



PAULO CÉSAR MORAES RIBEIRO

**FATORIAIS FRACIONÁRIOS EM UM EXEMPLO DE
TRIAGEM DE FATORES NA NUTRIÇÃO DE BANANEIRAS**

LAVRAS – MG

2018

PAULO CÉSAR MORAES RIBEIRO

**FATORIAIS FRACIONÁRIOS EM UM EXEMPLO DE TRIAGEM DE FATORES NA
NUTRIÇÃO DE BANANEIRAS**

TESE a ser apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

Professor Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho
Orientador

LAVRAS – MG
2018

**Ficha catalográfica elaborada pela Coordenadoria de Processos Técnicos
da Biblioteca Universitária da UFLA**

Ribeiro, Paulo César Moraes

Fatoriais fracionários em um exemplo de triagem de fatores na nutrição de bananeiras / Paulo César Moraes Ribeiro. – Lavras : UFLA, 2018.

95 p. : il.

Tese(doutorado)–Universidade Federal de Lavras, 2018.

Orientador: Professor Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho.

Bibliografia.

1. Algoritmo de intercâmbio. 2. Delineamento combinado.
3. Delineamento de triagem. I. Bueno Filho, Júlio Sílvio de Sousa. II. Título.

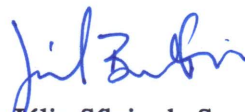
PAULO CÉSAR MORAES RIBEIRO

**FATORIAIS FRACIONÁRIOS EM UM EXEMPLO DE TRIAGEM DE FATORES NA
NUTRIÇÃO DE BANANEIRAS**

TESE a ser apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

APROVADA em 28 de Junho de 2018.

Prof. Dr. Claudiney Nunes de Lima UFSJ
Profa. Dra. Leila Aparecida Salles Pio UFLA
Prof. Dr. Marcelo Ângelo Cirillo UFLA
Prof. Dr. Augusto Ramalho de Morais UFLA



Professor Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho
Orientador

**LAVRAS – MG
2018**

À minha esposa Dora, por suportar as ausências, e pelo cuidado com as nossas filhas, dedico.

Às nossas preciosas filhas Vitória, Laís e Júlia, ofereço.

AGRADECIMENTOS

Aos meus queridos pais, Osvaldo Ribeiro e Maria de Moraes Ribeiro, (*in memoriam*), pela condução de meus primeiros passos, quando eu ainda não conhecia o valor da escola.

À Universidade Federal de Lavras pela oportunidade de vivenciar um período tão especial, de muitas angústias, mas também de muito aprendizado.

Ao Prof. Júlio Bueno pela paciência, pelo exemplo de ética profissional, o qual muito me honra ter como orientador.

Ao Matheus Pena Campos e à Profa. Leila Pio, pela parceria.

Aos professores da equipe de Matemática da EPCAr, Andréa, Alexandre, Leila, Cavaca, Marisa, José Antônio e Altamiro, pela confiança.

Aos colegas Ben Dêivide, grande camarada, Liska, Tales, Marcília, Camilla, Adriele, Sílvio, Tadeu, Cris e Leandro, por me abraçarem em tão seleta grupo, aos quais desejo toda sorte de bençãos.

Aos amigos Charles, Sérgio e Carlão pela hospedagem gratuita.

Aos amigos do grupo de reflexão, Charles, Peter, Ismael, Rogério e Prof. Marcelo, pelos momentos de oração e compartilhar da Palavra de Deus.

Aos meus amados irmãos Heloisa, Nivaldo, Luizinho, Celso, Pretinha, Aluízio, *in memoriam*, e Osvaldo, pela expressão plena da amizade.

Ao amigo José Augusto de Carvalho e esposa Silvinha, pela assistência à nossa família, por décadas.

Às pessoas por meio das quais manifestou seu cuidado, *quem na concha de sua mão mediu os oceanos, e tomou a medida dos céus a palmas; que faz sair o seu exército de estrelas, todas bem contadas, as quais chama pelo nome, e porquanto é forte em poder, nem uma só vem a faltar; que se revelou, por meios naturais e sobrenaturais, na criação, na natureza do homem, na história de Israel e da Igreja, nas páginas da Bíblia, na sua encarnação em Cristo, no coração daquele que crê. Quem me guarda, não dormita, nem permite que eu tropece. Em quem encontro esperança e paz. Até aqui me ajudou YHWH.*

Amamos a verdade quando ela nos ilumina, odiamo-la quando nos condena.

(Agostinho)

RESUMO

Este trabalho de tese é derivado de um estudo de caso em nutrição de plantas em que a demanda dos pesquisadores era o planejamento de um experimento envolvendo 14 fatores representando suplementos para adubação em bananeiras, sendo sete adubos de solo e sete adubos foliares. O objetivo era avaliar as alterações no crescimento, fisiologia e produtividade, proporcionadas por esses fatores. O tamanho inicial que os pesquisadores imaginaram para a realização do experimento era de 216 unidades experimentais. Essa era uma restrição importante para os pesquisadores devido à disponibilidade de apenas 90 unidades experimentais. A solução (plano experimental) proposta para o experimento baseou-se na concepção de delineamentos de triagem. A ideia foi combinar réplicas deste delineamento em cada bloco em um fatorial completo, no mesmo experimento. Algoritmos de troca e de intercâmbio foram empregados para a concatenação dos níveis de quatro fatores de um fatorial completo (da série 3^4) com os níveis de 10 fatores de um fatorial fracionário, constituído de screening designs da série 3^{10-6} repetidos em quatro blocos que contenham adicionalmente o nível 0 para todos os fatores. O objetivo de manter o fatorial fracionário era verificar qual a eficiência de análises separadas de cada bloco do fatorial completo, para fins didáticos, por interesse dos pesquisadores. O modelo adotado considerou os efeitos de controle local, efeitos principais e quadráticos puros de todos os fatores, além dos efeitos das interações duplas dos fatores do fatorial completo. O critério de eficiência para a escolha dos pontos experimentais foi a variância média esperada das estimativas dos efeitos de todos os fatores, sem considerar os efeitos de blocos (Critério A-optimalidade restrita). Após uma rodada de intercâmbio diminuiu 4,02% a variância do plano em relação ao valor médio da distribuição dos possíveis delineamentos. Com o plano encontrado é possível estimar todos os efeitos de interesse. Adicionalmente avaliou-se o experimento real implantado, medido aos seis meses para alguns caracteres agronômicos. O plano sofreu algumas alterações na implementação e foi calculada a perda de eficiência devido a este problema calculando o critério de optimalidade para o delineamento efetivamente praticado. O delineamento praticado foi sub-ótimo em relação ao proposto tendo sido, porém, relativamente eficiente, levando a afirmações de significância pelo teste F para vários dos fatores em estudo preliminar. Foi também possível mostrar que a variância das estimativas de efeitos derivados do fatorial completo foi maior que a das estimativas de efeitos principais e termos quadráticos no fatorial fracionário. Desta forma, recomenda-se o maior uso em agronomia, de fatoriais fracionários, ou ainda de delineamentos combinados que envolvam fatoriais completos e fatoriais fracionários, por constituírem estratégia flexível e de maior precisão em experimentação.

Palavras-chave: Algoritmo de troca. Algoritmo de intercâmbio. Delineamento combinado. Delineamento de triagem.

ABSTRACT

This thesis is derived from a case study in plant nutrition where the researchers' demand was to plan an experiment involving 14 factors representing supplements for banana fertilization, being seven soil fertilizers and seven leaf fertilizers. The objective was to evaluate the changes in growth, physiology and productivity, provided by these factors. The initial size the researchers envisioned for the experiment was 216 experimental units. This was an important constraint for researchers because of the availability of only 90 experimental units. The solution (experimental design) proposed for the experiment was based on the design of screening designs. The idea was to combine replicates of this design in each block in a complete factorial, in the same experiment. Exchange and Interchange algorithms were employed to concatenate the four factor levels of a complete factorial (3^4 series) with 10 a factorial fractional factors, consisting of series screening designs (3^{10-6}) in four blocks that additionally contain the 0 level for all factors. The objective of maintaining the fractional factorial was to verify the efficiency of separate analyzes of each block of the complete factorial, for didactic purposes, for the researchers' interest. The model considered the effects of local control, pure main and quadratic effects of all factors, besides the effects of double factorial interactions of the complete factorial. The efficiency criterion for the choice of experimental points was the expected mean variance of the estimates of the effects of all factors, without considering the effects of blocks (A-Criterion - restricted optimality). After one round of interchanges the variance of the best design was diminished 4,02% the average variance over possible designs distribution. With the best design found it was possible to estimate all the effects of interest. Additionally the actual experiment was evaluated at six months for some agronomic traits. The plan underwent some changes in the implementation and the loss of efficiency due to this problem was calculated by calculating the optimality criterion for the actual design. This design was changed in practice and was suboptimal, however it was relatively efficient, leading to assertions of significance by the F test for several of the factors in a preliminary study . It was also possible to show that the variance of the factorial-derived effects estimates was greater than the estimates of principal effects and quadratic terms in the fractional factorial. In this way, it is recommended the greater use in agronomy, of fractional factorials, or of combined designs that involve complete factorial and fractional factorial, since they are a flexible strategy and of greater precision in experimentation.

Keywords: Combining design. Exchange algorithm. Interchange algorithm. Screening design.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Superfície de resposta para o rendimento percentual de um processo químico em função dos fatores pressão e temperatura de reação.	42
Figura 2.2 – Aspecto da interação entre os fatores Etanol e Propanol.	52
Figura 2.3 – Efeitos estimados dos fatores para o experimento de polimerização de gases residuais.	55
Figura 4.1 – Densidade dos valores do critério de optimalidade dos delineamentos possíveis, com o melhor delineamento encontrado ao acaso marcado em vermelho.	64
Figura 4.2 – Densidade dos valores do critério de optimalidade. O delineamento encontrado com uma rodada do algoritmo de trocas está marcado em azul à esquerda.	65
Figura 4.3 – Verossimilhança perfilhada do parâmetro λ para os dados da variável resposta Altura	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Plano experimental para comparar seis tratamentos em seis blocos de cinco unidades experimentais.	18
Tabela 2.2 – Plano experimental para comparar seis tratamentos em seis blocos de quatro.	18
Tabela 2.3 – Tratamentos de um PBIB com seus primeiros e segundos associados.	19
Tabela 2.4 – Plano experimental para comparar sete tratamentos em sete blocos de três.	20
Tabela 2.5 – Partição de 2^2 tratamentos com confundimento do efeito do fator B com o efeito de blocos.	21
Tabela 2.6 – Partição dos tratamentos de um esquema fatorial 2^3 em dois blocos de quatro parcelas, com confundimento completo da interação tripla ABC. O bloco I contém apenas combinações que são pares para o número de fatores em seu nível mais alto; o bloco II, os ímpares.	21
Tabela 2.7 – Aspecto do confundimento completo da interação ABC com blocos.	22
Tabela 2.8 – Fração 2^{3-1} proveniente das combinações com $L = 1 \pmod{2}$ para a interação ABC.	22
Tabela 2.9 – Parte da matriz aliás resultante do fatorial fracionário 2^{3-1} com estrutura de confundimento completo de efeitos principais com efeitos de interação entre dois fatores.	22
Tabela 2.10 – Contraste do fator BC ilustrando a independência (ortogonalidade) entre este fator e blocos	23
Tabela 2.11 – Confundimento parcial de um delineamento 2^3 . Interação confundida: repetição 1 (ABC); 2 (AB); 3 (BC); 4 (AC)	23
Tabela 2.12 – Informação disponível (75%) e confundida (25%) da interação tripla ABC.	24
Tabela 2.13 – Parte da matriz aliás do delineamento proveniente das quatro repetições em oito blocos de 4 unidades, com a estratégia de confundir uma interação diferente em cada repetição.	24
Tabela 2.14 – Resumo da informação disponível de cada efeito de interação para cada estratégia de delineamento (em % de informação).	24
Tabela 2.15 – Distribuição de 2^4 tratamentos nos fatores A, B, C e D, em quatro blocos de quatro	25
Tabela 2.16 – Sinal da interação ABD nos quatro blocos	25

Tabela 2.17 – Uma repetição do fatorial 2^4 com 1 interação livre de efeitos de blocos e demais idênticas a blocos	25
Tabela 2.18 – Duas repetições de 2^4 com a estratégia A e BD igualmente importantes . . .	26
Tabela 2.19 – Parte da matriz aliás do delineamento ilustrando os três aspectos do confundimento.	26
Tabela 2.20 – Plano 2^{6-2} com geradores I=ABCE e I=BCDF	27
Tabela 2.21 – Partição da fração $\frac{1}{4}$ do fatorial 2^6 em dois blocos de 8 unidades como o confundimento da tripla ABD	27
Tabela 2.22 – Matriz do delineamento do fatorial 3^2	28
Tabela 2.23 – Análise de variância de um fatorial 3^2 planejado em DIC com r repetições.	29
Tabela 2.24 – Partição das 3^2 combinações por meio do contraste $L = x_1 + 2x_2 \text{ mod}(3)$	29
Tabela 2.25 – Partição das 3^3 combinações por meio do contraste $L = x_1 + 2x_2 + 2x_3 \text{ mod}(3)$	30
Tabela 2.26 – Esquema da análise de variância para o fatorial 3^3 com confundimento parcial de ABC.	31
Tabela 2.27 – Conjunto de níveis e fatores de uma estrutura fatorial 3^{5-2}	31
Tabela 2.28 – Duas possibilidades de delineamento 3^2 em três blocos de três	32
Tabela 2.29 – Contrastes ortogonais de tratamentos para a estrutura fatorial 3^2 em blocos de 3.	32
Tabela 2.30 – Duas repetições do fatorial 3^2 em seis blocos de três com confundimento parcial do efeito linear x linear da interação PQ	35
Tabela 2.31 – Ocorrência das combinações da interação (ABC) nos blocos no mesmo número de vezes.	36
Tabela 2.32 – Plano para a estrutura fatorial 2^33 em dois blocos de 12 unidades com interação (ABC) completamente confundida com blocos.	36
Tabela 2.33 – Frequência de ocorrência das oito combinações em cada bloco, segundo o padrão dos termos + e – da interação	37
Tabela 2.34 – Plano para a estrutura fatorial 2^33 em dois blocos de 12 unidades com interação ABC parcialmente confundida com blocos.	37
Tabela 2.35 – Aspecto da matriz aliás ao confundir-se a interação ABC com blocos: completa e parcialmente.	38
Tabela 2.36 – Delineamento para $\frac{1}{2}$ fração da estrutura fatorial 2^33^2 em três blocos de 12 unidades	40

Tabela 2.37 – Fração $\frac{1}{2}$ da estrutura fatoriais 2^33^2 que confunde DE parcialmente com blocos	40
Tabela 2.38 – Fração $\frac{1}{6}$ do fatorial 2^33^2	42
Tabela 2.39 – Delineamentos otimizado e de Box–Behnken para ajuste do modelo de efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores.	44
Tabela 2.40 – Estrutura de confundimento parcial dos níveis dos fatores no delineamento otimizado pelos algoritmos de troca e intercâmbio.	45
Tabela 2.41 – Distribuição dos níveis do fator AB no bloco I	45
Tabela 2.42 – Distribuição dos níveis do fator AB no bloco II	45
Tabela 2.43 – Designação de tratamentos da estrutura fatorial 2^4 em dois blocos segundo o padrão de combinações pares e ímpares da interação (confundida) ABCD.	46
Tabela 2.44 – Designação de tratamentos da estrutura fatorial 2^4 em quatro blocos segundo o padrão de combinações pares e ímpares da interação (confundida) ABC após confundimento de ABCD.	46
Tabela 2.45 – Divisão das 3^2 combinações de tratamentos para $\alpha = 2$ e $\beta = 1$	47
Tabela 2.46 – Matriz aliás para o experimento de extração indicando o potencial para o viés nas estimativas dos efeitos principais devido a interações de dois fatores.	50
Tabela 2.47 – Delineamento para triagem de fatores visando melhoria no processo de extração de inibidores do crescimento de micróbios comuns em alimentos processados, usando níveis codificados.	51
Tabela 2.48 – Estimativas de parâmetros com respectivos erros padrão conforme modelos de efeitos principais somente e com interação; asterisco indica que os efeitos são significativamente diferentes de zero com 95% de confiança.	53
Tabela 2.49 – Delineamento alternativo	53
Tabela 2.50 – Estrutura geral de DSDs para k fatores	57
Tabela 2.51 – Níveis de um DSD_{10}	57
Tabela 4.1 – Valores do critério de variância média nas análises de cada bloco. Situações em que os delineamento são derivados, do conjunto base ou do algoritmo de trocas.	66
Tabela 4.2 – Valores dos traços obtidos para os delineamentos fatoriais: completo e fracionário. Situações em que: os delineamentos adotados são o praticado, e o melhor delineamento encontrado após uma rodada de intercâmbio.	67

Tabela 4.3 – Estrutura de confundimento parcial dos níveis das interações duplas com blocos para o delineamento otimizado pelo algoritmo de troca e intercâmbio. Valores da matriz multiplicados por 21.	68
Tabela 4.4 – Estrutura de confundimento parcial dos níveis dos efeitos principais dos fatores no delineamento otimizado. Valores da matriz multiplicados por 21.	68
Tabela 4.5 – Tabela da análise de variância para a resposta Altura.	70
Tabela 4.6 – Estimativas dos coeficientes para a resposta Altura.	71
Tabela 6.1 – Delineamento otimizado	92
Tabela 6.2 – Delineamento praticado	94

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	REFERENCIAL TEÓRICO	17
2.1	Estratégias de experimentação	17
2.2	Experimentos fatoriais	20
2.2.1	Fatoriais 3^k	28
2.2.2	Blocagem em fatoriais 3^k	31
2.2.3	Fatoriais assimétricos	35
2.3	Delineamentos de superfícies de resposta	42
2.4	Teoria matemática de confundimento	45
2.4.1	Regra de Confundimento de Fisher	46
2.4.2	Confundimento clássico para 3^k	47
2.5	Eficiência e estrutura de aliases	48
2.6	Delineamentos de Triagem Definitiva	54
3	MATERIAL E MÉTODOS	59
3.1	Material	59
3.2	Métodos	60
3.2.1	Delineamento inicial e o algoritmo	60
3.2.2	Critério de optimalidade	61
3.2.3	Modelo linear de Gauss-Markov normal	62
3.2.4	Estrutura do delineamento combinado	63
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	64
4.1	Delineamento inicial e distribuição dos critérios	64
4.2	Eficiência do delineamento praticado (sub-ótimo)	67
4.3	Esquema de aliases do plano resultante	67
4.4	Exemplo da análise de variância	68
5	CONCLUSÕES	72
6	ANEXOS	76

1 INTRODUÇÃO

Para alcançar um bom plano experimental, o pesquisador deve primeiro considerar o conjunto de tratamentos apropriados aos objetivos do experimento, e pensar sobre as unidades experimentais. De um plano experimental eficiente espera-se que seja capaz de fornecer informações suficientes das diferenças entre tratamentos sob avaliação. Desse modo, as decisões para as quais o experimento foi conduzido podem ser tomadas com confiança.

Além disso, considerações econômicas podem ser importantes e devido aos custos envolvidos, o uso do menor número possível de unidades experimentais deve ser buscado.

Uma estratégia importante para a construção de um plano experimental é a estrutura fatorial de tratamentos. Nestas estruturas as combinações de níveis dos fatores possibilitam que várias questões sejam respondidas em uma só montagem do experimento. Por exemplo, se efeitos de interações entre dois ou mais fatores são ativos.

Um aspecto importante de fatoriais completos, é o fato do número de tratamentos aumentar rapidamente com o aumento do número de níveis dos fatores de interesse. Este problema é percebido especialmente em experimentos em que existe a necessidade de controle local (restrição na aleatorização), em que a obtenção de áreas uniformes em toda a sua extensão é mais difícil. Nestes casos, os delineamentos em blocos completos são inviáveis e blocos menores (incompletos) são alternativas adequadas. Porém, o desafio agora é a escolha dos tratamentos que deverão compor os blocos. Para alcançar maior eficiência, esta missão é reservada aos chamados algoritmos de busca. Outro problema de planejamento que advém da utilização de blocos incompletos é o surgimento de *confundimento*¹ (total ou parcial) dos efeitos de alguns tratamentos com blocos.

Se por um lado isso pode tornar alguns experimentos inviáveis, por outro, tem importância crucial em experimentos cujo propósito é a seleção de fatores relevantes. Os assim chamados *screening designs*, que são delineamentos para a triagem de fatores, são empregados em etapas iniciais de um experimento, em que há pouco conhecimento sobre quais os fatores são importantes em determinado fenômeno, sendo que o conjunto inicial de fatores potenciais é grande. Desta forma, o principal objetivo desse tipo de experimento é a seleção de menor conjunto de fatores ativos possível.

¹ Presença de efeitos de blocos na esperança dos níveis de tratamentos ou efeitos principais.

A questão é que esta seleção deve ser realizada de forma eficiente. Caso contrário, pode ocorrer de um fator não ser incluído nas etapas subsequentes do experimento, caso seu efeito pareça menor do que realmente é. O que traz ineficácia à pesquisa. Planejar, para que problemas desta natureza sejam minimizados, deve ser uma meta do experimentador.

Tradicionalmente fatoriais fracionários de resolução III e IV (Box e Hunter, 1961) e os delineamentos de Plackett–Burman (1946) são utilizados em experimentos de triagem. Estes delineamentos são ortogonais e considerados ótimos por fornecerem estimativas independentes dos efeitos principais. No entanto, ao empregar esses delineamentos, o experimentador pressupõe a inexistência de efeitos de interações entre dois ou mais fatores. Ora, na presença eventual de efeitos (ativos) de segunda ordem, o confundimento de efeitos principais e interações produz viés nos resultados. Outra limitação desses delineamentos deve-se ao fato de considerarem apenas fatores em dois níveis. Na presença de efeitos quadráticos, estes não são considerados, inflacionando o erro experimental (Goss, 2016). O recurso de adicionar pontos centrais para estimação da curvatura, o faz apenas globalmente, e não individualmente. Desta forma o teste para efeito de curvatura (para cada fator) não pode ser realizado. Isso significa ambiguidade na identificação do fator causador de tal efeito.

Jones e Nachtsheim (2011) apresentaram uma nova classe de delineamentos de triagem, os DSDs (sigla em inglês para delineamentos de triagem definitiva). Estes delineamentos são capazes de estimar os efeitos principais sem o viés de qualquer efeito de segunda ordem (efeito *foldover*) bem como todos os efeitos quadráticos (habilidade garantida pelo ponto central em cada linha).

