**EFICIÊNCIA DO DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL
ORTOGONAL COM 15 PONTOS EM RELAÇÃO AO
DELINEAMENTO DUPLO COMPOSTO CENTRAL
ORTOGONAL COM 29 PONTOS**

ADA CASTELLARI

Orientador: Dr. CLÓVIS POMPÍLIO DE ABREU

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

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
Junho de 1984

A Deus,

Aos meus Pais,

OFEREÇO

Ao meu esposo e nossos filhos

DEDICO

A G R A D E C I M E N T O S

Ao Dr. Clóvis Pompílio de Abreu, Professor do Departamento de Matemática e Estatística da Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", pela orientação e amizade dedicada.

Ao Dr. Cássio Roberto de Melo Godoi, Professor do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ, pela ajuda e revisão inestimáveis e pela versão do Resumo.

Ao Dr. Humberto de Campos, Coordenador do Curso de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agronômica, pelo apoio, atenção e ensinamentos durante o curso.

Aos Drs. Décio Barbin e Antonio Francisco Iemma, Professores do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ, pela amizade e estima.

Ao Corpo Docente do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ, pelos conhecimentos transmitidos.

Aos colegas do Curso de Pós-Graduação, pelo apoio, amizade e colaboração prestada.

A todos que de alguma forma colaboraram para a realização do Curso e deste trabalho.

Í N D I C E

iv.

Pág.

RESUMO	vi
SUMMARY	viii
1. INTRODUÇÃO	01
2. REVISÃO DE LITERATURA	04
3. DELINEAMENTOS DE SEGUNDA ORDEM	12
4. METODOLOGIA	18
4.1. Ortogonalização dos Delineamentos: Composto Central e Duplo Composto Central	18
4.1.1. Modelo de Segunda Ordem ..	19
4.1.2. Sistema de Equações .. Nor- mais e Estimativa dos Parâ- metros	24
4.1.3. Análise de Variância	35
4.1.4. Variâncias e Covariâncias das Estimativas dos Parâme- tros	40
4.2. Comparação entre as Variâncias ..	41
4.2.1. Eficiência do Delineamento Duplo Composto Central Or- togonal em Relação ao Deli- neamento Composto Central Ortogonal	41
4.2.2. Intervalos de Confiança ..	54
4.2.3. Variâncias e Intervalos de Confiança das Estimativas das Produções Estimadas ..	55
5. CONCLUSÕES	59
6. BIBLIOGRAFIA	61

7. APÊNDICE: EXEMPLO DE APLICAÇÃO	64
7.1. Exemplo Aplicado ao Delineamento · de 15 Pontos	66
7.2. Exemplo Aplicado ao Delineamento de 29 Pontos	69

EFICIÊNCIA DO DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL ORTOGONAL COM 15 PONTOS EM
RELAÇÃO AO DELINEAMENTO DUPLO COMPOSTO CENTRAL ORTOGONAL COM 29 PONTOS

Autora: Ada Castellari

Orientador: Dr. Clóvis Pompílio de Abreu

RESUMO

As pesquisas com fertilizantes têm sido largamente efetuadas visando ao aumento da produção por unidade de área cultivada. Tais pesquisas revelaram a importância do uso de delineamentos que possuem um número razoável de níveis e que possibilitem uma análise econômica fácil e de simples manejo.

Nos anos 50, BOX e WILSON (1951) criaram os delineamentos compostos centrais, utilizados inicialmente em pesquisas químicas e posteriormente utilizados em ensaios agrícolas e também estendidos a outros campos de pesquisa.

No presente trabalho foi comparada a eficiência do delineamento Composto Central Ortogonal, para três fatores em 5 níveis equidistantes que vão de zero a quatro, num total de 15 pontos experimentais sendo um ponto central, oito fatoriais e seis axiais e do delineamento Duplo Composto Central Ortogonal que é uma ex

tensão do primeiro, em 9 níveis equidistantes que vão de zero a oito, num total de 29 pontos experimentais sendo um ponto central, dezesseis fatoriais e doze axiais.

Na análise usou-se o modelo quadrático representado por:

$$Y_u = \beta + \sum_{i=1}^3 \beta_i X_{iu} + \sum_{i=1}^3 \beta_i X_{iu}^2 + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^3 \beta_{ij} X_{iu} X_{ju} + e_u$$

onde $u = 1, 2, \dots, n$ e $e_u \sim N(0, \sigma^2)$.

Durante o estudo foram obtidas as estimativas dos parâmetros da equação de regressão e seus respectivos intervalos de confiança e as variâncias dos parâmetros estimados foram comparadas entre os dois delineamentos concluindo-se que:

a. As variâncias das estimativas dos coeficientes do delineamento Duplo Composto Central Ortogonal foram menores quando comparadas com as do Composto Central Ortogonal (segundo critério de MYERS) (1.971).

b. O uso do delineamento Duplo Composto Central Ortogonal é mais recomendável do que o Composto Central Ortogonal pois além de possibilitar o estudo de três fatores com maior número de níveis, os coeficientes quadráticos têm variância menor quando comparadas àqueles.

c. A eficiência E entre a variância dos parâmetros estimados b 's do delineamento Duplo Composto Central Ortogonal e dos a 's do Composto Central Ortogonal, para efeitos lineares e interações é igual a 1 e para efeitos quadráticos, igual a 2,38.

THE EFFICIENCY OF THE ORTHOGONAL CENTRAL COMPOSITE WITH 15 POINTS WITH
RESPECT TO THE DOBLE ORTHOGONAL CENTRAL COMPOSITE DESIGNS WITH 29 POINTS

Author: Ada Castellari

Adviser: Dr. Clóvis Pompílio de Abreu

SUMMARY

The fertilizers researchs have been largely done in view of the yield increase by unit area. Such researches showed the importance of the use of designs having several factor levels making possible an easy economic analysis.

In the fifties, BOX and WILSON (1951) created the central composite designs, used initially in chemical research and furtherly used in agricultural experiments and other fields of application.

In the present work the efficiency of the central composite for a three 5 level factors in 15 points and the doble ortho-gonal central composite in 9 levels and 29 points are compared.

During the study the regression parameters are estiimated and the corresponding confidence intervals are calculated, concluding that:

a. The coefficient estimates have smallest variance in the double orthogonal central composite case (under MYERS criteria, 1971).

b. The use of the double orthogonal central composite design is better than the simple, one as in addition to the study of more factor levels, the coefficient estimates have smallest variances.

c. The efficiencies E between the variances are 1 for the linear and interaction terms and 2,38 for the quadratic effects.

1. INTRODUÇÃO

Em programas de pesquisa com fertilizantes, tem-se criado e desenvolvido delineamentos que, empregados em programas de adubação no estudo de macronutrientes, visam ao estudo das doses ótimas de fertilizantes que possibilitem a maximização do lucro a ser obtido. Isto porque os fertilizantes constituem insumos, tais como custo de produção e custo dos próprios fertilizantes, que encarecem, cada vez mais, os custos operacionais da produção agrícola.

No campo agronômico, principalmente em ensaios de adubação, é de interesse do pesquisador expressar os dados da produção da cultura em função da quantidade de nutrientes adicionada ao solo. A função de produção pode ser representada simbolicamente por:

$$Y = f(x_1, x_2, \dots, x_p)$$

onde: Y é a produtividade chamada função de resposta;

$x_1, x_2, \dots, x_p$ são as quantidades usadas dos nutrientes, denominadas variáveis independentes.

Os dados são geralmente provenientes de N valores de Y , correspondentes a N combinações dos níveis das doses de nutrientes.

Embora a forma matemática da função de resposta Y seja desconhecida, pode-se estudá-la em uma região específica, correspondente às combinações de interesse dos níveis das p doses ajustando as variáveis $x_1, x_2, \dots, x_p$, na qual todos os termos, até uma determinada ordem, são incluídos de modo que permitam efetuar a análise econômica, ou seja, determinar os níveis de nutrientes que conduzam a uma resposta ótima.

BOX e WILSON (1951) criaram novos delineamentos para ajustar superfícies de resposta de segunda ordem para uso em pesquisas químicas e, posteriormente, utilizados nos esquemas fatoriais 3^k dos ensaios agrícolas. Sua representação polinomial é:

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

Nas pesquisas com adubação, utilizou-se o delineamento 3^3 principalmente nas culturas com a beterraba açucareira, arroz, trigo, milho, algodão, cana-de-açúcar, feijão e amendoim, com bons resultados. Devido ao aparecimento frequente de "pontos de sela" na análise dos experimentos individuais, e mesmo de grupos de experimentos, alguns pesquisadores optaram por outros delineamentos, principalmente os do tipo BOX, ou seja, o delineamento composto central. Este delineamen

to, muito usado na experimentação industrial, pode conter $2^3 + 2(3) + n$ pontos, onde têm-se os níveis codificados (-1) e $(+1)$ para três fatores, dois pontos axiais nas distâncias $(-\alpha)$ e $(+\alpha)$ para cada fator e um ponto central 000 que pode ser repetido n_1 vezes para possibilitar a avaliação do erro experimental e a adequação do modelo.

Com o α convenientemente escolhido, pode-se obter o delineamento Composto Central Ortogonal, que facilita a obtenção das estimativas dos coeficientes lineares, quadráticos e interações, segundo MYERS (1971).

CONAGIN et alii (1969) propuseram uma extensão do delineamento composto central que chamaram de delineamento Duplo Composto Central visando obter melhor estimativa da curvatura da função de resposta.

No presente trabalho, estudar-se-á o delineamento Composto Central representado por $2^3 + 2(3) + 1 = 15$ combinações de tratamentos e o delineamento Duplo Composto Central representado por $2^3 + 2^3 + 2(3) + 2(3) + 1 = 29$ combinações de tratamentos.

Serão determinadas as estimativas dos parâmetros da equação de regressão e seus respectivos intervalos de confiança. Serão também, obtidas as variâncias das estimativas dos parâmetros e comparadas entre os dois delineamentos. Além disso, serão determinadas as variâncias e intervalos de confiança das estimativas das produções estimadas.

2. REVISÃO DE LITERATURA

A metodologia de superfície de resposta teve grande difusão e desenvolvimento a partir de BOX e WILSON (1951), quando os autores discutiram delineamentos, com o objetivo de determinar o ponto de resposta máxima, usando o menor número de observações possíveis. Compararam alguns delineamentos experimentais e introduziram, pela primeira vez, o conceito de delineamentos compostos, os quais foram inicialmente utilizados na indústria, onde o erro experimental é geralmente menor. Atualmente são utilizados na agricultura, pois permitem o estudo de diversos níveis de nutrientes, com o uso de um número relativamente pequeno de parcelas.

CAMPOS (1967) apresentou um trabalho aplicando a regressão polinomial ajustada a dados de ensaios fatoriais 3^3 de adubação NPK, em milho, usando o modelo polinomial:

$$\begin{aligned}
 Y = & a_0 + a_{11} X_1^2 + a_{22} X_2^2 + a_{33} X_3^2 + a_{12} X_1 X_2 + a_{13} X_1 X_3 + a_{23} X_2 X_3 + \\
 & + a_{14} X_1 + a_{24} X_2 + a_{34} X_3 + \xi
 \end{aligned}$$

Em seu estudo o autor determinou as estimativas dos parâmetros da equação e seus respectivos intervalos de confiança, os níveis ótimos de N, P e K, as estimativas e os intervalos de confiança das produções e estudou a natureza do ponto crítico para verificar se era de máximo, mínimo ou ponto de sela.

O autor fez a seguir um estudo de cortes da superfície, fixando dois nutrientes, nas suas doses padrão, obtendo, em cada um dos cortes, a fórmula para cálculo da dose ótima, assim como as variâncias e intervalos de confiança, numa forma aproximada dessas doses.

Durante o estudo dos delineamentos: rotativo de BOX e o fatorial 3^3 , chegou à conclusão de que o segundo é tão preciso quanto o primeiro.

Após o estudo teórico, o autor fez uma aplicação prática, concluindo, entre outras, que a aplicação da regressão polinomial aos ensaios fatoriais 3^3 de adubação é recomendada apenas a grupos de ensaios e de boa precisão.

VIEIRA (1970) estudou quatro funções de produção aplicadas aos ensaios fatoriais 3^3 de NPK em milho, sendo três modelos de superfície de resposta: X^2 , $\sqrt{X}$ e $X^{3/2}$ e um modelo de regressão assintótica (Lei de Mitscherlich). Dentre outras, conclui a au

tora que o modelo raiz quadrada apresentou os mais altos valores dos coeficientes de determinação R^2 enquanto que o modelo quadrático e o de grau $3/2$ revelaram-se praticamente iguais nos resultados.

Recomenda a autora que, para a determinação da dose econômica de nutrientes no caso de 3 níveis, o uso da Lei de Mitscherlich, porque leva a soluções satisfatórias através de métodos matemáticos simples. Entretanto, se existirem interações significativas de nutrientes ou se houver queda de produção devida a doses altas, recomenda-se a aplicação da regressão polinomial, preferencialmente o modelo de raiz quadrada.

