DELINEAMENTO GUADALUPE PARA TRÊS FATORES, ANALISADO ATRAVÉS DE MODELO DE REGRESSÃO POLINOMIAL QUADRÁTICA

JOASSY DE PAULA NEVES JORGE

Orientador: PROF. FREDERICO PIMENTEL GOMES

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

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
Junho, 1980

ii.

*A meus PAIS,
por nos terem criado num lar feliz*

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Frederico Pimentel Gomes, Professor Catedrático do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ, pela solicitude e minucioso cuidado com que foi orientador deste trabalho.

Ao Corpo Docente do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ, pelos ensinamentos ministrados durante o curso de pós-graduação.

Ao Dr. Armando Conagin, incentivador e mestre de nosso trabalho realizado no Instituto Agronômico de Campinas.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, por colaborar em nosso desempenho profissional durante oito anos.

Aos companheiros no curso de pós-graduação, que, de colegas, se transformaram em amigos.

Aos funcionários do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ, pela colaboração prestada sempre.

Às Srtas. Maria Inês Corat e Lílilana Solha, do Instituto Agronômico de Campinas, pelo esmero com que realizaram o trabalho de datilografia e desenho.

A todos que, mesmo sem o saberem, auxiliaram a levar a termo o projeto de pós-graduação.

Í N D I C E

	Pág.
1. RESUMO	1
2. INTRODUÇÃO	3
3. REVISÃO DE LITERATURA	5
3.1. Generalidades	5
3.2. O delineamento Guadalupe	12
4. METODOLOGIA	15
4.1. Características do delineamento Guadalupe para três fa- tores	15
4.2. Metodologia de superfície de resposta	17
4.3. Modelo de regressão linear: cálculo das estimativas dos parâmetros e de suas variâncias e covariâncias; análise da variância e testes de hipótese; intervalos de confian- ça	18
4.4. Aplicação do modelo de regressão linear polinomial qua- drática ao delineamento Guadalupe com três fatores	22
5. ORTOGONALIZAÇÃO DO DELINEAMENTO GUADALUPE COM TRÊS FATORES ..	28
5.1. Generalidades	28
5.2. Aplicação de modelo de regressão polinomial quadrática, com variável reduzida	29
6. COMPARAÇÃO DE DELINEAMENTOS	35
6.1. Eficiência do delineamento Guadalupe em relação aos de- lineamentos fatorial 3x3x3 e ao composto central origi- nal	35

6.2. Eficiência do delineamento Guadalupe ortogonal em relação ao Guadalupe original, ao fatorial $3 \times 3 \times 3$ e ao composto central original	38
7. EXEMPLO DE APLICAÇÃO	40
8. CONCLUSÕES	46
8.1. Delineamento Guadalupe original para três fatores	46
8.2. Delineamento Guadalupe ortogonal para três fatores	47
9. SUMMARY	49
10. LITERATURA CITADA	51

1. RESUMO

Com R.A. Fisher iniciou-se a procura de delineamentos, tanto experimentais como de tratamentos, que possibilitassem estudo mais eficiente de respostas à variação de fatores aplicados a determinado fenômeno. Introduzidos inicialmente em ensaios agronômicos, os delineamentos adaptam-se a vários ramos de pesquisa.

Além de utilizar os ensaios fatoriais e os fatoriais fracionados, no campo da experimentação industrial estão-se desenvolvendo, desde os anos 50, os delineamentos compostos centrais e delineamentos rotacionais; eles também vêm sendo estendidos a outros campos de pesquisa.

Na presente dissertação aplicou-se a metodologia de superfície de resposta a um delineamento do tipo composto central, denominado Guadalupe, para três fatores em sete níveis equidistantes, que vão de zero a seis, num total de vinte e sete pontos experimentais. Consta de um ponto central, dezoito axiais e oito fatoriais, cujas projeções sobre os eixos estão nos extremos do intervalo. A análise utilizou um modelo de regressão polinomial quadrática, com componentes ortogonais de 1º e de 2º grau.

São dados: o cálculo das estimativas dos parâmetros do modelo, de suas variâncias e covariâncias; a análise da variância e os testes de hipótese; os intervalos de confiança para os parâmetros e as respostas esperadas. A seguir vem sua aplicação ao delineamento Guadalupe.

Em comparação com os delineamentos fatorial $3 \times 3 \times 3$ e composto central original, tradicionais em pesquisa agronômica e industrial, ele se revelou menos eficiente que o fatorial $3 \times 3 \times 3$ e mais que o composto central, para ensaios agrícolas, e mais eficiente que os dois no segundo caso, de acordo com critérios preconizados por PIMENTEL GOMES e CAMPOS (1972) e por BOX e WILSON (1951), respectivamente.

O fato de os componentes quadráticos puros estarem correlacionados levou a autora à procura de novos níveis, para cada fator, que ortogonalizassem o delineamento Guadalupe, utilizando um modelo de regressão polinomial quadrática. Os seis níveis dos pontos axiais continuaram eqüidistantes entre si e ao ponto central; mas surgiram dois outros níveis por fator, correspondentes à projeção, sobre os eixos, dos níveis dos pontos fatoriais, internos ao intervalo total.

Pelos mesmos critérios de comparação, o Guadalupe ortogonal é menos eficiente que o Guadalupe original e o fatorial $3 \times 3 \times 3$, e mais que o composto central original, em ensaios de adubação; mas é mais eficiente que os mesmos, na estimação dos componentes quadráticos puros, em pesquisa industrial ou afins.

Foi simulado um experimento de adubação com N, P e K, em milho, como exemplo da utilização do delineamento Guadalupe no campo agrônomo, com análise que aplica a metodologia usada no presente trabalho.

2. INTRODUÇÃO

Os avanços da ciência e da tecnologia se fazem utilizando experimentos sempre mais detalhados e dispendiosos. Para maior rendimento desse processo evolutivo, a colaboração da Estatística no delineamento dos experimentos e avaliação de dados da pesquisa científica tem sido eficaz e dinâmica.

Até a década de vinte a evolução maior tinha sido no desenvolvimento de métodos de análise das respostas obtidas com os tratamentos aplicados; desde então, começou-se a pesquisar também quais os modos mais eficientes para planejar a procura dessas respostas.

A partir de delineamentos de tratamentos mais complexos, que utilizam todas as combinações dos fatores em estudo, várias tentativas têm sido feitas para redução do número de pontos experimentais, através de técnicas como a de confundimento e de repetição fracionada. Outra linha de pesquisa para essa redução é a dos chamados delineamentos compostos, introduzidos inicialmente na pesquisa industrial, em ensaios sequenciais, com pequeno erro experimental, e adaptados posteriormente a outros ramos da ciência. Várias modificações têm sido propostas tendo como base os

delineamentos compostos, centrais ou não.

Desenvolveu-se, no estudo presente, a análise de um tipo de delineamento composto central, denominado Guadalupe, para três fatores, em sete níveis, através da metodologia de superfície de resposta. Foi utilizado um modelo polinomial quadrático, com polinômios ortogonais de primeiro e segundo grau, não encontrado na literatura disponível, e que elimina a correlação entre a média e os efeitos quadráticos.

É dada a seqüência de operações para a realização da análise estatística, com soluções específicas para esse delineamento. Em seguida é proposta a ortogonalização para o delineamento Guadalupe; conserva-se o mesmo número total de pontos, vinte e sete, mas passa-se a ter nove níveis para cada fator, dois deles como projeção das coordenadas dos pontos fatoriais sobre os eixos. Além disso, a eficiência dos delineamentos Guadalupe original e Guadalupe ortogonal é calculada em relação a delineamentos de uso tradicional em pesquisa nos campos agronômico e industrial.

3. REVISÃO DE LITERATURA

3.1. Generalidades

A idéia a respeito de funções de resposta remonta ao século passado; segundo revisão apresentada por MEAD e PIKE (1975), surgiu com Fechner, em 1860, no campo de próbites.

No início do século, MITSCHERLICH (1909) aplicou-a ao estudo agronômico de respostas de produção aos níveis de fertilizantes; de acordo com HEADY e DILLON (1961), ele foi, talvez, o primeiro agrônomo a sugerir uma função não linear para relacionar o insumo nutriente à produção.

Sem conhecer a equação de Mitscherlich, W.J. Spillman chegou a uma função de produção exponencial, equivalente à anterior, depois de estudar resultados de experimentos de adubação com algodão, na Carolina do Norte. Suas pesquisas são relatadas por SPILLMAN e LANG (1924).

Pelo trabalho de revisão citado, sabe-se que Winsor sugeriu, em 1932, o uso da curva de Gompertz para situações em que a razão do crescimento relativo decrescesse exponencialmente com o tempo; WISHART

(1938) aplicou funções de resposta para explicar o crescimento de animais.

Até FISHER (1926) não se discutiam quais os delineamentos mais apropriados para pesquisar as curvas e superfícies de resposta; a publicação de YATES (1935), com a exposição dos Experimentos Fatoriais, revelou o interesse na procura de delineamentos que possibilitem melhores respostas, com utilização simultânea de vários fatores.

Embora desenvolvidos na área agronômica, os experimentos fatoriais têm sido utilizados nos mais variados campos de pesquisa. COCHRAN e COX (1957, p. 177) fizeram referência a um experimento fatorial em estudos de Neurofisiologia, com ratos. COX (1958, cap. 6 e 7) deu exemplos de aplicação em indústria têxtil, em Ciências Biológicas, em Parasitologia e em Bioquímica, bem como em processos de produção de medicamentos.

Em HICKS (1973, p. 86), exemplos em pesquisa tecnológica na indústria de computadores, de televisores, de filmes, foram dados no capítulo de ensaios fatoriais. SNEDECOR e COCHRAN (1974, p. 345) apresentaram experimentos fatoriais sobre o ganho de peso de suínos. GILL (1978, vol. 2, p. 262) relatou experimento que visa a encontrar o ponto de viscosidade mínima em leite esterilizado e concentrado, armazenado durante seis meses em temperatura ambiente.

Mas é na área agronômica que se encontra a maior utilização dos delineamentos fatoriais.

No Brasil, vários grupos de experimentos de adubação com N, P e K, em diversas culturas, foram planejados como fatoriais $3 \times 3 \times 3$ ou semelhantes. STRAUSS (1951), em Pernambuco, MALAVOLTA *et alii* (1963) e ALVAREZ *et alii* (1963), em São Paulo, os utilizaram para a cana-de-açúcar. ARRUDA (1959) e MIRANDA (1966) relataram resultados de ensaios de milho.

IGUE (1968) estudou o efeito de interações em cerca de cinquenta ensaios de feijão. FUZATTO *et alii* (1970) analisaram ensaios fatoriais $3 \times 3 \times 3$ de algodão, selecionados entre um grupo de trezentos e setenta e sete, plantados em três anos.

