.

Nos 189000 ensaios gerados, em todos aqueles onde ocorreu ponto de sela da superfície de resposta $\hat{\eta}$, o cálculo do ponto de máximo fronteira levou a somente 1(um) caso de indeterminação numa face da região experimental. Isto ocorreu no delineamento de Box com 15 pontos e $\alpha = 2$, em um ensaio gerado a partir do modelo de resposta número 13.

Conforme se pode observar, as porcentagens relativas da Tabela 5 não são grandes, no geral, mas são bem maiores que as porcentagens relativas correspondentes da Tabela 3. Este último fato, por si só, poderia justificar a utilização do ponto de máximo fronteira como substituto do ponto de máximo não encontrado nos casos onde $\hat{\eta}$ tem ponto de sela, se não fosse levado em consideração que a condição $|X_i - 4| \leq 1,0$, $i = 1, 2, 3$, é muito menos restritiva que $|X_i^* - 4| \leq 0,5$, $i = 1, 2, 3$, da Tabela 3. Assim, as condições menos restritivas para o ponto de máximo fronteira e as porcentagens relativas muito baixas da Tabela 3, não permitem uma conclusão definitiva sobre o ponto de máximo fronteira como substituto do ponto de máximo não encontrado. Como será visto, os resultados obtidos na segunda etapa, em condições idênticas e menos restritivas, permitirão as conclusões desejadas.

Ainda, referente à Tabela 5, é importante observar que foi tomada a quantidade 1,0 como limitante superior de $|X_i - 4|$ porque se essa quantidade fosse 0,5, todas as porcentagens seriam nulas, visto que se o ponto está na fronteira, tem-se que $|X_i - 4| = 1$ para algum i .

TABELA 5 - Porcentagens relativas de pontos de máximo fronteira ($X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{MF}$), tais que $|X_i - 4| \leq 1,0$ e $|\hat{Y}_{MF} - 4100| \leq 0,5\sigma$, $\sigma = 300$, determinados nos casos onde ocorreram pontos de sela em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

MODELO	DELINEAMENTOS									
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN	
1	38,09	37,50	10,83	1,20	25,00	15,06	6,98	3,67	8,60	
2	30,32	27,61	6,52	0,70	12,94	14,75	3,80	2,13	12,32	
3	22,68	23,74	7,22	0,86	12,25	10,66	4,04	2,53	9,84	
4	23,30	24,36	8,07	0,98	14,94	15,13	6,71	6,79	24,74	
5	27,46	29,38	12,47	1,13	19,87	21,45	8,92	7,76	18,78	
6	42,60	40,56	12,44	0,32	27,01	26,62	9,07	5,57	25,07	
7	29,78	30,80	9,40	1,10	16,76	22,82	5,39	5,97	17,85	
8	28,91	30,50	8,14	0,00	11,36	12,78	2,58	2,32	11,65	
9	19,43	22,49	5,93	0,00	8,89	12,28	2,59	1,65	11,47	
10	23,78	20,77	4,69	0,43	8,54	9,31	2,52	1,78	8,81	
11	28,38	30,20	5,23	1,00	11,18	12,15	2,97	2,58	15,20	
12	25,64	28,42	8,71	0,14	12,62	16,53	3,41	0,28	13,10	
13	28,38	23,88	5,06	0,89	11,34	14,50	3,33	2,52	8,84	
14	24,62	25,42	5,91	0,44	13,02	11,73	2,25	2,60	10,86	
15	*	0,00	16,66	0,89	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	
16	28,68	28,50	8,31	0,86	16,33	15,67	5,38	3,23	13,66	
17	23,34	22,66	7,24	0,60	17,15	12,64	4,12	3,63	12,13	
18	49,75	54,20	22,35	1,97	46,09	43,03	16,84	13,38	39,47	
19	24,35	28,40	10,87	2,48	20,54	17,70	11,19	9,41	20,79	
20	49,00	46,94	25,36	2,90	43,31	44,06	46,05	9,80	39,36	
21	22,00	27,41	11,42	2,14	25,33	19,71	8,52	10,12	25,90	

* Porcentagem relativa não definida porque não ocorreu ponto de sela.

5.6. O ponto de máximo experimental

Na Tabela 6 estão as porcentagens relativas de pontos de máximo experimentais ($X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{ME}$) nas condições $|X_i - 4| \leq 1,0, i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_{ME} - 4100| \leq 0,5\sigma$, com $\sigma = 300$. Como foi dito na seção 4.4, o ponto de máximo experimental foi calculado somente nos ensaios onde $\hat{\eta}$ apresentou ponto de sela. Portanto, as porcentagens relativas foram calculadas para cada modelo e delineamento, como o quociente entre o total de pontos de máximo experimentais nas condições especificadas e o total de pontos de sela obtidos nos 1000 ensaios gerados.