Entretanto, se ambos, interações duplas e efeitos quadráticos puros são ativos, pode haver alguma correlação (DSDs podem ser não ortogonais). Segundo os autores, em termos de D-eficiência, os DSDs apresentam uma perda, tipicamente em torno 10 % para estimação de efeitos principais. Esta perda é compensada pela capacidade de estimar os efeitos quadráticos puros, além dos principais de cada fator.

A principal vantagem desses delineamentos advém da adoção de fatores em três níveis. Pesquisadores preferem esta abordagem pois possibilita a detecção do efeito de curvatura na relação entre o fator quantitativo e a resposta. E com um número mínimo de $2k + 1$ ensaios, sendo k , o número de fatores.

Por conta de suas propriedades atrativas, os DSDs vêm sendo muito praticados, e com os resultados obtidos em vários estudos têm se mostrado interessante novidade para a triagem de fatores.

Neste trabalho também pretende-se aplicar a metodologia de DSDs, com o propósito de determinar um arranjo de pontos experimentais que otimizem o uso de suplementos à base de Cálcio em cultivos de bananeiras.

A solução proposta foi a construção de um delineamento fatorial proveniente da combinação de um fatorial completo 3^4 com DSDs em cada bloco, no mesmo experimento, a partir da abordagem desenvolvida por Jones e Nachtsheim (2011).

Desta forma, os objetivos deste trabalho são:

1. verificar a viabilidade de algoritmos do tipo intercâmbio para a construção de planos experimentais baseada na combinação de DSDs e fatoriais completos;
2. construir um fatorial completo de 4 fatores em 3 níveis (doses de aplicação) cada, suplementados de 3 repetições extra do nível central, totalizando 84 parcelas experimentais;
3. construir um fatorial fracionário (3^{10-6}) para os 10 fatores restantes, em 3 níveis (doses de aplicação) cada, suplementados de 3 repetições extra do nível central.

Para tanto, o restante das secções é organizado como segue. Na próxima está uma revisão sobre critérios de optimalidade, teoria dos fatoriais completos e fracionários, incluindo estratégias de confundimento em experimentos das séries 2^k e 3^k , e finalizando com a descrição dos delineamentos de triagem definitiva. Na secção seguinte, encontra-se descrita a metodologia deste trabalho, incluindo o roteiro para desenvolver o delineamento proposto. Na secção de resultados e discussão apresenta-se propriedades do delineamento resultante e do experimento implementado a campo. Uma secção adicional resume as principais conclusões. Nos anexos, encontram-se os códigos em linguagem R que permitiram desde a construção de fatoriais fracionários e suas matrizes de aliases, até o cálculo da variância (e eficiência) de delineamentos para um dado modelo, finalizando com a descrição do algoritmo de obtenção de delineamentos combinados.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Essa seção aborda conceitos em experimentação, importantes no contexto do objetivo do trabalho. Embora o foco seja em planejamento, métodos de análises de dados provenientes de experimentos reais são discutidos por meio de exemplos. Uma revisão sobre delineamentos de triagem definitiva é apresentada.

2.1 Estratégias de experimentação

As contribuições de Fisher e Yates no campo de planejamento de experimentos remontam a 1920, ano de fundação da Estação de Agricultura Experimental de Rothamsted, perto de Londres. Provavelmente, este foi o primeiro lugar a ter um departamento regular de estatística. Embora os trabalhos precursores tenham se desenvolvido no campo da agricultura, os princípios apresentados se estendem amplamente a diversas outras áreas.

Experimentos podem apresentar grande variabilidade em termos de resultados (como em ciências biológicas por exemplo). Variabilidade esta que advém tanto da complexidade dos procedimentos de medição, quanto da variabilidade inerente ao material experimental. Deste modo, a busca constante por experimentos úteis e eficientes deve ser uma prática constante das pesquisas.

Algumas questões devem ser levantadas na fase de planejamento de um experimento. Ao escolher-se as variáveis (ou fatores) de entrada, escolhidas para investigação, espera-se que sejam as mais prováveis de causarem efeito na resposta. A metodologia empregada na coleta dos dados, deve buscar garantir que o valor observado na resposta seja resultado representativo do experimento.

Para que o experimento seja capaz de responder às questões para as quais foi planejado, o experimentador deve ter uma compreensão razoável dos prováveis padrões de variação na resposta, quais os fatores devem ser de fato investigados, se há necessidade de alguma forma de controle local, e se os tratamentos escolhidos de fato vão permitir às respostas emergirem.

A experimentação pode ser vista como um processo de causa e efeito, um desafio é a identificação das variáveis (ou fatores) que afetam a resposta de um determinado processo ou sistema, de modo que o mesmo seja minimamente afetado por eventuais efeitos perturbadores. Se a fonte de tais efeitos é desconhecida, dela surge a variabilidade aleatória do experimento. Caso contrário, como em experimentos de campo por exemplo, em que muitas parcelas são uti-

lizadas, pode ser eliminada de forma sistemática, mediante a técnica de blocagem (uma questão de prevenção de problemas).

Em algumas situações, o conjunto de tratamentos se ajusta diretamente à uma estrutura padrão de unidades experimentais. Neste caso, o experimento já está planejado, caso contrário, um plano experimental deverá ser construído. Daí, o porquê de uma teoria de planejamento de experimentos.

Para introduzir as ideias de blocagem, nos exemplos iniciais os tratamentos são assumidos sem qualquer estrutura, e as comparações igualmente importantes.

Exemplo 1. Se seis tratamentos A – F devem ser comparados em 6 blocos de 5 unidades experimentais, então, a estratégia intuitiva (e correta), de omitir um tratamento em cada bloco, é a mais eficiente (Tabela 2.1). Isso por quê, como os delineamentos em blocos completos constituem-se no mais eficiente sistema de blocagem possível, é esperado que pequenas modificações nestes, forneçam planos com alta eficiência.

Tabela 2.1 – Plano experimental para comparar seis tratamentos em seis blocos de cinco unidades experimentais.

Blocos					
I	II	III	IV	V	VI
A	A	A	A	A	B
B	B	B	B	C	C
C	C	C	D	D	D
D	D	E	E	E	E
E	F	F	F	F	F

Exemplo 2. Supondo-se que um experimento consiste em comparar seis tratamentos, mas que se dispõe de apenas 24 parcelas. Um plano possível, mostrado antes do processo de *aleatorização*¹ é dado pela Tabela 2.2.

Tabela 2.2 – Plano experimental para comparar seis tratamentos em seis blocos de quatro.

Blocos					
I	II	III	IV	V	VI
A	B	A	A	B	A
B	C	C	B	C	C
D	E	D	D	E	D
E	F	F	E	F	F

¹ Palavra chave em experimentação. Segundo P. John, o mínimo que se pode dizer para sua recomendação, é que aleatorização é a única forma prudente de evitar a introdução do erro sistemático no experimento. Ademais, Fisher (1937) mostrou que a aleatorização é a base para a obtenção de testes de significância e intervalos de confiança.

Tal plano, que omite dois tratamentos diferentes em cada bloco, pode ser caracterizado por apresentar um balanceamento parcial, com dois níveis de precisão, ou, equivalentemente, duas classes de associados e pertence à classe dos blocos incompletos parcialmente balanceados (PBIB), como mostra a Tabela 2.3.

Tabela 2.3 – Tratamentos de um PBIB com seus primeiros e segundos associados.

		Tratamentos					
		A	B	C	D	E	F
$\lambda = 1$	D	E	F	A	B	C	
	B	A	A	B	A	A	
$\lambda = 2$	C	C	B	C	C	B	
	E	D	D	E	D	D	
	F	F	E	F	F	E	

Neste caso os tratamentos *A* e *D* aparecem simultaneamente nos blocos quatro vezes, da mesma forma que os tratamentos *B* e *E*, e *C* e *F* (primeiros associados); já os doze pares restantes, duas vezes (segundos associados), conforme atestado pela matriz de concorrência dos tratamentos NN^T , sendo N , é a matriz de incidência dos tratamentos nos blocos, como segue (Anexo 6.1).

$$NN^T = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 & 4 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 4 & 2 & 2 & 4 \\ 4 & 2 & 2 & 4 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 4 & 2 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

Exemplo 3. Da classe dos delineamentos em blocos incompletos balanceados (BIB) um plano possível para se comparar 7 tratamentos em 7 blocos de 3 unidades, é apresentado na Tabela 2.4. Essencialmente, em um BIB, os v tratamentos são alocados em b blocos de mesmo tamanho k , cada par de tratamento ocorrendo juntos em um bloco o mesmo número λ de vezes, de modo que pode ser verificada a relação

$$r(k-1) = (v-1)\lambda$$

Tabela 2.4 – Plano experimental para comparar sete tratamentos em sete blocos de três.

Blocos						
I	II	III	IV	V	VI	VII
A	B	C	D	E	F	G
B	C	D	E	F	G	A
D	E	F	G	A	B	C

Neste delineamento há um único padrão de variância para as diferenças de tratamentos. Dessa forma as comparações de tratamentos tem igual precisão. Neste caso o aspecto da matriz de concorrência dos tratamentos para o plano é

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 3 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

2.2 Experimentos fatoriais

Até este ponto, os efeitos de tratamentos são assumidos sem qualquer estrutura e todas comparações com igual importância. Na chamada estrutura fatorial, os tratamentos trazem uma ordem implícita; sendo os efeitos principais mais importantes que os efeito de interação entre fatores, estas mais importantes que as triplas, e assim por diante. Um experimento fatorial considera todas as possibilidades de combinações dos níveis dos fatores. Isso possibilita que várias questões sejam respondidas na mesma experiência e que o efeito da interação entre os fatores sejam examinados.

Uma característica marcante dos experimentos co estrutura fatorial é o fato de o número de possíveis combinações de níveis aumentar rapidamente, tornando muitas vezes inviável a execução de todos os tratamentos. Os assim chamados fatoriais fracionários utilizam somente uma parte (ou fração) dos tratamentos e se mostram muito eficientes. A forma com que a fração é escolhida pode afetar drasticamente o delineamento.

Buyske e Trout (2001) apresentam um experimento em que determinado material precisa ser provado. Os fatores de interesse são o raio (centro versus borda) e profundidade (topo versus meio). A amostragem foi feita em dois momentos; os tratamentos (1) e *a* são ensaiados primeiro, posteriormente, *b* e *ab*. Percebe-se pela Tabela 2.5 que o experimentador não é capaz de distinguir por exemplo, se uma eventual diferença é devida a um determinado tratamento, ou à forma com que os mesmos foram agrupados; claramente o efeito de blocos e do fator B estão confundidos.

Tabela 2.5 – Partição de 2^2 tratamentos com confundimento do efeito do fator B com o efeito de blocos.

Tratamento	A	B	AB	Bloco
(1)	-	-	+	I
a	+	-	-	I
b	-	+	-	II
ab	+	+	+	II

Se o experimento for planejado para que os tratamentos (1) e *ab* ocorram ao mesmo tempo, e *a* e *b* ocorram ao mesmo tempo, o problema é evitado. Todavia, se o interesse for o efeito conjunto dos fatores (interação), a primeira estratégia é a mais adequada.

Em termos do fatorial 2^3 , havendo necessidade do uso de dois blocos, uma estratégia é confundir o efeito da interação dos três fatores ABC, por ser mais difícil interpretar na prática. Uma forma de partição das combinações de tratamentos é conforme o número de fatores em seu nível alto sejam pares ou ímpares (Tabela 2.6). Neste caso a "palavra" ABC é chamada gerador, de modo que se possa chamar $I=ABC$, de relação definidora da fração particular (Lima 2009).

Tabela 2.6 – Partição dos tratamentos de um esquema fatorial 2^3 em dois blocos de quatro parcelas, com confundimento completo da interação tripla ABC. O bloco I contém apenas combinações que são pares para o número de fatores em seu nível mais alto; o bloco II, os ímpares

I	II
---(0)	--+(1)
-++(2)	-+- (1)
+--(2)	+--(1)
++-(2)	+++ (3)

Nota-se que o estimador do efeito da interação ABC é idêntico ao estimador do efeito de blocos; diz-se que ABC está completamente confundida com blocos.

$$ABC = \frac{1}{4} \left\{ \overbrace{[a + b + c + abc]}^{II} - \overbrace{[(1) + ab + ac + bc]}^{I} \right\}$$

Outro modo de entender a lógica do confundimento de ABC é por meio do contraste definidor $L = x_1 + x_2 + x_3 \pmod{2}$. Em termos da matriz aliás tal fato pode ser atestado pela Tabela 2.7 (Anexo 6.2).

Tabela 2.7 – Aspecto do confundimento completo da interação ABC com blocos.

Bloco	A	B	C	AB	AC	BC	ABC
1	0	0	0	0	0	0	-1
2	0	0	0	0	0	0	1

Atentando-se para o conjunto das combinações que compõem o bloco II (Tabela 2.8), nota-se que os efeitos de C e AB são aliases. O mesmo ocorre com os efeitos de A e BC, B e AC. No caso da fração 2^{4-1} verifica-se os efeitos principais são aliases das interações entre três fatores: A com BCD, B com ACD, C com ABD e D com ABC (Anexo 6.3).

Tabela 2.8 – Fração 2^{3-1} proveniente das combinações com $L = 1 \pmod{2}$ para a interação ABC.

Tratamento	A	B	C	AB	ABC
a	+	-	-	-	+
b	-	+	-	-	+
c	-	-	+	+	+
abc	+	+	+	+	+

Tais fatos refletem o aspecto de correlação perfeita entre esses efeitos conforme pode ser observado na Tabela 2.9. Na prática a estrutura de aliases é obtida multiplicando-se cada efeito em ambos os lados da relação definidora deletando qualquer letra que surge com potência dois.

$$A = A(ABC) = A^2BC = BC$$

Tabela 2.9 – Parte da matriz aliás resultante do fatorial fracionário 2^{3-1} com estrutura de confundimento completo de efeitos principais com efeitos de interação entre dois fatores.

	I(AB)	I(AC)	I(BC)
I(A)	0	0	1
I(B)	0	1	0
I(C)	1	0	0

No caso de necessidade do uso de quatro blocos, escolhendo-se os efeitos de BC e ABC para serem confundidos, o terceiro fator confundido é A. De fato

$$(BC)(ABC) = AB^2C^2 = A$$

Por outro lado, se AB e BC são escolhidos, AC é o terceiro fator confundido, ficando livres de efeitos de blocos as estimativas dos efeitos principais.

Um aspecto importante da estimação é a *ortogonalidade*². Diz-se que efeitos de tratamentos e blocos são ortogonais, se há independência; a estimação dos efeitos dos tratamentos é livre do efeito de blocos. No presente exemplo, todas as interações duplas são ortogonais aos blocos. A Tabela 2.10 ilustra este fato com relação ao efeito da interação BC, em particular; os níveis altos e baixos da interação BC sendo distribuídos uniformemente nos blocos.

Tabela 2.10 – Contraste do fator BC ilustrando a independência (ortogonalidade) entre este fator e blocos

I		II	
(1)	(+)	<i>b</i>	(-)
<i>ab</i>	(-)	<i>a</i>	(+)
<i>ac</i>	(-)	<i>abc</i>	(+)
<i>bc</i>	(+)	<i>c</i>	(-)

Tal procedimento pode ser usado para confundir qualquer efeito com blocos. Dessa forma, caso haja recursos para quatro repetições do delineamento confundido, o melhor é que em cada repetição seja confundida uma interação diferente, pois assim, alguma informação (parcial) de todos os efeitos é obtida. Por exemplo, por meio da repetições 1, 2 e 4 (Tabela 2.11), $\frac{3}{4}$ da informação contida na interação tripla ABC será obtida (informação não confundida).

Tabela 2.11 – Confundimento parcial de um delineamento 2³. Interação confundida: repetição 1 (ABC); 2 (AB); 3 (BC); 4 (AC)

Repetição	1		2		3		4	
Blocos	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
(1)	<i>a</i>		(1)	<i>a</i>	(1)	<i>b</i>	(1)	<i>a</i>
<i>ab</i>	<i>b</i>		<i>c</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>c</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
<i>ac</i>	<i>c</i>		<i>ab</i>	<i>ac</i>	<i>bc</i>	<i>ab</i>	<i>ac</i>	<i>ab</i>
<i>bc</i>	<i>abc</i>		<i>abc</i>	<i>bc</i>	<i>abc</i>	<i>ac</i>	<i>abc</i>	<i>bc</i>

Em termos de informação disponível, o mesmo vale para as interações AB, AC, BC e ABC. A Tabela 2.12, a seguir, ilustra como a proporção de informação de ABC, disponível e confundida, pode ser checada visualmente.

² As vantagens que havia em se praticar delineamentos ortogonais em relação à forma de cálculo estão reduzidas pois hoje é possível realizar estimativas usando métodos como a Máxima Verossimilhança Restrita ou Residual, capaz de estimar componentes de variância bem como efeitos de tratamentos em dados desbalanceados; método proposto por Patterson e Thompson, em 1971 (Searle, Casella e McCulloch - 1992). É preciso notar no entanto que ortogonalidade e menor variância continuam associados e, se possível os delineamentos devem evitar confundimentos

Tabela 2.12 – Informação disponível (75%) e confundida (25%) da interação tripla ABC.

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
-	+	-	+	-	+	-	+
-	+	+	+	+	+	+	+
-	+	-	-	-	-	-	-
-	+	+	-	+	-	+	-

O confundimento parcial dos efeitos, e reflete-se na proporção das entradas nulas, na matriz de aliases, em relação a cada um desses efeitos com mostra a Tabela 2.13 (Anexo 6.4).

Tabela 2.13 – Parte da matriz aliás do delineamento proveniente das quatro repetições em oito blocos de 4 unidades, com a estratégia de confundir uma interação diferente em cada repetição.

Bloco	AB	AC	BC	ABC
1	0	0	0	-1
2	0	0	0	1
3	1	0	0	0
4	-1	0	0	0
5	0	0	1	0
6	0	0	-1	0
7	0	1	0	0
8	0	-1	0	0

É, pois, importante considerar a informação relativa ou precisão para cada efeito a ser estimado. A Tabela 2.14 resume a informação disponível do efeito das interações AB, AC, BC e ABC, para duas estratégias de delineamento (Anexo 6.5):

- (i) confundimento diferente em cada repetição (AB, AC, BC e ABC);
- (ii) mesmo confundimento (interação tripla ABC) em todas as repetições.

Tabela 2.14 – Resumo da informação disponível de cada efeito de interação para cada estratégia de delineamento (em % de informação).

Efeito	Estratégias	
	(a)	(b)
AB	75	100
AC	75	100
BC	75	100
ABC	75	0

Similar identificação de contrastes pode ser observada no delineamento 2^4 em quatro blocos de tamanho quatro (Tabela 2.15).

Tabela 2.15 – Distribuição de 2^4 tratamentos nos fatores A, B, C e D, em quatro blocos de quatro

Blocos			
I	II	III	IV
0000	0011	0001	0010
0111	0100	0110	0101
1011	1000	1010	1001
1100	1111	1101	1110

Os contraste de blocos são idênticos aos contrastes de tratamentos, como segue.

(i) $b_1 + b_2 - b_3 - b_4 \equiv ABC$

(ii) $b_1 - b_2 + b_3 - b_4 \equiv ABD$

(iii) $b_1 - b_2 - b_3 + b_4 \equiv CD$

Para uma melhor compreensão desses fatos, a Tabela 2.16 reproduz a Tabela 2.15, dando ênfase apenas aos sinais da interação ABD em cada bloco, de modo a elucidar a identificação do efeito desta interação, com o contraste $b_1 - b_2 + b_3 - b_4 = (b_3 - b_4) - (b_2 - b_1)$.

Tabela 2.16 – Sinal da interação ABD nos quatro blocos

Blocos			
I	II	III	IV
-	+	+	-
-	+	+	-
-	+	+	-
-	+	+	-

Neste plano é possível por exemplo, observar que o efeito da interação AB é livre do efeito de blocos (Tabela 2.17). Por conta das entradas nulas na matriz de aliases (Anexo 6.6).

Tabela 2.17 – Uma repetição do fatorial 2^4 com 1 interação livre de efeitos de blocos e demais idênticas a blocos

Bloco	AB	CD	ABC	ABD
1	0	1	-1	-1
2	0	1	1	1
3	0	-1	-1	1
4	0	-1	1	-1

Uma segunda repetição (Tabela 2.18) da estrutura 2^4 (arranjando para que diferentes interações sejam confundidas em cada repetição), pode ser construída. Assumindo A e BD

igualmente importantes, todos os efeitos principais e interações duplas (exceto BC) são ortogonais a blocos. Por inspeção, os dois outros efeitos confundidos são ABD e (de novo) ACD.

Tabela 2.18 – Duas repetições de 2^4 com a estratégia A e BD igualmente importantes

Blocos							
I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
0000	0011	0001	0010	0000	0010	0001	0011
0111	0100	0110	0101	0111	0101	0110	0100
1011	1000	1010	1001	1001	1011	1000	1010
1100	1111	1101	1110	1110	1100	1111	1101

A matriz aliás do delineamento mostra o fornecimento de informação completa para o efeito de BD, livre de confundimento (entradas nulas), a interação ABD confundida em ambas as repetições (confundimento completo) e o confundimento parcial (metade da informação) de BC, CD, ABC, por exemplo (Tabela 2.19).

A escolha do delineamento (estrutura de confundimento), isto é, a informação resultante de cada efeito, depende do que o experimentador julga ser importante. O efeito de um tratamento considerado irrelevante pode ser escolhido para ser confundido completamente. Contudo, o mais provável é que o delineamento que espalha a informação sobre as interações de modo uniforme seja mais atrativo.

Tabela 2.19 – Parte da matriz aliás do delineamento ilustrando os três aspectos do confundimento.

Bloco	BC	BD	CD	ABC	ABD	BCD	ABCD
1	0	0	1	-1	-1	0	0
2	0	0	1	1	1	0	0
3	0	0	-1	-1	1	0	0
4	0	0	-1	1	-1	0	0
5	1	0	0	0	-1	0	0
6	-1	0	0	0	-1	0	0
7	1	0	0	0	1	0	0
8	-1	0	0	0	1	0	0

Vê-se que uma fração da estrutura 2^k menor que $\frac{1}{2}$ requer mais que um contraste definidor, o que reduz de forma considerável o número de interações duplas que podem ser estimadas sem aliases. Em geral o número de contrastes definidores para a fração $\frac{1}{n}$ será $(n - 1)$.