Como, para mais de três fatores, os ensaios fatoriais requerem número muito grande de unidades experimentais, FINNEY (1945) introduziu o conceito de fatoriais fracionados; são bastante úteis, principalmente em pesquisa industrial; segundo DAVIES (1954, p. 8), o uso do fatorial completo, nesse tipo de experimentação, iria levar à avaliação de interações sem importância e a um grau de precisão desnecessário em ensaios que, pela sua natureza, já têm um erro experimental pequeno.

BOX e WILSON (1951) desenvolveram delineamentos experimentais para permitir encontrar o ponto de resposta máxima ou mínima, em ensaios com diferentes níveis de k fatores, a partir de um número de observações inferior ao anteriormente preconizado. Com esse artigo foi aberta uma nova linha de procura de delineamentos que utilizaram, originalmente, cinco níveis de cada fator. Os delineamentos propostos, denominados compostos, foram introduzidos a fim de determinar condições ótimas em pesquisas químicas; mais tarde tiveram utilização em outros campos. Constam de um núcleo representado por um fatorial 2^k , de um ou mais pontos centrais, e de pontos extras $-\alpha$ e $+\alpha$ colocados em k eixos, a partir do ponto central. O delineamento original de BOX e WILSON (1951), para três fatores, tinha um único ponto central, num total de quinze pontos. No mesmo artigo, introduziram os compostos ortogonais e os compostos com variâncias iguais para os efeitos de segunda ordem. Os delineamentos compostos foram concebidos inicialmente para serem aplicados seqüencialmente, primeiro utilizando os

pontos fatoriais e depois acrescentando os demais. Este procedimento é apresentado com detalhe em DAVIES (1954, p. 541), com um exemplo seqüencial relativo a reações químicas.

Um ensaio com aplicação do composto central no campo da Zootecnia é citado em MYERS (1971, p. 132), no qual são procuradas as condições ótimas de conservação do sêmen bovino para que atinja sobrevivência máxima.

BOX e HUNTER (1957) desenvolveram os delineamentos rotacionais, para k fatores, com a propriedade de que é constante a variância da resposta estimada em pontos equidistantes do centro; como caso particular, apresentaram os compostos centrais rotacionais, para até oito fatores; conforme o número de fatores e de pontos centrais, eles podem, ou não, vir a ser rotacionais ortogonais. Para três fatores, os centrais rotacionais ficam com vinte pontos, constituídos de um cubo nos níveis ± 1 , pontos axiais em $\pm 1,682$ para nível zero dos outros dois, e com seis pontos centrais (nível zero). COCHRAN e COX (1957, p. 349) deram exemplo de análise para um delineamento composto central rotacional com três fatores, em nutrição vegetal.

Mas é, mais uma vez, no campo agronômico de ensaios de adubação, que se tem encontrado maior número de exemplos de aplicabilidade desse tipo de delineamentos para estudo de superfícies de resposta adaptadas através de modelos polinomiais de segundo grau. Além disso, vários autores têm tentado desenvolver, para aplicar em ensaios de adubação, extensões dos delineamentos compostos centrais, com utilização ou de maior número de cubos (pontos fatoriais), ou de maior número de pontos centrais, ou de maior número de pontos axiais. O uso dessas extensões, porém, não se

restringe a esse campo.

TRAMEL (1957) sugeriu o delineamento "triplo cubo", para três fatores, com cubos de vértices nas distâncias $\pm 0,4792$, $\pm 0,9584$ e $\pm 1,4376$, de seis pontos axiais nas distâncias $\pm 1,9168$ e de um ponto central, num total de trinta e um pontos, com nove níveis para cada fator.

STAVROU e CADY (1967) introduziram uma modificação no delineamento de TRAMEL (1957), colocando em dois blocos os tratamentos de cada cubo, e repetindo os pontos axiais em cada bloco. O ponto central pode ser colocado ou não; se o for, deve-se ter um em cada bloco. Com essa modificação os autores tentaram baixar o erro experimental, sem modificar a estimação dos parâmetros do modelo quadrático, que continuaram independentes do efeito de blocos.

VOSS e PESEK (1967) propuseram um composto central aumentado, com dezenove pontos; os quatro tratamentos adicionados correspondem a meio cubo nos níveis ± 2 . Aplicaram o delineamento a ensaios de milho, no Estado de Iowa, em 1959; em 1960 conduziram novos ensaios com acréscimo de mais quatro tratamentos, para remover o efeito do confundimento existente. O delineamento ficou, então, com vinte e três pontos: dois cubos, um nos níveis ± 1 , outro em ± 2 ; seis axiais nos níveis ± 2 de cada fator, para níveis médios dos outros dois fatores, e um ponto central.

Surgiram algumas modificações desse delineamento, ainda com vinte e três pontos; para sete níveis, VANDERLIP e PESEK (1970) construíram o delineamento com um cubo nos níveis ± 3 , outro nos níveis ± 1 , pontos axiais em ± 2 , para níveis médios dos outros fatores, e um ponto central no nível zero.

CHRISTIANS *et alii* (1979) colocaram seis repetições no

ponto central do delineamento duplo cubo, ficando com cubos nos níveis -1 , $+2$, seis pontos axiais nos níveis $+3$, num total de vinte e oito pontos experimentais.

Foi proposto no México o delineamento "San Cristóbal". É um composto modificado, desenvolvido por ROJAS (1963, pp. 197 a 203) e, segundo ele, com a finalidade de incluir um tratamento testemunha. Para k fatores, consta dos vértices de um hipercubo nos níveis -1 ; de um tratamento no centro do cubo (nível zero), e k pontos em semi-eixos que partem do centro, cada um com nível 2 de um dos fatores e nível zero dos restantes. Exemplo de sua aplicação encontra-se em MARTINEZ GARZA (1978, p. 101).

Posteriormente ROJAS (1972, pp. 1085-1093) propôs o "San Cristóbal ortogonalizado"; constitui, como o original, uma família de delineamentos para qualquer número de fatores. Consta de:

- a) um número α de repetições de um fatorial 2^k nos níveis -1 e $+1$ de cada fator, sendo α uma fração $1/2^g$ ou um inteiro.
- b) um número m de repetições do centro do hipercubo, no nível zero de cada fator.
- c) pontos axiais, correspondentes a α pontos no nível $-\alpha$ e de um ponto no nível $+\alpha$ de cada fator, para nível zero dos restantes, com a restrição $0 < \alpha \leq 1$.

O número total de tratamentos diferentes é $2^k + 2k + 1$; o número de unidades experimentais, por repetição básica, é $n = \alpha 2^k + k(\alpha + 1) + m$.

DÁVILA (1979, pp. 131 a 156) deu características e gráficos de uma série de delineamentos usados em experimentos com fertilizantes. Para dois fatores, mencionou os publicados em revista do CIMMYT, designados "diamante duplo" (um fatorial 3×3 com vértices em -1 e quatro

axiais com $\alpha = \pm 1/2$; "quadrado duplo" (um fatorial 3×3 com vértices em ± 1 e um quadrado com pontos nas diagonais do fatorial); e "quadrado triplo" (um fatorial 3×3 em ± 1 e dois quadrados com vértices nas diagonais do fatorial). Entre os de três fatores, além dos já mencionados San Cristóbal, composto central rotacional e triplo cubo, citou a utilização do "monocubo", delineamento com quatorze tratamentos, em programa de adubação no México.

No Brasil, uma primeira tentativa para modificação do composto central original, de que se tem conhecimento, foi a proposta em reunião da Região Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria, em 1966 ⁽¹⁾. As características do delineamento estão especificadas em CONAGIN *et alii* (1969, pp. 183 a 201); desenvolvido inicialmente para três fatores, consta de dois cubos nos níveis ± 1 e ± 2 ; de um ponto central; e de doze pontos axiais nos níveis ± 1 e ± 2 de cada fator, para nível médio dos outros dois, num total de vinte e nove pontos.

BATISTA (1978) apresentou um novo tipo de delineamento, denominado "em círculos", que teve por base, na formulação, os princípios de utilização de maior número de níveis para cada fator, menor número de combinações entre eles e independência na estimação dos coeficientes. Consta de dois conjuntos de oito pontos às distâncias $\sqrt{2}$ e $\alpha\sqrt{2}$ do centro, e mais P pontos centrais, que abrangem nove níveis diferentes de cada fator.

Os delineamentos compostos permitem o estudo de superfície de resposta com adaptação de modelos polinomiais de segundo grau, em x ou em $\sqrt{x}$. As respostas levarão a conclusões satisfatórias se houver, den-

⁽¹⁾ Delineamento experimental duplo cubo com pontos intermediários sobre os três eixos. Mencionado em 1967, Biometrics 23: p. 879.

tro dos níveis pesquisados no ensaio, um ponto de máximo ou de mínimo, conforme a natureza do problema estudado. PIMENTEL GOMES (1969) assinalou a necessidade da caracterização desses pontos críticos, mencionando a existência de vários trabalhos com conclusões erradas por não tomarem esse cuidado; lembrou, ainda, que esse ponto crítico deve ser buscado dentro da região estudada pelo ensaio.

Na comparação entre delineamentos experimentais utilizados para obtenção de superfícies de resposta polinomiais de segundo grau, BOX e WILSON (1951) levaram em conta a precisão na estimativa dos parâmetros da função e o vício que pode surgir pela não adequação do modelo.

Considerando somente o aspecto da precisão, a comparação é feita entre as matrizes de dispersão; deve-se antes ajustá-las para o número de pontos e, se os níveis dos fatores de cada delineamento estiverem em bases diferentes de escala, eles devem ser trazidos para uma escala comum, e as conclusões vão depender da definição dessa medida. Os autores sugeriram, no artigo, que dois delineamentos a serem comparados tenham iguais os segundos momentos em relação à média; consideraram razoáveis os resultados obtidos até então por esse critério, mas que possivelmente poderia haver outras medidas mais apropriadas em certos casos.

PIMENTEL GOMES e CAMPOS (1972) propõem como melhor, em experimentos com fertilizantes, que se tenha, para escala comum, a mesma amplitude entre os níveis extremos de cada fator.

3.2. O Delineamento Guadalupe

Pouco se sabe a respeito de como surgiu o delineamento

Guadalupe; tem-se a citação, em PÁEZ e SILVA (1975), de ter sido apresentado em curso de pós-graduação em Turrialba, Costa Rica, em 1972.

Os autores mencionam que se está generalizando, em certas estações experimentais da Europa e da América Central, a tendência no sentido do uso de maior número de níveis dos fatores, para estimar a função de produção. E é dito que o Guadalupe foi desenvolvido, em parte, para satisfazer a pesquisadores da escola que preconiza: "usar maior número de níveis para descrever a superfície de resposta biológica é mais seguro que usar poucos níveis e muitas repetições espaciais".

Em seguida, PÁEZ e SILVA (1975) definem os tratamentos do delineamento, chamando-os de radiais, centrais e polares. No presente trabalho os tratamentos serão chamados, respectivamente, de axiais, centrais e fatoriais, correspondentes aos pontos sobre os eixos, aos centrais e aos vértices do hipercubo.

