



**EFICIÊNCIA DE DELINEAMENTOS FATORIAIS COM DOIS  
FATORES DE NÍVEIS QUALITATIVOS EM BLOCOS INCOMPLETOS**

**FLÁVIO BITTENCOURT**

**2002**

**FLÁVIO BITTENCOURT**

**EFICIÊNCIA DE DELINEAMENTOS FATORIAIS COM DOIS  
FATORES DE NÍVEIS QUALITATIVOS EM BLOCOS INCOMPLETOS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do Curso de Mestrado em Agronomia, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de “Mestre”.

Orientador

Prof. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho

LAVRAS  
MINAS GERAIS – BRASIL

2002

**Ficha Catalográfica Preparada pela Divisão de Processos Técnicos da  
Biblioteca Central da UFLA**

**Bittencourt, Flávio**

Eficiência de delineamentos fatoriais com dois fatores de níveis qualitativos em blocos incompletos / Flávio Bittencourt. -- Lavras : UFLA, 2002.  
85 p. : il.

• Orientador: ~~Júlio Silveiro de Sousa~~ Bueno Filho.  
Dissertação (Mestrado) – UFLA.  
Bibliografia.

1. Delineamento A-ótimos. 2. Blocos Incompletos. 3. Ensaios fatoriais. 4. Algoritmo de intercâmbio. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD-519.56

**FLÁVIO BITTENCOURT**

**EFICIÊNCIA DE DELINEAMENTOS FATORIAIS COM DOIS  
FATORES DE NÍVEIS QUALITATIVOS EM BLOCOS INCOMPLETOS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do Curso de Mestrado em Agronomia, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de “Mestre”.

APROVADA em 27 de fevereiro de 2002

Prof. Antônio Carlos de Oliveira

EMBRAPA-CNPMS

Prof. Lucas Monteiro Chaves

UFLA

Prof. Ruben Delly Veiga

UFLA



Prof. Júlio Silvio de Sousa Bueno Filho

UFLA

(Orientador)

LAVRAS  
MINAS GERAIS – BRASIL  
2002

Aos meus pais, meus irmãos, cunhados e sobrinhos, à Fabiana (minha noiva),

**DEDICO**

## **Agradecimentos**

A Deus, por tudo...

Aos professores Márcio Ribeiro do Vale (UFLA) e Olavo Kanesky (UNIPAC-UBÁ) e ao Manoel Tadeu Teixeira, por acreditarem e confiarem em mim.

À Escola Agrotécnica Federal de Rio Pomba, especialmente ao diretor o professor Marcos Pascoalino, pois, sem sua ajuda, não seria possível continuar meus estudos.

À Universidade Federal de Lavras (UFLA), pela oportunidade de fazer o curso de mestrado.

Ao CNPq, pela bolsa de estudo.

À coordenação do curso Estatística e Experimentação Agropecuária, professor Joel Augusto Muniz.

A todos os professores e funcionários do Departamento de Ciências Exatas (DEX) e ao professor Antônio Carlos de Oliveira (EMBRAPA-Sete Lagoas) que muito contribuíram para minha formação.

Aos meus colegas de curso, especialmente ao José Marcelo (Pokemon), Paulo José (pjpe), Denismar e Ivana.

Aos meus colegas de trabalho da Escola Agrotécnica Federal de Rio Pomba, Chiquinho, Daniel, Geraldo Feio, Franciano e Ronald, e aos professores José Renato e Cachico e a Rosa, pelas caronas.

Ao professor Júlio, pela orientação, pela paciência e por compreender minhas limitações e deficiências.

Ao Chico Luiz, a Dona Nazaré e ao Ramon, pela hospedagem gratuita.

À Carola e à Vó Marina.

Aos novos colegas de curso.

A todos que, direta ou indiretamente, ajudaram-me e incentivaram-me.

## SUMÁRIO

RESUMO.....	i
ABSTRACT.....	ii
1 INTRODUÇÃO.....	1
2 REFERENCIAL TEÓRICO.....	3
2.1 Blocagem.....	3
2.1.1 Delineamentos em blocos incompletos.....	5
2.2 Experimentos em estrutura fatorial.....	9
2.3 Dialelos parciais como exemplos de ensaios fatoriais.....	11
2.4 Eficiência dos delineamentos e critérios de optimalidade.....	12
2.5 O algoritmo.....	16
3 METODOLOGIA.....	18
3.1 Situações experimentais.....	18
3.2 O modelo.....	19
3.3 Critério de optimalidade.....	21
3.4 Discussão dos delineamentos encontrados.....	22
3.5 Planos de látices que serão utilizados para comparações posteriormente.....	23
3.6 Exemplo da análise de variância.....	26
3.7 Comparações dos delineamentos obtidos.....	27
3.8 Busca do ótimo global.....	28
3.9 O algoritmo.....	33
3.10 Passos do algoritmo.....	34
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	37
4.1 Delineamentos otimizados obtidos pelo algoritmo de busca...	38
4.2. Exemplo de análise da variância.....	60

4.3 Cálculo do valor do critério de optimalidade (variância média das estimativas).....	62
4.4 Eficiências relativas.....	64
4.5 Eficiência dos delineamentos construídos a partir de planos básicos de látices, comparados a $D(3 \times 3, 6, 3)$ , $D(5 \times 5, 20, 5)$ , $D(3 \times 4, 10, 4)$ , e $D(4 \times 5, 10, 4)$ , otimizados .....	67
4.6 Considerações gerais sobre os delineamentos otimizados.....	73
5 CONCLUSÕES.....	75
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	76
7 APÊNDICES.....	79



## RESUMO

BITTENCOURT, Flávio. **Eficiência de delineamentos fatoriais com dois fatores de níveis qualitativos em blocos incompletos**. 2002. 85 p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação agropecuária) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.\*

O objetivo deste trabalho foi a implementação de um algoritmo de simples troca, utilizando o critério da A-optimalidade, para obtenção de delineamentos ótimos ou quase ótimos para estruturas de tratamentos em fatorial, com dois fatores de níveis qualitativos. Foram estudadas situações em que se desejava um plano ótimo para estimar, ora efeitos principais, ora efeitos principais e interações. Os planos experimentais obtidos para cada situação foram comparados. Calculou-se a perda de eficiência em se utilizar planos ótimos para o modelo sem interação quando se queria estimar também os efeitos de interação, e vice-versa. Adicionalmente, compararam-se alguns delineamentos encontrados com os delineamentos construídos a partir de planos básicos de látices quadrados e retangulares. Os planos encontrados pelo algoritmo foram sempre A-ótimos para estes casos. A situação mais robusta de planejamento, em geral, foi a de planejar para a ausência de interação. O algoritmo não encontrou alguns delineamentos *resolvable* (por exemplo, para 5x5 tratamentos em 20 blocos de tamanho 5, no modelo sem interação). Não obstante, os delineamentos encontrados foram também A-ótimos nestes casos. Na maioria das situações estudadas, o algoritmo levou a delineamentos ótimos ou quase-ótimos, sendo uma abordagem promissora para a construção de delineamentos fatoriais em blocos incompletos.

---

\* Comitê Orientador: Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho - UFLA, Daniel Furtado Ferreira - UFLA.

## ABSTRACT

BITTENCOURT, Flávio. **Efficiency of factorial designs with two factors of qualitative levels in incomplete blocks.** 2002. 85 p. Dissertation (Mater Degrae in Statistics and Agricultural Experimentation)\*

This work aims to implement a single swap algorithm using the A-optimality criterion to find optimal or near optimal designs to factorial experiments with two factors of qualitative levels. Experimental situations were studied in which optimal designs for models with the absence and the presence of interactions were searched. The resulting designs were compared. The efficiency loss for using optimal designs in the absence of interaction to estimate a model with interaction was calculated, and vice-versa. Some resulting designs were also compared to designs built from the basic orthogonal plans of square lattices. The more robust situation was in general to plan to the presence of interactions. Some resulting designs were also compared to designs constructed from the basic orthogonal plans of square and rectangular lattices. Designs resulting from the search algorithm were always A-optimal in this situation. The more robust situation was, in general, to plan for the absence of interactions. The algorithm could not find some of the resolvable designs (e.g. 5x5 treatments in 20 blocks of size 5 for the model without interaction). If though, the designs resulting from the search were also A-optimum. In most of the situations the algorithm leads to optimal or near-optimal designs, showing that this is a very promising approach to design incomplete block factorial experiments.

---

\* Guidance Committee: Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho - UFLA, Daniel Furtado Ferreira - UFLA.

# 1 INTRODUÇÃO

Os experimentos com estrutura fatorial facilitam o estudo dos níveis de um fator combinados aos de outro fator, informando se há influência de um sobre o outro e vice-versa. Desse modo, permitem testar as diferentes combinações dos fatores nos diferentes níveis, conduzindo às estimativas de interesse sob a forma de efeitos principais e interação.

Este tipo de ensaio é bastante comum na experimentação prática e o número de tratamentos aumenta rapidamente com o aumento do número de níveis dos fatores de interesse.

Muitas vezes, não é possível alocar todos os tratamentos em um delineamento em blocos completos, pois, em geral, é difícil encontrar áreas experimentais que sejam uniformes em toda sua extensão. Com isso, o delineamento em blocos completos perde sua eficiência, visto que a heterogeneidade dentro do bloco tende a aumentar o erro experimental, dificultando a obtenção de estimativas precisas.

O emprego de blocos menores e o uso do delineamento em blocos incompletos são, neste caso, alternativas adequadas, visto que facilitariam encontrar blocos mais homogêneos. No entanto, leva a um novo problema de delineamento: quais tratamentos alocar em cada um dos blocos.

Nos delineamentos em blocos incompletos, diferentes planos de alocação dos tratamentos são possíveis, No entanto, algumas alocações são mais eficientes do ponto de vista estatístico.

As eficiências destes delineamentos podem ser mensuradas por meio de diferentes critérios matemáticos de optimalidade. Tais critérios implementados em algoritmos de busca podem facilitar o planejamento de planos experimentais ótimos.

No presente trabalho, foi implementado um algoritmo de simples troca, utilizando um critério de optimalidade que minimiza a variância média das estimativas de interesse do modelo fatorial.

O objetivo principal foi a obtenção de delineamentos ótimos para ensaios com estrutura fatorial (dois fatores de níveis qualitativos) em situações experimentais em que o interesse era estimar apenas os efeitos principais do modelo, ou, alternativamente, em outras situações em que o interesse residia tanto nos efeitos principais quanto nas interações. Foram, então, estudadas as características dos planos experimentais obtidos com tais delineamentos.

## 2 REFERENCIAL TEÓRICO

### 2.1 Blocagem

A blocagem é um princípio básico de experimentação introduzido desde a década de 1920 por R. A. Fisher nos ensaios de campo da estação experimental de Rothamstead. John (1971) destaca duas práticas que têm a finalidade de aumentar a precisão do experimento. A primeira consiste em amostrar mais pontos, o que acarreta um aumento de recursos. A segunda, melhorar de alguma forma o delineamento por blocagem.

Segundo Hinkelmann & Kempthorne (1994), a blocagem é feita particionando-se a área experimental em subconjuntos (blocos) de forma a promover uma restrição na aleatorização. O fato de os efeitos de blocos serem tão homogêneos o quanto possível faz com que a variação entre as unidades experimentais do mesmo bloco possa ser minimizada. Isto irá contribuir para uma análise mais acurada, uma vez que o erro experimental será medido em cada bloco e então ajustado ao experimento completo (erro intrablocos).

Uma forma usual de blocagem é feita “em blocos próprios”, em que todos os blocos têm igual tamanho ( $k$  unidades experimentais por bloco) (Raghavarao, 1971).

Considerando  $v$  como número de tratamentos do delineamento e  $k$  o número de unidades experimentais por bloco, se  $k=v$  diz-se que o delineamento é em blocos completos; se  $k>v$ , o delineamento é dito ser em blocos estendidos; se  $k<v$ , o delineamento é em blocos incompletos (Bailey, 1999). A segunda situação é bastante particular (Mead & Curnow, 1983), mas, os delineamentos em blocos incompletos têm uma gama muito vasta de aplicações práticas.

Pode-se representar um delineamento em blocos pelo seguinte modelo matemático (John, 1980):

$$y_{ij} = \mu + b_j + t_i + e_{ij}$$

em que:

$\mu$  é uma constante associada a todas observações;

$b_j$  é o efeito do bloco  $j$  ( $j = 1, 2, \dots, J$ );

$t_i$  é o efeito do tratamento  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, I$ );

$e_{ij}$  é o erro experimental associado a  $y_{ij}$ , considerado aleatório com distribuição normal de média zero e variância  $\sigma^2$ .

Ou, ainda, pela forma matricial:

$$\underline{Y} = \underline{\mu}\underline{1} + \underline{X}_b + \underline{Z}_t + \underline{e}$$

em que:

$\underline{Y}$  é o vetor de observações;

$\underline{\mu}\underline{1}$  é o vetor de 1's;

$\underline{X}_b$  é a matriz de delineamento referente a blocos;

$\underline{Z}_t$  é a matriz de delineamento referente aos tratamentos;

$\underline{e}$  é o vetor de erros, considerado aleatório sendo  $\text{NID}(\underline{0}, \mathbf{I}\sigma^2)$ .

Embora não existam diferenças conceituais no processo de obtenção de estimativas quando o delineamento é em blocos completos ou incompletos, no delineamento em blocos completos  $t_i$  e  $b_j$  são ortogonais. Isso leva a propriedades desejáveis de interpretação (John, 1980).

Mead (1990) ressalta que, por este delineamento possuir estrutura ortogonal, ele é fácil de analisar e interpretar. Seus efeitos ou classificações ortogonais podem ser calculados independentemente um do outro, levando a

uma simplicidade na apresentação e interpretação dos resultados.

Segundo Mead (1990), há situações em que o delineamento em blocos completos é mal empregado, devido à inadequada definição do conceito de blocagem, ou seja, dificuldade em identificar padrões de variação entre as unidades experimentais. Neste caso, recomenda-se que busque-se a eficiência e não a ortogonalidade como característica mais desejável em um delineamento. A eficiência diz respeito à precisão das estimativas de interesse resultantes da aplicação de um delineamento.

O autor ainda ressalta que o planejamento de ensaios não ortogonais, como os delineamentos em blocos incompletos, é de extrema importância, especialmente com o barateamento dos custos computacionais. Assim gera delineamentos mais eficientes para uma mesma quantidade de recursos experimentais.

### **2.1.1 Delineamentos em blocos incompletos**

Delineamentos em blocos incompletos são delineamentos em que o número de tratamentos é maior do que o número de unidades experimentais por bloco ( $v > k$ ). Neste delineamento, o  $i$ -ésimo tratamento ( $i=1, 2, \dots, v$ ) aparece em  $r$  unidades experimentais, isto é, têm-se  $r$  repetições deste tratamento; o  $j$ -ésimo bloco contém  $k$  unidades experimentais das quais  $n_{ij}$  recebem o  $i$ -ésimo tratamento (John, 1980). Neste caso,  $n_{ij}$  é uma variável indicadora da presença de um tratamento num bloco.

Neste trabalho utilizaram-se apenas os delineamentos em blocos incompletos próprios e que são igualmente repetidos ( $r$  e  $k$  constantes, respectivamente, para todos os tratamentos e blocos de um mesmo plano experimental).

O delineamento em blocos incompletos balanceados foi desenvolvido por Yates (1936), citado por John (1971). Neste delineamento, cada bloco contém  $k$  diferentes tratamentos, cada tratamento ocorre em  $r$  blocos e quaisquer pares de tratamentos ocorrem juntos em  $\lambda$  blocos. Observa-se, então, que:

$$rv = bk = n;$$
$$\lambda(v-1) = r(k-1).$$

Bose & Nair (1939), citados por John (1971), desenvolveram uma classe de delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados, para situações em que não é possível montar um delineamento balanceado.

Embora não haja um conceito unânime para classificar um delineamento como parcialmente balanceado, pode-se dizer que estes possuem algumas destas propriedades (Cochran & Cox, 1957):

- cada bloco contém  $k$  unidades experimentais, as quais contêm diferentes tratamentos (é de blocagem própria);
- cada tratamento ocorre  $r$  vezes no experimento (é igualmente repetido);
- um par de tratamentos ocorre junto em  $\lambda_i$  blocos ( $i=1, 2, \dots$ );
- para o caso de haver apenas  $\lambda_1=1$  e  $\lambda_2=0$ , os pares de tratamentos que ocorrem juntos num mesmo bloco são chamados de primeiros associados e pares que não ocorrem em nenhum bloco são chamados de segundos associados;
- para outros  $\lambda_i$ , como por exemplo,  $\lambda_1=2$ ,  $\lambda_2=1$  e  $\lambda_3=0$ , tem-se respectivamente, primeiros, segundos e terceiros associados, e assim por diante.

Em especial, se um delineamento possui apenas dois valores para  $\lambda$ , quais sejam:  $\lambda_1 = \lambda$  e  $\lambda_2 = \lambda + 1$ , diz-se que o delineamento é grafo-regular (ou que gera um grafo regular) (Chang, 1997).

