

**ESCOLHA DE TRATAMENTOS E BLOCAGEM
OTIMIZADOS NA CONSTRUÇÃO DE
FATORIAIS FRACIONÁRIOS**

CLAUDINEY NUNES DE LIMA

2009

CLAUDINEY NUNES DE LIMA

**ESCOLHA DE TRATAMENTOS E BLOCAGEM
OTIMIZADOS NA CONSTRUÇÃO DE FATORIAIS
FRACIONÁRIOS**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

Orientador

Prof. Dr. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho

LAVRAS
MINAS GERAIS - BRASIL

2009

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

Lima, Claudiney Nunes de.

Escolha de tratamentos e blocagem otimizados na construção de fatoriais fracionários / Claudiney Nunes de Lima. - Lavras: UFLA, 2009.

147p. : il.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2009.

Orientador: Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho.

Bibliografia.

1. Algoritmos de intercâmbio. 2. Algoritmos de troca. 3. Delimitamentos ótimos. Fatoriais fracionários. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD - 630.2118

CLAUDINEY NUNES DE LIMA

**ESCOLHA DE TRATAMENTOS E BLOCAGEM
OTIMIZADOS NA CONSTRUÇÃO DE FATORIAIS
FRACIONÁRIOS**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

APROVADA em 07 de agosto de 2009.

Prof. Dr. Daniel Furtado Ferreira	UFLA
Prof. Dr. Fabyano Fonseca e Silva	UFV
Prof. Dr. Lucas Monteiro Chaves	UFLA
Prof. Dr. Marcelo Ângelo Cirillo	UFLA

Prof. Dr. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho

UFLA

(Orientador)

LAVRAS

MINAS GERAIS - BRASIL

DEDICO

A meus pais, Roque e Leopoldina, pela força e apoio incondicional nos momentos difíceis, por compreenderem minha ausência e por festejarem comigo esta conquista.

*Um galo sozinho não tece uma manhã
ele precisará sempre de outros galos.
De um que apanhe esse grito que ele
e o lance a outro; de um outro galo
que apanhe o grito que um galo antes
e o lance a outro; e de outros galos
que com muitos outros galos se cruzem
os fios de sol de seus gritos de galo,
para que a manhã, desde uma teia tênue,
se vá tecendo, entre todos os galos.*

(João Cabral de Melo Neto)

AGRADEÇO

À Universidade Federal de Lavras, especialmente ao Departamento de Ciências Exatas, pela oportunidade de concluir o Mestrado e o Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuária.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes), pela bolsa de estudo concedida.

À Universidade Federal de São João del-Rei, pela licença concedida para a conclusão do curso.

Ao professor e orientador Júlio, pela ajuda, amizade, atenção e orientação.

Aos professores Lucas e Osnel, pelos ensinamentos prestados no grupo de pesquisa, numa etapa fundamental para o desenvolvimento do trabalho.

Ao professor Daniel, por ser o meu *google latex*.

À minha família, especialmente os meus pais, que sempre fizeram o possível para as realizações da minha vida.

Ao Adilson, *companheiro* e braço direito em mais uma etapa da minha vida. Você é, para mim, uma pessoa mais do que especial. Obrigado por ter aguentado o meu estresse, o mau humor, a falta de paciência, etc. Realmente, você é uma das pessoas com quem eu posso contar. Saiba de uma coisa: “a vitória é nossa !”.

Aos amigos de Lavras:

À super-amiga Luciene, inseparável desde a graduação em Viçosa (1999). Considero você mais que uma irmã; de todos os que me acompanharam nessa caminhada, você é a pessoa por quem tenho o maior apreço.

À amiga Renata, pessoa especial que surgiu na minha vida, principalmente numa fase difícil em que eu não estava muito bem no doutorado. Você foi uma peça fundamental para me elevar pessoalmente; conheci um lado muito divertido e agradável da vida ao seu lado.

Ao meu amigo Helder, o meu irmão que nunca tive, a primeira e verdadeira amizade em Lavras. Obrigado pelo apoio, *design* do trabalho e por sempre estar ao meu lado.

Ao amigo Juliano, pelas horas de descontração, bobagens, entrevistas ... E principalmente pela divulgação do trabalho: você cumpriu muito bem o seu dever.

À amiga, ou melhor, a minha irmã de igreja, Ademária, pela amizade durante o curso.

Aos amigos de outras cidades:

À tia Clélia, à Maísa e à Simone, amigas de Muzambinho que, mesmo à distância, sempre torciam para o meu sucesso e me davam apoio.

Aos outros amigos de Muzambinho: Marli, Zoraid, Nanandi, Noeli, Franquinho, pela convivência e realização dos churrascos.

Ao amigo Roberto (BH), que sempre foi uma pessoa especial para mim, usando a sua famosa “sensatez”.

Ao amigo Eli, pelas mensagens e companhia no início da minha morada em Ouro Branco.

À Jô (Viçosa), pelas palavras de apoio e amizade.

Aos amigos de Sete Lagoas: Luciley e Adriane, amigos desde a infância e que sempre me acompanharam no decorrer dos estudos.

À dona Imaculada e senhor Wilba, por terem sido a minha segunda família em Lavras.

Ao Hotel Renata, que foi uma excelente acomodação no período de término da tese e que teve até serviço médico num momento em que eu estava convalescente (suspeita de gripe suína rsrs).

Aos colegas de orientação:

Rosi, valeu pela companhia no mês de julho, seria mais difícil se você não estivesse ao meu lado para podermos rir das nossas dificuldades e curtirlas. Ah, ótima parceira para congressos, me sinto totalmente estimulado em participar. Fábio “maluco”, foi legal conhecê-lo, você deu uma grande força no desenvolvimento do programa.

Aos funcionários do Departamento de Ciências Exatas: Edila, Selminha, Maria e as duas Josi do “pinto”, pela simpatia e boa vontade no atendimento.

À turma do bafão: Rosa Fada, Market, GW, Piriguete do DEX, prof. Adélia, Renatão, Tina, Julietty, Leia, Jô, Gaga, Eta Jesus, Beíça, Maria Cristina, mama Rafa, Lurdinha, Elissiva, Guiga, Anderlayne, Carlette, Mireia, Derina e Ná “Xuxu”. Foi muito bom compartilhar os momentos de diversão com vocês, foi uma terapia durante o doutorado.

E aos demais que não foram citados aqui mas, direta ou indiretamente, contribuíram para a elaboração deste trabalho.

A Deus, por tudo.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS	i
LISTA DE FIGURAS	iv
RESUMO	vi
ABSTRACT	vii
1 INTRODUÇÃO	1
2 REFERENCIAL TEÓRICO	7
2.1 Estrutura dos fatores	7
2.1.1 Fatoriais fracionários	7
2.1.2 Fatoriais fracionários 2^k	7
2.1.3 Meia fração dos delineamentos fatoriais fracionários 2^k : codifi- cação dos níveis dos fatores e dos tratamentos	8
2.1.4 Meia fração dos delineamentos fatoriais fracionários 2^k : concei- tos básicos e definições	9
2.1.5 Estimativas dos efeitos e dos aliases	11
2.1.6 Combinação linear dos aliases	13
2.1.7 Análise de um fatorial 2^k e de sua fração	14
2.1.8 Critérios de seleção de delineamentos: resolução	21
2.1.9 Critérios de seleção de delineamentos: aberração	24
2.1.10 Fatoriais fracionários 2^{k-p}	29
2.1.11 Etapas para a construção de um delineamento 2^{k-p}	30
2.1.12 <i>Foldover</i> de um fatorial fracionário	33
2.1.13 Fatoriais fracionários 3^{k-p}	36
2.1.14 Outros delineamentos fatoriais fracionários 3^{k-p}	40
2.1.15 O fatorial fracionário 3^{k-1} de máxima resolução	41
2.1.16 Delineamento composto central	41