O total de tratamentos para k fatores em sete níveis é igual a $2^{k-f} + 6k + c$, onde $6k$ é o número de tratamentos radiais, c representa o número de repetições do tratamento central e 2^{k-f} representa a parte fatorial, que pode ser uma repetição fracionada ou o fatorial completo, dependendo de k . Para k igual a dois, três ou quatro, f é geralmente igual a zero; se o número de fatores é maior que quatro, $f=1$; à medida que k cresce, f poderá crescer para reduzir o número de tratamentos fatoriais, através da técnica do fracionamento.

São sugeridos por Páez e Silva dois modelos: um de apreciação rápida e sem cálculos matemáticos, ajustando duas retas à parte axial e central, e determinando o ponto de intersecção das retas, para cada um dos fatores; o outro se refere a uma superfície de segundo grau, uti-

lizando todos os tratamentos.

Em comunicação pessoal Páez sugeriu a realização da análise da superfície de resposta através de método padrão de regressão múltipla, usando modelo quadrático com dez parâmetros; indicou a matriz das variáveis independentes, com níveis já codificados. A matriz $X'X$ obtida mostra que somente os efeitos lineares e as interações vão ser independentes, e a média e os efeitos quadráticos irão apresentar correlações.

4. METODOLOGIA

4.1. Características do delineamento Guadalupe para três fatores

Para $k = 3$, o delineamento Guadalupe permite estudar três fatores em sete níveis. Na expressão geral $2^{k-f+6k+c}$, f é igual a zero, pois, para $k = 3$, o número 8 de pontos fatoriais é bastante razoável. Fica-se, ainda, com $6k = 18$ tratamentos axiais, $c = 1$ tratamento central, num total N de 27 pontos. O conjunto de N pontos constitui o "delineamento de tratamentos".

É dada a seguir a composição dos tratamentos, onde os fatores serão indicados por i, j, k e os níveis vão de zero a seis, independentemente das unidades originais de medida de cada fator.

Pontos Fatoriais

$i_0j_0k_0$	$i_6j_0k_0$	$i_0j_6k_0$	$i_6j_6k_0$
$i_0j_0k_6$	$i_6j_0k_6$	$i_0j_6k_6$	$i_6j_6k_6$

Ponto Central

$$i_3j_3k_3$$

Pontos Axiais

$$\begin{array}{cccccc}
 i_0 j_3 k_3 & i_1 j_3 k_3 & i_2 j_3 k_3 & i_4 j_3 k_3 & i_5 j_3 k_3 & i_6 j_3 k_3 \\
 i_3 j_0 k_3 & i_3 j_1 k_3 & i_3 j_2 k_3 & i_3 j_4 k_3 & i_3 j_5 k_3 & i_3 j_6 k_3 \\
 i_3 j_3 k_0 & i_3 j_3 k_1 & i_3 j_3 k_2 & i_3 j_3 k_4 & i_3 j_3 k_5 & i_3 j_3 k_6
 \end{array}$$

Pode-se notar que os pontos fatoriais formam um cubo que limita a região experimental, com os axiais extremos pertencentes às faces do cubo.

As coordenadas do conjunto de pontos que define o delineamento podem ser colocadas em forma de matriz, constituída por 27 linhas e 3 colunas. Em cada linha da matriz D , chamada "matriz do delineamento", estão representados os níveis x dos fatores i, j, k aplicados a uma unidade experimental.

$$D = \begin{pmatrix}
 i & j & k \\
 0 & 0 & 0 \\
 6 & 0 & 0 \\
 0 & 6 & 0 \\
 6 & 6 & 0 \\
 0 & 0 & 6 \\
 6 & 0 & 6 \\
 0 & 6 & 6 \\
 6 & 6 & 6 \\
 3 & 3 & 3 \\
 0 & 3 & 3 \\
 1 & 3 & 3 \\
 2 & 3 & 3 \\
 4 & 3 & 3 \\
 5 & 3 & 3 \\
 6 & 3 & 3 \\
 3 & 0 & 3 \\
 3 & 1 & 3 \\
 3 & 2 & 3 \\
 3 & 4 & 3 \\
 3 & 5 & 3 \\
 3 & 6 & 3 \\
 3 & 3 & 0 \\
 3 & 3 & 1 \\
 3 & 3 & 2 \\
 3 & 3 & 4 \\
 3 & 3 & 5 \\
 3 & 3 & 6
 \end{pmatrix}$$

4.2. Metodologia de superfície de resposta

A análise do delineamento Guadalupe foi feita segundo a metodologia de superfície de resposta polinomial.

Levando em conta o fato de o delineamento Guadalupe ser um tipo de composto central, criado para permitir adaptação de funções de segundo grau, o modelo escolhido para relacionar as respostas (variável y) com os níveis dos fatores (variável x) foi uma função de resposta polinomial quadrática.

Poder-se-ia ter usado o modelo comumente sugerido

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^3 b_i x_i + \sum_{i=1}^3 b_{ii} x_i^2 + \sum_{i,j} b_{ij} x_i x_j$$

onde x_i é a variável reduzida ou codificada $x_i = (X_i - \bar{X}_i) / \alpha_i$.

Pelas características do delineamento, com esse modelo os parâmetros correspondentes aos efeitos quadráticos puros não ficariam independentes da média, sendo necessária nova parametrização para que a independência acontecesse (DAVIES, 1954, p. 535).

Procurando deixar o efeito médio sempre independente, foram usados polinômios p_1 e p_2 , de 1º e de 2º grau, correspondentes aos componentes linear e quadrático, ortogonais entre si e também ao polinômio p_0 , relacionado com a média e tomado sempre como $p_0 = 1$. Então, as condições de ortogonalidade entre a média e os efeitos lineares e quadráticos dos fatores se resumem nas condições de ortogonalidade entre os polinômios p_1 e p_2 .

Usou-se o método geral de ortogonalização dos polinômios, dado de modo bastante simples em GRANDAGE (1958) e, recentemente,

em NOGUEIRA (1979). Embora para níveis eqüidistantes seja mais fácil a reparametrização, o uso dos polinômios ortogonais padroniza a seqüência de operações e uniformiza o método para encontro do valor das variáveis para qualquer modelo.

4.3. Modelo de regressão linear: cálculo das estimativas dos parâmetros e de suas variâncias e covariâncias; análise da variância e testes de hipótese; intervalos de confiança

A função de resposta, suposta polinomial e adequada, foi expressa segundo o modelo de regressão linear em $q = 10$ parâmetros b , para três fatores i, j e k , cujos v níveis eqüidistantes variam de zero a seis. A resposta em cada um dos N pontos do delineamento é dada por:

$$y_{ijk} = b_0 p_0 + b_{1i} p_{1i} + b_{1j} p_{1j} + b_{1k} p_{1k} + b_{2i} p_{2i} + b_{2j} p_{2j} + b_{2k} p_{2k} + b_{1i1j} p_{1i} p_{1j} + b_{1i1k} p_{1i} p_{1k} + b_{1j1k} p_{1j} p_{1k} + e_{ijk}$$

No modelo, y é uma variável aleatória dependente de b e de p ; os parâmetros b são desconhecidos, a serem estimados; p_1 e p_2 são polinômios ortogonais de 1º e de 2º grau, respectivamente; e é uma variável aleatória normalmente distribuída, com média zero e variância σ^2 , isto é: $e \sim N(0, \sigma^2)$.

Visto que cada um dos fatores i, j, k entra, na composição dos tratamentos, com igual número de níveis, eles são chamados genericamente de fator m quando se calculam os polinômios p_{1m} e p_{2m} .

Todo o desenvolvimento metodológico do modelo de regressão linear (nos parâmetros b) está baseado em definições, fórmulas dedu-

zidas e conceitos emitidos nos livros de ANDERSON e BANCROFT (1952, cap. 14), GRAYBILL (1961, cap. 6), SEARLE (1971, cap. 3), no artigo de BOX e WILSON (1951) e em HOFFMAN e VIEIRA (1978, cap. 4).

O modelo apresentado pode ser dado, em forma matricial, como:

$$Y = P\beta + \epsilon$$

Y é o vetor coluna, com 27 linhas, das variáveis aleatórias y_{ijk} , que são função dos níveis x através dos polinômios p_1 e p_2 .

β é o vetor coluna dos dez parâmetros b e ϵ o vetor coluna dos erros e_{ijk} , com 27 linhas; $\epsilon \sim N(0; I\sigma^2)$.

P é a "matriz das variáveis independentes", construída a partir da matriz D (27x3), do delineamento, e das funções que definem os polinômios ortogonais, com 27 linhas e 10 colunas.

O vetor β , estimado pelo método dos quadrados mínimos, apresenta a solução única

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

desde que $(P'P)$ seja não-singular, o que acontece se a característica da matriz P for igual ao número de parâmetros.

Chamando de S a matriz $(P'P)$,

$$\hat{\beta} = S^{-1}P'Y$$

A "matriz de variâncias e covariâncias de $\hat{\beta}$ ", ou "matriz de dispersão de $\hat{\beta}$ ", é dada por:

$$\text{Cov } \hat{\beta} = (P'P)^{-1}\sigma^2 = S^{-1}\sigma^2$$

A expressão mostra que as variâncias e covariâncias das estimativas dos parâmetros dependem do delineamento experimental e da fun-

ção de resposta utilizada.

Sendo $\hat{\beta} = S^{-1}P'Y$ e $E(\hat{\beta}) = \beta$, tem-se que

$$\hat{\beta} \sim N(\beta, S^{-1}\sigma^2)$$

Geralmente se considera estimativa não-viciada de σ^2 a expressão

$$s^2 = \frac{1}{N-q} \left\{ Y'Y - \hat{\beta}'P'Y \right\},$$

que corresponde ao quadrado médio do erro, uma vez que $Y'Y$ é a soma de quadrados total (SQ Total) e $\hat{\beta}'P'Y$ é a redução, na soma de quadrados, devida à adaptação do modelo de regressão linear (SQ Reg.).

Com os elementos já mencionados, pode-se construir o quadro da análise da variância e realizar um teste global para os parâmetros do modelo. Quando há componentes ortogonais a SQ Regressão fica subdividida em parcelas correspondentes; os testes F são feitos com os graus de liberdade respectivos. No modelo, a média é sempre ortogonal aos outros componentes.

F.V.	S.Q.	G.L.	Q.M.
Regressão (q=10)	$\hat{\beta}'P'Y$	(10)	
Média	$\hat{b}_0^A$	1	
Regressão (q-1)	$\hat{b}_{1i}^B + \hat{b}_{1j}^C + \dots + \hat{b}_{1j1k}^J$	9	
Erro	$Y'Y - \hat{\beta}'P'Y$	17	s^2
Total	$Y'Y$	27	

Se se quiser testar se um parâmetro genérico b (exceto o correspondente à média e os ortogonais a todos os restantes) pode ser

considerado igual a zero, usa-se o método do resíduo condicional, devido a Fisher, e bastante detalhado em GRAYBILL (1961, pp. 133-140).