Dadas as propriedades acima, verifica-se que:

(i)  $rv = bk$ ;



$$(ii) \sum_i n_i \lambda_i = r(k-1);$$

$$(iii) \sum_i n_i = v-1, \text{ e também mostra-se que } \sum_k p_{jk}^i = n_j, \text{ se } i \neq j \text{ e}$$

$$\sum_k p_{jk}^i = n_j - 1, \text{ se } i = j.$$

Uma definição um pouco mais precisa refere-se a delineamentos em grafos regulares. Segundo Chang (1997), delineamentos de blocagem própria e igualmente repetidos estarão na classe dos grafos regulares se apresentarem apenas duas classes de associados, respectivamente com  $\lambda_1 = \lambda$  e  $\lambda_2 = \lambda + 1$ .

Esta classe de delineamentos envolve a maior parte dos blocos incompletos parcialmente balanceados de interesse prático, como os látices simples e triplos, por exemplo.

Quanto à eficiência da blocagem, se as unidades experimentais nos blocos são pouco ou não homogêneas, associa-se grande variância ao erro intrablocos. Dessa forma, blocos menores devem levar a erros menores e maior precisão, pois é mais provável que se obtenham parcelas mais homogêneas (Hinkelmann & Kempthorne, 1994).

Bailey (1999) reporta que as duas principais propriedades dos delineamentos em blocos incompletos são o balanceamento e a solubilidade (*resolvability* – propriedade de ser agrupado em repetições completas). Em um delineamento *resolvable*,  $r$  é um múltiplo do número de superblocos (repetições).

As repetições completas (superblocos) podem ou não assumir caráter de controle local, constituindo nova fonte de variação.

Considerando o modelo estatístico para os delineamentos em blocos (já citado),

$$y_{ij} = \mu + b_j + t_i + e_{ij},$$

as estimativas dos parâmetros do modelo pelo método dos quadrados mínimos,

para o delineamento em blocos completos e para o delineamento em blocos incompletos, podem evidenciar diferenças entre os delineamentos quanto à ortogonalidade.

**TABELA 2.1** Quadro comparativo entre os delineamentos em blocos incompletos e os delineamentos em blocos incompletos.

Blocos completos	Blocos incompletos
$G = \sum_i^I \sum_j^J y_{ij} = IJ\hat{\mu} + J\sum_i^I \hat{t}_i + I\sum_j^J \hat{b}_j$	$G = \sum_i^I \sum_j^J y_{ij} = bk\hat{\mu} + r\sum_i^I \hat{t}_i + k\sum_j^J \hat{b}_j$
$T_i = \sum_j^J y_{ij} = J\hat{\mu} + J\hat{t}_i + \sum_j^J \hat{b}_j$	$T_i = \sum_j^J y_{ij} = r\hat{\mu} + r\hat{t}_i + \sum_j^J n_{ij}\hat{b}_j$
$B_j = \sum_i^I y_{ij} = I\hat{\mu} + \sum_i^I \hat{t}_i + I\hat{b}_j$	$B_j = \sum_i^I y_{ij} = k\hat{\mu} + \sum_i^I n_{ij}\hat{t}_i + k\hat{b}_j$

Nas equações acima têm-se:

- $G$  como o total geral de todas as observações;
- $T_i$  como o total das observações do  $i$ -ésimo tratamento;
- $B_j$  como o total para o  $j$ -ésimo bloco
- $n_{ij}$  é um indicador para identificar se a unidade experimental  $j$  recebeu o  $i$ -ésimo tratamento ( $n_{ij} = 0$  ou  $1$ );
- $\hat{\mu}$  é a estimativa da constante associada ao modelo;
- $\hat{t}_i$  é a estimativa dos efeitos de tratamentos;
- $\hat{b}_j$  é a estimativa dos efeitos de blocos.

Quanto à ortogonalidade, as diferenças são visíveis nas equações para os totais de blocos ( $B_j$ ) e de tratamentos ( $T_i$ ). Nestas equações, para o delineamento em blocos completos, os efeitos de tratamentos são estimados sem depender dos efeitos de blocos e vice-versa. Já no delineamento em blocos incompletos, o

total do tratamento  $i$  depende do bloco  $j$  em que está alocado. A recíproca também é verdadeira. Assim sendo, os delineamentos em blocos incompletos são não-ortogonais (Mead, 1990).

## **2.2 Experimentos em estrutura fatorial**

Um experimento em estrutura fatorial consiste na combinação dos diferentes níveis de dois ou mais fatores. As combinações dos diferentes níveis de cada fator formam os tratamentos do experimento (Cochran & Cox, 1957; Cox, 1958).

Suponham-se os fatores A, B, em que cada fator tem número de níveis diferentes. O fator A refere-se a diferentes inseticidas, cujos níveis são  $a_i$  ( $i=1, 2, 3, \dots, a$ ); o fator B refere-se a tipos de aplicações, com níveis manual e mecânico. Nesse caso, o experimento possui estrutura fatorial com níveis dos fatores A e B qualitativos.

Segundo Cox (1958), os fatores qualitativos são aqueles em que não há nenhuma ordem natural, ou seja, os níveis são de interesse intrínseco (em geral, nominais). Por exemplo, diferentes terapias para uma doença (homeopatia ou alopatria), técnicas diferentes de poda, tipos diferentes (qualidades) de lã, grupos diferentes de assuntos em uma experiência de psicologia, entre outros.

Os fatores quantitativos diferem dos qualitativos por possuírem valores bem definidos de alguma quantidade numérica para seus níveis. Alguns exemplos desses tipos de fatores são: diferentes temperaturas de um ensaio, quantidade diferentes de fertilizantes em um campo agrícola, ou, ainda, em alguns casos, ordenamentos.

Os experimentos com estrutura fatorial são usados praticamente em todas as áreas de pesquisa. São de grande valor em trabalhos exploratórios

quando se sabe pouco sobre combinações ótimas dos fatores, ou sequer tem-se conhecimento de quais são os fatores mais importantes (Steel & Torrie, 1985).

Raghavarao (1971) recomenda testar as diversas combinações dos fatores nos vários níveis quando diferentes fatores influenciam uma característica a ser estudada. Tal teste consiste em uma partição das somas de quadrados em contrastes ortogonais, as quais possuem graus de liberdade simples correspondentes aos efeitos principais e interações de todos os tratamentos.

As vantagens do experimento em estrutura fatorial, comparado a outros, em que os fatores são testados separadamente, são a economia e a possibilidade de investigar interações entre diferentes fatores. No experimento fatorial há possibilidades de estimar até que ponto o efeito de um fator influencia nos diferentes níveis de outros fatores (Cox, 1958).

Hinkelmann & Kempthorne (1994) destacam que o experimento em estrutura fatorial permite observar vários fatores simultaneamente e estimar simultaneamente os vários efeitos principais e interações, facilitando tirar conclusões mais amplas sobre o experimento.

Além disso, Mead & Curnow (1983) citam que, sem a estrutura fatorial num experimento, torna-se difícil investigar interações. Além do mais, a interpretação dos efeitos dos fatores podem ser mal estimados, quando se tem conhecimento de que há influência de outro fator. Quando as interações são pequenas ou não existentes, as estimativas dos efeitos principais são, em geral, de mais aplicabilidade, pois os efeitos de algum fator são os mesmos para quaisquer níveis dos outros fatores.

Uma potencial desvantagem dos experimentos fatoriais é que o número de tratamentos aumenta rapidamente com o aumento dos números de níveis dos fatores individuais em estudo. Com isso, às vezes, o delineamento em blocos completos com esse grande número de tratamentos perde sua eficiência devido à

dificuldade de encontrar blocos homogêneos para alocar todos os tratamentos. Dessa forma, é necessária a alocação desses tratamentos em blocos incompletos, o que leva a problemas adicionais de planejamento, pelo surgimento de confundimentos<sup>1</sup> parciais entre efeitos de blocos e efeitos de fatores principais ou de interações (Kempthorne, 1952).

Diz-se que dois fatores estão confundidos quando não é possível isolar o efeito de cada um deles separadamente. Em geral, num delineamento em estrutura fatorial instalado em blocos incompletos, os efeitos de algum tratamento podem ou poderão ser totalmente ou parcialmente confundidos com efeitos de blocos. Quando isto acontece, as somas de quadrados desses efeitos são não-ortogonais. Alguns casos de confundimento são empregados por razões práticas, como nos ensaios em parcelas subdivididas. Mas, sempre que possível evitam-se tais delineamentos, por serem menos eficientes (Cochran & Cox, 1957).

### **2.3 Dialelos parciais como exemplos de ensaios fatoriais**

Uma importante aplicação do fatorial com dois fatores de níveis qualitativos em delineamentos em blocos incompletos é o ensaio dialélico parcial, muito comum no melhoramento de plantas.

Os dialelos parciais envolvem dois grupos de progenitores e seus respectivos cruzamentos. Este modelo é igual ao modelo fatorial (dois fatores com níveis qualitativos) proposto por Comstock & Robinson (1948), citados por Cruz & Regazzi (1992). Por meio deste modelo, é possível maximizar as informações sobre os grupos estudados, com o uso de um menor número de

---

<sup>1</sup> Tradução de *confounding*, adotada para definir a presença de efeitos de blocos na esperança dos totais de tratamentos e, ou, níveis de efeitos principais do modelo fatorial.

cruzamentos em relação aos dialelos completos.

A estrutura dos modelos de análise mais comumente utilizados envolve os dois efeitos principais e a interação. As observações são feitas na descendência obtida pelos cruzamentos dos genitores. Os efeitos principais são chamados de capacidade geral de combinação (CGC), enquanto as interações são chamadas de capacidade específica de combinação (CEC) (John, 1971).

Segundo Kempthorne & Curnow (1961), algumas vantagens ao usar um dialelo parcial podem ser destacadas, tais como: um grande número de pais pode ser avaliado para capacidade geral de combinação e a perda em precisão é compensada pelo maior ganho genético obtido de uma seleção mais intensa, que pode ser aplicada aos pais; a seleção pode ser feita entre os cruzamentos de uma amplitude maior de pais; a variância devido à capacidade geral de combinação da população de onde os pais são encontrados pode ser estimada com maior precisão.

Grosso modo, estas indicações podem ser generalizadas para os experimentos fatoriais com dois fatores de níveis qualitativos.

## **2.4 Eficiência dos delineamentos e critérios de optimalidade**

Ao observar a alocação dos tratamentos às unidades experimentais dos blocos, percebe-se que vários arranjos são possíveis. Segundo Hinkelmann & Kempthorne (1994), estes possíveis arranjos (alocações dos tratamentos aos blocos) podem levar a diferentes eficiências ao delineamento, de tal forma que poderão existir delineamentos melhores do que outros.

Cochran & Cox (1957) apresentam planos eficientes para diferentes delineamentos em blocos incompletos.

Em geral busca-se aumentar a eficiência dos delineamentos colocando no mesmo bloco tratamentos que serão comparados. Assim, reduz-se a variância das comparações (promovendo comparações intrablocos, sempre que possível).

Algumas formas usuais de quantificar a eficiência dos delineamentos são os critérios de optimalidade. Os critérios mais empregados são a A, D e E-optimalidade (Silva, 2000), também chamados critérios alfabéticos de optimalidade (Chaloner & Verdinelli, 1995).

Uma descrição destes critérios, associados à variância das estimativas dos parâmetros do modelo em estudo, pode ser resumida em:

**A-optimalidade** - minimiza o traço da matriz de variância-covariância dos parâmetros estimados, ou, equivalentemente, o total ou média das variâncias dos parâmetros estimados. O critério é equivalente a minimizar a soma ou média dos autovalores da matriz de variância-covariância.

**D-optimalidade** – o volume da região de confiança multidimensional para um conjunto de parâmetros pode ser encontrado para a matriz de variância-covariância dos parâmetros estimados, por meio do determinante desta matriz. Um delineamento D-ótimo minimiza o determinante da matriz de variância-covariância dos parâmetros inicialmente estimados e é referido como a variância generalizada.

**E-Optimalidade** - o delineamento que minimiza o maior dos autovalores da matriz de variância-covariância dos parâmetros estimados é um delineamento E-ótimo. Isto é equivalente a minimizar a variância do contraste menos precisamente estimado. Ou seja, os critérios de optimalidade baseiam-se em funções da matriz de informação e de sua inversa (a matriz de covariância do delineamento). O delineamento ótimo é aquele que maximiza (ou minimiza) uma função monótona dessa matriz.

Desde Kiefer (1959) procura-se encontrar delineamentos utilizando estes critérios e Fedorov (1972) propôs um algoritmo de busca de trocas que

corresponde, grosso modo, ao algoritmo de otimização *steepest descent*. Tal algoritmo e diversas de suas adaptações têm possibilitado a construção de delineamentos otimizados para blocos incompletos (Trinca & Gilmour, 2000).

É interessante citar Mardia et al. (1995), Manly (1986) e Jonhson & Wichern (1998), que tratam o determinante e o traço da matriz de variância-covariância como variâncias generalizadas. Estes autores relatam que quando se tem necessidade de representar uma matriz por meio de um único valor numérico utilizam-se essas funções ou operadores. O determinante da matriz de variância-covariância é proporcional ao quadrado do volume gerado pelos  $p$  vetores residuais. A este valor os mesmos autores denominam de variância amostral generalizada.

Ao desejar mais informação do que um simples valor, como é o caso do determinante, utilizam-se os autovalores da matriz de variância-covariância. Os autovalores evidenciam uma informação sobre a variabilidade em todas as direções na representação do espaço  $p$ -dimensional dos dados.

Uma outra variância generalizada é a soma dos autovalores, que é denominada de variância amostral total. Geometricamente, é a soma dos comprimentos ao quadrado dos vetores residuais, dividida por  $n-1$ . Essas variâncias são de grande utilidade na análise multivariada dos componentes principais.

Em John (1980), os autovalores ( $\psi_i$ ) da matriz de informação são chamados de fatores de eficiência. Os critérios de optimalidade A, D e E, citados pelo autor, são obtidos por meio dos fatores de eficiência ( $\psi_i$ ). A A-optimal é obtida se  $\sum \psi_i^{-1}$  é minimizada. Isto corresponde à eficiência intrabloco, ou seja, a média harmônica dos fatores de eficiência ( $\psi_i$ ). O D-optimal é obtido quando  $\prod \psi_i$  ( $\psi_i \neq 0$ ) é minimizado, que significa minimizar a variância generalizada



para todas as combinações lineares dos efeitos de tratamentos. O E-optimal é obtido quando (mim  $\psi_i$ ) é maximizado.

Em Charloner & Verdinelli (1995), embora os critérios de optimalidade A, D e E recebam um enfoque bayesiano, eles são os mesmos abordados por Atkinson (1996). A A-optimalidade está associada à variância média das estimativas de efeitos de tratamentos, sendo obtida minimizando-se a soma dos autovalores (traço) da matriz de variância-covariância. D-optimalidade está relacionado à variância global das estimativas, sendo obtido por meio da maximização do produto dos autovalores (determinante) não nulos da matriz de variância-covariância. O E-optimalidade associa-se à maior precisão no contraste menos preciso, sendo obtido minimizando-se o maior autovalor da matriz variância-covariância.

Nos ensaios dialélicos também se empregam critérios de optimalidade. Chai & Mukerjee (1999) citam que vários autores já investigaram delineamentos ótimos para capacidade geral de combinação, pressupondo que o modelo não incluía nenhum parâmetro representando a capacidade específica de combinação. No entanto, afirmam que, na prática, não é sempre segura a validade desta suposição.

Os autores citados descrevem os critérios de optimalidade para ensaios dialelos completos instalados em blocos, embora a maior parte da discussão possa ser generalizada para os ensaios com modelos fatoriais (dialelos parciais). Citam também que os delineamentos triangulares conectados com ausência da capacidade específica de combinação são ótimos para capacidade geral de combinação. Segundo os autores, pode-se checar também que alguns delineamentos triangulares são ótimos, mesmo quando se quer estimar capacidade específica de combinação, exceto quando  $p=4$  ( $p$  é o número de linhagens). Os autores salientam que resultados gerais em optimalidade na

presença de capacidades específicas de combinação não são encontrados na teoria dos ensaios dialéticos.

## 2.5 O algoritmo

Muito da teoria dos delineamentos ótimos se construiu sobre a aplicação dos critérios de optimalidade associados a propriedades combinatórias e geométricas dos delineamentos (Bailey, 1999; Raghavarao, 1971). Desde a década de 1960, sugere-se outro campo de estudo, qual seja, o da busca direta por computador de delineamentos e da verificação de sua optimalidade (Mead, 1990). Os maiores passos na construção de algoritmos de busca eficientes, no entanto, vieram com os algoritmos de trocas, propostos por Fedorov (1972), dentre outros.

As principais aplicações práticas deste algoritmo podem ser consultadas em Cook & Nachtsheim (1980 e 1989) e Trinca & Gilmour (2000).

Neste trabalho foi utilizado um algoritmo derivado do algoritmo *steepest descent* que encontra pontos mínimos para uma dada função. Segundo Molchanov & Zuyev (2000), este algoritmo é o mais utilizado para solucionar problemas de otimização de delineamentos.

