DELINEAMENTO EM ÂNGULOS COMPLEMENTARES

ELIZA HELENA FARIA SIMÕES CORRÊA

Engenheiro Agrônomo

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

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
Junho, 1987

DELINEAMENTO EM ÂNGULOS COMPLEMENTARES

ELIZA HELENA FARIA SIMÕES CORRÊA

Engenheiro Agrônomo

Orientador: Prof. Dr. HUMBERTO DE CAMPOS

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

PIRACICABA
Estado de São Paulo - Brasil
Junho, 1987

DELINEAMENTO EM ÂNGULOS COMPLEMENTARES

ELIZA HELENA FARIA SIMÕES CORRÊA

Aprovada em: 18.09.1987

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Humberto de Campos	ESALQ/USP
Prof. Dr. Cássio Roberto de Melo Godoi	ESALQ/USP
Prof. Dr. Antônio Francisco Iemma	ESALQ/USP
Dr. Hermano Vaz de Arruda	IAC/CAMPINAS
Prof. Dr. Dilermando Perecin	FCAV/UNESP

Prof. Dr. Humberto de Campos
Orientador

A meus PAIS,

por nos terem criado num lar feliz

e ao MÁRIO, com amor

DEDICO.

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Humberto de Campos, Professor Titular do Departamento de Matemática e Estatística da ESALQ/USP, pela orientação segura e amiga na realização deste trabalho.

Aos professores do Curso de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agronômica da ESALQ/USP, pelos ensinamentos recebidos.

Ao colega Lauro Boechat Batista, Professor Adjunto do Departamento de Matemática da UFRRJ, pela amizade e pelos ensinamentos recebidos, não só durante a realização deste trabalho, mas de um modo geral, ao longo de toda minha vida profissional.

Ao professor Dr. Antonio Francisco Iemma, da ESALQ/USP, que esteve sempre presente com sua solidariedade e ajuda durante a realização do curso.

Aos professores do Departamento de Matemática e à Reitoria da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, pelo afastamento concedido.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq - pela bolsa concedida.

Aos colegas do Curso de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agronômica, pelo excelente convívio.

À Srta. Marleni Esteves Duarte, funcionária da UFRRJ, pela amizade e pelos serviços datilográficos.

Ao Eduardo Mesquita Mendonça, pela confecção e editoração do original definitivo.

SUMÁRIO

RESUMO..... viii

SUMMARY..... x

1. INTRODUÇÃO..... 1

2. REVISÃO DE LITERATURA..... 3

3. MATERIAL E MÉTODOS..... 13

3.1. Modelo Matemático..... 16

3.2. Equações Normais..... 19

3.3. Solução do Sistema..... 24

3.4. Somas de Quadrados..... 26

3.5. Variâncias das Estimativas..... 27

3.6. Testes de Significância..... 28

3.7. Estudo do ponto crítico (máximo, mínimo ou ponto de sela) através de congruência de matrizes..... 28

3.8. Eficiência do Delineamento..... 29

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO..... 31

4.1. Ortogonalização do delineamento..... 32

4.1.1. Determinação de δ para ortogonalizar o Delineamento..... 32

4.1.2. Determinação dos Coeficientes Polinomiais..... 36

4.1.3. Determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais. 40

4.1.4. Determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais usando-se os mesmos comprimentos de intervalos..... 44

4.1.5. Comparação da eficiência do Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, com a dos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2..... 49

4.1.6. Determinação das somas de quadrados devida aos coeficientes polinomiais..... 68

4.1.7. Análise da variância do Delineamento em Ângulos Complementares..... 70

5. CONCLUSÕES..... 71

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... 75

APÊNDICE..... 82

DELINEAMENTO EM ÂNGULOS COMPLEMENTARES

Autora: ELIZA HELENA FARIA SIMÕES CORRÊA

Orientador: Prof. Dr. Humberto de Campos

RESUMO

Um novo tipo de delineamento, com dois parâmetros θ_1 e δ, foi desenvolvido, tendo em vista o estudo de superfície de resposta através do ajustamento aos dados de um polinômio do segundo grau com duas variáveis independentes X_1 e X_2, onde cada uma apresentou 9 níveis, dado pelo seguinte modelo matemático.

$$Y_u - \overline{Y} = \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_{11}\left(X_{1u}^2 - \overline{X}_1^2\right) + \beta_{22}\left(X_{2u}^2 - \overline{X}_2^2\right) + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + e_u$$

O delineamento ora proposto, denominado Delineamento em Ângulos Complementares, é constituído por 17 pontos, a saber:

$(0,0)$

$(d,0)$, $(-d,0)$, $(0,d)$, $(0,-d)$

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

$(\delta\cos\theta_1, \delta\,\mathrm{sen}\,\theta_1)$, $(\delta\cos\theta_1, -\delta\,\mathrm{sen}\,\theta_1)$

$(-\delta\cos\theta_1, \delta\,\mathrm{sen}\,\theta_1)$, $(\delta\cos\theta_1, -\delta\,\mathrm{sen}\,\theta_1)$

$(\delta\cos\theta_2, \delta\,\mathrm{sen}\,\theta_2)$, $(\delta\cos\theta_2, -\delta\,\mathrm{sen}\,\theta_2)$

$(-\delta\cos\theta_2, \delta\,\mathrm{sen}\,\theta_2)$ e $(-\delta\cos\theta_2, -\delta\,\mathrm{sen}\,\theta_2)$

onde $\theta_1 + \theta_2 = 90°$ e $\theta_1 \leq 45°$.

A ortogonalização do delineamento foi obtida em função de θ_1 e foram desenvolvidas fórmulas que permitem a determinação das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau com suas respectivas variâncias, quando o mesmo é ortogonal, como também as respectivas somas de quadrados.

Comparando-se a eficiência do Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, com as eficiências dos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2, em relação às variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais e considerando que se deva ter em conta a mesma área total a ser gasta bem como o mesmo comprimento de intervalo das doses, foi verificado que o Delineamento em Ângulos Complementares é menos eficiente do que o Delineamento Fatorial 3^2. Por outro lado, com relação as $V(\hat{\beta}_i)$ e $V(\hat{\beta}_{12})$, o referido delineamento é mais eficiente do que o Fatorial 5^2 quando $\delta < 0,86603$ e mais eficiente para $\delta > 0,86603$. Foi também verificado que conforme o valor de δ, o Delineamento em Ângulos Complementares poderá ser mais ou menos eficiente do que os Delineamentos Fatoriais 5^2, 7^2 e 9^2, quando se leva em conta a $V(\hat{\beta}_{ii})$.

COMPLEMENTARY ANGLE DESIGN

Author: ELIZA HELENA FARIA SIMÕES CORREA

Adviser: Prof. Dr. Humberto de Campos

SUMMARY

A new design, with two parameters (θ_1, and δ), was developed with the specific purpose of fitting second order response surfaces where two variables X_1 and X_2 are used and each variable X_i must take nine different levels.

The design, denominated Complementary Angle Design, was constructed using 17 treatment combinations, where 12 of them belong to three 2 x 2 factorials and the coded levels of the Xi - variable were -1 and +1; $\pm\delta$ cosin θ_1 and $\pm\delta$ sin θ_1; and $\pm\delta$ cosin θ_2 and $\pm\delta$ sin θ_2. The other five treatment combinations are axial points (0,0), (δ,0), ($-\delta$,0); (0,d), and (0,$-\delta$) subject to the restrictions $\theta_1 + \theta_2 = 90°$ and $\theta_1 \leq 45°$

The formula obtained makes the design orthogonal in function of the parameter θ_1. Formulas to estimate the polynomial equation coefficients, the

variances of the polynomial regression coefficients, and the sums of the squares of the polynomial equation coefficients were also determined.

The Complementary Angle Design was compared with the 3^2, 5^2, 7^2 and 9^2 Factorial Designs on the basis of efficiency, that is, efficiency in estimating the β_i, β_{ii}, and β_{12} coefficients in the response surface. The criteria used in comparing these designs were an equal number of the trials required and the use of the same interval lenght. It was verified that the 3^2 Factorial Design was more efficient than the Complementary Angle Design proved more efficient than the 7^2 and 9^2 Factorial Designs. This design was more efficient than the 5^2 Factorial Design when $\delta >$ 0,86603, and less efficient if $\delta <$ 0,86603, when the variances of the $\hat{\beta}_i$ and $\hat{\beta}_{12}$ were also considered. Finally, when the variance of the $\hat{\beta}_{ii}$ regression coefficient was considered, the Complementary Angle Design was found more efficient than the 5^2, 7^2, and 9^2 Factorial Designs for certain values of δ.

1. INTRODUÇÃO

A produção de alimentos é de importância fundamental para o desenvolvimento de um país, como também para o bem estar de sua população. Por outro lado, obtém-se uma produção mais econômica nem sempre associada à melhor produtividade.

Um dos fatores que influenciam na produtividade das culturas agrícolas é a adubação e, nesse particular, delineamentos estatísticos foram propostos visando ao estudo de obtenção de melhores fórmulas, associadas aos níveis ótimos de adubação. No entanto, esses primeiros delineamentos introduzidos na experimentação agrícola levam em consideração um grande número de combinações entre os níveis dos fatores a serem pesquisados, aumentando conseqüentemente o erro experimental, quando comparados com outros que envolvam poucos tratamentos. Além disso; a experimentação torna-se mais trabalhosa e onerosa.

Com o aparecimento dos delineamentos fatoriais fracionários, diminuiu-se o tamanho dos blocos sem, no entanto, tornar-se menos trabalhosa e onerosa a

experimentação.

Os delineamentos compostos centrais foram inicialmente desenvolvidos na experimentação química e adaptados à experimentação agrícola. Esses delineamentos apresentam um pequeno número de combinações entre as doses dos fatores e, desse modo, eliminam as desvantagens apresentadas pelos outros delineamentos. O objetivo principal dos delineamentos compostos centrais é ajustar aos dados, polinômios do segundo grau, envolvendo dois ou mais fatores.

Pode-se dizer que o aparecimento dos delineamentos compostos centrais foi essencial para o estudo de novos delineamentos com esse objetivo.

No Brasil, principalmente em Piracicaba (ESALQ), Campinas (Instituto Agronômico) e Itaguaí (UFRRJ), novos delineamentos vem sendo apresentados com o intuito de se ajustar aos dados um polinômio do segundo grau.

O autor se propõe a desenvolver um novo delineamento objetivando ajustar aos dados um polinômio do segundo grau, com dois fatores, onde são utilizados parâmetros para a construção desse delineamento. A caracterização principal do novo delineamento é em relação a um menor número de fatores e a ortogonalização do mesmo.

2. REVISÃO DE LITERATURA

MITSCHERLICH. (1909) sugeriu uma função não linear para relacionar o insumo nutriente à produção agrícola.

SPILLMAN & LANG (1924) relataram que SPILLMAN apresentou uma função exponencial para relacionar as respostas de produção aos níveis de fertilizantes, quando estudou resultados de experimentos de adubação com algodão, na Carolina do Norte, USA.

FISHER (1935) começou a pesquisar os delineamentos mais adequados ao estudo de superfícies de resposta.

YATES (1937) apresentou na Estatística Experimental os delineamentos fatoriais, tendo descrito numerosos tipos. Segundo o autor, os delineamentos fatoriais podem apresentar uma pequena eficiência relativa quando são comparados com delineamentos que envolvam poucos tratamentos, devido ao número elevado de tratamentos que são obtidos entre as combinações dos níveis dos fatores, dificultando desse modo a eliminação de diferenças de fertilidade dentro de uma mesma repetição e, assim, o erro

padrão por parcelas tende a ser elevado.

FINNEY (1945) apresentou os delineamentos fatoriais fracionários, de modo a minorar o problema de um número excessivo de tratamentos resultantes das combinações entre os níveis dos fatores, haja vista que a técnica experimental recomenda que seja utilizado um número de tratamentos por bloco que não prejudique a homogeneidade dentro deles, diminuindo assim o erro experimental.

PLACKETT & BURMAN (1946) descreveram diversos delineamentos fatoriais para N-1 fatores, onde N é um múltiplo de quatro e o seu valor máximo é 100. Entretanto, para N = 92, esses autores não conseguiram fracionar o delineamento e a solução desse problema somente foi conseguido por BAUMERT et alii (1962).

Outros pesquisadores estudaram os delineamentos fatoriais e dentre eles podem ser citados DANIEL (1956), JOHN (1961, 1962), NELDER (1963) e MARGOLIN (1967).

BOX & WILSON (1951) apresentaram os delineamentos compostos centrais, adequados ao estudo de superfícies de respostas, quando se adota polinômios do segundo grau. Os autores procuraram diminuir o número de combinações entre os níveis dos fatores, em comparação com os fatoriais completos, na confecção destes delineamentos.

O modelo polinomial do segundo grau com K variáveis usado por BOX & WILSON (1951), é dado pela

seguinte expressão:

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

Estes autores obtiveram os delineamentos compostos centrais a partir de um delineamento fatorial 2^k onde os níveis das variáveis estão codificados em -1 e + 1, adicionando as seguintes combinações:

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

Portanto, o número de combinações entre os níveis das variáveis ê dado por $2^k + 2k + 1$; sendo que 2^k ê o número de tratamentos provenientes do fatorial 2^k; 2k é o número de tratamentos dos pontos axiais; e 1 refere-se ao ponto central. O ponto central pode ser repetido P vezes e assim o número total de tratamentos do delineamento composto central será dado por $2^k + 2k + P$.

O valor de α pode ser escolhido de modo a fazer os coeficientes da equação polinomial ortogonais uns aos outros, ou para minimizar os erros que são obtidos se a verdadeira forma da superfície de resposta não for quadrática ou então para dar ao delineamento a propriedade de ser rotacional.

O critério de rotacionalidade nos delineamentos compostos centrais foi proposto por BOX & HUNTER (1957). Segundo esses autores, um delineamento composto central é rotacional se a variância da estimativa da resposta do polinômio do segundo grau é a mesma para todos os pontos eqüidistantes do ponto central.

A partir dos delineamentos compostos centrais, diversos autores estudaram o assunto e podem ser destacados os trabalhos efetuados por TRAMEL (1957), ROJAS (1963, 1972), STAVROU & CADY (1967) e VOSS & PESEK (1967).

CAMPOS (1967) impulsionou no Brasil o estudo de superfície de resposta comparando o delineamento composto central rotativo para três fatores e somente um ponto central com o delineamento fatorial 3^3, concluindo naquela oportunidade que em igualdade de condições, o delineamento fatorial é mais preciso do que o delineamento composto central rotativo.

PIMENTEL GOMES (1969) apresentou um estudo de determinação de ponto de máximo, mínimo ou de sela nas superfícies de respostas polinomiais, usando o critério de congruência de matrizes. O autor informou que CAMPOS (1967), em 50 casos estudados, encontrou 84 % de casos de ponto de sela agrupando de maneiras diversas os ensaios fatoriais 3^3, em adubação de milho.

PENTEADO & BATISTA (1971) estudaram a eficiência do delineamento composto central em comparação com os fatoriais completos de dois fatores e uma das

conclusões obtidas por eles é que o delineamento composto central é menos eficiente do que o fatorial 5 x 5. Naquele trabalho, os autores levaram em consideração que a área a ser usada na experimentação deve ser igual, para que a comparação da eficiência seja imparcial.

PIMENTEL GOMES & CAMPOS (1972) estudando a eficiência do delineamento composto central rotativo, com somente um ponto central, em relação ao fatorial 3^3, criaram o critério de correções entre os comprimentos de intervalos das doses de modo que os mesmos fossem iguais.

BATISTA (1976) estudou a ortogonalização do delineamento composto central, com um só ponto central, e um máximo de quatro fatores. Naquele trabalho, o autor determinou as fórmulas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau.

BATISTA & SILVA (1978) estudaram a ortogonalização do delineamento composto central, usando diversos pontos centrais. Os autores concluíram que quando são usados 8 pontos centrais, a precisão da estimativa do coeficiente quadrático β_{ii} é praticamente igual à precisão da estimativa do coeficiente linear β_i e superior a da estimativa de β_{ij}. Foi também observado pelos autores que quando se usa somente um ponto central, a precisão da estimação de β_{ii} é baixa em relação às demais.