O vetor das estimativas dos valores esperados de y_{ijk} , indicado por $\hat{Y}$, é dado por:

$$\hat{Y} = P \hat{\beta} \quad .$$

Chamando de P'_{ijk} o vetor linha com 10 colunas, cujos elementos correspondem à linha da matriz P relativa a uma determinada combinação dos fatores i, j, k ,

$$\hat{y}_{ijk} = P'_{ijk} \hat{\beta}$$

e a variância de cada $\hat{y}_{ijk}$ é da forma

$$\text{Var}(\hat{y}_{ijk}) = P'_{ijk} S^{-1} P_{ijk} \sigma^2 \quad .$$

Foi visto que $\hat{\beta} \sim N(\beta; S^{-1}\sigma^2)$; logo, cada um dos $\hat{b} \sim N(b; d\sigma^2)$, onde d designa o elemento da diagonal de S^{-1} correspondente ao parâmetro genérico b . Sabe-se, também, que $\hat{\beta}$ e s^2 são independentes e, em consequência, $\hat{\beta}$ e $(N-q)s^2/\sigma^2$ também o são. Portanto, havendo interesse, o intervalo de confiança de b , com coeficiente de confiança $1-\alpha$, e t com $N-q$ graus de liberdade, pode ser calculado como segue:

$$\hat{b} - t_{\alpha/2} s \sqrt{d} \leq b \leq \hat{b} + t_{\alpha/2} s \sqrt{d} \quad .$$

Como $\hat{y}_{ijk} \sim N(P'_{ijk}\beta; P'_{ijk}S^{-1}P_{ijk}\sigma^2)$, o intervalo de confiança de y_{ijk} , com coeficiente de confiança $1-\alpha$, e t com $N-q$ graus de liberdade, pode ser calculado por:

$$\hat{y}_{ijk} - t_{\alpha/2} s \sqrt{P'_{ijk}S^{-1}P_{ijk}} \leq y_{ijk} \leq \hat{y}_{ijk} + t_{\alpha/2} s \sqrt{P'_{ijk}S^{-1}P_{ijk}} \quad .$$

4.4. Aplicação do modelo de regressão linear polinomial quadrática ao delineamento Guadalupe com três fatores

No modelo de regressão linear polinomial em dez parâmetros, expresso no item anterior, os polinômios p_{1m} e p_{2m} , de primeiro e de segundo grau, são da forma geral

$$p_{1m} = \alpha_1 + x_m \quad \text{e} \quad p_{2m} = \alpha_2 + \gamma_2 x_m + x_m^2 \quad .$$

A partir das coordenadas x dos pontos do delineamento, dadas na matriz D , tem-se a expressão dos polinômios p_{1m} e p_{2m} para os 27 pontos.

Impostas as condições de ortogonalidade entre os vetores cujos elementos são os 27 polinômios de 1º e 2º grau, respectivamente, $(\sum p_{1m} = 0; \sum p_{2m} = 0; \sum p_{1m} p_{2m} = 0)$ chega-se ao sistema

$$\begin{cases} 27 \alpha_1 + 81 & = 0 \\ 27 \alpha_2 + 81 \gamma_2 + 343 & = 0 \\ 100 \gamma_2 + 600 & = 0 \end{cases}$$

cuja solução resulta nas expressões

$$p_{1m} = -3 + x_m \quad , \quad p_{2m} = 5,29629 - 6 x_m + x_m^2 \quad .$$

Obtidos p_{1m} e p_{2m} , segue-se imediatamente a construção de P , matriz das variáveis independentes; para melhor ajuste das condições de ortogonalidade, os valores positivos encontrados para p_{2m} foram aproximados até a quarta casa decimal.

Coord. Pont.	p_0	p_{1i}	p_{1j}	p_{1k}	p_{2i}	p_{2j}	p_{2k}	p_{1i1j}	p_{1i1k}	p_{1j1k}
000	1	-3	-3	-3	5,29630	5,29630	5,29630	9	9	9
600	1	3	-3	-3	5,29630	5,29630	5,29630	-9	-9	9
060	1	-3	3	-3	5,29630	5,29630	5,29630	-9	9	-9
660	1	3	3	-3	5,29630	5,29630	5,29630	9	-9	-9
006	1	-3	-3	3	5,29630	5,29630	5,29630	9	-9	-9
606	1	3	-3	3	5,29630	5,29630	5,29630	-9	9	-9
066	1	-3	3	3	5,29630	5,29630	5,29630	-9	-9	9
666	1	3	3	3	5,29630	5,29630	5,29630	9	9	9
033	1	-3	0	0	5,29630	-3,70371	-3,70371	0	0	0
133	1	-2	0	0	0,29630	-3,70371	-3,70371	0	0	0
233	1	-1	0	0	-2,70371	-3,70371	-3,70371	0	0	0
433	1	1	0	0	-2,70371	-3,70371	-3,70371	0	0	0
533	$P=$ 1	2	0	0	0,29630	-3,70371	-3,70371	0	0	0
633	1	3	0	0	5,29630	-3,70371	-3,70371	0	0	0
303	1	0	-3	0	-3,70371	5,29630	-3,70371	0	0	0
313	1	0	-2	0	-3,70371	0,29630	-3,70371	0	0	0
323	1	0	-1	0	-3,70371	-2,70371	-3,70371	0	0	0
343	1	0	1	0	-3,70371	-2,70371	-3,70371	0	0	0
353	1	0	2	0	-3,70371	0,29630	-3,70371	0	0	0
363	1	0	3	0	-3,70371	5,29630	-3,70371	0	0	0
330	1	0	0	-3	-3,70371	-3,70371	5,29630	0	0	0
331	1	0	0	-2	-3,70371	-3,70371	0,29630	0	0	0
332	1	0	0	-1	-3,70371	-3,70371	-2,70371	0	0	0
334	1	0	0	1	-3,70371	-3,70371	-2,70371	0	0	0
335	1	0	0	2	-3,70371	-3,70371	0,29630	0	0	0
336	1	0	0	3	-3,70371	-3,70371	5,29630	0	0	0
333	1	0	0	0	-3,70371	-3,70371	-3,70371	0	0	0

As linhas da matriz P são indicadas pelo vetor P'_{ijk} , com dez colunas; as colunas da matriz, pelo vetor indicado genericamente por P_b , constituído de 27 linhas.

Com P se obtêm $S = [P'P]$ e S^{-1} , transcritas a seguir.

Para a estimação do vetor β deve-se construir ainda o vetor coluna $P'Y$, com dez elementos $A, B, \dots, J$ que têm as expressões que se seguem:

$$A = P'_{b_0} Y = \sum Y_{ijk}$$

$$B = P'_{b_{1i}} Y \quad E = P'_{b_{2i}} Y \quad I = P'_{b_{1i1j}} Y$$

$$C = P'_{b_{1j}} Y \quad F = P'_{b_{2j}} Y \quad J = P'_{b_{1i1k}} Y$$

$$D = P'_{b_{1k}} Y \quad G = P'_{b_{2k}} Y \quad K = P'_{b_{1j1k}} Y \quad .$$

$\hat{\beta} = S^{-1}P'Y$ tem como estimativas:

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_{1i} \\ \hat{\beta}_{1j} \\ \hat{\beta}_{1k} \\ \hat{\beta}_{2i} \\ \hat{\beta}_{2j} \\ \hat{\beta}_{2k} \\ \hat{\beta}_{1i1j} \\ \hat{\beta}_{1i1k} \\ \hat{\beta}_{1j1k} \end{bmatrix} = 10^{-3} \begin{bmatrix} 37,037037A \\ 10B \\ 10C \\ 10D \\ Q=(+3,725327E -1,376703F -1,376703G) \\ R=(-1,376703E +3,725327F -1,376703G) \\ U=(-1,376703E -1,376703F +3,725327G) \\ 1,543200H \\ 1,543200I \\ 1,543200J \end{bmatrix}$$

As variâncias e covariâncias dos elementos de $\hat{\beta}$, que se encontram, respectivamente, sobre e fora da diagonal de $S^{-1}\sigma^2$, vêm em seguida:

$$\begin{aligned}
\text{Var } \hat{b}_0 &= 0,037037 \sigma^2 \\
\text{Var } \hat{b}_{1i} &= \text{Var } \hat{b}_{1j} = \text{Var } \hat{b}_{1k} = 0,010000 \sigma^2 \\
\text{Var } \hat{b}_{2i} &= \text{Var } \hat{b}_{2j} = \text{Var } \hat{b}_{2k} = 0,003725 \sigma^2 \\
\text{Var } \hat{b}_{1i1j} &= \text{Var } \hat{b}_{1i1k} = \text{Var } \hat{b}_{1j1k} = 0,001543 \sigma^2 \\
\text{Cov } (\hat{b}_{2i}, \hat{b}_{2j}) &= \text{Cov } (\hat{b}_{2i}, \hat{b}_{2k}) = \text{Cov } (\hat{b}_{2j}, \hat{b}_{2k}) = -0,001376 \sigma^2 .
\end{aligned}$$

A variância dos valores estimados tem por expressão:

$$\text{Var } (\hat{y}_{ijk}) = \left\{ \begin{aligned} &0,037037 p_0^2 + 0,010000 (p_{1i}^2 + p_{1j}^2 + p_{1k}^2) + \\ &+ 0,003725 (p_{2i}^2 + p_{2j}^2 + p_{2k}^2) + \\ &+ 0,001543 [(p_{1i}p_{1j})^2 + (p_{1i}p_{1k})^2 + (p_{1j}p_{1k})^2] - \\ &- 0,002753 (p_{2i}p_{2j} + p_{2i}p_{2k} + p_{2j}p_{2k}) \end{aligned} \right\} \sigma^2$$

Realizados os cálculos, as variâncias são as seguintes:

- a) pontos fatoriais : $0,7638 \sigma^2$
- b) ponto central : $0,0770 \sigma^2$
- c) pontos axiais simétricos, a partir dos extremos para o centro do delineamento : $0,4040 \sigma^2$, $0,1478 \sigma^2$ e $0,0836 \sigma^2$.

A disposição dos elementos da matriz S^{-1} mostra quais são os componentes ortogonais na soma de quadrados da regressão, dada por $\hat{\beta}'P'Y$. O quadro da análise da variância apresenta a decomposição dessa soma de quadrados, no caso de uma só repetição.

Por esse quadro, dado na próxima página, vê-se que os componentes quadráticos puros são correlacionados.

Os componentes lineares e os correspondentes às interações são testados individualmente, tomando-se F com 1 e 17 graus de liberdade.