Um plano proveniente da fração $\frac{1}{4}$ do fatorial 2^6 por exemplo (Tabela 2.20), pode ser construído a partir do delineamento básico associado ao fatorial completo em 2^{6-2} fatores. Se

$I=ABCE$ e $I=BCDF$ são os geradores do plano fracionário, a relação definidora completa é $I=ABCE=BCDF=ADEF$, de modo que os aliases de A são $A=BCE=ABCDF=DEF$.

Tabela 2.20 – Plano 2^{6-2} com geradores $I=ABCE$ e $I=BCDF$

A	B	C	D	E	F
-	+	+	-	-	-
-	-	-	-	-	-
+	-	+	+	-	-
-	-	+	-	+	+
-	-	-	+	-	+
+	-	-	+	+	+
+	+	-	-	-	+
+	-	-	-	+	-
+	+	+	+	+	+
-	+	+	+	-	+
-	+	-	+	+	-
-	+	-	-	+	+
-	-	+	+	+	-
+	+	+	-	+	-
+	-	+	-	-	+
+	+	-	+	-	-

Havendo necessidade de que os ensaios sejam executados em dois blocos de 8 tratamentos, e assumindo que não há interesse em alguma interação tripla, uma estratégia é a de confundir ABD, por meio do contraste $L = x_1 + x_2 + x_4 = 0$ ou $1 \pmod{2}$. Dessa forma obtém-se o plano da Tabela 2.21.

Tabela 2.21 – Partição da fração $\frac{1}{4}$ do fatorial 2^6 em dois blocos de 8 unidades como o confundimento da tripla ABD

L=0						L=1					
-	+	+	-	-	-	+	+	-	-	-	+
-	-	-	-	-	-	-	+	-	+	+	-
-	-	-	+	-	+	-	+	-	-	+	+
+	-	-	+	+	+	-	-	+	+	+	-
+	-	-	-	+	-	+	-	+	-	-	+
+	+	+	+	+	+	+	+	-	+	-	-
-	+	+	+	-	+	+	-	+	+	-	-
+	+	+	-	+	-	-	-	+	-	+	+

A fração $\frac{3}{4}$ para a estrutura 2^6 (exemplo de fração irregular) é um delineamento muito útil e pode ser obtido omitindo-se a fração $\frac{1}{4}$ da estrutura fatorial completa. Enquanto na fração $\frac{1}{4}$ todas as interações duplas são completamente aliases em duplas e triplas, na fração $\frac{3}{4}$ são apenas parcialmente aliases e estimativas para todas as interações duplas podem ser obtidas (Anexo 6.7).

2.2.1 Fatoriais 3^k

Ao contrário dos fatoriais 2^k , os experimentos com fatores em três níveis possibilitam identificar efeitos de curvatura dos fatores. Os três níveis de um fator – baixo, intermediário e alto – são denotados mais usualmente por $(-1,0,1)$ e $(0,1,2)$.

Considere-se que os efeitos de dois fatores A e B cada qual em três níveis (9 tratamentos) arranjados segundo um esquema fatorial 3^2 , possam ser avaliados por meio de um delineamento inteiramente casualizado (DIC). Adotando-se a notação matricial $y = X\beta + \varepsilon$ em que y é o vetor de observações, β , o vetor dos coeficientes de regressão e ε dos erros, então a matriz X do delineamento, com 1 repetição, é como dada na Tabela 2.22. O conjunto de contrastes ortogonais inclui efeito da média geral, os contrastes de efeitos principais (colunas 2–5) bem como a forma normal dos quatro contrastes para AB.

Tabela 2.22 – Matriz do delineamento do fatorial 3^2 .

(x_1, x_2)	β_{00}	β_{10}	β_{01}	β_{20}	β_{02}	β_{11}	β_{12}	β_{21}	β_{22}
$(-1, -1)$	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
$(-1, 0)$	1	-1	0	1	-2	0	2	0	-2
$(-1, 1)$	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1
$(0, -1)$	1	0	-1	-2	1	0	0	2	-2
$(0, 0)$	1	0	0	-2	-2	0	0	0	4
$(0, 1)$	1	0	1	-2	1	0	0	-2	-2
$(1, -1)$	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
$(1, 0)$	1	1	0	1	-2	0	-2	0	-2
$(1, 1)$	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Fonte: Mead *et al.* (2012)

A Tabela 2.23 apresenta os efeitos linear e quadrático dos fatores A e B, com respectivos graus de liberdade, bem como das interações dos mesmos, fornecidos pela Análise de variância do modelo com um número r de repetições.

Tabela 2.23 – Análise de variância de um fatorial 3^2 planejado em DIC com r repetições.

Fontes de Variação	Graus de Liberdade
Tratamentos	8
A_L	1
B_L	1
A_Q	1
B_Q	1
$A_L B_L$	1
$A_L B_Q$	1
$A_Q B_L$	1
$A_Q B_Q$	1
Erro	$9(r-1)$
Total	$9r-1$

O efeito principal de cada fator, A por exemplo, consiste de duas comparações: linear e quadrática. Em termos de comparações em que os níveis são valores quantitativos igualmente espaçados, $t_2 - t_0$ representa o efeito de regressão linear e $t_0 + t_2 - 2t_1$ da regressão quadrática. As hipóteses nulas no caso de teste desses efeitos são: $t_0 = t_2$ e $t_1 = \frac{t_0+t_2}{2}$

A interação AB consiste de quatro contrastes, linear x linear, linear x quadrático, quadrático x linear e quadrático x quadrático, podendo ser particionada em duas componentes denotadas por: AB e AB^2 . Por convenção, nas expressões da forma $A^p B^q$, o único expoente permitido para a primeira letra é 1. Se assim não for a expressão deve ser elevada ao quadrado e expoentes reduzidos em mod(3). Desse modo,

$$A^2 B = (A^2 B)^2 = A^4 B^2 = AB^2$$

Para obter-se as três frações $\frac{1}{3}$ da estrutura fatorial 3^2 , duas possíveis estratégias são: o confundimento da componente AB definido pela equação $x_1 + x_2 = 0, 1, 2 \pmod{3}$; ou da componente AB^2 por meio da equação $x_1 + 2x_2 = 0, 1, 2 \pmod{3}$, conforme Tabela 2.24.

Tabela 2.24 – Partição das 3^2 combinações por meio do contraste $L = x_1 + 2x_2 \pmod{3}$

L=0			L=1			L=2		
0	0	0	2	1	0	1	2	0
1	1	1	1	0	2	2	0	1
2	2	2	0	2	1	0	1	2

Para acomodar todas os 27 tratamentos do fatorial 3^3 em 3 blocos de 9 unidades, assumindo-se que não há interesse no efeito da interação ABC, escolhe-se qualquer de suas componentes ABC , AB^2C , ABC^2 , ou AB^2C^2 para confundir com blocos. Se a componente escolhida

for por exemplo AB^2C^2 , a equação que define a partição das 3^3 combinações é dada por $L = x_1 + 2x_2 + 2x_3 \pmod{3}$; as demais componentes são combinadas como uma estimativa do erro. Para cada componente da interação o conjunto de todos os tratamentos é particionado em três subconjuntos, como na Tabela 2.25. Qualquer que seja a fração executada, cada efeito tem dois aliases que são encontrados multiplicando-se o efeito por ambos $I = AB^2C^2$ e $I^2 \pmod{3}$. Para o fator A por exemplo tem-se que o efeito realmente estimado é $A + AB + ABC$. De fato

$$A = A(AB^2C^2) = A^2B^2C^2 = ABC$$

e

$$A = A(AB^2C^2)^2 = A^3B^4C^4 = BC$$

Tabela 2.25 – Partição das 3^3 combinações por meio do contraste $L = x_1 + 2x_2 + 2x_3 \pmod{3}$

L=0			L=1			L=2		
0	0	0	0	0	2	0	0	1
0	1	2	0	1	1	0	1	0
1	0	1	0	2	0	0	2	2
2	0	2	1	0	0	1	0	2
0	2	1	1	1	2	1	1	1
1	1	0	1	2	1	1	2	0
1	2	2	2	0	1	2	0	0
2	1	1	2	1	0	2	1	2
2	2	0	2	2	2	2	2	1

Em outras palavras, desde que, em adição, os subconjuntos satisfazendo $L = x_1 + 2x_2 + 2x_3 \pmod{3}$, também satisfazem $L = x_2 + x_3 \pmod{3}$ e $L = x_1 \pmod{3}$; A, BC e AB^2C^2 estão confundidos (são aliases) com cada outro. Do mesmo modo que $B = AC = AB^2C$, $C = AB = ABC^2$ e $AB^2 = AC^2 = BC^2$.

Se vários efeitos precisam ser confundidos com blocos, suas interações generalizadas são confundidas com blocos também. Por exemplo, se as triplas ABC e AC^2D são escolhidas para serem confundidas, então os outros efeitos confundidos são AB^2D^2 e BC^2D^2 .

Neste caso, embora haja informação completa sobre os efeitos principais e interações de dois fatores, a informação sobre a tripla ABC é limitada aos componentes não confundidos da mesma; isso significa que na tabela da Análise de variância somente 6 graus de liberdade são conferidos à tripla ABC (Tabela 2.26).

Tabela 2.26 – Esquema da análise de variância para o fatorial 3^3 com confundimento parcial de ABC.

Fonte de Variação	Graus de Liberdade
Blocos (AB^2C^2)	2
<i>A</i>	2
<i>B</i>	2
<i>AxB</i>	4
<i>C</i>	2
<i>AC</i>	4
<i>BC</i>	4
Erro ($ABC + AB^2C + ABC^2$)	6
Total	26

Para arranjar efeitos principais de uma estrutura 3^2 ortogonais a blocos é necessário ter todos os três níveis de cada fator ocorrendo com igual frequência em cada bloco. Para evitar confundimento de interações duplas quando na partição da estrutura 3^3 em três blocos de nove unidades, cada bloco deve conter todas as 9 combinações de níveis para cada par de fatores.

Na construção da fração 3^{5-2} , nos fatores A, B, C, D e E, não é possível garantir que todas os $C_{5,3}$ conjuntos de três fatores ocorram uma vez. Na melhor das hipóteses, o delineamento da Tabela 2.27 mostra que apenas a combinação dos fatores CDE, não alcança o objetivo, pois inclui somente 9 das 3^3 combinações possíveis. As interações duplas são estimadas independentes dos efeitos principais, exceto para DE, CE, CD, que são parcialmente confundidos com C, D, E, respectivamente (Anexo 6.8).

Tabela 2.27 – Conjunto de níveis e fatores de uma estrutura fatorial 3^{5-2}

A	B	C	D	E	A	B	C	D	E	A	B	C	D	E
0	0	0	0	0	0	0	1	1	2	0	0	2	2	1
0	1	0	1	1	0	1	1	2	0	0	1	2	0	2
0	2	0	2	2	0	2	1	0	1	0	2	2	1	0
1	0	0	1	1	1	0	1	2	0	1	0	2	0	2
1	1	0	2	2	1	1	1	0	1	1	1	2	1	0
1	2	0	0	0	1	2	1	1	2	1	2	2	2	1
2	0	0	2	2	2	0	1	0	1	2	0	2	1	0
2	1	0	0	0	2	1	1	1	2	2	1	2	2	1
2	2	0	1	1	2	2	1	2	0	2	2	2	0	2

2.2.2 Blocagem em fatoriais 3^k

O problema de arranjar as 3^2 combinações de tratamentos em blocos de três é exatamente equivalente ao de se obter um experimento em quadrado latino 3×3 . Admitindo-se dois

fatores P e Q cada qual nos níveis 0, 1 e 2, existem duas soluções possíveis como mostra a Tabela 2.28.

Tabela 2.28 – Duas possibilidades de delineamento 3^2 em três blocos de três

Blocos			Blocos		
I	II	III	I	II	III
p_0q_0	p_0q_1	p_0q_2	p_0q_0	p_0q_1	p_0q_2
p_1q_1	p_1q_2	p_1q_0	p_1q_2	p_1q_0	p_1q_1
p_2q_2	p_2q_0	p_2q_1	p_2q_1	p_2q_2	p_2q_0

O conjunto de oito contrastes ortogonais, mostrado nas oito primeiras colunas da Tabela 2.29, inclui os quatro principais contrastes de efeito (contrastos 1 a 4) e os contrastes de dois blocos (5 e 6) junto com dois contrastes (7 e 8) ortogonais aos seis anteriores. Além disso, há quatro contrastes de interação que são ortogonais aos de efeitos principais. As quatro últimas colunas compreendem a forma normal dos quatro contrastes de interação para PQ. Ao contrário dos experimentos 2^n , quer a identificação de efeitos foram confundidos, quer os que permanecem sem confundimento, é complexa.

Tabela 2.29 – Contrastos ortogonais de tratamentos para a estrutura fatorial 3^2 em blocos de 3.

Combinação	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
p_0q_0	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
p_0q_1	-1	+1	0	-2	+1	+1	+1	+1	0	0	+2	-2
p_0q_2	-1	+1	+1	+1	0	-2	0	-2	-1	+1	-1	+1
p_1q_0	0	-2	-1	+1	0	-2	+1	+1	0	+2	0	-2
p_1q_1	0	-2	0	-2	-1	+1	0	-2	0	0	0	+4
p_1q_2	0	-2	+1	+1	+1	+1	-1	+1	0	-2	0	-2
p_2q_0	+1	+1	-1	+1	+1	+1	0	-2	-1	-1	+1	+1
p_2q_1	+1	+1	0	-2	0	-2	-1	+1	0	0	-2	-2
p_2q_2	+1	+1	+1	+1	-1	+1	+1	+1	+1	+2	+1	+1

Fonte: Mead *et al.* (2012)

De acordo com o delineamento da esquerda da (Tabela 2.28), o efeito linear de blocos $b_2 - b_1$ é dado por

$$[p_0q_1 + p_1q_2 + p_2q_0] - [p_0q_0 + p_1q_1 + p_2q_2]$$

ao passo que o efeito quadrático $b_1 + b_2 - 2b_3$ por

$$[p_0q_0 + p_0q_1 + p_1q_1 + p_1q_2 + p_2q_0 + p_2q_2] - 2[p_0q_2 + p_1q_0 + p_2q_1]$$

Como interpretar tais efeitos em termos de efeitos de tratamentos confundidos?

Considerando os delineamentos como duas repetições, cada uma confunde um grupo (equivalentes à diferenças de blocos) de comparações. Para o delineamento da esquerda

$$I_1 = p_0q_0 + p_1q_1 + p_2q_2,$$

$$I_2 = p_0q_1 + p_1q_2 + p_2q_0$$

e

$$I_3 = p_0q_2 + p_1q_0 + p_2q_1$$

Para o delineamento da direita

$$J_1 = p_0q_0 + p_1q_2 + p_2q_1,$$

$$J_2 = p_0q_1 + p_1q_0 + p_2q_2$$

e

$$J_3 = p_0q_2 + p_1q_1 + p_2q_0.$$

Exemplo. Para o efeito linear x linear de PQ. O contraste contido na sexta linha da matriz U (página 23) fornece

$$2P'Q' = p_0q_0 + p_2q_2 - p_0q_2 - p_2q_0$$

expressão idêntica à obtida por $C_1 + C_2$, em que

$$C_1 = \beta_1 I_1 + \beta_2 I_2 + \beta_3 I_3$$

e

$$C_2 = \gamma_1 J_1 + \gamma_2 J_2 + \gamma_3 J_3$$

e

$$(\beta_1, \beta_2, \beta_3) = \left(\frac{2}{6}, -\frac{1}{6}, -\frac{1}{6} \right),$$

$$(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, -\frac{2}{6} \right).$$

De fato,

$$C_3 = C_1 + C_2 = \beta_1 I_1 + \beta_2 I_2 + \beta_3 I_3 + \gamma_1 J_1 + \gamma_2 J_2 + \gamma_3 J_3$$

$$C_3 = \frac{2}{6}[p_0 q_0 + p_1 q_1 + p_2 q_2] - \frac{1}{6}[p_0 q_1 + p_1 q_2 + p_2 q_0] - \frac{1}{6}[p_0 q_2 + p_1 q_0 + p_2 q_1] +$$

$$\frac{1}{6}[p_0 q_0 + p_1 q_2 + p_2 q_1] + \frac{1}{6}[p_0 q_1 + p_1 q_0 + p_2 q_2] - \frac{2}{6}[p_0 q_2 + p_1 q_1 + p_2 q_0]$$

ou seja,

$$6C_3 = 3p_0 q_0 + 3p_2 q_2 - 3p_2 q_0 - 3p_0 q_2$$

ou

$$2C_3 = p_0 q_0 - p_0 q_2 - p_2 q_0 + p_2 q_2$$

ou ainda

$$2P'Q' = p_0 q_0 - p_0 q_2 - p_2 q_0 + p_2 q_2 = (p_2 - p_0)(q_2 - q_0),$$

donde se conclui que as duas repetições do fatorial 3^2 em seis blocos de três confunde parcialmente a interação $P'Q'$.

Identificações similares dos outros efeitos da interação PQ podem ser obtidas.

$$4P''Q'' = (p_2 - 2p_1 + p_0)(q_2 - q_0)$$

$$4P'Q' = (p_2 - p_0)(q_2 - 2q_1 + q_0)$$

$$8P''Q'' = (p_2 - 2p_1 + p_0)(q_2 - 2q_1 + q_0)$$

Tabela 2.30 – Duas repetições do fatorial 3^2 em seis blocos de três com confundimento parcial do efeito linear x linear da interação PQ

Blocos					
I	II	III	IV	V	VI
p_0q_0	p_0q_1	p_0q_2	p_0q_0	p_0q_1	p_0q_2
p_1q_1	p_1q_2	p_1q_0	p_1q_2	p_1q_0	p_1q_1
p_2q_2	p_2q_0	p_2q_1	p_2q_1	p_2q_2	p_2q_0

2.2.3 Fatoriais assimétricos

A abordagem até o momento foi dirigida a fatoriais cujos fatores possuem o mesmo número de níveis (2^3 e 3^2 por exemplo), são ditos simétricos. De particular interesse são os experimentos da forma 2^m3^n , são os chamados experimentos fatoriais assimétricos.

Em experimentação, para cada informação que se deseja obter, em geral é possível obter um plano mais eficiente em relação a outro, por meio de escolhas (de tratamentos) e locação (nos blocos) específicas. Um plano experimental com estrutura fatorial 2^33 nos fatores A, B, C e D não pode ser arranjado com a interação $2 \times 2 \times 2$ (por exemplo) ortogonal a blocos, quando quatro blocos (duas réplicas) de 12 unidades são usados.

Para que o efeito de um tratamento seja estimado independentemente de efeito de bloco, cada nível ou combinação de níveis incluídos na definição do efeito deve ocorrer em cada bloco o mesmo número de vezes. Algumas considerações acerca de restrições quanto à locação dos níveis do fator C com respeito aos efeitos principais e interações com demais fatores são:

- (i) para que seja estimável o efeito principal de C, cada nível deve ocorrer seis vezes em cada bloco e doze vezes com cada tratamento restante;
- (ii) para que seja estimável o efeito da interação AC, cada das 2^2 combinações dos níveis desses fatores deve ocorrer três vezes em cada bloco e duas vezes com cada das 2×3 combinações de níveis da interação BD;
- (iii) para que seja estimável o efeito da interação CD, cada das 2×3 combinações dos níveis desses fatores deve ocorrer duas vezes em cada bloco e duas vezes com cada das 2×2 combinações de níveis da interação AB;
- (iv) para que seja estimável o efeito da interação ACD, cada das $2 \times 2 \times 3$ combinações dos níveis desses fatores deve ocorrer uma vez em cada bloco e duas vezes com cada nível de B;

(v) para que seja estimável o efeito da interação ABC, cada das $2 \times 2 \times 3$ combinações dos níveis desses fatores deve ocorrer duas vezes em cada bloco e duas vezes com cada nível de D.

Essencialmente duas alternativas de possíveis planos são:

Alternativa (a): quatro das oito combinações da interação ABC ocorrendo três vezes no primeiro (e terceiro) bloco e as outras quatro no segundo (e quarto).

Tabela 2.31 – Ocorrência das combinações da interação (ABC) nos blocos no mesmo número de vezes.

Combinação		Blocos	
ABC	(ABC)	I	II
111	(-)	(3)	nenhuma
112	(+)	nenhuma	(3)
121	(+)	nenhuma	(3)
122	(-)	(3)	nenhuma
211	(+)	nenhuma	(3)
212	(-)	(3)	nenhuma
221	(-)	(3)	nenhuma
222	(+)	nenhuma	(3)

Ocorre separação total das combinações; metade para cada bloco. Neste caso o delineamento resultante (Tabela 2.32) promove o confundimento completo da interação com blocos. De forma equivalente, o efeito da interação ABC é idêntico ao de blocos.

Tabela 2.32 – Plano para a estrutura fatorial $2^3 3$ em dois blocos de 12 unidades com interação (ABC) completamente confundida com blocos.

Blocos									
I					II				
A	B	C	D	(ABC)	A	B	C	D	(ABC)
1	1	1	1	(-)	1	2	1	1	(+)
1	2	2	1	(-)	1	1	2	1	(+)
1	1	1	2	(-)	1	2	1	2	(+)
1	2	2	2	(-)	1	1	2	2	(+)
1	1	1	3	(-)	1	2	1	3	(+)
1	2	2	3	(-)	1	1	2	3	(+)
2	2	1	1	(-)	2	1	1	1	(+)
2	1	2	1	(-)	2	2	2	1	(+)
2	2	1	2	(-)	2	1	1	2	(+)
2	1	2	2	(-)	2	2	2	2	(+)
2	2	1	3	(-)	2	1	1	3	(+)
2	1	2	3	(-)	2	2	2	3	(+)

Alternativa (b): Todas as oito combinações dos três fatores de dois níveis ocorreram em cada bloco, de modo mais equilibrado possível, dentro da exigência de evitar confundir todos os efeitos principais e interações duplas: Quatro combinações ocorrendo duas vezes e outras

quatro uma vez no bloco I; quatro combinações ocorrendo uma vez e outras quatro duas vezes no bloco II (Tabela 2.34).

Tabela 2.33 – Frequência de ocorrência das oito combinações em cada bloco, segundo o padrão dos termos + e – da interação

Combinação		Blocos	
ABC	(ABC)	I	II
111	(–)	(2)	(1)
112	(+)	(1)	(2)
121	(+)	(1)	(2)
122	(–)	(2)	(1)
211	(+)	(1)	(2)
212	(–)	(2)	(1)
221	(–)	(2)	(1)
222	(+)	(1)	(2)

Neste caso o delineamento apresenta confundimento das interações triplas e efeitos de blocos.