PIMENTEL GOMES e CAMPOS (1972) discutiram a precisão das estimativas entre os delineamentos: fatorial 3^3 e o central rotativo de BOX com 15 tratamentos, concluindo que o primeiro é mais eficiente do que o segundo por apresentar variância menor nas estimativas dos parâmetros. Concluíram, também que, com relação a ensaios com fertilizantes, o melhor é ter-se o mesmo intervalo de confiança na adubação das doses para cada parâmetro em ambos os delineamentos.

OLIVEIRA (1974) realizou um estudo teórico comparando a precisão das estimativas dos coeficientes dos modelos do grupo fatorial 3^K para $K = 2, 3, 4$, relativamente às estimativas correspondentes nos modelos do delineamento Composto Central Rotativo para $K = 2, 3, 4$, usando-se um ou mais pontos no centro.

Para cada delineamento foram obtidas as respectivas matrizes de dispersão, cujos termos comparados, após conveniente equi-

valência de escala, levou à conclusão de que o fatorial 3^K mostrou-se mais eficiente, pois forneceu variâncias das estimativas dos coeficientes muito menores.

COSTA (1977) fez um estudo comparativo de 3 modelos de regressão polinomial aplicados a 27 ensaios fatoriais de adubação NPK em cultura de arroz, no Estado de Goiás. Os modelos foram X^2 , raiz quadrada de X e $X^{3/2}$. Verificou o autor que os resultados obtidos pelos modelos quadrático e de grau 3/3 praticamente não diferiam entre si, levando-o, assim, a abandonar o estudo com o de grau 3/2 por ser de maior complexidade e apresentar cálculos mais laboriosos.

Dentre outras, o autor concluiu que os valores de F das regressões e os coeficientes de determinação R^2 em ambos os modelos foram concordantes em todos os casos estudados. Ambos os modelos apresentaram, em alguns casos, doses econômicas fora do intervalo estudado. As doses econômicas obtidas nos cortes foram bastante próximas das encontradas nas superfícies, sendo seus intervalos de confiança muito amplos, dificultando a recomendação de adubação. Recomenda o autor a aplicação das superfícies de resposta somente para grupos de ensaios e de boa precisão.

MONTEIRO (1978) aplicou os modelos de regressão polinomial e de regressão assintótica (Lei de Mitscherlich) aos dados de produção provenientes de ensaios fatorial 3^3 de adubação NPK em amendoim, concluindo que os dois modelos apresentaram um bom ajuste aos dados experimentais e que os intervalos de confiança para os rendimentos através do modelo polinomial quadrático foram estreitos.

Recomenda o autor, ambos os modelos, na determinação das doses econômicas de nutrientes para o caso de três níveis, para grupos de ensaios de boa precisão, sendo que pela Lei de Mitscherlich chega-se a resultados razoáveis, através de cálculos imediatos.

CONAGIN e JORGE (1979) apresentaram um trabalho sobre o Delineamento Duplo Composto Central, desenvolvido para o estudo de três fatores e mais de três níveis.

No trabalho são apresentados o delineamento não ortogonal completamente casualizado, estudado com três fatores em cinco níveis, o ortogonal completamente casualizado com três fatores em nove níveis, e o ortogonal divisível em dois blocos com três fatores em nove níveis.

Os autores concluíram que os três delineamentos, quando comparados com o delineamento fatorial 3^3 , revelaram propriedades altamente vantajosas, pois possibilitam a estimação mais eficiente dos coeficientes quadráticos, responsáveis pela curvatura da função e, consequentemente, pela localização do ponto ótimo econômico.

Concluíram, também, que esses delineamentos são superiores ao 3^3 por possibilitarem o estudo de três fatores com maior número de níveis, e por estimarem os coeficientes quadráticos com variância menor que as do 3^3 .

JORGE (1980) fez a análise do delineamento Guadalupe para três fatores, usando o modelo polinomial quadrático, com polinômios ortogonais do primeiro e segundo graus.

Entre outras, a autora concluiu, segundo critério de PIMENTEL GOMES E CAMPOS (1967) que

- (a) para ensaios de adubação, o delineamento Guadalupe original é menos eficiente que o fatorial 3^3 e mais eficiente que o composto central original;
- (b) em ensaios de adubação, o delineamento Guadalupe ortogonal é menos eficiente que o Guadalupe original e que o fatorial 3^3 ; em relação ao central composto original, o Guadalupe ortogonal é mais eficiente na estimativa dos componentes quadráticos.

LIMA (1980) aplicando os modelos de regressão polinomial e de regressão assintótica (Lei de Mitscherlich), em produções provenientes de ensaios fatoriais 3^3 incompletos de adubação MPK em mandioca, no Estado do Ceará, concluiu que para ambos os modelos os intervalos de confiança para os parâmetros foram bastante amplos e os intervalos de confiança para os rendimentos foram estreitos.

NICOLELLA (1981), utilizando dados de 5 ensaios instalados em blocos casualizados com duas repetições e quinze tratamentos, em cultura de cacau, no Estado da Bahia, estudou o comportamento do modelo polinomial quadrático (com e sem interação).

O autor determinou as estimativas dos parâmetros de equação de regressão e as estimativas dos rendimentos, bem como seus respectivos intervalos de confiança, concluindo que os parâmetros da equa-

ção apresentaram intervalos de confiança amplos, resultando em uma imprecisão nas estimativas dos rendimentos,

Concluiu, também, que o uso da superfície de resposta na interpretação de ensaios de adubação NPK, utilizando-se para o ajuste dos dados de produção a função polinomial quadrática, revelou-se inadequado, na cultura de cacau no Estado da Bahia.

CONAGIN (1982-A) realizou um trabalho sobre delineamentos Duplos Compostos Centrais constituídos de dois fatoriais nos níveis $^{+}1$ e ^{+}w , pontos axiais nos níveis $^{+}\alpha$ e $^{+}\gamma\alpha$, para cada fator e pontos centrais e que pode apresentar cinco, sete ou nove níveis para cada fator.

O trabalho apresenta três tipos de delineamentos: (1) os delineamentos que além de ortogonais são subdivisíveis em dois, três ou cinco blocos, cujos níveis w , da parte fatorial, são menores que dois, condição esta que os torna bastante desejáveis na prática pois níveis mais altos são raramente utilizados; (2) os delineamentos ortogonais, divisíveis ortogonalmente em blocos com os pontos da parte fatorial inseridos em duas hiperesferas de raios $\alpha \sim \sqrt{K}$ e $\alpha\gamma \sim w\sqrt{K}$ contendo dois ou quatro pontos centrais; (3) os delineamentos ortogonais, rotacionais ou quase completamente rotacionais, sendo, também, divisíveis ortogonalmente, em dois, três ou cinco blocos, visando fornecer uma boa estimação do erro experimental e um teste mais preciso de adequação ao modelo.

Conclui que esses delineamentos podem ser de utilidade na pesquisa agrícola e na pesquisa com fertilizantes, em que a subdivisão em blocos é muito importante, possibilitando uma determinação precisa da dose econômica dos fertilizantes, e também nos casos em que é importante cobrir a área pesquisada com várias doses de cada fator.

CONAGIN (1982-B) apresentou um trabalho sobre delineamentos Compostos Centrais Ortogonais, Rotacionais e Divisíveis em Blocos, cujos delineamentos possuem a propriedade dos delineamentos Compostos Centrais Ortogonais onde a estimação dos coeficientes do modelo é facilmente obtida, e possuem também a propriedade dos Compostos Centrais Ortogonais Rotacionais que apresentam uma uniformidade de variâncias para os pontos que se encontram a mesma distância do centro de delineamento.

Concluiu que os delineamentos que possuem essas três propriedades possibilitam uma estimativa precisa do erro e que o teste de adequação do modelo pode ser feito, e com precisão razoável.

Aconselha, para o caso de experimentos de adubação, que deve-se calibrar bem a amplitude das doses escolhidas, de forma que as decisões econômicas ótimas possam estar situadas no intervalo de zero a uma das doses, mais próximas de zero do que de um.

3. DELINEAMENTOS DE SEGUNDA ORDEM

O modelo de regressão polinomial de segundo grau, com três variáveis independentes X_1 , X_2 e X_3 , é dado pela seguinte equação:

$$y_j = a_0 + a_1 X_1 + a_2 X_2 + a_3 X_3 + a_{11} X_1^2 + a_{22} X_2^2 + a_{33} X_3^2 + \\ + a_{12} X_1 X_2 + a_{13} X_1 X_3 + a_{23} X_2 X_3 + e_j$$

onde $e_j \sim N(0, \sigma^2)$.

BOX e WILSON (1951) introduziram os delineamentos compostos para ajustar superfícies de resposta de segunda ordem. Esses delineamentos são construídos pela adição de combinações de tratamentos àquelas que são obtidas de um fatorial 2^k . Se os níveis codificados de cada variável $\underline{x}$ são (-1) e (+1) no fatorial 2^k , adicionando-se a estes as $(2k+p)$ combinações obtemos os Delineamentos Compostos Centrais.

Dessa forma, tem-se que o delineamento Composto Central subdivide-se em três partes:

- (a) 2^k : pontos do fatorial
- (b) $2k$: pontos axiais, isto é, pontos localizados sobre o eixo a uma distância α do centro.
- (c) p : pontos centrais.

Assim, o número total de combinações de tratamentos, ou seja, o número total de pontos é dado por $(2^k + 2k + p)$. Usando-se um ponto no centro tem-se $(2^k + 2k + 1)$ como o número total de combinações de tratamentos. Assim, para 2, 3 e 4 fatores, o experimento requer 9, 15 e 25 unidades, respectivamente, comparados com 9, 27 e 81 no grupo 3^k .

Estudar-se-á o delineamento Composto Central com $k = 3$ e $p = 1$ ponto central, representado por $2^3 + 2(3) + 1 = 15$ número total de tratamentos onde:

- $2^3 = 8$: pontos do fatorial, são os vértices do cubo
- $2(3) = 6$: pontos axiais
- 1 : ponto central.

Assim, com os 8 tratamentos codificados do fatorial

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

adicionados aos 6 pontos axiais:

$$\begin{array}{ll}
 (-\alpha, 0, 0) & , \quad (\alpha, 0, 0) \\
 (0, -\alpha, 0) & , \quad (0, \alpha, 0) \\
 (0, 0, -\alpha) & , \quad (0, 0, \alpha)
 \end{array}$$

mais 1 ponto central: $(0, 0, 0)$, obtêm-se os 15 tratamentos, cuja representação gráfica é dada por:

FIGURA 1 - Delineamento Composto Central no nível α .

CONAGIN et alii (1968) introduziram o delineamento Du plo Composto Central visando uma estimativa mais eficiente dos coeficientes quadráticos, obtendo, assim, melhor estimativa da curvatura da função de resposta responsável pela localização do ponto ótimo econômico.

Este delineamento é composto de 29 pontos distribuídos em dois cubos situados nas distâncias α e 2α , e um ponto central, cuja representação pode ser dada por: $2^3 + 2^3 + 2(3) + 2(3) + 1 = 29$ com binações de tratamentos.

Assim com os $2^3 + 2^3 = 16$ tratamentos codificados do fatorial:

$(-2, -2, -2)$	$(-2, 2, 2)$	$(-1, -1, -1)$	$(-1, 1, 1)$
$(-2, -2, 2)$	$(2, -2, 2)$	$(-1, -1, 1)$	$(1, -1, 1)$
$(-2, 2, -2)$	$(2, 2, -2)$	$(-1, 1, -1)$	$(1, 1, -1)$
$(2, -2, -2)$	$(2, 2, 2)$	$(1, -1, -1)$	$(1, 1, 1)$

somados com os $2(3) + 2(3) = 12$ pontos axiais

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

mais 1 ponto central $(0, 0, 0)$, têm-se os 29 tratamentos, que graficamente são assim representados:

FIGURA 2 - Delineamento Duplo Composto Central
nos níveis α e 2α .

O valor α pode ser escolhido para tornar os coeficientes de regressão ortogonais o que facilita a estimação dos parâmetros e a análise de variância correspondente (BOX e WILSON, 1951); ou para minimizar o desvio que resulta se a forma verdadeira da superfície

de resposta não for quadrática, ou para dar ao delineamento a propriedade de ser rotacional, o que se caracteriza por ter a variância da resposta estimada constante em pontos equidistantes do centro (BOX e HUNTER, 1957).

4. METODOLOGIA

4.1. Ortogonalização dos Delineamentos: Composto Central e Duplo Composto Central

A metodologia usada para a ortogonalização dos delineamentos baseia-se dentre outros, nos trabalhos de BOX e WILSON (1951) e CONAGIN e JORGE (1979).