BATISTA (1978) apresentou o "Delineamento em Círculos", onde na formulação do mesmo procurou-se usar um maior número de níveis para cada fator, menor número de

combinações entre eles e independência na estimação dos coeficientes. Nesse novo delineamento, tem-se dois conjuntos de pontos distanciados do ponto central, sendo que no primeiro a distancia é $\sqrt{2}$, enquanto que no segundo conjunto a distancia é $\alpha\sqrt{2}$. Com a ortogonalização do delineamento em círculos, o autor determinou fórmulas para estimar as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau. O autor observou que à medida que o valor de P aumenta, as estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau diminuem, aumentando a precisão das estimativas destes coeficientes.

COSTA (1980) desenvolveu um novo tipo de delineamento para permitir o ajuste aos dados de um polinômio do segundo grau com duas variáveis independentes, de modo a oferecer maior flexibilidade na escolha dos delineamentos fatoriais. Naquele trabalho, o autor usou dois fatores, cada um com sete níveis. O delineamento apresentado é composto por dois fatoriais 2 x 2, sendo que no primeiro os níveis estão codificados em -1 e +1 e no segundo em $-\alpha$ e $+\alpha$, acrescido pelos pontos $(0,\alpha\sqrt{2})$, $(0, -\alpha\sqrt{2})$, $(-\alpha\sqrt{2},0)$ $(-\alpha\sqrt{2},0)$ e o ponto central é repetido até 8 vezes. O autor pesquisou também a eficiência do delineamento em função do número de repetições do ponto central, chegando à conclusão de que se deve de preferência utilizar somente um ponto central com o valor de α igual a 0,716332 a fim de que o delineamento seja mais eficiente.

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

CONAGIN (1982) apresentou um novo tipo de delineamento objetivando o estudo de superfície de resposta, o qual foi denominado "Delineamento Composto Central com Duas Estrelas". Segundo o autor, trata-se de um delineamento simétrico, da "Família do Composto Central", caracterizado pela presença de duas estrelas. O delineamento é composto por um fatorial ao nível de ± W, duas estrelas aos níveis $\pm \alpha$ e $\pm \gamma$ para cada fator (a nível zero dos fatores remanescentes) e pontos centrais, apresentando cinco ou sete níveis para cada fator. O autor descreveu que na agricultura os experimentos, diversamente dos tecnológicos, devem ser montados com todos os tratamentos do delineamento colocados no campo, de uma só vez. Afirmou, ainda, que no caso de experimentos de adubação do tipo NPK, as respostas podem ser mais amplas nos anos bons e menos amplas nos anos ruins. De acordo com o autor, esse delineamento possibilita, nos anos bons, a avaliação da resposta sobre toda a amplitude pesquisada e,

nos anos ruins, com "resposta em platô"; pode-se, pela eliminação da estrela exterior, analisá-lo como um composto central.

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

RODRIGUES (1984) desenvolveu um novo tipo de delineamento, denominado "Delineamento em Ângulos" que teve por finalidade o ajustamento aos dados de um polinômio do segundo grau, com duas variáveis. Nesse delineamento, foram considerados oito novos pontos, em relação ao delineamento composto central, escolhidos de modo a ortogonalizar o citado delineamento. Foram obtidas fórmulas que determinam as estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau e suas respectivas variâncias. Segundo o autor, o Delineamento estudado mostrou-se mais eficiente que o fatorial 3^2 e menos eficiente do que os fatoriais 5^2 e 7^2 na estimação dos coeficientes polinomiais. Quando o autor considerou a mesma área total a ser gasta, para efeito de comparação entre os delineamentos, o Delineamento em Ângulos é mais preciso quando se usa um ponto central e neste caso ele é mais preciso do que os fatoriais 5^2 e 7^2 na

estimação dos coeficientes β_i e β_{12} e menos preciso que os fatoriais 3^2, 5^2 e 7^2 na estimação do coeficiente β_{ii}

SILVA et alii (1985) estudaram um novo tipo de delineamento, o qual tem por meta o estudo de superfície de resposta, com duas variáveis. O delineamento foi denominado "Delineamento de Três Parâmetros", sendo constituído por P pontos centrais, um fatorial 2 x 2 onde os níveis codificados das variáveis são ± 1 e os pontos codificados $(\delta, 0)$, $(-\delta, 0)$, $(0, \gamma)$ e $(0, -\gamma)$. Os autores determinaram fórmulas que permitem a ortogonalização deste delineamento, sendo que quando $\delta = \gamma$ o delineamento torna-se um Composto Central Ortogonal, com P pontos centrais. Ainda, os autores determinaram fórmulas das estimativas dos coeficientes polinomiais e suas respectivas somas de quadrados e variâncias. Segundo os autores, quando $\delta = 1$, as variâncias das estimativas de β_1 e β_{12} são mínimas se P = 1 e a variância da estimativa de β_{11} é mínima quando P = 4. Por outro lado, quando $\gamma = 1$, as variâncias das estimativas de β_2 e β_{12} são mínimas se P = 1 e a variância da estimativa de β_{22} é mínima quando P = 4. Finalmente, os autores verificaram que quando P é maior do que um, para $\delta = 1$ as variâncias de β_1, β_{11} e β_{12} são menores do que quando o delineamento torna-se um Composto Central Ortogonal e para $\gamma = 1$ as variâncias de β_2, β_{22} e β_{12} são menores do que quando o delineamento torna-se um Composto Central Ortogonal.

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

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

3. MATERIAL E MÉTODOS

O delineamento em estudo, denominado Delineamento em Ângulos Complementares (Figura 1), tem por objetivo o ajustamento aos dados de um polinômio do segundo grau, com dois fatores. O delineamento é constituído por um conjunto de 17 pontos codificados, sendo um o ponto central (0,0); quatro pontos axiais codificados em (δ, 0), ($-\delta$, 0), (0, δ) e (0, $-\delta$); quatro pontos do fatorial 2 x 2 com os níveis codificados em $\pm$ 1; quatro pontos do fatorial 2 x 2 com os níveis codificados em $\pm\ \delta \cos \theta_1$ e $\pm\ \delta$ sen θ_1; e os quatro últimos do fatorial 2 x 2 onde os níveis codificados são $\pm\ \delta \cos \theta_2$ e $\pm\ \delta$ sen θ_2. Assim, os 17 pontos do delineamento são dados por:

(0,0)

(δ, 0), ($-\delta$,0), (0, δ) (0, $-\delta$)

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

($\delta \cos \theta_1$, δ sen θ_1), ($\delta \cos \theta_1$, $-\delta$ sen θ_1)

($-\delta \cos \theta_1$, δ sen θ_1), ($-\delta \cos \theta_1$, $-\delta$ sen θ_1)

($\delta \cos \theta_2$, δ sen θ_2), ($\delta \cos \theta_2$, $-\delta$ sen θ_2)

($-\delta \cos \theta_2$, δ sen θ_2) e ($-\delta \cos \theta_2$, $-\delta$ sen θ_2)

Neste novo delineamento admite-se que o ponto central (0,0) está localizado próximo ao ponto de máximo (ou de mínimo) da resposta do polinômio do segundo grau e que $\theta_1 + \theta_2 = 90°$, isto é, θ_1 e θ_2 são ângulos complementares e, conseqüentemente, cos θ_2 = sen $\theta 1$ e sen θ_2 = cos θ_1, como também $\theta_1 \leq 45°$. Portanto, os 4 últimos pontos podem ser substituídos por (δ sen θ_1, δ cos θ_1); (δ sen θ_1, $-\delta$ cos θ_1), ($-\delta$ sen θ_1, δ cos θ_1) e ($-\delta$ sen θ_1, $-\delta$ cos θ_1), respectivamente.

Os valores de δ e θ_1 podem ser escolhidos de modo a ortogonalizarem o Delineamento em Ângulos Complementares e, nesse caso, é necessário que a matriz X'X obtida do modelo matemático seja diagonal.

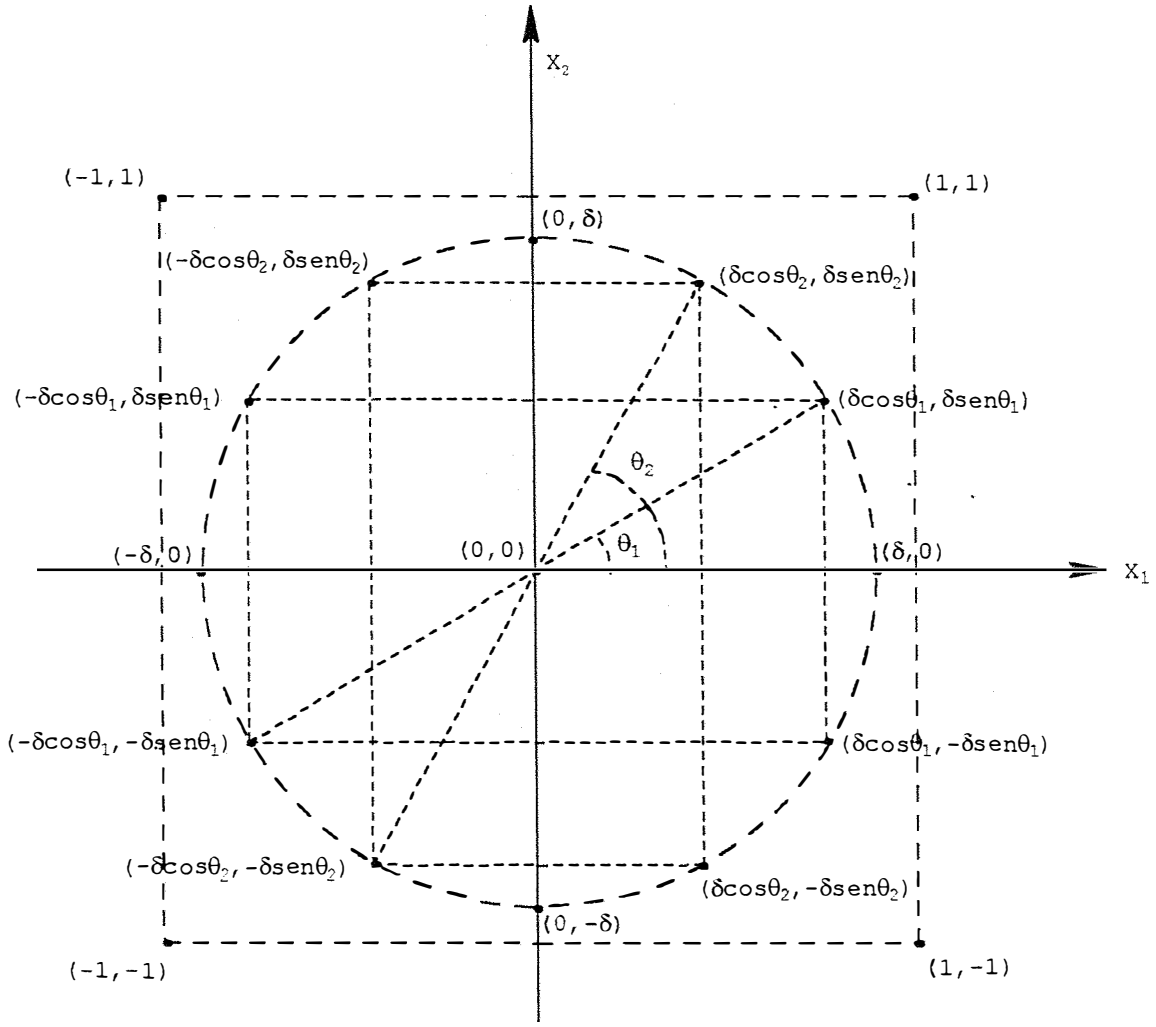


FIGURA 1. Delineamento em Ângulos Complementares

3.1. Modelo Matemático

O modelo matemático de um polinômio do segundo grau com dois fatores que estima os coeficientes polinomiais neste delineamento, é dado por:

$$y_u = Y_u - \overline{Y} = \beta_1 X_{1u} + \beta_{11}\left(X_{1u}^2 - \overline{X}_1^2\right) + \beta_{22}\left(X_{2u}^2 - \overline{X}_2^2\right) + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + e_u$$

Este modelo é bem mais prático do que o usado por BOX e WILSON (1951), haja vista que há simplificação na diagonalização da matriz X'X para tornar o delineamento ortogonal. Por outro lado, os dois modelos são semelhantes, pois se adotássemos, neste caso, o usado por BOX e WILSON (1951), teríamos:

$$y_u = \beta_0 + \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_{11} X_{1u}^2 + \beta_{22} X_{2u}^2 + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + e_u$$

Comparando-se entre si os dois modelos, verifica-se que:

$$\beta_0 = \overline{Y} - \beta_{11}\overline{X}_1^2 - \beta_{22}\overline{X}_2^2$$

O sistema de equações obtido, em forma matricial, do modelo adotado, é dado por:

$Y = X\,\beta + \varepsilon$, onde

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

Onde $y_u = Y_u - \overline{Y}$

$$
X = \begin{array}{c}
\begin{array}{ccccc} X_{1u} & X_{2u} & X_{1u}^2 - \overline{X}_1^2 & X_{2u}^2 - \overline{X}_2^2 & X_{1u}X_{2u} \end{array} \\
\begin{bmatrix}
0 & 0 & 0 - A & 0 - A & 0 \\
\delta & 0 & \delta^2 - A & 0 - A & 0 \\
-\delta & 0 & \delta^2 - A & 0 - A & 0 \\
0 & \delta & 0 - A & \delta^2 - A & 0 \\
0 & -\delta & 0 - A & \delta^2 - A & 0 \\
1 & 1 & 1 - A & 1 - A & 1 \\
1 & -1 & 1 - A & 1 - A & -1 \\
-1 & 1 & 1 - A & 1 - A & -1 \\
-1 & -1 & 1 - A & 1 - A & 1 \\
\delta \cos\theta_1 & \delta \operatorname{sen}\theta_1 & \delta^2 \cos^2\theta_1 - A & \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1 - A & \delta^2 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\theta_1 \\
\delta \cos\theta_1 & -\delta \operatorname{sen}\theta_1 & \delta^2 \cos^2\theta_1 - A & \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1 - A & -\delta^2 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\theta_1 \\
-\delta \cos\theta_1 & \delta \operatorname{sen}\theta_1 & \delta^2 \cos^2\theta_1 - A & \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1 - A & -\delta^2 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\theta_1 \\
-\delta \cos\theta_1 & -\delta \operatorname{sen}\theta_1 & \delta^2 \cos^2\theta_1 - A & \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1 - A & \delta^2 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\theta_1 \\
\delta \operatorname{sen}\theta_1 & \delta \cos\theta_1 & \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1 - A & \delta^2 \cos^2\theta_1 - A & \delta^2 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\theta_1 \\
\delta \operatorname{sen}\theta_1 & -\delta \cos\theta_1 & \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1 - A & \delta^2 \cos^2\theta_1 - A & -\delta^2 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\theta_1 \\
-\delta \operatorname{sen}\theta_1 & \delta \cos\theta_1 & \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1 - A & \delta^2 \cos^2\theta_1 - A & -\delta^2 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\theta_1 \\
-\delta \operatorname{sen}\theta_1 & -\delta \cos\theta_1 & \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1 - A & \delta^2 \cos^2\theta_1 - A & \delta^2 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\theta_1
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

Onde $\overline{X}_1^2 = \overline{X}_2^2 = A = \dfrac{4 + 6\delta^2}{17}$ pois

$$\overline{X}_1^2 = \frac{0 + \delta^2 + \ldots + \delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1}{17}$$

$$\overline{X}_1^2 = \frac{2\delta^2 + 4 + 4\delta^2 \cos^2\theta_1 + 4\delta^2 \operatorname{sen}^2\theta_1}{17}$$

$$\overline{X}_1^2 = \frac{2\delta^2 + 4 + 4\delta^2\left(\cos^2\theta_1 + \operatorname{sen}^2\theta_1\right)}{17}$$

Mas $\operatorname{sen}^2\theta_1 + \cos^2\theta_1 = 1$. Assim,

$$\overline{X}_1^2 = \frac{2\delta^2 + 4 + 4\delta^2}{17}$$

Portanto,

$$\overline{X}_1^2 = \frac{4 + 6\delta^2}{17}$$

De modo análogo, pode-se verificar que

$$\overline{X}_2^2 = \frac{4 + 6\delta^2}{17} = A$$

3.2. Equações Normais

Através do método dos quadrados mínimos obtêm-se as equações normais, que, em forma matricial, ficam:

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

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

Onde:

$$E = 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4 \theta_1 + \operatorname{sen}^4 \theta_1\right) - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17}$$

$$F = 4 + 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17}$$

$$G = 4 + 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1$$

Visto que:

$$E = (0 - A)^2 + 2\left(\delta^2 - A\right)^2 + 2(0 - A)^2 + 4(1 - A)^2 +$$
$$+4\left(\delta \cos^2 \theta_1 - A\right)^2 + 4\left(\delta^2 \operatorname{sen}^2 \theta_1 - A\right)^2$$

$$E = A^2 + 2\delta^4 + 2A^2 - 4A\delta^2 + 2A^2 + 4 + 4A^2 - 8A +$$
$$+4\delta^4 \cos^4 \theta_1 + 4A^2 - 8A\delta^2 \cos^2 \theta_1 + 4\delta^4 \operatorname{sen}^4 \theta_1 +$$
$$4A^2 - 8A\delta^2 \operatorname{sen}^2 \theta_1$$

$$E = 17A^2 - 4A\delta^2 - 8A + 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4 \theta_1 + \operatorname{sen}^4 \theta_1\right) -$$
$$-8A\delta^2\left(\operatorname{sen}^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_1\right)$$

Mas $\operatorname{sen}^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_1 = 1$, então

$$E = 17A^2 - 12A\delta^2 - 8A + 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4 \theta_1 + \operatorname{sen}^4 \theta_1\right)$$

Porém

$$17A^2 = 17A\left(\frac{4 + 6\delta^2}{17}\right) = A\left(4 + 6\delta^2\right) = 4A + 6A\delta^2$$

Portanto,

$$E = 4A + 6A\delta^2 - 12A\delta^2 - 8A + 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4\theta_1 + \operatorname{sen}^4\theta_1\right)$$

$$E = -4A - 6A\delta^2 + 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4\theta_1 + \operatorname{sen}^4\theta_1\right)$$

$$E = -A\left(4 + 6\delta^2\right) + 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4\theta_1 + \operatorname{sen}^4\theta_1\right)$$

$$E = 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4\theta_1 + \operatorname{sen}^4\theta_1\right) - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17}$$

Para F temos:

$$F = (0 - A)^2 + 4\left(\delta^2 - A\right)(0 - A) + 4(1 - A)^2 +$$
$$+8\left(\delta^2\cos^2\theta_1 - A\right)\left(\delta^2\operatorname{sen}^2\theta_1 - A\right)$$

$$F = A^2 - 4A\delta^2 + 4A^2 + 4 + 4A^2 - 8A + 8\delta^4\operatorname{sen}^2\theta_1\cos^2\theta_1 -$$
$$-8A\delta^2\cos^2\theta_1 - 8A\delta^2\operatorname{sen}^2\theta_1 + 8A^2$$

$$F = 17A^2 - 4A\delta^2 - 8A + 4 + 8\delta^4\operatorname{sen}^2\theta_1\cos^2\theta_1 -$$
$$-8A\delta^2\left(\operatorname{sen}^2\theta_1 + \cos^2\theta_1\right)$$

Mas $\operatorname{sen}^2\theta_1 + \cos^2\theta_1 = 1$. Então,

$$F = 17A^2 - 12A\delta^2 - 8A + 4 + 8\delta^4\operatorname{sen}^2\theta_1\cos^2\theta_1$$

Como já vimos, $17A^2 = 4A + 6A\delta^2$. Portanto,

$$F = -4A - 6A\delta^2 + 4 + 8\delta^4\operatorname{sen}^2\theta_1\cos^2\theta_1$$

$$F = 4 + 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - A\left(4 + 6\delta^2\right)$$

$$F = 4 + 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17}$$

A matriz X'Y é dada por:

$$X'Y = \begin{bmatrix} \sum_u X_{1u} Y_u \\ \sum_u X_{2u} Y_u \\ \sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \cdot \sum_u Y_u \\ \sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \cdot \sum_u Y_u \\ \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_u X_{1u} Y_u \\ \sum_u X_{2u} Y_u \\ \sum_u X_{1u}^2 Y_u \\ \sum_u X_{2u}^2 Y_u \\ \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u \end{bmatrix},$$

uma vez que:

$$\frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \cdot \sum_u Y_u = 0 \text{ pois } \sum_u Y_u = 0$$

Se trabalharmos com os dados originais Y_u, isto é, os dados sem transformação, teremos:

$$X'Y = \begin{bmatrix} \sum_u X_{1u} Y_u \\ \sum_u X_{2u} Y_u \\ \sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \cdot \sum_u Y_u \\ \sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \cdot \sum_u Y_u \\ \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u \end{bmatrix},$$

pois,

a) $\sum_u X_{1u} y_u = \sum_u X_{1u}\left(Y_u - \overline{Y}\right) = \sum_u X_{1u} Y_u - \overline{Y}\sum_u X_{1u} = \sum_u X_{1u} Y_u$

pois $\sum_u X_{1u} = 0$

b) $\sum_u X_{2u} y_u = \sum_u X_{2u}\left(Y_u - \overline{Y}\right) = \sum_u X_{2u} Y_u - \overline{Y}\sum_u X_{2u} = \sum_u X_{2u} Y_u$

pois $\sum_u X_{2u} = 0$

c) $\sum_u X_{1u} y_u = \sum_u X_{1u}^2\left(Y_u - \overline{Y}\right) = \sum_u X_{1u}^2 Y_u - \overline{Y}\sum_u X_{1u}^2 =$

$$= \sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{\sum_u Y_u}{17} \cdot \left(4 + 6\delta^2\right) =$$

$$= \sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u$$

d) $\sum_u X_{2u} y_u = \sum_u X_{2u}^2\left(Y_u - \overline{Y}\right) = \sum_u X_{2u}^2 Y_u - \overline{Y}\sum_u X_{2u}^2 =$

$$= \sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u$$

e) $\sum_u X_{1u} X_{2u} y_u = \sum_u X_{1u} X_{2u}\left(Y_u - \overline{Y}\right) =$

$$= \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u - \overline{Y}\sum_u X_{1u} X_{2u} =$$

$$= \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u$$

Porque:

$$\sum_u X_{1u}X_{2u} = 0$$

Portanto, o sistema de equações normais $X'X\hat{\beta} = X'Y$ fica:

$$\begin{bmatrix} 4+6\delta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4+6\delta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E & F & 0 \\ 0 & 0 & F & E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & G \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \hat{\beta}_{11} \\ \hat{\beta}_{22} \\ \hat{\beta}_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_u X_{1u}Y_u \\ \sum_u X_{2u}Y_u \\ \sum_u X_{1u}^2Y_u - \frac{(4+6\delta^2)}{17} \cdot \sum_u Y_u \\ \sum_u X_{2u}^2Y_u - \frac{(4+6\delta^2)}{17} \cdot \sum_u Y_u \\ \sum_u X_{1u}X_{2u}Y_u \end{bmatrix}$$

3.3. Solução do Sistema

A solução do sistema $X'X\hat{\beta} = X'Y$ é obtida através da matriz $(X'X)^{-1}$, pois $X'X$ é não singular.
Assim,

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

Nota-se na matriz $X'X$ que a mesma não é diagonal. Para torná-la diagonal basta fazermos F=0 e neste caso teremos:

$$F = 0 \Rightarrow 4 + 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17} = 0,$$

donde,

$$4 + 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 = \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17}$$

e conseqüentemente,

$$G = 4 + 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 = \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17}$$

Assim, temos:

$$E = 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4 \theta_1 + \operatorname{sen}^4 \theta_1\right) - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17}$$
$$E = 4 + 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4 \theta_1 + \operatorname{sen}^4 \theta_1\right) - 4 - 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1$$
$$E = 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\cos^4 \theta_1 + \operatorname{sen}^4 \theta_1 - 2 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1\right)$$
$$E = 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\operatorname{sen}^2 \theta_1 - \cos^2 \theta_1\right)^2$$

Mas como $\operatorname{sen}^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_1 = 1$ vem: $-\cos^2 \theta_1 = \operatorname{sen}^2 \theta_1 - 1$. Assim,

$$E = 2\delta^4 + 4\delta^4\left(\operatorname{sen}^2 \theta_1 + \operatorname{sen}^2 \theta_1 - 1\right)^2$$
$$E = 2\delta^4 + 4\delta^4\left(2 \operatorname{sen}^2 \theta_1 - 1\right)^2$$
$$E = 2\delta^4\left[1 + 2\left(2 \operatorname{sen}^2 \theta_1 - 1\right)^2\right]$$

Portanto, quando F=0, vem:

$$X'X = \begin{bmatrix} 4+6\delta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4+6\delta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\delta^4\left[1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\delta^4\left[1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dfrac{\left(4+6\delta^2\right)^2}{17} \end{bmatrix}$$

Conseqüentemente, $(X'X)^{-1}$ é

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} (4+6\delta^2)^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (4+6\delta^2)^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \left(2\delta^4\left[1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right]\right)^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left(2\delta^4\left[1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right]\right)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dfrac{17}{\left(4+6\delta^2\right)^2} \end{bmatrix}$$

Assim,

$$\hat{\beta}_1 = \frac{1}{4+6\delta^2} \cdot \sum_u X_{1u} Y_u ; \; \hat{\beta}_2 = \frac{1}{4+6\delta^2} \sum_u X_{2u} Y_u$$

$$\hat{\beta}_{11} = \left\{2\delta^4\left(1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)\right\}^{-1} \cdot \left\{\sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{\left(4+6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u\right\}$$

$$\hat{\beta}_{22} = \left\{2\delta^4\left(1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)\right\}^{-1} \cdot \left\{\sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{\left(4+6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u\right\}$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{17}{\left(4+6\delta^2\right)^2} \cdot \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u$$

3.4. Soma de Quadrados

A soma de quadrados devida aos parâmetros é sabidamente dada por:

SQ Par = $\hat{\beta}' X' Y$, isto é,

$$SQ\ \ Par = \left[\hat{\beta}_1 \quad \hat{\beta}_2 \quad \hat{\beta}_{11} \quad \hat{\beta}_{22} \quad \hat{\beta}_{12}\right] \begin{bmatrix} \sum_u X_{1u} Y_u \\ \sum_u X_{2u} Y_u \\ \sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{(4 + 6\delta^2)}{17} \sum_u Y_u \\ \sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{(4 + 6\delta^2)}{17} \sum_u Y_u \\ \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u \end{bmatrix}$$

Como as estimativas dos coeficientes polinomiais são determinadas independentemente, no caso do delineamento ser ortogonal, então a soma de quadrados devida aos parâmetros pode ser desdobrada em:

$$SQ\ \ \hat{\beta}_1 = \hat{\beta}_1 \sum_u X_{1u} Y_u$$

$$SQ\ \ \hat{\beta}_2 = \hat{\beta}_2 \sum_u X_{2u} Y_u$$

$$SQ\ \ \hat{\beta}_{11} = \hat{\beta}_{11} \left\{ \sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{(4 + 6\delta^2)}{17} \sum_u Y_u \right\}$$

$$SQ\ \ \hat{\beta}_{22} = \hat{\beta}_{22} \left\{ \sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{(4 + 6\delta^2)}{17} \sum_u Y_u \right\}$$

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

3.5. Variâncias das Estimativas

As variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais são obtidas através da matriz de dispersão (matriz das variâncias e covariâncias) dada por:

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

3.6. Testes de Significância

Admitindo-se a prova de t, o valor de "t" para se testar a hipótese $H_0: \beta_i = 0$ vs. $\beta_i \neq 0$ é dada por

$$t = \frac{\beta_i}{\sqrt{V\ (\beta_i)}}$$

3.7. Estudo do ponto crítico (máximo, mínimo ou ponto de sela) através de congruência de matrizes:

Para se estudar o ponto crítico (máximo, mínimo ou o ponto de sela) através de congruência de matrizes é necessário estudar a matriz Hessiana:

$$H = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 Y}{\partial X_1^2} & \dfrac{\partial^2 Y}{\partial X_1 \partial X_2} \\ \dfrac{\partial^2 Y}{\partial X_1 \partial X_2} & \dfrac{\partial^2 Y}{\partial X_2^2} \end{bmatrix}$$

que, para o modelo em estudo resulta:

$$H = \begin{bmatrix} 2\hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12} \\ \hat{\beta}_{12} & 2\hat{\beta}_{22} \end{bmatrix}$$

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

Pode-se estudar a matriz (definida ou não definida) através de congruência de matrizes que consiste diagonalizar a matriz H. Se na matriz diagonal os termos da diagonal principal forem positivos, a matriz será definida positiva; se forem negativos, será definida negativa; e em outro caso (termos positivos e negativos) será não definida.

3.8. Eficiência do Delineamento

A eficiência do delineamento será estudada tomando por base os diversos valores de δ e θ_1, como também comparando este delineamento com os delineamentos fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2.

No estudo da eficiência do delineamento, tomar-se-á por base as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, como também aplicar-se-á a técnica preconizada por PIMENTEL GOMES & CAMPOS (1972), os quais mostraram que ao se fazer comparações de eficiências deve-se igualar os comprimentos dos intervalos das doses dos níveis.

Assim, tomando-se como referência o Delineamento Fatorial 9^2 que tem 81 parcelas, visto ser este o maior em termos de parcelas e, assim, tem-se que repetir os demais delineamentos tantas vezes quantos forem os resultados das razões 81/9; 81/25; 81/49 e 81/81, respectivamente, aos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2

(Tabela 5). Com relação ao Delineamento em Ângulos Complementares, o nº de repetições é dado pela razão 81/17 (Tabela 6).

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ajustando-se aos dados provenientes do Delineamento em Ângulos Complementares o modelo matemático expresso por:

$$Y_u - \overline{Y} = \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_{11}\left(X_{1u}^2 - \overline{X}_1^2\right) + \beta_{22}\left(X_{2u}^2 - \overline{X}_2^2\right) + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + e_u$$

Obtém-se a matriz X já apresentada em 3.1.

Em forma matricial, o sistema de equações normais é representado por $(X'X)\hat{\beta} = X'Y$. A matriz $X'X$ (3.2) é de suma importância pois através dela pode-se estipular se o delineamento será ortogonal, além da estimação dos coeficientes polinomiais, das somas de quadrados, das variâncias e covariâncias dos coeficientes polinomiais, etc.

4.1. Ortogonalização do Delineamento

4.1.1. Determinação de δ para ortogonalizar o Delineamento

Quando a matriz X'X é diagonal, o delineamento é ortogonal e portanto às estimativas dos coeficientes polinomiais serão independentes. Então, para que o Delineamento em Ângulos Complementares seja ortogonal, deve-se tornar a matriz X'X diagonal, isto é, deve-se igualar F a zero (F=0). Assim,

$$4 + 8\delta^4 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)^2}{17} = 0$$

Desenvolvendo-se, tem-se:

$$\delta^4\left(34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9\right) - 12\delta^2 + 13 = 0$$

Resolvendo-se, vem:

$$\delta^2 = \frac{6 \pm \sqrt{36 - 13\left(34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9\right)}}{34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9} \qquad \text{(e.1)}$$

Para que haja solução no campo real, é necessário que:

$$13\left(34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9\right) \leq 36, \text{ isto é,}$$

$$\text{sen}^2\,\theta_1\,\cos^2\theta_1 \leq 0{,}3461538 \qquad \text{(e.2)}$$

Como $0° \leq \theta_1 \leq 45°$, esta inequação é satisfeita para $\theta_1 = 0°$, pois:

$$\theta_1 = 0° \Rightarrow \text{sen}\,0° = 0 \Rightarrow \text{sen}^2\,\theta_1\,\cos^2\theta_1 = 0 < 0{,}3461538$$

Verificar-se-á agora se a inequação é satisfeita para $0° < \theta_1 \leq 45°$, Para tanto, basta estudar a função dada por:

$$Y = \text{sen}^2\,\theta_1\,\cos^2\theta_1$$

Assim, determinando Y', tem-se:

$$Y' = 2\,\text{sen}\,\theta_1\,\cos\theta_1\,\cos^2\theta_1 - 2\cos\theta_1\,\text{sen}\,\theta_1\,\text{sen}^2\,\theta_1$$

$$Y' = 2\,\text{sen}\,\theta_1\,\cos\theta_1\left(\cos^2\theta_1 - \text{sen}^2\,\theta_1\right)$$

$Y' = 0 \Rightarrow 2\,\text{sen}\,\theta_1\,\cos\theta_1\left(\cos^2\theta_1 - \text{sen}^2\,\theta_1\right) = 0$ e como no intervalo considerado, $\left(0 \leq \theta_1 \leq 45°\right)$ $\text{sen}\,\theta_1$ e $\cos\theta_1$ são maiores que zero, tem-se de Y'=0:

$$\cos^2\theta_1 - \text{sen}^2\,\theta_1 = 0,$$

e portanto,

$$\cos^2 \theta_1 = \operatorname{sen}^2 \theta_1 \Rightarrow \operatorname{sen} \theta_1 = \cos \theta_1 \Rightarrow \theta_1 = 45°$$

Assim, a função atinge o máximo quando $\theta_1 = 45°$.