Como se pode ver na Tabela 6, as porcentagens relativas são também pequenas e, no geral, pode-se dizer que são ligeiramente maiores que as porcentagens relativas correspondentes da Tabela 3. Deve-se notar, contudo, que aqui, tal como na Tabela 5, a condição sobre $X_i, i = 1, 2, 3$, é também muito menos restritiva do que a condição correspondente da Tabela 3. Os resultados obtidos na segunda etapa permitirão uma melhor avaliação do ponto de máximo experimental como substituto do ponto de máximo não encontrado.

Tal como na Tabela 5, aqui na Tabela 6, o limitante superior de $|X_i - 4|$ foi tomado como 1,0 ao invés de 0,5. Isso foi feito porque se fosse 0,5, todas as porcentagens nas duas primeiras colunas seriam nulas, visto que para os dois delineamentos 3^3 tem-se, necessariamente, $|X_i - 4| > 0,5, \forall i$

5.7. Discussões finais

Com o objetivo de se obter uma melhor avaliação das propriedades do ponto de sela, do ponto de máximo fronteira e do ponto de máximo experimental, como substitutos do ponto de máximo de $\hat{\eta}$ não encontrado, foram tomados três modelos de resposta e simulados mais 27000 ensaios, sendo 1000 para cada modelo e delineamento. Os modelos de resposta utilizados foram os modelos 6, 14 e 18, sendo um para cada condição, isto é,

$$\sum_{i=1}^3 \lambda_i = -150 \text{ (média curvatura),}$$

$$\sum_{i=1}^3 \lambda_i = -90 \text{ (pequena curvatura), e}$$

TABELA 6 - Porcentagens relativas de pontos de máximo experimentais ($X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{ME}$), tais que $|X_1 - 4| \leq 1,0$ e $|\hat{Y}_{ME} - 4100| \leq 0,5\sigma$, $\sigma = 300$, determinados nos casos onde ocorreram ponto de sela em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

MODELO	DELINEAMENTO									
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN	
1	4,76	7,14	21,67	10,13	16,07	21,91	8,93	4,46	7,28	
2	4,76	14,61	11,16	8,30	6,57	8,81	5,61	4,42	4,28	
3	6,18	13,92	10,25	5,61	6,71	4,18	1,94	0,74	0,70	
4	7,93	20,00	16,58	10,89	12,33	13,65	7,15	5,14	8,24	
5	11,91	25,59	17,94	9,54	10,09	12,87	3,73	1,79	2,72	
6	6,27	20,88	15,15	9,22	10,55	10,38	8,24	4,08	7,66	
7	8,51	23,22	14,90	7,88	10,79	9,96	4,77	1,59	4,59	
8	4,01	13,83	7,79	5,60	4,77	5,01	1,97	1,16	1,74	
9	2,10	5,56	5,48	3,19	3,73	3,40	1,87	0,55	1,31	
10	3,15	7,53	5,72	3,45	3,45	3,58	0,98	0,27	1,57	
11	4,51	12,60	9,20	5,42	5,17	4,69	2,23	1,15	1,78	
12	2,88	12,89	9,63	3,23	3,49	4,43	1,78	0,42	0,71	
13	3,30	4,72	9,33	3,86	4,92	4,39	2,12	1,40	2,16	
14	5,63	13,31	8,14	2,54	4,80	4,34	0,60	0,82	0,86	
15	*	0,00	16,66	20,05	66,66	0,00	13,04	14,89	50,00	
16	10,59	17,99	19,30	11,73	12,35	10,16	9,03	6,76	10,56	
17	8,93	15,73	13,07	9,74	10,87	7,90	4,27	1,42	3,71	
18	17,91	21,49	23,26	18,54	21,63	23,20	19,29	15,15	21,05	
19	21,79	34,09	32,32	18,46	21,62	21,05	11,71	4,58	7,42	
20	14,50	21,59	25,07	17,27	20,24	24,90	46,05	12,67	16,82	
21	22,00	34,94	27,42	21,09	19,55	18,77	9,27	4,09	5,90	

* Porcentagem relativa não definida porque não ocorreu ponto de sela.