2.1.17 Delineamentos de Box-Behnken	43
2.1.18 Eficiência como critério para construção de delineamentos	45
2.2 Estrutura das unidades experimentais	48
2.2.1 Delineamentos em blocos incompletos	48
2.2.2 Delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados (PBIB)	51
2.2.3 Blocagem de delineamentos fatoriais fracionários em modelos de superfície de resposta	53
2.2.4 Notações e definições	55
3 METODOLOGIA	61
3.1 Modelo para seleção dos tratamentos e critérios alfabéticos de oti- malidade	61
3.2 Implementação do algoritmo <i>exchange</i>	62
3.3 Passos do algoritmo <i>exchange</i>	63
3.4 O algoritmo para blocagem de delineamentos de superfície de res- posta	65
3.4.1 O modelo estatístico	65
3.4.2 O algoritmo <i>interchange</i> - construção dos fatoriais fracionários em blocos incompletos	66
3.4.3 Passos do algoritmo <i>interchange</i>	67
3.4.4 O algoritmo <i>S-interchange</i> - construção dos fatoriais fracionários em BIB do tipo <i>resolvable</i>	71
3.4.5 O modelo estatístico para análise de delineamentos <i>resolvable</i>	71
3.4.6 Passos do algoritmo <i>S-interchange (resolvable)</i>	72
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	75
4.1 Escolha de tratamentos	75
4.2 Escolha de tratamentos e blocagem	80
4.2.1 Delineamento A-ótimo	80

4.2.2 Delineamento D-ótimo	90
4.3 Eficiência dos delineamentos otimizados	96
4.4 Blocagem e superblocos	103
5 CONCLUSÕES	122
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	123
APÊNDICES	129
ANEXO	145

LISTA DE TABELAS

1	Codificações usuais para identificação dos níveis dos fatores (A e B) e dos tratamentos em um delineamento 2^2	9
2	Delineamento fatorial 2^3 com os fatores A, B e C e suas interações	10
3	Procedimento para estimação dos efeitos principais e das interações de dois fatores, a partir da junção das duas meias frações de um experimento 2^3	14
4	Delineamento 2^4 de um experimento fictício com fatores A, B, C e D e variável resposta observada Y	15
5	Quadro-resumo da análise de variância do experimento fictício	18
6	Delineamento 2^{4-1} com a relação definidora $I = ABCD$ e respectivas observações no experimento fictício	19
7	Três escolhas de geradores para o delineamento 2_{IV}^{7-2} com as respectivas estruturas de aliases das interações de dois fatores	25
8	Delineamentos fatoriais fracionários 2_{IV}^{7-2} com os fatores: A, B, C, D, E, F e G obtidos das 3 escolhas de geradores da Tabela 7	26
9	Delineamento saturado 2_{III}^{7-4} com os geradores $D = AB$, $E = AC$, $F = BC$ e $G = ABC$ com uma variável resposta fictícia (Y)	32
10	Delineamento <i>foldover</i> 2_{III}^{7-4} com os geradores $D = -AB$, $E = AC$, $F = BC$ e $G = ABC$ com uma variável resposta fictícia (Y)	33

11	Delineamento D-ótimo com 15 tratamentos selecionados para efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores e o delineamento composto central (DCC: $2^k + 2k + 1$) com ponto axial sendo $\alpha = 1$	76
12	Delineamento A-ótimo encontrado pelo algoritmo de busca otimizado para efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores e atribuição dos tratamentos às combinações dos níveis dos fatores do delineamento otimizado e o de Box-Behnken	81
13	Delineamento D-ótimo encontrado pelo algoritmo de busca otimizado para efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores e atribuição dos tratamentos às combinações dos níveis dos fatores do delineamento otimizado e o de Box-Behnken	91
14	Valores dos critérios A e D para os delineamentos otimizados segundo os critérios A e D e do delineamento de Box-Behnken. (Situações em que se considera ou não a estrutura em blocos das unidades experimentais.)	97
15	Delineamentos otimizados encontrados pelo algoritmo de busca com o ponto central fixado em cada um dos blocos	99
16	Valores dos critérios A e D dos delineamentos otimizados com os pontos centrais fixados em cada um dos blocos	100
17	Tratamentos selecionados pelo algoritmo <i>exchange</i> aplicados ao sistema triplo de Steiner e delineamentos otimizados	104

18	Delineamento ótimo balanceado do tipo <i>resolvable</i> como uma solução ao problema de Kirkman e o delineamento otimizado pelo algoritmo <i>S-interchange</i> pelo critério A com os fatores (A,B,C) em 7 repetições ou superblocos (REP) em 35 blocos de tamanho 3	105
19	Delineamento ótimo balanceado do tipo <i>resolvable</i> como uma solução ao problema de Kirkman e o delineamento otimizado pelo algoritmo <i>S-interchange</i> pelo critério D com os fatores (A,B,C) em 7 repetições ou superblocos (REP) em 35 blocos de tamanho 3	109
20	Valores dos traços e determinantes da matriz de covariâncias dos delineamentos: sistema triplo e otimizados	120

LISTA DE FIGURAS

1	Modelo geral de um processo ou sistema	2
2	Representação geométrica da fração 1/2 do delineamento 2^3 .	10
3	Delineamento 2^4 do experimento fictício	15
4	Gráfico de probabilidade normal dos efeitos do experimento fictício	17
5	O delineamento 2^{4-1} do experimento fictício	19
6	As três frações um terço do delineamento 3^3 com a relação definidora $I = AB^2C^2$	38
7	Delineamento composto central para $k = 3$ fatores, 6 pontos axiais α e um ponto central	42
8	Duas representações do delineamento de Box-Behnken para três fatores	44
9	Delineamento de Box-Behnken com $k = 3$ fatores e um ponto central	45
10	Representação do grafo do delineamento A-ótimo com 25 tra- tamentos (vértices) - (Os tratamentos que ocorrem em um mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.)	85
11	Representação do grafo do delineamento de Box-Behnken com 25 tratamentos (vértices) - (Os tratamentos que ocorrem em um mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.)	86
12	Representação dos grafos do delineamento de Box-Behnken com 25 tratamentos - (Os tratamentos na forma estruturada são representados pelos quadriláteros.)	88

13	Representação dos grafos do delineamento A-ótimo com 25 tratamentos - (Os tratamentos na forma estruturada são representados pelos quadriláteros. O quadrilátero em destaque no bloco II indica a repetição do ponto central.)	89
14	Representação do grafo não regular para o delineamento D-ótimo com 25 tratamentos (vértices) - (Os tratamentos que ocorrem em um mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.)	94
15	Representação dos grafos do delineamento D-ótimo com 25 tratamentos - (Os tratamentos na forma estruturada são representados pelos quadriláteros. O quadrilátero em destaque no bloco III indica a repetição do ponto central.)	95
16	Representação do grafo regular para o $\xi(15,35,3,7)$ em que cada tratamento é um ponto (vértice) - (Os tratamentos que ocorrem num mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.)	119

RESUMO

LIMA, Claudiney Nunes de. **Escolha de tratamentos e blocagem otimizados na construção de fatoriais fracionários**. 2009. 147p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuária) - Universidade Federal de Lavras, Lavras. MG*

Este trabalho trata da implementação de algoritmos de simples troca do tipo *exchange* (trocas) e *interchange* (intercâmbio). Foram empregados critérios de eficiência para a escolha de tratamentos e para a blocagem de fatoriais fracionários. Os delineamentos encontrados foram comparados a alternativas usuais da literatura. Em todos os casos, os delineamentos A-ótimos ou D-ótimos foram mais eficientes que delineamentos construídos usando outros métodos tais como considerações combinatórias. Delineamentos *resolvable* foram também encontrados e um exemplo de comparação com um Sistema Triplo de Steiner com 15 tratamentos é apresentado. Os algoritmos resultantes são flexíveis e recomenda-se que sejam utilizados por pesquisadores práticos para construir alternativas aos fatoriais fracionários comumente encontrados na literatura. Isso vale tanto para estágios iniciais da pesquisa (escolha de tratamentos) quanto para fases mais adiantadas de otimização usando modelos de superfície de resposta.

Palavras-chave: Algoritmos de intercâmbio. Algoritmos de troca. Delineamentos ótimos. Fatoriais fracionários.

***Orientador:** Prof. Dr. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho - UFLA.

ABSTRACT

LIMA, Claudiney Nunes. **Optimal treatment choice and blocking for the construction of fractional factorial designs.** 2009. 147p. Thesis (Doctoral Degree in Statistics and Agriculture Experimentation) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.*

This work deals with implementing exchange and interchange algorithms. Efficiency based optimality criteria were used to find optimal fractional factorials for response surface designs. Both treatment choice and blocking were considered. Designs found for each situation were compared to alternatives from literature. In all cases A-optimal or D-optimal designs were more efficient than designs constructed using other methods like combinatorial considerations. Resolvable designs were also found and compared to a Steiner triple system for 15 treatments. Resulting algorithms are flexible and should be used by applied researchers as alternatives to fractional factorials. This is also valid for initial steps of research as well as for fitting response surfaces in optimization steps.