O algoritmo funciona da seguinte forma: dada uma função diferenciável (muitas vezes é difícil encontrar uma expressão analítica que minimiza esta função), o algoritmo chuta um ponto inicial qualquer ( $X_0$ ). Após calcular o valor deste ponto na função é, então, buscado outro ponto  $X_1$ , que também tem calculado o seu valor na função. Dessa forma, é feita uma comparação entre os valores respectivos de cada ponto. Caso o valor correspondente de  $X_0$  seja menor do que  $X_1$  o algoritmo conserva  $X_0$  e busca outro número. Caso contrário,

conserva-se  $X_1$ . Atribui-se o valor a  $X_1$  a  $X_0$  e assim sucessivamente, reiniciando todo o processo, até encontrar o ponto de mínimo.

O algoritmo utilizado neste trabalho, que consiste num caos particular do algoritmo *steeped descent*, é o algoritmo de simples troca de Fedorov.

Neste algoritmo se utilizou o critério da A-optimalidade, por ser o critério mais utilizado quando o objetivo é a estimação direta dos efeitos do modelo.

Usando-se tal critério pondera-se a estimação privilegiando os efeitos estimados com menor precisão, sem contudo cair no extremo de apenas se ater à combinação linear estimada com menor precisão (que no caso seria a E-optimalidade). Por outro lado, pode-se esperar que delineamentos com diferentes valores para A-optimalidade apresentem a mesma variância global das estimativas (mesma D-optimalidade) (Pukelsheim, 1993).

A revisão deste trabalho apontou para a conveniência de se estudar a optimalidade de delineamentos fatoriais em blocos incompletos, visando, principalmente, a construção de algoritmos de busca para este tipo de ensaio e o estudo das propriedades dos delineamentos resultantes. Tal estudo permite conclusões, generalizáveis para uma diversa gama de aplicações análogas, dentre as quais os dialelos parciais.

### 3 METODOLOGIA

Neste trabalho foi utilizado um algoritmo de busca, para encontrar os delineamentos otimizados para ensaios em estrutura fatorial com dois fatores de níveis qualitativos. O algoritmo foi desenvolvido para encontrar um delineamento otimizado para efeitos principais e interação, e outro otimizado para efeitos principais na ausência de interação. Os delineamentos foram otimizados de acordo com o critério de A-optimalidade (Kiefer, 1959; Chaloner e Verdinelli, 1995).

O algoritmo de busca foi então empregado, considerando-se as seguintes situações experimentais.

#### 3.1 Situações experimentais

As situações experimentais consideradas são definidas como  $D(v=n_A \times n_B, b, k, r)_i$ , em que  $v$  é o número de tratamentos, constituídos de combinações de níveis de A e B,  $n_A$  e  $n_B$ ;  $b$  é o número de blocos;  $k$  é o número de unidades experimentais por bloco;  $r$  é o número de repetições de cada tratamento e  $i$  refere à presença ou ausência de interações no modelo desejado ( $i=p$  ou  $i=a$ , respectivamente). O parâmetro  $\lambda$  não foi definido, sendo, portanto, observado após a otimização. Quando se usar a notação com apenas três parâmetros:  $D(v, b, k)$ , subentende-se que os  $v$  tratamentos são igualmente repetidos e que o modelo pode ou não conter interações.

Consideradas as definições acima, foram, então, objeto de estudo, as seguintes situações experimentais:

1-  $D(3 \times 3, 6, 3, 2)_i$ ;

2-  $D(3 \times 4, 6, 4, 2)_i$ ;

- 3-  $D(3 \times 4, 8, 3, 2)i$ ;
- 4-  $D(4 \times 5, 20, 3, 3)i$ ;
- 5-  $D(4 \times 5, 10, 4, 2)i$ ;
- 6-  $D(5 \times 5, 20, 5, 4)i$ ;
- 7-  $D(5 \times 5, 25, 4, 4)i$ ;
- 8-  $D(8 \times 8, 32, 10, 5)i$ ;
- 9-  $D(8 \times 8, 64, 5, 5)i$ .

Cada situação experimental foi submetida a um sistema de busca do plano de alocação ótima de tratamentos (combinação de dois fatores) aos blocos, considerando que o delineamento de controle local já estivesse realizado. Ou seja, já se conheciam o número de blocos e o número de unidades experimentais por bloco em um sistema de blocagem próprio (mesmo número de unidades experimentais por bloco). Para isso, construiu-se um programa de busca que adapta um algoritmo do tipo simples troca (Federov, 1972; Molchanov & Zuyev, 2000).

Os diversos candidatos ao ótimo são comparados entre si de acordo com o critério adotado. É escolhido como delineamento ótimo aquele que apresentar maior eficiência. No caso de freqüentes empates há maior indício de que o ótimo global fora encontrado, sendo que qualquer dos delineamentos de igual valor para o critério pode ser assumido como ótimo ou “quase-ótimo”.

### 3.2 O modelo

A representação do modelo em notação matricial pode ser dada por:

$$\underline{Y} = \underline{X}\underline{\theta} + \underline{\varepsilon} \quad (1)$$

em que:

- $\underline{Y}$  é o vetor de observações;
- $\mathbf{X}$  é a matriz de delineamento;
- $\underline{\theta}$  é o vetor de parâmetros, com:

$$\underline{\theta} = \underline{\theta}_1 = \begin{bmatrix} \mu \\ \underline{\gamma} \\ \underline{\alpha} \\ \underline{\beta} \\ \underline{\alpha\beta} \end{bmatrix} \text{ e } \underline{\theta} = \underline{\theta}_2 = \begin{bmatrix} \mu \\ \underline{\gamma} \\ \underline{\alpha} \\ \underline{\beta} \end{bmatrix};$$

- $\underline{\varepsilon}$  é o vetor de erros suposto NID  $(\underline{0}, \mathbf{I}\sigma^2)$ .

A solução do sistema linear (2) inconsistente é obtida pela solução das equações normais:

$$\underline{\theta}^0 = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^+ \mathbf{X}'\underline{Y} \quad (2)$$

sendo  $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^+$  a inversa de Moore-Penrose de  $(\mathbf{X}'\mathbf{X})$ .

Para aplicação do algoritmo adotado, a matriz de variância-covariância  $\Omega^+$  deve ser obtida. A definição de  $\Omega^+$  é dada em (3), destacando que como  $\sigma^2$  é uma constante, então pode-se escrever  $\Omega^+$  como sendo proporcional a  $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^+$ :

$$\Omega^+ \propto (\mathbf{X}'\mathbf{X})^+ \quad (3).$$

Considerando as seguintes partições da matriz do delineamento  $\mathbf{X}$ :

$$\mathbf{X} = (\mathbf{X}_b : \mathbf{Z}_A : \mathbf{Z}_B : \mathbf{Z}_{AB}).$$

em que:  $\mathbf{X}_b$  representa o espaço descrito pelas colunas referentes aos efeitos de blocos;  $\mathbf{Z}_A$ ,  $\mathbf{Z}_B$ ,  $\mathbf{Z}_{AB}$  têm significado análogo, respectivamente, para os efeitos dos fatores A, B e da interação AB.

Dessa forma,  $\mathbf{\Omega}^+$  pode ser escrita como:

$$\mathbf{\Omega}^+ \propto \begin{bmatrix} \mathbf{X}_b' \mathbf{X}_b & \mathbf{X}_b' \mathbf{Z}_A & \mathbf{X}_b' \mathbf{Z}_B & \mathbf{X}_b' \mathbf{Z}_{AB} \\ \mathbf{Z}_A' \mathbf{X}_b & \mathbf{Z}_A' \mathbf{Z}_A & \mathbf{Z}_A' \mathbf{Z}_B & \mathbf{Z}_A' \mathbf{Z}_{AB} \\ \mathbf{Z}_B' \mathbf{X}_b & \mathbf{Z}_B' \mathbf{Z}_A & \mathbf{Z}_B' \mathbf{Z}_B & \mathbf{Z}_B' \mathbf{Z}_{AB} \\ \mathbf{Z}_{AB}' \mathbf{X}_b & \mathbf{Z}_{AB}' \mathbf{Z}_A & \mathbf{Z}_{AB}' \mathbf{Z}_B & \mathbf{Z}_{AB}' \mathbf{Z}_{AB} \end{bmatrix}^+$$

Em que  $\mathbf{X}_b' \mathbf{X}_b$  é a submatriz de covariâncias referentes apenas aos efeitos de blocos;  $\mathbf{X}_b' \mathbf{Z}_A$ ,  $\mathbf{X}_b' \mathbf{Z}_B$ , e  $\mathbf{X}_b' \mathbf{Z}_{AB}$  são submatrizes referentes às covariâncias dos efeitos de blocos e os fatores A, B e AB, respectivamente;  $\mathbf{Z}_A' \mathbf{Z}_A$ ,  $\mathbf{Z}_B' \mathbf{Z}_B$  e  $\mathbf{Z}_{AB}' \mathbf{Z}_{AB}$ , são submatrizes referentes às covariâncias apenas dos efeitos A, B e interação AB, respectivamente.

Os critérios de optimalidade resumem-se, então, a funções da matriz  $\mathbf{\Omega}^+$ .

### 3.3 Critério de optimalidade

O critério adotado foi a A-optimalidade, dado pela média harmônica dos fatores de eficiência. A forma de cálculo da A-optimalidade empregada foi efetuada tomando a soma dos inversos dos fatores de eficiência ou, simplesmente, o traço da matriz de variância-covariância  $\mathbf{\Omega}^+$  (Chaloner & Verdinelli, 1995).

[REDACTED]

Dado que os delineamentos não diferem quanto aos blocos empregados, uma vez tomada a inversa da matriz  $(X'X)$ , a submatriz  $X_b'X_b$  referente aos blocos não é necessária para a discussão, em termos relativos. Utilizaram-se, neste caso, apenas as submatrizes referentes aos efeitos  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\alpha\beta$  do modelo,  $Z_A'Z_A$ ,  $Z_B'Z_B$ ,  $Z_{AB}'Z_{AB}$ , respectivamente.

O critério A, neste caso, seria o inverso do traço das matrizes (ou submatrizes) referentes aos efeitos de interesse. Utilizou-se o traço, no entanto, por ser proporcional à variância média das estimativas do modelo. Assim, buscou-se o delineamento que minimizasse o valor do critério, por minimizar a variância associada aos efeitos do modelo.

### 3.4 Discussão dos delineamentos encontrados

Para a discussão dos delineamentos encontrados, ora foi aplicado um modelo considerando todos os efeitos, ora foi aplicado um modelo em que se estimam apenas os efeitos principais (na ausência de interação).

A comparação entre eles foi feita mediante a comparação do critério obtido para o modelo completo de ambas otimizações. Compararam-se também os critérios tomando-se as partições referentes aos diferentes efeitos do modelo,

quais sejam,  $P_1 = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$  e  $P_2 = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \alpha\beta \end{bmatrix}$ .

Além disso, observaram-se características peculiares dos diferentes delineamentos, como o surgimento de confundimento. Também foram feitas



comparações entre os delineamentos ótimos encontrados versus delineamentos usualmente empregados, como os látices quadrados e retangulares.

Os delineamentos comparados aos látices quadrados e retangulares apresentados por Cochran & Cox (1957) foram:  $D(3 \times 3, 6, 3)$ ,  $D(5 \times 5, 20, 5)$ ,  $D(3 \times 4, 8, 3)$  e  $D(4 \times 5, 10, 4)$ .

Os planos apresentados por Cochran & Cox (1957) são delineamentos em blocos incompletos (DBI) *resolved*. No entanto, isto não impede que DBI *non-resolved* sejam mais eficientes pelo critério empregado, o qual poderá levar a soluções ótimas que são *non-resolved*. A comparação pode lançar luz sobre a utilidade de se buscar delineamentos com algoritmos de busca em situações mais gerais.

### 3.5 Planos de látices que serão utilizados para comparações posteriores

Os planos de látices apresentados a seguir foram obtidos em Cochran & Cox (1957) e, em cada bloco, os tratamentos originais foram substituídos por tratamentos em estrutura fatorial.

Para o látice  $3 \times 3$  ( $v=9$ ,  $b=12$ ,  $k=3$ ,  $\lambda=1$ ), os tratamentos de 1 a 9, como estão no plano básico original de Cochran & Cox (1957), foram convenientemente substituídos pelos tratamentos com estrutura fatorial  $3 \times 3$ . Assim, o tratamento 1 foi substituído por 11; o 2 substituído por 12 e assim seqüencialmente, até 9 ser substituído por 33. Dessa forma, o par de algarismos representado significa combinações dos fatores A e B de um delineamento em estrutura fatorial (o primeiro algarismo se refere ao nível  $i$  do fator A e o segundo algarismo ao nível  $j$  do fator B).

Após a adoção desta técnica, as seguintes repetições do látice  $3 \times 3$  poderão ser apresentadas:

Bloco	Repetição 1		
I	11	12	13
II	21	22	23
III	31	32	33

Bloco	Repetição 3		
I	11	22	33
II	31	12	23
III	21	32	13

Bloco	Repetição 2		
I	11	21	31
II	12	22	32
III	13	23	33

Bloco	Repetição 4		
I	11	32	23
II	21	12	33
III	31	22	13

Para o látice  $5 \times 5$  ( $v=25$ ,  $b=30$ ,  $k=5$ ,  $\lambda=1$ ), o mesmo processo foi repetido. Neste os tratamentos de 1 a 25 foram convenientemente substituídos por equivalentes tratamentos do ensaio fatorial  $5 \times 5$ . Dessa forma, o tratamento 1 foi substituído por 11; o 2 por 12; o 3 por 13 e assim por diante até 24 ser substituído por 54 e 25 por 55.

Dado o processo acima, chega-se às seguintes repetições do látice  $5 \times 5$ :

Bloco	Repetição 1				
I	11	12	13	14	15
II	21	22	23	24	25
III	31	32	33	34	35
IV	41	42	43	44	45
V	51	52	53	54	55

Bloco	Repetição 3				
I	11	22	33	44	55
II	51	12	23	34	45
III	41	52	13	24	35
IV	31	42	53	14	25
V	21	32	43	54	15

Bloco	Repetição 2				
I	11	21	31	41	51
II	12	22	32	42	52
III	13	23	33	43	53
IV	14	24	34	44	54
V	15	25	35	45	55

Bloco	Repetição 4				
I	11	32	53	24	45
II	41	12	33	54	25
III	21	42	13	34	55
IV	51	22	43	14	35
V	31	52	23	44	15

Bloco	Repetição 5					Bloco	Repetição 6				
I	11	42	23	54	35	I	11	52	43	34	25
II	31	12	43	24	55	II	21	12	53	44	35
III	51	32	13	44	25	III	31	22	13	54	45
IV	21	52	33	14	45	IV	41	32	23	14	55
V	41	22	53	34	15	V	51	42	33	24	15

Para o látice 3x4 ( $v=12$ ,  $b=12$ ,  $k=3$ ), apresentado por Cochran & Cox (1957), os tratamentos de 1 a 12, foram substituídos por equivalentes tratamentos do ensaio fatorial 3x4. Os tratamentos 1 foi substituído por 11, 2 por 12, sucessivamente até 12 ser substituído por 34.

Utilizando este processo chega-se às seguintes repetições:

Bloco	Repetição 1			Bloco	Repetição 2			Bloco	Repetição 3		
I	11	12	13	I	14	23	32	I	22	24	34
II	14	21	22	II	11	24	33	II	12	31	32
III	23	24	31	III	12	21	34	III	13	14	33
IV	32	33	34	IV	13	22	31	IV	11	21	23

O mesmo processo foi feito para o látice 4x5 ( $v=20$ ,  $b=15$ ,  $k=4$ ). Tendo os tratamentos de 1 a 20 foram substituídos por equivalentes tratamentos do ensaio fatorial 4x5 Dessa maneira, o tratamento 1 foi substituído por 11; o 2 por 12, ..., o 6 por 21, sucessivamente até que o tratamento 20 fosse substituído por 45.

Dessa forma foram obtidas as seguintes repetições para o látice em questão:

Bloco	Repetição 1				Bloco	Repetição 1				Bloco	Repetição 1			
I	11	12	13	14	I	15	24	33	42	I	23	31	35	43
II	15	21	22	23	II	11	25	34	43	II	12	24	41	45
III	24	25	31	32	III	12	21	35	44	III	14	22	34	42
IV	33	34	35	41	IV	13	22	31	45	IV	11	15	32	44
V	42	43	44	45	V	14	23	32	41	V	13	21	25	33

### 3.6 Exemplo da análise de variância

Para exemplificar, simulou-se um experimento para o  $D(3 \times 3, 6, 3)$  e, a seguir, foi calculada a análise de variância, utilizando-se as somas de quadrados tipo I da proc GLM do SAS (SAS, 1995). A análise preliminar dos tratamentos pode ser encontrada em John (1980, pág. 9). A partição das somas de quadrados (SQ) de tratamentos é feita de maneira seqüencial, conforme apresentado em Searle (1987).