TABELA 7 - Porcentagens de pontos de máximo de superfície polinomial quadrática, ocorridos em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

MODELO	DELINEAMENTO								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	79,10	75,60	54,80	35,70	66,70	71,20	52,50	49,60	64,00
14	68,80	62,60	36,00	27,70	47,50	53,70	30,70	30,40	43,00
18	81,20	80,40	65,50	49,80	72,90	74,30	64,40	66,00	72,80

TABELA 8 - Porcentagens de pontos de sela de superfície polinomial quadrática, ocorridos em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

MODELO	DELINEAMENTO								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	20,90	24,40	45,20	63,30	33,30	28,80	47,50	50,40	36,00
14	31,20	37,40	64,00	68,80	52,50	46,30	69,10	69,40	57,00
18	18,80	19,60	34,50	50,10	27,10	25,70	35,60	34,00	27,20

TABELA 9 - Porcentagens relativas de pontos de máximo (X_1^* , X_2^* , X_3^* , $\hat{Y}_M$), tais que $|X_i - 4| \leq 1,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_M - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$, ocorridos em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e deli neamento.

MODELO	DELINEAMENTO								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	61,94	75,60	41,78	42,01	50,07	49,71	40,76	39,91	46,25
14	54,94	53,51	39,44	32,85	47,57	45,06	37,45	42,76	39,06
18	68,10	72,26	54,19	37,75	61,04	61,37	44,40	44,69	63,46

TABELA 10 - Porcentagens relativas de pontos de sela (X_1^* , X_2^* , X_3^* , $\hat{Y}_S$), tais que $|X_i - 4| \leq 1,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_S - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$, ocorridos em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e deli neamento.

MODELO	DELINEAMENTO								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	4,78	11,06	9,29	10,26	7,80	6,59	12,00	14,48	10,83
14	2,56	1,87	5,62	8,13	2,47	2,59	2,02	7,20	2,28
18	9,57	15,30	18,55	15,96	8,11	9,72	17,97	17,94	9,55

TABELA 11 - Porcentagens relativas de pontos de máximo fronteira ($X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{MF}$), tais que $|X_i - 4| \leq 1,5$ e $|\hat{Y}_{MF} - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$, determinados nos casos onde ocorreram pontos de sela em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

MODELO	DELINEAMENTO								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	81,81	70,49	46,23	7,58	64,86	64,93	31,57	30,35	71,66
14	61,53	61,22	35,31	4,65	51,04	54,85	23,87	16,85	66,14
18	86,17	80,61	59,13	12,37	85,60	82,49	50,84	45,58	84,55

TABELA 12 - Porcentagens relativas de pontos de máximo experimentais ($X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{ME}$), tais que $|X_i - 4| \leq 1,5$ e $|\hat{Y}_{ME} - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$, determinados nos casos onde ocorreram pontos de sela em 1000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

MODELO	DELINEAMENTO								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	77,99	37,70	73,00	58,60	61,86	64,58	66,31	56,34	61,38
14	70,83	32,62	67,81	41,71	49,71	54,85	54,70	36,02	45,08
18	78,72	47,44	69,85	60,07	78,22	79,76	66,29	56,76	64,70

$$\sum_{i=1}^3 \lambda_i = -255 \text{ (grande curvatura),}$$

respectivamente. Como se pode ver pela Tabela 1, esses três modelos apresentam porcentagens de máximo nem muito altas e nem muito baixas, entre os 21 modelos de resposta considerados.

As Tabelas 7 e 8 contêm, respectivamente, as porcentagens de pontos de máximo e de pontos de sela em 1000 ensaios simulados, para cada modelo e delineamento. Como não ocorreram indeterminações, a porcentagem de pontos de mínimo para cada modelo e delineamento pode ser obtida como a diferença entre 100 e a soma dos totais correspondentes das Tabelas 7 e 8. Os delineamentos que apresentaram pontos de mínimo foram os seguintes: BN (1,00) para o modelo 6, BN (3,50), CC (0,20) e DCO (0,20) para o modelo 14 e BN (0,10) para o modelo 18. Como se vê pelas porcentagens indicadas entre parênteses, foram poucas as ocorrências de pontos de mínimo.

Conforme se pode notar, as maiores porcentagens de mínimo, ainda que pequenas, ocorreram para o modelo 14 que representa a situação onde $\sum \lambda_i$ é menor. Esse resultado não é surpreendente, pois, em termos comparativos, a situação onde

$$\sum_{i=1}^3 \lambda_i = -90$$

tem muito maior probabilidade de produzir inversões de concavidade do que as outras duas situações.