Para cada delineamento é obtida a matriz de dispersão e, pela comparação dos termos das matrizes, após conseguir-se conveniente equivalência de escala, poder-se-á avaliar a eficiência dos delineamentos.

Através desta metodologia, será comparada a precisão das estimativas dos coeficientes do delineamento Composto Central Ortogonal (C.C.O.) com 15 tratamentos com as estimativas correspondentes, obtidas no delineamento Duplo Composto Central Ortogonal (D.C.C.O.) com 29 tratamentos.

4.1.1. Modelo de Segunda Ordem

No presente trabalho será indicado por:

$$y_j = a_0 + a_1 X_1 + a_2 X_2 + a_3 X_3 + a_{11} X_1^2 + a_{22} X_2^2 + a_{33} X_3^2 + a_{12} X_1 X_2 +$$

$$+ a_{13} X_1 X_3 + a_{23} X_2 X_3 + e_j$$

o modelo de superfície de resposta relativa ao delineamento Composto Central Ortogonal.

Os 15 tratamentos codificados são:

$$\begin{array}{lllll} (-1, -1, -1) & (1, 1, -1) & (1, -1, -1) & (-\alpha, 0, 0) & (\alpha, 0, 0) \\ (-1, 1, 1) & (-1, -1, 1) & (1, 1, 1) & (0, -\alpha, 0) & (0, \alpha, 0) \\ (1, -1, 1) & (-1, 1, -1) & (0, 0, 0) & (0, 0, -\alpha) & (0, 0, \alpha) \end{array}$$

O modelo de superfície de resposta, correspondente ao delineamento Duplo Composto Central Ortogonal será indicado por:

$$y_j = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3 + b_{11} X_1^2 + b_{22} X_2^2 + b_{33} X_3^2 + b_{12} X_1 X_2 +$$

$$+ b_{13} X_1 X_3 + b_{23} X_2 X_3 + e_j$$

Os 29 tratamentos codificados são:

$(-2, -2, -2)$	$(-2, -2, -2)$	$(1, -1, 1)$
$(-2, 2, 2)$	$(2, -2, -2)$	$(1, 1, -1)$
$(2, -2, 2)$	$(2, 2, 2)$	$(-1, -1, 1)$
$(2, 2, -2)$	$(-1, -1, -1)$	$(-1, 1, -1)$
$(-2, -2, 2)$	$(-1, 1, 1)$	$(1, -1, -1)$

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

Considerando-se:

Y o vetor das produções;

X a matriz dos valores assumidos por X_1, X_2 e X_3 nos tratamentos considerados;

β o vetor dos parâmetros;

ξ o vetor dos erros

pode-se escrever os modelos dos delineamentos na forma matricial dada por:

$$Y = X\beta + \xi$$

Considerando-se ainda que a matriz $X' = [X_1, X_2, X_3]$ é constituída dos valores dos tratamentos codificados e considerando a correção para a média introduzida nos termos quadráticos pela expressão $\sum_i (x_i^2 - c) = 0$, têm-se os polinômios:

para o delineamento composto central ortogonal:

$$\hat{Y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_1 + \hat{a}_2 x_2 + \hat{a}_3 x_3 + \hat{a}_{11} (x_1^2 - c) + \hat{a}_{22} (x_2^2 - c) + \\ + \hat{a}_{33} (x_3^2 - c) + \hat{a}_{12} x_1 x_2 + \hat{a}_{13} x_1 x_3 + \hat{a}_{23} x_2 x_3 .$$

e para o delineamento duplo composto central ortogonal:

$$\hat{Y} = \hat{b}_0 + \hat{b}_1 x_1 + \hat{b}_2 x_2 + \hat{b}_3 x_3 + \hat{b}_{11} (x_1^2 - c) + \hat{b}_{22} (x_2^2 - c) + \\ + \hat{b}_{33} (x_3^2 - c) + \hat{b}_{12} x_1 x_2 + \hat{b}_{13} x_1 x_3 + \hat{b}_{23} x_2 x_3 .$$

O vetor Y das produções j correspondentes aos tratamentos numerados de 1 a 15, e a matriz X das variáveis independentes para o delineamento Composto Central Ortogonal, são dados na Tabela 1, e para o delineamento Duplo Composto Central Ortogonal, com os tratamentos numerados de 1 a 29, na Tabela 2.

TABELA 1 - O vetor Y das Produções e a Matriz X para o Delineamento Composto Central Ortogonal.

x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1^2 - c$	$x_2^2 - c$	$x_3^2 - c$	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	$x_1 x_2 x_3$
1	-1	-1	-1	1-c	1-c	1-c	1	1	1	1
1	-1	-1	1	1-c	1-c	1-c	1	-1	-1	-1
1	-1	1	-1	1-c	1-c	1-c	-1	1	1	-1
1	1	-1	-1	1-c	1-c	1-c	-1	-1	-1	1
1	1	1	-1	1-c	1-c	1-c	1	-1	-1	-1
1	1	-1	1	1-c	1-c	1-c	-1	1	1	-1
1	-1	1	1	1-c	1-c	1-c	-1	-1	1	1
1	1	1	1	1-c	1-c	1-c	1	1	1	1
1	- α	0	0	$\alpha^2 - c$	-c	-c	0	0	0	0
1	0	- α	0	-c	$\alpha^2 - c$	-c	0	0	0	0
1	0	0	- α	-c	-c	$\alpha^2 - c$	0	0	0	0
1	α	0	0	$\alpha^2 - c$	-c	-c	0	0	0	0
1	0	α	0	-c	$\alpha^2 - c$	-c	0	0	0	0
1	0	0	α	-c	-c	$\alpha^2 - c$	0	0	0	0
1	0	0	0	-c	-c	-c	0	0	0	0

$$Y_1 = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \\ T_9 \\ T_{10} \\ T_{11} \\ T_{12} \\ T_{13} \\ T_{14} \\ T_{15} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_{111} \\ Y_{113} \\ Y_{131} \\ Y_{311} \\ Y_{331} \\ Y_{313} \\ Y_{133} \\ Y_{333} \\ Y_{122} \\ Y_{212} \\ Y_{221} \\ Y_{322} \\ Y_{232} \\ Y_{223} \\ Y_{222} \end{bmatrix}$$

$$X_1 = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & x_2 & x_3 & x_1^2 - c & x_2^2 - c & x_3^2 - c & x_1 x_2 & x_1 x_3 & x_2 x_3 & x_1 x_2 x_3 \end{bmatrix}$$

TABELA 2 - O Vetor Y e a Matriz X para o Delineamento Duplo Composto Central Ortogonal.

			x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1^2 - c$	$x_2^2 - c$	$x_3^2 - c$	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$
$Y_2 =$	T_1	Y_{000}	1	-2	-2	-2	$4-c$	$4-c$	$4-c$	4	4	4
	T_2	Y_{400}	1	2	-2	-2	$4-c$	$4-c$	$4-c$	-4	-4	4
	T_3	Y_{040}	1	-2	2	-2	$4-c$	$4-c$	$4-c$	-4	4	-4
	T_4	Y_{440}	1	2	2	-2	$4-c$	$4-c$	$4-c$	4	-4	-4
	T_5	Y_{004}	1	-2	-2	2	$4-c$	$4-c$	$4-c$	4	-4	-4
	T_6	Y_{404}	1	2	-2	2	$4-c$	$4-c$	$4-c$	-4	4	-4
	T_7	Y_{044}	1	-2	2	2	$4-c$	$4-c$	$4-c$	-4	-4	4
	T_8	Y_{444}	1	2	2	2	$4-c$	$4-c$	$4-c$	4	4	4
	T_9	Y_{111}	1	-1	-1	-1	$1-c$	$1-c$	$1-c$	1	-1	1
	T_{10}	Y_{311}	1	1	-1	-1	$1-c$	$1-c$	$1-c$	-1	-1	1
	T_{11}	Y_{131}	1	-1	1	-1	$1-c$	$1-c$	$1-c$	-1	1	-1
	T_{12}	Y_{331}	1	1	1	-1	$1-c$	$1-c$	$1-c$	1	-1	-1
	T_{13}	Y_{113}	1	-1	-1	1	$1-c$	$1-c$	$1-c$	1	-1	-1
	T_{14}	Y_{313}	1	1	-1	1	$1-c$	$1-c$	$1-c$	-1	1	-1
	T_{15}	Y_{133}	1	-1	1	1	$1-c$	$1-c$	$1-c$	-1	-1	1
	T_{16}	Y_{333}	1	1	1	1	$1-c$	$1-c$	$1-c$	1	1	1
	T_{17}	Y_{222}	1	0	0	0	$-c$	$-c$	$-c$	0	0	0
	T_{18}	Y_{022}	1	-2α	0	0	$4\alpha^2 - c$	$-c$	$-c$	0	0	0
	T_{19}	Y_{122}	1	$-\alpha$	0	0	$\alpha^2 - c$	$-c$	$-c$	0	0	0
	T_{20}	Y_{322}	1	α	0	0	$\alpha^2 - c$	$-c$	$-c$	0	0	0
	T_{21}	Y_{422}	1	2α	0	0	$4\alpha^2 - c$	$-c$	$-c$	0	0	0
	T_{22}	Y_{202}	1	0	-2α	0	$-c$	$4\alpha^2 - c$	$-c$	0	0	0
	T_{23}	Y_{212}	1	0	$-\alpha$	0	$-c$	$\alpha^2 - c$	$-c$	0	0	0
	T_{24}	Y_{232}	1	0	α	0	$-c$	$\alpha^2 - c$	$-c$	0	0	0
	T_{25}	Y_{242}	1	0	2α	0	$-c$	$4\alpha^2 - c$	$-c$	0	0	0
	T_{26}	Y_{220}	1	0	0	-2α	$-c$	$-c$	$4\alpha^2 - c$	0	0	0
	T_{27}	Y_{221}	1	0	0	$-\alpha$	$-c$	$-c$	$\alpha^2 - c$	0	0	0
	T_{28}	Y_{223}	1	0	0	α	$-c$	$-c$	$\alpha^2 - c$	0	0	0
	T_{29}	Y_{224}	1	0	0	2α	$-c$	$-c$	$4\alpha^2 - c$	0	0	0

4.1.2. Sistema de Equações Normais e Estimativa dos Parâmetros

Matricialmente tem-se que $Y = X\beta + \varepsilon$ e, pela minimização da soma dos quadrados dos desvios $(\varepsilon'\varepsilon)$, tem-se o sistema de equações normais dado por:

$$X'X\hat{\beta} = X'Y$$

Seja a matriz $S_1 = X_1'X_1$ para o delineamento Composto Central Ortogonal dada por:

$$S_1 = X_1'X_1 = \begin{bmatrix} 15 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_1 & T_1 & T_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T_1 & M_1 & T_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T_1 & T_1 & M_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}$$

onde

onde: $M_1 = 8(1 - c)^2 + 2(\alpha^2 - c)^2 + 5(c)^2$

$$T_1 = 8(1 - c)^2 - 4c(\alpha^2 - c) + 3(c)^2$$

Efetuada as operações e simplificando, chega-se a

$$M_1 = T_1 + 2\alpha^4$$

A partir da equação em T_1 , obtêm-se:

$$T_1 = 8 + 15c^2 - 16c - 4c\alpha^2$$

Substituindo $c = 2(4 + \alpha^2) \div 15$, fazendo $\alpha^2 = z$, e lembrando que para a matriz ficar diagonal, devemos ter $T_1 = 0$, chega-se à equação $z^2 + 8z - 14 = 0$, cuja raiz válida é a positiva,

$$z = \alpha^2 = 1,4772, \text{ de onde } \alpha = 1,2154.$$

Portanto usando $\alpha = 1,2154$ obtêm-se o delineamento Composto Central Ortogonal.

Para o delineamento Duplo Composto Central Ortogonal o raciocínio é idêntico. Seja a matriz

$$S_2 = X_2' X_2 = \begin{bmatrix} 29 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 40+10\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 40+10\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 40+10\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{M_2} & \boxed{T_2} & \boxed{T_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{T_2} & \boxed{M_2} & \boxed{T_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{T_2} & \boxed{T_2} & \boxed{M_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 136 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 136 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 136 \end{bmatrix}$$

onde

$$M_2 = 8(4-c)^2 + 8(1-c)^2 + 9(c)^2 + 2(4\alpha^2-c)^2 + 2(\alpha^2-c)^2$$

$$T_2 = 8(4-c)^2 + 8(1-c)^2 + 5(c)^2 - 4c(4\alpha^2-c) - 4c(\alpha^2-c)$$

Efetutando as operações e simplificando tem-se:

$$M_2 = T_2 + 34\alpha^4 .$$

Substituindo em T_2 o valor de c , fazendo $T_2 = 0$ e resolvendo a equação em z , chega-se a $z = \alpha^2 = 2,2801$ onde $\alpha = 1,5100$.