Tabela 2.34 – Plano para a estrutura fatorial $2^3 3$ em dois blocos de 12 unidades com interação ABC parcialmente confundida com blocos.

Blocos			
I		II	
ABCD	(ABC)	ABCD	(ABC)
1 1 1 1	(–)	1 2 1 1	(+)
1 2 2 1	(–)	1 1 2 1	(+)
1 2 1 2	(+)	1 1 1 2	(–)
1 1 2 2	(+)	1 2 2 2	(–)
1 1 1 3	(–)	1 2 1 3	(+)
1 2 2 3	(–)	1 1 2 3	(+)
2 2 1 1	(–)	2 1 1 1	(+)
2 1 2 1	(–)	2 2 2 1	(+)
2 1 1 2	(+)	2 2 1 2	(–)
2 2 2 2	(+)	2 1 2 2	(–)
2 2 1 3	(–)	2 1 1 3	(+)
2 1 2 3	(–)	2 2 2 3	(+)

Em termos da matriz de aliases (Tabela 2.35), também é possível observar o aspecto dos confundimento completo e parcial; neste caso a ilustração refere-se ao confundimento parcial da interação tripla ABC com efeitos de blocos (Anexo 6.9).

Tabela 2.35 – Aspecto da matriz aliás ao confundir-se a interação ABC com blocos: completa e parcialmente.

Bloco	Confundimento	
	completo	parcial
I	-1	$-\frac{1}{3}$
II	+1	$+\frac{1}{3}$
III	-1	$-\frac{1}{3}$
IV	+1	$+\frac{1}{3}$

Claramente, estimar o efeito da interação ABC é equivalente ao de se estimar a diferença $\hat{t}_1 - \hat{t}_2$ entre dois tratamentos tais que, em dois blocos de 12: t_1 ocorre 8 vezes no primeiro bloco e 4 vezes no segundo; e t_2 ocorre 4 vezes no primeiro bloco e 8 vezes no segundo. Com esta configuração, e o ajuste das observações realizado po meio do modelo

$$y_{ij} = \mu + b_i + \tau_j + \varepsilon_{ij}$$

nota-se que a matriz de covariâncias das estimativas dos parâmetros é dada por (Anexo 6.10).

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{96} & \frac{1}{192} & \frac{1}{192} & \frac{1}{192} & \frac{1}{192} \\ \frac{1}{192} & \frac{19}{384} & -\frac{17}{384} & -\frac{5}{384} & \frac{7}{384} \\ \frac{1}{192} & -\frac{17}{384} & \frac{19}{384} & \frac{7}{384} & -\frac{5}{384} \\ \frac{1}{192} & -\frac{5}{384} & \frac{7}{384} & \frac{19}{384} & -\frac{17}{384} \\ \frac{1}{192} & \frac{7}{384} & -\frac{5}{384} & -\frac{17}{384} & \frac{19}{384} \end{bmatrix}$$

Torna-se útil reconhecer que os arranjos de efeitos de modo a obter ortogonalidade em relação a blocos, minimiza o efeito do confundimento na estimação dos tratamentos. Mesmo que a locação dos tratamentos não seja exatamente ortogonal, em geral consegue-se alta eficiência, se realizada de forma mais uniforme possível. No exemplo, a variância da estimativa de $\hat{t}_1 - \hat{t}_2$ é $\frac{3}{16}\sigma^2$; de fato $[\frac{19}{384} + \frac{19}{384} - 2(\frac{-17}{384}) = \frac{3}{16}]$. Comparada com a variância usual, $\frac{2\sigma^2}{12}$, dá uma eficiência de $\frac{\frac{2}{12}}{\frac{3}{16}} = \frac{8}{9}$ para o efeito da interação ABC.

Para um experimento em que cinco fatores A, B, C, D e E, têm de ser avaliados, sendo os fatores A, B e C em dois níveis cada, e os dois fatores D e E em três níveis cada, com recurso disponível para a execução de somente metade das 2^33^2 combinações, uma estratégia que deve ser apropriada é a partição dos 36 ensaios (tratamentos) em três blocos de 12 unidades. A escolha entre as alternativas de planos que se apresentam depende da importância de alguma informação em particular pretendida, por exemplo, o grau de correlação entre os efeitos.

Pode-se simplesmente definir $I=ABC$ e usar um mesmo conjunto de quatro combinações da estrutura $A(2)B(2)C(2)$ para ser combinado com todas as nove combinações provenientes da estrutura $D(3)E(3)$. Contudo isso confundiria completamente os efeitos principais de A, B e C com as interações dos fatores D e E, acarretando mais perda da informação destes efeitos.

Alternativamente, escolhendo-se cada metade do fatorial 2^3 e quatro ou cinco combinações de 3^2 , resulta em delineamento com confundimento apenas parcial. Isso torna possível estimar os efeitos principais e interações de dois fatores, ainda que por meio de uma análise não-ortogonal (presença de correlação). No delineamento descrito na Tabela 2.36 o conjunto

$$S_1 = \{(0, 0, 0), (1, 0, 1), (1, 1, 0), (0, 1, 1)\}$$

combinado com o conjunto

$$S'_1 = \{(0, 0), (2, 0), (1, 1), (0, 2), (2, 2)\}$$

ao passo que

$$S_2 = \{(1, 0, 0), (0, 0, 1), (0, 1, 0), (1, 1, 1)\}$$

combinado com o conjunto

$$S'_2 = \{(1, 0), (0, 1), (2, 1), (1, 2)\}$$

formam os 36 pontos experimentais.

Tabela 2.36 – Delineamento para $\frac{1}{2}$ fração da estrutura fatorial $2^3 3^2$ em três blocos de 12 unidades

A	B	C	D	E	A	B	C	D	E	A	B	C	D	E
0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	2
1	0	0	1	0	0	0	0	1	1	1	0	0	1	2
0	0	0	2	0	1	0	0	2	1	0	0	0	2	2
1	0	1	0	0	0	0	1	0	1	1	0	1	0	2
0	0	1	1	0	1	0	1	1	1	0	0	1	1	2
1	0	1	2	0	0	0	1	2	1	1	0	1	2	2
1	1	0	0	0	0	1	0	0	1	1	1	0	0	2
0	1	0	1	0	1	1	0	1	1	0	1	0	1	2
1	1	0	2	0	0	1	0	2	1	1	1	0	2	2
0	1	1	0	0	1	1	1	0	1	0	1	1	0	2
1	1	1	0	2	0	1	1	1	1	1	1	1	1	2
0	1	1	2	0	1	1	1	2	1	0	1	1	2	2

Uma tentativa ótima de locação das observações em uma fração $\frac{1}{2}$ seria alocar todas as $2 \times 2 \times 3$ combinações de BCD, divisíveis no tamanho 12 dos blocos. Neste caso o plano evita o confundimento de BCE e minimiza o confundimento de DE, parcialmente confundida com blocos, embora ao custo do aumento da correlação entre \hat{A} e \hat{BC} por exemplo (Tabela 2.37).

Tabela 2.37 – Fração $\frac{1}{2}$ da estrutura fatorial $2^3 3^2$ que confunde DE parcialmente com blocos

A	B	C	D	E	A	B	C	D	E	A	B	C	D	E
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	2
1	0	0	1	1	1	0	0	1	2	1	0	0	1	0
0	0	0	2	2	0	0	0	2	0	0	0	0	2	1
1	0	1	0	1	1	0	1	0	2	1	0	1	0	0
0	0	1	1	2	0	0	1	1	0	0	0	1	1	1
1	0	1	2	0	1	0	1	2	1	1	0	1	2	2
1	1	0	0	2	1	1	0	0	0	1	1	0	0	1
0	1	0	1	0	0	1	0	1	1	0	1	0	1	2
1	1	0	2	1	1	1	0	2	2	1	1	0	2	0
0	1	1	0	0	0	1	1	0	1	0	1	1	0	2
1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	1	1	1	1	0
0	1	1	2	2	0	1	1	2	0	0	1	1	2	1

Na construção de uma fração pode-se ainda escolher deliberadamente os efeitos que estarão confundidos. Supondo que da estrutura fatorial $2^3 3^2$, deseja-se utilizar somente 12 pontos. Neste caso, requer-se a construção de uma fração $\frac{1}{6}$. Há vários modos de combinar uma fração $\frac{1}{2}$ do fatorial 2^3 com uma $\frac{1}{3}$ da estrutura 3^2 : combinar um sistema de confundimento

para o fatorial 3^2 com o fatorial completo 2^3 , ou combinar um sistema de confundimento para o fatorial 2^3 com o fatorial completo 3^2 , ou combinar sistemas de confundimento para ambos os fatoriais.

Supondo que as combinações de níveis dos cinco fatores, sejam denotadas por $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$, os níveis do fatorial 2^3 nos fatores A, B e C são representados por x_1, x_2, x_3 , e do fatorial 3^2 nos fatores D e E por x_4, x_5 .

A escolha da interação ABC para confundimento, por meio de $L = x_1 + x_2 + x_3 \pmod{2}$, gera os conjuntos

$$S_1 = \{(0, 0, 0), (0, 1, 1), (1, 0, 1), (1, 1, 0)\}$$

e

$$S_2 = \{(0, 0, 1), (0, 1, 0), (1, 0, 0), (1, 1, 1)\}$$

Já o confundimento da componente DE^2 da interação entre dois fatores, por meio do contraste $x_4 + 2x_5 \pmod{3}$, gera os conjuntos

$$S'_1 = \{(0, 0), (1, 1), (2, 2)\},$$

$$S'_2 = \{(0, 2), (1, 0), (2, 1)\}$$

e

$$S'_3 = \{(0, 1), (1, 2), (2, 0)\}$$

Cada das seis combinações $S_i S'_j$, ($i=1,2; j=1,2,3$), produz uma fração de tamanho 12. A Tabela 2.38 ilustra a fração $\frac{1}{6}$ proveniente da combinação de $S_1 S'_1$ (Produto de Kronecker). Logo, dois blocos quaisquer podem ser selecionados por meio de uma fração $\frac{1}{3}$ da estrutura fatorial $(2^3 3^2)$, para a execução de 24 pontos experimentais por exemplo.

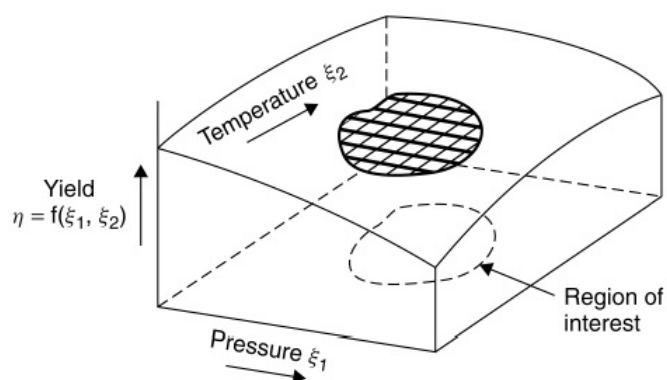
Tabela 2.38 – Fração $\frac{1}{6}$ do fatorial $2^3 3^2$

0	0	0	0	0
0	0	0	1	1
0	0	0	2	2
0	1	1	0	0
0	1	1	1	1
0	1	1	2	2
1	0	1	0	0
1	0	1	1	1
1	0	1	2	2
1	1	0	0	0
1	1	0	1	1
1	1	0	2	2

2.3 Delineamentos de superfícies de resposta

De acordo com Box e Draper (2007), metodologia de superfície de resposta compreende um grupo de técnicas estatísticas que visam a determinação de condições ótimas de operação em que fatores (ou variáveis preditoras) produzem uma resposta de máximo (ou mínimo) dentro de uma região de interesse. Para Khuri (2003), tais técnicas ajudam o experimentador na determinação da melhor combinação das variáveis de entrada que conduz os valores desejáveis da variável resposta.

Figura 2.1 – Superfície de resposta para o rendimento percentual de um processo químico em função dos fatores pressão e temperatura de reação.



Fonte: Box e Draper (2007).

Por exemplo, o rendimento percentual de um processo químico em termos da temperatura e pressão da reação. Entre os delineamentos mais utilizados encontram-se: fatoriais

fracionários 2^k e delineamentos de Plackett e Burman (1946), para ajuste de modelo de primeira ordem; delineamento composto central (DCC, introduzidos por Box e Wilson, 1951) e de Box–Behnken, modelos de segunda ordem.

De acordo com Lima e Bueno Filho (2009), a interpretação da natureza física das interações nos delineamentos fatoriais fracionários 3^k , é algumas vezes obscura, mas útil em pesquisas de otimização de processos por meio de modelos de superfície de resposta.

Uma classe interessante de delineamentos usando apenas três níveis de cada fator foi proposta por Box e Behnken (1960). Estes são construídos combinando ideias de blocos incompletos (balanceados ou parcialmente balanceados) e experimentos fatoriais, especialmente 2^k .

Os autores desenvolveram algoritmo com o propósito, dentre outros, de construir um delineamento para o ajuste dos efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores, a ser comparado (quanto à eficiência na estimação da superfície de resposta) com o delineamento de Box–Behnken. A Tabela 2.39 apresenta ambos os delineamentos.

Tabela 2.39 – Delineamentos otimizado e de Box–Behnken para ajuste do modelo de efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores.

Bloco	Otimizado				Box–Behnken			
	A	B	C	D	A	B	C	D
I	1	1	0	1	-1	-1	0	0
	1	-1	1	0	1	-1	0	0
	0	-1	1	-1	-1	1	0	0
	-1	-1	-1	-1	1	1	0	0
	1	-1	-1	1	0	0	-1	-1
	-1	1	-1	-1	0	0	1	-1
	-1	1	1	1	0	0	-1	1
	1	0	1	-1	0	0	1	1
	0	0	0	0	0	0	0	0
II	-1	-1	1	1	-1	0	0	-1
	0	0	0	0	1	0	0	-1
	0	0	0	0	-1	0	0	1
	1	0	1	1	1	0	0	1
	1	-1	-1	-1	0	-1	-1	0
	-1	1	-1	1	0	1	-1	0
	0	1	0	-1	0	-1	1	0
	1	1	1	0	0	1	1	0
	-1	-1	1	-1	0	0	0	0
III	-1	0	0	0	0	-1	0	-1
	-1	1	1	-1	0	1	0	-1
	1	-1	0	-1	0	-1	0	1
	1	1	-1	-1	0	1	0	0
	1	1	-1	1	-1	0	-1	0
	1	-1	1	1	1	0	-1	0
	-1	-1	-1	1	-1	0	1	0
	0	0	-1	0	1	0	1	0
	0	1	1	1	0	0	0	0

Fonte: Lima (2009)

Dessa forma, o algoritmo de busca promoveu a seleção de 24 tratamentos de um fatorial completo 3^4 , alocados em 3 blocos de tamanho 9, com ponto central repetido três vezes. O modelo adotado para estimação dos coeficientes foi o modelo de efeitos principais, quadráticos puros e interações de dois fatores. Apesar da estrutura de confundimento parcial presente (Tabela 2.40), o delineamento otimizado comparado ao delineamento de Box–Behnken, é mais eficiente para a estimação da superfície de resposta (Anexo 6.11). Contudo, a variância média das estimativas de efeitos quadráticos fornecidas pelo delineamento de Box–Behnken é menor.

Tabela 2.40 – Estrutura de confundimento parcial dos níveis dos fatores no delineamento otimizado pelos algoritmos de troca e intercâmbio.

Bloco	A	B	C	D	AB	AC	AD	BC	BD	CD
I	$\frac{1}{9}$	$-\frac{1}{9}$	$\frac{1}{9}$	$-\frac{1}{9}$	$-\frac{2}{9}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{2}{9}$	0	$\frac{2}{9}$	0
II	0	0	$\frac{2}{9}$	0	$\frac{1}{9}$	0	$-\frac{1}{9}$	$-\frac{1}{9}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{9}$
III	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{9}$	$-\frac{1}{9}$	$\frac{1}{9}$	0	$-\frac{1}{9}$	0	0	$-\frac{1}{9}$	0

Nota-se que o nível alto do fator A está confundido nos blocos I e III. O fator B tem seu nível alto confundido apenas no bloco III, e seu nível baixo, apenas no bloco I. Nota-se ainda que os níveis dos fatores A, B e D são ortogonais (apenas) no bloco II; em relação ao fator A por exemplo, vê-se que todos os níveis $(-1, 0, 1)$, estão distribuídos dentro do bloco, uniformemente. Por outro lado, a estimativa no bloco I por exemplo, do efeito da dupla AB, é acompanhada de uma correlação negativa de $\frac{2}{9}$, visto que a distribuição dos níveis AB no bloco segue como na Tabela 2.41.

Tabela 2.41 – Distribuição dos níveis do fator AB no bloco I

-1	0	1
$\frac{4}{9}$	$\frac{3}{9}$	$\frac{2}{9}$

Já no bloco II a estimativa do efeito de AB traz consigo uma correlação positiva, de acordo com a Tabela 2.42.

Tabela 2.42 – Distribuição dos níveis do fator AB no bloco II

-1	0	1
$\frac{2}{9}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{3}{9}$

2.4 Teoria matemática de confundimento

A teoria matemática do confundimento é complexa. Resumidamente, a teoria permite definir, que efeitos serão confundidos, e quais não serão. Nas secções que se seguem nos baseamos fortemente na apresentação de Mead *et al.* (2012).

Para apresentação da teoria do confundimento, seja o fatorial 2^4 nos fatores A, B, C e D em dois blocos de oito (Tabela 2.43). Confundindo a interação de mais ordem com blocos, demais efeitos serão ortogonais a blocos (não confundidos), assim podem ser estimados.

Tabela 2.43 – Designação de tratamentos da estrutura fatorial 2^4 em dois blocos segundo o padrão de combinações pares e ímpares da interação (confundida) ABCD.

+	-
-----	+-----
++---	-+---
+--+-	--+-
+---+	---+
-++-	++++-
-+-+	+++-
--++	+--+
++++	-+++

Após esse confundimento, decide-se confundir a tripla ABC, de modo que blocos pas-sam a ter tamanho 4. Vê-se que isso acarreta o confundimento do efeito principal do fator D; primeiro e quarto blocos contemplando o nível superior de D, segundo e terceiro blocos, o inferior (Tabela 2.44).

Tabela 2.44 – Designação de tratamentos da estrutura fatorial 2^4 em quatro blocos segundo o padrão de combinações pares e ímpares da interação (confundida) ABC após confundimento de ABCD.

-	+	-	+
+---+	++---	+-----	-----+
-+-+	+--+-	-+---	+++--
--++	-++-	--+-	+---+
++++	-----	++++-	-+++

Ora, um delineamento que confunde um fator principal não é adequado. Importa pois que um método mais apropriado para a construção de delineamentos, baseado na seleção de efeitos a serem confundidos, seja elaborado.

2.4.1 Regra de Confundimento de Fisher

De acordo Mead *et al.* (2012), Fisher utilizou a ideia de módulo e os conceitos de união e intersecção da teoria de conjuntos para enunciar uma regra que resumidamente diz: se na estrutura fatorial 2^n , três efeitos W, X e Y são escolhidos para serem confundidos, então o conjunto de efeitos confundidos é: W, X, Y, WX, WY, XY, WXY, sendo que o conjunto de fatores envolvidos na interação XY por exemplo, inclui todos os fatores de X ou Y, mas não em ambos.

Assim, em um fatorial 2^5 nos fatores A, B, C, D e E, em 2^3 blocos de quatro, se as interações ABCD, ACE, e ABC são escolhidas para serem confundidas, também o serão BDE,

D, BE e ACDE. De fato: $ABCD=ACE=BDE$; $ABCD=ABC=D$; $ACE=ABC=BE$;
 $ABCD=ACE=ABC \Rightarrow BDE=ABC=ACDE$

Nota-se que um total de $2^3 - 1$ efeitos são confundidos, cada fator ocorre 2^{3-1} vezes e que a partição da quantidade $5 \cdot 2^{3-1}$ dentro do número de efeitos confundidos é (4,3,3,3,1,2,4); os números referem-se aos tamanhos das "palavras" envolvidas na relação definidora, ABCD, ACE, ABC, BDE, D, BE e ACDE respectivamente.

Tendo-se por prioridade evitar o confundimento de efeitos principais e interações duplas (nessa ordem), o sistema de confundimento ótimo deve considerar tal partição tão equilibrada quanto possível. Por exemplo, (4,3,3,3,3,2,2).

2.4.2 Confundimento clássico para 3^k

A divisão das 2^k combinações de tratamentos em dois conjuntos foi baseada na caracterização de determinado efeito como 'par' ou 'ímpar'. Mais formalmente, o número de fatores em um efeito, tendo seu nível superior na combinação de tratamento pode ser 0 ou 1 (mod 2). Com três níveis, em vez de uma simples contagem de fatores o nível superior na combinação de tratamento, tal divisão dentro dos três conjuntos é determinada por $\alpha_i + \beta_j + \dots = 0, 1, 2 \pmod{3}$ onde i, j, \dots representa os níveis dos diferentes fatores P, Q, \dots para uma combinação de tratamento $p_i q_j \dots$ e α, β, \dots , representa os pesos.

Uma forma de dividir as combinações de tratamentos da estrutura fatorial 3^2 é fazendo-se $\alpha = 2$ e $\beta = 1$. São nove combinações de tratamentos possíveis

00, 01, 02, 10, 11, 12, 20, 21, 22

Assim, $\alpha_i + \beta_j = 2 \cdot i + 1 \cdot j = 0, 1$ ou $2 \pmod{3}$. Por exemplo, para a combinação 12 tem-se $2 \cdot 1 + 1 \cdot 2 = 4 = 1 \pmod{3}$; para a combinação 22, $2 \cdot 2 + 1 \cdot 2 = 6 = 0 \pmod{3}$, e assim por diante, resultando na locação da Tabela 2.45.

Tabela 2.45 – Divisão das 3^2 combinações de tratamentos para $\alpha = 2$ e $\beta = 1$

Conjuntos		
0 mod(3)	1 mod(3)	2 mod(3)
00	02	01
11	10	12
22	21	20

Vê-se que os três níveis dos dois fatores são preservados nos conjuntos. Portanto efeitos principais são claramente não confundidos. Para distinguir a divisão que leva para determinada parte da interação AB cujo efeito está sendo confundido, as mesmas são identificadas por $A^\alpha B^\beta$. Dessa forma, para o exemplo, tem-se $A^2 B^1$, ou $A^2 B$. A locação para $A^2 B$ é a mesma que para AB^2 . Isso vale também para $A^2 B^2$ e AB .