As condições de interesse, sob as quais foram obtidas as porcentagens relativas de pontos de máximo, pontos de sela, pontos de máximo fronteira e pontos de máximo experimentais da superfície de resposta $\hat{\eta}$, nas Tabelas 9, 10, 11 e 12, respectivamente, foram alteradas em relação às condições das Tabelas 3, 4, 5 e 6, tornando-se menos restritivas. Isso foi feito para proporcionar porcentagens relativas maiores e com isso fazer-se as comparações desejadas. O cálculo das porcentagens relativas das Tabelas 9, 10, 11 e 12, foi feito do mesmo modo que nas Tabelas 3, 4, 5 e 6, respectivamente, considerando-se, é claro, as novas condições de interesse.

A Tabela 9 contém as porcentagens relativas de pontos de máximo $(X_1^*, X_2^*, X_3^*, \hat{Y}_M)$, tais que $|X_i^* - 4| \leq 1,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_M - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$. Nota-se pelos resultados que, realmente, a estimativa do

ponto de máximo não é muito próxima do ponto de máximo real. Essa falta de proximidade é mais acentuada numa situação real de pequena curvatura, como se pode observar pelas porcentagens menores do modelo 14, em relação aos outros dois, em praticamente todos os delineamentos.

Numa comparação dos delineamentos quanto às porcentagens relativas da Tabela 9 para os três modelos considerados, a preferência fica para os dois delineamentos fatoriais 3^3 , com uma ligeira preferência para o delineamento fatorial 3^3 com níveis do tipo 0, q e 3q. Em seguida, numa ordem decrescente de preferência, podem ser colocados os delineamentos Y e W em condições praticamente iguais, vindo depois nessa ordem, os delineamentos DCN, BO, depois CC e DCO em condições praticamente iguais e finalmente o delineamento BN.

A avaliação das propriedades do ponto de sela, ponto de máximo fronteira e do ponto de máximo experimental como substitutos do ponto de máximo não encontrado para $\hat{\eta}$, será feita pela comparação das porcentagens relativas das Tabelas 10, 11 e 12 com as porcentagens relativas correspondentes da Tabela 9. Assim, qualquer uma das três soluções alternativas que venha a ser recomendada, deverá ter porcentagens no mínimo bem próximas das porcentagens relativas correspondentes da Tabela 9.

A Tabela 10 contém as porcentagens relativas de pontos de sela $(X_1^*, X_2^*, X_3^*, \hat{Y}_S)$, tais que $|X_i^* - 4| \leq 1,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_S - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$. Conforme se observa nessa tabela, as porcentagens relativas de pontos de sela são ainda muito pequenas, mostrando que o ponto de sela é, no geral, muito afastado do ponto de máximo real. Em termos comparativos, estas porcentagens relativas são bem menores que as porcentagens relativas da Tabela 9, o que reforça a conclusão já obtida de que o ponto de sela não é um bom substituto para o ponto de máximo de $\hat{\eta}$ não encontrado.

Na Tabela 11 estão as porcentagens relativas de pontos de máximo fronteira $(X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{MF})$, tais que $|X_i - 4| \leq 1,5$ e $|\hat{Y}_{MF} - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$. Para o modelo 14, as porcentagens desta tabela são maiores que as porcentagens correspondentes na Tabela 9, para os delineamentos FIE, FN, Y, W e DCN, e são bem menores para os delineamentos CC, DCO, principalmente para o BN. Para o delineamento BO também é menor, mas difere pouco. Para o modelo 6, as porcentagens desta tabela são maiores que as porcentagens correspondentes da Tabela 9 para os delineamentos FIE,

BO, Y, W e DCN, não muito menores para os delineamentos FN, CC e DCO e bem menor para o delineamento BN. Numa situação real de grande curvatura, como é o caso do modelo 18, todas as porcentagens desta tabela são maiores que as correspondentes da Tabela 9 para todos os delineamentos, com exceção apenas do delineamento BN onde a porcentagem é bem menor.

Esta análise simples mostrou que para os delineamentos FIE, Y, W e DCN, o ponto de máximo fronteira pode ser utilizado como substituto do ponto de máximo não encontrado, em situações de pequenas, médias ou grandes curvaturas. Para esses delineamentos, devido às maiores porcentagens obtidas na Tabela 11, o ponto de máximo fronteira tem maior probabilidade de estar mais próximo do ponto de máximo real do que o próprio ponto de máximo estimado (nos casos onde é encontrado). Para os delineamentos FN, BO, CC e DCO, a utilização do ponto de máximo fronteira, de modo satisfatório, dependerá do fato de se estar numa situação de grande curvatura. Este resultado é uma indicação de que em presença de situações reais de grande curvatura, o ponto de máximo fronteira pode ser utilizado como solução alternativa para o máximo não encontrado para um número bem maior de delineamentos. Para o delineamento BN, os resultados obtidos não permitem a recomendação do ponto de máximo fronteira como solução alternativa para o ponto de máximo não encontrado, em vista das pequenas porcentagens obtidas na Tabela 11.