Substituindo α pelos seus respectivos valores nas matrizes S_1 e S_2 , agora diagonais, obtém-se

Matriz $X'X$ para o Delineamento Composto Central Ortogonal ($\alpha = 1,2154$)

$$S_1 = X_1' X_1 = \begin{bmatrix} 15 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10,9544 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10,9544 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10,9544 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10,9544 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,3642 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,3642 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,3642 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,3642 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}$$

Matriz $X'X$ para o Delineamento Duplo Composto Central Ortogonal ($\alpha = 1,5100$)

$$S_2 = X_2' X_2 = \begin{bmatrix} 29 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 62,8010 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 62,8010 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 62,8010 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 176,7611 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 176,7611 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 176,7611 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 176,7611 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 136 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 136 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 136 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 136 \end{bmatrix}$$

As estimativas dos parâmetros da equação de regressão são obtidas a partir da solução do sistema de equações normais:

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

Assim, para o delineamento composto central ortogonal

$$S_1^{-1} = (X_1'X_1)^{-1} = \text{diag} \left(\frac{1}{15}; 0,0913; 0,0913, 0,0913; 0,2291; 0,2291; \right. \\ \left. 0,2291; \frac{1}{8}; \frac{1}{8}; \frac{1}{8} \right)$$

e para o delineamento duplo composto central ortogonal

$$S_2^{-1} = (X_2'X_2)^{-1} = \text{diag} \left(\frac{1}{29}; 0,0159; 0,0159; 0,0159; 0,005657; \right. \\ \left. 0,005657; 0,005657; \frac{1}{136}; \frac{1}{136}; \frac{1}{136} \right)$$

As matrizes X e $X'Y$, para ambos os delineamentos, são dadas a seguir:

Matriz X para o Delineamento Composto Central Ortogonal

x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1^2 - 0,7303$	$x_2^2 - 0,7303$	$x_3^2 - 0,7303$	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$
1	-1	-1	-1	0,2697	0,2697	0,2697	1	1	1
1	-1	-1	1	0,2697	0,2697	0,2697	1	-1	-1
1	-1	1	-1	0,2697	0,2697	0,2697	-1	1	-1
1	1	-1	-1	0,2697	0,2697	0,2697	-1	-1	1
1	1	1	-1	0,2697	0,2697	0,2697	1	-1	-1
1	1	-1	1	0,2697	0,2697	0,2697	-1	1	-1
1	-1	1	1	0,2697	0,2697	0,2697	-1	-1	1
1	-1,2154	0	0	0,7469	-0,7303	-0,7303	0	0	0
1	0	-1,2154	0	-0,7303	0,7469	-0,7303	0	0	0
1	0	0	-1,2154	-0,7303	-0,7303	0,7469	0	0	0
1	1,2154	0	0	0,7469	-0,7303	-0,7303	0	0	0
1	0	1,2154	0	-0,7303	0,7469	-0,7303	0	0	0
1	0	0	1,2154	-0,7303	-0,7303	0,7469	0	0	0
1	0	0	0	-0,7303	-0,7303	-0,7303	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0

$= X_1$

Matriz X para o Delineamento Duplo Composto Central Ortogonal

x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1^2-2,1655$	$x_2^2-2,1655$	$x_3^2-2,1655$	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3
1	-2	-2	-2	1,8345	1,8345	1,8345	4	4	4
1	2	-2	-2	1,8345	1,8345	1,8345	-4	-4	4
1	-2	2	-2	1,8345	1,8345	1,8345	-4	4	-4
1	2	2	-2	1,8345	1,8345	1,8345	4	-4	-4
1	-2	-2	2	1,8345	1,8345	1,8345	4	-4	-4
1	2	-2	2	1,8345	1,8345	1,8345	-4	4	-4
1	-2	2	2	1,8345	1,8345	1,8345	-4	-4	4
1	2	2	2	1,8345	1,8345	1,8345	4	4	4
1	-1	-1	-1	-1,1655	-1,1655	-1,1655	1	1	1
1	-1	-1	1	-1,1655	-1,1655	-1,1655	1	-1	-1
1	-1	1	-1	-1,1655	-1,1655	-1,1655	-1	1	-1
1	1	-1	-1	-1,1655	-1,1655	-1,1655	-1	-1	1
1	1	1	-1	-1,1655	-1,1655	-1,1655	1	-1	-1
1	1	-1	1	-1,1655	-1,1655	-1,1655	-1	1	-1
1	-1	1	1	-1,1655	-1,1655	-1,1655	-1	-1	1
1	1	1	1	-1,1655	-1,1655	-1,1655	1	1	1
1	0	0	0	-2,1655	-2,1655	-2,1655	0	0	0
1	-3,02	0	0	6,9549	-2,1655	-2,1655	0	0	0
1	-1,51	0	0	0,1146	-2,1655	-2,1655	0	0	0
1	1,51	0	0	0,1146	-2,1655	-2,1655	0	0	0
1	3,02	0	0	6,9549	-2,1655	-2,1655	0	0	0
1	0	-3,02	0	-2,1655	6,9549	-2,1655	0	0	0
1	0	-1,51	0	-2,1655	0,1146	-2,1655	0	0	0
1	0	1,51	0	-2,1655	0,1146	-2,1655	0	0	0
1	0	3,02	0	-2,1655	6,9549	-2,1655	0	0	0
1	0	0	-3,02	-2,1655	-2,1655	6,9549	0	0	0
1	0	0	-1,51	-2,1655	-2,1655	0,1146	0	0	0
1	0	0	1,51	-2,1655	-2,1655	0,1146	0	0	0
1	0	0	3,02	-2,1655	-2,1655	6,9549	0	0	0
29	0	0	0	0	0	0	0	0	0

= X_2

Matriz X'Y para o Delineamento Composto Central Ortogonal:

$$X'Y = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_{111} \\ Y_{112} \\ Y_{131} \\ Y_{311} \\ Y_{331} \\ Y_{313} \\ Y_{133} \\ Y_{333} \\ Y_{122} \\ Y_{212} \\ Y_{221} \\ Y_{322} \\ Y_{232} \\ Y_{223} \\ Y_{222} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ C_1 \\ D_1 \\ E_1 \\ F_1 \\ G_1 \\ H_1 \\ I_1 \\ J_1 \end{bmatrix}$$

onde: $A_1 = \sum_{i,j,k}^{15} Y_{ijk}$

$$B_1 = -1(Y_{111} + Y_{113} + Y_{131} + Y_{133}) + 1(Y_{311} + Y_{313} + Y_{331} + Y_{333}) + 1,2154(Y_{322} - Y_{122})$$

C₁ e D₁ são definidos de forma semelhante a B₁

$$E_1 = 0,2697(Y_{111} + Y_{113} + Y_{131} + Y_{133} + Y_{311} + Y_{313} + Y_{331} + Y_{333}) + 0,7496(Y_{122} + Y_{322}) - 0,7303(Y_{212} + Y_{222} + Y_{223})$$

F₁ e G₁ são definidos de forma análoga a E₁

$$H_1 = B_1 C_1 = +1(Y_{111} + Y_{113} + Y_{131} + Y_{133}) - 1(Y_{311} + Y_{313} + Y_{331} + Y_{333})$$

I₁ e J₁ são definidos semelhantemente a H₁

$$J_1 = C_1 D_1$$

Desse modo, as estimativas dos parâmetros, elementos do vetor $\hat{\beta}$, são:

No delineamento Composto Central Ortogonal:

$$\hat{\beta}_1 = S_1^{-1} X_1' Y_1 =$$

$\hat{a}_0$	$A \div 15$
$\hat{a}_1$	$0,0913 B_1$
$\hat{a}_2$	$0,0913 C_1$
$\hat{a}_3$	$0,0913 D_1$
$\hat{a}_{11}$	$0,2291 E_1$
$\hat{a}_{22}$	$0,2291 F_1$
$\hat{a}_{33}$	$0,2291 G_1$
$\hat{a}_{12}$	$H_1 \div 8$
$\hat{a}_{13}$	$I_1 \div 8$
$\hat{a}_{23}$	$J_1 \div 8$

No delineamento Duplo Composto Central Ortogonal:

$$\hat{\beta}_2 = S_2^{-1} X_2' Y_2 = \begin{bmatrix} \hat{b}_0 \\ \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \\ \hat{b}_3 \\ \hat{b}_{11} \\ \hat{b}_{22} \\ \hat{b}_{33} \\ \hat{b}_{12} \\ \hat{b}_{13} \\ \hat{b}_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_2 \div 29 \\ 0,0159 B_2 \\ 0,0159 C_2 \\ 0,0159 D_2 \\ 0,005657 E_2 \\ 0,005657 F_2 \\ 0,005657 G_2 \\ H_2 \div 136 \\ I_2 \div 136 \\ J_2 \div 136 \end{bmatrix}$$

4.1.3. Análise da Variância

A redução na soma de quadrados, devida à regressão, é dada por:

$$S.Q. \text{Regressão} = \hat{\beta}' X' Y - C \quad , \quad \text{onde } C = \text{correção}.$$

Para o delineamento Composto Central Ortogonal tem-se:

$$S.Q. \text{Reg} = \hat{\beta}'_1 X'_1 Y_1 - C_1 \quad \text{onde} \quad C_1 = \frac{(\sum_1^{15} Y_{ijk})^2}{15} = \frac{A_1^2}{15}$$

$$\begin{aligned}
\text{SQReg.} = & \frac{1}{15} A_1^2 + 0,0913B_1^2 + 0,913C_1^2 + 0,0193D_1^2 + 0,2291E_1^2 + \\
& + 0,2291F_1^2 + 0,2291G_1^2 + \frac{1}{8} H_1^2 + \frac{1}{8} I_1^2 + \\
& + \frac{1}{8} J_1^2 - \frac{1}{15} A_1^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{SQReg.} = & \text{SQ}\hat{a}_0 + \text{SQ}\hat{a}_1 + \text{SQ}\hat{a}_2 + \text{SQ}\hat{a}_3 + \text{SQ}\hat{a}_{11} + \text{SQ}\hat{a}_{22} + \text{SQ}\hat{a}_{33} + \\
& + \text{SQ}\hat{a}_{12} + \text{SQ}\hat{a}_{13} + \text{SQ}\hat{a}_{23} - C_1
\end{aligned}$$

O quadro da análise de variância será:

C. Variação	G.L.	S.Q.
Efeito $\hat{a}_0$ (média)	1	$SQ\hat{a}_0$
Efeito $\hat{a}_1$	1	$SQ\hat{a}_1$
Efeito $\hat{a}_2$	1	$SQ\hat{a}_2$
Efeito $\hat{a}_3$	1	$SQ\hat{a}_3$
Efeito $\hat{a}_{11}$	1	$SQ\hat{a}_{11}$
Efeito $\hat{a}_{22}$	1	$SQ\hat{a}_{22}$
Efeito $\hat{a}_{33}$	1	$SQ\hat{a}_{33}$
Efeito $\hat{a}_{12}$	1	$SQ\hat{a}_{12}$
Efeito $\hat{a}_{13}$	1	$SQ\hat{a}_{13}$
Efeito $\hat{a}_{23}$	1	$SQ\hat{a}_{23}$
Regressão	10	$\hat{\beta}'_1 X'_1 Y_1$
Desvios de Regressão	4	por dif.
Tratamentos	14	maneira usual
Resíduo	N-15	por dif.
T o t a l	N-1	$\sum_1^{15} Y_{ijk}^2 - C_1$

Para o delineamento Duplo Composto Central Ortogonal, tem-se:

$$SQReg. = \hat{\beta}'_2 X'_2 Y_2 - C_2 \quad \text{onde} \quad C_2 = \frac{(\sum_1^{29} Y_{ijk})^2}{29} = \frac{A_2^2}{29}$$

$$\begin{aligned}
 \text{SQReg.} = & \frac{1}{29} A_2^2 + 0,0159B_2^2 + 0,0159C_2^2 + 0,0159D_2^2 + 0,00565E_2^2 + \\
 & + 0,00565F_2^2 + 0,00565G_2^2 + \frac{1}{136} H_2^2 + \frac{1}{136} I_2^2 + \\
 & + \frac{1}{136} J_2^2 - \frac{1}{29} A_2^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{SQReg.} = & \text{SQ}\hat{\text{b}}_0 + \text{SQ}\hat{\text{b}}_1 + \text{SQ}\hat{\text{b}}_2 + \text{SQ}\hat{\text{b}}_3 + \text{SQ}\hat{\text{b}}_{11} + \text{SQ}\hat{\text{b}}_{22} + \text{SQ}\hat{\text{b}}_{33} + \\
 & + \text{SQ}\hat{\text{b}}_{12} + \text{SQ}\hat{\text{b}}_{13} + \text{SQ}\hat{\text{b}}_{23} - C_2
 \end{aligned}$$

O quadro de análise de variância será:

C. Variação	G.L.	S.Q.
Efeito $\bar{b}_0$ (média)	1	$sq\bar{b}_0$
Efeito $\bar{b}_1$	1	$sq\bar{b}_1$
Efeito $\bar{b}_2$	1	$sq\bar{b}_2$
Efeito $\bar{b}_3$	1	$sq\bar{b}_3$
Efeito $\bar{b}_{11}$	1	$sq\bar{b}_{11}$
Efeito $\bar{b}_{22}$	1	$sq\bar{b}_{22}$
Efeito $\bar{b}_{33}$	1	$sq\bar{b}_{33}$
Efeito $\bar{b}_{12}$	1	$sq\bar{b}_{12}$
Efeito $\bar{b}_{13}$	1	$sq\bar{b}_{13}$
Efeito $\bar{b}_{23}$	1	$sq\bar{b}_{23}$
Regressão	10	$\hat{\beta}'_2 X'_2 Y'_2$
Desvios de Regressão	18	por dif.
Tratamentos	28	maneira usual
Resíduo	N-29	por dif.
T o t a l	N-1	$\sum_1^{29} Y_{ijk}^2 - C_2$

As hipóteses de nulidade relativas às diferentes causas de variação são testadas através da prova de F, utilizando o Q.M. Res. como denominador para todas as fontes.