F.V.	S.Q.	G.L.	Q.M.
Regressão	$\hat{\beta}'P'Y$	(10)	
$\hat{\delta}_0^A$ (média)	$0,037037A^2$	1	$0,037037A^2$
$\hat{\delta}_{1i}^B$	$0,010000B^2$	1	$0,010000B^2$
$\hat{\delta}_{1j}^C$	$0,010000C^2$	1	$0,010000C^2$
$\hat{\delta}_{1k}^D$	$0,010000D^2$	1	$0,010000D^2$
$\hat{\delta}_{2i}^E + \hat{\delta}_{2j}^F + \hat{\delta}_{2k}^G$	$10^{-3}(QE+RF+UG)$	3	$10^{-3}(QE+RF+UG) \div 3$
$\hat{\delta}_{1i1j}^H$	$0,001543H^2$	1	$0,001543H^2$
$\hat{\delta}_{1i1k}^I$	$0,001543I^2$	1	$0,001543I^2$
$\hat{\delta}_{1j1k}^J$	$0,001543J^2$	1	$0,001543J^2$
Erro	$Y'Y - \hat{\beta}'P'Y$	17	$(Y'Y - \hat{\beta}'P'Y) \div 17$
Total	$Y'Y$	27	

Como os componentes quadráticos puros são de grande interesse na caracterização da superfície de resposta e na análise econômica dos resultados, usa-se o método do resíduo condicional para testá-los individualmente.

É dada a inversa da matriz $S_q(2 \times 2)$, necessária para o cálculo da soma de quadrados, correspondente a cada componente quadrático, ajustada para os outros dois.

$$S_q^{-1} = 10^{-3} \begin{bmatrix} 3,216563 & -1,885467 \\ -1,885467 & 3,216563 \end{bmatrix}$$

5. ORTOGONALIZAÇÃO DO DELINEAMENTO GUADALUPE COM TRÊS FATORES

5.1. Generalidades

O delineamento Guadalupe, conforme foi proposto, tem os componentes quadráticos puros não independentes e a grandeza entre as covariâncias existentes representa cerca de um terço da grandeza de suas variâncias.

A fim de permitir a estimação independente de todos os componentes do modelo polinomial quadrático é realizada a ortogonalização da matriz S . Para isso devem-se anular os elementos de S relativos aos produtos dos vetores correspondentes a $p_{2i}p_{2j}$, $p_{2i}p_{2k}$ e $p_{2j}p_{2k}$.

Foram conservados os níveis zero e seis dos pontos fatoriais e o nível três do ponto central; introduziu-se um fator multiplicativo α nos níveis dos pontos axiais, tendo-se mantido a distância relativa entre eles. Esse fator multiplicativo α possibilita a anulação dos elementos desejados, em S .

Com a introdução do fator multiplicativo α , não se con-

seguiu solução satisfatória, para a ortogonalização do delineamento, através do modelo com os polinômicos p_{1m} e p_{2m} .

5.2. Aplicação de modelo de regressão polinomial quadrática, com variável reduzida

Utilizou-se o modelo geral sugerido em BOX e WILSON (1951, p. 36), em que a variável genérica x_m é agora uma variável reduzida e os componentes quadráticos puros ficam ortogonais à média através de uma reparametrização.

$$y_{ijk} = b'_0 + b_{1i}x_i + b_{1j}x_j + b_{1k}x_k + b_{2i}(x_i^2 - \Sigma x_i^2/N) + b_{2j}(x_j^2 - \Sigma x_j^2/N) + b_{2k}(x_k^2 - \Sigma x_k^2/N) + b_{1i1j}x_i x_j + b_{1i1k}x_i x_k + b_{1j1k}x_j x_k + e_{ijk} ,$$

$$\text{onde } b'_0 = b_0 + (\Sigma x_m^2/N)(b_{2i} + b_{2j} + b_{2k}) .$$

Em termos da variável reduzida x_m , os pontos fatoriais têm coordenadas ± 3 , o ponto central tem coordenada zero e os axiais, conforme definido, correspondem a $\pm \alpha$, $\pm 2\alpha$ e $\pm 3\alpha$.

Colocando em forma de matriz, obtém-se:

$$Y = X\beta + \varepsilon .$$

Pelas características do delineamento e do modelo, a matriz $[X'X]$, não-singular, tem os elementos fora da diagonal principal iguais a zero, com exceção dos relativos aos produtos W dos termos quadráticos puros.

Tendo-se que $(\Sigma x_m^2/N) = (72 + 28\alpha^2)/27$, os valores de

$(x_m^2 - \Sigma x_m^2/N)$ são dados a seguir:

a) 8 pontos fatoriais	:	$(171-28\alpha^2)/27$
b) 13 pontos com uma coordenada zero	:	$(-72-28\alpha^2)/27$
c) 2 axiais $+\alpha$	:	$(-72-\alpha^2)/27$
d) 2 axiais $+2\alpha$	:	$(-72+80\alpha^2)/27$
e) 2 axiais $+3\alpha$	:	$(-72+215\alpha^2)/27$

Efetuada os produtos correspondentes aos componentes b_{2i} e b_{2j} , b_{2i} e b_{2k} , b_{2j} e b_{2k} , chega-se à expressão

$$W = (216/729)(-98\alpha^4 - 504\alpha^2 + 1539) ,$$

que deve ser tornada igual a zero.

Resolvendo a equação, chega-se ao valor $\alpha = \sqrt{2,1526}$. Os pontos axiais do delineamento Guadalupe ortogonal estão, portanto, localizados nas distâncias aproximadas $\pm 1,467$; $\pm 2,934$ e $\pm 4,402$; os pontos fatoriais mantêm as coordenadas ± 3 . Para efeitos práticos, dependendo do campo de aplicação do delineamento, os níveis $\pm 2,934$ e ± 3 podem ser considerados iguais.

O Guadalupe ortogonal, com o mesmo número total de pontos que o original, passou a ter nove níveis em vez de sete; dois deles correspondem à projeção, sobre os eixos, das coordenadas dos pontos fatoriais. Mudando a origem dos valores dos níveis, os pontos fatoriais têm coordenadas em 1,402 e 7,402; o ponto central em 4,402; e os pontos axiais em 0 e 8,804; 1,468 e 7,336; e 2,935 e 5,869.

Segue a matriz X .

$$X = \begin{pmatrix} x_0 & x_i & x_j & x_k & (x_i^2 - \Sigma x_i^2/N) & (x_j^2 - \Sigma x_j^2/N) & (x_k^2 - \Sigma x_k^2/N) & x_i x_j & x_i x_k & x_j x_k \end{pmatrix}$$

1	-3	-3	-3	4, 101	4, 101	4, 101	9	9	9
1	3	-3	-3	4, 101	4, 101	4, 101	-9	-9	9
1	-3	3	-3	4, 101	4, 101	4, 101	-9	9	-9
1	3	3	-3	4, 101	4, 101	4, 101	-9	-9	-9
1	-3	-3	3	4, 101	4, 101	4, 101	9	-9	-9
1	3	-3	3	4, 101	4, 101	4, 101	-9	9	-9
1	-3	3	3	4, 101	4, 101	4, 101	-9	-9	9
1	3	3	3	4, 101	4, 101	4, 101	9	9	9
1	-4, 402	0	0	14, 474	-4, 899	-4, 899	0	0	0
1	-2, 934	0	0	3, 711	-4, 899	-4, 899	0	0	0
1	-1, 467	0	0	-2, 746	-4, 899	-4, 899	0	0	0
1	1, 467	0	0	-2, 746	-4, 899	-4, 899	0	0	0
1	2, 934	0	0	3, 711	-4, 899	-4, 899	0	0	0
1	4, 402	0	0	14, 474	-4, 899	-4, 899	0	0	0
1	0	-4, 402	0	-4, 899	14, 474	-4, 899	0	0	0
1	0	-2, 934	0	-4, 899	3, 711	-4, 899	0	0	0
1	0	-1, 467	0	-4, 899	-2, 746	-4, 899	0	0	0
1	0	1, 467	0	-4, 899	-2, 746	-4, 899	0	0	0
1	0	2, 934	0	-4, 899	3, 711	-4, 899	0	0	0
1	0	4, 402	0	-4, 899	14, 474	-4, 899	0	0	0
1	0	0	-4, 402	-4, 899	-4, 899	14, 474	0	0	0
1	0	0	-2, 934	-4, 899	-4, 899	3, 711	0	0	0
1	0	0	-1, 467	-4, 899	-4, 899	-2, 746	0	0	0
1	0	0	1, 467	-4, 899	-4, 899	-2, 746	0	0	0
1	0	0	2, 934	-4, 899	3, 711	-4, 899	0	0	0
1	0	0	4, 402	-4, 899	14, 474	-4, 899	0	0	0
1	0	0	0	-4, 899	-4, 899	14, 474	0	0	0
1	0	0	0	-4, 899	-4, 899	3, 711	0	0	0
1	0	0	0	-4, 899	-4, 899	-2, 746	0	0	0
1	0	0	0	-4, 899	-4, 899	-2, 746	0	0	0
1	0	0	0	-4, 899	-4, 899	3, 711	0	0	0
1	0	0	0	-4, 899	-4, 899	14, 474	0	0	0
1	0	0	0	-4, 899	-4, 899	-4, 899	0	0	0

X =

O vetor $\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y$ é expresso por:

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}'_0 \\ \hat{\beta}_{1i} \\ \hat{\beta}_{1j} \\ \hat{\beta}_{1k} \\ \hat{\beta}_{2i} \\ \hat{\beta}_{2j} \\ \hat{\beta}_{2k} \\ \hat{\beta}_{1i1j} \\ \hat{\beta}_{1i1k} \\ \hat{\beta}_{1j1k} \end{bmatrix} = 10^{-6} \begin{bmatrix} 37037 \text{ A} \\ 7560 \text{ B} \\ 7560 \text{ C} \\ 7560 \text{ D} \\ 1101 \text{ E} \\ 1101 \text{ F} \\ 1101 \text{ G} \\ 1543 \text{ I} \\ 1543 \text{ J} \\ 1543 \text{ K} \end{bmatrix}$$

onde

$$A = X'_{b_0} Y$$

$$B = X'_{b_{1i}} Y$$

$$E = X'_{b_{2i}} Y$$

$$H = X'_{b_{1i1j}} Y$$

$$C = X'_{b_{1j}} Y$$

$$F = X'_{b_{2j}} Y$$

$$I = X'_{b_{1i1k}} Y$$

$$D = X'_{b_{1k}} Y$$

$$G = X'_{b_{2k}} Y$$

$$J = X'_{b_{1j1k}} Y$$

.

As variâncias dos elementos de $\hat{\beta}$, dadas pelos elementos correspondentes em $(X'X)^{-1} \sigma^2$, são as que se seguem:

$$\text{Var } \hat{\beta}'_0 = 0,037037 \sigma^2$$

$$\text{Var } \hat{\beta}_{1i} = \text{Var } \hat{\beta}_{1j} = \text{Var } \hat{\beta}_{1k} = 0,007560 \sigma^2$$

$$\text{Var } \hat{\beta}_{2i} = \text{Var } \hat{\beta}_{2j} = \text{Var } \hat{\beta}_{2k} = 0,001101 \sigma^2$$

$$\text{Var } \hat{\beta}_{1i1j} = \text{Var } \hat{\beta}_{1i1k} = \text{Var } \hat{\beta}_{1j1k} = 0,001543 \sigma^2$$

Os valores observados têm por variância:

a) pontos fatoriais : $0,6716 \sigma^2$

b) ponto central : $0,1163 \sigma^2$

c) pontos axiais simétricos, a partir dos extremos para o centro do delineamento : $0,4670 \sigma^2$; $0,1701 \sigma^2$; $0,1144 \sigma^2$.