A Tabela 12 contém as porcentagens relativas de pontos de máximo experimentais ($X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{ME}$), tais que $|X_1 - 4| \leq 1,5$ e $|\hat{Y}_{ME} - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$. Para os modelos 6 e 18, as porcentagens desta tabela são maiores que as porcentagens correspondentes da Tabela 9, para os delineamentos FIE, BO, BN, Y, W, CC, DCO e DCN, e bem menores para o delineamento FN. Para o modelo 14, as porcentagens desta tabela são maiores para os delineamentos FIE, BO, BN, Y, W, CC e DCN, pouco menor para o DCO e bem menor para o FN. Um pouco surpreendente foi o delineamento FN apresentar porcentagens relativas tão baixas em comparação com o delineamento FIE. Quanto aos delineamentos com 7 e 9 níveis, espera-se porcentagens bem maiores do que aquelas obtidas, exatamente pelo grande número de níveis que apresentam. Este fato pode estar mais uma vez sugerindo a afirmativa de que um grande número de níveis pouco resolve se isso não resultar em uma distribuição adequada de pontos na região experimental.

Esta análise pelos modelos utilizados mostrou que o ponto

de máximo experimental pode ser utilizado como substituto do ponto de máximo de $\hat{\eta}$ não encontrado, para os delineamentos FIE, BO, BN, Y, W, CC e DCN. Para o DCO, a utilização dessa solução alternativa, dependerá de se estar numa situação real de média ou grande curvatura. Esse fato, permite a conclusão que o ponto de máximo experimental pode ser utilizado como uma solução alternativa para o ponto de máximo não encontrado, para um número maior de delineamentos, sempre que se estiver em situações reais de grandes curvaturas. Para o delineamento FN, os resultados obtidos não recomendam a substituição do ponto de máximo não encontrado pelo ponto de máximo experimental.

Ao final destas discussões, vale ressaltar dois resultados interessantes, sendo o primeiro deles referente às propriedades do delineamento fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados. Nas condições em que foram estudados todos os delineamentos, o FIE foi o melhor quanto à capacidade de reproduzir máximos, foi um dos dois melhores quanto à proximidade do ponto de máximo estimado do ponto de máximo real e ainda apresentou, na maioria das situações, as maiores porcentagens nas Tabelas 11 e 12. Esses resultados colocam o delineamento fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados numa posição de destaque no confronto com os outros delineamentos estudados.

O segundo resultado interessante é que as análises dos resultados obtidos indicaram duas soluções alternativas para o ponto de máximo de $\hat{\eta}$ não encontrado que, juntas, resolvem o problema para todos os delineamentos estudados. O Quadro 5.7.1 é um resumo das comparações das Tabelas 11 e 12 com a Tabela 9 e dá uma visão geral dos delineamentos estudados quanto às duas soluções alternativas que podem ser utilizadas.

QUADRO 5.7.1 - Delineamentos e as soluções alternativas.

SOLUÇÃO ALTERNATIVA	DELINEAMENTO								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
Máx. fronteira	*	+	+	o	*	*	-	-	*
Máx. experimental	*	o	*	*	*	*	*	+	*

Para cada delineamento, a indicação com (*) significa que a solução alternativa correspondente pode ser utilizada satisfatoriamente

nas três situações (modelos de resposta) estudadas. A indicação com (+) significa que a solução alternativa correspondente pode ser utilizada satisfatoriamente em duas das situações estudadas e a indicação com (-) significa que pode ser utilizada somente em uma situação, no caso, aquela de grande curvatura. A indicação com (o) significa que não pode ser utilizada.

6. CONCLUSÕES

Os nove delineamentos utilizados nesta pesquisa, foram os seguintes: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, fatorial 3^3 com níveis do tipo 0, q e 3q, q > 0, Box com 15 pontos e $\alpha = 1,215$, Box com 15 pontos e $\alpha = 2$, $(1/5)5^3$ tipo Y (ou tipo I, III, IV), $(1/5)5^3$ tipo W, composto central com duas estrelas, duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1,51$ e duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1$. Para todos esses delineamentos, os resultados obtidos indicaram uma elevada porcentagem de falsos pontos de sela na maioria das situações reais criadas para a simulação de dados.