4.1.4. Variâncias e Covariâncias das Estimativas dos Parâmetros

A matriz de dispersão (D) ou matriz das variâncias e covariâncias de $\hat{\beta}$ é obtida a partir da matriz S^{-1} . Assim, através da igualdade $D = S^{-1} \sigma^2$ têm-se as variâncias (elementos da diagonal principal) e as covariâncias (elementos fora da diagonal principal) das estimativas dos parâmetros.

Como em experimentação σ^2 é desconhecido, trabalha-se com sua estimativa imparcial $s^2 = Q.M.Res.$, obtendo-se, assim, as variâncias e covariâncias estimadas.

Para o modelo Composto Central Ortogonal:

$$\begin{aligned} V(\hat{a}_0) &= 1/15 \sigma^2 & \hat{V}(\hat{a}_0) &= 1/15 s^2 \\ V(\hat{a}_i) &= 0,0913 \sigma^2 & \hat{V}(\hat{a}_i) &= 0,0913 s^2 & i = 1, 2, 3 \\ V(\hat{a}_{ii}) &= 0,2291 \sigma^2 & \hat{V}(\hat{a}_{ii}) &= 0,2291 s^2 & i = 1, 2, 3 \\ V(\hat{a}_{ij}) &= 1/8 \sigma^2 & \hat{V}(\hat{a}_{ij}) &= 1/8 s^2 & i = 1, 2; j = 2, 3 \\ & & & & i \neq j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{e as } \text{Cov}(\hat{a}_{ij}, \hat{a}_{i',j'}) &= 0 & i \neq i' &= 1, 2, 3 \\ & & j \neq j' &= 1, 2, 3 \end{aligned}$$

Para o modelo Duplo Composto Central Ortogonal:

$$\begin{aligned}
 v(\hat{\beta}_0) &= 1/29 \sigma^2 & \hat{v}(\hat{\beta}_0) &= 1/29 s^2 \\
 v(\hat{\beta}_i) &= 0,0159 \sigma^2 & \hat{v}(\hat{\beta}_i) &= 0,0159 s^2 & i = 1, 2, 3 \\
 v(\hat{\beta}_{ii}) &= 0,005657 \sigma^2 & \hat{v}(\hat{\beta}_{ii}) &= 0,005657 s^2 & i = 1, 2, 3 \\
 v(\hat{\beta}_{ij}) &= 1/136 \sigma^2 & \hat{v}(\hat{\beta}_{ij}) &= 1/136 s^2 & i = 1, 2; j = 2, 3 \\
 & & & & i \neq j
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{e as } \text{Cov}(\hat{\beta}_{ij}, \hat{\beta}_{i'j'}) &= 0 & i \neq i' &= 1, 2, 3 \\
 & & j \neq j' &= 1, 2, 3
 \end{aligned}$$

4.2. Comparação Entre as Variâncias

4.2.1. Eficiência do Delineamento Duplo Composto Central Ortogonal em Relação ao Delineamento Composto Central Ortogonal

Pelo fato do número de tratamentos ser diferente nos dois modelos, não é correto comparar simplesmente as variâncias anteriores. Para a resolução desse problema, BOX e WILSON (1951) propuseram um processo de comparação quanto a precisão das estimativas dos parâmetros, confrontando

$$N_1 V_1 \text{ com } N_2 V_2$$

sendo N_1 e N_2 os números das observações

V_1 e V_2 variâncias das estimativas a serem comparadas.

Com base neste processo, tem-se, neste caso, que multiplicar as variâncias das estimativas do delineamento Composto Central Ortogonal por $N_1 = 15$ e as do Duplo Composto Central Ortogonal por $N_2 = 29$.

Tinha-se a seguinte situação:

C.C.O.	D.C.C.O.
$V(\hat{a}_i) = 0,0913\sigma^2$	$V(\hat{b}_i) = 0,0159\sigma^2$
$V(\hat{a}_{ii}) = 0,2291\sigma^2$	$V(\hat{b}_{ii}) = 0,005657\sigma^2$
$V(\hat{a}_{ij}) = 1/8\sigma^2$	$V(\hat{b}_{ij}) = 1/136\sigma^2$

Fazendo o ajuste para número de observações, tem-se:

C.C.O.	D.C.C.O.
$V(\hat{a}_i) = (15)(0,0913\sigma^2) = 1,3695\sigma^2$	$V(\hat{b}_i) = (29)(0,0159\sigma^2) = 0,4611\sigma^2$
$V(\hat{a}_{ii}) = (15)(0,2291\sigma^2) = 3,4365\sigma^2$	$V(\hat{b}_{ii}) = (29)(0,005657\sigma^2) = 0,1641\sigma^2$
$V(\hat{a}_{ij}) = 15/8\sigma^2 = 1,8550\sigma^2$	$V(\hat{b}_{ij}) = 29/136\sigma^2 = 0,2133\sigma^2$

Entretanto, a comparação ainda não é correta, pois o "spread" (expansão), nos dois delineamentos, não é igual. A medida do "spread" é dada por

$$s^2 = \frac{\sum x_{iu}^2}{N}$$

(MYERS, 1971, pág. 135), que é o 2º momento do delineamento.

Fazendo o ajuste de escala:

Para o delineamento Composto Central Ortogonal,

$$\text{Matriz delineamento } D_1 = \begin{matrix} & \begin{matrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ -1,2154 & 0 & 0 \\ 0 & -1,2154 & 0 \\ 0 & 0 & -1,2154 \\ 1,2154 & 0 & 0 \\ 0 & 1,2154 & 0 \\ 0 & 0 & 1,2154 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$s_1^2 = \frac{\sum_u x_{iu}^2}{15} = 0,73029 = s_2^2 = s_3^2$$

$s_{\text{c.c.o.}}^2 = 0,73029$

Para o delineamento Duplo Composto Central Ortogonal

Matriz Delineamento $D_2 =$

x_1	x_2	x_3
-2	-2	-2
2	-2	-2
-2	2	-2
2	2	-2
-2	-2	2
2	-2	2
-2	2	2
2	2	2
-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
-3,02	0	0
-1,51	0	0
1,51	0	0
3,02	0	0
0	-3,02	0
0	-1,51	0
0	1,51	0
0	3,02	0
0	0	-3,02
0	0	-1,51
0	0	1,51
0	0	3,02

$$s_1^2 = \frac{\sum x_{iu}^2}{u} = s_2^2 = s_3^2$$

29

$$s_{d.c.c.o.}^2 = 2,16555$$

Desta forma, ao se comparar as variâncias entre os de lineamentos deve-se multiplicar por s^2 as variâncias das estimativas dos parâmetros do efeito linear e por s^4 dos efeitos quadráticos e in terações:

Para D.C.C.O.

$$V(\hat{b}_i) = s^2(0,4611\sigma^2) = (2,1655)(0,4611\sigma^2) = 0,9985\sigma^2 \approx \sigma^2$$

$$V(\hat{b}_{ii}) = s^4(0,1641\sigma^2) = (2,1655)^2(0,1641\sigma^2) = 0,7695\sigma^2$$

$$V(\hat{b}_{ij}) = s^4(0,2133\sigma^2) = \sigma^2$$

Para C.C.O.

$$V(\hat{a}_i) = s^2(1,3695\sigma^2) = (0,73029)(1,3695\sigma^2) = \sigma^2$$

$$V(\hat{a}_{ii}) = s^4(3,4365\sigma^2) = (0,73029)^2(3,4365\sigma^2) = 1,83278 \sigma^2$$

$$V(\hat{a}_{ij}) = s^4(1,855\sigma^2) \approx \sigma^2$$

A eficiência E entre a variância dos parâmetros esti mados b 's do D.C.C.O. e dos a 's do C.C.O. é dada por:

$$E \left(\frac{\text{D.C.C.O.}}{\text{C.C.O.}} \right) = \frac{(\text{Variância } a's)}{(\text{Variância } b's)}$$

Assim, para os efeitos lineares e interações:

$$E = 1,00 ,$$

e para os efeitos quadráticos:

$$E = \frac{1,83278\sigma^2}{0,7695\sigma^2} = 2,38$$

Por outro lado, segundo critério de MYERS (1971, pág. 136), o "spread" (expansão) deve ser igual nos dois delineamentos; para tanto usa-se o escalonamento convencional dado por:

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

Assim, para o D.C.C.O. deve-se ter $\sum_{u=1}^{15} x_{iu}^2 = 15$. Como $\sum_{u=1} x_{iu}^2 = 10,9544$, deve-se ter uma constante 'k' tal que: $k \cdot \sum_{u=1} x_{iu}^2 = 15$ donde $k = 1,3693$ e $k^{1/2} = 1,1702$.

Desta forma, deve-se multiplicar cada coluna da matriz D_1 do delineamento Composto Central Ortogonal por 1,1702 obtendo-se:

$$D_1 = \begin{bmatrix} -1,1702 & -1,1702 & -1,1702 \\ -1,1702 & -1,1702 & 1,1702 \\ -1,1702 & 1,1702 & -1,1702 \\ 1,1702 & -1,1702 & -1,1702 \\ 1,1702 & 1,1702 & -1,1702 \\ 1,1702 & -1,1702 & 1,1702 \\ -1,1702 & 1,1702 & 1,1702 \\ 1,1702 & 1,1702 & 1,1702 \\ -1,4223 & 0 & 0 \\ 0 & -1,4223 & 0 \\ 0 & 0 & -1,4223 \\ 1,4223 & 0 & 0 \\ 0 & 1,4223 & 0 \\ 0 & 0 & 1,4223 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

onde se verificam as igualdades: $\sum_1^{15} x_{iu}^2 = 15$

$$\sum_1^{15} x_{iu} = 0$$

Para o D.C.C.O. deve-se ter $\sum_{u=1}^{29} x_{iu}^2 = 29$ e $\sum_u x_{iu} = 0$.
 Como $\sum_{iu} x_{iu}^2 = 62,8010$, a constante k deverá ser igual a 0,4618, donde
 $k^{1/2} = 0,6795$. Multiplicando-se cada coluna da matriz D_2 do delineamento por 0,6795 obtêm-se:

	x_1	x_2	x_3
	-1,3591	-1,3691	-1,3591
	1,3591	-1,3591	-1,3591
	-1,3591	1,3591	-1,3591
	1,3591	1,3591	-1,3591
	-1,3591	-1,3591	1,3591
	1,3591	-1,3591	1,3591
	-1,3591	1,3591	1,3591
	1,3591	1,3591	1,3591
	-0,6795	-0,6795	-0,6795
	0,6795	-0,6795	-0,6795
	-0,6795	0,6795	-0,6795
	0,6795	0,6795	-0,6795
$D_2 =$	-0,6795	-0,6795	0,6795
	0,6795	-0,6795	0,6795
	-0,6795	0,6795	0,6795
	0,6795	0,6795	0,6795
	0	0	0
	-2,0521	0	0
	-1,0260	0	0
	1,0260	0	0
	2,0521	0	0
	0	-2,0521	0
	0	-1,0260	0
	0	1,0260	0
	0	2,0521	0
	0	0	-2,0521
	0	0	-1,0260
	0	0	1,0260
	0	0	2,0521

onde, também, se verificam $\sum_{u=1}^{29} x_{iu}^2 = 29$ e $\sum_{u=1}^{29} x_{iu} = 0$.

Para comparar-se a eficiência entre os delineamentos precisa-se das variâncias dos parâmetros estimados e para tanto precisa-se da matriz X de cada um dos delineamentos.