Key-words: exchange algorithms, interchange algorithms, fractional factorials, optimal designs.

***Adviser:** Prof. Dr. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho - UFLA.

1 INTRODUÇÃO

Planejar experimentos é, sem dúvida, uma das mais importantes fases do processo de investigação científica. Quando cuidadosamente executado, o planejamento cria uma estrutura bem definida para o experimento, seja em termos dos fatores em estudo, seja das unidades, justificando a definição de um modelo estatístico. Dessa forma, o produto final do planejamento, que é o conjunto de dados, poderá ser tratado com base em resultados teóricos que permitem implementação computacional e interpretação mais simples.

Em todas as áreas científicas e campos de investigação é costume executarem-se experimentos para se analisar o comportamento de sistemas e processos. Um experimento é a realização de um procedimento em que algumas características explicativas são controladas pelo experimentador. Em um experimento, são testadas novas condições para as variáveis causais - chamadas fatores - de um processo ou sistema, com o objetivo de se observarem e de se identificarem as variações provocadas nas variáveis efeito - chamadas respostas.

Um processo ou sistema, que pode ser representado pelo modelo apresentado na Figura 1, geralmente pode ser visualizado como uma combinação de máquinas, métodos, pessoas e outros recursos que transformam uma entrada (material) em uma saída, que tem uma ou mais respostas observadas. As variáveis x_1, x_2, \dots, x_p do processo são controladas, enquanto que outras variáveis z_1, z_2, \dots, z_q são não controladas.

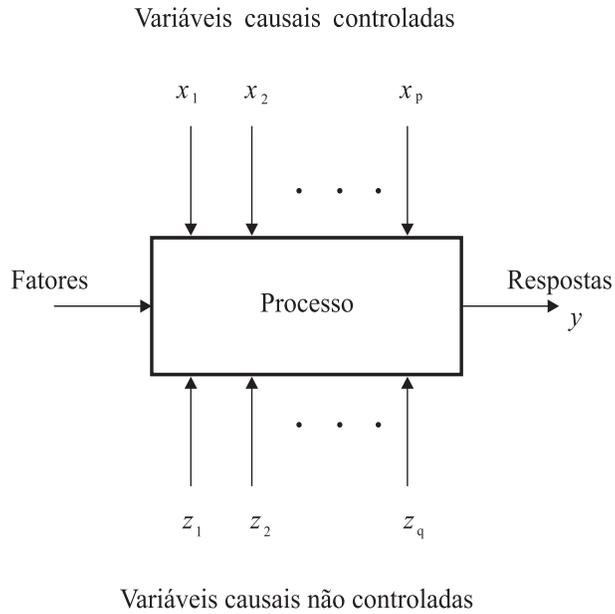


FIGURA 1 Modelo geral de um processo ou sistema

Em experimentos fatoriais estuda-se, simultaneamente, mais de um fator, e o número de tratamentos geralmente é elevado por ser a combinação das categorias dos fatores (fatoriais completos), que, por sua vez, representam os tipos ou níveis escolhidos para serem estudados - fatores qualitativo e quantitativo, respectivamente.

Limitações diversas, como disponibilidade de material experimental, de recursos financeiros, de laboratórios e de equipamentos disponíveis, dentre outros, podem exigir ensaios com uma quantidade reduzida de parcelas ou unidades experimentais. Essa e outras justificativas também podem levar à redução do número de tratamentos. O uso de apenas uma parte dos tratamentos de um fatorial completo traz a vantagem de economia de recursos e de tempo, mas apresenta a desvantagem de que efeitos principais e interações podem estar confundidos, isto é, não podem ser estimados separadamente.

Muitas vezes, esse problema é de pouco interesse dos pesquisadores nas interações de ordens elevadas devido ao fato de quase sempre serem irrelevantes e/ou de difícil interpretação prática.

O pesquisador, então, pode optar por uma quantidade de tratamentos possível, definindo uma fração do fatorial completo ($1/2$, $1/3$ ou outras). O problema, nesse caso, consiste em escolher o grupo de tratamentos que irá compor o fatorial fracionário pretendido de forma a otimizar alguma propriedade estatística; por exemplo, minimizar a variância generalizada dos estimadores dos parâmetros.

Mesmo que seja possível repetir todos os tratamentos, frequentemente ocorrem situações em que não é possível alocar os tratamentos em um só bloco de unidades experimentais homogêneas. Em ensaios agrícolas, por exemplo, é difícil encontrarem-se áreas experimentais que sejam homogêneas em toda a sua extensão. Dessa forma, o delineamento em blocos completos perde a sua eficiência, visto que a heterogeneidade dentro dos blocos tende a aumentar o erro experimental, dificultando a obtenção de estimativas precisas.

A utilização de blocos menores e de delineamentos em blocos incompletos é uma alternativa adequada nesses casos, pois a blocagem é um método efetivo para reduzir-se as variações sistemáticas e, portanto, ela aumenta a precisão da estimação dos efeitos de interesse. No entanto, o problema consiste em como escolher quais tratamentos devem ser alocados em cada um dos blocos.

Do ponto de vista estatístico, tanto a escolha dos tratamentos quanto a alocação dos tratamentos aos blocos podem tornar um delineamento mais eficiente do que outro. Essa eficiência pode ser mensurada por meio de

alguns critérios de otimalidade, que podem ser implementados em algoritmos de busca. Dessa forma, os planos experimentais resultantes dessa busca são designados como ótimos.

O problema da escolha de tratamentos consiste em selecionar, de um conjunto N tratamentos candidatos, um subconjunto com apenas $v < N$ tratamentos a serem avaliados, de tal maneira que o delineamento resultante seja melhor possível em algum sentido. Em geral, para modelos lineares fixos, isso se reduz a estudar as propriedades da matriz $X'X$. Vários algoritmos computacionais para a construção de delineamentos com v tratamentos estão disponíveis na literatura, mas uma das classes mais importantes nessa direção são os algoritmos de troca (EA, do inglês *exchange algorithm*), dentre os quais podem ser citados: EA, atribuído a Wynn (1970); EA, devido a Fedorov (1972); EA, chamado de DETMAX, elaborado por Mitchell (1974); EA, atribuído a Cook & Nachtsheim (1980); e, por fim, EA, atribuído a Atkinson & Donev (1989). Os quatro primeiros algoritmos foram implementados no software SAS (proc optex). A esse respeito, Nguyen & Miller (1992) apresenta uma revisão dos algoritmos citados anteriormente, sugerindo uma implementação melhorada do EA de Fedorov (1972), comparando-o com os demais.

A teoria de delineamentos ótimos tornou-se um importante componente no desenvolvimento geral do delineamento experimental para modelos de regressão. A principal característica dessa teoria é a percepção do delineamento como uma medida de probabilidade com forte ênfase na redução da variância com respeito ao modelo ajustado. Dentre os critérios de otimalidade que se baseiam na redução da variância, destacam-se o A e o D.

O critério D-ótimo minimiza a variância generalizada dos coeficientes a estimar com o modelo, enquanto o A-ótimo minimiza a variância média dos estimadores dos parâmetros.

Desde Kiefer (1959), procura-se comparar delineamentos utilizando-se esses critérios. 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. Uma lacuna importante na literatura dos algoritmos de busca é a obtenção de delineamentos *resolvable*¹. Isso porque, em algumas situações conhecidas, em que as unidades experimentais são estruturadas (por exemplo, parcelas subdivididas ou sistemas triplos de Steiner), algoritmos de simples troca resultam frequentemente em delineamentos sub-ótimos e alternativas, como critérios bayesianos, têm sido experimentadas (Jones & Goos, 2009).

Nesse sentido, os objetivos deste trabalho podem ser assim resumidos:

1. implementar algoritmos de simples troca tanto para a escolha de tratamentos para a construção de um fatorial fracionário quanto para a sua alocação em blocos incompletos;
2. implementar algoritmos gerais que funcionem para quaisquer quantidades de tratamentos, de blocos e de tamanhos de blocos, possibilitando ao pesquisador aplicado uma forma flexível de construir o seu experimento;

¹Por não haver, em língua portuguesa, uma expressão que traduza adequada e fielmente o sentido que o termo assume, optou-se por manter o vocábulo na sua língua de origem.