No quadro da análise da variância, a SQ Regressão fica subdividida em dez parcelas independentes.

6. COMPARAÇÃO DE DELINEAMENTOS

6.1. Eficiência do delineamento Guadalupe em relação aos delineamentos fatorial $3 \times 3 \times 3$ e ao composto central original

A comparação do delineamento Guadalupe é feita, no presente trabalho, em primeiro lugar em relação ao fatorial $3 \times 3 \times 3$, tendo em vista ser ele um delineamento clássico em pesquisa no campo agrônomo, para o qual o Guadalupe foi originalmente proposto. Além disso, o fato de terem ambos o mesmo número de pontos experimentais torna de grande interesse prático a comparação.

Pelo critério de PIMENTEL GOMES e CAMPOS (1972), aplicado a ensaios de adubação, o delineamento Guadalupe deve ter seus níveis trazidos para a mesma amplitude dos níveis do fatorial; eles, que vão de -3 a +3, em variáveis reduzidas, devem ser divididos por 3 para serem comparáveis aos do fatorial, cuja amplitude vai de -1 a +1. Nesse caso, a variância da estimativa dos coeficientes lineares $\hat{\delta}_{1m}$ ficará multiplicada por 9 e a dos quadráticos puros $\hat{\delta}_{2m}$ e dos relativos às interações, representados todos por $\hat{\delta}_{1i1j}$, será multiplicada por 81.

Para o delineamento Guadalupe,

$$V(\hat{\epsilon}_{1m}) = 0,010000\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{2m}) = 0,003725\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{1i1j}) = 0,001543\sigma^2 \quad (1)$$

No fatorial 3x3x3,

$$V(\hat{\epsilon}_{1m}) = 0,055556\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{2m}) = 0,166667\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{1i1j}) = 0,083333\sigma^2 \quad (2)$$

Aplicando o ajuste, as variâncias do Guadalupe se tornam:

$$V(\hat{\epsilon}_{1m}) = 0,090000\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{2m}) = 0,301725\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{1i1j}) = 0,124983\sigma^2 .$$

Isto mostra que o fatorial 3x3x3 é mais eficiente que o delineamento Guadalupe, para ensaios com fertilizantes.

Sendo um tipo de delineamento composto central, o Guadalupe foi também comparado ao composto central original, com quinze tratamentos, cujas variâncias são as que se seguem:

$$V(\hat{\epsilon}_{1m}) = 0,062500\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{2m}) = 0,090277\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{1i1j}) = 0,125000\sigma^2 \quad (3)$$

Usando o critério de Pimentel Gomes e Campos, após correção para número de tratamentos e para escala, as variâncias dos estimadores dos componentes, no delineamento Guadalupe, em relação ao composto central, se transformam em:

$$V(\hat{\epsilon}_{1m}) = 0,040500\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{2m}) = 0,033942\sigma^2 ; V(\hat{\epsilon}_{1i1j}) = 0,014059\sigma^2 .$$

Em ensaios de adubação o Guadalupe apresenta-se, assim, mais eficiente que o composto central original.

Pelo critério de BOX e WILSON (1951), a variância das estimativas dos parâmetros deve ser corrigida para número de pontos do delineamento, quando necessário, e para escala, através do segundo momento em relação à média. Isto vai corresponder a que as variâncias de $\hat{\epsilon}_{1m}$ se-

jam multiplicadas pelo valor desse segundo momento, e as variâncias das estimativas dos quadráticos, puros ou não, sejam multiplicadas pelo quadrado desse valor.

No delineamento Guadalupe, corrigido para escala, têm-se as variâncias:

$$V(\hat{b}_{1m}) = 0,037037\sigma^2 ; V(\hat{b}_{2m}) = 0,051097\sigma^2 ; V(\hat{b}_{1i1j}) = 0,021166\sigma^2 \quad (1')$$

Para o fatorial 3x3x3 com o ajustamento, as variâncias se tornam:

$$V(\hat{b}_{1m}) = 0,037037\sigma^2 ; V(\hat{b}_{2m}) = 0,074074\sigma^2 ; V(\hat{b}_{1i1j}) = 0,037037\sigma^2 \quad (2')$$

Portanto, na área de ensaios industriais, para os quais, segundo Box e Wilson, o critério havia apresentado resultados razoáveis, o Guadalupe se mostra mais eficiente que o fatorial 3x3x3.

Corrigindo pela medida proposta por Box e Wilson, as variâncias, no composto central, são dadas por:

$$V(\hat{b}_{1m}) = 0,066667\sigma^2 ; V(\hat{b}_{2m}) = 0,102715\sigma^2 ; V(\hat{b}_{1i1j}) = 0,142222\sigma^2 \quad (3')$$

As no Guadalupe, já corrigidas para medida em (1') e agora também para número, em relação ao composto central, vêm a seguir:

$$V(\hat{b}_{1m}) = 0,066667\sigma^2 ; V(\hat{b}_{2m}) = 0,091962\sigma^2 ; V(\hat{b}_{1i1j}) = 0,038097\sigma^2$$

Comparando-as, vê-se que o delineamento Guadalupe é mais eficiente que o composto central original, para utilização em experimentos no campo industrial ou afins.

6.2. Eficiência do delineamento Guadalupe ortogonal em relação ao Guadalupe original, ao fatorial 3x3x3 e ao composto central original

O delineamento Guadalupe ortogonal tem as seguintes variâncias das estimativas dos parâmetros lineares e quadráticos:

$$V(\hat{b}_{1m}) = 0,007560\sigma^2 ; V(\hat{b}_{2m}) = 0,001101\sigma^2 ; V(\hat{b}_{1i1j}) = 0,001543\sigma^2 \quad (4)$$

A fim de compará-lo, pelo critério de PIMENTEL GOMES e CAMPOS (1972), aos delineamentos mencionados, as variâncias, corrigidas para medida e, se for o caso, para número de pontos, vêm a seguir.

Para comparação com o Guadalupe original, com variâncias em (1), as coordenadas dos pontos do Guadalupe ortogonal devem ser divididas por 1,4673; portanto, as variâncias são multiplicadas por 2,1530 ; 4,6353 e 4,6353, respectivamente.

$$V(\hat{b}_{1m}) = 0,016276\sigma^2 ; V(\hat{b}_{2m}) = 0,005103\sigma^2 ; V(\hat{b}_{1i1j}) = 0,007152\sigma^2 .$$

O Guadalupe ortogonal é, assim, menos eficiente que o Guadalupe original, para ensaios de adubação.

As coordenadas do Guadalupe ortogonal devem ser divididas por 4,402 para o delineamento ser comparado com o fatorial 3x3x3, cujas variâncias estão em (2). As variâncias do Guadalupe ortogonal se tornam:

$$V(\hat{b}_{1m}) = 0,146494\sigma^2 ; V(\hat{b}_{2m}) = 0,413415\sigma^2 ; V(\hat{b}_{1i1j}) = 0,579383\sigma^2 .$$

O Guadalupe ortogonal é, portanto, menos eficiente que o fatorial 3x3x3, para o mesmo tipo de ensaios.

Feitas as correções para escala e número de tratamentos, as variâncias no Guadalupe ortogonal, para serem comparadas com as do

composto central, dadas em (3), são as seguintes:

$$V(\hat{\beta}_{1m}) = 0,065921\sigma^2 ; V(\hat{\beta}_{2m}) = 0,046508\sigma^2 ; V(\hat{\beta}_{1i1j}) = 0,065179\sigma^2 .$$

Então, para ensaios de adubação, pelo critério de Pimentel Gomes e Campos, a precisão da estimativa dos componentes lineares do delineamento Guadalupe ortogonal é cerca de 5% inferior à dos lineares no composto central; para estimar os componentes quadráticos o Guadalupe ortogonal é, porém, mais eficiente.

As variâncias no Guadalupe ortogonal, com escala ajustada pelo método de Box e Wilson, apresentam os valores:

$$V(\hat{\beta}_{1m}) = 0,037037\sigma^2 ; V(\hat{\beta}_{2m}) = 0,026424\sigma^2 ; V(\hat{\beta}_{1i1j}) = 0,037037\sigma^2 \quad (4')$$

Comparando-as com as do Guadalupe original (1'), o Guadalupe ortogonal se mostra mais eficiente para estimação dos componentes quadráticos puros e menos para a dos relativos às interações.

Em relação ao fatorial 3x3x3 (2'), ele é mais eficiente para estimação dos quadráticos puros e tem mesma eficiência para estimação das interações.

Corrigindo para escala e também para número de pontos, para compará-lo ao composto central, (3'), o Guadalupe ortogonal tem as variâncias:

$$V(\hat{\beta}_{1m}) = 0,066667\sigma^2 ; V(\hat{\beta}_{2m}) = 0,047563\sigma^2 ; V(\hat{\beta}_{1i1j}) = 0,066667\sigma^2 , \quad o$$

que mostra ser ele mais eficiente que o composto central original, em ensaios no campo industrial.

7. EXEMPLO DE APLICAÇÃO

Para exemplificar a aplicação da metodologia de superfície de resposta polinomial a dados provenientes de experimentos com o delineamento Guadalupe, foi simulado um ensaio de adubação com N, P, e K, em milho, tendo-se procurado levar em conta recomendações de PIMENTEL GOMES e ZAGATTO (1967) a respeito de precisão do ensaio e significância dos efeitos quadráticos puros.

Os dados foram obtidos a partir da equação fundamental, de segundo grau, que procurou representar uma situação de boa produção no Brasil.

Aos valores esperados de produção, a partir dessa equação, foram adicionados erros provenientes de distribuição normal com coeficiente de variação de 10%, tirados da Tabela 2 de DIXON e MASSEY (1951, pp. 295 a 304). Foram simulados dados de produção, em quilogramas por hectare, para um experimento em dois blocos completos casualizados.

As doses consideradas para cada nutriente foram:

0	20	40	60	80	100	120	kg/ha de N	,
0	20	40	60	80	100	120	kg/ha de P_2O_5	,
0	12,5	25	37,5	50	62,5	75	kg/ha de K_2O	.

Os dados simulados de produção, relativos à aplicação dos tratamentos especificados, encontram-se nas colunas referentes às repetições I e II.