Assim, tem-se:

Para o C.C.O. a matriz X passa a ser:

x_0	x_1	x_2	x_3	$(x_1^2 - c)$	$(x_2^2 - c)$	$(x_3^2 - c)$	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	
1	-1,1702	-1,1702	-1,1702	0,3694	0,3694	0,3694	1,3694	1,3694	1,3694	= x_1
1	-1,1702	-1,1702	1,1702	0,3694	0,3694	0,3694	1,3694	-1,3694	-1,3694	
1	-1,1702	1,1702	-1,1702	0,3694	0,3694	0,3694	-1,3694	1,3694	-1,3694	
1	1,1702	-1,1702	-1,1702	0,3694	0,3694	0,3694	-1,3694	-1,3694	1,3694	
1	1,1702	1,1702	-1,1702	0,3694	0,3694	0,3694	1,3694	-1,3694	-1,3694	
1	1,1702	-1,1702	1,1702	0,3694	0,3694	0,3694	-1,3694	1,3694	-1,3694	
1	-1,1702	1,1702	1,1702	0,3694	0,3694	0,3694	-1,3694	-1,3694	1,3694	
1	1,1702	1,1702	1,1702	0,3694	0,3694	0,3694	1,3694	1,3694	1,3694	
1	-1,4223	0	0	1,0229	-1	-1	0	0	0	
1	0	-1,4223	0	-1	1,0229	-1	0	0	0	
1	0	0	-1,4223	-1	-1	1,0229	0	0	0	
1	1,4223	0	0	1,0229	-1	-1	0	0	0	
1	0	1,4223	0	-1	1,0229	-1	0	0	0	
1	0	0	1,4223	-1	-1	1,0229	0	0	0	
1	0	0	0	-1	-1	-1	0	0	0	
1	0	0	0	-1	-1	-1	0	0	0	

A partir da matriz X_1 constroem-se $X_1'X_1$, não singular, e sua inversa $(X_1'X_1)^{-1}$

$$\begin{bmatrix}
 15 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & 15 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & 15 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & 15 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & 8,1843 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & 8,1843 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & & 8,1843 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & & & 15 & 0 & 0 \\
 & & & & & & & & 15 & 0 \\
 & & & & & & & & & 15
 \end{bmatrix} = X_1'X_1$$

Simétrica

$$S_1^{-1} = (X_1'X_1)^{-1} =
 \begin{bmatrix}
 0,0667 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & 0,0667 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & 0,0667 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & 0,0667 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & 0,1222 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & 0,1222 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & & 0,1222 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & & & 0,0667 & 0 & 0 \\
 & & & & & & & & 0,0667 & 0 \\
 & & & & & & & & & 0,0667
 \end{bmatrix}$$

Simétrica

Para o D.C.C.Q a matriz X passa a ser:

x_0	x_1	x_2	x_3	$(x_1^2 - c)$	$(x_2^2 - c)$	$(x_3^2 - c)$	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$
1	-1,3591	-1,3591	-1,3591	0,8471	0,8471	0,8471	1,8471	1,8471	1,8471
1	1,3591	-1,3591	-1,3591	0,8471	0,8471	0,8471	-1,8471	-1,8471	1,8471
1	-1,3591	1,3591	-1,3591	0,8471	0,8471	0,8471	-1,8471	1,8471	-1,8471
1	1,3591	1,3591	-1,3591	0,8471	0,8471	0,8471	1,8471	-1,8471	-1,8471
1	-1,3591	-1,3591	1,3591	0,8471	0,8471	0,8471	1,8471	-1,8471	-1,8471
1	1,3591	-1,3591	1,3591	0,8471	0,8471	0,8471	-1,8471	1,8471	-1,8471
1	-1,3591	1,3591	1,3591	0,8471	0,8471	0,8471	-1,8471	-1,8471	1,8471
1	1,3591	1,3591	1,3591	0,8471	0,8471	0,8471	1,8471	1,8471	1,8471
1	-0,6795	-0,6795	-0,6795	-0,5383	-0,5383	-0,5383	0,4617	0,4617	0,4617
1	-0,6795	-0,6795	0,6795	-0,5383	-0,5383	-0,5383	0,4617	-0,4617	-0,4617
1	-0,6795	0,6795	-0,6795	-0,5383	-0,5383	-0,5383	-0,4617	0,4617	-0,4617
1	0,6795	-0,6795	-0,6795	-0,5383	-0,5383	-0,5383	-0,4617	-0,4617	0,4617
1	0,6795	0,6795	-0,6795	-0,5383	-0,5383	-0,5383	0,4617	-0,4617	-0,4617
1	0,6795	-0,6795	0,6795	-0,5383	-0,5383	-0,5383	-0,4617	0,4617	-0,4617
1	-0,6795	0,6795	0,6795	-0,5383	-0,5383	-0,5383	-0,4617	-0,4617	0,4617
1	0,6795	0,6795	0,6795	-0,5383	-0,5383	-0,5383	0,4617	0,4617	0,4617
1	0	0	0	-1	-1	-1	0	0	0
1	-2,0521	0	0	3,2111	-1	-1	0	0	0
1	-1,0260	0	0	0,0527	-1	-1	0	0	0
1	1,0260	0	0	0,0527	-1	-1	0	0	0
1	2,0521	0	0	3,2111	-1	-1	0	0	0
1	0	-2,0521	0	-1	3,2111	-1	0	0	0
1	0	-1,0260	0	-1	0,0527	-1	0	0	0
1	0	1,0260	0	-1	0,0527	-1	0	0	0
1	0	2,0521	0	-1	3,2111	-1	0	0	0
1	0	0	-2,0521	-1	-1	3,2111	0	0	0
1	0	0	-1,0260	-1	-1	0,0527	0	0	0
1	0	0	1,0260	-1	-1	0,0527	0	0	0
1	0	0	2,0521	-1	-1	3,2111	0	0	0

$$\begin{bmatrix}
 29 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & 29 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & 29 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & 29 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & 37,6866 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & 37,6866 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & & 37,6866 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & & & 29 & 0 & 0 \\
 & & & & & & & & 29 & 0 \\
 & & & & & & & & & 29
 \end{bmatrix} = X_2' X_2$$

Simétrica

$$\begin{bmatrix}
 0,0345 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & 0,0345 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & 0,0345 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & 0,0345 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & 0,0265 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & 0,0265 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & & 0,0265 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & & & 0,0345 & 0 & 0 \\
 & & & & & & & & 0,0345 & 0 \\
 & & & & & & & & & 0,0345
 \end{bmatrix} = (X_2' X_2)^{-1} = S_2^{-1}$$

Simétrica

onde, em ambos os delineamentos, $c=1$ pois $\sum_{u=1}^N (x_{iu}^2 - c) = 0$, o que equivale, simplesmente, a multiplicar-se nas matrizes X originais, da das na página 28, as colunas dos termos lineares por $k^{1/2}$ e as colunas dos termos quadráticos e interações por k .

Agora, podem-se comparar as variâncias, dos parâmetros estimados, entre os delineamentos

D.C.C.O.	C.C.O.
$V(\hat{b}_i) = V(\hat{b}_{ij}) = \frac{1}{29} \sigma^2 = 0,0345\sigma^2$	$V(\hat{a}_i) = V(\hat{a}_{ij}) = \frac{1}{15} \sigma^2 = 0,0667\sigma^2$
$V(\hat{b}_{ii}) = 0,0265\sigma^2$	$V(\hat{a}_{ii}) = 0,1222\sigma^2$

A eficiência entre a variância dos parâmetros estimados b 's do D.C.C.O. e dos a 's do C.C.O. é dada dada por:

$$E \left(\frac{\text{D.C.C.O.}}{\text{C.C.O.}} \right) = \frac{(\text{Variância } a's) N_1}{(\text{Variância } b's) N_2}$$

Para os efeitos lineares e interações

$$E = \frac{(\frac{1}{15} \sigma^2)}{(\frac{1}{29} \sigma^2)} \cdot \left(\frac{15}{29} \right) = 1,00$$

e para os efeitos quadráticos

$$E = \frac{(0,1222 \sigma^2)}{0,0265 \sigma^2} \cdot \left(\frac{15}{29} \right) = \frac{1,833}{0,7685} = 2,38$$

4.2.2. Intervalos de Confiança dos Parâmetros

Admitindo-se a hipótese de que os parâmetros têm uma distribuição aproximadamente normal, os extremos de seus intervalos de confiança são calculados como se segue:

$$I.C.(a_{ij}) : \hat{a}_{ij} \pm t \sqrt{\hat{V}(\hat{a}_{ij})}$$

onde:

$\hat{a}_{ij}$ é qualquer um dos parâmetros estimados;

t é obtido da distribuição teórica de t ao nível $\alpha/2$ de probabilidade e com o número de graus de liberdade do resíduo.

Assim, serão obtidos os seguintes intervalos:

Para os parâmetros do C.C.O.,

$$\hat{a}_i \pm t_{s 0,2582} \quad (i = 0, 1, 2, 3)$$

$$\hat{a}_{ii} \pm t_{s 0,3496} \quad (i = 1, 2, 3)$$

$$\hat{a}_{ij} \pm t_{s 0,2582} \quad (i = 1, 2; j = 2, 3; i \neq j)$$

Admitindo o nível 95% de probabilidade e tomando $t = 2,78$, tem-se:

$$\hat{a}_i \pm 0,7178 \text{ s}$$

$$\hat{a}_{ii} \pm 0,9718 \text{ s}$$

$$\hat{a}_{ij} \pm 0,7178 \text{ s}$$

Para os parâmetros do D.C.C.O.

$$\hat{b}_i \pm ts \ 0,1857 \quad (i = 0, 1, 2, 3)$$

$$\hat{b}_{ii} \pm ts \ 0,1628 \quad (i = 1, 2, 3)$$

$$\hat{b}_{ij} \pm ts \ 0,1857 \quad (i = 1, 2; j = 2, 3; i \neq j)$$

Admitindo o nível 95% de probabilidade e tomando $t = 2,10$, tem-se:

$$\hat{b}_i \pm 0,3900 \text{ s}$$

$$\hat{b}_{ii} \pm 0,3418 \text{ s}$$

$$\hat{b}_{ij} \pm 0,3900 \text{ s}$$

4.2.3. Variâncias e Intervalos de Confiança das Estimativas das Produções Estimadas

No Delineamento Composto Central Ortogonal:

Observando a Matriz X_1 , dada em 4.2.1. verifica-se que os 15 tratamentos se subdividem em 3 grupos distintos, reunindo em cada um os tratamentos que apresentam a mesma expressão da variância da estimativa do Y . Os grupos são assim formados:

1º Grupo: 111, 113, 131, 311, 331, 313, 133 e 333;

2º Grupo: 122, 212, 221, 322, 232 e 223;

3º Grupo: 222.

Uma vez que já são conhecidas as estimativas das variâncias das estimativas dos parâmetros tem-se:

$$1^\circ \text{ Grupo: } V(\hat{Y}) = 0,7322 \sigma^2 \quad \text{e portanto} \quad \hat{V}(\hat{Y}) = 0,7322 s^2$$

$$2^\circ \text{ Grupo: } V(\hat{Y}) = 0,5737 \sigma^2 \quad \text{e portanto} \quad \hat{V}(\hat{Y}) = 0,5737 s^2$$

$$3^\circ \text{ Grupo: } V(\hat{Y}) = 0,4333 \sigma^2 \quad \text{e portanto} \quad \hat{V}(\hat{Y}) = 0,4333 s^2$$

Admitindo-se o nível de 95% de probabilidade e tomando $t = 2,78$, os extremos dos intervalos de confiança são:

$$1^\circ \text{ Grupo: } \hat{Y} \pm ts\sqrt{0,7322} \implies \hat{Y} \pm 2,3788 s$$

$$2^\circ \text{ Grupo: } \hat{Y} \pm ts\sqrt{0,5737} \implies \hat{Y} \pm 2,1056 s$$

$$3^\circ \text{ Grupo: } \hat{Y} \pm ts\sqrt{0,4333} \implies \hat{Y} \pm 1,8299 s$$

No Delineamento Duplo Composto Central Ortogonal:

Observa-se que os 29 tratamentos dados na Matriz X_2 se subdividem em 5 grupos distintos, assim formados;

1º Grupo: 000, 400, 040, 440, 004, 404, 044 e 444;

2º Grupo: 111, 311, 131, 331, 113, 313, 133 e 333;

3º Grupo: 222;

4º Grupo: 022, 422, 202, 242, 220 e 224;

5º Grupo: 122, 322, 212, 232, 221 e 223.