3. comparar alguns dos delineamentos resultantes da implementação desses algoritmos a soluções consagradas na literatura, em especial para situações mistas que envolvam tanto escolha de tratamentos quanto blocagem e delineamentos *resolvable*;
4. discutir a obtenção de delineamentos ótimos em termos de eficiência estatística para ensaios com estrutura fatorial em que o interesse seja estimar os efeitos principais e interações de baixa ordem do modelo fatorial (modelo de superfície de resposta).

Para a consecução desses objetivos, este trabalho encontra-se organizado em mais 4 seções. A seção 2 apresenta uma revisão sobre estratégias ótimas para estabelecer a estrutura dos fatores e das unidades experimentais, iniciando com a teoria dos fatoriais fracionários de dois e três níveis, passando por alguns critérios de seleção de delineamentos para a construção das frações e finalizando com a teoria dos blocos incompletos e blocagem em planos fatoriais fracionários. Na seção 3, são apresentadas as formas de implementação dos algoritmos *exchange* e *interchange*, bem como os modelos de análise e critérios de otimalidade empregados em cada caso. A seção 4 ilustra alguns resultados e discussões dos delineamentos otimizados comparados a delineamentos já conhecidos. Por fim, na seção 5, são apresentadas as principais conclusões.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Estrutura dos fatores

2.1.1 Fatoriais fracionários

Os experimentos fatoriais fracionários - conhecidos também como fatoriais incompletos - como o próprio nome sugere, são experimentos em que apenas uma fração dos tratamentos é analisada, sob uma estrutura de confundimento.

Dependendo da fração escolhida para análise, a obtenção da estrutura de confundimento torna-se mais complexa, de tal forma que essa complexidade é classificada segundo o grau de resolução do fatorial fracionário. Com base nessas premissas, este trabalho apresenta discussões de métodos, descritos nas seções seguintes, destinados a obter diferentes frações para qualquer número de fatores.

Nesta seção, é apresentada uma revisão da teoria e dos principais conceitos dos fatoriais fracionários, tomando-se por base principalmente Box & Hunter (1961); Box & Draper (1987); Wu & Hamada (2000); Montgomery (2001) e Box et al. (2005).

2.1.2 Fatoriais fracionários 2^k

Os experimentos fatoriais 2^k fracionários são muito empregados nos estágios iniciais de experimentação, quando há um número muito grande de fatores a serem investigados, sendo, portanto, desejável avaliar, de forma mais superficial e com o mínimo de tempo e custos, os efeitos desse grande número de fatores sobre a variável resposta. Uma suposição razoável é a de que apenas alguns poucos fatores exerçam efeitos significativos sobre a variável resposta, sendo, então, o objetivo principal do experimento a identifica-

ção desses fatores, os quais deverão ser analisados de forma mais detalhada em estágios posteriores do estudo que está sendo realizado.

Para que se possa compreender melhor a importância dos experimentos fatoriais fracionários 2^k , deve-se destacar o fato de que, em qualquer processo experimental, é fundamental manter um equilíbrio entre o volume de informação obtida e o custo envolvido. Em um delineamento 2^k , por exemplo, à medida que o número de k fatores aumenta, também aumenta a quantidade de informações obtidas por meio do experimento. No entanto, para que essas informações possam ser produzidas, é necessário avaliar um grande número de tratamentos, o que pode aumentar sobremaneira o custo do experimento, a ponto de inviabilizá-lo.

2.1.3 Meia fração dos delineamentos fatoriais fracionários 2^k : codificação dos níveis dos fatores e dos tratamentos

Nos delineamentos fatoriais 2^k , os níveis dos fatores são geralmente identificados por meio do emprego de uma codificação. Uma das formas de codificação normalmente utilizada consiste em identificar como “baixo” e “alto” os dois níveis do fator. Quando o fator é qualitativo, os tipos baixo e alto são escolhidos arbitrariamente. De outro modo, quando o fator é quantitativo, o nível baixo é aquele de menor valor e, conseqüentemente, o nível alto é o de maior valor.

Além desse, existem outros tipos de codificação utilizados para identificar os níveis dos fatores de um delineamento fatorial 2^k . Algumas dessas codificações, para um experimento 2^2 , são apresentadas na Tabela 1.

TABELA 1 Codificações usuais para identificação dos níveis dos fatores (A e B) e dos tratamentos em um delineamento 2^2

Codificação 1		Codificação 2		Codificação 3		Codificação 4
A	B	A	B	A	B	
Baixo	Baixo	-	-	0	0	(1)
Alto	Baixo	+	-	1	0	a
Baixo	Alto	-	+	0	1	b
Alto	Alto	+	+	1	1	ab

Observe-se, nessa tabela, que a codificação 1 foi citada anteriormente, tendo sido repetida para funcionar como referência para a definição das novas simbologias. Note-se, também, que, segundo as codificações 2 e 3, o nível baixo de cada fator é representado pelos símbolos “-” e “0”, enquanto que o nível alto é identificado por “+” e “1”. Já na codificação 4, quando o fator está no nível alto, esse fato é registrado pela presença da forma minúscula da letra, que identifica o fator e, quando o fator está no nível baixo, essa situação é simbolizada pela ausência da letra que representa o fator. De acordo com essa codificação, o tratamento em que todos os fatores estão no nível baixo é representado pelo símbolo (1).

Além disso, é também usual representar por (1), a , b e ab os totais de todas as medidas da variável resposta correspondentes aos tratamentos identificados por esses símbolos.

2.1.4 Meia fração dos delineamentos fatoriais fracionários 2^k : conceitos básicos e definições

Uma fração um meio de um delineamento 2^k contém 2^{k-1} tratamentos e é, em geral, chamada de delineamento fatorial fracionário 2^{k-1} .

A Tabela 2 mostra os sinais positivo e negativo para o delineamento 2^3 .

TABELA 2 Delineamento fatorial 2^3 com os fatores A, B e C e suas interações

Combinação dos tratamentos	Efeitos do fatorial								Frações
	I	A	B	C	AB	AC	BC	ABC	
a	+	+	-	-	-	-	+	+	Principal
b	+	-	+	-	-	+	-	+	
c	+	-	-	+	+	-	-	+	
abc	+	+	+	+	+	+	+	+	
ab	+	+	+	-	+	-	-	-	Alternada
ac	+	+	-	+	-	+	-	-	
bc	+	-	+	+	-	-	+	-	
(1)	+	-	-	-	+	+	+	-	

Suponha-se que se escolham os quatro tratamentos a, b, c e abc como a fração um meio. Esses tratamentos constituem a metade superior da Tabela 2. A Figura 2(a) dá uma visão geométrica do delineamento.

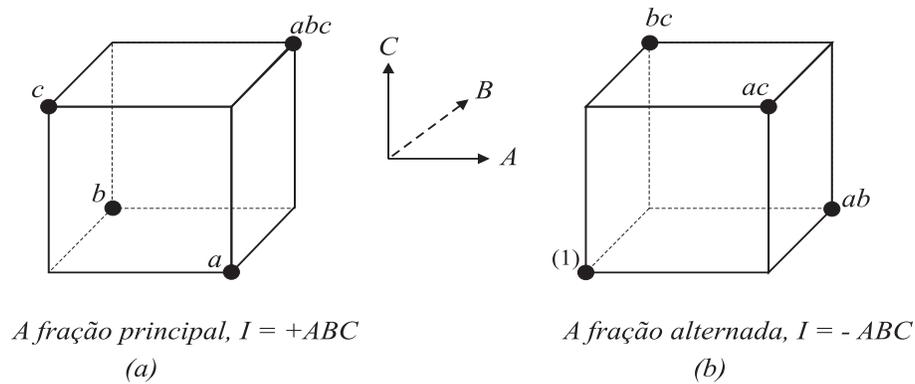


FIGURA 2 Representação geométrica da fração $1/2$ do delineamento 2^3

Note-se que o delineamento 2^{3-1} é formado pela seleção apenas dos tratamentos que resultam em um sinal positivo no efeito ABC ; assim, ABC é chamado de **gerador** dessa fração particular. Além disso, o elemento identidade I tem também o sinal positivo para os quatro tratamentos, de modo que se possa chamar

$$I = ABC$$

de **relação definidora** (ou relação de definição) para o delineamento, ou seja, a relação definidora para um fatorial fracionário é o conjunto de todas as colunas que são iguais à coluna identidade I .