Então, para $\theta_1 = 45°$, tem-se:

$$Y = \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 = 0{,}25 < 0{,}3461538$$

Vê-se, pois, que (e.2) está satisfeita para qualquer valor de θ_1, onde $0° \leq \theta_1 \leq 45°$.

Por outro lado, $34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9 < 0$, para qualquer valor de θ_1 e, assim, o denominador dessa fórmula será negativo. Portanto, o numerador também deverá ser negativo para se determinar δ no campo real, isto é,

$$\delta = \left[\frac{6 - \sqrt{36 - 13\left(34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9\right)}}{34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9} \right]^{1/2} \qquad \text{(e.3)}$$

que é a expressão de δ para que o Delineamento em Ângulos Complementares seja ortogonal.

Atribuindo-se valores a θ_1 no intervalo $0° \leq \theta_1 \leq 45°$, obtém-se valores de δ que ortogonalizam o Delineamento em Ângulos Complementares (Tabela 1).

Tabela 1. Exemplos de valores de δ, em função de θ_1, que tornam ortogonal o Delineamento em Ângulos Complementares, para $0° \leq \theta_1 \leq 45°$.

Valor de θ_1 (graus)	Valor de δ
0	0,8412502
3	0,8423721
6	0,8457422
9	0,8513712
12	0,8694489
15	0,8818835
18	0,8965058
21	0,8965058
24	0,9131534
27	0,9315075
30	0,9510029
33	0,9707158
36	0,9892650
37,98	1,0000000
39	1,0048115
42	1,0152997

Pela Tabela 1 e pela Figura 1, pode-se notar:

a) À medida que θ_1 aumenta, o valor de δ aumenta.

b) Quando $\theta_1 = 0°$ e levando-se em conta que θ_1 e θ_2 são ângulos complementares, os pontos axiais $(\delta,0)$, $(-\delta,0)$, $(0,\delta)$ e $(0,-\delta)$ ficam repetidos três vezes pois:

$$(\delta \cos \theta_1, \delta \operatorname{sen} \theta_1) = (\delta \cos \theta_1, -\delta \operatorname{sen} \theta_1) = (\delta, 0)$$
$$(-\delta \cos \theta_1, \delta \operatorname{sen} \theta_1) = (-\delta \cos \theta_1, -\delta \operatorname{sen} \theta_1) = (-\delta, 0)$$
$$(\delta \cos \theta_2, \delta \operatorname{sen} \theta_2) = (-\delta \cos \theta_2, \delta \operatorname{sen} \theta_2) = (0, \delta)$$
$$(\delta \cos \theta_2, -\delta \operatorname{sen} \theta_2) = (-\delta \cos \theta_2, -\delta \operatorname{sen} \theta_2) = (0, -\delta)$$

c) Quando $\theta_1 = 30°$, obtém-se $\delta = 0,9510029$, valor esse encontrado por RODRIGUES (1984) para ortogonalizar o seu Delineamento em Ângulos, para um só ponto central.

d) Quando $\theta_1 = 45°$, os pontos $(\delta \cos \theta_1, \delta \operatorname{sen} \theta_1)$, $(\delta \cos \theta_1, -\delta \operatorname{sen} \theta_1)$, $(-\delta \cos \theta_1, \delta \operatorname{sen} \theta_1)$ e $(-\delta \cos \theta_1, -\delta \operatorname{sen} \theta_1)$ ficam repetidos duas vezes pois sen θ_1 = sen θ_2 e cos θ_1 = cos θ_2.

4.1.2. Determinação dos Coeficientes Polinomiais.

As estimativas dos coeficientes polinomiais são determinados matricialmente por:

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

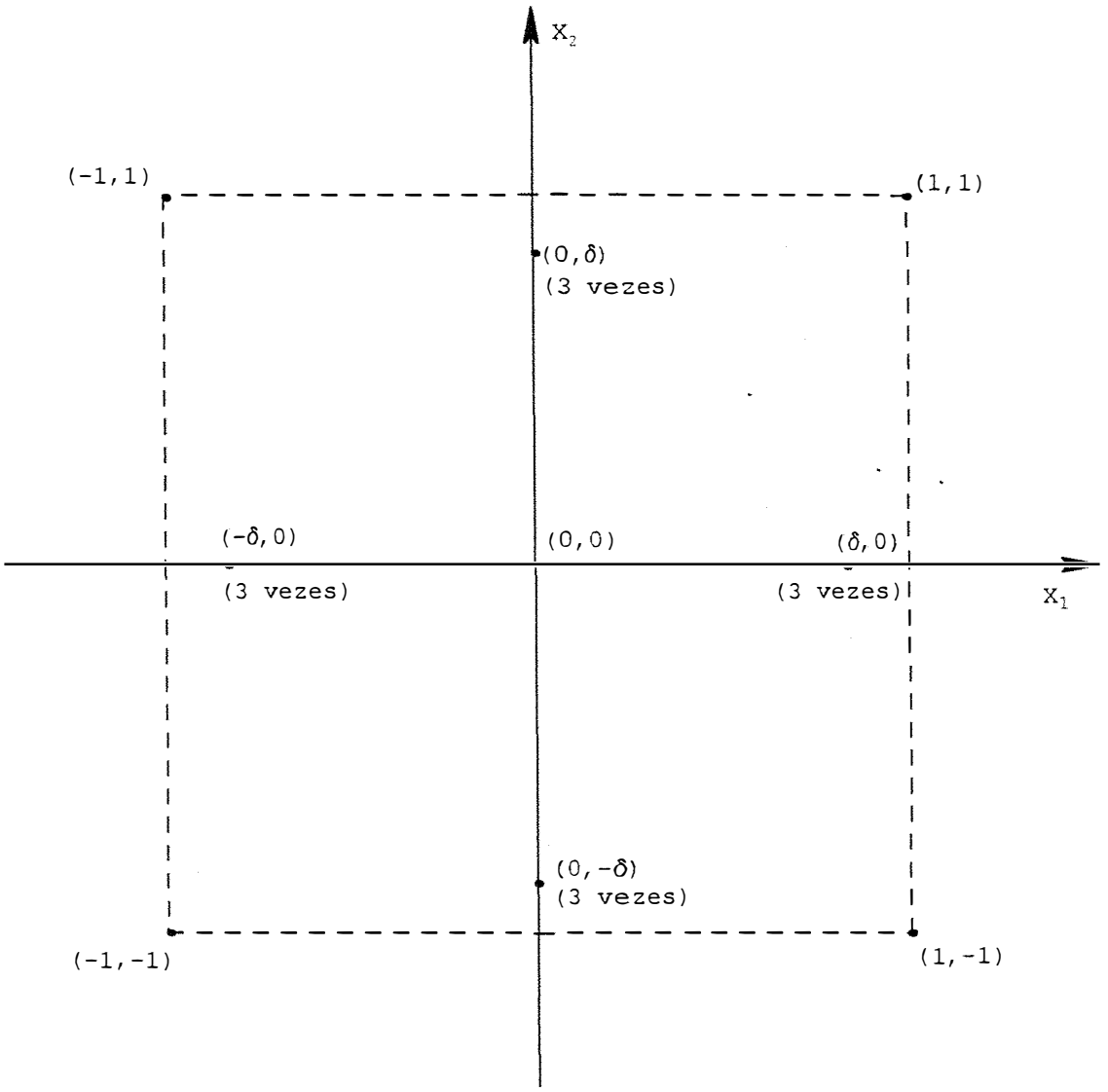


FIGURA 2. Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal para $\theta_1 = 0°$, onde os pontos axiais $(\delta,0)$, $(-\delta,0)$, $(0,\delta)$ e $(0,-\delta)$ estão cada um repetidos 3 vezes e $\delta = 0,8412501$.

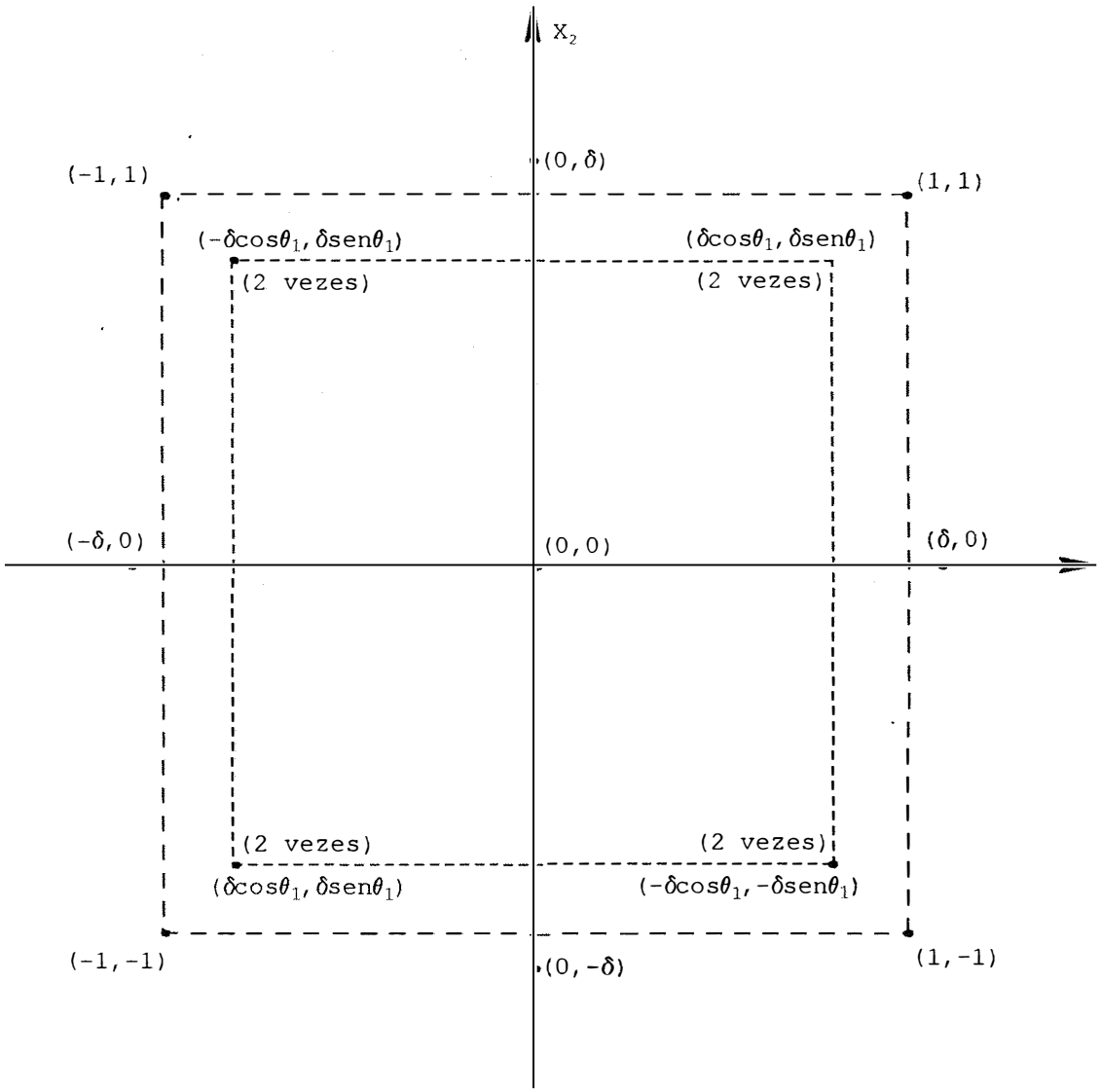


FIGURA 3. Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, para $\theta_1 = 45°$, onde os pontos do fatorial, no qual tem-se sen θ_1 e cos θ_1, repetidos duas vezes, e $\delta = 1,0190215$.

Quando o delineamento em Ângulos Complementares é ortogonal, a matriz X'X é diagonal, facilitando sobremaneira a determinação dos coeficientes polinomiais. Assim, para r repetições, tem-se:

$$\hat{\beta}_i = \frac{1}{r\left(4 + 6\delta^2\right)} \cdot \sum_u X_{iu} Y_u$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \left\{2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)\right\}^{-1} \cdot \left(\sum_u X_{iu}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u\right)$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{17}{r\left(4 + 6\delta^2\right)^2} \cdot \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u$$

onde X_{iu}, X_{iu}^2 e $X_{iu}X_{2u}$ são valores encontrados na matriz X.

Já foi visto que $\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \hat{\beta}_{11}\overline{X}_1^2 - \hat{\beta}_{22}\overline{X}_2^2$. Assim, desenvolvendo a expressão, vem:

$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17}\left(\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{22}\right)$$

pois $\overline{X}_1^2 = \overline{X}_2^2 = \dfrac{4 + 6\delta^2}{17}$

Se nas fórmulas determinadas anteriormente fizermos $\theta_1 = 30°$, teremos:

$$\hat{\beta}_i = \frac{1}{r\left(4 + 6\delta^2\right)} \cdot \sum_u X_{iu}^2 Y_u$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \left(3r\delta^4\right)^{-1} \cdot \left(\sum_u X_{iu}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^4\right)}{17} \sum_u Y_u\right)$$

$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \left(\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{22}\right)$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{17}{r\left(4 + 6\delta^2\right)^2} \cdot \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u = \frac{0{,}191317}{r} \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u$$

As três primeiras fórmulas são semelhantes às obtidas por RODRIGUES (1984), quando usou somente um ponto central. A última difere da obtida por aquela autora na maneira de apresentação, pois:

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{1}{r\left(4 + \frac{3}{2}\delta^4\right)} \cdot \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u \qquad \text{(RODRIGUES, 1984)}$$

Para $\delta = 0{,}9510029$ vem:

$\hat{\beta}_{12} = \frac{0{,}191317}{r} \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u$, que é a mesma obtida anteriormente.

4.1.3. Determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais.

A matriz de dispersão (D), isto é, a matriz das variâncias e covariâncias é dada por $\sigma^2(X'X)^{-1}$. Assim, no

caso presente onde X'X é diagonal, temos a seguinte matriz de dispersão $D = \sigma^2(X'X)^{-1}$:

$$\begin{bmatrix} (4+6\delta^2)^{-1}.\sigma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (4+6\delta^2)^{-1}.\sigma^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \left\{2\delta^4\left[1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1-1\right)^2\right]\right\}^{-1}.\sigma^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left\{2\delta^4\left[1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1-1\right)^2\right]\right\}^{-1}.\sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dfrac{17\sigma^2}{(4+6\delta^2)^2} \end{bmatrix}$$

Para r repetições, temos:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(4+6\delta^2)}.\sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \left\{2r\delta^4\left(1+2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1-1\right)^2\right)\right\}^{-1}.\sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{17}{r(4+6\delta^2)^2}.\sigma^2$$

Atribuindo-se valores a δ que tornam ortogonal o Delineamento em Ângulos Complementares, tem-se uma tabela das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com dois fatores (Tabela 2).

Tabela 2. Variâncias de estimativas dos coeficientes polinomiais, quando o Delineamento em Ângulos Complementares é ortogonal. (Os valores desta tabela devem ser multiplicados por σ^2/r).