O modelo matemático para a análise dos dados de um experimento com estrutura de tratamentos fatorial, instalado em blocos incompletos, foi assumido como sendo:

$$y_{ijk} = \mu + \gamma_k + \alpha_i + \beta_j + \alpha\beta_{ij} + e_{ijk}$$

em que:

- $y_{ijk}$  é a resposta do  $i$ -ésimo nível do fator A, combinado com o  $j$ -ésimo nível do fator B, instalado no  $k$ -ésimo bloco;
- $\mu$  é uma constante inerente a todas as observações;
- $\gamma_k$  é o efeito do  $k$ -ésimo bloco;
- $\alpha_i$  é o efeito do  $i$ -ésimo nível do fator A;
- $\beta_j$  é o efeito do  $j$ -ésimo nível do fator B;
- $\alpha\beta_{ij}$  é o efeito da interação do  $i$ -ésimo nível do fator A, com o  $j$ -ésimo nível do fator B;
- $e_{ijk}$  é o erro experimental associado, considerado normalmente distribuído com média 0 (zero) e variância  $\sigma^2$ .

### **3.7 Comparações dos delineamentos obtidos**

A partir dos delineamentos encontrados, calculou-se sua eficiência de acordo com o critério adotado no trabalho (A-optimalidade). Posteriormente, os delineamentos otimizados para efeitos principais e interação e os delineamentos ótimos para efeitos principais na ausência de interação (de mesmo número de blocos e de mesmo número de tratamentos) foram comparados. Tal comparação foi feita porque a escolha de um ou outro delineamento (otimizado para efeitos principais e interação ou só para efeitos principais) pode levar a delineamentos ótimos ou até a subótimos. Uma vez que se utiliza um delineamento ótimo para estimar ausência de interação, o mesmo é subótimo para estimar presença de interação e a recíproca também é verdadeira.

Com o intuito de fazer comparações, foram calculados valores parciais do critério para cada grupo de efeitos principais e de interação. A partir destes valores, calculou-se a eficiência de cada delineamento, seja otimizado para presença de interações, seja para ausência de interações.

Os cálculos da eficiência dos delineamentos foram feitos da seguinte maneira:

- os ótimos, encontrados pelo algoritmo de busca, para cada situação foram considerados como 100% eficientes;
- calculou-se, então, a eficiência dos delineamentos otimizados para presença de interação, caso utilizasse os mesmos para estimar ausência de interação, tal cálculo foi feito tomando-se a soma dos valores dos critérios dos efeitos principais (A+B) do delineamento otimizado para presença de interação e dividiu-se pela soma dos valores dos critérios (A+B) do delineamento otimizado para ausência de interação.
- posteriormente, calculou-se a eficiência dos delineamentos otimizados para ausência de interação, caso fossem os mesmos usados para estimar presença

de interação. Assim, tomou-se a soma de todos os valores dos critérios  $(A+B+AB)$  deste delineamento e dividiu-se pela soma  $(A+B+AB)$  do delineamento otimizado para presença de interação.

### **3.8 Busca do ótimo global**

Uma investigação adicional que se procedeu em alguns delineamentos foi a da matriz de concorrência que surgia em cada caso, podendo-se usar como inferência adicional de que foi encontrado o ótimo global, pois alguns delineamentos estão relacionados a grafos regulares. Os delineamentos grafos regulares possuem  $\lambda_1 = \lambda$  e  $\lambda_2 = \lambda+1$  (duas classes de associados) (Chang, 1997).

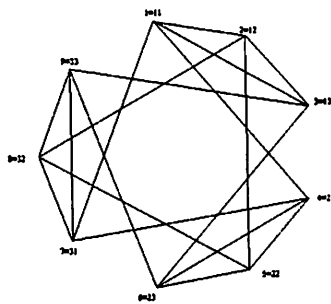
Ao obter a matriz de concorrência  $N'N$ , percebeu-se que, em algumas situações otimizadas o delineamento obtido pelo algoritmo é, provavelmente, o ótimo global.

Por exemplo, para o  $D(3 \times 3, 6, 3)_i$  o algoritmo encontrou o ótimo global, pois sua matriz de concorrência possui  $\lambda_1 = 0$  e  $\lambda_2 = 1$  para as interações (tratamentos) nos delineamentos otimizados  $D(3 \times 3, 6, 3)_p$  e  $D(3 \times 3, 6, 3)_a$ . As matrizes de concorrência e seus respectivos grafos para estes delineamentos estão apresentadas a seguir.

**Matriz de concorrência do  $D(3 \times 3, 6, 3)_p$ :**

$$NN' = \begin{bmatrix} 12 & 3 & 3 & 6 & 6 & 6 & 4 & 4 & 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 3 & 12 & 3 & 6 & 6 & 6 & 1 & 1 & 1 & 4 & 4 & 4 & 1 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 12 & 6 & 6 & 6 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 4 & 4 & 4 \\ 6 & 6 & 6 & 12 & 3 & 3 & 4 & 1 & 1 & 4 & 1 & 1 & 4 & 1 & 1 \\ 6 & 6 & 6 & 3 & 12 & 3 & 1 & 4 & 1 & 1 & 4 & 1 & 1 & 4 & 1 \\ 6 & 6 & 6 & 3 & 3 & 12 & 1 & 1 & 4 & 1 & 1 & 4 & 1 & 1 & 4 \\ 4 & 1 & 1 & 4 & 1 & 1 & 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 1 & 1 & 1 & 4 & 1 & 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 4 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 4 & 1 & 4 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 1 & 4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 1 & 1 & 4 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 4 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 1 & 4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 1 & 1 & 4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

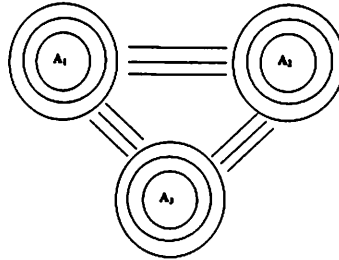
Na submatriz de tratamentos tem-se  $\lambda_1 = 0$  e  $\lambda_2 = 1$ , portanto,  $D(3 \times 3, 6, 3)$  é grafo regular (Figura 3.1. Nesta figura, os números antes do sinal de igualdade representam os tratamentos sem estrutura e os números após o sinal representam as combinações dos fatores de um delineamento em estrutura fatorial (tratamentos).



**FIGURA 3.1** Representação do grafo regular para  $D(3 \times 3, 6, 3)_p$ . cada tratamento é um ponto (vértice); os tratamentos que ocorrem num mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.

Observa-se que, nesta figura, os tratamentos interligados possuem níveis repetidos.

Ao observar a submatriz relativa aos efeitos principais, nota-se que, pela da mesma também se pode construir um grafo regular (Figura 3.2).



**FIGURA 3.2** Representação do grafo regular para  $D(3 \times 3, 6, 3)_p$  para o fator A (efeito principal). Cada ponto representa um nível do fator A ( $A_1$ ,  $A_2$  e  $A_3$ ).

Quando o nível do fator A está envolvido pelo círculo, indica que o mesmo ocorreu três vezes num bloco. Quando os níveis estão ligados por linhas indica que os mesmos ocorreram juntos num mesmo bloco.

Observe que neste delineamento houve confundimento entre os efeitos de tratamentos (combinações dos níveis de A e de B) com efeitos de blocos.

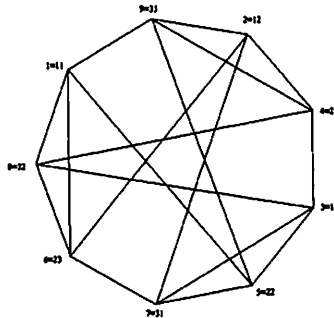


**Matriz de concorrência do D(3x3, 6, 3)a:**

$$\begin{matrix}
 & \begin{matrix} 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \end{matrix} \\
 \begin{matrix} NN= \\ 6 \\ 6 \\ 6 \\ 6 \\ 6 \\ 6 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \end{matrix} & \begin{bmatrix}
 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 2 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 1 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 1 & 0 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \\
 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 2
 \end{bmatrix}
 \end{matrix}$$

Observa-se que a matriz acima possui duas classes de associados para os tratamentos.

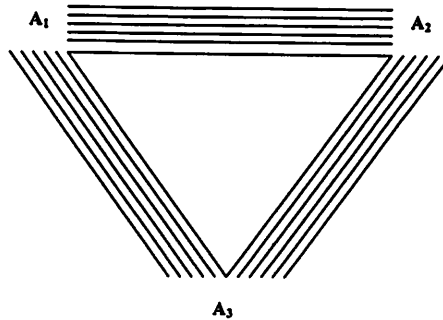
Na Figura 3.3, os números antes do sinal de igualdade representam os tratamentos sem estrutura e os números após o sinal representam as combinações dos fatores de um delineamento fatorial (tratamentos).



**FIGURA 3.3** Representação do grafo regular para D(3x3, 6, 3)a. Cada tratamento é um ponto (vértice); os tratamentos que ocorrem num mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.

Os tratamentos que ocorrem num mesmo bloco não possuem níveis de um fator, sejam A ou B repetidos.

Observando-se a matriz relativa ao fator A, nota-se que também é possível construir um grafo regular (Figura 3.4).



**FIGURA 3.4** Representação do grafo regular para  $D(3 \times 3, 6, 3)$  para o fator A (efeito principal). Os vértices representam os níveis do fator A.

Neste delineamento, os níveis de A ocorreram em blocos diferentes. Dessa forma, este delineamento não possui confundimento dos níveis de A com efeitos de blocos.

As características do grafo regular para o fator A também podem ser observadas para o fator B.

Devido ao tamanho da matriz  $N \times N$  obtida, tal avaliação visual seria infrutífera para delineamentos maiores, por razões óbvias. Neste exemplo, pode-se ver que sua dimensão é  $15 \times 15$ . Num delineamento fatorial  $8 \times 8$ , sua dimensão aumentaria para  $80 \times 80$ .

### 3.9 O algoritmo

Neste trabalho o algoritmo desenvolvido foi implementado na linguagem matricial do Procedimento IML do Sistema SAS<sup>®</sup>. Para uma melhor compreensão do algoritmo efetuado, são descritos a seguir os passos necessários para sua implementação. O programa obtido encontra-se no Apêndice 2 (pág. 79).

Definidos o número de tratamentos, número de blocos, número de parcelas por bloco e o número de repetições dos tratamentos, o algoritmo inicialmente sorteia um delineamento do conjunto  $\xi$  dos delineamentos possíveis. Após o sorteio, é, então, calculada a matriz de delineamento  $X$  do modelo adotado.

O próximo passo é calcular a matriz de informação e, a partir desta, a variância-covariância. Obtém-se o valor do critério da matriz de variância-covariância, que é armazenado.

Um novo passo (intercâmbio) é efetuado. Este consiste na troca das linhas da matriz de delineamento referentes apenas às colunas dos efeitos principais e interações, conservando, portanto, as linhas das colunas referentes aos blocos. Após montar a matriz de delineamento, de informação e de variância-covariância, é obtido o valor do critério para fins de comparação.

Assim, é realizada a comparação entre os dois valores do critério para o delineamento inicial e o obtido pelo intercâmbio. Havendo um ganho de eficiência, a troca é efetivada. Caso contrário, é mantida a configuração anterior. O processo é repetido até que não haja mais ganhos na eficiência.

O algoritmo descrito garante que o delineamento resultante é ótimo a menos de uma troca (ótimo local), não havendo garantias de que seja ótimo global. Isto significa que, a partir de algumas configurações originais, poderia-se

obter um delineamento melhor realizando-se duas ou mais trocas simultaneamente, em vez de apenas uma troca.

Para evitar tal problema de ótimos locais, procede-se ao sorteio de vários delineamentos iniciais, obtendo vários delineamentos. Para a maior parte das configurações um total de 1000 tentativas foi avaliado. Exceto para as situações D(8x8, 32, 10, 5) e D(8x8, 64, 5, 5), em que se avaliaram apenas dois delineamentos iniciais, por limitações de ordem computacional.

### **3.10 Passos do algoritmo**

#### **1. Sorteio**

Definidos o número de níveis dos fatores A e B (do ensaio fatorial), o número de blocos, o número de unidades experimentais em cada bloco e o número de repetições dos tratamentos (combinações dos níveis de A e B), o algoritmo, então, sorteia um delineamento qualquer  $\xi_1$  com esta estrutura.

#### **2. Matriz de delineamento**

Definido o delineamento  $\xi_1$ , o algoritmo então encontra a sua respectiva matriz de delineamento  $X_1$ .

#### **3. Matriz de informação**

A matriz de informação  $\Omega_1 = (X_1'X_1) \frac{1}{\sigma^2}$  é encontrada a partir da matriz de delineamento e armazenada.

#### **4. Matriz de variância-covariância**

Construída a matriz de informação  $\Omega_1 = (X_1'X_1) \frac{1}{\sigma^2}$ , sua inversa, a matriz de variância-covariância  $\Omega_1^+ = (X_1'X_1)^+ \sigma^2$ , é determinada para se calcular o valor do critério.

## 5. Critério

Calcula-se o traço da submatriz de  $\Omega_1^+$ , que é proporcional à variância das estimativas dos efeitos de interesse.

## 6. Intercâmbio

Na matriz de delineamento  $X_1$  de  $\xi_1$  é efetivada a troca de duas linhas referentes aos efeitos principais e interações de blocos diferentes.

Ao intercâmbio só interessa se as linhas referentes aos efeitos principais e de interações forem de blocos diferentes, pois, trocar linhas no mesmo bloco não altera o delineamento.

É importante notar que o intercâmbio é feito de forma seqüencial, começando da unidade experimental (UE) 1 do bloco 1 versus UE 1 do bloco 2; depois UE 1 do bloco 1 com UE 2 do bloco 2 e, assim por diante, até a UE  $k$  do bloco  $b-1$  versus EU  $k$  do bloco  $b$ .

## 7. Construção do delineamento $\xi_2$

Após o intercâmbio, obtém-se um novo delineamento. A partir daí segue o mesmo passo efetivado em  $\xi_1$ .

## 8. Construção da matriz de delineamento $X_2$

## 9. Construção da matriz de informação para $\xi_2$

$$\Omega_2 = (X_2'X_2) \frac{1}{\sigma^2}.$$

## 10. Construção da matriz de variância-covariância para $\xi_2$

$$\Omega_2^+ = (X_2'X_2)^+ \sigma^2.$$

Neste passo, para facilitar a inversão e, com isso, aumentar a rapidez no cálculo, foi usado um procedimento de atualização da inversa (Sölkner, 1993), que está descrito no Apêndice 1 (pág. 76).

## 11. Decisão

Comparar os valores obtidos pelo critério de otimização que foram encontrados nos delineamentos  $\xi_1$  e  $\xi_2$ .

A decisão é tomada comparando-se o critério obtido pelo  $\xi_1$  versus  $\xi_2$ .

O delineamento escolhido será aquele que possuir menor valor para o traço da matriz de variância-covariância. Ao minimizar o traço obtém-se uma menor variância nos efeitos das estimativas.

Comparando os dois delineamentos por meio dos traços das respectivas matrizes de variância-covariância, o algoritmo faz a seguinte decisão:

- Se  $\text{tr}(\Omega_1^+) < \text{tr}(\Omega_2^+)$ , o melhor delineamento é  $\xi_1$ . Assim, o algoritmo o mantém.
- Se  $\text{tr}(\Omega_1^+) > \text{tr}(\Omega_2^+)$ , neste caso o delineamento  $\xi_2$  é melhor do que  $\xi_1$ . Logo, é armazenado.

## 11. Ciclo

Encontrado o melhor delineamento, um novo intercâmbio é efetuado, repetindo assim todo o processo.

## 12. Fim

O algoritmo repete todo o procedimento para um número pré-determinado de sorteios iniciais.

Terminado o processo, é então armazenado e imprime-se o melhor delineamento encontrado pelo algoritmo.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nas tabelas a seguir, encontram-se os delineamentos otimizados que foram obtidos pelo algoritmo de busca utilizado neste trabalho. Tais delineamentos são identificados pelos parâmetros fixados do delineamento desejado, dado pela fórmula  $D(v=n_A \times n_B, b, k, r)i$ , em que  $v$  é o número de tratamentos, constituídos de combinações de níveis de A e B,  $n_A$  e  $n_B$ ;  $b$  é o número de blocos;  $k$  é o número de unidades experimentais por bloco;  $r$  é o número de repetições de cada tratamento e  $i$  refere-se à otimização para efeitos principais na presença de interação ( $i = p$ ) ou ausência de interação ( $i = a$ ).

Como exemplo,  $D(3 \times 3, 6, 3, 2)p$  representa o delineamento fatorial  $3 \times 3$  (9 tratamentos) otimizado para efeitos principais na presença de interação, instalado em 6 blocos de tamanho 3. Cada tratamento ocorre duas vezes.

Assim, não foi prefixado o parâmetro  $\lambda$ , que indica quantas vezes um par de tratamentos ocorre junto no mesmo bloco. Os seus valores podem ser observados no delineamento resultante. Note-se que em nenhuma das situações propostas é possível construir um delineamento balanceado, em que todos os pares de tratamentos apresentem o mesmo  $\lambda$ .

As tabelas da seção 4.1 (Tabelas 4.1 a 4.18), que apresentam os delineamentos otimizados obtidos pelo algoritmo de busca, têm a seguinte estrutura: na primeira coluna, estão enumerados os blocos; nas demais, os tratamentos (combinações dos níveis dos fatores), que são indicados por um par de algarismos no interior da tabela. O primeiro algarismo indica o nível do fator A e o segundo indica o nível do fator B. Por exemplo: o par 32 indica o nível 3 do fator A e o nível 2 do fator B, e assim sucessivamente.