2.1.5 Estimativas dos efeitos e dos aliases

Os tratamentos dos delineamentos 2^{3-1} resultam em três graus de liberdade associados aos efeitos principais, cujas estimativas são obtidas pela Tabela 2 como

$$l_A = \frac{1}{2}[a - b - c + abc]; \quad l_B = \frac{1}{2}[-a + b - c + abc];$$

$$l_C = \frac{1}{2}[-a - b + c + abc].$$

Pode-se verificar, também, que as estimativas das interações de dois fatores são

$$l_{BC} = \frac{1}{2}[a - b - c + abc]; \quad l_{AC} = \frac{1}{2}[-a + b - c + abc];$$

$$l_{AB} = \frac{1}{2}[-a - b + c + abc].$$

Assim, a combinação linear de observações na coluna A , ou seja, l_A , dá a estimativa de $A + BC$. Analogamente, l_B dá a estimativa de $B + AC$ e l_C , a estimativa $C + AB$. Dois ou mais efeitos que tenham a propriedade de que as colunas dos seus respectivos fatores sejam iguais, são chamados **aliases** (ou associados, ou confundidos). No delineamento 2^{3-1} , A e BC são aliases, bem como B e AC ; C e AB . Em muitas situações práticas, é possível selecionar a fração de modo que os efeitos principais e as interações de ordem inferior de interesse sejam aliases das interações de ordem superior (que são, geralmente, desprezíveis).

A forma fácil de conhecer a estrutura de aliases consiste em utilizar a relação definidora do delineamento. A multiplicação de qualquer coluna pela relação definidora dá origem aos aliases do efeito identificado pela coluna

considerada, após ser tomado o resto da divisão por 2 (operação mod 2) do expoente de cada letra que identifica o nível dos fatores do experimento. Por exemplo: o aliás do efeito A é gerado da seguinte forma:

$$A = A \cdot I = A \cdot ABC = A^2BC = BC.$$

De modo análogo, os aliases para B e C são:

$$B = B \cdot I = B \cdot ABC = AB^2C = AC;$$

$$C = C \cdot I = C \cdot ABC = ABC^2 = AB.$$

Suponha-se, agora, que tivesse sido escolhida a outra fração um meio, ou seja, os tratamentos da Tabela 2 associados ao sinal negativo em ABC , delineamento esse mostrado na Figura 2b. A relação definidora agora é $I = -ABC$ e os aliases são $A = -BC$, $B = -AC$ e $C = -AB$. Dessa forma, os efeitos A , B e C , com essa fração particular, realmente estimam $A - BC$ (l'_A), $B - AC$ (l'_B) e $C - AB$ (l'_C). Na prática, usualmente, não importa qual fração se escolhe. A fração com o sinal positivo na relação definidora é comumente chamada de **fração principal**; a outra fração é chamada de **fração alternada**. Pode-se dizer que ambas as frações consideradas acima pertencem à mesma família, isto é, as duas meias frações formam um delineamento 2^3 completo, como pôde ser visualizado pela Tabela 2.

2.1.6 Combinação linear dos aliases

Algumas vezes usamos sequências de delineamentos fatoriais fracionários para estimar efeitos. Suponha-se que se tenha executado a fração principal do delineamento 2^{3-1} já se sabendo que cada efeito principal é aliás com uma interação de dois fatores. Suponha-se, a essa altura, que as interações de dois fatores sejam desprezíveis. Se esse for o caso, então o delineamento 2^{3-1} produziu estimativas para os três efeitos principais A , B e C . No entanto, após ser executada a fração principal, se houver incerteza sobre as interações, é possível estimá-las, executando-se a fração alternada. A junção dos resultados obtidos com a realização de cada uma das frações levará à obtenção de um experimento 2^3 completo em dois blocos de 2^{3-1} tratamentos, com a interação ABC confundida com os blocos. Essa junção permitirá que cada efeito, exceto a interação ABC , seja estimado individualmente. Para que se possa perceber a veracidade dessa afirmação, considere-se a combinação linear $\frac{1}{2}(l_A + l'_A)$:

$$\frac{1}{2}(l_A + l'_A) = \frac{1}{2}(A + BC + A - BC) = A.$$

Essa combinação linear permite a estimação do efeito isolado do fator A . De modo análogo, $\frac{1}{2}(l_A - l'_A)$ fornece uma estimativa do efeito da interação BC .

A Tabela 3 apresenta o procedimento para estimação, isoladamente, dos efeitos principais e dos efeitos das interações de dois fatores, a partir da junção das duas meias frações de um experimento 2^3 .

TABELA 3 Procedimento para estimação dos efeitos principais e das interações de dois fatores, a partir da junção das duas meias frações de um experimento 2^3

Efeito i	A partir de $\frac{1}{2}(l_i + l'_i)$	A partir de $\frac{1}{2}(l_i - l'_i)$
i = A	$\frac{1}{2}(A + BC + A - BC) = A$	$\frac{1}{2}[(A + BC - (A - BC))] = BC$
i = B	$\frac{1}{2}(B + AC + B - AC) = B$	$\frac{1}{2}[(B + AC - (B - AC))] = AC$
i = C	$\frac{1}{2}(C + AB + C - AB) = C$	$\frac{1}{2}[(C + AB - (C - AB))] = AB$

2.1.7 Análise de um fatorial 2^k e de sua fração

Uma única repetição de um delineamento fatorial 2^k é chamada de fatorial não repetido. Com uma única repetição, não existe uma estimativa do erro (ou erro puro). Uma abordagem para analisar-se um fatorial não repetido consiste em assumir-se que certas interações de maior ordem (envolvendo mais fatores) sejam desprezíveis e, dessa forma, pode-se combiná-las como uma estimativa do erro. Na maioria das situações, o princípio da escassez de efeitos se aplica, ou seja, o sistema é, usualmente, dominado pelos efeitos principais e interações de ordem inferior.

Considere-se, por exemplo, um experimento fatorial fictício 2^4 , com os fatores A, B, C e D, juntamente com a variável resposta Y . A Figura 3 dá a visão geométrica do experimento e a Tabela 4 apresenta os dados dos 16 tratamentos.

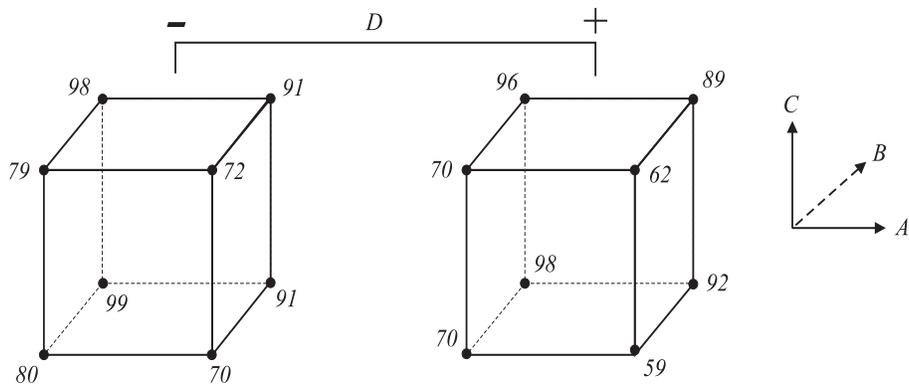


FIGURA 3 Delineamento 2^4 do experimento fictício

TABELA 4 Delineamento 2^4 de um experimento fictício com fatores A, B, C e D e variável resposta observada Y

Tratamentos	Fatores				Y
	A	B	C	D	
(1)	-	-	-	-	80
a	+	-	-	-	70
b	-	+	-	-	99
ab	+	+	-	-	91
c	-	-	+	-	79
ac	+	-	+	-	72
bc	-	+	+	-	98
abc	+	+	+	-	91
d	-	-	-	+	70
ad	+	-	-	+	59
bd	-	+	-	+	98
abd	+	+	-	+	92
cd	-	-	+	+	70
acd	+	-	+	+	62
bcd	-	+	+	+	96
abcd	+	+	+	+	89

Os sinais nas colunas da Tabela 4 podem ser usados para estimarem-se os efeitos dos fatores. Como ilustração, a estimativa do efeito de A é:

$$\hat{A} = \frac{1}{8}[a + ab + ac + abc + ad + abd + acd + abcd - (1) - b - c - d - bc - bd - cd - bcd] = -8,00.$$

Da mesma forma, para os demais efeitos, tem-se o seguinte conjunto completo das estimativas:

$$\begin{array}{ll} \hat{A} & = -8,00 & \widehat{BD} & = 4,50 \\ \hat{B} & = 24,00 & \widehat{CD} & = -0,25 \\ \hat{C} & = -0,25 & \widehat{ABC} & = -0,75 \\ \hat{D} & = -5,50 & \widehat{ABD} & = 0,50 \\ \widehat{AB} & = 1,00 & \widehat{ACD} & = -0,25 \\ \widehat{AC} & = 0,75 & \widehat{BCD} & = -0,75 \\ \widehat{AD} & = 0,00 & \widehat{ABCD} & = -0,25 \\ \widehat{BC} & = -1,25 & & \end{array}$$

Um método preliminar para identificar-se a significância dos efeitos em um experimento 2^k consiste na construção do gráfico de probabilidade normal das estimativas dos efeitos, supondo-se que os erros tenham distribuição normal. Se nenhum efeito é significativo, então as estimativas comportar-se-ão como uma amostra aleatória extraída de uma distribuição normal com média zero, e os efeitos plotados localizar-se-ão aproximadamente ao longo de uma reta. Assim, os efeitos que não se localizarem sobre a reta serão fatores significantes.