Valor de θ_1 (graus)	Valor de δ	Variâncias		
		$\hat{\beta}_i$	$\hat{\beta}_{ii}$	$\hat{\beta}_{12}$
0	0,8412501	0,1212678	0,3327731	0,2500000
3	0,8423721	0,1211013	0,3334324	0,2493142
6	0,8457422	0,1206028	0,3354256	0,2472657
9	0,8513712	0,1197748	0,3387972	0,2438822
12	0,8592718	0,1186227	0,3436196	0,2392129
15	0,8694489	0,1171557	0,3499884	0,2333328
18	0,8818835	0,1153893	0,3580123	0,2263499
21	0,8965058	0,1133486	0,3677924	0,2184146
24	0,9131534	0,1110729	0,3793829	0,2097322
27	0,9315075	0,1086220	0,3927221	0,2005786
30	0,9510029	0,1060846	0,4075223	0,1913170
33	0,9707158	0,1035868	0,4231225	0,1824140
36	0,9892650	0,1012979	0,4383427	0,1744415
37,98	1,0000000	0,1000000	0,4473437	0,1700000
39	1,0048115	0,0994245	0,4514608	0,1680491
42	1,0152997	0,0981835	0,4604736	0,1638803
45	1,0190215	0,0977476	0,4636995	0,162428

Analisando a Tabela 2, pode-se verificar:

a) À medida que θ_1 aumenta, as variâncias de $\hat{\beta}_i$ e $\hat{\beta}_{12}$ diminuem, mostrando que há maior eficiência para valores altos de θ_1;

b) À medida que θ_1 aumenta, a variância de β_{ii} aumenta, mostrando que há maior eficiência para valores baixos de θ_1.

c) Quando $\theta_1 = 30°$, as variâncias de $\hat{\beta}_i$, $\hat{\beta}_{ii}$ e $\hat{\beta}_{12}$ são iguais às do Delineamento em Ângulos, para um ponto central, estudado por RODRIGUES (1984).

d) Para $\theta_1 > 30°$ este delineamento é mais eficiente do que o Delineamento em Ângulos, com um só ponto central, estudado por RODRIGUES (1984), considerando $V(\hat{\beta}_i)$ e $V(\hat{\beta}_{12})$.

e) Para $\theta_1 < 30°$, este delineamento é mais eficiente do que o Delineamento em Ângulos com um só ponto central, estudado por RODRIGUES (1984), considerando $V(\hat{\beta}_{ii})$.

4.1.4. Determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais usando-se os mesmos comprimentos de intervalos.

PIMENTEL GOMES e CAMPOS (1972) introduziram uma técnica quando se deseja fazer comparações de eficiências entre delineamentos, na qual iguala-se os comprimentos dos intervalos dos níveis utilizados. Portanto, aplicando-se a técnica desses autores no, presente estudo, multiplica-se as coordenadas dos pontos do delineamento por $1/\delta$ para qualquer valor de $\delta \geq 1$. Conseqüentemente, o intervalo passa a ser 2 para qualquer valor de δ e cada variância da estimativa do coeficiente do polinômio do segundo grau (Tabela 2) ficará multiplicada por δ^2, δ^4 e δ^4 correspondentes a $V(\hat{\beta}_i)$, $V(\hat{\beta}_{ii})$ e $V(\hat{\beta}_{i2})$, respectivamente (Tabela 3).

Assim, as fórmulas das variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais serão dadas por:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(4 + 6\delta^2)} \cdot \sigma^2 \text{ para } 0{,}8412501 \leq \delta \leq 1 \qquad \text{(f.1)}$$

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(4 + 6\delta^2)} \cdot \sigma^2 \text{ para } 1 \leq \delta \leq 1{,}0190215 \qquad \text{(f.4)}$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\,\text{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)} \cdot \sigma^2 \text{ para } 0{,}8412501 \leq \delta \leq 1 \qquad \text{(f.3)}$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{2r\left(1 + 2\left(2\,\text{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)} \cdot \sigma^2 \text{ para } 1 \leq \delta \leq 1{,}0190215 \qquad \text{(f.4)}$$

$$V(\hat{\beta}_{i2}) = \frac{17}{r(4 + 6\delta^2)} \cdot \sigma^2 \text{ para } 0{,}8412501 \leq \delta \leq 1 \qquad \text{(f.5)}$$

Tabela 3. Variância de estimativas do coeficiente polinomiais, quando o Delineamento em Ângulos Complementares é ortogonal, considerando o mesmo comprimento de intervalo. (Os valores desta tabela devem ser multiplicados por σ^2/r).

Valor de θ_1 (graus)	Valor de δ	Variâncias		
		$\hat{\beta}_i$	$\hat{\beta}_{ii}$	$\hat{\beta}_{i2}$
0	0,8412501	0,1212678	0,3327731	0,2500000
3	0,8423721	0,1211013	0,3334324	0,2493142
6	0,8457422	0,1206028	0,3354256	0,2472657
9	0,8513712	0,1197748	0,3387972	0,2438822
12	0,8592718	0,1186227	0,3436196	0,2392129
15	0,8694489	0,1171557	0,3499884	0,2333328
18	0,8818835	0,1153893	0,3580123	0,2263499
21	0,8965058	0,1133486	0,3677924	0,2184146
24	0,9131534	0,1110729	0,3793829	0,2097322
27	0,9315075	0,1086220	0,3927221	0,2005786
30	0,9510029	0,1060846	0,4075223	0,1913170
33	0,9707158	0,1035868	0,4231225	0,1824140
36	0,9892650	0,1012979	0,4383427	0,1744415
37,98	1,0000000	0,1000000	0,4473437	0,1700000
39	1,0048115	0,1003835	0,4602125	0,1713067
42	1,0152997	0,1012108	0,4893073	0,1741421
45	1,0190215	0,1015015	0,5000000	0,1751437

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{17\delta^4}{r(4 + 6\delta^2)} \cdot \sigma^2 \text{ para } 1 \leq \delta \leq 1,0190215 \qquad \text{(f.6)}$$

Analisando-se as fórmulas referentes a $V(\hat{\beta}_i)$, tem-se que :

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(4 + 6\delta^2)} \cdot \sigma^2 \text{ para } 0,8412501 \leq \delta \leq 1 \text{ é mínima}$$

quando δ atinge o valor máximo, isto é, quando $\delta = 1$.

Assim, para $\delta = 1$, obtemos $\theta_1 = 37,98°$ pois:

$$\delta^4(34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9) - 12\delta^2 + 13 = 0$$

e, considerando $\delta = 1$, vem:

$$34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cos^2 \theta_1 - 9 - 12 + 13 = 0$$

$$34 \operatorname{sen}^2 \theta_1 (1 - \operatorname{sen}^2 \theta_1) - 8 = 0$$

$$\operatorname{sen}^4 \theta_1 - \operatorname{sen}^2 \theta_1 + \frac{4}{17} = 0$$

Resolvendo, temos, no intervalo $0 \leq \theta_1 \leq 45°$:

$\operatorname{sen} \theta_1 = 0,6154122$ e assim $\theta_1 = 37,98°$.

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{\delta^2}{r(4 + 6\delta^2)} \cdot \sigma^2 \text{ para } 1 \leq \delta \leq 1,0190215$$

Desenvolvendo, vem:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(4/\delta^2 + 6)}\sigma^2 .$$

Nota-se, portanto, que o denominador da fórmula diminui quando δ aumenta e assim a $V(\hat{\beta}_i)$ aumenta. Portanto, a $V(\hat{\beta}_i)$ é mínima quando $\delta = 1$.

Analisando as fórmulas da $V(\hat{\beta}_{ii})$, temos:

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)} \cdot \sigma^2$$

para $0{,}8412501 \leq \delta \leq 1$.

Atribuindo valores numéricos a essa função, facilmente se verifica que $V(\hat{\beta}_{ii})$ aumenta à medida que δ aumenta. Portanto, a variância de $\hat{\beta}_{ii}$ decresce com o valor de δ, alcançando o mínimo quando $\delta = 0{,}8412501$.

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{2r\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)}\sigma^2 \text{ para } 1 \leq \delta \leq 1{,}0190215.$$

É fácil notar que para $\delta \geq 1$, à medida que δ cresce, cresce também θ_1 e conseqüentemente sen θ_1 cresce. Assim, a expressão $\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2$ tende a zero e quando $\theta_1 = 45°$, é zero. Então, à medida que δ cresce, a $V(\hat{\beta}_{ii})$ cresce

também. Portanto, a $V(\hat{\beta}_{ii})$ é mais eficiente quando $\delta = 1$, isto é, $\theta_1 = 37,98°$.

Portanto, com a análise das duas fórmulas verifica-se que a variância é mínima quando $\theta_1 = 0°$, isto é $\delta = 0,8412501$.

Analisando as fórmulas da $V(\hat{\beta}_{12})$, temos:

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{17}{r(4 + 6\delta^2)} . \sigma^2 \text{ para } 0,8412501 \leq \delta \leq 1.$$

Pode-se verificar que à medida que δ cresce, a $V(\hat{\beta}_{12})$ diminui, atingindo o mínimo quando $\delta = 1$, isto é, quando $\theta_1 = 37,98°$.

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{17\delta^4}{r(4 + 6\delta^2)^2} . \sigma^2 \text{ para } 1 \leq \delta \leq 1,0190215$$

Desenvolvendo, vem:

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{17}{r.\left[\frac{16}{\delta^4} + \frac{48}{\delta^2} + 36\right]} \sigma^2$$

É fácil verificar que para $\delta \geq 1$, o denominador da fórmula decresce à medida que δ cresce. Então, obtém-se a variância mínima quando $\delta = 1$, isto é, quando $\theta_1 = 37,98°$.

Portanto, considerando as $V(\hat{\beta}_i)$ e $V(\hat{\beta}_{12})$, podemos dizer que o delineamento é mais eficiente quando $\delta = 1$, isto é, $\theta_1 = 37,98°$. No entanto, levando em consideração a $V(\hat{\beta}_{ii})$ podemos dizer que a eficiência do delineamento é maior à medida que δ diminui (Tabela 3).

4.1.5. Comparação da eficiência do Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, com a dos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2

Para se comparar a eficiência deste delineamento com a dos fatoriais, através das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, é necessário determinar as variâncias destes coeficientes naqueles delineamentos, partindo-se do seguinte modelo matemático:

$$Y_u - \overline{Y} = \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_{11}\left(X_{1u}^2 - \overline{X}_1^2\right) + \beta_{22}\left(X_{2u}^2 - \overline{X}_2^2\right) + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + e_u$$

4.1.5.1. Determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com duas variáveis, no Delineamento Fatorial 3^2.

No Delineamento Fatorial 3^2, codificando os níveis das variáveis X_1 e X_2 em -1, 0 e 1 e ajustando aos

dados o modelo matemático supra citado, obtém-se a matriz X:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1/3 & 1/3 & 1 \\ 1 & 0 & 1/3 & -2/3 & 0 \\ 1 & -1 & 1/3 & 1/3 & -1 \\ 0 & 1 & -2/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & -2/3 & -2/3 & 0 \\ 0 & -1 & -2/3 & 1/3 & 0 \\ -1 & 1 & 1/3 & 1/3 & -1 \\ -1 & 0 & 1/3 & -2/3 & 0 \\ -1 & -1 & 1/3 & 1/3 & 1 \end{bmatrix}$$

Pré-multiplicando a matriz X pela sua transposta X', vem:

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

Assim, facilmente se consegue a matriz inversa $(X'X)^{-1}$, visto que a mesma é diagonal:

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

Como já foi visto, as variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais são obtidas através da matriz de dispersão (D), dada por $D = (X'X)^{-1}\sigma^2$. Portanto, para r repetições, as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio são dadas por:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{6r} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{2r} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{1}{4r} \cdot \sigma^2$$

4.1.5.2. Determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, no Delineamento Fatorial 5^2.

Codificando os níveis das variáveis X_1 e X_2 em -1, -1/2, 0, 1/2 e 1 e ajustando-se aos dados o modelo matemático citado anteriormente, obtém-se a matriz X:

$$X = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \end{bmatrix}$$

Onde:

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1/2 & 1/2 & 1 \\ 1 & 1/2 & 1/2 & -1/4 & 1/2 \\ 1 & 0 & 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1 & -1/2 & 1/2 & -1/4 & -1/2 \\ 1 & -1 & 1/2 & 1/2 & -1 \end{bmatrix}$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 1/2 & 1 & -1/4 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/4 & -1/4 & 1/4 \\ 1/2 & 0 & -1/4 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & -1/4 & -1/4 & -1/4 \\ 1/2 & -1 & -1/4 & 1/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & -1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & -1 & -1/2 & 1/2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A_4 = \begin{bmatrix} -1/2 & 1 & -1/4 & 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 & -1/4 & -1/4 & -1/4 \\ -1/2 & 0 & -1/4 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & -1/2 & -1/4 & -1/4 & 1/4 \\ -1/2 & -1 & -1/4 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix}$$

$$A_5 = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1/2 & 1/2 & -1 \\ -1 & 1/2 & 1/2 & -1/4 & -1/2 \\ -1 & 0 & 1/2 & -1/2 & 0 \\ -1 & -1/2 & 1/2 & -1/4 & 1/2 \\ -1 & -1 & 1/2 & 1/2 & 1 \end{bmatrix}$$

A divisão da matriz X, de dimensão 25 x 5, em 5 matrizes de dimensão 5 x 5, tem por objetivo facilitar a apresentação do presente trabalho.

Pré-multiplicando a matriz X pela sua transposta X', temos:

$$X'X = \begin{bmatrix} A_1' & A_2' & A_3' & A_4' & A_5' \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \end{bmatrix}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} A_1'A_1 + A_2'A_2 + A_3'A_3 + A_4'A_4 + A_5'A_5 \end{bmatrix}$$

$$(X'X) = \begin{bmatrix} 25/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 25/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 35/8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 35/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 25/4 \end{bmatrix}$$

Então, a matriz inversa $(X'X)^{-1}$ é facilmente determinada, como se segue:

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} 2/25 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2/25 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8/35 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8/35 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4/25 \end{bmatrix}$$

Assim, como as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau são obtidas da matriz de dispersão (D), onde $D = (X'X)^{-1}\sigma^2$, temos para r repetições as seguintes variâncias

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{2}{25r} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{8}{35r} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{4}{25r} \cdot \sigma^2$$

4.1.5.3. Determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com duas variáveis, no Delineamento Fatorial 7^2.

Neste delineamento, codificando os níveis das variáveis X_1 e X_2 em -1, -2/3, -1/3, 0, 1/3, 2/3 e 1 e ajustando-se aos dados provenientes deste delineamento o modelo matemático já adotado, tem-se a seguinte matriz X:

$$X = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \end{bmatrix}$$

onde:

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 5/9 & 5/9 & 1 \\ 1 & 2/3 & 5/9 & 0 & 2/3 \\ 1 & 1/3 & 5/9 & -3/9 & 1/3 \\ 1 & 0 & 5/9 & -4/9 & 0 \\ 1 & -1/3 & 5/9 & -3/9 & -1/3 \\ 1 & -2/3 & 5/9 & 0 & -2/3 \\ 1 & -1 & 5/9 & 5/9 & -1 \end{bmatrix}$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 2/3 & 1 & 0 & 5/9 & 2/3 \\ 2/3 & 2/3 & 0 & 0 & 4/9 \\ 2/3 & 1/3 & 0 & -3/9 & 2/9 \\ 2/3 & 0 & 0 & -4/9 & 0 \\ 2/3 & -1/3 & 0 & -3/9 & -2/9 \\ 2/3 & -2/3 & 0 & 0 & -4/9 \\ 2/3 & -1 & 0 & 5/9 & -2/3 \end{bmatrix}$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 1/3 & 1 & -3/9 & 5/9 & 1/3 \\ 1/3 & 2/3 & -3/9 & 0 & 2/9 \\ 1/3 & 1/3 & -3/9 & -3/9 & 1/9 \\ 1/3 & 0 & -3/9 & -4/9 & 0 \\ 1/3 & -1/3 & -3/9 & -3/9 & -1/9 \\ 1/3 & -2/3 & -3/9 & 0 & -2/9 \\ 1/3 & -1 & -3/9 & 5/9 & -1/3 \end{bmatrix}$$

$$A_4 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -4/9 & 5/9 & 0 \\ 0 & 2/3 & -4/9 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & -4/9 & -3/9 & 0 \\ 0 & 0 & -4/9 & -4/9 & 0 \\ 0 & -1/3 & -4/9 & -3/9 & 0 \\ 0 & -2/3 & -4/9 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -4/9 & 5/9 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A_5 = \begin{bmatrix} -1/3 & 1 & -3/9 & 5/9 & -1/3 \\ -1/3 & 2/3 & -3/9 & 0 & -2/9 \\ -1/3 & 1/3 & -3/9 & -3/9 & -1/9 \\ -1/3 & 0 & -3/9 & -4/9 & 0 \\ -1/3 & -1/3 & -3/9 & -3/9 & 1/9 \\ -1/3 & -2/3 & -3/9 & 0 & 2/9 \\ -1/3 & -1 & -3/9 & 5/9 & 1/3 \end{bmatrix}$$

$$A_6 = \begin{bmatrix} -2/3 & 1 & 0 & 5/9 & -2/3 \\ -2/3 & 2/3 & 0 & 0 & -4/9 \\ -2/3 & 1/3 & 0 & -3/9 & -2/9 \\ -2/3 & 0 & 0 & -4/9 & 0 \\ -2/3 & -1/3 & 0 & -3/9 & 2/9 \\ -2/3 & -2/3 & 0 & 0 & 4/9 \\ -2/3 & -1 & 0 & 5/9 & 2/3 \end{bmatrix}$$

$$A_7 = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 5/9 & 5/9 & -1 \\ -1 & 2/3 & 5/9 & 0 & -2/3 \\ -1 & 1/3 & 5/9 & -3/9 & -1/3 \\ -1 & 0 & 5/9 & -4/9 & 0 \\ -1 & -1/3 & 5/9 & -3/9 & 1/3 \\ -1 & -2/3 & 5/9 & 0 & 2/3 \\ -1 & -1 & 5/9 & 5/9 & 1 \end{bmatrix}$$

Pré-multiplicando a matriz X pela sua transposta X′, vem:

$$X'X = \begin{bmatrix} A_1' & A_2' & A_3' & A_4' & A_5' & A_6' & A_7' \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \end{bmatrix}$$

$$X'X = \left[A_1'A_1 + A_2'A_2 + A_3'A_3 + A_4'A_4 + A_5'A_5 + A_6'A_6 + A_7'A_7\right]$$

Então,

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

Assim, a matriz inversa $(X'X)^{-1}$ é dada por:

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} 9/196 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9/196 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 81/588 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 81/588 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 81/784 \end{bmatrix}$$

Portanto, para <u>r</u> repetições, as variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais serão dadas por:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{9}{196r} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{81}{588r} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{81}{784r} \cdot \sigma^2$$

4.1.5.4. Determinação das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com duas variáveis, no Delineamento Fatorial 9^2.

Codificando, neste delineamento, os níveis das variáveis X_1 e X_2 em -1, -3/4, -2/4, -1/4, 0, 1/4, 2/4, 3/4, 1 e ajustando-se aos dados obtidos deste delineamento o modelo matemático que vem sendo adotado, tem-se a seguinte matriz X:

$$X = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \\ A_8 \\ A_9 \end{bmatrix}$$

onde:

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 28/48 & 28/48 & 1 \\ 1 & 3/4 & 28/48 & 7/48 & 3/4 \\ 1 & 2/4 & 28/48 & -8/48 & 2/4 \\ 1 & 1/4 & 28/48 & -17/48 & 1/4 \\ 1 & 0 & 28/48 & -20/48 & 0 \\ 1 & -1/4 & 28/48 & -17/48 & -1/4 \\ 1 & -2/4 & 28/48 & -8/48 & -2/4 \\ 1 & -3/4 & 28/48 & 7/48 & -3/4 \\ 1 & -1 & 28/48 & 28/48 & -1 \end{bmatrix}$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 3/4 & 1 & 7/48 & 28/48 & 3/4 \\ 3/4 & 3/4 & 7/48 & 7/48 & 9/16 \\ 3/4 & 2/4 & 7/48 & -8/48 & 6/16 \\ 3/4 & 1/4 & 7/48 & -17/48 & 3/16 \\ 3/4 & 0 & 7/48 & -20/48 & 0 \\ 3/4 & -1/4 & 7/48 & -17/48 & -3/16 \\ 3/4 & -2/4 & 7/48 & -8/48 & -6/16 \\ 3/3 & -3/4 & 7/48 & 7/48 & -9/16 \\ 3/3 & -1 & 7/48 & 28/48 & -3/4 \end{bmatrix}$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 2/4 & 1 & -8/48 & 28/48 & 2/4 \\ 2/4 & 3/4 & -8/48 & 7/48 & 6/16 \\ 2/4 & 2/4 & -8/48 & -8/48 & 4/16 \\ 2/4 & 1/4 & -8/48 & -17/48 & 2/16 \\ 2/4 & 0 & -8/48 & -20/48 & 0 \\ 2/4 & -1/3 & -8/48 & -17/48 & -2/16 \\ 2/4 & -2/4 & -8/48 & -8/48 & -4/16 \\ 2/4 & -3/4 & -8/48 & 7/48 & -6/16 \\ 2/4 & -1 & -8/48 & 28/48 & -2/4 \end{bmatrix}$$

$$A_4 = \begin{bmatrix} 1/4 & 1 & -17/48 & 28/48 & 1/4 \\ 1/4 & 3/4 & -17/48 & 7/48 & 3/16 \\ 1/4 & 2/4 & -17/48 & -8/48 & 2/16 \\ 1/4 & 1/4 & -17/48 & -17/48 & 1/16 \\ 1/4 & 0 & -17/48 & -20/48 & 0 \\ 1/4 & -1/4 & -17/48 & -17/48 & -1/16 \\ 1/4 & -2/4 & -17/48 & -8/48 & -2/16 \\ 1/4 & -3/4 & -17/48 & 7/48 & -3/16 \\ 1/4 & -1 & -17/48 & 28/48 & -1/4 \end{bmatrix}.$$

$$A_5 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -20/48 & 28/48 & 0 \\ 0 & 3/4 & -20/48 & 7/48 & 0 \\ 0 & 2/4 & -20/48 & -8/48 & 0 \\ 0 & 1/4 & -20/48 & -17/48 & 0 \\ 0 & 0 & -20/48 & -20/48 & 0 \\ 0 & -1/4 & -20/48 & -17/48 & 0 \\ 0 & -2/4 & -20/48 & -8/48 & 0 \\ 0 & -3/4 & -20/48 & 7/48 & 0 \\ 0 & -1 & -20/48 & 28/48 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A_6 = \begin{bmatrix} -1/4 & 1 & -17/48 & 28/48 & -2/4 \\ -1/4 & 3/4 & -17/48 & 7/48 & -6/16 \\ -1/4 & 2/4 & -17/48 & -8/48 & -4/16 \\ -1/4 & 1/4 & -17/48 & -17/48 & -2/16 \\ -1/4 & 0 & -17/48 & -20/48 & 0 \\ -1/4 & -1/4 & -17/48 & 17/48 & 2/16 \\ -1/4 & -2/4 & -17/48 & -8/48 & 4/16 \\ -1/4 & -3/4 & -17/48 & 7/48 & 6/16 \\ -1/4 & -1 & -17/48 & 28/48 & 2/4 \end{bmatrix}$$

$$A_7 = \begin{bmatrix} -2/4 & 1 & -8/48 & 28/48 & -2/4 \\ -2/4 & 3/4 & -8/48 & -7/48 & -6/16 \\ -2/4 & 2/4 & -8/48 & -8/48 & -4/16 \\ -2/4 & 1/4 & -8/48 & -17/48 & -2/16 \\ -2/4 & 0 & -8/48 & -20/48 & 0 \\ -2/4 & -1/4 & -8/48 & -17/48 & 2/16 \\ -2/4 & -2/4 & -8/48 & -8/48 & 4/16 \\ -2/4 & -3/4 & -8/48 & 7/48 & 6/16 \\ -2/4 & -1 & -8/48 & 28/48 & 2/4 \end{bmatrix}$$

$$A_8 = \begin{bmatrix} -3/4 & 1 & 7/48 & 28/48 & -3/4 \\ -3/4 & 3/4 & 7/48 & 7/48 & -9/16 \\ -3/4 & 2/4 & 7/48 & -8/48 & -6/16 \\ -3/4 & 1/4 & 7/48 & -17/48 & -3/16 \\ -3/4 & 0 & 7/48 & -20/48 & 0 \\ -3/4 & -1/4 & 7/48 & -17/48 & 3/16 \\ -3/4 & -2/4 & 7/48 & -8/48 & 6/16 \\ -3/4 & -3/4 & 7/48 & 7/48 & 9/16 \\ -3/4 & -1 & 7/48 & 28/48 & 3/4 \end{bmatrix}$$

$$A_9 = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 28/48 & 28/48 & -1 \\ -1 & 3/4 & 28/48 & 7/48 & -3/4 \\ -1 & 2/4 & 28/48 & -8/48 & -2/4 \\ -1 & 1/4 & 28/48 & -17/48 & -1/4 \\ -1 & 0 & 28/48 & -20/48 & 0 \\ -1 & -1/4 & 28/48 & -17/48 & 1/4 \\ -1 & -2/4 & 28/48 & -8/48 & 2/4 \\ -1 & -3/4 & 28/48 & 7/48 & 3/4 \\ -1 & -1 & 28/48 & 28/48 & 1 \end{bmatrix}$$

Pré-multiplicando a matriz X pela sua transposta X′, vem:

$$X'X = \begin{bmatrix} A_1' & A_2' & A_3' & A_4' & A_5' & A_6' & A_7' & A_8' & A_9' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \\ A_8 \\ A_9 \end{bmatrix}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} A_1'A_1 + A_2'A_2 + A_3'A_3 + A_4'A_4 + A_5'A_5 + A_6'A_6 + A_7'A_7 + A_8'A_8 + A_9'A_9 \end{bmatrix}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} 135/4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 135/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 693/64 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 693/64 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 225/16 \end{bmatrix}$$

Portanto, a inversa $(X'X)^{-1}$ é facilmente obtida, como se segue:

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} 4/135 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4/135 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 64/693 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 64/693 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 16/225 \end{bmatrix}$$

Então, para r repetições, as variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais serão dadas por:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{4}{135r} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{64}{693r} \cdot \sigma^2$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \frac{16}{225r} \cdot \sigma^2$$

4.1.5.5. Variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, nos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2.

As variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais nos 4 delineamentos fatoriais são dadas na Tabela 4.

Tabela 4. Variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, nos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2. (Os valores desta tabela devem ser multiplicados pela fração σ^2/r).

Fatorial	$V(\hat{\beta}_i)$	$V(\hat{\beta}_{ii})$	$V(\hat{\beta}_{12})$
3^2	0,1666667	0,5000000	0,2500000
5^2	0,0800000	0,2285714	0,1600000
7^2	0,0459183	0,1377551	0,1033163
9^2	0,0296296	0,0923520	0,0711111

Comparando estas variâncias (Tabela 4) com as variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais do Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é

ortogonal, e ajustadas para o mesmo intervalo de comprimento (Tabela 3), vem:

1) Com relação a $V(\hat{\beta}_i)$, o Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, é mais eficiente do que o Delineamento Fatorial 3^2 e menos eficiente do que os Delineamentos Fatoriais 5^2, 7^2 e 9^2.

2) Com relação a $V(\hat{\beta}_{ii})$, o Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, é mais eficiente do que o Delineamento Fatorial 3^2 para $\theta_1 < 45°$ e mesma eficiência quando $\theta_1 = 45°$ e menos eficiente do que os Delineamentos Fatoriais 5^2, 7^2 e 9^2.

3) Considerando a $V(\hat{\beta}_{12})$, o Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, é mais eficiente do que o Delineamento Fatorial 3^2 para $\theta_1 > 0°$ e mesma eficiência quando $\theta_1 = 0°$ e menos eficiente do que os Delineamentos Fatoriais 5^2, 7^2 e 9^2.

Nas comparações efetuadas anteriormente, não se considerou que na experimentação a ser efetuada se deve ter o mesmo custo em termos da área total do experimento. Portanto, para que a comparação seja exeqüível é necessário igualar-se o número de parcelas dos 5 delineamentos considerados.

Assim, tomando-se como referência o Delineamento Fatorial 9^2 que tem 81 parcelas, visto ser este o maior em termos de parcelas, tem-se que repetir os demais delineamentos tantas vezes quantos forem os resultados das razões 81/9; 81/25; 81/49 e 81/81, respectivamente, aos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2 (Tabela 5). Com relação ao Delineamento em Ângulos Complementares, o nº de repetições é dado pela razão 81/17 (Tabela 6).

Tabela 5. Variâncias de estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, nos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2, considerando a mesma área total de 81 parcelas e o mesmo comprimento de intervalo. Os valores desta tabela devem ser multiplicados por σ^2.

Fatorial	$V(\hat{\beta}_i)$	$V(\hat{\beta}_{ii})$	$V(\hat{\beta}_{12})$
3^2	0,0185185	0,0555556	0,0277778
5^2	0,0246913	0,0705467	0,0493827
7^2	0,0277778	0,0833333	0,0625000
9^2	0,0296296	0,0923520	0,0711111

Tabela 6. Variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, no Delineamento em Ângulos Complementares, considerando-se o mesmo intervalo de comprimento e a mesma área total utilizada (81 parcelas). Os valores desta tabela devem ser multiplicados por σ^2.

Valor de θ_1 (graus)	Valor de δ	Variâncias $\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_{11}$	$\hat{\beta}_{12}$
0	0,8412501	0,0254512	0,0698412	0,0524691
3	0,8423721	0,0254163	0,0699796	0,0523252
6	0,8457422	0,0253116	0,0703979	0,0518952
9	0,8513712	0,0251379	0,0703979	0,0511851
12	0,8592718	0,0248961	0,0711055	0,0502051
15	0,8694489	0,0245882	0,0721176	0,0489710
18	0,8818835	0,0242175	0,0734543	0,0475055
21	0,8965058	0,0237892	0,0771909	0,0458401
24	0,9131534	0,0233115	0,0796235	0,0440178
27	0,9315075	0,0227972	0,0824231	0,0420967
30	0,9510029	0,0222646	0,0855293	0,0401529
33	0,9707158	0,0217404	0,0888034	0,0382844
36	0,9892650	0,0212600	0,0919978	0,0366111
37,98	1,0000000	0,1000000	0,4473437	0,1700000
39	1,0048115	0,0210681	0,0965878	0,0359532
42	1,0152997	0,0212417	0,1026941	0,0365483
45	1,0190215	0,0213027	0,1049382	0,0367585

Comparando-se as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, nos Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2, considerando a mesma área de 81 parcelas e o mesmo intervalo de comprimento (Tabela 5) com as variâncias das estimativas destes mesmos coeficientes no Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, com as 81 parcelas e o mesmo comprimento de intervalo (Tabela 6), tem-se:

1) Quanto a $V(\hat{\beta}_i)$, o Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal, é menos eficiente do que o Delineamento Fatorial 3^2 e mais eficiente do que os Delineamentos Fatoriais 7^2 e 9^2. Quando $\delta < 0,86603$, o Delineamento em Ângulos Complementares é menos eficiente do que o Delineamento Fatorial 5^2 e $\delta > 0,86603$ é mais eficiente.

2) Considerando a $V(\hat{\beta}_{ii})$, o Delineamento em Ângulos Complementares é menos eficiente do que o Delineamento Fatorial 3^2 e poderá ser mais eficiente do que os demais delineamentos, para certos valores de δ.

3) Com relação a $V(\hat{\beta}_{12})$, o Delineamento em Ângulos Complementares é menos eficiente do que o Delineamento Fatorial 3^2 e mais eficiente do que os Delineamentos

Fatoriais 7^2 e 9^2. Quando $\delta < 0,86603$, o Delineamento em Ângulos Complementares é menos eficiente do que o Delineamento Fatorial 5^2 e para $\delta > 0,86603$ é mais eficiente.