Um exemplo da obtenção de análise da variância para um conjunto de dados simulados é apresentado na seção 4.2.

Na seção 4.3, encontra-se calculado o valor do critério de optimalidade para cada delineamento otimizado.

A eficiência relativa de cada delineamento otimizado para uma dada situação específica e utilizado para outra situação, localiza-se na seção 4.4.

Uma comparação dos delineamentos otimizados  $D(3 \times 3, 6, 3)$ ,  $D(5 \times 5, 20, 5)$ ,  $D(3 \times 4, 10, 4)$  e  $D(4 \times 5, 10, 4)$  com planos básicos obtidos a partir de látices quadrados e retangulares, pode ser visto na seção 4.5.

Na seção 4.6, há algumas considerações sobre os delineamentos otimizados.

#### 4.1 Delineamentos otimizados obtidos pelo algoritmo de busca

**TABELA 4.1** Delineamento  $D(3 \times 3, 6, 3, 2)_p$ , com  $v=9$ ,  $k=3$ ,  $r=2$ ,  $b=6$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar de efeitos principais e interação.

Blocos	Tratamentos		
I	32	31	33
II	33	23	13
III	11	31	21
IV	22	12	32
V	12	13	11
VI	21	22	23

Neste delineamento ocorre, em cada bloco, o confundimento dos efeitos de um dos níveis dos fatores principais com o efeito do bloco. Por exemplo, no bloco I há confundimento do nível 3 do fator A; no bloco II, há confundimento do nível 3 do fator B, e assim sucessivamente. Cada nível dos efeitos principais está confundido uma vez em todo o delineamento, ou seja, em algum bloco.



Neste delineamento todos os efeitos principais e de interação são estimáveis com igual precisão. É um delineamento *resolvable*, ou seja, pode ser agrupado em superblocos ou repetições completas. Neste caso, o ótimo também poderia ser obtido, a partir de planos básicos adequadamente escolhidos de um látice quadrado 3x3. Para fins de comparação, os delineamentos assim obtidos são apresentados na seção 4.5.

**TABELA 4.2** Delineamento  $D(3 \times 3, 6, 3, 2)_a$ ,  $v=9$ ,  $k=3$ ,  $r=2$ ,  $b=6$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$  e foi otimizado para estimar efeitos principais na ausência de interação.

Blocos	Tratamentos		
I	23	11	32
II	31	23	12
III	31	13	22
IV	22	11	33
V	32	21	13
VI	21	12	33

Neste delineamento da Tabela 4.2, a maior diferença com relação ao delineamento anterior (Tabela 4.1) é que ele não apresenta confundimento dos níveis dos fatores com os blocos, sendo que cada nível é ortogonal a todos os blocos.

Isto foi possível, pois, neste caso, o número de parcelas por bloco ( $k$ ) é igual ao número de níveis dos fatores A e B. Este delineamento também é *resolvable*, podendo ser agrupado em superblocos.

Todos os efeitos do delineamento estimáveis com igual precisão. Este delineamento pode também ser obtido por meio de repetições convenientemente escolhidas de um látice 3x3 e os delineamentos assim obtidos serão comparados a este na seção 4.5.

**TABELA 4.3** Delineamento  $D(3 \times 4, 6, 4, 2)_p$ ,  $v=12$ ,  $k=4$ ,  $r=2$ ,  $b=6$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais e interação.

Blocos		Tratamentos			
I	12	32	34	22	
II	11	32	21	31	
III	31	33	13	23	
IV	33	14	34	24	
V	11	14	12	13	
VI	24	22	21	23	

No delineamento otimizado para presença de interação acima há confundimento de níveis dos fatores A e B com efeitos de blocos.

Neste delineamento, o número de níveis do fator A é menor do que o número de unidades experimentais ( $k$ ). Já os níveis do fator B é igual ao número de unidades experimentais por bloco. Por esse motivo, a alocação dos tratamentos às unidades experimentais não obedece a uma seqüência, como os delineamentos apresentados nas Tabelas 4.1 e 4.2.

O delineamento otimizado acima não é *resolvable* e apresenta o nível 3 do fator A estimado com menor precisão. No entanto, todas as interações são estimáveis com igual precisão.

**TABELA 4.4** Delineamento  $D(3 \times 4, 6, 4, 2)_a$ ,  $v=12$ ,  $k=4$ ,  $r=2$ ,  $b=6$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais na ausência de interação.

Blocos		Tratamentos			
I	13	24	31	12	
II	23	24	32	11	
III	14	11	33	22	
IV	34	33	12	21	
V	32	14	31	23	
VI	34	22	21	13	

Neste delineamento (Tabela 4.4) o número de níveis de A é menor do que o número de unidades experimentais ( $k$ ), enquanto o número de níveis do fator B é igual a  $k$ . Logo, não foi possível evitar confundimento para o fator A. No entanto, o fator B é isento do confundimento dos seus níveis com efeitos de blocos. A exemplo do delineamento otimizado para presença de interação, a alocação dos tratamentos para este caso é também complexa.

O delineamento otimizado apresenta efeitos principais livremente estimáveis e com igual precisão.

**TABELA 4.5** Delineamento **D(3x4, 8, 3, 2)<sub>p</sub>**,  $v=12$ ,  $k=3$ ,  $r=2$ ,  $b=8$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais e interação.

Blocos		Tratamentos	
I	24	34	32
II	32	12	22
III	33	31	34
IV	11	31	21
V	14	13	12
VI	11	14	24
VII	13	23	33
VIII	23	21	22

Este delineamento (Tabela 4.5) possui número de níveis do fator A igual ao número de unidades experimentais por bloco ( $k$ ). Já o número de níveis do fator B é maior do que  $k$ . Observa-se que houve confundimento de alguns níveis dos fatores A e B.

O delineamento acima não é *resolvable* e, para a análise intrablocos, as estimativas apresentam precisões diferentes.

**TABELA 4.6** Delineamento **D(3x4, 8, 3, 2)**<sub>a</sub>,  $v=12$ ,  $k=3$ ,  $r=2$ ,  $b=8$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais na ausência de interação.

Blocos		Tratamentos	
I	11	33	24
II	21	34	13
III	21	14	32
IV	22	33	14
V	34	12	23
VI	22	31	13
VII	24	31	12
VIII	23	11	32

Neste delineamento (da Tabela 4.6) não há confundimento dos níveis de A com efeitos de blocos. Isso se deve ao fato de o delineamento possuir número de níveis do fator A, igual ao número de unidades experimentais por bloco ( $k$ ) e o número de níveis do fator B, maior do que  $k$ . Dessa forma, foi possível encontrar um delineamento em que os níveis de A são ortogonais com blocos, o que não ocorre com os níveis de B. Como o delineamento anterior, este delineamento também não é *resolvable* mas, todos os efeitos são estimáveis e com mesma precisão.

TABELA 4.7 Delineamento  $D(4 \times 5, 20, 3, 3)_p$ ,  $v=20$ ,  $k=3$ ,  $r=3$ ,  $b=20$ ,  
 $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais e interação.

Blocos		Tratamentos	
I	25	15	35
II	44	34	24
III	24	22	25
IV	43	42	33
V	25	35	45
VI	24	23	21
VII	11	41	31
VIII	21	14	11
IX	14	44	41
X	31	33	32
XI	21	31	34
XII	13	42	12
XIII	43	13	23
XIV	23	22	33
XV	45	43	41
XVI	13	15	11
XVII	32	35	34
XVII	32	22	12
XIX	42	44	45
XX	15	12	14

No delineamento (Tabela 4.7) otimizado para efeitos principais na presença de interação, há não-ortogonalidade dos níveis de A e de B (também dos tratamentos – combinações dos níveis) com efeitos de blocos. Isto porque o número de níveis de A e B é maior do que o número de parcelas por bloco ( $k$ ).

Este delineamento também não é *resolvable* e seus efeitos não são estimáveis com igual precisão na análise intrablocos.

TABELA 4.8 Delineamento  $D(4 \times 5, 20, 3, 3)_a$ ,  $v=20$ ,  $k=3$ ,  $r=3$ ,  $b=20$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais na ausência de interação.

Blocos	Tratamentos		
I	32	44	11
II	43	22	35
III	23	15	44
IV	35	21	12
V	22	45	11
VI	41	32	23
VII	31	25	44
VIII	11	24	33
IX	45	12	33
X	14	35	43
XI	24	33	45
XII	15	34	41
XIII	15	23	32
XIV	42	13	25
XV	43	21	14
XVI	34	13	25
XVII	42	34	21
XVIII	31	22	14
XIX	24	41	12
XX	31	42	13

No delineamento da Tabela 4.8, o número de níveis de A e B é maior que o número de parcelas por bloco. Assim, o confundimento dos níveis de A e de B foi evitado, o que é desejável quando se tem como objetivo encontrar planos otimizados para efeitos principais na ausência de interação.

Este delineamento, assim como o anterior, também não é *resolvable*. No entanto, na análise intrabloco, apresenta estimativas de mesma precisão para os efeitos principais. Note-se, no entanto, que ao se estimar efeitos de interações, estas saem estimadas com diferentes precisões.

**TABELA 4.9** Delineamento  $D(4 \times 5, 10, 4, 2)_p$ ,  $v=20$ ,  $k=4$ ,  $r=2$ ,  $b=10$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais e interação.

Blocos		Tratamentos		
I	32	31	11	12
II	11	41	44	21
III	44	34	14	24
IV	33	31	35	34
V	25	35	45	15
VI	21	25	23	22
VII	14	13	15	12
VIII	33	23	43	13
IX	42	43	41	45
X	22	42	32	24

Nota-se que o número de níveis do fator B é maior do que o número de unidades experimentais ( $k$ ) por bloco. Já o número dos níveis do fator A é igual a  $k$ .

Neste delineamento há confundimento parcial e total de alguns dos fatores A e B com efeitos de blocos. O delineamento obtido não é *resolved* embora existam planos *resolvable* que possam ser obtidos a partir de planos básicos do látice  $4 \times 5$  (Cochran & Cox, 1957). Posteriormente, os delineamentos obtidos a partir de planos básicos do látice  $4 \times 5$  serão comparados com o delineamento obtido.

Apenas os níveis do fator A e da interação são estimados com igual precisão.

**TABELA 4.10** Delineamento  $D(4 \times 5, 10, 4, 2)_a$ ,  $v=20$ ,  $k=4$ ,  $r=2$ ,  $b=10$ ,  $\lambda_1=1, \lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais na ausência de interação.

Blocos	Tratamentos			
I	42	35	23	14
II	44	21	12	35
III	22	43	14	31
IV	33	41	24	12
V	34	23	15	41
VI	25	42	33	11
VII	13	45	24	32
VIII	21	15	32	43
IX	25	13	31	44
X	34	22	45	11

O delineamento otimizado possui número de níveis de B maior do que o número de unidades experimentais ( $k$ ) por bloco, e número de níveis de A igual a  $k$ . Com isso, neste delineamento, foi possível evitar confundimento, pode-se notar que, em todos os blocos, há todos os níveis do fator A e não há todos os níveis de B (não-ortogonais com efeitos de blocos).

Outra característica que pode ser observada é que, ao contrário do delineamento anterior, este é *resolvable* e todos são estimados com igual precisão.



**TABELA 4.11** Delineamento  $D(5 \times 5, 20, 5, 4)_p$ ,  $v=25$ ,  $k=5$ ,  $r=4$ ,  $b=20$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais e interação.

Blocos	Tratamentos				
I	45	15	35	25	55
II	24	34	14	44	54
III	15	13	12	11	14
IV	12	42	22	52	32
V	21	41	31	11	51
VI	24	23	21	22	25
VII	52	51	53	55	54
VIII	15	45	55	35	25
IX	44	43	41	45	42
X	54	53	52	51	55
XI	33	43	23	53	13
XII	31	34	33	32	35
XIII	42	43	44	41	45
XIV	25	24	21	22	23
XV	34	32	35	31	33
XVI	24	44	34	14	54
XVII	31	21	41	11	51
XVIII	53	13	43	23	33
XIX	14	11	12	13	15
XX	12	22	42	52	32

Os níveis dos fatores A e B possuem confundimento com efeitos de blocos. Dessa forma, por exemplo, nota-se que o nível 5 do fator B confundiu-se com efeitos dos blocos I e VIII; o nível 4 do fator B confundiu-se com os blocos II e XVI e assim por diante. Todos os fatores tiveram dois níveis confundidos em algum dos blocos.

Como os níveis de A e B são iguais ao número de unidades experimentais ( $k$ ) por bloco, enquanto um nível de um fator era confundido, o outro fator tinha seus níveis variando. O delineamento obtido é *resolvable* e *resolved*, podendo ser obtido de planos básicos convenientes do látice  $5 \times 5$ .

Tal característica leva a comparações do delineamento otimizado com os obtidos do látice 5x5, pois, neste caso, o mesmo é um látice simples duplicado. O simples fato do delineamento ótimo ser um látice simples duplicado, merece estudos posteriores. Este delineamento também será comparado ao obtido dos planos básicos de Cochran & Cox (1957), na seção 4.5.

Os efeitos do modelo deste delineamento são estimáveis com igual precisão.

**TABELA 4.12** Delineamento **D(5x5, 20, 5, 4)**a,  $v=25$ ,  $k=5$ ,  $r=4$ ,  $b=20$ ,  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=0$ , otimizado para estimar efeitos principais na ausência de interação.

Blocos	Tratamentos				
I	44	12	53	31	25
II	52	44	33	25	11
III	14	41	53	22	35
IV	34	51	22	43	15
V	52	23	35	44	11
VI	33	22	11	54	45
VII	23	34	12	45	51
VIII	34	13	42	21	55
IX	14	55	31	42	23
X	24	41	55	13	32
XI	33	45	22	14	51
XII	24	55	13	31	42
XIII	15	41	24	33	52
XIV	52	31	25	43	14
XV	21	15	43	32	54
XVI	54	43	12	35	21
XVII	11	24	45	53	32
XVIII	53	12	35	44	21
XIX	54	41	32	23	15
XX	13	34	25	42	51

Neste caso (Tabela 4.12), o algoritmo de busca encontrou um delineamento que não possui nenhum tipo de confundimento dos efeitos principais com efeitos de blocos. Embora seja possível encontrar planos *resolvable*, o delineamento encontrado não é. Para este delineamento, somente os efeitos principais são estimáveis com igual precisão.

**TABELA 4.13** Delineamento  $D(5 \times 5, 25, 4, 4)_p$ ,  $v=25$ ,  $k=4$ ,  $r=4$ ,  $b=25$ ,  $\lambda_1=2$   $\lambda_2=1$ ,  $\lambda_3=0$ , otimizado para estimar efeitos principais e interação.

Blocos	Tratamentos			
I	22	24	25	23
II	43	23	13	33
III	31	35	21	41
IV	33	43	23	53
V	44	41	54	34
VI	32	33	34	31
VII	12	52	32	22
VIII	35	32	34	33
IX	51	11	41	31
X	14	11	15	13
XI	53	51	55	52
XII	24	44	54	14
XIII	44	34	24	14
XIV	12	52	42	54
XV	44	43	45	42
XVI	45	41	43	42
XVII	55	35	45	15
XVIII	51	31	11	21
XIX	13	11	14	12
XX	54	53	55	51
XXI	15	23	21	25
XXII	24	21	25	22
XXIII	22	52	42	32
XXIV	35	55	25	45
XXV	12	53	15	13

Neste delineamento (Tabela 4.13) o número de níveis de A e B é maior do que o número de unidades experimentais por bloco ( $k$ ), levando a um confundimento entre os níveis dos fatores e blocos.

O delineamento encontrado não é *resolvable*, mas apresenta todos os efeitos estimáveis com igual precisão.

**TABELA 4.14** Delineamento  $D(5 \times 5, 25, 4, 4)_a$ ,  $v=25$ ,  $k=4$ ,  $r=4$ ,  $b=25$ ,  $\lambda_1=2$   $\lambda_2=1$ ,  $\lambda_3=0$ , otimizado para estimar efeitos principais na ausência de interação.

Blocos	Tratamentos			
I	31	15	43	22
II	35	14	42	53
III	31	23	44	55
IV	34	15	52	21
V	24	11	53	35
VI	14	32	41	23
VII	23	52	45	11
VIII	13	24	42	51
IX	43	14	51	25
X	55	32	13	41
XI	35	21	42	53
XII	44	33	25	12
XIII	21	44	53	12
XIV	54	22	43	31
XV	22	55	41	14
XVI	15	54	23	32
XVII	33	51	12	25
XVIII	21	13	45	34
XIX	44	25	51	32
XX	15	41	54	33
XXI	43	52	11	34
XXII	45	24	52	33
XXIII	55	22	13	34
XXIV	31	45	12	54
XXV	24	35	42	11

Este delineamento (Tabela 4.14) otimizado para ausência de interação apresenta os mesmos parâmetros do delineamento anterior. Mas, nota-se que não houve nenhuma situação de confundimento.

O delineamento apresentado na tabela acima também não é *resolvable* e os efeitos são estimáveis, mas com diferentes precisões.