Pelo mesmo argumento utilizado para fatores de dois níveis, se na estrutura 3^k , dois fatores $X = A^\alpha B^\beta \dots$ e $Y = A^{\alpha'} B^{\beta'} \dots$ são confundidos, então a interação $A^{\alpha''} B^{\beta''} \dots$ onde $\alpha'' = \alpha + \alpha' \text{ mod}(3)$ e $\beta'' = \beta + \beta' \text{ mod}(3)$, também é confundida.

2.5 Eficiência e estrutura de aliases

Jones e Nachtsheim (2011) afirmam que a abordagem padrão de delineamentos ótimos possui a desvantagem de não considerar a estrutura de aliases dos termos do modelo especificado e os termos potencialmente importantes e não incluídos no modelo.

Para exemplificação, dois planos experimentais para uma triagem envolvendo seis fatores e recursos disponíveis para doze ensaios são apresentados a um pesquisador. O primeiro da classe dos delineamentos de Plackett–Burman e o segundo dos DSDs. Há uma preocupação em adotar um delineamento deste, pois o mesmo não protege as estimativas dos efeitos principais de viés. De acordo com Bursztyń e Steinberg (2006), o potencial deste viés para um determinado delineamento, pode ser computado pelo traço de $A^T A$, em que A é a matriz de aliases.

Admitindo que X_1 é a matriz de dimensão 12×7 do modelo de efeitos principais, incluindo o intercepto, e X_2 , 12×15 , correspondente às colunas das $C_{6,2}$ interações duplas. Supondo-se que o modelo "verdadeiro" possa ser ajustado por

$$Y = X_1 \beta_1 + X_2 \beta_2 + \varepsilon$$

em que: ε , é o vetor de resíduos com $E(\varepsilon) = 0$; β_1 é vetor (7×1) do intercepto e coeficientes dos efeitos principais (termos primários); β_2 é vetor (15×1) dos coeficientes das $C_{6,2}$ interações duplas (termos potenciais), e que o pesquisador decida ajustar o modelo de efeitos principais

$$Y = X_1 \beta_1 + \varepsilon^*$$

então, assumindo que a matriz do modelo é posto completo, sabe-se que a esperança do estimador de quadrados mínimos $\hat{\beta}_1$ de β é $E(\hat{\beta}_1) = \beta_1 + A\beta_2$ sendo a matriz aliás A dada por

$A = (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T X_2$. De fato

$$\begin{aligned}
 E(\widehat{\beta}_1) &= E \left[(X_1^T X_1)^{-1} X_1^T Y \right] \\
 &= (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T E[Y] \\
 &= (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T E[X_1 \beta_1 + X_2 \beta_2 + \varepsilon] \\
 &= (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T [X_1 \beta_1 + X_2 \beta_2] \\
 &= (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T X_1 \beta_1 + (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T X_2 \beta_2 \\
 &= \beta_1 + (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T X_2 \beta_2 = \beta_1 + A \beta_2
 \end{aligned}$$

As entradas correspondentes aos efeitos principais na matriz de aliases, que são nulas, garantem estimativas não tendenciosas aos mesmos. Mas, como mostra a Tabela 2.46, o delineamento utilizado para ajustar os dados tem a desvantagem que cada efeito principal tem uma correlação (em módulo) de um terço para cada interação de dois fatores que não inclui esse fator (Anexo 6.12).

Especificamente, se for assumido que a única interação importante (a matriz aliás assume que todas as interações entre dois fatores é ativa) é a que envolve os fatores dois e três por exemplo, a esperança de β_1

$$E(\widehat{\beta}_1) = \beta_1 - \frac{1}{3}\beta_{23} + \frac{1}{3}\beta_{24} + \frac{1}{3}\beta_{25} - \frac{1}{3}\beta_{26} - \frac{1}{3}\beta_{34} - \frac{1}{3}\beta_{35} + \frac{1}{3}\beta_{36} - \frac{1}{3}\beta_{45} - \frac{1}{3}\beta_{46} + \frac{1}{3}\beta_{56}$$

simplifica em

$$E(\widehat{\beta}_1) = \beta_1 - \frac{1}{3}\beta_{23}$$

O caso onde elementos da matriz aliás é $+1$ ou -1 é especial. Há uma ou mais colunas em X_1 que aparece em X_2 (ou como suas negativas), e não há como (por meio das observações) distinguir entre o efeito de uma ou de outra. Diz-se que os efeitos correspondentes são completamente confundidos ou, aliases.

Tabela 2.46 – Matriz aliás para o experimento de extração indicando o potencial para o viés nas estimativas dos efeitos principais devido a interações de dois fatores.

	β_{12}	β_{13}	β_{14}	β_{15}	β_{16}	β_{23}	β_{24}	β_{25}	β_{26}	β_{34}	β_{35}	β_{36}	β_{45}	β_{46}	β_{56}
β_1	0	0	0	0	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$
β_2	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	0	0	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$
β_3	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	0	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
β_4	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	0	$\frac{1}{3}$
β_5	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	0
β_6	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	0	0

Assim, se há uma interação ativa de dois fatores e um delineamento (derivado da classe Plackett-Burman por exemplo) é usado, as estimativas dos efeitos principais de fatores que não estão envolvidos na interação são viesadas. Uma vez que a interação ativa é detectada e o termo correspondente é incluído no modelo, as estimativas dos efeitos principais não são mais tendenciosas.

A este respeito Goos e Jones (2011), apresentam estudo sobre inibidores do crescimento de micróbios (*Salmonella typhimurium* por exemplo) presentes na maioria dos alimentos processados; o efeito a longo prazo causado pela utilização dos aditivos químicos é uma preocupação da comunidade científica. O principal objetivo do experimento é a melhora do rendimento do processo de extração de inibidores presentes em culturas, que venham a ser alternativa aos agentes químicos atuais. Foram identificados previamente, quatro solventes usados no processo de extração, nos níveis presente (com 10 ml) ou ausente, cujos efeitos na performance (rendimento) da extração de substância antimicrobiana, os pesquisadores desejavam investigar: metanol, etanol, propanol e butanol. A ausência e a presença de um solvente foi codificada por -1 e $+1$ respectivamente. Mais dois fatores foram investigados: índice de pH (6 ou 9) da cultura e tempo em solução (1 ou 2 horas). O delineamento utilizado para o ajuste está descrito na Tabela 2.47. Nota-se que cada coluna tem mesmo número de -1 s e $+1$ s; em cada par de colunas as 2^2 possibilidades das combinações de -1 s e $+1$ s aparecem três vezes (delineamento ortogonal).

Tabela 2.47 – Delineamento para triagem de fatores visando melhoria no processo de extração de inibidores do crescimento de micróbios comuns em alimentos processados, usando níveis codificados.

Ensaio	Níveis dos fatores						Rendimento
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	
1	-1	-1	-1	1	-1	-1	10,94
2	-1	1	-1	-1	1	-1	15,79
3	-1	1	-1	1	1	1	25,96
4	1	1	1	-1	-1	-1	35,92
5	-1	-1	1	-1	-1	1	22,92
6	-1	1	1	1	-1	-1	23,54
7	1	1	-1	-1	-1	1	47,44
8	1	-1	-1	-1	1	-1	19,80
9	1	-1	1	1	1	-1	29,48
10	-1	-1	1	-1	1	1	17,13
11	1	1	1	1	1	1	43,75
12	1	-1	-1	1	-1	1	40,86

Fonte: Goos e Jones (2011).

O modelo ajustado levando-se em conta apenas efeitos principais, e removendo-se do modelo todos os fatores cujo os efeitos foram não significativos, foi

$$\text{Rendimento} = 27,79 + 8,41x_1 + 4,27x_2 - 2,48x_5 + 5,21x_6$$

A análise dos resultados indicou que a adição de propanol como solvente, quando o etanol está presente, aumenta muito o rendimento do processo (Figura 2.2).

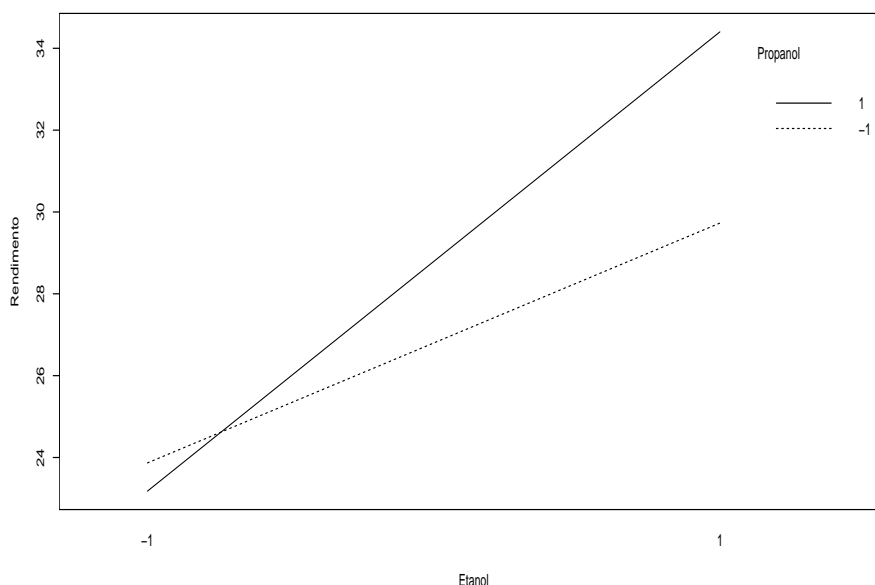
Neste exemplo, a interação envolvendo etanol e propanol (denotada por β_{23}), ativa, mas não incluída no modelo de efeitos principais, causou uma estimativa 0.59 menor no efeito principal do metanol (denotado por β_1), do que deveria ser. No modelo com o termo da interação incluído,

$$\text{Rendimento} = 27,79 + 9,00x_1 + 4,27x_2 + 1,00x_3 + 1,88x_4 - 3,07x_5 + 4,63x_6 - 1,77x_2x_3$$

nota-se que o viés $9 - 8,41 = 0,59$ é igual a $\frac{1}{3}\beta_{23} = -\frac{1,77}{3}$. O fato é que, se há um efeito significativo de interação entre dois fatores, e um modelo com somente efeitos principais é ajustado, estimativas de efeitos principais de fatores não envolvidos na mesma, são viesadas.

Normalmente calcular o viés exige inversão de matriz. Como neste exemplo o delineamento é ortogonal, é simples compreender a origem do valor $\frac{1}{3}$. Toma-se a soma dos produtos

Figura 2.2 – Aspecto da interação entre os fatores Etanol e Propanol.



Fonte: Do autor (2018)

da coluna da interação dos fatores x_2 e x_3 pela coluna do fator x_1 e divide pelo número de ensaios 12.

A inclusão do termo da interação no modelo gera estimativas correlacionadas, mas o benefício de descobrir um efeito grande de interação entre dois fatores faz o esforço valer a pena. Além de uma estimativa do efeito principal do metanol sem viés, o erro padrão das estimativas diminui (Tabela 2.48). Isso por que a soma de quadrados do erro mede a variação na resposta que não é explicada pelo modelo. Com a inclusão da variável explicativa (termo de interação entre etanol e propanol) no modelo, conseqüentemente, menos variação não explicada (menor erro). Além disso, no modelo com o termo da interação incluído, o efeito principal do butanol é altamente significativo. No de efeitos principais, não. Isso, por causa do confundimento do efeito principal do butanol com o efeito da interação etanol x propanol.

Tabela 2.48 – Estimativas de parâmetros com respectivos erros padrão conforme modelos de efeitos principais somente e com interação; asterisco indica que os efeitos são significativamente diferentes de zero com 95% de confiança.

Efeito	Efeito principal somente			Interação		
	Estimativa	Erro padrão	valor p	Estimativa	Erro padrão	valor p
Intercepto	27,79	0,71	0,0001 *	27,79	0,45	0,0001*
Metanol	8,41	0,71	0,0001*	9,00	0,49	0,0001*
Etanol	4,27	0,71	0,0019*	4,27	0,45	0,0007*
Propanol	1,00	0,71	0,2214	1,00	0,45	0,0908
Butanol	1,29	0,71	0,1292	1,88	0,49	0,0186*
pH	-2,48	0,71	0,0178*	-3,07	0,49	0,0034*
Time	5,22	0,71	0,0007*	4,63	0,49	0,0007*
Etanol x Propanol				-1,77	0,60	0,0426*

Fonte: Goos e Jones (2011).

Um plano alternativo produzido por método descrito pelos autores, e cuja abordagem é a de minimizar o potencial de confundimento (pelo cálculo do traço de $A^T A$) entre efeitos principais e interações duplas do delineamento, é mostrado na Tabela 2.49. As linhas de números pares são obtidas multiplicando cada entrada da linha anterior por -1 ; o plano consiste então em seis pares *fold-over*³.

Com isso, os efeitos principais não são aliases de nenhuma interação dupla. Neste caso, enquanto o termo intercepto é parcialmente aliás com algumas duplas, as estimativas dos efeitos principais são completamente limpas dos efeitos das interações duplas.

Tabela 2.49 – Delineamento alternativo

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6
+	+	-	+	+	+
-	-	+	-	-	-
+	+	+	-	+	-
-	-	-	+	-	+
+	+	-	+	-	-
-	-	+	-	+	+
+	-	-	+	+	-
-	+	+	-	-	+
+	-	+	+	-	+
-	+	-	-	+	-
+	-	-	-	-	+
-	+	+	+	+	-

³ Yang e Draper (2003) notaram que o delineamento que tem a propriedade que, cada par de linhas são imagens espelhadas umas das outras, não é necessariamente o melhor arranjo, mas que é útil para fornecer estimativas imparciais dos efeitos principais.

Desde que para o delineamento alternativo, o cálculo do traço $A^T A$, igual a $\frac{6}{9}$, corresponde a $\frac{1}{10}$ do valor obtido para o delineamento Plackett–Burman, $\frac{60}{9}$, diz-se que há uma redução de 90% do potencial do viés em favor do primeiro .

Contudo, tal redução tem um custo. Relativo ao plano de Plackett-Burman, a D-eficiência do delineamento alternativo é 92% .

Sendo assim, ao escolher este último, o experimentador aceita trocar o ganho da garantia de estimativas não viesadas para os coeficientes dos efeitos principais, pela pequena perda de 8% na D-eficiência (Anexo 6.13).

Os mesmos autores Jones & Nachtsheim (2011) desenvolveram uma nova classe de delineamentos com três níveis na presença de efeitos de segunda ordem. Com status de última palavra em delineamentos de triagem, a nova classe se propõe a eliminar as ambiguidades provenientes dos conhecidos planos de resolução III, IV, etc.

A próxima seção é dedicada a esta nova classe de delineamentos de seleção de fatores.

2.6 Delineamentos de Triagem Definitiva

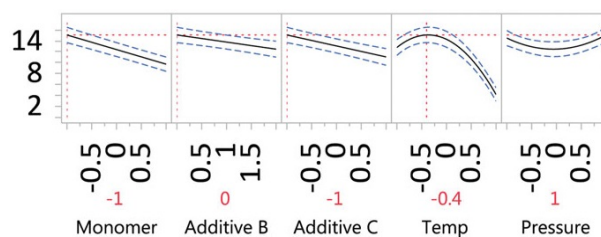
O emprego de delineamentos de resolução III ou Plackett-Burman falham na identificação de efeitos principais ativos. Na presença de efeitos quadráticos (puros ou provenientes de interação dupla), as estimativas dos efeitos dos fatores podem parecer menor do realmente são. Este viés pode deixar fatores importantes, fora da seleção, em experimento de triagem (caracterizando o assim chamado erro conhecido como Tipo II).

Para Goos (2016), a importância disso é que os efeitos quadráticos passaram despercebidos em etapas de triagem no passado, devido ao uso de fatores em dois níveis. Em alguns casos, o impacto disso terá sido limitado, mas em muitas ocasiões, é possível que grandes oportunidades de configurações ótimas tenham sido perdidas.

O autor sustenta sua opinião apresentando uma aplicação de triagem definitiva em um estudo de polimerização de gases residuais. Nesse estudo, cinco dos dez fatores revelaram efeitos significativos. Sendo um grande efeito quadrático do fator temperatura, que veio como um completa surpresa para os pesquisadores. Também havia um efeito quadrático menor do fator pressão.

Uma ilustração do modelo final encontrado é apresentada na Figura 2.2.

Figura 2.3 – Efeitos estimados dos fatores para o experimento de polimerização de gases residuais.



Fonte: Goos (2016).

Mesmo a adição de pontos centrais (muito popular em delineamentos de dois níveis), que permite uma avaliação global da curvatura, se eventualmente está presente, o investigador não pode determinar (sem ambiguidade), qual o fator causador. Isso por que os efeitos são confundidos e não é possível estimá-los individualmente. Os DSDs evitam isso tornando possível identificar inequivocadamente a fonte de qualquer curvatura.

O Princípio da escassez de efeitos preconiza que nem todos os efeitos são importantes, e Jones (2016) afirma que o principal objetivo dos delineamentos de triagem –*screening design*– é justamente selecionar os relevantes.

Tradicionalmente, os planos fatoriais fracionários são usados para identificar um grande número de efeitos com um número mínimo de execuções. A eficiência desses planos é alcançada através do uso de padrões de aliases que resultam em confundimento entre efeitos específicos.

Todavia, o grande desafio desses delineamentos é sua ambiguidade na identificação dos fatores causadores dos efeitos. Os chamados delineamentos de resolução III confundem os efeitos principais com as interações de dois fatores. Para contornar tal problema, um aumento do número de ensaios é exigido. Os chamados delineamentos de resolução IV requerem o dobro do número de ensaios e interações de dois fatores são confundidas entre si. Resolver isso implica em assumir uma forte hereditariedade dos efeitos. Os delineamentos de triagem definitiva (DSDs) superaram essas limitações.

Os DSDs compreendem uma classe de delineamentos introduzida por Jones e Nachtsheim (2011). A nova classe têm três níveis e para o caso de haver seis fatores ou mais, permite a estimativa eficiente do modelo quadrático completo, aumentando assim a eficiência de todo o processo de experimentação. Segundo Jones (2016) um dos mais fortes atributos dos DSDs é que eles evitam o viés nos efeitos principais devido a (ou na presença de) interações duplas ati-

vas, pois são delineamentos *foldover*. Além disso, permitem a detecção de efeitos quadráticos puros.

A seguir, motivos pelos quais os DSDs representam uma abordagem revolucionária para a concepção de experimentos de triagem; os muitos resultados positivos registrados em estudos de caso, tornam difícil a refutação da terminologia empregada (definitiva) e o status de última palavra em triagem de fatores, como pretendem alguns autores. Em resumo, os DSDs:

- (i) possuem três níveis; isso possibilita a captação de efeito não linear na relação entre o fator quantitativo e a variável resposta;
- (ii) requerem apenas $(2k + 1)$ ensaios, onde k é o número de fatores;
- (iii) não confundem efeitos principais com interações de dois fatores (completamente independentes);
- (iv) as interações de dois fatores podem estar correlacionadas, mas não estão totalmente confundidas
- (v) todos os efeitos quadráticos são estimáveis; são correlacionados com as interações de dois fatores, mas não são confundidos com os efeitos principais;
- (vi) com 6 a 12 fatores, estimam todos os modelos quadráticos completos possíveis com alto nível de eficiência.

Vining (2016) critica o nome DSD, pois é controverso dizer que são planos de triagem definitivos. Além disso, dizer que um delineamento é ótimo depende de critérios específicos. Gilmour (2016) afirma que "triagem definitiva" é um termo pretensioso, sendo que planos análogos aos DSD podem ser encontrados em Tsai *et al.* (2000).

A nova classe de delineamentos de triagem de três níveis, tem a estrutura ilustrada na Tabela 2.50. Para k^4 fatores, existem $2k + 1$ ensaios baseados em k pares de *foldover* e, na última linha, um ponto central. Em cada execução, exceto no ponto central, há um fator ao nível intermediário, e os demais, aos níveis extremos. Um DSD_6 por exemplo pode ajustar um modelo que inclui os termos: de intercepto; todos os efeitos principais e todos os efeitos quadráticos de cada fator. O elemento x_{ij} denota a configuração do fator j , $j = 1, 2, \dots, k$ para o ensaio i , $i = 1, 2, \dots, 2k + 1$.

⁴ Neste texto o delineamento de triagem definitiva com k fatores será denotado por DSD_k .

Tabela 2.50 – Estrutura geral de DSDs para k fatores

Ensaio	Níveis dos fatores				
	$x_{i,1}$	$x_{i,2}$	$x_{i,3}$	\dots	$x_{i,k}$
1	0	\pm	\pm	\dots	\pm
2	0	\pm	\pm	\dots	\pm
3	\pm	0	\pm	\dots	\pm
4	\pm	0	\pm	\dots	\pm
5	\pm	\pm	0	\dots	\pm
6	\pm	\pm	0	\dots	\pm
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
2k-1	\pm	\pm	\pm	\dots	0
2k	\pm	\pm	\pm	\dots	0
2k+1	0	0	0	\dots	0

As colunas deste delineamento são ortogonais a cada outra. As linhas numeradas com pares são obtidas multiplicando-se cada valor da linha anterior por -1 . Devido ao espelhamento nos pares de execuções, os efeitos principais são todos independentes de qualquer interação dupla ativa (que são correlacionadas entre si e com os efeitos quadráticos puros). Na Tabela 2.51, o delineamento resultante para um DSD_{10} .

Tabela 2.51 – Níveis de um DSD_{10} .

0	+	+	-	+	+	+	+	-	+
0	-	-	+	-	-	-	-	+	-
+	0	-	+	+	-	+	+	-	-
-	0	+	-	-	+	-	-	+	+
-	+	0	-	-	-	+	-	-	-
+	-	0	+	+	+	-	+	+	+
-	+	+	0	+	-	-	+	+	-
+	-	-	0	-	+	+	-	-	+
-	-	-	-	0	+	+	+	+	-
+	+	+	+	0	-	-	-	-	+
-	+	-	+	+	0	+	-	+	+
+	-	+	-	-	0	-	+	-	-
+	+	-	-	-	-	0	+	+	+
-	-	+	+	+	+	0	-	-	-
+	+	+	+	-	+	+	0	+	-
-	-	-	-	+	-	-	0	-	+
+	+	-	-	+	+	-	-	0	-
-	-	+	+	-	-	+	+	0	+
+	-	+	-	+	-	+	-	+	0
-	+	-	+	-	+	-	+	-	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Comparado com o delineamento Plackett–Burman com 12 ensaios com 1 ponto central adicional, o DSD_6 tem D-eficiência relativa de 85.5% para o modelo consistindo de todos efei-

tos principais de primeira ordem. Tal perda assegura estimação de efeitos quadráticos puros, bem como estimativas de efeitos principais livres do efeito de interações duplas. Neste caso, vê-se que a perda na eficiência (14,5%), resultou em uma melhoria drástica em outras propriedades do delineamento (Anexo 6.14).