Níveis de nutriente			Rep I	Rep II	Média	Valor esperado	Intervalo de confiança de
N	P	K	kg/ha	kg/ha	kg/ha	$\hat{\bar{y}}_{ijk}$ kg/ha	$\bar{y}_{ijk}$ kg/ha
0	0	0	764	1221	992	933	(493, 1373)
6	0	0	2180	2491	2336	2323	(1883, 2723)
0	6	0	2416	3120	2768	2703	(2263, 3143)
6	6	0	4049	3394	3722	3823	(3383, 4263)
0	0	6	1652	1697	1674	1593	(1153, 2033)
6	0	6	2867	3304	3086	3171	(2731, 3611)
0	6	6	3112	3530	3321	3355	(2915, 3795)
6	6	6	4833	4333	4583	4663	(4223, 5103)
0	3	3	2948	3463	3206	3062	(2742, 3382)
1	3	3	3272	2906	3089	3435	(3241, 3629)
2	3	3	3893	3374	3634	3748	(3602, 3894)
4	3	3	4749	4414	4582	4198	(4052, 4344)
5	3	3	5286	4364	4825	4334	(4140, 4528)
6	3	3	4434	4077	4256	4411	(4091, 4731)
3	0	3	2606	3041	2824	2714	(2394, 3034)
3	1	3	3048	2985	3016	3249	(3055, 3443)
3	2	3	3806	3192	3499	3678	(3532, 3824)
3	4	3	4389	3973	4181	4222	(4076, 4368)
3	5	3	4400	4512	4456	4336	(4142, 4530)
3	6	3	4293	4491	4392	4345	(4025, 4665)
3	3	0	2996	3190	3093	3186	(2866, 3506)
3	3	1	3243	4195	3719	3557	(3363, 3751)
3	3	2	3521	3907	3714	3829	(3683, 3975)
3	3	4	3947	4091	4019	4079	(3933, 4225)
3	3	5	4076	4284	4180	4057	(3863, 4251)
3	3	6	4058	3951	4004	3936	(3616, 4256)
3	3	3	4178	3370	3774	4003	(3863, 4143)

Utilizando a metodologia que se encontra em 4.4, foram estimados os vetores $P'Y$ e $\hat{\beta}$, lembrando que se levou em conta, na matriz S^{-1} , o número de repetições para cada tratamento, tendo em vista a existência de dois blocos.

$$P'Y = \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ E \\ F \\ G \\ H \\ I \\ J \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 189886,0000 \\ 44957,0000 \\ 54366,0000 \\ 25002,0000 \\ -84573,7782 \\ -93595,9335 \\ -92201,9275 \\ -3693,0000 \\ 6777,0000 \\ -315,0000 \end{bmatrix} ; \quad \hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_{1i} \\ \hat{\beta}_{1j} \\ \hat{\beta}_{1k} \\ \hat{\beta}_{2i} \\ \hat{\beta}_{2j} \\ \hat{\beta}_{2k} \\ \hat{\beta}_{1i1j} \\ \hat{\beta}_{1i1k} \\ \hat{\beta}_{1j1k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3516,4074 \\ 224,7850 \\ 271,8300 \\ 125,0100 \\ -29,6380 \\ -52,6539 \\ -49,0974 \\ -7,4791 \\ 5,2291 \\ -0,2430 \end{bmatrix}$$

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

F.V.	S.Q.	G.L.	Q.M.	F
Blocos	394,74	1		
Média	667.716.536,96	1		
Efeito $\hat{b}_{1i}$	10.105.659,24	1	10.105.659,24	84,46**
Efeito $\hat{b}_{1j}$	14.778.309,78	1	14.778.309,78	123,51**
Efeito $\hat{b}_{1k}$	3.125.500,02	1	3.125.500,02	26,12**
Ef. ($\hat{b}_{2i} + \hat{b}_{2j} + \hat{b}_{2k}$)	11.961.663,48	3	3.987.221,16	33,32**
Efeito $\hat{b}_{1i1j}$	72.494,92	1	72.494,92	
Efeito $\hat{b}_{1i1k}$	35.437,61	1	35.437,61	
Efeito $\hat{b}_{1j1k}$	76,54	1	76,54	
(Regressão)	(707.795.678,53)	(10)		
Desvios da Regressão	1.691.849,47	17	99.520,55	
(Tratamentos)	(709.487.528,00)	(27)		
Erro	3.110.841,26	26	119.647,74	
Total	712.598.764,00	54		

C.V. = 9,8%

A soma de quadrados relativa aos desvios da regressão não foi significativa, o que mostra a boa adaptação do modelo quadrático.

Calculando a soma de quadrados de cada componente quadrático, ajustada para os dois restantes, foram obtidos os seguintes resultados:

$$\text{S.Q. } \hat{\delta}_{2i} \text{ (ajust.)} = 471.545,20 ; F_{(1;26)} = 3,94 \text{ (sign. a 10\%)}$$

$$\text{S.Q. } \hat{\delta}_{2j} \text{ (ajust.)} = 1.488.372,37 ; F_{(1;26)} = 12,43^{**}$$

$$\text{S.Q. } \hat{\delta}_{2k} \text{ (ajust.)} = 1.294.111,86 ; F_{(1;26)} = 10,81^{**} .$$

Embora não significativo aos níveis habituais de probabilidade, mas levando em conta que, nos ensaios de adubação, o crescimento da resposta ao nitrogênio não é somente linear, resolveu-se manter, na equação, o coeficiente $\hat{\delta}_{2i}$ do efeito quadrático. Foram conservados também os outros efeitos de segundo grau, relativos às interações.

Com os elementos de $\hat{\beta}$ pode-se escrever a equação polinomial da superfície de resposta, em termos dos polinômios p_{1m} e p_{2m} .

$$\begin{aligned} \hat{y}_{ijk} = & 3516,4 + 224,8 p_{1i} + 271,8 p_{1j} + 125,0 p_{1k} - 29,64 p_{2i} - \\ & - 52,65 p_{2j} - 49,10 p_{2k} - 7,48 p_{1i1j} + \\ & + 5,23 p_{1i1k} - 0,24 p_{1j1k} . \end{aligned}$$

Passando para as variáveis x_m , a fim de mais facilmente realizar a análise econômica do experimento, a equação se transforma em:

$$\begin{aligned} \hat{y}_{ijk} = & 933,2 + 409,4 x_i + 610,9 x_j + 404,6 x_k - 29,64 x_i^2 - 52,65 x_j^2 - \\ & - 49,10 x_k^2 - 7,48 x_i x_j + 5,23 x_i x_k - 0,24 x_j x_k . \end{aligned}$$

Com qualquer das equações podem-se calcular os valores esperados $\hat{\bar{y}}_{ijk}$, que se encontram na página 41, bem como os intervalos de confiança de $\bar{y}_{ijk}$.

A procura do ponto crítico da superfície de resposta, através do estudo da diferencial de segunda ordem, levou ao encontro de ponto de máximo, o que possibilita a análise econômica dos dados experi-

mentais pelo método usual.

A estimação das quantidades econômicas de nutrientes foi realizada tomando-se a relação entre os preços de cada nutriente e do produto, com estimação somente por ponto e não por intervalo.

A expressão geral da receita líquida é dada por:

$$L = (\hat{y}_{ijk} - \hat{y}_{000}) P_y - (x_i P_i + x_j P_j + x_k P_k) - CF ,$$

onde P_y é o preço médio do produto, pago ao produtor, subtraindo-se os custos variáveis de colheita, por unidade de produto; P_i , P_j e P_k são os preços dos nutrientes, ajustados para o acréscimo dos custos de transporte e de colocação do adubo no solo, dos juros correspondentes ao capital empatado e dos subsídios recebidos na compra do adubo; CF são custos fixos do serviço do trator, da adubadeira e da mão de obra.

O valor máximo da receita líquida obtém-se pela solução do sistema de equações:

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial L}{\partial x_j} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial L}{\partial x_k} = 0 \quad ,$$

que correspondem a

$$\frac{\partial y_{ijk}}{\partial x_i} = \frac{P_i}{P_y} \quad ; \quad \frac{\partial y_{ijk}}{\partial x_j} = \frac{P_j}{P_y} \quad ; \quad \frac{\partial y_{ijk}}{\partial x_k} = \frac{P_k}{P_y} \quad .$$

Considerando os valores 120, 105 e 35 para as relações acima, as coordenadas do ponto de receita líquida máxima são as seguintes:

$$x_i = 4,67 \quad ; \quad x_j = 4,46 \quad ; \quad x_k = 4,00 \quad ,$$

equivalentes, aproximadamente, a 95, 90 e 50 kg/ha de N , $P_{25}O_5$ e K_2O , respectivamente.

8. CONCLUSÕES

8.1. Delineamento Guadalupe original para três fatores

A aplicação da metodologia de superfície de resposta, através da utilização de um modelo de regressão, com polinômios ortogonais de 1º e de 2º grau em x , a experimento planejado com o uso do delineamento Guadalupe, para três fatores, levou aos seguintes resultados e conclusões:

8.1.1. As estimativas de todos os coeficientes de 1º e de 2º grau, encontradas pelo método dos quadrados mínimos, são independentes da estimativa do coeficiente b_0 , correspondente à média.

8.1.2. Somente as estimativas dos coeficientes quadráticos puros estão correlacionadas, e as estimativas das covariâncias entre eles representam cerca de um terço da estimativa de suas variâncias.

8.1.3. As variâncias das respostas estimadas $\hat{y}_{ijk}$ em cada ponto do delineamento, para os níveis utilizados, na escala adotada, são as seguintes:

- a) pontos fatoriais : $0,7638 \sigma^2$
- b) ponto central : $0,0770 \sigma^2$
- c) pontos axiais simétricos, a partir dos extremos para o centro do delineamento : $0,4040 \sigma^2$; $0,1478 \sigma^2$; $0,0836 \sigma^2$.

8.1.4. Para ensaios de adubação, o delineamento Guadalupe é menos eficiente que o fatorial $3 \times 3 \times 3$ e mais eficiente que o composto central original (critério de Pimentel Gomes e Campos).

8.1.5. Para ensaios no campo industrial o delineamento Guadalupe é mais eficiente que o fatorial $3 \times 3 \times 3$ e o composto central original (critério de Box e Wilson).

8.2. Delineamento Guadalupe ortogonal para três fatores

8.2.1. A ortogonalização do delineamento Guadalupe, para três fatores e igual número de pontos que o Guadalupe original, através de um modelo de regressão polinomial quadrática aumentou de sete para nove o número de níveis de cada fator. Os dois níveis adicionais correspondem à projeção dos pontos fatoriais sobre os eixos.

8.2.2. Os pontos fatoriais e o central permaneceram nas coordenadas ± 3 e zero, respectivamente, e os pontos axiais encontram-se nas distâncias aproximadas $\pm 1,467$; $\pm 2,934$ e $\pm 4,402$.

8.2.3. As variâncias das respostas estimadas $\hat{y}_{ijk}$ em cada ponto do delineamento, para os níveis mencionados, são as que se seguem:

- a) pontos fatoriais : $0,6716 \sigma^2$
- b) ponto central : $0,1163 \sigma^2$

c) pontos axiais simétricos, a partir dos extremos para o centro do delineamento : $0,4670 \sigma^2$; $0,1701 \sigma^2$; $0,1144 \sigma^2$.