Lenth (1989) apresenta um procedimento alternativo ao gráfico de probabilidade normal para se avaliar a significância dos efeitos. A Figura 4 mostra o gráfico de probabilidade normal das estimativas dos efeitos do experimento fictício:

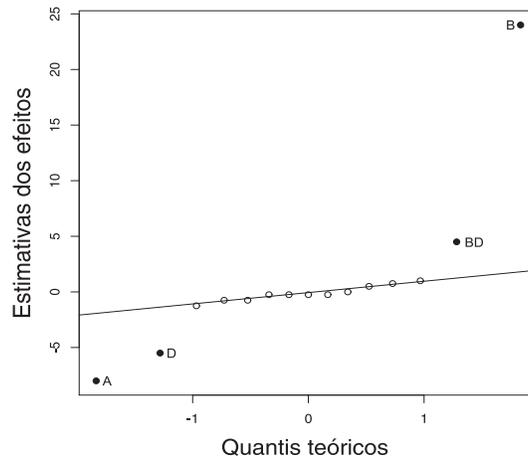


FIGURA 4 Gráfico de probabilidade normal dos efeitos do experimento fictício

Os efeitos principais A, B e D e a interação BD são considerados significativos, uma vez que se localizam distantes da reta que passa pelos outros pontos, conclusão essa reforçada pela análise de variância na Tabela 5 . Note-se que, na análise de variância, foram combinadas as interações de três e quatro fatores para formar o erro experimental (resíduo), admitindo-se que, em vista dos valores obtidos do conjunto das estimativas dos efeitos, os efeitos principais e interações de dois fatores são de maior interesse do pesquisador. Uma maneira de se obter uma estimativa independente do erro experimental, chamado de “erro puro”, é a adição de pontos centrais no delineamento 2^k , que consistem em n_c repetições do nível intermediário de cada fator. Uma razão importante para se adicionarem pontos centrais

repetidos é que eles não causam impacto nas estimativas usuais dos efeitos em um delineamento 2^k .

TABELA 5 Quadro-resumo da análise de variância do experimento fictício

FV	GL	SQ	QM	F	Pr>F
A	1	256	256	213,33	0,00
B	1	2304	2304	1920	0,00
C	1	0,25	0,25	0,21	0,67
D	1	121	121	100,83	0,00
AB	1	4,00	4,00	3,33	0,13
AC	1	2,25	2,25	1,88	0,23
AD	1	0,00	0,00	0,00	1,00
BC	1	6,25	6,25	5,21	0,07
BD	1	81,00	81,00	67,50	0,00
CD	1	0,25	0,25	0,21	0,67
Resíduo	5	6,00	1,20		
Total	15	2781			

Para ilustrar o uso da fração um meio, suponha-se que, por economia, o pesquisador tivesse decidido utilizar apenas oito tratamentos do experimento fictício com $I = ABCD$ para analisar os quatro fatores: A, B, C e D. O delineamento seria construído escrevendo-se um 2^3 nos fatores A, B e C e fazendo-se, então, $D = ABC$.

A Tabela 6 apresenta o delineamento 2^{4-1} com sua variável resposta (Y) e, na Figura 5, tem-se a sua representação geométrica.

TABELA 6 Delineamento 2^{4-1} com a relação definidora $I = ABCD$ e respectivas observações no experimento fictício

Tratamentos	Fatores				Y
	A	B	C	D	
(1)	-	-	-	-	80
ad	+	-	-	+	59
bd	-	+	-	+	98
ab	+	+	-	-	91
cd	-	-	+	+	70
ac	+	-	+	-	72
bc	-	+	+	-	98
abcd	+	+	+	+	89

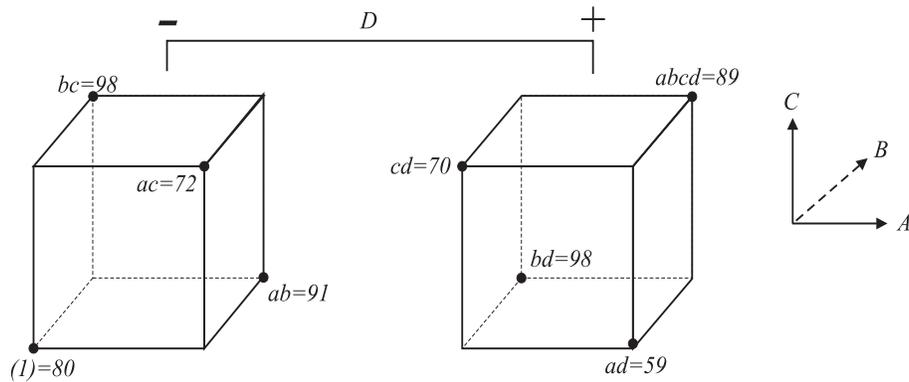


FIGURA 5 O delineamento 2^{4-1} do experimento fictício

Pode-se observar que o nível do fator D em cada tratamento é o produto dos sinais das colunas A , B e C . Usando-se a relação definidora, os efeitos principais têm por aliases as interações de três fatores; note-se que o aliás de A é:

$$A \cdot I = A \cdot ABCD$$

$$A = A^2BCD$$

$$A = BCD.$$

Analogamente,

$$B = ACD$$

$$C = ABD$$

$$D = ABC.$$

As interações de dois fatores são aliases umas das outras. Por exemplo: o aliás de AB é CD :

$$AB \cdot I = AB \cdot ABCD$$

$$AB = A^2B^2CD$$

$$AB = CD.$$

Já os outros aliases são:

$$AC = BD$$

$$AD = BC.$$

As estimativas dos efeitos principais (e seus aliases) são encontradas usando-se as quatro colunas da Tabela 6. Exemplificando, da coluna A , obtém-se:

$$l_A = A + BCD = \frac{1}{4}[-80 + 59 - 98 + 91 - 70 + 72 - 98 + 89] = -8,75.$$

De forma similar, para os outros efeitos:

$$\begin{aligned}l_B &= B + ACD = \mathbf{23,75} \\l_C &= C + ABD = 0,25 \\l_D &= D + ABC = \mathbf{-6,25} \\l_{AB} &= AB + CD = 0,75 \\l_{AC} &= AC + BD = \mathbf{5,25} \\l_{AD} &= AD + BC = -1,25\end{aligned}$$

Supondo-se que as interações de três fatores são desprezíveis, os efeitos principais A , B e D afetam significativamente a variável resposta (Y). Além disso, comparando-se os valores dos efeitos obtidos no delineamento completo, verifica-se que as estimativas estão próximas, podendo-se estimar muito bem os efeitos com a metade do esforço necessário para se realizar o delineamento completo, principalmente os valores dos efeitos principais e da interação significativos, que estão em boa concordância com os valores das combinações lineares dos aliases l_A , l_B , l_D e l_{AC} .

2.1.8 Critérios de seleção de delineamentos: resolução

O conceito de resolução de delineamentos é uma maneira útil de se classificarem delineamentos fatoriais fracionários s^{n-p} , os quais têm n fatores de s níveis e s^{n-p} tratamentos, de acordo com as características da estrutura de aliases, sendo as interações desses fatores na relação definidora - isto é, os geradores - chamadas de “palavras”. A relação definidora pode conter várias palavras de tamanhos distintos. Os aliases, como discriminados anteriormente, definem a resolução de um fatorial fracionário, cuja resolu-

ção, de modo geral, é igual ao menor número de letras da(s) palavra(s) da sua relação definidora. O número de letras em uma palavra é chamado de tamanho da palavra e o vetor $W = (A_1, \dots, A_n)$ é chamado de tamanho padrão da palavra, em que A_i denota o número de palavras de tamanho i na relação definidora.