O número de ensaios em um DSD não precisa ser inflexível. Entretanto um DSD com dez fatores e 25 ensaios pode ser obtido facilmente, descartando duas colunas quaisquer de um DSD_{12} .

3 MATERIAL E MÉTODOS

Esta seção apresenta uma descrição do experimento do qual os dados utilizados no estudo emergiram.

3.1 Material

Os *dados*¹ utilizados neste trabalho são provenientes de um experimento com 252 plantas de bananeira Prata clone: Gorutuba. A estrutura de tratamentos compôs-se de catorze fatores, cada qual em três níveis, representando suplementos para adubação em bananeiras, previamente selecionados pela equipe do projeto, sendo sete produtos condicionadores de solo e sete produtos bioestimulantes (adubação foliar) a base de extrato de algas marinhas, totalizando 84 parcelas experimentais com três repetições. Os bioestimulantes foram: Multiturbo, Acadian, PDQ, Biof-Nature I e II, Litho-Natus e Vitakelp. Os condicionadores de solo: Calcário de conchas, Silicato de Cálcio e Magnésio, Casca de ovo triturada, Calcário dolomítico, Celtonita, Lithothamnium calcareum e Lithotamne, os quais por simplicidade foram denotados por A, B, ..., N.

O experimento foi realizado em área experimental situada a 19° 16' de latitude S, 44° 26' de longitude O, com altitude de 761 m, na região de Paraopeba.

A área experimental de 1008 m² foi dividida em quatro blocos, cada qual com 21 parcelas. Cada parcela foi formada por uma fileira de seis (6) metros de comprimento, espaçados entre si por dois (2) metros, perfazendo uma área de 12 m², e contendo três plantas na linha, distanciadas por dois metros. desse modo, teve-se 63 plantas em cada bloco e, no experimento, 252 plantas.

As avaliações fitotécnicas foram definidas para cinco épocas com as respectivas variáveis a serem medidas:

1. 1^a altura de plantas e diâmetro do pseudocaule, tomados da planta central da parcela e número de folhas expandidas, contadas das três plantas da parcela;

¹ CAMPOS, M. P. Lavras: UFLA/DAG, 2017.

2. 2^a altura de plantas, diâmetro do pseudocaule, n^o de folhas expandidas e número de Perfilhos, contados das três plantas da parcela;
3. 3^a, 4^a e 5^a altura de plantas, diâmetro do pseudocaule, número de folhas expandidas e número de Perfilhos.

3.2 Métodos

Neste trabalho utilizou-se um algoritmo de busca, para construção de um delineamento baseado na combinação de réplicas de frações de DSDs da série 3^{10-6} com um fatorial completo da série 3^4 . O algoritmo, cujo *script* pode ser visto no Anexo 6.15 foi desenvolvido para encontrar um delineamento otimizado para efeitos principais e quadráticos de todos os fatores e interação dos fatores do fatorial completo.

3.2.1 Delineamento inicial e o algoritmo

A partir de uma base de dados com 84 linhas (81 pontos experimentais de um fatorial completo, adicionados de 3 pontos centrais) por 15 colunas (1 para o fator bloco, 4 para o fatorial completo da série 3^4 e 10 para os fatores de um DSD), procedeu-se à aleatorização das linhas, exceto para as posições 21, 42, 63 e 84, mantidas como fixas no nível 0 de cada fator. O delineamento inicial resultou então no fatorial 3^4 em 4 blocos de 21 unidades, efetuando-se o cálculo do critério.

O modelo adotado para o cálculo do critério considerou os efeitos de controle local, efeitos principais e quadráticos puros dos 4 fatores, além dos efeitos das interações duplas, e o valor do critério correspondeu ao traço da inversa da matriz informação do modelo, sem os efeitos de blocos.

Para a obtenção de uma distribuição de referência para os delineamentos repetiu-se o processo de aleatorização obtendo-se $N = 10.000.000$ valores iniciais de critérios de eficiência para delineamentos obtidos ao acaso.

Posteriormente, uma função de intercâmbio para b blocos de tamanho k foi elaborada e avaliada uma rodada do emprego de tal função de intercâmbio. Foi computado o número de trocas aceitas nesta rodada a partir de um delineamento aleatório, bem como a eficiência relativa

do plano inicial, arranjado pelo autor sem algoritmos de busca, doravante nomeado "organizado à mão".

O plano resultante constituiu-se da inserção (nos fatores do fatorial completo) dos níveis otimizados à Base inicial de dados, com as réplicas do fatorial fracionário.

Adicionalmente avaliou-se a perda de eficiência pelo experimento real implantado. Isto porque o plano efetivamente implementado sofreu algumas alterações na implementação prática. Foi calculada a perda de eficiência devido a este problema e o novo valor para o critério de optimalidade para o delineamento efetivamente praticado.

Efetuuou-se ainda a comparação entre a variância das estimativas de efeitos derivados do fatorial completo e as estimativas de efeitos principais e termos quadráticos no fatorial fracionário implementado. Realizou-se também um estudo do esquema de confundimento (aliases) do delineamento resultante.

3.2.2 Critério de optimalidade

Para Mead *et al.* (2012), alcançar um delineamento ótimo não deve ser um objetivo absoluto, já que para a maioria dos problemas existem muitos candidatos praticamente com a mesma eficiência. Apesar disso, os vários arranjos possíveis de tratamentos aos blocos conferem a alguns delineamentos, maior eficiência que a outros.

Neste estudo, para a comparação de delineamentos experimentais quanto à eficiência, utilizou-se o critério da menor variância média das estimativas (critério A de optimalidade). Os delineamentos DSDs praticados em cada bloco foram comparados ao delineamento fatorial completo utilizando o critério do traço modificado, para acomodar os tamanhos diferentes de experimento ($n = 84$ vs $n = 21$). O modelo utilizado para o cálculo do critério, neste caso reduzido, incluía efeitos linear e quadrático (todos os fatores), sem interações.

A razão de combinar DSD em cada bloco com um fatorial completo no mesmo experimento é conseguir mostrar que um delineamento fatorial fracionário pode ser boa estratégia comparado ao fatorial completo. Para tanto foi efetuada a comparação, quanto à eficiência, dos

quatro fatores lineares e termos quadráticos estimáveis nos dois.

3.2.3 Modelo linear de Gauss-Markov normal

Para proceder os cálculos necessários às comparações a que o trabalho se propõe, foi utilizado o modelo linear de Gauss-Markov normal. De acordo com Kempthorne (1955), para que a análise de experimentos em que se medem respostas contínuas, seja válida, é necessário apenas garantir que o experimento seja aleatorizado, e assumir que os efeitos de tratamentos e das unidades experimentais são aditivos. Como resultado, o modelo linear Gauss-Markov *normal*² pode ser utilizado como boa aproximação da análise de variância, bem como para inferência sobre diferenças entre médias de tratamentos (Teste F).

Dessa forma, para o modelo na forma matricial $Y = X\theta + \varepsilon$, o estimador de mínimos quadrados $\hat{\theta}$ é dado por $\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} X^T y$ cuja matriz de covariâncias é $var(\hat{\theta}) = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$, em que $M = X^T X$ é a matriz informação do modelo e σ^2 podendo ser estimado pelo quadrado médio residual da análise de variância.

Admitindo que o vetor θ dos parâmetros pode ser parcelado em dois subconjuntos: θ_1 dos parâmetros nuisance (blocos por exemplo); e θ_2 , de parâmetros de real interesse (tratamentos por exemplo), de modo correspondente, tem-se a partição da inversa de M em submatrizes como segue.

$$M^{-1} \propto \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix}$$

De acordo com Bueno Filho e Gilmour (2003), a variância do vetor de parâmetros depende somente de C_{22} . Utilizando-se notação usual para blocos incompletos e o Complemento de Schur da inversa de uma matriz particionada, verifica-se que a variância citada é proporcional à inversa da matriz $rI_v - \frac{1}{k} NN^T$

$$\begin{bmatrix} kI_b & N^T \\ N & rI_v \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{k}I_b & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{1}{k}N^T \\ I \end{bmatrix} \left[rI_v - \frac{1}{k}NN^T \right]^{-1} \begin{bmatrix} -\frac{1}{k}N & I \end{bmatrix}$$

² O modelo clássico de regressão teve origem nos trabalhos astronômicos de Gauss entre 1809 e 1821. A associação do modelo a experimentos planejados foi apresentada por Fisher entre 1920 e 1935 (Souza, 2013).

em que kI_b e rI_v são matrizes diagonais do número de parcelas por blocos, e número de repetições por tratamento, respectivamente, e N a matriz de incidência de tratamentos nos blocos.

No presente trabalho, o critério utilizado na escolha do delineamento é a variância média dos efeitos de todos os fatores de interesse, pelo cálculo do traço da submatriz de $(X^T X)^{-1}$, excluídas as linhas e as colunas referentes aos blocos, e sendo X , a matriz do delineamento. O modelo utilizado, neste caso, para o cálculo do critério incluía o controle local (blocos), além dos efeitos linear e quadrático (todos os fatores), e mais as interações duplas envolvendo os fatores do fatorial completo.

3.2.4 Estrutura do delineamento combinado

A partir do fatorial completo 3^4 , adicionado de três pontos centrais, procedeu-se a troca dos 80 pontos experimentais (linhas não nulas), dentro de quatro blocos, cada qual formado por um DSD_{10} . Repetindo-se um ponto central em cada bloco. As quatro repetições do nível intermediário foram mantidas fixas nos ensaios de número 21, 42, 63 e 84. Não sendo permitida a tais entradas, a mudança de lugar, durante o curso do algoritmo. Os pontos não centrais do fatorial completo foram espalhados no restante das 80 unidades experimentais do fatorial completo, enquanto os DSDs eram mantidos "parados" (quadro abaixo). Desse modo o delineamento resultante perfaz um total de $n=84$ ensaios em $b=4$ blocos de $k=21$ unidades.

Bloco	Parcela	Fatores do fatorial 3^4	Fatores do DSD
		A B C D	E F G H I J K L M N
1	1	20 dos 80 níveis do fatorial 3^4	DSD_1
1	a		
1	20		
1	21	0 0 0 0	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2	22	20 dos 80 níveis do fatorial 3^4	DSD_2
2	a		
2	41		
2	42	0 0 0 0	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3	43	20 dos 80 níveis do fatorial 3^4	DSD_3
3	a		
3	62		
3	63	0 0 0 0	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
4	64	20 dos 80 níveis do fatorial 3^4	DSD_4
4	a		
4	83		
4	84	0 0 0 0	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

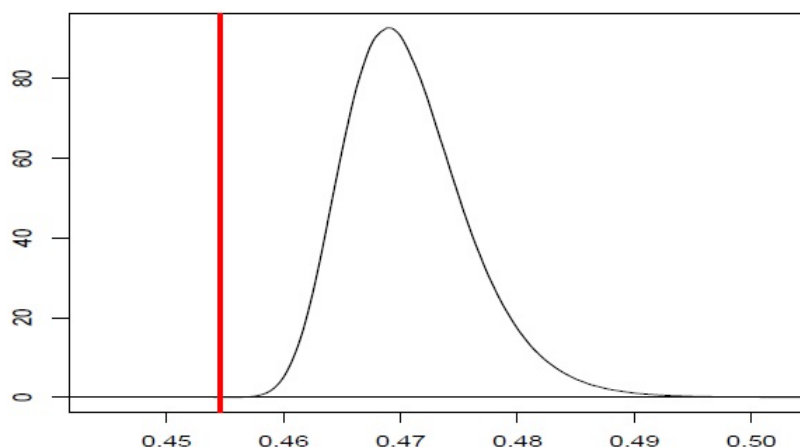
Nesta seção serão apresentados os principais resultados obtidos considerando a construção de planos ótimos, combinando delineamentos fatoriais fracionários com fatoriais completos, por meio de algoritmos de *intercâmbio*¹.

4.1 Delineamento inicial e distribuição dos critérios

O delineamento inicial, arranjado à mão, para o modelo contendo efeito de blocos, efeitos principais e quadráticos puros mais efeitos de interação dupla retornou para o critério o valor de 1,014. Após uma rodada de intercâmbio, o valor computado para o critério foi e 0,4525

Uma análise descritiva do valor do critério dos delineamentos possíveis, calculado para 10.000.000 amostras apresentou média igual a 0,4707 e o valor mínimo, 0,4549, que é o valor da vertical colorida em vermelho no gráfico (Figura 4.1). Note-se que nesta figura apenas se consideram bons delineamentos, e que as trocas consideradas foram restritas à melhoria da combinação de tratamentos entre os fatores dos DSD e do fatorial completo da série 3^4 .

Figura 4.1 – Densidade dos valores do critério de optimalidade dos delineamentos possíveis, com o melhor delineamento encontrado ao acaso marcado em vermelho.



Fonte: Do autor (2018)

Desse modo, o delineamento obtido tentando combinar fatores do fatorial 3^4 com os **DSD** apresenta menor variância em relação à média (0,4707) dos delineamentos considerados bem como em relação à maioria esmagadora dos delineamentos possíveis; ao se procurar delineamentos por mero acaso consegue-se melhorar este delineamento consideravelmente (menor variância por mero acaso: 0,4549).

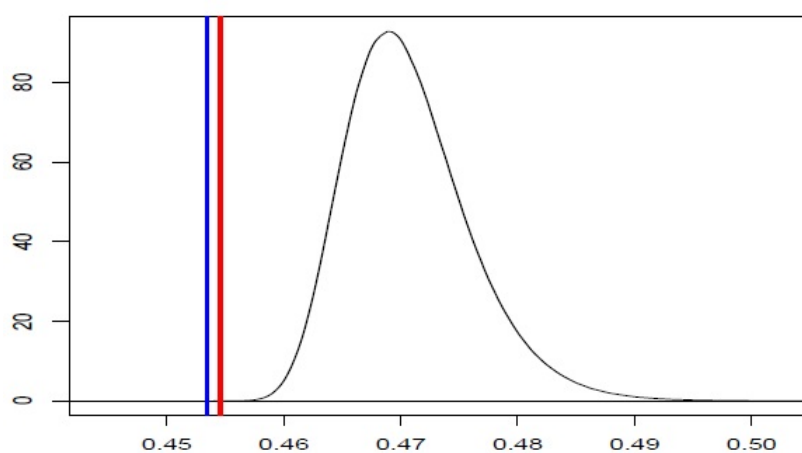
¹ Algoritmos de troca (exchange) estão relacionados com a escolha de tratamentos e de intercâmbio (interchange), à decisão de como se organiza os blocos; o problema abordado nesta tese trata da organização de blocos

Isto indica que uma sugestão inicial aos pesquisadores não precisa necessariamente ser encontrada por algoritmos de busca, mas que pode ser derivada de considerações estatísticas razoáveis do tipo ortogonalidade e balanceamento. No entanto, delineamentos com menor variância sem dúvida podem ser encontrados por mero acaso!

Ao realizar uma rodada de trocas, consegue-se diminuir ainda mais a variância das estimativas, sendo que para o delineamento encontrado a variância foi de (0,4525), como apresentado na Figura 4.2. Em relação ao valor médio da distribuição dos bons delineamentos, o aumento da eficiência é da ordem de 4,02%.

O processo pode ser repetido N vezes e verificar se outro delineamento é encontrado, O resultado de qualquer das rodadas é um delineamento otimizado (embora possa não ser por mero acaso o ótimo global).

Figura 4.2 – Densidade dos valores do critério de optimalidade. O delineamento encontrado com uma rodada do algoritmo de trocas está marcado em azul à esquerda.



Fonte: Do autor (2018)

Este resultado é um indício claro de que se pode melhorar a eficiência da alocação dos fatoriais fracionários mesmo que haja restrições do tipo das apresentadas pelos pesquisadores: blocos com no máximo vinte e cinco parcelas; máximo de 90 unidades experimentais.

Isto é também um forte indício de que delineamentos do tipo DSD ou delineamentos otimizados com propriedades semelhantes aos DSD podem ser usados na investigação de fatores experimentais relevantes em estágios iniciais de experimentação em adubação.

Um dos focos da pesquisa é a avaliação da eficiência de análises separadas de cada bloco do fatorial completo, repetindo o fatorial fracionário, em quatro blocos contendo adicionalmente o nível central para todos os fatores. O objetivo de manter o fatorial fracionário era verificar qual a eficiência de análises, por interesse dos pesquisadores.

Tabela 4.1 – Valores do critério de variância média nas análises de cada bloco. Situações em que os delineamento são derivados, do conjunto base ou do algoritmo de trocas.

Bloco	Origem do plano		Eficiência
	Plano Base	Otimizado pelo Algoritmo	
I	2,50	2,26	1,1062
II	2,44	2,20	1,1091
III	2,58	2,24	1,1518
IV	2,65	2,33	1,1373

Interpreta-se o valor 1,1062 afirmando-se que no bloco I, o delineamento encontrado é cerca de 10,62% mais eficiente que o organizado à mão. Ou seja, em todos os blocos consegue-se reduzir a variância média das estimativas ao se utilizar o delineamento encontrado pelo algoritmo, Em especial isto se dá por uma melhor concatenação de linhas do fatorial completo e do **DSD**. É de se esperar que um **DSD₁₄** seja ainda melhor, conseguindo reduzir a variância das comparações com menor número de unidades experimentais.

Embora a razão inicial de se combinar um DSD em cada bloco com um fatorial completo fosse o anseio dos pesquisadores em comparar o fatorial completo ao fracionário, foi possível mostrar que o delineamento composto também pode ser empregado, embora não seja a melhor estratégia de triagem.

Foi também possível mostrar as covariâncias das estimativas de efeitos quadráticos dos fatores (comuns) derivados do fatorial completo

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 & 1 & -2 \\ 0 & 5 & -2 & 2 \\ 1 & -2 & 24 & -16 \\ -2 & 2 & -16 & 24 \end{bmatrix},$$

foram maiores que a do fatorial fracionário

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}.$$

Desta forma, recomenda-se o maior uso em agronomia, de fatoriais fracionários.

4.2 Eficiência do delineamento praticado (sub-ótimo)

Devido a problemas de implementação, o plano proposto pelo algoritmo sofreu alterações e foi calculada a perda de eficiência para o plano efetivamente praticado. Os traços das matrizes de covariâncias dos delineamentos efetivamente praticado e proposto pelo algoritmo foram iguais a 2,6953 e 2,3811 respectivamente. Assim, o delineamento praticado é cerca 13,2% menos eficiente que o proposto pelo algoritmo. (Anexo 6.16).

Ressalta-se que o fatorial completo da série 3^4 foi mantido ao lado do fatorial fracionário apenas para se verificar em que medida a análise do modelo proposto seria viável em ambos e o que se perde de eficiência ao utilizar o fatorial completo para analisar o modelo simplificado (sem interações). Para o delineamento encontrado pelo algoritmo, a perda computada é da ordem de 42,7 % $\left(\frac{0,2848}{0,6674}\right)$. Já para o caso do delineamento efetivamente praticado, tal perda é da ordem de 44,8 % $\left(\frac{0,2989}{0,6674}\right)$.

Além disso, a Tabela 4.2 mostra que mesmo o delineamento praticado, mesmo com problemas de implementação ("errado"), é bem melhor que o fatorial completo; o modelo adotado neste caso incluía os termos para os quatro fatores e seus quadrados. Vale lembrar que não importa comparar a variância de todos os fatores, pois a parte dos dez fatores que estão em DSD é comum (Anexo 6.17).

Tabela 4.2 – Valores dos traços obtidos para os delineamentos fatoriais: completo e fracionário. Situações em que: os delineamentos adotados são o praticado, e o melhor delineamento encontrado após uma rodada de intercâmbio.

Delineamento	Fatorial		Eficiência
	Fracionário	Completo	
Praticado	0,2989	0,6674	2,2328
Após 1 rodada de intercâmbio	0,2848	0,6674	2,3434

4.3 Esquema de aliases do plano resultante

Avaliando-se a estrutura de confundimento parcial das interações duplas com blocos presente (Tabela 4.3), nota-se que a interação BC não teve nenhum de seus níveis confundidos com blocos (são ortogonais). Por outro lado, cada um dos níveis das demais interações duplas, estão confundidos em diferentes blocos. Por exemplo, para a interação AB, seu nível baixo está confundido no bloco I e seu nível alto está confundido no bloco IV.

Tabela 4.3 – Estrutura de confundimento parcial dos níveis das interações duplas com blocos para o delineamento otimizado pelo algoritmo de troca e intercâmbio. Valores da matriz multiplicados por 21.

	AB	AC	AD	BC	BD	CD
Bloco I	-1	0	-1	0	1	0
Bloco II	0	0	1	0	0	0
Bloco III	0	1	0	0	0	1
Bloco IV	1	-1	0	0	-1	-1

Avaliando-se a estrutura de confundimento parcial de efeitos principais com blocos (Tabela 4.4), nota-se que 10 dos 14 fatores têm as estimativas dos efeitos principais livres de efeito de blocos (são ortogonais).

Tabela 4.4 – Estrutura de confundimento parcial dos níveis dos efeitos principais dos fatores no delineamento otimizado. Valores da matriz multiplicados por 21.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
Bloco I	0	-1	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bloco II	-1	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bloco III	1	-1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bloco IV	0	0	2	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

4.4 Exemplo da análise de variância

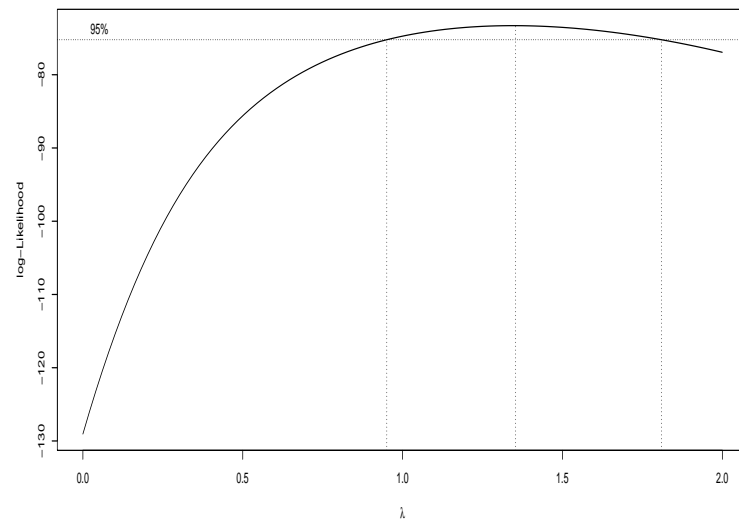
Avaliou-se o experimento real implantado, para alguns caracteres agronômicos, como Altura, Diâmetro, número médio de folhas e Perfilhos por parcela, à segunda época (para o número de Perfilhos só houve coleta de dados a partir da 2^a época de avaliação). O mesmo foi relativamente eficiente, levando a afirmações de significância pelo teste F para vários dos fatores em estudo preliminar, como se pode ver pela análise a seguir.