**TABELA 4.15** Delineamento  $D(8 \times 8, 32, 10, 5)_p$ ,  $v=64$ ,  $k=10$ ,  $r=5$ ,  $b=32$ ,  
 $\lambda_1=3$ ,  $\lambda_2=2$ ,  $\lambda_3=1$ ,  $\lambda_4=0$ , otimizado para estimar efeitos  
principais e interação.

Blocos	Tratamentos									
I	65	74	66	67	63	61	14	68	64	62
II	16	86	66	11	56	36	26	46	21	76
III	67	43	42	46	47	45	48	41	77	44
IV	35	15	75	25	85	65	45	27	37	55
V	21	51	31	33	41	71	63	61	81	11
VI	88	28	78	68	18	38	58	36	48	76
VII	82	86	83	88	87	85	81	46	26	84
VIII	13	63	73	53	23	33	43	68	88	83
IX	21	23	28	27	25	22	77	73	24	26
X	72	74	73	75	77	76	71	78	84	54
XI	52	53	86	82	51	54	56	55	58	57
XII	65	15	75	55	25	35	57	85	45	87
XIII	18	11	17	16	15	14	12	53	58	13
XIV	42	32	52	22	12	82	62	72	24	64
XV	46	56	16	76	66	36	26	41	71	86
XVI	81	87	88	83	85	86	47	84	82	17
XVII	18	65	61	63	66	67	68	16	62	64
XVIII	24	23	25	22	26	21	27	48	28	78
XIX	35	55	75	25	34	15	65	45	85	38
XX	58	56	51	44	53	42	52	54	55	57
XXI	32	36	38	34	35	33	31	17	37	67
XXII	31	57	51	11	37	21	71	81	61	41
XXIII	45	42	43	46	61	31	41	44	47	48
XXIV	82	12	52	27	62	47	72	32	22	42
XXV	78	76	72	74	73	81	75	77	71	51
XXVI	14	34	24	13	74	64	84	54	43	44
XXVII	14	12	11	16	17	23	18	28	13	15
XXVIII	27	57	17	87	37	12	67	52	47	77
XXIX	53	63	73	23	43	33	66	13	83	56
XXX	32	34	22	33	31	37	35	38	36	62
XXXI	58	48	88	68	32	72	38	18	78	28
XXXII	24	84	83	14	44	54	74	87	34	64

O delineamento otimizado (Tabela 4.15) possui número de níveis de cada fator menor do que o número de unidades experimentais por bloco (níveis de A e B igual a 8 e número de unidades experimentais igual a 10).

Isto fez com que em todos os blocos houvesse confundimento de algum nível de algum fator.

Além disso, pode ser observado que, em cada bloco, um nível varia mais do que o outro. Por exemplo, no bloco I, os níveis de A variam menos que os níveis de B. No entanto, como os blocos possuem 10 unidades por bloco e as combinações de um fator vão até oito, são acrescentados então dois tratamentos (combinação de dois fatores) e que também têm o mesmo nível de um efeito principal. Assim no bloco I há 8 parcelas com nível 6 de A e 2 parcelas com o nível 4 de B, isso faz com que o efeito deste bloco seja parcialmente confundido com os níveis destes dois efeitos.

Este delineamento não é *resolvable* e os seus efeitos são estimáveis com diferentes precisões. É importante lembrar que para este delineamento foi procedida a busca a partir de um número limitado de delineamentos iniciais. O delineamento obtido, muito provavelmente, foi apenas um ótimo local.

**TABELA 4.16** Delineamento  $D(8 \times 8, 32, 10, 5)_a$ ,  $v=64$ ,  $k=10$ ,  $r=5$ ,  $b=32$ ,  
 $\lambda_1=2$ ,  $\lambda_2=1$ ,  $\lambda_3=0$ , otimizado para efeitos principais na  
ausência de interação.

Blocos	Tratamentos									
I	26	14	63	36	27	48	55	71	15	82
II	61	62	58	37	23	15	87	44	76	72
III	21	43	86	15	62	75	87	58	31	34
IV	42	25	11	66	86	83	53	27	38	74
V	31	26	12	68	53	82	67	48	75	84
VI	72	43	55	67	81	46	24	64	32	18
VII	57	81	14	32	23	46	83	76	35	68
VIII	67	28	41	37	12	84	56	35	73	55
IX	25	14	68	71	53	31	54	46	77	82
X	78	65	38	54	57	81	63	26	42	17
XI	11	64	13	66	38	85	45	77	22	51
XII	27	31	46	72	23	54	65	85	18	13
XIII	48	34	11	86	33	52	75	24	57	65
XIV	48	75	56	12	74	33	67	81	16	21
XV	45	54	13	76	87	27	48	68	32	51
XVI	23	17	81	74	56	68	22	41	14	35
XVII	61	84	53	17	21	36	78	73	42	45
XVIII	16	63	77	51	42	82	25	44	38	35
XIX	61	78	34	28	22	57	83	47	15	46
XX	31	53	66	85	78	47	56	32	24	17
XXI	24	11	41	65	72	32	83	57	76	18
XXII	51	43	74	77	22	63	88	36	55	18
XXIII	77	33	58	41	25	86	63	14	62	47
XXIV	21	47	16	58	88	62	73	24	34	55
XXV	52	43	18	71	85	66	28	84	37	41
XXVI	28	44	87	64	15	36	82	51	73	16
XXVII	62	86	34	78	47	52	16	25	71	13
XXVIII	26	37	88	13	36	54	72	61	45	84
XXIX	26	44	52	88	11	75	37	43	23	67
XXX	28	87	33	21	73	12	64	52	45	66
XXXI	22	65	42	88	74	17	83	35	56	61
XXXII	85	64	12	71	27	76	33	44	58	38



Este delineamento (Tabela 4.16) é otimizado para efeitos principais na ausência de interação. Como no caso anterior, o número de níveis de cada fator é menor do que o número de unidades experimentais por bloco (número de níveis de A e B igual a 8 e número de unidades experimentais igual a 10). Em todos os blocos houve confundimento parcial de algum nível de A e de B.

Este delineamento não é *resolvable*, apresentando efeitos igualmente estimáveis somente na análise interbloco.

Provavelmente, o delineamento encontrado seja também um ótimo local, pelos mesmos motivos do delineamento da Tabela 4.15 (processo de busca limitado).

No entanto, pode-se especular uma forma adequada (e de certa forma interessante) para alocação dos tratamentos (combinações dos níveis de A e de B) nos blocos para um delineamento ótimo, nesta situação experimental. Esta forma adequada seria a alocação dos tratamentos nos blocos, de tal maneira que não possua confundimento em 8 unidades experimentais do bloco e as duas unidades restantes alguma repetição dos níveis de efeitos principais. Isto pode ser ilustrado com o bloco XXXII, em que há confundimento dos níveis 3 e 7 do fator A e dos níveis 4 e 8 do fator B.

**TABELA 4.17** Delineamento D(8x8, 64, 5, 5)p, com  $v=64$ ,  $k=5$ ,  $r=5$ ,  $b=64$ ,  
 $\lambda_1=2$ ,  $\lambda_2=1$ ,  $\lambda_3=0$ , otimizado para efeitos principais e interação.

Blocos	Tratamentos				
I	11	51	27	21	71
II	64	67	61	66	65
III	78	58	28	38	68
IV	74	34	64	14	54
V	35	11	37	31	15
VI	23	21	24	22	25
VII	88	86	83	82	84
VIII	41	44	48	46	45
IX	56	66	36	26	76
X	31	71	21	81	61
XI	44	74	64	84	24
XII	88	18	38	78	28
XIII	31	32	37	38	33
XIV	52	54	58	53	57
XV	13	18	16	17	11
XVI	63	64	62	67	68
XVII	42	62	52	72	22
XVIII	15	14	16	84	85
XIX	71	74	72	77	73
XX	17	87	77	37	57
XXI	75	78	72	73	76
XXII	51	31	21	81	41
XXIII	23	25	21	26	28
XXIV	12	14	13	17	11
XXV	35	25	65	85	55
XXVI	25	26	22	27	24
XXVII	81	41	71	61	11
XXVIII	45	35	85	25	75
XXIX	86	56	76	16	36
XXX	34	33	32	35	36
XXXI	86	85	81	87	88
XXXII	28	88	48	68	58
XXXIII	65	66	64	63	62
XXXIV	48	68	78	18	88

Continua na próxima página

Blocos		Tratamentos			
				Continuação da tabela 4.17	
XXXV	51	55	54	52	57
XXXVI	84	82	87	27	42
XXXVII	73	63	53	23	43
XXXVIII	34	36	37	38	32
XXXIX	73	13	63	83	43
XL	62	72	12	32	82
XLI	44	47	43	42	48
XLII	48	47	42	45	46
XLIII	34	35	31	36	38
XLIV	67	65	62	61	68
XLV	47	67	77	17	87
XLVI	37	27	47	67	57
XLVII	46	16	66	76	86
XLVIII	74	77	72	78	75
XLIX	34	44	54	24	84
L	32	22	52	82	12
LI	66	46	26	56	86
LII	57	51	55	58	56
LIII	83	23	53	33	13
LIV	22	27	23	26	28
LV	43	33	42	41	83
LVI	55	15	65	75	45
LVII	14	18	15	12	17
LVIII	52	53	58	55	56
LVIX	24	54	74	14	44
LX	85	82	83	87	81
LXI	43	47	45	41	46
LXII	18	15	16	12	13
LXIII	75	73	71	76	77
LXIV	33	63	53	51	61

No delineamento apresentado, em todos os blocos houve confundimento total ou parcial de algum nível do fator A ou de B. Este delineamento não é *resolvable* e os seus efeitos não são estimáveis com precisões variadas na análise intrabloco.

**TABELA 4.18** Delineamento **D(8x8, 64, 5, 5)a**, com  $v=64$ ,  $k=5$ ,  $r=5$ ,  $b=64$ ,  
 $\lambda_1=2$ ,  $\lambda_2=1$ ,  $\lambda_3=0$ , otimizado para efeitos principais na ausência  
de interação.

Blocos		Tratamentos			
I	65	31	78	13	86
II	45	62	77	28	51
III	14	45	27	53	82
IV	84	23	16	67	51
V	75	23	11	38	62
VI	26	75	54	63	17
VII	81	63	78	55	27
VIII	61	43	18	76	27
IX	77	52	13	24	68
X	21	72	83	54	65
XI	72	66	88	43	11
XII	56	88	65	27	34
XIII	17	61	85	74	52
XIV	31	44	63	26	82
XV	45	74	81	36	52
XVI	36	13	67	45	28
XVII	25	76	51	34	12
XVIII	41	76	58	67	24
XIX	12	74	58	23	87
XX	68	15	36	74	21
XXI	41	73	16	22	55
XXII	52	26	17	43	38
XXIII	61	56	78	44	12
XXIV	26	35	47	18	71
XXV	83	36	14	62	58
XXVI	76	33	41	85	57
XXVII	51	68	83	46	37
XXVIII	35	51	18	84	72
XXIX	48	71	17	63	32
XXX	25	66	44	72	57
XXXI	75	67	31	42	84
XXXII	47	56	62	13	71

Continua na próxima página

Blocos		Tratamentos			
Continuação da tabela 4.18					
XXXIII	73	68	47	22	84
XXXIV	67	86	38	53	72
XXXV	43	82	78	34	25
XXXVI	21	33	64	57	42
XXXVII	57	46	18	82	65
XXXVIII	55	88	13	44	32
XXXIX	38	41	17	85	24
XL	32	64	86	55	47
XLI	15	83	44	21	77
XLII	88	12	34	63	41
XLIII	34	11	47	23	65
XLIV	22	81	48	14	66
XLV	87	35	61	43	54
XLVI	64	37	15	48	73
XLVII	53	35	16	68	42
XLVIII	73	31	57	28	14
XLIX	12	87	66	28	33
L	87	75	48	11	56
LI	31	66	77	25	58
LII	36	85	52	48	23
LIII	46	38	81	73	54
LIV	32	46	27	74	11
LV	53	37	81	22	15
LVI	45	33	86	77	14
LVII	22	37	76	88	55
LVIII	26	85	71	64	53
LVIX	16	71	28	82	64
LX	35	62	46	24	87
LXI	18	84	25	61	33
LXII	75	56	83	24	32
LXIII	16	37	78	54	42
LXIV	42	86	21	15	58

Neste delineamento (Tabela 4.18) não houve confundimento em nenhum bloco. Este delineamento não é *resolvable* e os seus efeitos na análise intrabloco também são estimáveis com diferentes precisões.

#### 4.2 Exemplo de análise da variância

Nesta seção procura-se exemplificar a análise da variância intrablocos, a qual segue o mesmo padrão para os demais delineamentos.

Seja o seguinte experimento em que foram simulados dados empregando o delineamento descrito na Tabela 4.2.

Na Tabela 4.19, os números entre parênteses identificam os tratamentos e os números ao lado dos parênteses identificam as realizações da variável aleatória  $y$  (observações).

**TABELA 4.19** Exemplo de experimento empregando o delineamento da Tabela 4.2 (com valores simulados para as observações. Os tratamentos são identificados pelos números entre parênteses).

Bloco	(Tratamentos) Valores observados						Total de cada bloco
I	(23)	189	(11)	148	(32)	174	511,0
II	(31)	210	(23)	104	(12)	169	483,0
III	(31)	130	(13)	154	(22)	231	515,0
IV	(22)	264	(11)	160	(33)	31	455,0
V	(32)	25	(21)	168	(13)	31	224,0
VI	(21)	150	(12)	110	(33)	130	390,0
Total geral							2578,0

Os totais de cada tratamento encontram-se na Tabela 4.20.

**TABELA 4.20** Totais de cada tratamento.

Tratamentos	Total de cada tratamento
11	308,0
12	279,0
13	185,0
21	318,0
22	495,0
23	293,0
31	340,0
32	199,0
33	161,0
<b>Total geral</b>	<b>2578,0</b>

O quadro resumo da análise da variância (ANAVA) para este delineamento está escrito na Tabela 4.21.

**Tabela 4.21** Quadro resumo da Análise da variância do exemplo simulado.

FV	GL	SQ	E(QM)	
Blocos ajustados	5	19.934,44		
Tratamentos não ajustados	8	31.765,42		
	A	2	7.068,41	$\sigma^2 + 3\phi_A$
	B	2	7.530,57	$\sigma^2 + 3\phi_B$
	AB	4	17.166,44	$\sigma^2 + 2\phi_{AB}$
Erro	4	21.995,25	$\sigma^2$	
<b>Total</b>	<b>17</b>	<b>73.695,11</b>		

$$\text{Em que: } \phi_A = \frac{\sum_i^I A_i^2}{I-1}, \phi_B = \frac{\sum_i^J B_i^2}{J-1}, \phi_{AB} = \frac{\sum_i^I AB_{ij}^2}{(I-1)(J-1)} \text{ e } A_b, B_b$$

$AB_{ij}$  são respectivamente os efeitos de A, B e interação AB, respectivamente.

### **4.3 Cálculo do valor do critério de optimalidade (variância média das estimativas)**

A Tabela 4.22 contém o valor da variância média das estimativas para cada efeito  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\alpha\beta$  dos delineamentos que foram otimizados. Na primeira coluna estão os delineamentos otimizados. Nas colunas  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\alpha\beta$  referem-se ao valor do critério de cada efeito ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\alpha\beta$ ) obtido por meio do traço da matriz de variância correspondente. As colunas referentes às somas indicam a soma de cada efeito do modelo considerado. Assim, a coluna  $\alpha+\beta$  indica a soma dos efeitos principais e a coluna  $\alpha+\beta+\alpha\beta$  indica a soma dos efeitos principais e interação.



**TABELA 4.22** Valor da variância média das estimativas para delineamentos otimizados.

Delineamentos	Valor do critério			Somam	
	$\alpha$	$\beta$	$\alpha\beta$	$\alpha+\beta$	$\alpha+\beta+\alpha\beta$
D(3x3, 6, 3)p	0,379898	0,379898	2,251633	0,759796	3,011429
D(3x3, 6, 3)a	0,192398	0,192398	4,126633	0,384796	4,511429
D(3x4, 6, 4)p	0,339327	0,666191	3,854921	1,005518	4,860439
D(3x4, 6, 4)a	0,164327	0,33137	6,650457	0,495697	7,146154
D(3x4, 8, 3)p	0,270799	0,461433	3,442700	0,732232	4,174932
D(3x4, 8, 3)a	0,177466	0,284349	5,554783	0,461815	6,016598
D(4x5, 20, 3)p	0,342612	0,487655	5,202512	0,830267	6,032779
D(4x5, 20, 3)a	0,157984	0,263206	10,69248	0,42119	11,11367
D(4x5, 10, 4)p	0,435775	0,667953	6,971155	1,103728	8,074883
D(4x5, 10, 4)a	0,210775	0,353953	10,46349	0,564728	11,02822
D(5x5, 20, 5)p	0,278679	0,278679	4,111291	0,557358	4,668649
D(5x5, 20, 5)a	0,13979	0,13979	5,800647	0,279579	6,080226
D(5x5, 25, 4)p	0,287653	0,29460	4,519219	0,582253	5,101472
D(5x5, 25, 4)a	0,149846	0,149241	6,671981	0,299087	6,971068
D(8x8, 32, 10)p	0,208386	0,215643	10,06275	0,424029	10,48678
D(8x8, 32, 10)a	0,141124	0,141148	11,28091	0,282272	11,56318
D(8x8, 64, 5)p	0,32036	0,28606	10,98078	0,60642	11,58720
D(8x8, 64, 5)a	0,15252	0,152495	13,31254	0,305015	13,61755

Na Tabela 4.22, nos delineamentos, D(5x5, 25, 4)i, D(8x8, 32, 10)i e D(8x8, 64, 5)i, há indícios de que o algoritmo não tenha encontrado o ótimo. Primeiro, porque nestes delineamentos foi interrompido o processo de busca; segundo porque nos delineamentos que possuem números de níveis de A e B iguais, como os delineamentos D(3x3, 6, 3)i e D(5x5, 20, 5)i, os valores de cada critério para  $\alpha$  e  $\beta$  foram iguais. Logo, estes delineamentos - D(3x3, 6, 3)i e D(5x5, 20, 5)i - podem ser ótimos globais, uma vez que tiveram valores de critério iguais para  $\alpha$  e  $\beta$ .