Uma vez conhecidas as estimativas das variâncias das estimativas dos parâmetros tem-se:

1º Grupo: $V(\hat{Y}) = 0,6356 \sigma^2$ e portanto $\hat{V}(\hat{Y}) = 0,6356 s^2$

2º Grupo: $V(\hat{Y}) = 0,1273 \sigma^2$ e portanto $\hat{V}(\hat{Y}) = 0,1273 s^2$

3º Grupo: $V(\hat{Y}) = 0,1140 \sigma^2$ e portanto $\hat{V}(\hat{Y}) = 0,1140 s^2$

4º Grupo: $V(\hat{Y}) = 0,5059 \sigma^2$ e portanto $\hat{V}(\hat{Y}) = 0,5059 s^2$

5º Grupo: $V(\hat{Y}) = 0,1238 \sigma^2$ e portanto $\hat{V}(\hat{Y}) = 0,1238 s^2$

Admitindo-se o nível de 95% de probabilidade e tomando-se $t = 2,10$, os extremos dos intervalos de confiança são:

$$1^{\circ} \text{ Grupo: } \hat{Y} \pm ts\sqrt{0,6356} \implies \hat{Y} \pm 1,6742 \text{ s}$$

$$2^{\circ} \text{ Grupo: } \hat{Y} \pm ts\sqrt{0,1273} \implies \hat{Y} \pm 0,7493 \text{ s}$$

$$3^{\circ} \text{ Grupo: } \hat{Y} \pm ts\sqrt{0,1140} \implies \hat{Y} \pm 0,7090 \text{ s}$$

$$4^{\circ} \text{ Grupo: } \hat{Y} \pm ts\sqrt{0,5059} \implies \hat{Y} \pm 1,4936 \text{ s}$$

$$5^{\circ} \text{ Grupo: } \hat{Y} \pm ts\sqrt{0,1238} \implies \hat{Y} \pm 0,7389 \text{ s}$$

5. CONCLUSÕES

A metodologia de superfície de resposta, através da utilização de um modelo polinomial quadrático do delineamento duplo composto central ortogonal e do delineamento composto central ortogonal, para três fatores, levou aos seguintes resultados e conclusões:

1. As estimativas de todos os coeficientes do 1º e 2º graus, encontradas pelo método dos quadrados mínimos, são independentes da estimativa do coeficiente a_0 no d.c.c.o. e do b_0 no d.d.c.c.o., correspondentes à média.
2. As variâncias das estimativas dos termos quadráticos no delineamento d.c.c.o. são menores quando comparadas ao c.c.o., segundo critérios de BOX e WILSON (1951) e de MYERS (1971). Esta propriedade é altamente vantajosa pois tais coeficientes

são diretamente responsáveis pela curvatura da função, que é responsável pela localização do ponto ótimo econômico.

3. Concluimos que o delineamento duplo composto central ortogonal com 29 pontos é mais eficiente que o composto central ortogonal, pois possibilita o estudo de três fatores com maior número de níveis e gera variâncias menores das estimativas.

6. BIBLIOGRAFIA

- BOX, G.E.P. e K.B. WILSON, 1951. On The Experimental Attainment of Optimum Conditions. Journal of The Statistical Society, Londres, B13: 1-45.
- BOX, G.E.P., 1954. Exploration and Exploitation of Response Surfaces: Some General Considerations and Examples. Biometrics 10: 16-60.
- BOX, G.E.P. e J.S. HUNTER, 1957. Multi-Factor Experimental Designs for Exploring Response Surfaces. Ann. Math. Stat. 28: 195-241.
- 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., J.P.N. JORGE e W.R. VENTURINI, 1969. Delíneamentos Experimentais Utilizáveis na Experimentação de Campo. In: REYNAERT, E. E., ed. La Investigación de Fertilidad de Suelos para la Producción en la Zona Templada. Montevideo, IICA Zona Sur. pp. 183-201.

- CONAGIN, A. e J.P.N. JORGE, 1979. Delineamento Duplo Composto Central com 29 Pontos. Bragantia, Campinas, 38: 217-235.
- CONAGIN, A., 1982-A.Delineamentos Compostos Centrais Duplos. Bragantia, Campinas, 41: 35-48.
- CONAGIN, A., 1982-B.Delineamentos Compostos Centrais Ortogonais, Rotacionais e Divisíveis em Blocos. Bragantia, Campinas, 41: 49-56.
- COSTA, R.A. da, 1977. Funções de Produção Ajustadas a Ensaios Fatoriais 3^3 de Adubação de Arroz. Piracicaba, ESALQ/USP, 80pp. (Dissertação de Mestrado).
- DIXON, W.J. e F.J. MASSEY, 1951. Introduction to Statistical Analysis. Nova York, McGraw-Hill. 370 p.
- JORGE, J.P.N., 1980. Delineamento Guadalupe para Três Fatores, Análise do Através de Modelo de Regressão Polinomial Quadrática. Piracicaba, ESALQ/USP, 56 p. (Dissertação de Mestrado).
- LIMA, A.R.C., 1980. Superfícies de Resposta em Experimentos Fatoriais 3^3 Incompletos de Adubação NPK em Mandioca. Piracicaba, ESALQ/USP, 100 p. (Dissertação de Mestrado).
- MONTEIRO, J.R.A., 1978. Comportamento de Funções de Produção em Ensaios Fatoriais 3^3 de Adubação NPK em Amendoim no Estado do Maranhão. Piracicaba, ESALQ/USP, 77pp. (Dissertação de Mestrado).
- MYERS, R.H., 1971. Response Surface Methodology. Boston Allyn And Bacon. 243 p.

- NICOLELLA, G., 1981. O Uso de Superfícies de Resposta na Interpretação de Ensaio de Adubação NPK em Plantações de Cacaú. Piracicaba, ESALQ/USP, 91 p.. (Dissertação de Mestrado).
- OLIVEIRA, L.M., 1974. Eficiência de Delineamentos para Ajustamento de Superfícies de Resposta. Piracicaba, ESALQ/USP, 61 pp. (Dissertação de Mestrado).
- PIMENTEL GOMES, F. e H. CAMPOS, 1972. The Efficiency of Factorial 3^3 Designs as Compared to a Central Composite Rotatable Design. Potash Review, Fevereiro.
- VIEIRA, S., 1970. Aspectos das Funções de Produção Ajustadas aos Ensaio Fatoriais 3^3 de Adubação. Piracicaba, ESALQ/USP, 165pp. (Tese de Doutorado).

7. APÊNDICE

Para exemplificar a aplicação da metodologia de superfície de resposta polinomial a dados provenientes de experimentos com os delineamentos composto central ortogonal (15 pontos) e o duplo composto central ortogonal (29 pontos), simulou-se um ensaio de adubação com N, P e K, em milho, cujos dados foram obtidos a partir da equação fundamental, de segundo grau, que representa uma boa produção de milho na região de Ribeirão Preto, Estado de São Paulo, onde foram estudados 50 ensaios apresentados em CAMPOS (1967).

A equação é dada por:

$$\begin{aligned}\hat{Y} = & 5.915,1 + 700,1X_1 + 106,2X_2 + 262,0X_3 \\ & - 260,2X_1^2 - 40,7X_2^2 - 79,2X_3^2 \\ & - 50,3X_1X_2 - 64,7X_1X_3 + 1,0X_2X_3\end{aligned}$$

onde X_1 , X_2 e X_3 representam N, P e K, respectivamente.

Para facilitar a ortogonalização (diagonalização da matriz) faz-se a transformação:

$$\begin{aligned}\hat{Y} = & \hat{\eta}_0 + 700,1x_1 + 106,2x_2 + 262,0x_3 \\ & - 260,2(x_1^2-1) - 40,7(x_2^2-1) - 79,2(x_3^2-1) \\ & - 50,3x_1x_2 - 64,7x_1x_3 + 1,0x_2x_3\end{aligned}$$

onde $\hat{\eta}_0 = 5.915,1 + (-260,2 - 40,7 - 79,2) = 5.535,0$

onde, finalmente a equação usada para ambos os delineamentos é:

$$\begin{aligned}\hat{Y} = & 5.535,0 + 700,1x_1 + 106,2x_2 + 262,0x_3 \\ & - 260,2(x_1^2-1) - 40,7(x_2^2-1) - 79,2(x_3^2-1) \\ & - 50,3x_1x_2 - 64,7x_1x_3 + 1,0x_2x_3\end{aligned}$$

Aos valores observados de produção, a partir dessa equação, foram adicionados erros provenientes de distribuição normal com desvio padrão $\sigma = 684,78$ kg/ha, tirados da Tabela de DIXON e MASSEY (1951). Foram simulados dados de produção, em quilogramas por hectare, tanto para o delineamento de 15 pontos como para o de 29, para uma repetição, somente.

Os dados simulados de produção, relativos à aplicação dos tratamentos especificados, foram obtidos utilizando-se a matriz X das páginas 47 e 49, e são dados a seguir:

7.1. Exemplo Aplicado ao delineamento de 15 pontos

Valor Simulado	Valor Estimado	Intervalo de Confiança
Y_j	$\hat{Y}_j$	
kg/ha	kg/ha	
4.153,387	4.593,024	(2.964,179; 6.222,089)
4.791,066	4.794,605	(3.163,760; 6.421,670)
3.787,811	4.012,805	(2.383,960; 5.641,870)
5.598,756	5.881,310	(4.252,465; 7.510,375)
6.350,499	6.317,544	(4.688,699; 7.946,609)
5.084,266	4.827,546	(3.198,701; 6.456,611)
4.990,433	4.676,387	(3.047,542; 6.305,452)
6.198,942	5.727,781	(4.098,936; 7.356,846)
4.979,845	4.681,611	(3.239,848; 6.123,594)
5.503,677	5.111,023	(3.669,260; 6.553,006)
6.034,839	5.274,272	(3.832,509; 6.716,255)
5.718,203	6.103,474	(4.661,711; 7.545,457)
4.825,853	5.305,502	(3.863,739; 6.747,485)
4.189,602	5.037,152	(3.595,389; 6.479,135)
5.532,993	5.396,137	(4.143,305; 6.649,463)
$\Sigma Y = 77.740,173$	$\Sigma \hat{Y} = 77.740,173$	

Utilizando a metodologia que se encontra em 4.1 obtemos as matrizes

$$X'Y = \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ C_1 \\ D_1 \\ E_1 \\ F_1 \\ G_1 \\ H_1 \\ I_1 \\ J_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 77.740,173 \\ 7.497,693 \\ 1.025,519 \\ -1.250,369 \\ -15,095 \\ -760,570 \\ -973,156 \\ 2.783,481 \\ -3.432,194 \\ 1.270,633 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{a}_0 \\ \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \\ \hat{a}_3 \\ \hat{a}_{11} \\ \hat{a}_{22} \\ \hat{a}_{33} \\ \hat{a}_{12} \\ \hat{a}_{13} \\ \hat{a}_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.182,679 \\ 499,846 \\ -68,368 \\ -83,358 \\ -1,845 \\ -92,942 \\ -118,920 \\ 185,565 \\ -228,813 \\ 84,709 \end{bmatrix}$$

Aplicando a análise da variância aos dados do experimento, chega-se aos resultados que se seguem:

Causas de Variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Média	1	402.902.299,80		608,059**
Efeito $\hat{a}_1$: N'	1	3.747.695,75	3747.695,75	5,66
Efeito $\hat{a}_2$: P'	1	70.112,58	70.112,58	0,11
Efeito $\hat{a}_3$: K'	1	104.228,20	104.228,20	0,16
Efeito $\hat{a}_{11}$: N''	1	27,85	27,85	0,00
Efeito $\hat{a}_{22}$: P''	1	70.688,72	70.688,72	0,11
Efeito $\hat{a}_{33}$: K''	1	115.727,33	115.727,33	0,17**
Efeito $\hat{a}_{12}$: N' x P'	1	516.517,88	516.517,88	0,78**
Efeito $\hat{a}_{13}$: N' x K'	1	785.330,00	785.330,00	1,19**
Efeito $\hat{a}_{23}$: P' x K'	1	107.633,89	107.633,89	0,16
Regressão	10	5.517.962,19	551.796,22	0,83**
Resíduo	4	2.650.416,81	662.604,20	
T o t a l	14	8.168.379,00		

$$C.V. = \frac{100 \times s}{\hat{m}} = 13,21\%$$

Com os elementos de $\hat{\beta}$, pode-se escrever a equação polinomial de superfície de resposta

$$\begin{aligned} \hat{Y} = & 5.182,678 + 499,846x_1 + 68,368x_2 - 83,358x_3 \\ & - 1,845(x_1^2-1) - 92,942(x_2^2-1) - 118,920(x_3^2-1) \\ & + 185,565x_1x_2 - 228,813x_1x_3 + 84,709x_2x_3 \end{aligned}$$

cuja equação dada nas variáveis originais é:

$$\begin{aligned}\hat{Y} = & 5.396,085 + 499,846X_1 + 68,368X_2 - 83,358X_3 \\ & - 1,845X_1^2 - 92,942X_2^2 - 118,920X_3^2 \\ & + 185,565X_1X_2 - 228,813X_1X_3 + 84,709X_2X_3\end{aligned}$$

7.2. Exemplo Aplicado ao Delineamento de 29 Pontos

Para o delineamento duplo composto central ortogonal os valores de x 's são os da tabela que se encontra na página 49.