Para a variável resposta Altura. Antes de proceder a análise de variância verificou-se a necessidade de transformação dos dados.

Para que a análise de variância possa ser executada é importante averiguar os pressupostos de normalidade e homocedasticidade dos dados. Se tais hipóteses são rejeitadas (teste significativo), para contornar o problema usa-se a transformação Box-Cox, que consiste em transformar os dados y de acordo com a expressão

$$y' = \frac{y^\lambda - 1}{\lambda},$$

Figura 4.3 – Verossimilhança perfilhada do parâmetro λ para os dados da variável resposta Altura



Fonte: Do autor (2018).

na qual λ é um parâmetro a ser estimado por meio dos dados, Se $\lambda = 0$ a equação acima se reduz a

$$y' = \log(y),$$

então segue com o logaritmo neperiano ou natural dos dados, Se $\lambda = 0,5$, recomenda-se a raiz quadrada dos dados para a transformação.

O gráfico da verossimilhança perfilhada do parâmetro λ (Figura 4.3), mostra que o valor que maximiza a função é aproximadamente $\hat{\lambda} = 1,5$. Não havendo necessidade de transformar os dados, procedeu-se então a análise de variância, com a qual foi possível verificar que os efeitos principais dos fatores CT, CD, bem como o efeito da interação AG:LT, foram significativos, como revela a Tabela 4.5.

Tabela 4.5 – Tabela da análise de variância para a resposta Altura.

F.V.	G.L.	S.Q.	Q.M.	F_c	$P(F > F_c)$
Bloco	3	0,3430	0,1143	0,5762	0,6329
CC	1	0,0136	0,0135	0,0684	0,7946
AG	1	0,0065	0,0065	0,0327	0,8570
CT	1	0,8274	0,8273	4,1697	0,0455 *
LT	1	0,2248	0,2248	1,1329	0,2914
CO	1	0,0498	0,0498	0,2510	0,6182
CD	1	0,9675	0,9674	4,8758	0,0310 *
HA	1	0,4442	0,4442	2,2387	0,1398
MTU	1	0,3065	0,3065	1,5447	0,2187
ACA	1	0,4006	0,4006	2,0190	0,1605
PDQ	1	0,0915	0,0915	0,4612	0,4996
BKP	1	0,2275	0,2275	1,1465	0,2885
BF2	1	0,0837	0,0837	0,4218	0,5185
LTL	1	0,3708	0,3707	1,8686	0,1767
VTK	1	0,0156	0,0155	0,0785	0,7803
CC:AG	1	0,0590	0,0589	0,2971	0,5877
CC:CT	1	0,0136	0,0136	0,0685	0,7943
CC:LT	1	0,0253	0,0252	0,1273	0,7225
AG:CT	1	0,1885	0,1885	0,9501	0,3336
AG:LT	1	1,6424	1,6423	8,2770	0,0055 **
CT:LT	1	0,1211	0,1210	0,6101	0,4378
Res	60	11,9055	0,1984		

Para a resposta Número médio de Perfilhos por parcela, com a constatação do valor de $\lambda = 0,6667$ procedeu-se transformação dos dados por meio de $NPmt = \frac{NPm^\lambda - 1}{\lambda}$, e posterior análise de variância com os dados transformados. Neste caso os únicos efeitos que se mostraram significativos foram do fator CO e da interação CC:AG. No modelo reduzido, apenas CO, Os coeficientes de regressão (com respectivos erros-padrão), do intercepto: 0,7796 (0,2130) e de CO: -0,3407 (0,1161).

Na tabela 4.6 estão as estimativas dos efeitos do modelo. Pode-se notar que todos os efeitos têm variâncias (erros-padrão) relativamente próximos (Anexo 6.17).

Tabela 4.6 – Estimativas dos coeficientes para a resposta Altura.

Efeito	Estimativa	E.P.	t_c	$P(t > t_c)$
Bloco1	0,5156	0,0416	12,373	0,0000 ***
Bloco2	0,5393	0,0414	13,025	0,0000 ***
Bloco3	0,5002	0,0415	12,033	0,0000 ***
Bloco4	0,4758	0,0421	11,280	0,0000 ***
CC	0,0377	0,0328	1,150	0,2548
AG	-0,0146	0,0296	-0,495	0,6224
CT	0,0524	0,0297	1,763	0,0830
LT	0,0236	0,0278	0,850	0,3988
CO	-0,0196	0,0237	-0,824	0,4130
CD	-0,0245	0,0226	-1,084	0,2828
HA	-0,0062	0,0252	-0,246	0,8066
MTU	-0,0049	0,0241	-0,206	0,8373
ACA	0,0386	0,0248	1,551	0,1261
PD	-0,0398	0,0228	-1,743	0,0864
BKP	0,0509	0,0232	2,192	0,0323 *
BF2	0,0303	0,0239	1,268	0,2097
LTL	-0,0001	0,0255	-0,005	0,9959
VTK	-0,0028	0,0237	-0,120	0,9049
CC:AG	0,0316	0,0424	0,746	0,4586
CC:CT	0,0008	0,0372	0,023	0,9817
CC:LT	0,0164	0,0440	0,373	0,7105
AG:CT	0,0036	0,0367	0,101	0,9203
AG:LT	-0,0737	0,0403	-1,827	0,0727
CT:LT	-0,0328	0,0391	-0,839	0,4046

De modo geral o compromisso de se encontrar uma maior eficiência (precisão) e menor viés, pode ser traduzido na busca de um menor grau de confundimento. Mesmo em um delineamento com maior precisão, se algum fator tiver variância aumentada ou tendendo ao infinito, há indícios de confundimento severo para este fator. Neste caso o delineamento pode ser muito pobre para estimar o efeito deste fator, e portanto, não deve ser usado. No caso do delineamento praticado, nenhum fator apresentou indícios de confundimento severo e o pequeno viés presente, associado à declarações de significância pelo teste F para vários fatores permite avaliar como boa a qualidade do experimento.

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho de tese é introduzida uma abordagem para triagem de fatores que combina fatorial completo com a classe de delineamentos de triagem definitiva (DSDs); seguem as principais conclusões.

É possível construir réplicas de frações DSD (Definitive Screening Designs) da série 3^{10-6} concatenadas a um fatorial completo da série 3^4 , empregando um algoritmo de intercâmbio para otimizar a alocação em blocos.

É possível construir delineamentos combinando DSDs e fatoriais completos organizados em blocos incompletos, com maior eficiência média do que os fatoriais completos, para o modelo de segunda ordem utilizado na seleção de fatores.

O delineamento resultante é um fatorial fracionário 3^{10-6} para os 10 fatores restantes, em 3 níveis (doses de aplicação) cada, suplementados de 3 repetições adicionais do nível central, sendo uma em cada bloco.

Com o experimento implementado é possível testar a presença de efeitos principais e quadráticos usando menos unidades experimentais do que seria necessário no fatorial completo, o que leva à economia de recursos e melhoria da qualidade experimental.

Recomenda-se o maior uso de fatoriais fracionários na seleção de fatores em estudos iniciais em Agronomia.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N.; TOBIAS R. D. **Optimum experimental designs with SAS**. New York: Oxford University, 2007. 511 p.
- BOX, G. E. P.; BEHNKEN, D. W. Some new three level designs for the study of quantitative variables. **Technometrics**, Washington, v. 2, n. 4, p. 455-475, Nov. 1960.
- BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. **Response surfaces, mixtures, and ridge analyses**. 2nd ed. New York: J. Wiley, 2007. 857 p.
- BOX, G. E. P.; HUNTER, J. S. The 2^{k-p} fractional factorial designs. Part I. **Technometrics**, Washington, v. 42, n. 1, p. 28-47, 1961.
- BOX, G. E. P.; HUNTER, J. S. The 2^{k-p} fractional factorial designs. Part II. **Technometrics**, Washington, v. 3, n. 4, p. 449-458, 1961.
- BOX, G. E. P.; WILSON, K. B. On the experimental attainment of optimum conditions. **Journal of the Royal Statistical Society (Methodological): série B**, London, v. 13, n. 1, p. 1-45, 1951.
- BUENO FILHO, J. S. S.; GILMOUR, S. G. Planning incomplete block experiments when treatments are genetically related. **Biometrics**, London, v. 59, n. 2, p. 375-381, June 2003.
- BURSZTYN, D.; STEINBERG, D. Comparison of designs for computer experiments. **Journal of Statistical Planning and Inference**, n. 136, p. 1103–1119, 2006.
- BUYSKE, S.; TROUT, R. Stat 591: Advanced design of experiments. Rutgers University, Fall, 2001.
- CAMPOS, M. P. **Extrato de algas e condicionadores de solo no crescimento e produtividade de Banana Prata Gorutuba**. Lavras: UFLA/DAG, 2017. 21 p.
- FISHER, R. A. **The design of experiments**. 2nd ed. Edinburgh: Oliver and Boyd, 1937.
- GILMOUR, S. G. Discussion of “21st century screening experiments: What, why, and how”, **Quality Engineering**, v. 28, n. 1, p. 107-110, DOI: 10.1080/08982112.2015.1100463, 2016.
- GOOS, P.; BRADLEY J. **Optimal design of experiments: A case study approach**. Chichester, UK: John Wiley & Sons, 2011. v. 1, 305 p.

GOOS, P. Discussion of “21st century screening experiments: What, why, and how”, **Quality Engineering**, v. 28, n. 1, p. 111-114, DOI: 10.1080/08982112.2015.1100464, 2016.

HINKELMANN, K.; KEMPTHORNE O. **Design and analysis of experiments: introduction to experimental design**. New Jersey: John Wiley & Sons, 2008. 666 p.

JOHN, P. W. M. **Statistical design and analysis of experiments**. New York: Macmillan, 1971.

JONES B.; NACHTSHEIM, C. J. Efficient designs with minimal aliasing. **Technometrics**, n. 53, p. 62-71, 2011.

JONES B.; NACHTSHEIM, C. J. A class of three-Level designs for definitive screening in the presence of second-order effects. **Journal of Quality Technology**, n. 43, p. 1-15, 2011.

JONES B. Rejoinder, **Quality Engineering**, v. 28, n. 1, p. 122-126, DOI: 10.1080/08982112.2015.1100468, 2016.

KEMPTHORNE O. The randomization theory of experimental inference. **Journal of the American Statistical Association**, New York, v. 50, p. 946-967, 1955.

KHURI, A I **Advanced calculus with applications in statistics**. 2nd ed. rev. and expanded. John Wiley & Sons. New Jersey, 2003. 673 p.

LIMA, C. N.; BUENO FILHO, J. S. S. **Escolha de tratamentos e blocagem otimizados na construção de fatoriais fracionários**. 2009. 147 p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuária) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2009.

MEAD, R.; GILMOUR, S. G.; MEAD, A. **Statistical principles for the design of experiments: applications to real experiments**. Cambridge: Cambridge University Press, 2012. 584 p.

MONTGOMERY, D. C. **Design and analysis of experiments**. 5nd ed. John Wiley & Sons, 2001. 684 p.

MOOD, A. M.; GRAYBILL, F. A.;BOES, D. C. **Introduction to the theory of statistics**. 3nd ed. Tokyo: McGraw-Hill, 1974. 564 p.

PATTERSON, H. D.; THOMPSON, R. Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. **Biometrika**, London, v. 58, n. 3, p. 545-554, Nov. 1971.

PLACKETT, R. L.; BURMAN J. P. The design of optimum multifactorial experiments. **Biometrika**, London, v. 33, n. 4, p. 305–325, June. 1946.

SEARLE, S.R.; CASELLA, G.; McCULLOCH C.E. **Variance components**. New York: Willey, 1992. 501 p.

SOUZA, F R. **Modelagem de experimentos planejados com respostas discretas**. 2013. 92p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuária) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2013.

TSAI, P.W.; GILMOUR, S. G.; MEAD , R. Projective three-level main effects designs robust to model uncertainty. **Biometrika**, v. 87, p. 467–475, 2000.

VINING G. Discussion of “21st century screening experiments: What, why, and how?”, **Quality Engineering**, v. 28, n. 1, p. 115-121, DOI: 10.1080/08982112.2015.1100466, 2016.

WILKINSON, G. N; ROGERS C. E. Symbolic description of factorial models for analysis of variance. **Journal of the Royal Statistical Society (Applied Statistics): Series C**, v. 22, n. 3, p. 392-399, 1973.

YANG, J. Y.; DRAPER, N. R. Two-level factorial and fractional factorial designs in blocks of size two. **Journal of Quality Technology**, n. 35, p. 294–305, 2000.

6 ANEXOS

6.1 Cálculo da matriz de concorrência para o delineamento com seis blocos de quatro unidades cada.

```
b      <- 6
blocos <- factor(kronecker(1:b,c(1,1,1,1)))
Z      <- model.matrix(~ -1+blocos)
Trat   <- factor(c(1,2,4,5,2,3,5,6,1,3,4,6,1,2,4,5,2,3,5,6,1,3,4,6))
X      <- model.matrix(~ -1+Trat)
N      <- t(X)%*%Z
(NN    <- N%*%t(N))
```

6.2 Aspecto do confundimento completo da interação tripla ABC em dois blocos de quatro unidades

```
rm(list=ls(all=T))
fat <- as.matrix(expand.grid(c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1)))
trat <- fat[c(1,4,6,7,2,3,5,8),]
A <- trat[,1]
B <- trat[,2]
C <- trat[,3]
blocos <- factor(kronecker(1:2,c(rep(1,4))))
b <- model.matrix(~-1+blocos)
y <- rnorm(length(A))
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + b ))
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A)+I(B)+I(C)+I(A*B)+I(A*C)+I(B*C)+I(A*B*C)))
(alias <- solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)
```

6.3 Cálculo da matriz aliás resultante do fatorial fracionário 2^{4-1}

```
rm(list=ls(all=T))
base <- expand.grid(c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1))
meiafracao <- base[c(1,13,11,7,10,6,4,16),]
A <- meiafracao[,1]
B <- meiafracao[,2]
C <- meiafracao[,3]
D <- meiafracao[,4]
```

```

y <- rnorm(length(A))

X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A)+I(B)+I(C)+I(D)) )
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B)+I(A*C)+
I(A*B*C)+I(A*B*D)+I(A*C*D)+I(B*C*D)) )
(alias <- solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)

```

6.4 Estratégia de confundir uma interação diferente e cada repetição.

```

rm(list=ls(all=T))
fat <- as.matrix(expand.grid(c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1)))
trat <- fat[c(1,4,6,7,2,3,5,8,1,5,4,8,2,3,6,7,1,2,7,8,3,5,4,6,1,3,6,8,2,5,4,7),]
A <- trat[,1]
B <- trat[,2]
C <- trat[,3]
y <- rnorm(length(A))
blocos <- factor(kronecker(1:8,c(rep(1,4))))
b <- model.matrix(~-1+blocos)
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + b ) )
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B)+I(A*C)+I(B*C)+I(A*B*C)) )
(alias <- solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)

```

6.5 Cálculo da precisão relativa para duas estratégias de confundimento

```

rm(list=ls(all=T))
fat <- as.matrix(expand.grid(c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1)))
trat <- fat[c(1,4,6,7,2,3,5,8,1,4,6,7,2,3,5,8,1,4,6,7,2,3,5,8,1,4,6,7,2,3,5,8),]
A <- trat[,1]
B <- trat[,2]
C <- trat[,3]
blocos <- factor(kronecker(1:8,c(rep(1,4))))
b <- model.matrix(~-1+blocos)
y <- rnorm(length(A))
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + b ) )
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B)+I(A*C)+I(B*C)+I(A*B*C)) )
(alias <- solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)
rm(list=ls(all=T))

```

```

fat <- as.matrix(expand.grid(c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1)))
trat <- fat[c(1,4,6,7,2,3,5,8,1,5,4,8,2,3,6,7,1,2,7,8,3,5,4,6,1,3,6,8,2,5,4,7),]
A <- trat[,1]
B <- trat[,2]
C <- trat[,3]
y <- rnorm(length(A))
blocos <- factor(kronecker(1:8,c(rep(1,4))))
b <- model.matrix(~-1+blocos)
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + b ))
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B)+I(A*C)+I(B*C)+I(A*B*C)))
(alias <- solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)

```

6.6 Ilustração do efeito de interação AB ortogonal a (ou livre do efeito de) blocos, ao passo que as demais interações são idênticas (ou completamente confundidas).

```

fat <- as.matrix(expand.grid(c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1)))
trat <- fat[c(1,15,14,4,13,3,2,16,9,7,6,12,5,11,10,8),]
A <- trat[,1]
B <- trat[,2]
C <- trat[,3]
D <- trat[,4]
y <- rnorm(length(A))
blocos <- factor(kronecker(1:4,c(rep(1,4))))
b <- model.matrix(~-1+blocos)
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + b ))
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B) + I(C*D) + I(A*B*C) + I(A*B*D)))
(alias <- solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)

```

6.7 Cálculo da matriz aliases para as frações $\frac{1}{4}$ e $\frac{3}{4}$ da estrutura fatorial 2^6

```

fat <- as.matrix(expand.grid(c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1),c(-1,1)))
fuq <- fat[c(1,43,21,4,49,27,37,52,13,39,26,16,61,23,42,64),]

trat <- fuq

```



```

A <- trat[,1]
B <- trat[,2]
C <- trat[,3]
D <- trat[,4]
E <- trat[,5]
F <- trat[,6]
y <- rnorm(length(A))
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B)+I(A*C)+I(A*D)+I(A*E)+I(A*F)+I(B*C)+I(B*D)+
I(B*E)+I(B*F)+I(C*D)+I(C*E)+I(C*F)+I(D*E)+I(D*F)+I(E*F)) )
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 +I(A*B)+I(A*C)+I(A*D)+ I(A*E) + I(A*F)+I(B*C)+I(B*D)+
I(B*E)+ I(B*F)+ I(C*D)+I(C*E)+I(C*F)+I(D*E)+ I(D*F)+(E*F)) )
library(MASS)
(alias <- fractions(ginv(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2))
ftq <- fat[ -c(1,43,21,4,49,27,37,52,13,39,26,16,61,23,42,64), ]
A <- ftq[,1]
B <- ftq[,2]
C <- ftq[,3]
D <- ftq[,4]
E <- ftq[,5]
F <- ftq[,6]
y <- rnorm(length(A))
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B)+I(A*C)+I(A*D)+I(A*E)+I(A*F)+I(B*C)+I(B*D)
I(B*E)+I(B*F)+I(C*D)+I(C*E)+I(C*F)+I(D*E)+I(D*F)+I(E*F)) )
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 +I(A*B)+I(A*C)+I(A*D)+ I(A*E)+I(A*F)+I(B*C)+I(B*D)
I(B*E)+ I(B*F)+ I(C*D)+I(C*E)+I(C*F)+I(D*E)+I(D*F)+I(E*F)) )
library(MASS)
(alias <- fractions(ginv(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2))

```

6.8 Cálculo da matriz aliases para a fração $\frac{1}{9}$ da estrutura fatorial 3^5

```

P <- rep(rep(c(-1:1),each=3),3)
Q <- rep(rep(c(-1:1),each=1),9)
R <- rep(rep(c(-1:1),each=9),1)
S <- c(-1,0,1,0,1,-1,1,-1,0,0,1,-1,1,-1,0,-1,0,1,1,-1,0,-1,0,1,0,1,-1)
T <- c(-1,0,1,0,1,-1,1,-1,0,1,-1,0,-1,0,1,0,1,-1,0,1,-1,1,-1,0,-1,0,1)

```

```

y <- rnorm(27)
X1 <- model.matrix( lm(y ~ I(P)+I(Q)+I(R)+I(S)+I(T)) )
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(P*Q)+I(P*R)+I(P*S)+I(P*T) +
I(Q*R)+I(Q*S)+I(Q*T) +
I(R*S)+I(R*T) +
I(S*T) +
I(P*Q*R)+I(P*Q*S)+I(P*Q*T) +I(P*R*S)+I(P*R*T)+I(P*S*T) +
I(Q*R*S)+I(Q*R*T)+I(Q*S*T)+I(R*S*T)
))
library(MASS)
(alias <- fractions(solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2))

```

6.9 Dois tipos de confundimento: completo e parcial

```

t <- matrix(c(rep(rep(rep(c(-1,1), each=6), 4)),
rep(c(-1,1,-1,1,-1,1,1,-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,-1,1), 2),
rep(c(-1,1), 24),
rep(rep(c(-1,0,1), each=2), 8)), 48, 4)
A <- t[,1]
B <- t[,2]
C <- t[,3]
D <- t[,4]
blocos <- factor(kronecker(1:4,c(rep(1,12))))
b <- model.matrix(~-1+blocos)
y <-rnorm(length(A))
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + b ))
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B*C)) )
library(MASS)
(alias <- fractions(solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2))
t <- matrix(c(rep(rep(rep(c(-1,1), each=6), 4)),
rep(c(-1,1,1,-1,-1,1,1,-1,-1,1,1,-1,1,-1,-1,1,1,-1,-1,1), 2),
rep(c(-1,1), 24),
rep(rep(c(-1,0,1), each=2), 8)), 48, 4)
A <- t[,1]
B <- t[,2]
C <- t[,3]

```

```

D <- t[,4]
blocos <- factor(kronecker(1:4,c(rep(1,12))))
b <- model.matrix(~-1+blocos)
y <- rnorm(length(A))
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + b ))
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B*C)) )
library(MASS)
(alias <- solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)

```

6.10 Matriz de covariâncias do modelo em blocos.

```

b <- factor(kronecker(1:2,c(rep(1,12))))
b <- model.matrix(~ -1+b)
t <- factor(c(1,1,1,1,1,1,1,1,2,2,2,2,1,1,1,1,2,2,2,2,2,2,2,2))
t <- model.matrix(~ -1+t)
mod <- lm(rnorm(24)~1+b+Z)
M <- model.matrix(mod)
a=t(M)%*%M
library(MASS)
ai=fractions(ginv(a))