Nas situações reais em que os modelos de resposta utilizados para simulação exibiam pequenas curvaturas, foram observadas porcentagens de pontos de sela superiores a 50% em mais da metade dos delineamentos utilizados. Para modelos de resposta com maiores curvaturas foram obtidas, como era esperado, menores porcentagens de pontos de sela. No entanto, apesar dessa diminuição, tem-se ainda essas porcentagens variando desde zero até quase 70%, dependendo do delineamento e da situação real que se tem para o modelo de resposta. Estes fatos aumentam a importância de se buscar uma solução alternativa satisfatória diante da ocorrência de ponto de sela, num problema prático onde se espera ponto de máximo.

No que se refere aos objetivos propostos e considerando-se as hipóteses sob as quais o trabalho foi desenvolvido, os resultados obtidos levaram às seguintes conclusões:

1ª) O ponto de sela não é um bom substituto do ponto de máximo não encontrado, pois, em todas as situações estudadas e para todos os

nove delineamentos, esse ponto se mostrou sempre bem afastado do ponto de máximo real. Em termos comparativos, mostrou-se, no geral, muito mais afastado do ponto de máximo real do que o ponto de máximo estimado (nos casos onde é encontrado). Em vista disso, não se recomenda a sua utilização como uma estimativa do ponto de máximo real.

2ª) O ponto de máximo fronteira mostrou-se um bom substituto do ponto de máximo não encontrado, para quatro dos delineamentos utilizados, quais sejam: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, $(1/5)5^3$ tipo Y, $(1/5)5^3$ tipo W e duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1$. Para esses delineamentos, mostrou-se, no geral, com maior proximidade do ponto de máximo real do que o próprio ponto de máximo estimado (nos casos onde é encontrado). Assim, nesses delineamentos recomenda-se a sua utilização como uma solução alternativa para o ponto de máximo não encontrado. Para situações reais de máximo e de grande sensibilidade da resposta (função de resposta verdadeira com grande curvatura) o ponto de máximo fronteira pode também ser utilizado como solução alternativa satisfatória para o ponto de máximo não encontrado, para os delineamentos de Box com 15 pontos e $\alpha = 1,215$, composto central com duas estrelas e duplo central composto com $\alpha = 1,51$.

3ª) O ponto de máximo experimental mostrou-se um bom substituto para o ponto de máximo não encontrado para seis dos delineamentos utilizados, quais sejam: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, Box com 15 pontos e $\alpha = 1,215$, Box com 15 pontos e $\alpha = 2$, $(1/5)5^3$ tipo Y, $(1/5)5^3$ tipo W e composto central com duas estrelas. Para esses delineamentos os resultados indicaram que o ponto de máximo experimental exhibe, no geral, uma proximidade do máximo real, ligeiramente maior do que o próprio ponto de máximo estimado (nos casos onde é encontrado). Quando se tem situações reais de grande sensibilidade da resposta, esta solução alternativa também pode ser utilizada, de modo satisfatório, para o delineamento duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1,51$.

4ª) Para cada um dos nove delineamentos estudados, tem-se pelo menos uma das duas soluções alternativas para o problema do ponto de sela que são o ponto de máximo fronteira e o ponto de máximo experimental. Nos delineamentos onde se tem as duas soluções alternativas, há uma tendência de superioridade (maior proximidade do ponto de máximo real) do ponto de máximo fronteira sobre o ponto de máximo experimental, à medida

que se tem situações reais de maior sensibilidade da resposta.

5ª) Na comparação de todos os nove delineamentos entre si, o fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados foi o que apresentou maior eficiência na obtenção de pontos de máximo, isto é, maiores porcentagens de pontos de máximo para situações reais de máximo. A classificação conjunta na ordem decrescente de preferência, quanto à eficiência na obtenção de pontos de máximo, foi a seguinte: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, fatorial 3^3 com níveis do tipo 0, q e 3q, q > 0, $(1/5)5^3$ tipo W, $(1/5)5^3$ tipo Y, duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1$, Box com 15 pontos e $\alpha = 1,215$, composto central com duas estrelas, duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1,51$ e Box com 15 pontos e $\alpha = 2$.