O conceito de resolução proposto por Box & Hunter (1961) é definido como o menor r , tal que $A_r \geq 1$, tratando-se de um critério útil e conveniente para selecionarem-se delineamentos, cuja resolução é denotada, usualmente, empregando-se um algarismo romano como subscrito.

Seguindo-se a terminologia introduzida pelos autores citados, os delineamentos fatoriais fracionários classificam-se entre os seguintes tipos mais usados:

1. Delineamento de resolução III: nenhum efeito principal é aliás de qualquer outro efeito principal, mas os efeitos principais são aliases das interações de dois fatores, e as interações de dois fatores podem ser aliases umas das outras. Por exemplo: o delineamento 2^{3-1} sob estudo, com $I = ABC$, é de resolução III (2_{III}^{3-1}).
2. Delineamento de resolução IV: nenhum efeito principal é aliás de qualquer outro efeito principal e nem de interações de dois fatores, mas as interações de dois fatores são aliases umas das outras. Um delineamento 2^{4-1} com $I = ABCD$ é de resolução IV (2_{IV}^{4-1}).

3. Delineamento de resolução V: nenhum efeito principal ou interação de dois fatores é aliás de qualquer outro efeito principal ou interação de dois fatores, mas as interações de dois fatores são aliases das interações de três fatores. Um delineamento 2^{5-1} com $I = ABCDE$ é de resolução V (2_V^{5-1}).

De forma geral, um delineamento é de resolução R se nenhum efeito de p -fator é aliás de outro efeito que contém menos que $R - p$ fatores.

Assim, deve-se procurar utilizar experimentos fatoriais fracionários com a maior resolução possível, que seja compatível com o grau de fracionamento empregado, porque, quanto maior a resolução, menos interações de baixa ordem deverão ser consideradas não significantes, para que se possam estimar isoladamente os efeitos de interesse. No entanto, à medida que se aumenta a resolução, mais tratamentos deverão ser executados, o que pode inviabilizar o experimento em termos de custo, tempo para realização dos tratamentos, entre outros fatores. Deve-se, então, encontrar um balanceamento entre resolução e custos.

Etapas para construção de uma meia fração de maior resolução possível

Uma meia fração de um experimento 2^k de maior resolução possível pode ser construída seguindo-se as etapas apresentadas na sequência:

1. Escolher $k-1$ fatores e construir um fatorial 2^{k-1} completo envolvendo esses fatores.

2. Adicionar ao experimento acima o k -ésimo fator restante (K), igualando-se a alocação dos sinais que representam os níveis desse fator à alocação dos sinais que identificam os níveis correspondentes à interação de maior ordem no experimento $2^{k-1} ABC \dots (K-1)$, construído no item 1, acima. Esse procedimento é identificado, de forma abreviada, pelos termos *igualar o fator K à interação $(ABC \dots K-1)$* , isto é:

$$K = ABC \dots K-1 \implies I = ABC \dots K \text{ (relação definidora).}$$

3. Igualar o fator K à interação $-ABC \dots (K-1)$ para se construir a fração complementar do experimento, isto é:

$$K = -ABC \dots K-1 \implies I = -ABC \dots K \text{ (relação definidora).}$$

2.1.9 Critérios de seleção de delineamentos: aberração

Muitas vezes, a resolução dos delineamentos é insuficiente para distinção entre eles. Considerem-se, por exemplo, os três delineamentos 2_{IV}^{7-2} nas Tabelas 7 e 8 apenas com a estrutura dos aliases das interações de dois fatores. Todos esses delineamentos são de resolução IV, mas eles têm - assumindo-se que interações de três ou mais fatores são desprezíveis - diferentes estruturas com respeito às interações de dois fatores. Pode-se verificar que o delineamento A tem mais aliases e que o delineamento C, ao contrário, possui um número menor de aliases, o que, baseando-se nisso, levaria à sua escolha.

TABELA 7 Três escolhas de geradores para o delineamento 2_{IV}^{7-2} com as respectivas estruturas de aliases das interações de dois fatores

Delineamento A	
Geradores:	$F = ABC, G = BCD$
Relação definidora:	$I = ABCF = BCDG = ADFG$
	Aliases (interações de dois fatores)
	AB + CF
	AC + BF
	AD + FG
	AG + DF
	BD + CG
	BG + CD
	AF + BC + DG
Delineamento B	
Geradores:	$F = ABC, G = ADE$
Relação definidora:	$I = ABCF = ADEG = BCDEFG$
	Aliases (interações de dois fatores)
	AB + CF
	AC + BF
	AD + EG
	AE + DG
	AF + BC
Delineamento C	
Geradores:	$F = ABCD, G = ABDE$
Relação definidora:	$I = ABCDF = ABDEG = CEFG$
	Aliases (interações de dois fatores)
	DE + FG
	DF + EG
	DG + EF

TABELA 8 Delineamentos fatoriais fracionários 2_{IV}^{7-2} com os fatores: A, B, C, D, E, F e G obtidos das 3 escolhas de geradores da Tabela 7

Tratamentos	Delineamento A							Delineamento B						
	A	B	C	D	E	F	G	A	B	C	D	E	F	G
1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2	+	-	-	-	-	+	-	+	-	-	-	-	+	+
3	-	+	-	-	-	+	+	-	+	-	-	-	+	-
4	+	+	-	-	-	-	+	+	+	-	-	-	-	+
5	-	-	+	-	-	+	+	-	-	+	-	-	+	-
6	+	-	+	-	-	-	+	+	-	+	-	-	-	+
7	-	+	+	-	-	-	-	-	+	+	-	-	-	-
8	+	+	+	-	-	+	-	+	+	+	-	-	+	+
9	-	-	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	+
10	+	-	-	+	-	+	+	+	-	-	+	-	+	-
11	-	+	-	+	-	+	-	-	+	-	+	-	+	+
12	+	+	-	+	-	-	-	+	+	-	+	-	-	-
13	-	-	+	+	-	+	-	-	-	+	+	-	+	+
14	+	-	+	+	-	-	-	+	-	+	+	-	-	-
15	-	+	+	+	-	-	+	-	+	+	+	-	-	+
16	+	+	+	+	-	+	+	+	+	+	+	-	+	-
17	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-	+	-	+
18	+	-	-	-	+	+	-	+	-	-	-	+	+	-
19	-	+	-	-	+	+	+	-	+	-	-	+	+	+
20	+	+	-	-	+	-	+	+	+	-	-	+	-	-
21	-	-	+	-	+	+	+	-	-	+	-	+	+	+
22	+	-	+	-	+	-	+	+	-	+	-	+	-	-
23	-	+	+	-	+	-	-	-	+	+	-	+	-	+
24	+	+	+	-	+	+	-	+	+	+	-	+	+	-
25	-	-	-	+	+	-	+	-	-	-	+	+	-	-
26	+	-	-	+	+	+	+	+	-	-	+	+	+	+
27	-	+	-	+	+	+	-	-	+	-	+	+	+	-
28	+	+	-	+	+	-	-	+	+	-	+	+	-	+
29	-	-	+	+	+	+	-	-	-	+	+	+	+	-
30	+	-	+	+	+	-	-	+	-	+	+	+	-	+
31	-	+	+	+	+	-	+	-	+	+	+	+	-	-
32	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

Tabela 8. Continuação

Tratamentos	Delineamento C						
	A	B	C	D	E	F	G
1	-	-	-	-	-	+	+
2	+	-	-	-	-	-	-
3	-	+	-	-	-	-	-
4	+	+	-	-	-	+	+
5	-	-	+	-	-	-	+
6	+	-	+	-	-	+	-
7	-	+	+	-	-	+	-
8	+	+	+	-	-	-	+
9	-	-	-	+	-	-	-
10	+	-	-	+	-	+	+
11	-	+	-	+	-	+	+
12	+	+	-	+	-	-	-
13	-	-	+	+	-	+	-
14	+	-	+	+	-	-	+
15	-	+	+	+	-	-	+
16	+	+	+	+	-	+	-
17	-	-	-	-	+	+	-
18	+	-	-	-	+	-	+
19	-	+	-	-	+	-	+
20	+	+	-	-	+	+	-
21	-	-	+	-	+	-	-
22	+	-	+	-	+	+	+
23	-	+	+	-	+	+	+
24	+	+	+	-	+	-	-
25	-	-	-	+	+	-	+
26	+	-	-	+	+	+	-
27	-	+	-	+	+	+	-
28	+	+	-	+	+	-	+
29	-	-	+	+	+	+	+
30	+	-	+	+	+	-	-
31	-	+	+	+	+	-	-
32	+	+	+	+	+	+	+