4.1.6. Determinação das somas de quadrados devida aos coeficientes polinomiais.

Pela teoria de modelos lineares, sabe-se que a soma de quadrados devida à regressão é dada por $\hat{\beta}' X' Y$. Então, no presente delineamento, tem-se:

$$\hat{\beta}X'Y = \left[\hat{\beta}_1 \quad \hat{\beta}_2 \quad \hat{\beta}_{11} \quad \hat{\beta}_{22} \quad \hat{\beta}_{12}\right].\begin{bmatrix} \sum_u X_{1u}Y_u \\ \sum_u X_{2u}Y_u \\ \sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{(4+6\delta^2)}{17}\sum_u Y_u \\ \sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{(4+6\delta^2)}{17}\sum_u Y_u \\ \sum_u X_{1u}X_{2u}Y_u \end{bmatrix}$$

Assim

$$\begin{aligned} \text{SQ regressão} = {} & \hat{\beta}_1 \sum_u X_{1u}Y_u + \hat{\beta}_2 \sum_u X_{2u}Y_u + \\ & + \hat{\beta}_{11}\left[\sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{(4+6\delta^2)}{17}\sum_u Y_u\right] + \\ & + \hat{\beta}_{22}\left[\sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{(4+6\delta^2)}{17}\sum_u Y_u\right] + \\ & + \hat{\beta}_{12}X_{1u}X_{2u}Y_u \end{aligned}$$

Mas, como o delineamento é ortogonal e portanto os coeficientes polinomiais são estimados independentemente, a soma de quadrados devida à regressão pode ser decomposta, em:

$$SQ\left(\hat{\beta}_1\right) = \hat{\beta}_1 \sum_u X_{1u} Y_u$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_2\right) = \hat{\beta}_2 \sum_u X_{2u} Y_u$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{11}\right) = \hat{\beta}_{11}\left[\sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u\right]$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{22}\right) = \hat{\beta}_{22}\left[\sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u\right]$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{12}\right) = \hat{\beta}_{12} \sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u$$

Substituindo as estimativas dos coeficientes polinomiais pelos seus respectivos estimadores, vem:

a) $$SQ\left(\hat{\beta}_i\right) = \frac{1}{r\left(4 + 6\delta^2\right)}\left(\sum_u X_{iu} Y_u\right)^2$$

b) $$SQ\left(\hat{\beta}_{ii}\right) = \frac{\left[\sum_u X_{iu}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u\right]^2}{2r\delta^2\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)}$$

c) $SQ\left(\hat{\beta}_{12}\right) = \dfrac{17}{r\left(4 + 6\delta^2\right)^2}\left(\sum_u X_{1u}X_{2u}Y_u\right)^2$

4.1.7. Análise de variância do Delineamento em Ângulos Complementares

Se o Delineamento em Ângulos Complementares for repetido r vezes, em blocos ao acaso, tem-se o seguinte quadro da análise de variância (Tabela 7).

Tabela 7. Quadro da Análise de Variância, no Delineamento em Ângulos Complementares, com r repetições (blocos).

Fontes de Variação	GL	SQ
Total	17 r - 1	$\sum_u Y_u^2 - \dfrac{\left[\sum_u Y_u\right]^2}{17r}$
Blocos	r - 1	$\dfrac{1}{17}\sum_j B_j^2$
$\hat{\beta}_1$	1	$\hat{\beta}_1\sum_u X_{1u}Y_u$
$\hat{\beta}_2$	1	$\hat{\beta}_2\sum_u X_{2u}Y_u$
$\hat{\beta}_{11}$	1	$\hat{\beta}_{11}\left[\sum_u X_{1u}^2Y_u - \dfrac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17}\sum_u Y_u\right]$
$\hat{\beta}_{22}$	1	$\hat{\beta}_{22}\left[\sum_u X_{2u}^2Y_u - \dfrac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17}\sum_u Y_u\right]$
$\hat{\beta}_{12}$	1	$\hat{\beta}_{11}\sum_u X_{1u}X_{2u}Y_u$
Falta de ajuste	11	SQ trats. - SQ $\hat{\beta}_1$ - SQ $\hat{\beta}_2$- -SQ $\hat{\beta}_{11}$ - SQ $\hat{\beta}_{22}$ - SQ $\hat{\beta}_{12}$
Erro	16(r-1)	por diferença

5. CONCLUSÕES

Do presente estudo, pode-se chegar às seguintes conclusões:

5.1. A fórmula de δ que permite ortogonalizar o Delineamento em Ângulos é dada por:

$$\delta = \left[\frac{6 - \sqrt{36 - 13\left(34\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1\,\cos^2\theta_1 - 9\right)}}{34\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 9} \right]^{1/2}$$

5.2. Quando $\theta_1 = 30°$, obtém-se $\delta = 0{,}9510029$, valor esse encontrado por RODRIGUES (1984) para ortogonalizar o seu Delineamento em Ângulos, para um só ponto central.

5.3. As estimativas dos coeficientes polinomiais, quando o delineamento é ortogonal, são dadas pelas seguintes fórmulas:

$$\hat{\beta}_i = \frac{1}{r\left(4 + 6\delta^2\right)} \sum_u X_{iu} Y_u$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \frac{\sum_u X_{iu}^2 - \left(\frac{4 + 6\delta^2}{17}\right)\sum_u Y_u}{2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_{i-1}\right)^2\right)}$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{17}{r\left(4 + 6\delta^2\right)^2} \cdot \sum_u X_{1u}X_{2u}Y_u$$

$$\hat{\beta}_o = \overline{Y} - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17}\left(\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{22}\right)$$

5.4. As variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais, quando o delineamento é ortogonal, são dadas por:

$$V\left(\hat{\beta}_i\right) = \frac{1}{r\left(4 + 6\delta^2\right)} \cdot \sigma^2$$

$$V\left(\hat{\beta}_{ii}\right) = \left(2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_i - 1\right)^2\right)\right)^{-1} \cdot \sigma^2$$

$$V\left(\hat{\beta}_{12}\right) = \frac{17}{r\left(4 + 6\delta^2\right)^2} \cdot \sigma^2$$

5.5. Com relação às $V(\hat{\beta}_i)$ e $V(\hat{\beta}_{12})$, para um mesmo comprimento de intervalo dos níveis utilizados, o delineamento é mais eficiente quando $\delta = 1$.

5.6. Considerando a $V(\hat{\beta}_{ii})$, para um mesmo intervalo de comprimento, o delineamento é mais eficiente quando $\delta = 0{,}8412501$.

5.7. Comparando-se o Delineamento em Ângulos Complementares com os Delineamentos Fatoriais 3^2, 5^2, 7^2 e 9^2, para um mesmo intervalo de comprimento e mesma área total a ser gasta, na base da eficiência, tem-se:

5.7.1. O Delineamento em Ângulos Complementares é menos eficiente do que o Delineamento Fatorial 3^2.

5.7.2. Considerando as $V(\hat{\beta}_i)$ e $V(\hat{\beta}_{12})$, o Delineamento em Ângulos Complementares é mais eficiente do que os Delineamentos Fatoriais 7^2 e 9^2. Para $\delta < 0,86603$, o Delineamento em Ângulos Complementares é mais eficiente do que os Delineamentos Fatoriais 5^2 e quando $\delta > 0,86603$ é mais eficiente.

5.7.3. Com relação a $V(\hat{\beta}_{ii})$, o Delineamento em Ângulos Complementares poderá ser mais eficiente do que os Delineamentos Fatoriais 5^2, 7^2 e 9^2, dependendo do valor de δ.

5.8. As somas de quadrados referentes aos coeficientes polinomiais são dadas por:

5.8.1. $$SQ\left(\hat{\beta}_i\right) = \frac{1}{r\left(4 + 6\delta^2\right)} \cdot \left[\sum_u X_{iu} Y_u\right]^2$$

5.8.2. $$SQ\left(\hat{\beta}_{ii}\right) = \frac{\left[\sum_u X_{iu}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u\right]^2}{2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_i - 1\right)^2\right)}$$

5.8.3. $$SQ\left(\hat{\beta}_{12}\right) = \frac{17}{r\left(4 + 6\delta^2\right)^2}\left[\sum_u X_{1u} X_{2u} Y_u\right]^2$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BATISTA, L.B. Determinação de α para Tornar Ortogonal o Delineamento Composto Central (Box). Piracicaba, 1976. 26p.(Mestrado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP)

BATISTA, L.B. Determinação em Círculos Pesquisa Agropecuária Brasileira, Brasília, 13 (4):9:15, 1978

BATISTA, L.B. & SILVA, S.C. e. Determinação de Fórmulas no Delineamento Composto Central (Box). Pesquisa Agropecuária Brasileira, Brasília, 13(2): 39-47, 1978.

BAUMERT, L., GOLOMB, S.W.; HALL, M. Jr. The Discovery of an Hademard Matrise of Order 9^2. Bull. AMer. Math. Soc.68:237-8, 1962.

BOX, G.E.P. & WILSON, K.B. On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. Journal of the Royal Statistical Society, série B, 13:1-45, 1951.

BOX, G.E.P & HUNTER, J.S. Multifactor Experimental Designs for Exploring Response Surface. Ann. Math. Stat,28:195-241, 1957.

CAMPOS, H. Aspectos de Aplicação das Superfícies de Resposta a Ensaios Fatoriais 3^3 de Adubação. Piracicaba, 1967, 82p. (Livre Docência - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP).

CONAGIN, A. & JORGE, J.P.N. Delineamento (1/5) (5^3) Bragantia, Campinas, 36: 23-58, 1977.

CONAGIN, A. Delineamento Composto Central com duas Estrelas. Pesquisa Agropecuária Brasileira, Brasília, 17(9):1261-9, set. 1982.

COSTA, F.A. Novo tipo de delineamento ortogonal adequado para a regressão polinomial do segundo grau. Piracicaba, 1980. 32p. (Mestrado-Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP).

DANIEL, C. Fractional Replication in Industrial Research. Proc. In: HOHN, P.W.M., 1971. Statistical Design and Analysis of Experiments. The Macmillan Co., New York, 1956 , Cap: 8 , 151-157

FINNEY, D.J. The Fractional Replication of Factorial Arrangementes. In: JOHN, P.W.M., 1971. Statistical Design and Analysis of Experiments. The Macmillan Co., New York, 1945, Cap. 8, p. 148-150.

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

JOHN, P.W.M. Three - quarter Replicates of 2^4 and 2^5 Designs. Biometrics, 17:319-321, 1961.

JOHN, P.W.M. Three - quarter Replicates cf 2^n Designs. Biometrics, 18; 172-184, 1962.

JORGE, J. de P.N. Delineamento Guadalupe para Três Fatores, Analisado Através de Modelo de Regressão Polinomial Quadrática. Piracicaba, 1980. 56p. (Mestrado -Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP).

JORGE, J. de P.N. Variações a partir do Delineamento Guadalupe. Pesquisa Agropecuária Brasileira, Brasília, 19(6):739-753, jun. 1984.

MARGOLIN, B.H. Systematic Methods of Analyzing 2^m3^n Factorial Experiments with Applications. In: JOHN, P.W.M., 1971. Statistical Design and Analysis of Experiments The Macmillan Co., New York, 1967. cap. 8, p.158-160.

MITSCHERLICH, E.A. Das Gesetz des Minimus und das Gesetz das Abnehmenden Bodenertrazes. Landwirtschasthiche Jahrbücher. Berlin, 38:537-552, 1909.

NELDER, J.A. Identification of Contrasts in Factorial Replication of 2^n Experiments, In: JOHN, P.W.M 1971. Statistical Design and Analysis of Experiments. The Macmillan Co., New York; 1963, Cap. 8 .158-160.

PENTEADO, A.F. & BATISTA, L.B. Eficiência do Ensaio Composto Central (Box) em. Comparação com os Fatoriais Completos de Dois Fatores. In: XIII Congresso Brasileiro de Ciência do Solo. Vitória, 1971, E.S.

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

PEREIRA, G.T., & PERECIN, D., Máxima Partição Ortogonal de uma superfície de resposta. In: Simpósio de Estatística Aplicada à Experimentação Agronômica 1. Piracicaba, 1985-a p. 25-43.

PEREIRA, G.T. & PERECIN D., Eficiência de (1/5) 5^3, em Relação ao Delineamento Composto Central (15 pontos). Simpósio de Estatística Aplicada à Experimentação Agronômica 1. Piracicaba, 1985-b: p.183-196.

PIMENTEL GOMES, F. Novos Aspectos de Estudo Econômico de Ensaio de Adubação. Fertilité, 34:3-9, 1969.

PIMENTEL GOMES, F.& CAMPOS H. The Efficienty of Factorial 3^3 Designs as Compared to a Central Composite Rotatable Designs. Potash review, Fevereiro, 1972.

PLACKETT, R.L. & BURMAN, J. P., The Design of Optimum Multifactorial Experiments. Biometrika 33: 305, 1946.

RODRIGUES, M.E.O.C. Delineamento em Ângulos. Piracicaba, 1984 82p. (Mestrado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP).

ROJAS, B.A. The San Cristóbal Designs for Fertilizer Experiments. In: JORGE, J. de P.N., 1980. Delineamento Guadalupe para Três Fatores, Analisado Através de Modelo de Regressão Polinomial Quadrática. Piracicaba 1963.56P. [Mestrado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP) .

ROJAS, B.A., 1972. The Orthogonalized San Cristóbal Design. In: JORGE, J. de P.N., 1980. Delineamento Guadalupe para Três Fatores, Analisado Através de Modelo de Regressão Polinomial Quadrática. Piracicaba, 1963. 56.(Mestrado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP).

SILVA, S.C. e; CORRÊA, E.H.F.S.; BATISTA, L.B.; RODRIGUES, M.E.O.C. Delineamento de Três Parâmetros. Arquivos da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro,8 (1,2) :33-49, 1985.

SPILLMAN, W.J. & LANG, E. The Law of Dimimshing Returns. Chicago, World Book Co, 1924. p. 178.

STAVROU, J. & CADY, F.B. Counfounding the Triple Cube Response Surface Design to Reduce Block Size. Soil. Sci. Soc. Amer. Proc., Madison, 31:126-128, 1967.

TRAMEL, T.E., A Suggested Procedure for Agronomic-economic Fertilizer Experiments. In: JORGE, J. de P.N.,1980. Delineamento Guadalupe para Três Fatores, Analisado Através de Modelo de Regressão Polinomial Quadrática. Piracicaba. ESALQ/USP, 56 p. (Dissertação de Mestrado).

VOSS, R. & PESEK, J. Yield of Corn Grain as Affected by Fertilizer Rates and Environmental Factors. Agron. J., Madison, 59:567-572, 1967.

YATES, F. The Design and Analysis of Factorial Experiments. Tech. Commun. Bur. Soil Sci. Harpenden 1937. cap 33 35: p 77

APÊNDICE

EXEMPLO DE APLICAÇÃO DO DELINEAMENTO EM ÂNGULOS COMPLEMENTARES

Com o objetivo de exemplificar a aplicação da.metodologia desenvolvida no presente estudo, foi simulado um experimento do Delineamento em Ângulos Complementares, em blocos ao acaso, com 4 repetições, quando δ = 1,0048115 (Figura 4).

Os dados apresentados foram obtidos através de uma função polinomial onde adicionou-se erros provenientes de uma distribuição normal, com média zero e desvio padrão igual a um (Tabela 8).

Tabela 8. Dados de um Delineamento em Ângulos Complementares, quando o mesmo é ortogonal e δ = 1,0048115, com 4 repetições.