#### 4.4 Eficiências relativas

Na literatura a respeito blocos incompletos, em geral utiliza-se a eficiência em relação ao delineamento inteiramente casualizado (DIC) correspondente. Isto permite concluir sobre a eficiência máxima de um delineamento em particular. No caso, o interesse maior reside na eficiência em relação aos diferentes modelos de análise. Portanto, será utilizada a seguinte expressão para eficiência relativa de um delineamento. Abaixo, a eficiência do delineamento  $\xi_1$  em relação a outro delineamento dado ( $\xi_2$ ) pode ser dada pela razão inversa das variâncias das suas estimativas de interesse (Hinkelmann & Kempthorne, 1994):

$$ER(\xi_1, \xi_2) = \frac{V(\xi_2)}{V(\xi_1)}.$$

Esta medida, em geral, é utilizada para comparar delineamentos em relação a limites máximos de eficiência que podem ser atingidos, ou na comparação entre delineamentos com diferentes estruturas de controle local. Neste trabalho, será utilizada a medida com a primeira idéia, ou seja, verificar o quanto um delineamento é subótimo em relação a outro otimizado para aquela situação específica.

A Tabela 4.23 e a Figura 1 apresentam as eficiências de cada delineamento, quando o mesmo for utilizado para estimar efeitos principais e interação e quando for utilizado para estimar efeitos principais na ausência de interação. Os resultados apresentados são sumários da Tabela 4.22. Com isso, auxilia a visualizar os principais resultados já apresentados nesta tabela.

Na primeira coluna da Tabela 4.23 estão os delineamentos otimizados. Nas demais colunas, a eficiência do delineamento quando o mesmo for utilizado para outra situação experimental. Com isso, na coluna "Estimar na presença de interação", o resultado que está apresentado indica o quanto é eficiente o

delineamento que foi otimizado na ausência de interação, ao ser usado para estimar tanto interações quanto efeitos principais. Já na outra coluna, “Estimar na ausência de interação”, os valores são obtidos dos delineamentos que foram otimizados na presença de interação, se os mesmos forem utilizados para estimar apenas efeitos principais.

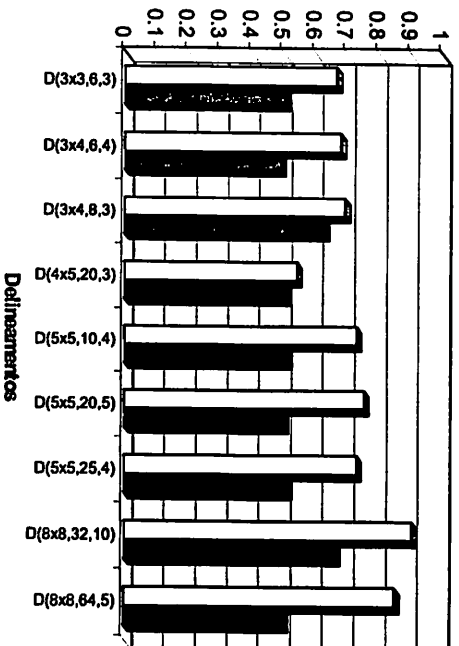
**TABELA 4.23** Eficiência (%) dos delineamentos otimizados quando utilizados na situação experimental inadequada.

Delineamento	Eficiência dos delineamentos subótimos para	
	Estimar na presença de interação	Estimar na ausência de interação
D(3x3,6,3)	66,75	50,64
D(3x4,6,4)	68,01	49,30
D(3x4,8,3)	69,39	63,07
D(4x5,20,3)	54,28	50,73
D(5x5,10,4)	73,22	51,16
D(5x5,20,5)	76,78	50,17
D(5x5,25,4)	73,18	51,36
D(8x8,32,10)	90,69	66,57
D(8x8,64,5)	85,09	50,30

Na Figura 1 a cor branca indica em porcentagem a eficiência do delineamento otimizado na ausência de interação, quando o mesmo for utilizado para estimar apenas efeitos principais e interação. A cor cinza indica a eficiência do delineamento otimizado na presença de interação quando o mesmo for utilizado para estimar apenas efeitos principais.



### Eficiência dos subótimos



**FIGURA 1** Eficiência relativa de um delineamento, quando o mesmo foi otimizado para uma situação experimental e utilizado em outra.

Tanto na Tabela 4.23 quanto na Figura 1, nota-se que todos os delineamentos otimizados para uma dada situação experimental são subótimos ao serem utilizados para outra situação experimental. No entanto, quando o delineamento é otimizado para estimar ausência de interação, há uma menor perda de eficiência.

Em sentido oposto, os delineamentos otimizados para estimar presença de interação acarretam maior perda de eficiência quando não há interação.

Isto se dá porque a presença de confundimento de níveis de efeitos principais com efeitos de blocos, embora auxilie a detecção de efeitos de interações, atrapalha as estimativas dos efeitos principais.

Como só faz sentido medir eficiências relativas entre dois delineamentos que têm os mesmos parâmetros, as porcentagens (eficiências) que estão na

Tabela 11 e na Figura 1 apenas identificam o quanto é eficiente o delineamento otimizado na presença de interação, se o mesmo for utilizado para estimar ausência de interação.

Como exemplo, se o delineamento  $D(3 \times 3, 6, 3)_p$  for utilizado para estimar efeitos principais na ausência de interação, o mesmo possui 50,64% de eficiência. Enquanto que se o delineamento  $D(3 \times 3, 6, 3)_a$  for utilizado para estimar efeitos principais e interações, sua eficiência será de 66,75%.

É preciso lembrar que a comparação entre as eficiências deve ser feita a horizontal (exemplo acima) e não entre delineamentos, o que levaria a uma comparação errada da eficiência do delineamento.

#### **4.5 Eficiência dos delineamentos construídos a partir de planos básicos de latices, comparados a $D(3 \times 3, 6, 3)$ , $D(5 \times 5, 20, 5)$ , $D(3 \times 4, 8, 3)$ , e $D(4 \times 5, 10, 4)$ , otimizados.**

Na tabela 4.24 está o valor da eficiência do delineamento otimizado  $D(3 \times 3, 6, 3)_p$  e  $D(3 \times 3, 6, 3)_a$  e dos planos básicos obtidos a partir do látice quadrado  $3 \times 3$ , obtido em Cochran & Cox (1957). O delineamento  $D(3 \times 3, 6, 3)_i$  é igual aos planos obtidos a partir do látice  $3 \times 3$ , bastando que o agrupe em repetições utilizando planos adequados a cada situação. O interesse da tabela a seguir, é verificar que o algoritmo encontrou os melhores delineamentos para cada situação experimental (embora agrupar em superblocos – *resolvable* – não fosse o objetivo da otimização).

**TABELA 4.24** Eficiência (%) do  $D(3 \times 3, 6, 3)_i$  em relação aos delineamentos construídos a partir de planos básicos do látice  $3 \times 3$ .

Delineamento	Eficiência	
	Efeitos principais e interações	Efeitos principais
$D(3 \times 3, 6, 3)_p$	100	50,64
$D(3 \times 3, 6, 3)_a$	66,75	100
Látice $3 \times 3$ (repetições 1 e 2)	100	50,64
Látice $3 \times 3$ (repetições 1 e 3)	80,06	67,24
Látice $3 \times 3$ (repetições 1 e 4)	80,06	67,24
Látice $3 \times 3$ (repetições 2 e 3)	80,06	67,24
Látice $3 \times 3$ (repetições 2 e 4)	80,06	67,24
Látice $3 \times 3$ (repetições 3 e 4)	66,75	100

Como já fora mencionado, o delineamento  $D(3 \times 3, 6, 3)_p$  é igual ao plano básico do látice  $3 \times 3$ , tomando as repetições 1 e 2. Por isso é que as suas eficiências são iguais. O delineamento  $D(3 \times 3, 6, 3)_a$  é obtido a partir das repetições 3 e 4 do látice  $3 \times 3$ . Logo, suas eficiências são iguais.

Os demais delineamentos obtidos a partir do látice  $3 \times 3$  (repetições 1 e 3, 1 e 4, 2 e 3, 2 e 4) são subótimas em relação ao delineamento otimizado  $D(3 \times 3, 6, 3)_i$  (planos básicos obtidos do látice  $3 \times 3$  - repetições 1 e 2 e 3 e 4).

Os delineamentos obtidos a partir das repetições 1 e 3 e 1 e 4, são ótimos para estimar o fator B, pois possuem menor valor do critério para este efeito (0,192398). Para o fator A, o valor do critério é 0,37989.

Já as repetições 2 e 3 e 2 e 4 são ótimas para estimar o fator A, pois o valor do critério é igual a 0,192398 e para o fator B, igual a 0,37989.

Os delineamentos citados (repetições 1 e 3, 1 e 4, 2 e 3, 2 e 4 do látice  $3 \times 3$ ), são subótimos para estimar modelos com interação. Isso porque para estes delineamentos a variância média das estimativas é igual a 3,761429, que é maior do que o valor do critério do delineamento  $D(3 \times 3, 6, 3)_p$  (repetições 1 e 2 do látice  $3 \times 3$ ), que é igual a 2,251633.

Na Tabela 4.25 comparou-se o delineamento  $D(5 \times 5, 20, 5)_p$  e  $D(5 \times 5, 20, 5)_a$ , com os delineamentos que podem ser obtidos a partir de planos básicos do látice quadrado  $5 \times 5$ . Para tal comparação, utilizou-se a combinação das repetições formando delineamentos que possuíam 20 blocos no total. Nesta tabela, o objetivo foi o de comparar os delineamentos otimizados com os obtidos a partir do látice.

**TABELA 4.25** Eficiência (%) do  $D(5 \times 5, 20, 5)_i$  em relação aos planos básicos obtidos a partir do látice quadrado  $5 \times 5$ .

Delineamento	Eficiência	
	Efeitos principais e interações	Efeitos principais
$D(5 \times 5, 20, 5)_p$	100,00	50,17
$D(5 \times 5, 20, 5)_a$	76,78	100,00
Látice c/ rep. 1, 2, 3 e 4	91,31	75,12
Látice c/ rep. 1, 2, 3 e 5	91,31	75,12
Látice c/ rep. 1, 2, 3 e 6	91,31	75,12
Látice c/ rep. 1, 2, 4 e 5	91,31	75,12
Látice c/ rep. 1, 2, 4 e 6	91,31	75,12
Látice c/ rep. 1, 2, 5 e 6	91,31	75,12
Látice c/ rep. 1, 3, 4, e 5	86,60	85,79
Látice c/ rep. 1, 3, 4, e 6	86,60	85,79
Látice c/ rep. 1, 3, 5 e 6	86,60	85,79
Látice c/ rep. 1, 4, 5 e 6	86,60	85,79
Látice c/ rep. 2, 3, 4 e 5	86,60	85,79
Látice c/ rep. 2, 3, 4 e 6	86,60	85,79
Látice c/ rep. 2, 3, 5 e 6	86,60	85,79
Látice c/ rep. 2, 4, 5 e 6	86,60	85,79
Látice c/ rep. 3, 4, 5 e 6	82,36	100,00

O delineamento  $D(5 \times 5, 20, 5)_p$  resultou num látice simples duplicado (com as repetições 1 e 2 do látice em questão). Isto indica que, para estimar efeitos principais e interação, o delineamento mais eficiente leva a um alto grau

de confundimento entre efeitos de blocos e de níveis de fatores A e B, sendo pouco eficiente utilizar repetições variadas do látice 5x5.

O delineamento D(5x5, 20, 5)<sub>a</sub> apresentou precisão igual a do delineamento obtido pelas repetições 3, 4, 5 e 6 (látice 5x5). Pode-se notar que, no delineamento obtido com base no látice, todos os efeitos são estimáveis com igual precisão o que não ocorre com o delineamento otimizado.

O fato do algoritmo não procurar dentro da classe de delineamentos *resolvable* acarreta esta consequência curiosa. Algumas vezes, o delineamento é ótimo segundo o critério da média da variância das comparações, mas seria subótimo se o critério envolvesse a igualdade na precisão das comparações.

Já o delineamento D(5x5, 20, 5)<sub>a</sub> encontrado não é *resolved*. Este delineamento possui três classes de associados. O melhor, neste caso, deve ser optar pelo delineamento construído a partir do látice, que apresenta apenas duas classes de associados. Todos os efeitos principais são estimáveis com igual precisão, embora haja diferentes precisões para os efeitos de interação.

O delineamento obtido pelas repetições 3, 4, 5 e 6, além de ser ótimo para estimar efeitos principais na ausência de interação, possui o melhor subótimo do que o delineamento encontrado pelo algoritmo. Portanto, este delineamento é o mais robusto.

Os delineamentos obtidos a partir das repetições 1 ou 2 do látice 5x5 são subótimos para estimar apenas efeitos principais. Isto porque, nestas repetições, ocorre alto grau de confundimento entre níveis de efeitos principais e blocos. No entanto, alguns subótimos são melhores para estimar presença de interação e outros são melhores para estimar ausência. Neste caso, os delineamentos obtidos a partir dos planos básicos do látice 5x5 sofrem menos com a má especificação do modelo (são mais robustos).



Na Tabela 4.26 vê-se que, o delineamento otimizado D(3x4, 8, 3) é mais eficiente do que os planos obtidos a partir do látice 3x4 retangular.

**TABELA 4.26** Eficiência (%) do delineamento D(3x4, 8, 3)i em relação aos delineamentos construídos a partir de planos básicos do látice 3x4 retangular.

Delineamento	Eficiência	
	Efeitos principais e interações	Efeitos principais
D(3x4, 8, 3)p	100	63,07
D(3x4, 8, 3)a	69,39	100
Látice 3x4 (repetições 1 e 2)	53,13	34,36
Látice 3x4 (repetições 1 e 3)	67,40	63,86
Látice 3x4 (repetições 2 e 3)	75,96	53,50

Nota-se que, nenhum plano obtido com base no látice foi tão eficiente quanto os delineamentos D(3x4, 8, 3)a e D(3x4, 8, 3)p. Em termos das estimativas dos efeitos do modelo: as repetições 1 e 2 do látice em questão apresentam, na análise intrabloco, todos os efeitos estimáveis com diferentes precisões; as repetições 1 e 3 apresentam, na análise intrabloco, que somente as interações são estimáveis com igual precisão; o mesmo acontece ao se escolher um plano com as repetições 2 e 3.

Assim, para o delineamento D(3x4, 8, 3)p, na análise intrabloco os efeitos não são estimáveis com igual precisão. Já o delineamento D(3x3,8,3)a possui todos os efeitos estimáveis com igual precisão.

O delineamento otimizado na ausência de interação é mais robusto do que os planos obtidos com base no látice tratado. Isso porque a má especificação do modelo acarreta menor perda de eficiência na análise.

A Tabela 4.27 compara o delineamento  $D(4 \times 5, 10, 4)_i$  com delineamentos construídos a partir do látice  $4 \times 5$  retangular, cujos planos foram obtidos em Cochran & Cox (1957).

**TABELA 4.27** Eficiência (%) do delineamento  $D(4 \times 5, 10, 4)_i$  em relação aos delineamentos construídos a partir de planos básicos do látice  $4 \times 5$  retangular.

Delineamento	Eficiência	
	Efeitos principais e interações	Efeitos principais
$D(4 \times 5, 10, 4)_p$	100	51,16
$D(4 \times 5, 10, 4)_a$	73,22	100
Látice $4 \times 5$ (repetições 1 e 2)	80,10	78,05
Látice $4 \times 5$ (repetições 1 e 3)	84,06	69,66
Látice $4 \times 5$ (repetições 2 e 3)	76,33	87,80

Para esta comparação, nota-se que nenhum plano obtido com base no látice foi tão eficiente quanto os delineamentos  $D(4 \times 5, 10, 4)_a$  e  $D(4 \times 5, 10, 4)_p$ .