6ª) O aumento do número de níveis não é causa que, por si só, pode determinar uma maior eficiência na obtenção de pontos de máximo. Isso pode ser visto pela classificação conjunta dos nove delineamentos estudados, onde o delineamento 3^3 com níveis igualmente espaçados é melhor que vários delineamentos de maior número de níveis, especialmente aqueles com 7 e 9 níveis que são o composto central com duas estrelas e o duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1,51$.

7ª) A presença de interação entre os fatores não apresentou alteração na ordem de preferência dos delineamentos quanto à eficiência na obtenção de pontos de máximo.

8ª) Num ensaio de adubação com 3 fatores, onde (a) a produção vai ser estudada através da função polinomial quadrática, (b) os intervalos das doses que vão ser utilizadas estão fixados nas doses mínima e máxima, (c) sabe-se que o ponto de máximo real deve estar próximo das doses maiores e (d) quer-se obter a combinação de doses de produção máxima, então, entre os nove delineamentos estudados, o pesquisador deve escolher o delineamento fatorial 3^3 pelas seguintes razões: (i) é o delineamento para o qual se tem maior probabilidade de se obter um ponto de máximo para a função de resposta estimada $\hat{\eta}$, (ii) é um dos dois melhores quanto a proximidade do ponto de máximo estimado do ponto de máximo real e (iii) se ocorrer ponto de sela para $\hat{\eta}$, este delineamento tem, na maioria das situações estudadas, as duas soluções alternativas em melhores condições do que os outros oito delineamentos, em termos de maior proximidade com o ponto de máximo real.

7. LITERATURA CITADA

- ANDERSON, R.L. e L.A. NELSON, 1975. A family of models involving intersecting straight lines and concomitant experimental designs useful in evaluating response to fertilizer nutrients. *Biometrics*, 31:303-318.
- ARRUDA, H.V., 1959. *Contribuição para o estudo da adubação mineral do milho nas terras roxas do município de Ribeirão Preto*. Piracicaba, ESALQ/USP, 39 p. (Tese)
- BOX, G.E.P., 1958. A note on generating normal deviates. *Ann. Math. Stat.*, vol. 20.
- BOX, G.E.P. e K.B. WILSON, 1951. On the experimental attainment of optimum conditions. *Jour. Roy. Stat. Soc., B*, 13:1-45.
- CAMPOS, H., 1967. *Aspectos da aplicação das superfícies de resposta a ensaios fatoriais 3^3 de adubação*. Piracicaba, ESALQ/USP, 82 p. (Tese de Livre-Docência).
- CONAGIN, A., 1978. *Delineamentos de ensaios de adubação*. Campinas, Instituto Agrônômico. 39 p. (Circular nº 101).
- CONAGIN, A., 1982. Delineamento composto central com duas estrelas. *Pesq. Agrop. Bras.*, 17(9):1261-1269.
- CONAGIN, A. e J.P.N. JORGE, 1977. Delineamentos $(1/5)5^3$. *Bragantia*, 36: 23-58.
- CONAGIN, A. e J.P.N. JORGE, 1979. Delineamento duplo central composto com 29 pontos. *Bragantia*, 38:217-235.

- CONAGIN, A., J.P.N. JORGE e W.R. VENTURINI, 1969. Delineamentos experimentais utilizáveis na experimentação de campo. In: Reynaert, E.E. *La investigación de fertilidade de suelos para la producción agrícola en la zona templada*. Montevideo, IICA, Zona Sur. p. 183-201.
- DÁVILA, L.E.R., 1979. Algunos diseños para estudios la superficie de res^{posta} a la aplicacion de fertilizantes. In: Reunión Internacional de Biometria, Piracicaba, SP, 1975. *Anais*, p. 131-156.
- DEPIZZOLATTI, A.L.V., 1983. *Pontos críticos de superfície de resposta com raiz quadrada em função das doses de nutrientes usadas nos experimentos de adubação*. Piracicaba, ESALQ/USP, 110 p. (Tese de Doutorado).
- FUZATTO, M.G., W.R. VENTURINI e P.A. CAVALERI, 1970. *Estudo técnico econômico da adubação do algodoeiro no Estado de São Paulo*. Campinas, Instituto Agronômico. 15 p. (Projeto BNDE/ANDA/CIA nº 1).
- HILL, W.J. e W.G. HUNTER, 1966. A review of response methodology: A literature survey. *Technometrics*, 8:571-590.
- IGUE, T.; H.A.A. MASCARENHAS e S. MIYASAKA, 1971. *Estudo comparativo dos métodos de Mitscherlich e do trinômio do segundo grau, na determinação das doses mais econômicas de fertilizantes, na adubação do feijoeiro*. Campinas, Instituto Agronômico. 15 p. (Projeto BNDE/ANDA/CIA nº 4).
- JOHN, P.W.M., 1971 *Statistical design and analysis of experiments*. New York, The Macmillan Company. 355 p.
- JOHN, P.W.N. e N.R. DRAPER, 1975. D-optimality for regression designs: A review. *Technometrics*, 17:15-23.
- JORDAN, L., 1979. Some new developments on potimal designs for polinomial fitting. In: Reunión Internacional de Biometria, Piracicaba, SP, 1975. *Anais*. p. 59-77.
- JORGE, J.P.N. e A. CONAGIN, 1977. Estudos em um grupo especial de delineamentos $(1/5)^3$. *Bragantia*, 36:59-88.
- MALHEIROS, E.B. e D. PERECIN, 1983. Posição das doses de nutrientes na análise de uma superfície de resposta à adubação. *Rev. Mat. Est.*, 1:69-78.