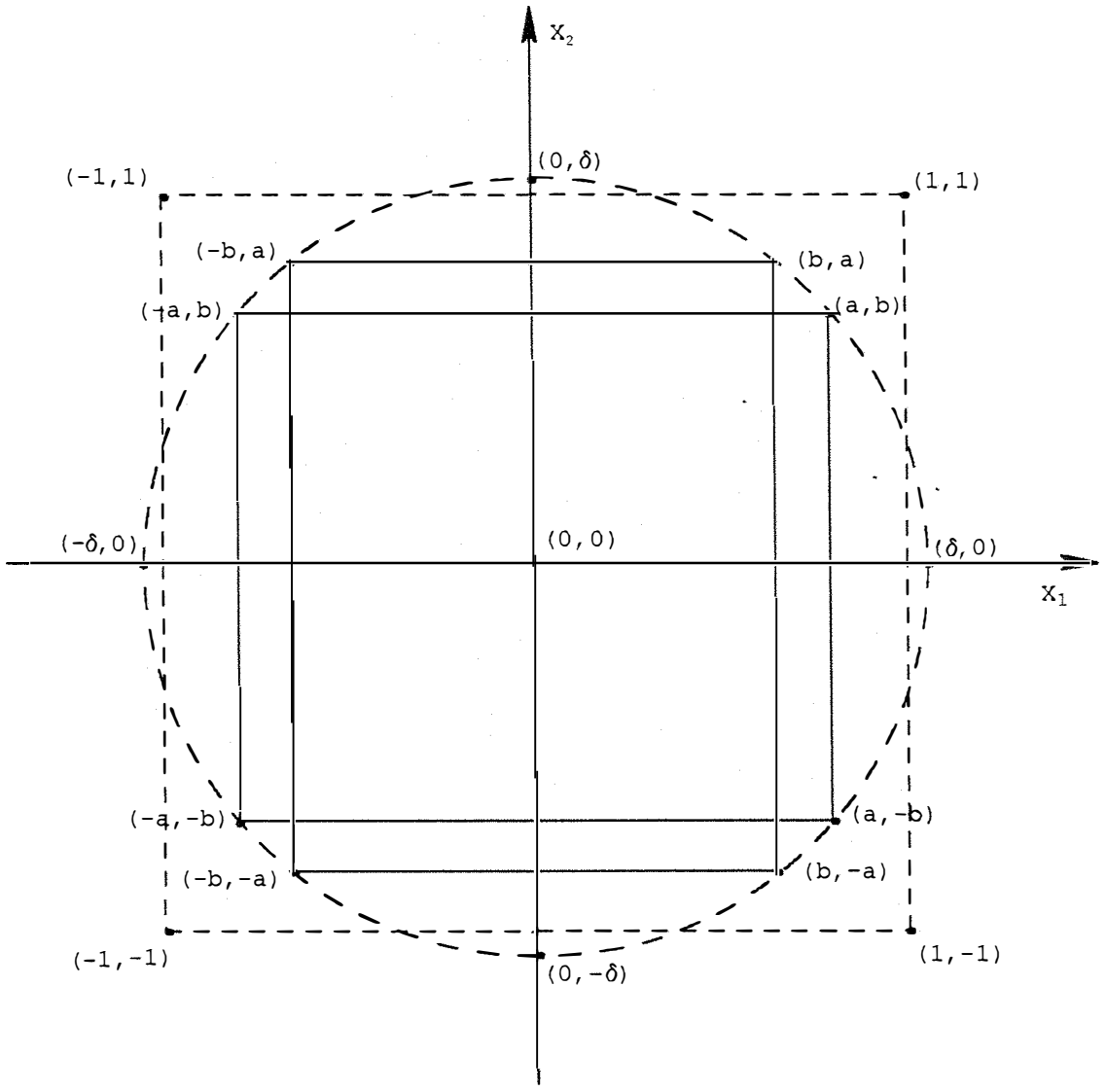
Tratamentos codificados		Blocos I	II	III	IV	Total
1	1	32,85	35,55	34,30	33,57	136,27
1	-1	29,23	27,04	29,36	28,58	114,21
-1	1	27,19	28,79	27,64	27,56	111,18
-1	-1	25,40	24,76	25,69	24,28	100,13
a	b	33,20	33,79	32,22	32,12	131,33
a	-b	29,19	29,45	30,43	30,40	119,47
-a	b	28,72	29,50	28,17	27,18	113,57
-a	-b	26,77	25,51	25,41	27,08	104,77
b	a	33,14	33,32	32,30	32,69	131,45
b	-a	27,94	28,15	30,61	29,52	116,22
-b	a	30,12	29,51	28,61	28,96	117,20
-b	-a	26,97	27,84	25,94	25,91	106,66
δ	0	30,81	31,47	32,53	32,45	127,26
$-\delta$	0	28,40	26,06	27,54	26,92	108,92
0	δ	31,52	32,13	31,66	29,48	124,79
0	$-\delta$	26,33	26,87	28,65	28,13	109,98
0	0	30,21	30,44	28,69	29,40	118,74
Total		497,99	500,18	499,75	494,23	1.992,15

$\theta_1 = 39°$

$\delta = 1,0048115$

$a = \delta \cos\theta_1 = \delta \cos 39° = 0,7808852$

$b = \delta \operatorname{sen}\theta_1 = \delta \operatorname{sen} 39° = 0,6323483$



Onde $a = \delta \cos\theta_1 = 0{,}7808852$

$b = \delta \operatorname{sen}\theta_1 = 0{,}6323483$

FIGURA 4. Delineamento em Ângulos Complementares, para $\theta_1 = 39°$ e $\delta = 1{,}0048115$.

1. Determinação dos coeficientes polinomiais.

1.1. Determinação de $\hat{\beta}_1$

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_u X_{1u} Y_u}{r\left(4 + 6\delta^2\right)} = \frac{98,001989}{40,231508} = 2,4359512$$

1.2. Determinação de $\hat{\beta}_2$

$$\hat{\beta}_2 = \frac{\sum_u X_{2u} Y_u}{r\left(4 + 6\delta^2\right)} = \frac{81,178986}{40,231508} = 2,0177962$$

1.3. Determinação de $\hat{\beta}_{11}$

$$\hat{\beta}_{11} = \frac{\sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{\left(4 - 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u}{2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)}$$

$$\hat{\beta}_{11} = \frac{1174,8692 - 1178,6350}{8,8601259} = -0,4250323$$

1.4. Determinação de $\hat{\beta}_{22}$

$$\hat{\beta}_{22} = \frac{\sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \sum_u Y_u}{2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\,\mathrm{sen}^2\,\theta_1 - 1\right)^2\right)}$$

$$\hat{\beta}_{22} = \frac{1473,9473 - 1178,6352}{8,8601259} = -0,5291008$$

1.5. Determinação de $\hat{\beta}_{12}$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{17}{r\left(4 + 6\delta^2\right)^2} \cdot \sum_u X_{1u}X_{2u}Y_u = \frac{252,22702}{404,64352} = 0,6233314$$

1.6. Determinação de $\hat{\beta}_0$

$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \frac{4 + 6\delta^2}{17}\left(\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{12}\right)$$

$$\hat{\beta}_0 = 29,296324 - 0,5916398(-0,4250323 - 0,5290782)$$

$$\hat{\beta}_0 = 30,19689$$

2. Determinação das Somas de Quadrados

2.1. Determinação de SQ Total

$$\text{SQ Total} = \sum_u Y_u^2 - \frac{\left(\sum Y_u\right)^2}{17r}$$

SQ Total = 459,422000

2.2. Determinação de SQ Blocos

SQ Blocos = 1,339840

2.3. Determinação de SQ Tratamento

$$\text{SQ Tratamento} = \frac{1}{r}\sum_{i} T_i^2 - C$$

SQ Tratamento = 417,449000

2.4. Determinação das Somas de Quadrados dos Coeficientes Polinomiais.

2.4.1. Determinação de SQ $\left(\hat{\beta}_1\right)$

$$SQ\left(\hat{\beta}_1\right) = \hat{\beta}_1 . \sum_{u} X_{1u} Y_u$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_1\right) = 2,4359512 \times 98,001989 = 238,728060$$

2.4.2. Determinação SQ $\left(\hat{\beta}_2\right)$

$$SQ\left(\hat{\beta}_2\right) = \hat{\beta}_2 \sum_{u} X_{2u} Y_u$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_2\right) = 2,0177962 \times 81,178986$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_2\right) = 163,802650$$

2.4.3. Determinação de SQ (β_{11})

$$SQ\left(\hat{\beta}_{11}\right) = \hat{\beta}_{11}\left[\sum_u X_{1u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \cdot \sum_u Y_u\right]$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{11}\right) = -0,4250323x(-3,7658)$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{11} = 1,600587\right)$$

2.4.4 Determinação de SQ $\left(\hat{\beta}_{22}\right)$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{22}\right) = \hat{\beta}_{22}\left[\sum_u X_{2u}^2 Y_u - \frac{\left(4 + 6\delta^2\right)}{17} \cdot \sum_u Y_u\right]$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{22}\right) = -0,5291008x(-4,6879)$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{22}\right) = 2,480372$$

2.4.5 Determinação de SQ $\left(\hat{\beta}_{12}\right)$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{12}\right) = \hat{\beta}_{12}\sum_u X_{1u}X_{2u}Y_u$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{12}\right) = 0,6233314x14,836883$$

$$SQ\left(\hat{\beta}_{12}\right) = 9,248037$$

2.4.6. Determinação de SQ Falta de ajuste

$$\text{SQ Falta de ajuste} = \text{SQ Tratamento} - \text{SQ } \hat{\beta}_1 - \text{SQ } \hat{\beta}_2 - \text{SQ } \hat{\beta}_{11} - \text{SQ } \hat{\beta}_{22} - \text{SQ } \hat{\beta}_{12}$$

$$\begin{aligned}\text{SQ Falta de ajuste} &= 417{,}449000 - 238{,}728060 - \\ &- 163{,}802650 - 1{,}600587 - \\ &- 2{,}480372 - 9{,}248037 = \\ &= 0{,}249460\end{aligned}$$

2.4.7. Determinação da SQ Erro

SQ Erro = SQ Total - SQ Bloco - SQ Tratamento

SQ Erro = 40,632800

Portanto, temos o seguinte Quadro de Análise de Variância (Tabela 9):

Tabela 9. Quadro da Análise da Variância

F.V.	GL	SQ	QM	F
Total	67	459,422000	-	-
Blocos	3	1,339840	0,446615	-
$\hat{\beta}_1$	1	238,728060	238,728060	282,01**
$\hat{\beta}_2$	1	163,802650	163,802650	193,50**
$\hat{\beta}_{11}$	1	1,600587	1,600587	1,89
$\hat{\beta}_{12}$	1	2,480372	2,480372	2,93
$\hat{\beta}_{12}$	1	9,248037	9,248037	10,92**
Falta de ajuste	11	0,249460	0,022678	-
Erro	48	40,632800	0,846517	

3. Determinação das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes polinomiais.

3.1. Determinação da $\hat{V}\left(\hat{\beta}_i\right)$

$$\hat{V}\left(\hat{\beta}_i\right) = \frac{1}{r\left(4 + 6\delta^2\right)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}\left(\hat{\beta}_i\right) = \frac{0,846517}{40,231508} = 0,0210411$$

3.2. Determinação da $\hat{V}\left(\hat{\beta}_{ii}\right)$

$$\hat{V}\left(\hat{\beta}_{ii}\right) = \frac{1}{2r\delta^4\left(1 + 2\left(2\ \text{sen}^2\ \theta_1 - 1\right)^2\right)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}\left(\hat{\beta}_{ii}\right) = \frac{0,846517}{8,8601259} = 0,0955423$$

3.3. Determinação da $\hat{V}\left(\hat{\beta}_{12}\right)$

$$\hat{V}\left(\hat{\beta}_{12}\right) = \frac{17}{r\left(4 + 6\delta^2\right)}^{2} \cdot \hat{\sigma}^2$$

4. Determinação dos valores de "t"para testar as hipóteses de que as estimativas dos coeficientes polinomiais não diferem de zero.

4.1. Valor de "t" para testar $H_0 : \beta_1 = 0$ vs $H_1 : \beta_1 \neq 0$

$$t = \frac{\hat{\beta}_1}{\sqrt{\hat{V}\left(\hat{\beta}_1\right)}} = \frac{2,4359512}{\sqrt{0,0210411}} = 16,79$$

4.2. Valor de "t" para testar $H_0 : \beta_2 = 0$ vs $H_1 : \beta_2 \neq 0$

$$t = \frac{\hat{\beta}_2}{\sqrt{\hat{V}\left(\hat{\beta}_2\right)}} = \frac{2,0177962}{\sqrt{0,0210411}} = 13,91$$

4.3. Valor de "t" para testar $H_0 : \beta_{11} = 0$ vs $H_1 : \beta_{11} \neq 0$

$$t = \frac{\hat{\beta}_{11}}{\sqrt{\hat{V}(\hat{\beta}_{11})}} = \frac{-0{,}4250323}{\sqrt{0{,}0955423}} = -1{,}38$$

4.4. Valor de "t" para testar $H_0 : \beta_{22} = 0$ vs $H_1 : \beta_{22} \neq 0$

$$t = \frac{\hat{\beta}_{22}}{\sqrt{\hat{V}(\hat{\beta}_{22})}} = \frac{-0{,}5291008}{\sqrt{0{,}0955423}} = -1{,}71$$

4.5. Valor de "t" para testar $H_0 : \beta_{12} = 0$ vs $H_1 : \beta_{12} \neq 0$

$$t = \frac{\hat{\beta}_{12}}{\sqrt{\hat{V}(\hat{\beta}_{12})}} = \frac{0{,}6233314}{\sqrt{0{,}0355641}} = 3{,}31$$

5. Estudo do máximo, mínimo ou ponto de sela através de congruência de matrizes.

$$H = \begin{bmatrix} 2\hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12} \\ \hat{\beta}_{12} & 2\hat{\beta}_{22} \end{bmatrix}$$

Substituindo, vem

$$H = \begin{bmatrix} -0{,}8500646 & 0{,}6233314 \\ 0{,}6233314 & -1{,}0582016 \end{bmatrix}$$

$L_2 = 0{,}8500646\ L_2 + 0{,}6233314\ L_1$

$$H = \begin{bmatrix} -0{,}8500646 & 0{,}6233314 \\ 0 & -0{,}5109977 \end{bmatrix}$$

Usando o mesmo procedimento para as colunas, temos:

$$C_2 = 0{,}8500646\ C2 + 0{,}6233314\ C1$$

$$H = \begin{bmatrix} -0{,}4250323 & 0 \\ 0 & -0{,}434381 \end{bmatrix}$$

Como a matriz é definida negativa, então a função atinge o ponto de máximo.

5.1. Determinação do máximo da função.

A equação polinomial do segundo grau, com duas variáveis, no presente exemplo, foi estimada em:

$$\hat{Y} = 30{,}19689 + 2{,}4359512X_{1u} + 2{,}0177962X_{2u} - \\ -0{,}4250323X_{1u}^2 - 0{,}5291008X_{2u}^2 + 0{,}6233314X_{1u}X_{2u}$$

Para se determinar o máximo da função, visto que a matriz anteriormente estudada foi negativa definida, devemos determinar:

$$\frac{\partial \hat{Y}_u}{\partial X_{1u}} = 2{,}4359512 - 0{,}800646X_{1u} + 0{,}6233314X_{2u}$$

$$\frac{\partial \hat{Y}_u}{\partial X_{2u}} = 2{,}0177962 - 1{,}0582016X_{2u} + 0{,}6233314X_{1u}$$

Fazendo $\frac{\partial \hat{Y}_u}{\partial X_{1u}} = 0$ e $\frac{\partial \hat{Y}_u}{\partial X_{2u}} = 0$, vem:

$$0{,}8500646X^*_{1u} - 0{,}6233314X^*_{2u} = 2{,}4359512$$

$$-0{,}6233314X^*_{1u} + 1{,}0582016X^*_{2u} = 2{,}0177962$$

Resolvendo o sistema de equações em forma matricial, obtem-se:

$$\begin{bmatrix} 0{,}8500646 & -0{,}6233314 \\ -0{,}6233314 & 1{,}0582016 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} X^*_{1u} \\ X^*_{2u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2{,}4359512 \\ 2{,}0177962 \end{bmatrix}$$

$$\Delta = 0{,}5109977$$

$$\begin{bmatrix} X^*_{1u} \\ X^*_{2u} \end{bmatrix} = \frac{1}{0{,}5109977} \begin{bmatrix} 1{,}0582016 & 0{,}6233314 \\ 0{,}6233314 & 0{,}8500646 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2{,}4359512 \\ 2{,}0177962 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} X^*_{1u} \\ X^*_{2u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7{,}5058715 \\ 6{,}3281339 \end{bmatrix}$$

Valores de X^*_{1u} e X^*_{2u} onde a função atinge o ponto de máximo.