```

6.11 Estrutura de confundimento de delineamento encontrado por algoritmo de troca e intercâmbio (Lima, 2009)

```

b <- 3
k <- 9
blocos <- factor(kronecker(1:b,rep(1,k)))
Xb <- model.matrix(~ -1+blocos)
base <- expand.grid(c(-1:1),c(-1:1),c(-1:1),c(-1:1))
write(t(base),file="base.csv",ncol=4)
Base <- as.matrix(read.table("base.csv"))
Xt <- Base[c(72,48,20,1,57,7,79,24,41,
73,41,41,78,3,61,17,54,19,
40,25,12,9,63,75,55,32,80),]
y <- rnorm(27)
A <- Xt[,1]

```

```

B <- Xt[,2]
C <- Xt[,3]
D <- Xt[,4]
X1 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + Xb)
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A)+I(B)+I(C)+I(D)+I(A*B)+I(A*C)+I(A*D)+
I(B*C)+I(B*D)+I(C*D)))
library(MASS)
fractions((alias <- solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2))

```

6.12 Cálculo da matriz aliás do delineamento para o experimento de extração e experimento alternativo

```

A <- c(-1,-1,-1,1,-1,-1,1,1,1,-1,1,1)
B <- c(-1,1,1,1,-1,1,1,-1,-1,-1,1,-1)
C <- c(-1,-1,-1,1,1,1,-1,-1,1,1,1,-1)
D <- c(1,-1,1,-1,-1,1,-1,-1,1,-1,1,1)
E <- c(-1,1,1,-1,-1,-1,-1,1,1,1,1,-1)
F <- c(-1,-1,1,-1,1,-1,1,-1,-1,1,1,1)
y <- rnorm(12)
X1 <- model.matrix( lm(y ~ I(A)+I(B)+I(C)+I(D)+I(E)+I(F) ) )
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*B)+I(A*C)+I(A*D)+I(A*E)+I(A*F)+
I(B*C)+I(B*D)+I(B*E)+I(B*F)+
I(C*D)+I(C*E)+I(C*F)+
I(D*E)+I(D*F)+
I(E*F) ) )
library(MASS)
(alias <- fractions(solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2))
d1 <- det(t(X1)%*%X1)
library(MASS)
alias <- fractions(solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)
A <- alias
(traco <- sum(diag(t(A)%*%A)))
#### Delineamento alternativo
A <- c(1,-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,-1)
B <- c(1,-1,1,-1,1,-1,-1,1,-1,1,-1,1)
C <- c(-1,1,1,-1,-1,1,-1,1,1,-1,-1,1)

```

```

D <- c(1,-1,-1,1,1,-1,1,-1,1,-1,-1,1)
E <- c(1,-1,1,-1,-1,1,1,-1,-1,1,-1,1)
F <- c(1,-1,-1,1,-1,1,-1,1,1,-1,1,-1)
y <- rnorm(12)
X1 <- model.matrix( lm(y ~ I(A)+I(B)+I(C)+I(D)+I(E)+I(F) ) )
X2 <- model.matrix( lm(y ~ -1 + I(A*E)+I(A*D)+I(A*C)+I(A*B)+I(A*F)+
I(B*C)+I(B*D)+I(B*E)+I(B*F)+
I(C*D)+I(C*E)+I(C*F)+
I(D*E)+I(D*F)+
I(E*F) ) )
d2 <- det(t(X1)%*%X1)
library(MASS)
alias <- fractions(solve(t(X1)%*%X1)%*%t(X1)%*%X2)
A <- alias
(traco <- sum(diag(t(A)%*%A)))
(d2/d1)^(1/7)

```

6.13 Cálculo da D - eficiência do delineamento de Bradley e Nachtsheim relativo ao delineamento de Plackett–Burman.

```

A <- c(0,0,1,-1,-1,1,-1,1,1,-1,1,-1,0)
B <- c(1,-1,0,0,-1,1,1,-1,-1,1,1,-1,0)
C <- c(-1,1,-1,1,0,0,1,-1,1,-1,1,-1,0)
D <- c(-1,1,1,-1,1,-1,0,0,-1,1,1,-1,0)
E <- c(-1,1,1,-1,-1,1,1,-1,0,0,-1,1,0)
F <- c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0)
y = rnorm(length(A))
modelo1 <- lm(y ~ I(A)+I(B)+I(C)+I(D)+I(E)+I(F) )
X <-model.matrix(modelo1)
BN <- det(t(X)%*%(X))
A <- c(1,-1,-1,-1,1,-1,-1,-1,1,1,0,1,1)
B <- c(1,-1,-1,-1,-1,1,1,1,1,-1,0,1,-1)
C <- c(1,-1,1,-1,1,1,1,-1,-1,-1,0,-1,1)
D <- c(-1,-1,1,1,1,-1,1,-1,1,-1,0,1,-1)
E <- c(1,-1,1,1,-1,1,-1,-1,-1,1,0,1,-1)

```

```

F <- c(1,-1,-1,1,1,-1,1,1,-1,1,0,-1,-1)
modelo2 <- lm(y ~ I(A)+I(B)+I(C)+I(D)+I(E)+I(F) )
Y <-model.matrix(modelo2)
PB <- det(t(Y)%*%(Y))

(BN/PB)^(1/7)
0.8553234

```

6.14 Experimento *Salmonella typhimurium*

```

Meth <- c(-1,-1,-1,1,-1,-1,1,1,1,-1,1,1)
Etha <- c(-1,1,1,1,-1,1,1,-1,-1,-1,1,-1)
Prop <- c(-1,-1,-1,1,1,1,-1,-1,1,1,1,-1)
Buta <- c(1,-1,1,-1,-1,1,-1,-1,1,-1,1,1)
pH <- c(-1,1,1,-1,-1,-1,-1,1,1,1,1,-1)
Time <- c(-1,-1,1,-1,1,-1,1,-1,-1,1,1,1)
Yield <- c(10.94,15.79,25.96,35.92,22.92,23.54,47.44,19.80,29.48,17.13,43.75,40.86)
reg <- lm(Yield ~ I(Meth)+I(Etha) + I(Prop) + I(Buta) + I(pH)+I(Time) )
summary(reg)
reg <- lm(Yield ~ I(Meth)+I(Etha) + I(Prop) + I(Buta) + I(pH)+I(Time) + I(Etha*Prop) )
summary(reg)
sum(Etha*Prop*Meth)/12
library(MASS)
fractions(sum(Etha*Prop*Meth)/12)

```

6.15 Algoritmo escrito em linguagem R: distribuição de delineamentos seguindo a proposta de concatenamento de DSD e Fatorial completo

```

#####
## Invocando conjunto de dados de dimensão 84 x 15
## constituído de colunas de; blocos, fatorial completo
## com 4 fatores em três níveis cada, e DSDs de 10
## fatores.
#####
Base <- as.matrix(read.table("Base.csv"))
Blocos <- factor(Base[,1])

```

```

Xbase <- Base[,2:15]
Xb     <- model.matrix(~ -1+Blocos)
##### Função inicia #####
inicia <- function(Xbase){
  indice <- sample(c(1:20,22:41,43:62,64:83))
  sorteio <- c(indice[1:20],21,indice[21:40],42,indice[41:60],63,indice[61:80],84)
  Xt     <- Xbase[sorteio,1:4]
  X      <- cbind(Xb,Xt,(Xt^2),
  (Xt[,1]*Xt[,2]),(Xt[,1]*Xt[,3]),(Xt[,1]*Xt[,4]),
  (Xt[,2]*Xt[,3]),(Xt[,2]*Xt[,4]),(Xt[,3]*Xt[,4]))
  XX     <- t(X)%*%X
  XXi    <- solve(XX)
  Crit   <- sum(diag(XXi[5:18,5:18]))
  return(list(Xt=Xt,Crit=Crit))
}

(inicial <- inicia(Xbase))

Xt     <- inicial$Xt
Crit   <- inicial$Crit
(Crit.fin <- Crit)

N <- 10000000
critvec <- 1:N
for(i in 1:N){
  inicial <- inicia(Xbase)
  critvec[i] <- inicial$Crit
  if(inicial$Crit < Crit){
    Xprov <- inicial$Xt
    Crit  <- inicial$Crit
  }
}

#####
### Avaliando a distribuição dos critérios nos

```

```

### delimitações possíveis
#####

save(critvec,file="critvec.rda")
load("critvec.rda")

aa <- mean(critvec)-5*sd(critvec)
bb <- mean(critvec)+6*sd(critvec)

summary(critvec)

(CritMedio <- mean(critvec))
(CritMin <- min(critvec))
CritMedio/CritMin

plot(density(critvec, kernel="rectangular"),
xlim=c(aa,bb),
xlab="Criterion Value")
abline(h=0)
abline(v=min(critvec), lwd=2, col="red")

b <- 4
k <- 21
l1 <- NULL
l2 <- NULL
trocado <- 1

Xt <- inicial$Xt
Crit.old <- inicial$Crit

```

Função troca

```

trocas <- function(Xt){
for(i in 1:(b-1)){
for(j in 1:(k-1)){
for(ii in (i+1):b){

```



```

for(jj in 1:(k-1)){
  l1 <- (i-1)*21+ j
  l2 <- (ii-1)*21+jj
  Xt.n <- Xt
  Xt.n[c(l1,l2),] <- Xt.n[c(l2,l1),]

  Xn <- cbind(Xb,Xt.n, (Xt.n^2), (Xt.n[,1]*Xt.n[,2]),
  (Xt.n[,1]*Xt.n[,3]), (Xt.n[,1]*Xt.n[,4]),
  (Xt.n[,2]*Xt.n[,3]), (Xt.n[,2]*Xt.n[,4]), (Xt.n[,3]*Xt.n[,4]))

  XXn <- t(Xn)%*%Xn
  if(det(XXn)>0){
    XXni <- solve(XXn)
    Crit <- sum(diag(XXni[5:18,5:18]))

    if(Crit < Crit.old){
      Crit.old <- Crit
      Xt <- Xt.n
      trocado <- trocado+1
    }
  }
  return(list(Crit=Crit, Xt=Xt, trocado=trocado))
}

tt <- trocas(Xt)

(Crit <- tt$Crit)
Crit.old <- Crit
Xt <- tt$Xt
XFin <- tt$Xt
(trocado <- tt$trocado)
if(Crit<CritMin){
  Xprov <- Xt
  CritMin <- Crit
}
CritMin

```

```

CritMedio/CritMin

<<echo=FALSE, fig=TRUE>>=
plot(density(critvec, kernel="rectangular"),
xlim=c(aa, bb),
xlab="Criterion Value")
abline(h=0)
abline(v=min(critvec), lwd=2, col="red")
abline(v=min(CritMin), lwd=2, col="blue")

#####
### Testando o delineamento gerado
#####

Delineamento <- Base
Delineamento[,2:5] <- Xprov
Delineamento
apply(Delineamento, 1, sum)
apply(Delineamento, 2, sum)

Xd <- Delineamento[,2:15]
Xd <- d[,2:15]
table(apply(Xd, 1, sum))
apply(Xd, 2, sum)

modelo.teste <- lm(rnorm(84) ~ Blocos + Xd + I(Xd[,1]*Xd[,2]) +
+I(Xd[,1]*Xd[,3]) + I(Xd[,1]*Xd[,4])
+I(Xd[,2]*Xd[,3]) + I(Xd[,2]*Xd[,4])
+I(Xd[,3]*Xd[,4]) + I(Xd^2))
anova(modelo.teste)

write(t(Delineamento), file="Delineamento.csv", ncol=15)

```

O processo poderia ser repetido N vezes e verificar se outro delineamento é encontrado. O resultado de qualquer das rodadas é o delineamento ótimo.

6.16 Cálculo da A-eficiência do delineamento praticado relativo ao proposto pelo algoritmo

```

Base <- as.matrix(read.table("encontrado.txt"))
Xb <- factor(Base[,1])
Xt <- Base[,2:15]
Xd <- Xt
modelo.teste <- lm(rnorm(84)~Xb+Xd+I(Xd[,1]*Xd[,2])+
I(Xd[,1]*Xd[,3])+I(Xd[,1]*Xd[,4])+
I(Xd[,2]*Xd[,3])+I(Xd[,2]*Xd[,4])+
I(Xd[,3]*Xd[,4])+I(Xd^2))
Xn=model.matrix(modelo.teste)
XXn <- t(Xn)%*%Xn
dim(XXn)
XXni <- solve(XXn)
(traco.E <- sum(diag(XXni[5:38,5:38])))
Base <- as.matrix(read.table("praticado.txt"))
Xb <- factor(Base[,1])
Xt <- Base[,2:15]
Xd <- Xt
modelo.teste <- lm(rnorm(84)~Xb+Xd+I(Xd[,1]*Xd[,2])+
I(Xd[,1]*Xd[,3])+I(Xd[,1]*Xd[,4])+
I(Xd[,2]*Xd[,3])+I(Xd[,2]*Xd[,4])+
I(Xd[,3]*Xd[,4])+I(Xd^2))
Xn=model.matrix(modelo.teste)
XXn <- t(Xn)%*%Xn
dim(XXn)
XXni <- solve(XXn)
(traco.P <- sum(diag(XXni[5:38,5:38])))
round((traco.E/traco.P),2)
88.34

```

6.17 Traços calculados para modelo de efeitos principais e quadráticos puros dos fatores provenientes dos fatoriais completo e fracionário. Situações em que os delineamentos utilizados são o praticado, arranjado a mão e após 1 rodada de trocas

```

Base <- as.matrix(read.table("Base.csv"))
Blocos <- factor(Base[,1])
Xbase <- Base[,-1]
Xb <- model.matrix(~ -1+Blocos)
indice <- sample(1:80)
sorteio <- c(c(indice[1:20]),21,(c(indice[21:40])+1),42,(c(indice[41:60])+2),63,(c(indice[61:80])+3)))
Xt.new <- Xt[sorteio,]
Xn <- cbind(Xb,Xt.new,(Xt.new^2))
XXn <- t(Xn)%*%Xn
XXni <- solve(XXn)
Crit <- sum(diag(XXni[5:12,5:12]))
0.3574244

Base <- as.matrix(read.table("Base.csv"))
Xb <- factor(Base[,1])
Xt <- Base[,2:5]
Xd <- Xt
modelo.teste <- lm(rnorm(84)~-1+Xb+I(Xd)+I(Xd^2))
Xn=model.matrix(modelo.teste)
XXn <- t(Xn)%*%Xn
dim(XXn)
XXni <- solve(XXn)
(traco <- sum(diag(XXni[5:12,5:12])))
0.6673744
rm(list=ls(all=T))

Base <- as.matrix(read.table("encontrado.txt"))
Xb <- factor(Base[,1])
Xt <- Base[,2:5]
Xd <- Xt
modelo.teste <- lm(rnorm(84)~-1+Xb+I(Xd)+I(Xd^2))
Xn=model.matrix(modelo.teste)
XXn <- t(Xn)%*%Xn
dim(XXn)
XXni <- solve(XXn)
(traco <- sum(diag(XXni[5:12,5:12])))

```

```

0.2847783
rm(list=ls(all=T))
Base <- as.matrix(read.table("praticado.txt"))
Xb <- factor(Base[,1])
Xt <- Base[,2:5]
Xd <- Xt
modelo.teste <- lm(rnorm(84) ~ -1+Xb+I(Xd)+I(Xd^2))
Xn=model.matrix(modelo.teste)
XXn <- t(Xn)%*%Xn
XXni <- solve(XXn)
(traco <- sum(diag(XXni[5:12,5:12])))
0.2989521

```

6.18 Análise de variância e estimativas dos efeitos do modelo praticado

```

#####
##### Resposta: altura
#####
dados <- read.table("fitotecnicos.txt",h=T)
dados1 <- dados[which(dados$Epoca==1),]
attach(dados1)
Bloco <- factor(Bloco)
Epoca <- factor(Epoca)
Parcela <- factor(Planta)
m.A <- lm(Altura ~ -1+Bloco + CC*AG +CC*CT+CC*LT+AG*CT+AG*LT+CT*LT+CO+
CD+HA+MTU+ACA+PDQ+BKP+BF2+LTL+VTK)
anova(m.A)
summary(m.A)

```

Tabela 6.1 – Delineamento otimizado

Bloco	Fatores													
	CC	AG	CT	LT	CO	CD	HA	MTU	ACA	PDQ	BKP	BF2	LTL	VTK
1	1	0	-1	1	0	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1
1	1	-1	0	-1	0	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1
1	1	1	0	0	1	0	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1
1	0	-1	-1	1	-1	0	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
1	-1	-1	0	1	-1	1	0	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1
1	1	-1	1	-1	1	-1	0	1	1	1	-1	1	1	1
1	-1	1	1	0	-1	1	1	0	1	-1	-1	1	1	-1
1	0	-1	1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	1	-1	-1	1
1	1	0	-1	0	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1	1	-1
1	-1	1	-1	-1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1	-1	1
1	1	1	1	1	-1	1	-1	1	1	0	1	-1	1	1
1	-1	0	1	1	1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	-1	-1
1	0	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1
1	0	0	1	1	-1	-1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1
1	0	1	0	0	1	1	1	1	-1	1	1	0	1	-1
1	-1	0	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	0	-1	1
1	0	0	0	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0	-1
1	-1	0	-1	0	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	0	1
1	1	-1	-1	0	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	0
1	-1	-1	0	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	1	0	1	0	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1
2	0	-1	0	-1	0	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1
2	0	1	1	1	1	0	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1
2	-1	-1	-1	0	-1	0	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
2	-1	0	0	-1	-1	1	0	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1
2	-1	1	0	1	1	-1	0	1	1	1	-1	1	1	1
2	0	0	1	-1	-1	1	1	0	1	-1	-1	1	1	-1
2	0	1	-1	0	1	-1	-1	0	-1	1	1	-1	-1	1
2	1	1	1	0	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1	1	-1
2	-1	0	1	0	1	1	1	1	0	-1	-1	-1	-1	1
2	-1	0	0	1	-1	1	-1	1	1	0	1	-1	1	1
2	0	0	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	-1	-1
2	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1
2	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1
2	-1	1	-1	0	1	1	1	1	-1	1	1	0	1	-1
2	-1	-1	1	0	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	0	-1	1
2	0	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0	-1
2	0	0	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	0	1
2	1	-1	0	0	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	0
2	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

continua

Tabela 6.2 – Delineamento praticado

Bloco	Fatores													
	CC	AG	CT	LT	CO	CD	HA	MTU	ACA	PDQ	BKP	BF2	LTL	VTK
1	-1	0	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1
1	1	-1	1	0	1	-1	0	1	1	1	-1	1	1	1
1	1	1	0	1	-1	1	-1	1	1	0	1	-1	1	1
1	0	1	-1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	1	-1	-1	1
1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	0	1
1	0	-1	0	1	0	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1
1	0	1	0	-1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1	-1	1
1	0	1	1	0	-1	0	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	0	1	-1	-1	1	1	-1
1	1	0	-1	0	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0	-1
1	-1	-1	-1	-1	1	0	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1
1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	1	1	0	1	-1
1	0	0	1	-1	-1	1	0	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1
1	1	0	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	1	0	-1	1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	-1	-1
1	1	1	-1	1	0	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1
1	0	-1	0	0	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1	1	-1
1	1	0	0	0	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	0	-1	1
1	0	0	0	0	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	0
1	0	0	0	0	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	0
2	0	0	1	0	-1	1	1	0	1	-1	-1	1	1	-1
2	1	0	-1	0	-1	1	-1	1	1	0	1	-1	1	1
2	0	-1	0	1	0	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1
2	0	1	-1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	1	-1	-1	1
2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	1	0	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	0	-1	1
2	-1	0	1	0	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	0
2	-1	1	-1	0	-1	-1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1
2	1	0	1	0	1	1	1	1	0	-1	-1	-1	-1	1
2	0	0	0	1	0	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1
2	0	-1	-1	1	-1	0	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
2	1	1	-1	0	1	0	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1
2	0	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	1	0	1	-1
2	0	0	0	0	1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	-1	-1
2	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	0
2	0	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0	-1
2	0	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1
2	-1	-1	0	1	1	-1	0	1	1	1	-1	1	1	1
2	-1	0	0	-1	-1	1	0	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	0	1
2	-1	-1	0	-1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1	1	-1

continua

Delineamento praticado... continuação

Bloco	Fatores													
	CC	AG	CT	LT	CO	CD	HA	MTU	ACA	PDQ	BKP	BF2	LTL	VTK
3	0	0	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	0	-1	1
3	-1	0	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	0
3	0	0	0	-1	-1	1	1	0	1	-1	-1	1	1	-1
3	0	-1	0	0	-1	-1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1
3	1	0	0	1	1	-1	-1	0	-1	1	1	-1	-1	1
3	-1	-1	-1	1	-1	1	0	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1
3	-1	0	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0	-1
3	0	-1	1	0	1	1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1
3	0	-1	1	0	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1	1	-1
3	0	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	0
3	0	1	-1	0	1	0	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1
3	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	1	0	1	-1	1	1
3	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	-1	-1
3	1	1	-1	1	-1	0	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
3	1	0	0	1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1	-1	1
3	0	0	-1	-1	0	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1
3	-1	1	1	0	1	1	1	1	-1	1	1	0	1	-1
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	-1	-1	0	0	1	-1	0	1	1	1	-1	1	1	1
3	0	1	0	0	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	0	1
3	1	0	0	-1	0	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1
4	-1	1	-1	0	1	0	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1
4	0	-1	0	-1	-1	1	1	0	1	-1	-1	1	1	-1
4	0	-1	1	1	-1	1	0	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1
4	0	1	0	-1	0	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1
4	-1	0	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	0
4	1	1	0	0	1	1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1
4	0	0	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	0	1
4	0	1	0	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	0
4	1	0	-1	-1	-1	1	-1	1	1	0	1	-1	1	1
4	1	1	1	0	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0	-1
4	1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1	1	-1
4	1	-1	1	-1	1	-1	0	1	1	1	-1	1	1	1
4	-1	-1	1	0	-1	-1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1
4	-1	-1	-1	0	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	0	-1	1
4	0	-1	0	0	-1	0	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
4	1	1	0	1	0	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1
4	0	0	0	1	1	1	1	1	0	-1	-1	-1	-1	1
4	-1	0	1	-1	1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	-1	-1
4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	-1	0	1	-1	1	-1	-1	0	-1	1	1	-1	-1	1
4	0	0	-1	0	1	1	1	1	-1	1	1	0	1	-1