Os dados obtidos são:

Valor Observado Y_{ijk} kg/ha	Valor Estimado $\hat{Y}_{ijk}$ kg/ha	Intervalo de Confiança
3.715,553	3.683,100	(2.536,661; 4.829,579)
5.893,431	5.553,686	(4.407,247; 6.700,165)
3.437,201	3.225,762	(2.079,323; 4.372,241)
5.634,452	5.739,382	(4.592,943; 6.885,861)
4.798,629	4.578,000	(3.431,541; 5.724,459)
5.057,016	5.272,425	(4.126,006; 6.418,924)
4.801,577	5.100,147	(3.954,708; 6.246,626)
6.164,713	6.437,645	(5.291,206; 7.584,124)
5.547,921	4.752,766	(4.239,680; 5.265,892)
5.197,900	5.175,596	(4.662,510; 5.688,722)
5.803,509	4.726,939	(4.213,849; 5.240,061)
5.352,400	5.621,354	(5.108,268; 6.134,480)
4.957,684	5.756,254	(5.243,168; 6.269,380)
4.376,154	5.750,201	(5.237,115; 6.263,327)
5.185,532	5.394,601	(4.881,515; 5.907,727)
5.983,527	6.129,938	(6.616,852; 6.643,064)
5.156,364	5.568,318	(5.082,829; 6.053,847)
2.200,766	3.196,888	(2.174,052; 4.219,764)
5.281,709	4.672,768	(4.166,804; 5.178,772)
5.967,111	5.883,678	(5.377,714; 6.389,682)
6.578,578	5.618,826	(4.595,990; 6.641,702)
5.313,493	5.640,608	(4.617,772; 6.663,484)
6.181,009	5.519,591	(5.013,627; 6.025,595)
5.830,565	5.786,778	(5.280,814; 6.292,782)
6.467,009	6.175,008	(5.152,424; 7.197,884)
3.664,099	4.375,441	(3.352,605; 5.398,317)
5.136,296	5.119,781	(4.613,817; 5.625,785)
5.621,877	5.721,122	(5.215,158; 6.227,126)
6.448,610	5.578,027	(4.555,346; 6.601,058)
$\Sigma Y = 151.754,687$	$\Sigma \hat{Y} = 151.754,687$	

As matrizes $X'Y$ e $\hat{\beta}$ são, assim, formadas:

$$X'Y = \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \\ C_2 \\ D_2 \\ E_2 \\ F_2 \\ G_2 \\ H_2 \\ I_2 \\ J_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 151.754,687 \\ 17.113,246 \\ 3.376,032 \\ 8.498,484 \\ -10.398,937 \\ 3.042,189 \\ -5.300,510 \\ 2.523,953 \\ -4.616,362 \\ 3.844,627 \end{bmatrix} \quad \hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \hat{\beta}_3 \\ \hat{\beta}_{11} \\ \hat{\beta}_{22} \\ \hat{\beta}_{33} \\ \hat{\beta}_{12} \\ \hat{\beta}_{13} \\ \hat{\beta}_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.232,920 \\ 590,112 \\ 130,208 \\ 293,051 \\ -275,572 \\ 80,618 \\ -140,464 \\ 87,033 \\ -159,185 \\ 132,573 \end{bmatrix}$$

Com os elementos de $\hat{\beta}$ pode-se escrever a equação polinomial de superfície de resposta

$$\begin{aligned} \hat{Y} = & 5.232,920 + 590,112x_1 + 130,208x_2 + 293,051x_3 \\ & - 275,572(x_1^2-1) + 80,618(x_2^2-1) - 140,464(x_3^2-1) \\ & + 87,033x_1x_2 - 159,185x_1x_3 + 132,573x_2x_3 \end{aligned}$$

e que nas variáveis originais é:

$$\begin{aligned} \hat{Y} = & 5.568,338 + 590,112X_1 + 130,208X_2 + 293,051X_3 \\ & - 270,572X_1^2 + 80,618X_2^2 - 140,464X_3^2 \\ & + 87,033X_1X_2 - 159,185X_1X_3 + 132,573X_2X_3 \end{aligned}$$

Análise de variância:

Causas de Variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F
Média	1	794.120.173,10	794.120.173,10	1.545,29**
Efeito $\hat{\delta}_1 : N'$	1	10.098.735,00	10.098.735,00	19,65**
Efeito $\hat{\delta}_2 : P'$	1	491.669,47	491.669,47	0,96*
Efeito $\hat{\delta}_3 : K'$	1	2.490.494,50	2.490.494,50	4,85**
Efeito $\hat{\delta}_{11} : N''$	1	2.865.655,00	2.865.655,00	5,58**
Efeito $\hat{\delta}_{22} : P''$	1	245.254,97	245.254,97	0,48*
Efeito $\hat{\delta}_{33} : K''$	1	744.528,69	744.528,69	1,45
Efeito $\hat{\delta}_{12} : N' \times P'$	1	219.667,00	219.667,00	0,43
Efeito $\hat{\delta}_{13} : N' \times K'$	1	734.855,19	734.855,19	1,43
Efeito $\hat{\delta}_{23} : P' \times K'$	1	509.694,78	509.694,78	0,99*
Regressão	10	18.400.554,59	1.840.055,46	3,58
Resíduo	18	9.520.141,91	513.896,77	
T o t a l	28	27.650.696,50		

$$C.V. = \frac{100 \times s}{\hat{m}} = 13,09\%$$

Foram obtidos os intervalos de confiança das estimativas dos parâmetros, dados a seguir:

Verifica-se que os intervalos obtidos no C.C.O. são de variação maior do que no D.C.C.O. mostrando assim que, os parâmetros do C.C.O. estão sujeitos a grande variação e, conseqüentemente, levando a uma estimativa de produção pouco digna de crédito, podendo inclusive ocorrer uma produção negativa nos ensaios de pouco rendimento.

Foram obtidos, também, os pontos de máximo, de mínimo e de sela das produções observadas, utilizando-se da metodologia apresentada em MYERS (1971).

Foram estudados 50 casos, que são dados a seguir:

Para o C.C.O. Pontos de Máximo, de Mínimo, de Sela e produções. 75.

	x_1	x_2	x_3		Produção φ
01	1,13735	0,61652	1,19337	M	6122,2000
02	0,37457	0,53484	0,60233	S	5853,2700
03	0,37089	-1,81151	0,84274	S	5737,7200
04	0,63048	0,52944	-1,06983	S	5442,2900
05	-1,37784	0,33735	0,88930	S	5249,3800
06	0,46187	0,18754	0,00577	S	5726,0400
07	0,50753	0,36617	-0,43544	S	5524,6700
08	0,52150	0,30333	1,61058	S	6081,2000
09	1,15082	0,49878	-0,21398	S	6306,5500
10	1,04027	0,34648	1,03168	S	5785,4000
11	0,80562	-0,62326	0,04306	S	6140,6700
12	0,59513	-0,37368	-0,00256	S	5833,7500
13	-2,47847	0,22886	0,87099	S	4657,0400
14	0,56059	-0,00432	-0,05428	S	5724,4400
15	-0,12673	3,29996	2,81427	S	6585,6500
16	0,79947	0,38719	0,70007	S	6078,0500
17	-0,08781	0,39542	-2,02925	S	5271,3400
18	1,20375	1,29939	0,44580	S	5751,7500
19	1,16851	-1,50637	2,11014	M	6107,3500
20	0,40717	1,21858	0,86600	S	5876,0600
21	-0,06353	2,87991	0,44573	S	4904,3100
22	0,78158	0,67206	-1,89798	S	5980,7800
23	1,58477	0,61307	-2,30878	S	5371,2800
24	-1,92656	-2,04189	2,32038	S	5307,9200
25	1,54889	6,16013	3,16389	M	7941,9800
26	1,17774	-0,93718	-0,41708	S	6023,9700
27	1,08826	-0,81419	0,53863	S	5996,5300
28	-1,95971	3,32628	1,76764	S	5198,5300
29	0,23204	0,02692	-0,73086	S	5411,9500
30	1,34511	0,25326	0,62602	S	6309,1600
31	0,33253	0,44763	0,49373	M	5953,6700
32	0,39057	0,50634	0,23291	S	5719,0300
33	0,75130	1,36753	-1,01796	S	6097,4200
34	1,06208	0,11526	-0,97037	S	5857,6600
35	1,36895	3,35411	-0,78173	M	6625,6600
37	6,38878	-2,25730	4,48157	M	8668,9700
38	0,48000	0,28760	-0,33000	S	5613,8500
39	0,73670	0,48699	1,84514	S	6119,9100
40	2,52170	-0,48367	0,05763	S	6109,8800
41	0,33353	1,63366	1,12913	S	5808,8200
42	2,66246	-0,59772	-0,80052	S	6730,3000
43	1,49514	0,40057	-0,08971	S	5817,1800
44	1,26103	-0,32239	-0,42866	S	5707,6200
45	1,46863	-0,86689	1,65457	M	6023,7100
46	0,43084	-0,01078	1,25021	S	5965,6500
47	0,74295	-0,10388	1,65763	S	6045,3100
48	3,12764	0,21346	0,18943	M	6567,5800
49	0,74785	-0,21949	0,21853	M	5809,3200
50	0,95459	-0,58250	-0,60493	S	5823,4100

M = ponto de máximo; m = ponto de mínimo;

S = ponto de sela

Para o D.C.C.O. Pontos de Máximo, de Mínimo, de Sela e produções.

	x_1	x_2	x_3		Produção q
01	1,13735	0,61652	1,19337	M	6122,2000
02	5,29950	9,37775	4,14193	S	8657,1500
03	0,53201	0,24278	1,52945	M	5998,4700
04	0,33562	0,69685	3,07582	S	6244,7900
05	3,63889	-0,53914	-4,08134	M	6465,7300
06	3,28983	-1,21033	-0,52187	S	6936,5700
07	1,93455	-0,10488	-1,11827	S	6207,3300
08	2,30982	0,46606	-0,40963	S	6363,7600
09	1,08710	-0,19593	0,43778	S	5514,9800
10	1,50863	-0,82288	0,92635	S	6223,8600
11	2,22454	-1,28333	1,13370	S	6755,2700
12	1,39329	0,10528	1,76465	M	5938,4000
13	1,49277	1,40977	0,87529	M	6098,2400
14	-0,02524	1,60102	1,00067	S	5768,6900
15	1,14331	-0,95484	2,01362	M	6098,6300
16	0,78784	2,91546	1,50238	M	6294,7700
17	0,21578	2,61423	-0,18293	S	5702,5900
18	2,01792	0,13745	-4,07874	S	53790400
19	0,10504	1,58649	0,57496	S	5928,9900
20	1,20677	2,09788	0,07279	M	6267,3400
21	2,71712	2,35695	-2,02664	S	6338,2100
22	0,34120	-3,13072	0,21535	S	5325,8700
23	0,86919	1,26654	1,44011	M	6155,3900
24	1,20621	-0,69314	-2,53769	S	5132,1000
25	0,87029	0,78566	-0,20335	S	5961,4700
26	0,57710	0,87139	1,43551	M	6016,4300
27	1,13525	0,79956	-0,84054	S	5532,8100
28	1,35057	-2,44081	-1,87899	S	5551,8500
29	1,16503	-0,76969	-0,50656	S	5857,9000
30	2,18306	2,44043	-0,33349	S	6129,2800
31	1,58914	-5,87609	5,05710	M	7658,5500
32	0,32214	-0,93574	1,71497	S	5782,3400
33	0,42218	1,84139	0,13140	S	6039,8200
34	0,37309	2,42340	0,88860	S	5960,1900
35	-0,32705	-2,43808	2,00757	S	5276,0200
36	0,87030	-1,75109	0,30504	S	5771,9600
37	2,18155	-1,63044	5,62491	M	6921,6900
38	0,95960	5,34633	-2,51366	M	6282,2800
39	1,12303	0,38904	0,05714	S	5870,9100
40	1,32238	0,59803	-1,08894	S	6059,4100
41	0,77368	1,74852	1,40894	S	6201,4400
42	1,39977	1,48403	1,89637	M	6707,2700
43	2,89591	1,77666	1,21227	S	6659,0300
44	1,10454	-0,03887	0,30265	M	5876,2000
45	0,70358	1,09741	0,58307	S	6001,3100
46	1,20307	2,20359	1,07000	M	6115,4300
47	1,36274	-1,87768	-0,48094	S	5901,9700
48	1,39413	0,24718	1,21860	S	6121,5100
49	1,22780	1,26978	1,97443	S	6265,4400
50	1,89679	-1,22674	0,53853	S	6365,9700

M = ponto de máximo; m = ponto de mínimo;

S = ponto de sela