8.2.4. Em ensaios de adubação, o delineamento Guadalupe ortogonal, com vinte e sete pontos, para três fatores, é menos eficiente que o Guadalupe original e o fatorial $3 \times 3 \times 3$; em relação ao central composto original, o Guadalupe ortogonal é mais eficiente na estimação dos componentes quadráticos.

8.2.5. Em ensaios na área industrial, o Guadalupe ortogonal é mais eficiente que o original ao estimar os componentes quadráticos puros e menos eficiente ao estimar as interações; em relação ao fatorial $3 \times 3 \times 3$, é mais eficiente para estimação dos quadráticos puros e tem mesma eficiência em relação às interações; é ainda mais eficiente que o composto central original.

9. SUMMARY

The development of experimental and treatment designs, that provide a more efficient approach to investigate response surfaces, was initiated by R.A. Fisher, in the agronomic field, and extended to other research areas.

The central composite and the rotatable designs, applicable mainly in the chemical industry, were also extended to other investigation fields.

In the present thesis, the response surface methodology was applied to a type of central composite design, named Guadalupe, for three factors at seven equally spaced levels, with twenty seven treatments. It has a central point, eighteen axial and eight factorial points, with their projections on the axes interval extremes.

A quadratic polynomial regression was used in the analysis, with orthogonal polynomials of first and second degree. The estimates of the model parameters, their variances and covariances, the analysis of variance and the tests of hypotheses, the confidence intervals

for parameters and expected values are given. Their adaptation to the Guadalupe design is developed.

Comparing with the $3 \times 3 \times 3$ factorial and the central composite designs, the Guadalupe is less efficient than the first and more efficient than the second, when applied to fertilizer experiments, according to PIMENTEL GOMES and CAMPOS (1972) criterion. But it is more efficient in the chemical industry and similar fields of investigation, by BOX and WILSON (1951) criterion,

The Guadalupe design has become orthogonal by imposing conditions when fitting a new quadratic polynomial regression model. The six axial and the center points are still equally spaced. The projections of the factorial points, on the axes, introduce two new levels of each factor, with nine levels on the whole.

By the same criteria, the orthogonalized Guadalupe is less efficient than the original Guadalupe and the $3 \times 3 \times 3$ factorial, and more efficient than the central composite design, in fertilizer trials; but it is the most efficient, in estimating the pure quadratic components, in chemical research.

A simulated N, P, K fertilizer experiment, with corn (maize), is given as an example of using the Guadalupe design in agricultural research, utilizing the response surface methodology developed in the present paper.

10. LITERATURA CITADA

- ALVAREZ, R., A. SEGALLA, A.C. PIMENTEL WUTKE e E.S. FREIRE, 1963. Adubação da cana-de-açúcar VIII. Adubação mineral em solos massapê-salmouirão (1957-58). *Bragantia*. Campinas, 22: 657-676.
- ANDERSON, R.L. e T.A. BANCROFT, 1952. *Statistical Theory in Research*. Nova York, McGraw-Hill. 399 p.
- ARRUDA, H.V. de, 1959. *Contribuição para o Estudo da Adubação Mineral do Milho nas Terras Roxas do Município de Ribeirão Preto*. Piracicaba, ESALQ/USP. 39 p. (Tese de Doutorado).
- BATISTA, L.B., 1978. Delineamento em círculos. *Pesq. Agropec. Bras.*, Brasília, 13 (4): 9-15.
- BOX, G.E.P. e J.S. HUNTER, 1957. Multi-factor experimental designs for exploring response surfaces. *Ann. Math. Statist.*, An Arbor, 28: 195-241.
- BOX, G.E.P. e K.B. WILSON, 1951. On the experimental attainment of optimum conditions. *Jl. R. Statisc. Soc.*, Londres, B 13: 1-45.

- CONAGIN, A., J. de P.N. JORGE e W.R. VENTURINI, 1969. Delineamentos experimentais utilizáveis na experimentação de campo. In: REYNAERT, E.E., Ed. *La Investigación de Fertilidad de Suelos para la Producción Agrícola en la Zona Templada*. Montevideu, IICA-ZC, p. 183-201.
- CHRISTIANS, N.E., O.P. MARTIN e J.F. WILKINSON, 1979. Nitrogen, phosphorus, and potassium effects on quality and growth of Kentucky bluegrass and creeping bentgrass. *Agron. J.*, Madison, 71: 564-567.
- COCHRAN, W.G. e G.M. COX, 1957. *Experimental Designs*. 2a. ed. Nova York, John Wiley. 611 p.
- COX, D.R., 1958. *Planning of Experiments*. Nova York, John Wiley. 308 p.
- DAVIES, O.L., Ed., 1954. *The Design and Analysis of Industrial Experiments*. Londres, Oliver and Boyd. 636 p.
- DÁVILA, L.E.R., 1979. Algunos diseños para estudios de la superficie de respuesta a la aplicación de fertilizantes. In: *Reunião Internacional de Biometria*, Região Brasileira. Piracicaba, 1975. Fundação Cargill, p. 131-156.
- DIXON, W.J. e F.J. MASSEY, 1951. *Introduction to Statistical Analysis*. Nova York, McGraw-Hill. 370 p.
- FINNEY, D.J., 1945. The fractional replication of factorial arrangements. *Ann. Eugen.*, Londres, 12: 291-301.
- FISHER, R.A., 1926. The arrangement of field experiments. *Jour. Min. Agric.*, Londres, 33: 503-513. In: SHEWHART, W.A., Ed., 1950. *R.A. Fisher: Contributions to Mathematical Statistics*. Nova York, John Wiley, p. 17.503-17.513.

- 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 BNOE/ANOA/CIA. n° 1).
- GILL, J.L., 1968. *Design and Analysis of Experiments in the Animal and Medical Sciences*, Volume 2. Ames, The Iowa State University Press. 301 p.
- GRANDAGE, A., 1958. Orthogonal coefficients for unequal intervals. *Biometrics*. Raleigh, 14: 287-289.
- GRAYBILL, F.A., 1961. *An Introduction to Linear Statistical Models*. Volume 1. Nova York, McGraw-Hill. 463 p.
- HEADY, E.O. e J.L. DILLON, 1961. *Agricultural Production Functions*, 3a. ed. Ames, The Iowa State Univ. Press. 667 p.
- HICKS, C.R., 1973. *Fundamental Concepts in the Design of Experiments*, 2a. ed. Nova York. Holt, Rinehart and Winston. 349 p.
- HOFFMANN, R. e S. VIEIRA, 1977. *Análise de Regressão. Uma Introdução à Econometria*. São Paulo, HUCITEC-EDUSP. 339 p.
- IGUE, T., 1968. *Interações em Grupos de Experimentos de Adubação do Feijoeiro com N, P e K, Segundo o Esquema Fatorial 3x3x3*. Piracicaba, ESALQ/USP. 81 p. (Dissertação de Mestrado).
- MALAVOLTA, E., F. PIMENTEL GOMES e outros, 1963. A diagnose foliar na cana de açúcar IV. Piracicaba, ESALQ/USP. 47 p.
- MARTINEZ GARZA, A. 1978. *Hacia el Incremento de la Productividad. Métodos Estadístico - Matemáticos*. Chapingo. CEC, Colégio de Postgraduados. 125 p.

- MEAD, R. e D.J. PIKE, 1975. A review of response surface methodology from a biometric viewpoint. *Biometrics*. Raleigh, 31: 803-851.
- MIRANDA, L.T. de, 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. 541 p.
- MITSCHERLICH, E.A., 1909. Das Gesetz des Minimums und das Gesetz des Abnehmenden Bodenertrages. *Landwirtschaftliche Jahrbücher*. Berlin, 38: 537-552.
- MYERS, R.H., 1971. *Response Surface Methodology*. Boston, Allyn and Bacon. 246 p.
- NOGUEIRA, I.R., 1979. Método geral para obtenção de tabelas de polinômios ortogonais. *Rev. Agricultura*. Piracicaba, 54 (4): 269-279.
- PÁEZ, G. e T. SILVA, 1975. *Delineamento dos Experimentos de Adubação*. Brasília, EMBRAPA, D.P.D. 55 p.
- PIMENTEL GOMES, F. e A.G. ZAGATTO, 1967. Aspectos econômicos da adubação. In: MALAVOLTA, E. *Manual de Química Agrícola - Adubos e Adubação*. São Paulo, Ed. Agr. Ceres. 606 p.
- PIMENTEL GOMES, F., 1969. Novos aspectos do estudo econômico de adubação. *Fertilité*. Paris, 34: 3-9.
- PIMENTEL GOMES, F. e H. CAMPOS, 1972. The efficiency of factorial 3^3 designs as compared to a central composite rotatable design. *Potash Review*. Berna. Fevereiro. 3 p.

- ROJAS, B.A., 1963. The San Cristóbal designs for fertilizer experiments. In: WILLIAM, J.R., Ed. *Proc. Int. Soc. of Sugar Cane Technologists*. Eleventh Congress, Mauritius. Nova York, Elsevier Publ. Comp., p. 197-203.
- ROJAS, B.A., 1972. The orthogonalized San Cristóbal design. In: HENDERSON, M.T., Ed. *Proc. Int. Soc. of Sugar Cane Technologists*. Fourteenth Congress, Nova Orleans. Louisiana, Franklin Press Inc., p. 1085-1093.
- SEARLE, S.R., 1971. *Linear Models*. Nova York, John Wiley. 532 p.
- SNEDECOR, G.W. e W.G. COCHRAN, 1967. *Statistical Methods*. 6a. ed. Ames, The Iowa State University Press. 593 p.
- SPELLMAN, W.J. e E. LANG, 1924. *The Law of Diminishing Returns*. Chicago, World Book Co. 178 p.
- STAVROU, J. e F.B. CADY, 1967. Counfounding the triple cube response surface design to reduce block size. *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.*, Madison, 31: 126-128.
- STRAUSS, E., 1951. Experimentos de adubação da zona canavieira de Pernambuco. *Anais da Terceira Reunião Brasileira de Ciências do Solo*, p. 336-446.
- TRAMEL, T.E., 1957. A suggested procedure for agronomic-economic fertilizer experiments. In: BAUM, E.L., E.O. HEADY, J.T. PESEK e C.G. HILDRETH, Ed. *Economic and Technical Analysis of Fertilizer Innovations and Resource Use*. Ames, The Iowa State College Press, p. 168-175.

VANDERLIP, R.L. e J. PESEK, 1970. Nitrate accumulation in smooth brome-grass (*Bromus inermis*, Leyss.): I. Effects of applied N, P, and K. *Agron. J.*, Madison, 62:491-494.

VOSS, R. e J. PESEK, 1967. Yield of corn grain as affected by fertilizer rates and environmental factors. *Agron. J.*, Madison, 59:567-572.

WISHART, J., 1938. Growth rate determination in nutrition studies with the bacon pig, and their analysis. *Biometrika*. Londres, 30:16-28.

YATES, F., 1935. Complex experiments. *Jl. R. Statist. Soc.*, Londres, B2:181-247. In: YATES, F., 1970. *Experimental Design*. Londres, Griffin, p. 71-117.