- MEAD, R. e D.J. PIKE, 1975. A review of response surface methodology from a biometric viewpoint. *Biometrics*, 31:803-851.
- MIRANDA, L.T., 1966. Resultados de experimentos de adubação e sugestões para a interpretação baseada na análise química do solo. In: *Cultura e adubação do milho*. São Paulo, Instituto Brasileiro de Potassa. p.451-472.
- MIRANDA, L.T., 1971. *Adubação do milho. I- Relação entre dados de ensaios de campo e de análise química do solo*. Campinas, Instituto Agrônômico. 11 p. (Projeto BNDE/ANDA/CIA nº 11).
- MYERS, R.H., 1971. *Response surface methodology*. Boston, Allyn and Bacon, Inc. 246 p.
- NELDER, J.A., 1966. Inverse polynomials, a useful group of multipactor response functions. *Biometrics*, 22:128-141.
- NOGUEIRA, I.R., 1960. *Pesquisa sobre o planejamento experimental em ensaios de adubação*. Piracicaba, ESALQ/USP. 44 p. (Tese de Livre-Docência).
- PAEZ, G. e T. SILVA, 1975. *Delineamento dos experimentos de adubação*. Departamento de Processamento de Dados, EMBRAPA. 50 p. (Mimeografado).
- PERECIN, D.; E. B. MALHEIROS e D.A. BANZATTO, 1982. Tipos de delineamento $(1/5)^5$ e superfícies de respostas. *Científica*, 10:193-201.
- ROJAS, B.A., 1982. Designs of fertilizer experiments. In: Conferência Internacional de Biometria, 10, Guarujá, SP, 1979. *Anais*, p. 49-60.
- TRAMEL, T.E., 1957. A suggested procedure for agronomic-economic fertilizer experiments. In: Baum, E.L. e outros. *Economic and technical analysis of fertilizer innovations and resource use*. Ames, Iowa, State College Press. p. 168-175.
- VIEIRA, S., 1970. *Aspectos das funções de produção ajustadas aos ensaios fatoriais 3^3 de adubação*. Piracicaba, ESALQ/USP. 160 p. (Tese de Doutorado).
- VOSS, R. e J.T. PESEK, 1967. Yield of corn as affected by fertilizer rates and environmental factors. *Agronomy*, 59:567-572.

APÊNDICE

Se V_1 e V_2 são variáveis aleatórias com distribuição uniforme no intervalo $(0, 1)$, então

$$Z_1 = (-2 \log V_2)^{1/2} \cos (2\pi V_1)$$

tem distribuição normal com média 0 (zero) e variância 1 (BOX, 1958). Com isso, tem-se que

$$Y = m + \sigma Z_1$$

tem distribuição normal com média m e variância σ^2 .

A sub-rotina (em BASIC), que foi utilizada para gerar NT observações correspondentes a todos os NT tratamentos de um delineamento é a seguinte:

```

10 FOR I=1 TO NT
20 A1=VAL(RIGHT$(TIME$,2))
30 A2=VAL(MID$(TIME$,4,2))
40 B=(A1*A2/3600+V1)/2*32767
50 RANDOMIZE(B)
60 V1=RND
70 V2=RND
80 Z1=SQR(-2*LOG(V2))*COS(2*3.141592654*V1)
90 Y(I)=XB(I)+E*Z1
100 NEXT I

```

onde: NT = número de tratamentos do delineamento

Y(I) = observação simulada correspondente ao tratamento I

XB(I) = média de Y(I)

E = desvio padrão σ utilizado.