No delineamento obtido a partir do látice  $4 \times 5$ , utilizando as repetições 1 e 2, na análise intrablocos somente as interações são estimadas com igual precisão (os fatores A e B não são). Nas repetições 1 e 3, na análise intrablocos, os efeitos principais também não são estimados com igual precisão. Nas repetições 2 e 3, as análises inter e intrablocos apresentam apenas os efeitos de interação estimados com igual precisão.

Novamente, ocorreu que, para o delineamento  $D(4 \times 5, 10, 4)_p$ , tanto os efeitos principais quanto de interação não são estimáveis com igual precisão na análise intrablocos. Já que na ausência de interação, em qualquer das análises, o delineamento otimizado apresenta todos os efeitos estimáveis com igual precisão.

## 4.6 Considerações gerais sobre os delineamentos otimizados

Na prática, sempre que possível, se evitam delineamentos com confundimento. Contradizendo esta prática, pode-se observar que os delineamentos ótimos para modelos com interação sempre apresentam confundimento. Isto pode ser exemplificado no  $D(5 \times 5, 20, 5)_p$ , que é um látice simples duplicado, que consiste em duas repetições de planos que levam a confundimento de níveis de blocos com níveis de efeitos principais.

A maioria dos delineamentos encontrados possui duas classes de associados. O menor número possível de classes de associados leva a um tipo de simetria desejável nos delineamentos (comparações entre todos os tratamentos com precisão mais homogênea).

Nos delineamentos construídos com base em látices quadrados, é possível imaginar, de início, vantagens na busca de repetições ortogonais. Isso simplifica a escolha da relação entre os números de tratamento e as combinações do fatorial. Nos látices retangulares esta associação é menos evidente, eliminando um dos possíveis atrativos do método de construção.

É, em geral, melhor utilizar o  $D(4 \times 5, 10, 4)_a$  do que planos obtidos por meio do látice  $4 \times 5$ , pois aquele delineamento é mais eficiente e mais robusto do que os construídos a partir dos planos encontrados em Cochran & Cox (1957). Nota-se que o delineamento encontrado é *resolvable*. Portanto, deve ser um caso particular de uma combinação de planos dentre os apresentados por aqueles autores, a menos de uma permutação nos rótulos dos tratamentos, sendo, no entanto, de construção não evidente.

Se considerarmos apenas situações de duas repetições, é sempre possível construir dois planos ortogonais de látices simples. Isso pode facilitar a construção de delineamentos fatoriais, desde que o número de parcelas por bloco

não exceda o número de níveis de qualquer fator, o que leva a delineamentos fatoriais de construção mais simples.

Na maior parte dos casos, otimizar apenas para efeitos principais levou também a delineamentos em que todos os níveis de um mesmo fator e da interação são estimáveis com mesma precisão. Isso não ocorre quando se otimiza para a presença de interação.

Sempre é bom lembrar que o melhor delineamento encontrado por um algoritmo de simples troca pode ser um ótimo local a menos de uma troca. Para evitar que isso ocorra, é necessário aumentar o número de tentativas do intercâmbio.

O algoritmo empregado mostrou-se bastante geral e flexível, podendo ser utilizado para obter delineamentos com estrutura fatorial com diferentes fatores e com níveis variados.

## 5 CONCLUSÕES

- O critério utilizado neste trabalho permite construir algoritmos de busca de planos experimentais ótimos para os delineamentos fatoriais com dois fatores de níveis qualitativos.
- A maioria dos delineamentos encontrados está próxima ou atinge condições de ótimo global, tanto quando se busca otimizar para os efeitos principais e interação quanto quando se busca otimizar apenas para os efeitos principais.
- Ao comparar os delineamentos que otimizam tanto para os efeitos principais quanto para a interação com os que otimizam apenas para os efeitos principais, concluiu-se que estes são subótimos, e vice-versa. Deve-se buscar planos adequados para cada situação específica.
- Os delineamentos também otimizados para a presença de interação apresentam diferentes níveis de confundimento entre alguns efeitos de blocos e níveis dos fatores principais.
- Em alguns casos, pode-se construir delineamentos a partir de látices. No entanto, estes delineamentos, em geral, são subótimos, pelas razões já expostas. Em geral, os planos derivados de látices quadrados são mais robustos.
- Ao comparar os subótimos de cada situação experimental, nota-se que ao otimizar para a ausência de interações, os delineamentos obtidos são mais robustos do que para otimizar para presença de interações.
- Os algoritmos de busca são uma alternativa flexível e eficaz para construir delineamentos ótimos ou quase-ótimos para experimentos fatoriais em blocos incompletos.

## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ATKINSON, A. C. the usefulness of optimum experimental designs. **Journal of the Royal Statistical Society Serie B**, London, v. 58, n. 1, p. 59-76, 1996.
- BALEY, R. A. Resolved designs viewed as sets of partitions. In: HOLROYD, F. C.; QUINN, K. A. S.; ROWLEY, C.; WEBB, B. S. (Ed.) **Combinatorial Designs and their Applications**. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 1999. p. 17-47. (Research Notes in Mathematics, 403).
- CHAI, F.; MUKERJEE, R. Micellanea – optimal design for diallel crosses with specific combining abilities. **Biometrika**, London, v. 86, n. 2, p. 453-458, June 1999.
- CHALONER, K.; VERDINELLI, I. Bayesian experimental design: a review. **Statistical Science**, Harward, v. 10, n. 3, p. 237-304, Aug. 1995.
- CHANG, C. M. Some regular graph designs. **Taiwanese Journal of Mathematics**, Taipei, v. 1, n. 1, p. 47-57, 1997.
- COCHRAN, W. G.; COX, G. M. **Experimental designs**. 2. ed. New York: John Wiley, 1957. 617 p.
- COOK, R. D.; NACHTSHEIM, C. J. A Comparison of algorithms for constructing exact D-Optimal designs. **Technometrics**, Washington, v. 22, n. 3, p. 315-324, Aug. 1980.
- COOK, R. D., NACHTSHEIM, C. J. Computer aided blocking of factorial and response surface designs. **Technometrics**, Washington, v. 31, n. 3, p. 339-346, Aug. 1989.
- COX, D. R. **Planning of experiments**. New York: John Wiley, 1958. 308 p.
- CRUZ, C. D.; REGAZZI, A. J. **Modelos biométricos aplicados ao melhoramento genético**. Viçosa: Imprensa Universitária, 1992. 390 p.
- FEDOROV, V. V. **Theory of optimal experiments**. New York: Academic Press, 1972.
- HINKELMANN, K.; KEMPTHORNE, O. **Design and analysis of experiments**. New York: John Wiley, 1994. 495 p.

JOHN, P. W. M. **Incomplete block designs**. New York: Marcel Dekker, 1980. 101 p.

JOHN, P. W. M. **Statistical design and analysis of experiments**. New York: The Macmillan Company, 1971. 356 p.

JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W. **Applied multivariate statistical analysis**. 4. ed. New Jersey: Prentice Hall, 1998. 816 p.

KEMPTHORNE, O.; CURNOW, R. N. The partiall diallel crosses. **Biometrics**, Raleigh, v. 17, n. 2, p. 229-250, June 1961.

KEMPTHORNE, O. **Design and analysis of experiments**. 6. ed. New York: John Wiley, 1952. 631 p.

KIEFER, J. Optimum experimental designs. **Journal of the Royal Statistical Society, Serie B**, London, v. 21, n. 2, p. 272-319, 1959.

MANLY, B. F. J. **Multivariate statistical methods**. 2. ed. London: Chapman & Hall, 1994. 215 p.

MARDIA, K. V.; KENT, J. T.; BIBBY, J. M. **Multivariate analysis**. San Diego: Academic Press, 1995. 518 p.

MEAD, R. The Non-ortogonal design of experiments. **Journal of Royal Statistical Society**, London, v. 153, n. 2, p. 151-201, 1990.

MEAD, R.; CURNOW, R. N. **Statistical methods in agriculture and experimental biology**. London: Chapman and Hall, 1983. 335 p.

MOLCHANOV, I.; ZUYEV, S. Otimization in space of measures and optimal design. In: ATKINSON, A. C.; BOGALKA, B.; ZHIGLJAVSKY, A. (Ed.). **Optimum experimental design: properts for the new millnium**. Kluwer, 2000. p. 79-90.

PUKELSHEIM, F. **Optimal design of experiments**. New York: John Wiley, 1993.

RAGHAVARAO, D. **Constructions and combinatorial problems in design of experiments**. New York: John Wiley, 1971. 386 p.

SAS INSTITUTE. **SAS/QC Software: Reference, Version 6.** Cary, NC: SAS Institute, 1995.

SEARLE, S. R. **Linear Models for unbalanced data.** New York: John Wiley, 1987.

SILVA, C. H. O. **A proposed framework for establishing optimal genetic designs for estimating narrow-sense heritability.** North Carolina: NC State University, 2000. 184 p.

SÖLKNER, J. Choice of optimality criteria for the design of crossbreeding experiments. **Journal of Animal Science**, Champaign, v. 71, n. 11, p. 2867-2873, Nov. 1993.

STEEL, R. G. D.; TORRIE, J. H. **Bioestadística: principios y procedimientos.** 2. ed. New York: McGraw-Hill, 1985. 622p.

TRINCA, L. A.; GILMOUR, S. G. An algorithm for arranging response surface designs in small blocks. **Computational Statistics and Data Analysis**, Amsterdam, v. 33, n. 1, p. 25-43, Mar. 2000.



## 7 APÊNDICES

### Apêndice 1

Para facilitar a inversão, foi usado um procedimento de atualização da inversa, baseado no complemento de Schur.

Como pode ser visto em Sölkner (1993) a atualização da matriz quando se adiciona ( e remove) uma única linha  $\mathbf{x}'$  da matriz  $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ , denotando  $\mathbf{X}'\mathbf{X}$  por  $\mathbf{B}$  é como se segue:

$$(\mathbf{B} + \mathbf{xx}')^{-1} = \mathbf{B}^{-1} - \frac{(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x})(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x})'}{1 + \mathbf{x}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x}}$$

$$(\mathbf{B} - \mathbf{xx}')^{-1} = \mathbf{B}^{-1} + \frac{(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x})(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x})'}{1 - \mathbf{x}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x}}$$

Isto pode ser usado quando há uma atualização na matriz de variância-covariância, que o critério utilizado neste trabalho utiliza. Assim fazendo  $\mathbf{a}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{a}$ , temos:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}'(\mathbf{B} + \mathbf{xx}')^{-1}\mathbf{a} &= \mathbf{a}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{a} - \mathbf{a}'\frac{\mathbf{B}^{-1}\mathbf{xx}'\mathbf{B}^{-1}}{1 + \mathbf{x}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x}}\mathbf{a} \\ &= \mathbf{a}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{a} - \frac{(\mathbf{a}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x})^2}{1 + \mathbf{x}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x}} \end{aligned}$$

e

$$\mathbf{a}'(\mathbf{B} - \mathbf{xx}')^{-1}\mathbf{a} = \mathbf{a}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{a} + \frac{(\mathbf{a}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x})^2}{1 - \mathbf{x}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x}}$$

Este procedimento corresponde ao comando "inverse update" da Proc IML do SAS.

## Apêndice 2

### Algoritmo de busca:

\*\*\*Exemplo de busca para um  $D(3 \times 3, 6, 3, 2)_p$ \*\*\*

```
options ps=1000 ls=120 nocenter;
```

```
proc iml;
```

```
*****
```

```
Define o n° de sorteios iniciais, o n° de níveis de A, B e a  
interação, n° de blocos, n° de repetições
```

```
*****
```

```
tries =1000;  
na=3;  
nb=3;  
nab=na*nb;  
nt=na+nb+na*nb;  
nbl=6;  
n=18;  
ve=1;  
va=10;  
vb=10;  
vab=10;  
vbl=10;  
vt=10;  
wa=1;  
wb=1;  
wab=1;  
ibl=(ve/vbl)*i(nbl);  
ia=(ve/va)*i(na);  
ib=(ve/vb)*i(nb);  
iab=(ve/vab)*i(na*nb);  
ig=(ve/vt)*i(nt);  
anr=n/nt;  
anp=n/nbl;  
  
nr=j(nt,1,anr);  
np=j(nbl,1,anp);
```

```

critold=1000000000;

indbl=1:nbl;
inda=1:na;
  indb=1:nb;
indab=1:nab;
indt=1:nt;

*****
Define as combinações presentes e seu número de repetições
*****

aai={1,2,3,
      1,2,3,
      1,2,3,
      1,2,3,
      1,2,3};
bbi={1,1,1,
      1,1,1,
      2,2,2,
      2,2,2,
      3,3,3,
      3,3,3};

*****
Define a rotina de intercâmbio
*****

start interch;
do bi=1 to (nbl-1);
  do pi=1 to (anp);
    do bj=(bi+1) to nbl;
      do pj=1 to (anp);
        xts=xt;
        ki=(n/nbl)*(bi-1)+pi;
        kj=(n/nbl)*(bj-1)+pj;
        xts[(ki//kj),]=xt[(kj//ki),];
        tts=t(xts)*xts+ig;
      end do;
    end do;
  end do;
end do;

```

```

l1=j (1,1,0) //t (xbl [ki,] -xbl [kj,]) //j (nt,1,0);
l2=j (1,1,0) //j (nbl,1,0) //t (xt [ki,] -xt [kj,]);
l=l1+l2;

im1=invupdt (im,l1);
im2=invupdt (im1,l2);
imu=invupdt (im2,1,-1);
imut=imu [nbl+2:nbl+nt+1,nbl+2:nbl+nt+1];

imuat=imu [nbl+2:nbl+na+1,nbl+2:nbl+na+1];
imubt=imu [nbl+na+2:nbl+na+nb+1,nbl+na+2:nbl+na+nb+1];
imuabt=imu [nbl+na+nb+2:nbl+nt+1,nbl+na+nb+2:nbl+nt+1];

critxsa = trace (imuat);
critxsb = trace (imubt);
critxsab= trace (imuabt);
critxs = wa*critxsa + wb*critxsb + wab*critxsab;

if critxs < critx then do;
  xt=xts;
  im=imu;
  critx=critxs;
end;

end;
end;
end;
end;

finish;

*****
*****Final da rotina de intercâmbio*****
*****Inicia o algoritmo*****
*****Define o delineamento de blocos*****
*****
do j=1 to nbl;
  bl=bl//j (np[j],1,j);

```

```

end;

xm=j(n,1,1);
xbl=design(bl);
blbl=t(xbl)*xbl+ibl;
*****Sorteia o delineamento inicial*****
u=uniform(j(n,tries,912));
critfin=1000000000;
*****Repete o algoritmo para "tries" delineamentos
iniciais*****
do i = 1 to tries;

  at=aa[rank(u[,i])];
  bt=bbi[rank(u[,i])];
  xa=design(at);
  xb=design(bt);
  xab=j(n,na*nb,0);

  do fa=1 to na;
    do fb=1 to nb;
      do lin=1 to n;
        xab[lin,nb*(fa-1)+fb]=xa[lin,fa]*xb[lin,fb];
      end;
    end;
  end;
  xt=xa||xb||xab;

  aa=t(xa)*xa+ia;
  bb=t(xb)*xb+ib;
  abab=t(xab)*xab+iab;
*****
*****Constrói a matriz de informação
*****
m1=t(xm)*xm||t(xm)*xbl||t(xm)*xa||t(xm)*xb||t(xm)*xab;
m2=t(xbl)*xm||blbl||t(xbl)*xa||t(xbl)*xb||t(xbl)*xab;
m3=t(xa)*xm||t(xa)*xbl||aa||t(xa)*xb||t(xa)*xab;
m4=t(xb)*xm||t(xb)*xbl||t(xb)*xa||bb||t(xb)*xab;
m5=t(xab)*xm||t(xab)*xbl||t(xab)*xa||t(xab)*xb||abab;
m=m1//m2//m3//m4//m5;

```

```

im=ginv(m);
imt=im[nbl+2:nbl+nt+1,nbl+2:nbl+nt+1];
imta=im[nbl+2:nbl+na+1,nbl+2:nbl+na+1];
imtb=im[nbl+na+2:nbl+na+nb+1,nbl+na+2:nbl+na+nb+1];
imtab=im[nbl+na+nb+2:nbl+nt+1,nbl+na+nb+2:nbl+nt+1];

*****
*****Calcula o critério*****
*****

critxa = trace(imta);
critxb = trace(imtb);
critxab= trace(imtab);

imt=im[nbl+2:nbl+nt+1,nbl+2:nbl+nt+1];

critx = wa*critxa + wb*critxb + wab*critxab;

critvec=critvec//critx;

do until (critold=critx);
  critold=critx;

*****
*****Invoca a rotina de intercâmbio*****
*****

run interch;

*****
*****Armazena o melhor delineamento*****
*****

if critx < critfin then do;
  critfin=critx;
  xfin=xt;
end;
end;
end;
end;

```

```

des = bl||xfin;

Ninc = t(xbl)*xfin;

desa=des[,2:na+1];
desb=des[,na+2:na+nb+1];
desab=des[,na+nb+2:nt+1];

desaind = desa*t(inda);
desbind = desb*t(indb);
desbabab = bl||desaind||desbind;

*****
Imprime o melhor delineamento encontrado e o critério correspondente
*****

print desbabab;
print desa;
print desb;
print desab;

print critvec;

quit;

```