Os tamanhos das três palavras do delineamento A são todos iguais a 4, ou seja, o tamanho padrão da palavra é $(0,0,0,3,0,0,0)$; para o delineamento B é $(0,0,0,2,0,1,0)$ e, por fim, para o C, $(0,0,0,1,2,0,0)$. Note-se que, para a relação definidora do delineamento C, há apenas uma palavra de tamanho quatro, enquanto que os outros delineamentos têm duas ou três. Portanto, o delineamento C minimiza o número de palavras na relação definidora que são de tamanho mínimo, logo o delineamento é chamado de delineamento de aberração mínima (Fries & Hunter, 1980). Quando se comparam dois delineamentos usando-se a resolução como critério, consideram-se os tamanhos das menores palavras em cada relação definidora. Se esses tamanhos são iguais, os dois delineamentos são equivalentes. Com a aberração como critério, todavia, continua-se a examinar o menor tamanho da próxima palavra em cada relação definidora, até que um delineamento seja classificado como superior ao outro.

Em um delineamento de resolução R , efeitos principais são aliases com interações de $R - 1$ fatores, interações de dois fatores são aliases de interações de $R - 2$ fatores, e assim por diante. Dado que a resolução seja maximizada e igual a R_{max} , minimizando-se a aberração, assegura-se que o delineamento tenha um menor número de palavras de tamanho R_{max} , o que significa que um menor número de efeitos principais serão aliases com interações de $R_{max} - 1$ fatores, e que um menor número de interações de dois fatores serão aliases com interações de $R_{max} - 2$, e, assim, sucessivamente. Daí se deduz que o conceito de aberração é uma extensão natural de resolução.

O critério de aberração mínima tem sido usado explicitamente na construção de tabelas de delineamentos, como apresentam Franklin (1984); Wu & Zhang (1993); Chen et al. (1993); Montgomery (2001) e Box et al. (2005).

As definições de resolução e aberração são baseadas nas seguintes suposições hierárquicas:

1. efeitos de ordem inferior são mais importantes do que efeitos de ordem superior;
2. efeitos de mesma ordem são igualmente importantes.

Em geral, o critério de aberração mínima é uma boa medida para se ordenarem (classificarem) delineamentos, desde que essas suposições não sejam grosseiramente violadas.

2.1.10 Fatoriais fracionários 2^{k-p}

Embora o delineamento fatorial seja valioso para se reduzir o número requerido de pontos experimentais, frequentemente vê-se que frações menores dão quase a mesma quantidade de informação útil a um custo menor. Em geral, um delineamento 2^k pode ser executado em uma fração $(1/2)^p$, chamada de delineamento fatorial fracionário 2^{k-p} . Assim, uma fração $(1/4)$ é chamada de delineamento fatorial fracionário 2^{k-2} , uma fração $(1/8)$ é um delineamento 2^{k-3} , e assim por diante. Esses delineamentos exigem a seleção de p geradores independentes. As relações definidoras para o delineamento consiste dos p geradores inicialmente escolhidos e seus $2^p - p - 1$ interações generalizadas.

A estrutura dos aliases pode ser encontrada multiplicando-se cada coluna do efeito pelas relações definidoras, mas um cuidado deve ser tomado na seleção dos geradores, de forma que efeitos de potencial interesse não sejam aliases uns com os outros. Cada efeito tem $2^p - 1$ aliases. Para grandes valores de k , geralmente supõe-se que as interações de maior ordem (terceira ordem, quarta ordem ou superiores) sejam desprezíveis, e isso simplifica notavelmente a estrutura dos aliases.

É importante selecionar p geradores para um fatorial fracionário 2^{k-p} , de forma que se obtenha a melhor estrutura de aliases possível. Um critério razoável consiste em selecionar os geradores de um modo que o delineamento resultante 2^{k-p} tenha a maior resolução possível. Montgomery (2001) apresenta uma série de experimentos fatoriais fracionários 2^{k-p} para $k \leq 15$ fatores e até 128 tratamentos com sugestões de geradores, os quais resultam em um delineamento de maior resolução possível.

2.1.11 Etapas para a construção de um delineamento 2^{k-p}

As etapas para a construção de um delineamento 2^{k-p} são as seguintes:

1. escolha de $k - p$ fatores e construção de um experimento fatorial 2^{k-p} completo envolvendo esses fatores;
2. adição, ao experimento acima, dos p fatores restantes, igualando a alocação dos sinais que representam os níveis desses fatores à alocação dos sinais que identificam os níveis correspondentes às interações apropriadamente escolhidas, envolvendo os $k - p$ fatores selecionados no item 1, anterior.

Como exemplo, para se construir um delineamento 2^{7-4} , escreve-se o delineamento 2^3 nos fatores A , B e C e acrescentam-se, então, as quatro colunas para os fatores D , E , F e G , selecionando-se os geradores da seguinte forma: $D = AB$, $E = AC$, $F = BC$ e $G = ABC$, cuja relação definidora é $I = ABD = ACE = BCF = ABCG$. Multiplicando-se os geradores 2 a 2, a relação é $I = BCDE = ACDF = CDG = ABEF = BEG = AFG$. Multiplicando-se os geradores 3 a 3, a relação é $I = DEF = ADEG = CEFG = BDFG$. Finalmente, multiplicando-se 4 de cada vez, tem-se como relação definidora $I = ABCDEF$. A relação definidora completa, então, é dada por $I = ABD = ACE = BCF = ABCG = BCDE = ACDF = CDG = ABEF = BEG = AFG = DEF = ADEG = CEFG = BDFG = ABCDEFG$. Observe-se que a menor palavra da relação definidora possui três letras, logo o delineamento é de resolução III, 2_{III}^{7-4} .

Convém salientar que o delineamento 2_{III}^{7-4} é dito saturado, assim como o delineamento 2_{III}^{3-1} , pois são planejados com $k = n - 1$ variáveis em n tratamentos. Dessa forma, todos os seus graus de liberdade disponíveis são usados para se estimarem os efeitos principais, ou seja, todas as novas variáveis são aliases com todas as interações entre as variáveis originais, como pode ser observado na Tabela 9. Uma classe especial de delineamentos saturados é a de Plackett & Burman (1946). São delineamentos ortogonais de dois níveis, sendo n um múltiplo de 4. Os mais utilizados são: 12, 20, 24, 28 e 36 tratamentos para se estudarem 11, 19, 23, 27 e 35 fatores, respectivamente.

TABELA 9 Delineamento saturado 2_{III}^{7-4} com os geradores $D = AB$, $E = AC$, $F = BC$ e $G = ABC$ com uma variável resposta fictícia (Y)

Comb. Trat.	D. Básico			D=AB	E=AC	F=BC	G=ABC	Y
	A	B	C					
def	-	-	-	+	+	+	-	86
afg	+	-	-	-	-	+	+	77
beg	-	+	-	-	+	-	+	95
abd	+	+	-	+	-	-	-	150
cdg	-	-	+	+	-	-	+	80
ace	+	-	+	-	+	-	-	75
bcf	-	+	+	-	-	+	-	98
abcdefg	+	+	+	+	+	+	+	142

Os sete graus de liberdade nesse delineamento podem ser usados para se estimarem os sete efeitos principais. Cada um desses efeitos tem 15 aliases; contudo, supondo-se que as interações de três ou mais fatores sejam desprezíveis, isso resulta em uma simplificação considerável na estrutura dos aliases. Fazendo-se essa suposição - cada uma das combinações lineares associadas com os sete efeitos principais nesse delineamento - estimam-se realmente os efeitos principais e três interações de dois fatores, conforme a equação 1 dada a seguir:

$$\begin{aligned}
 l_A &\longrightarrow A + BD + CE + FG = 21,25 \\
 l_B &\longrightarrow B + AD + CF + EG = 41,75 \\
 l_C &\longrightarrow C + AE + BF + DG = -3,25 \\
 l_D &\longrightarrow D + AB + CG + EF = 28,25 \quad . \quad (1) \\
 l_E &\longrightarrow E + AC + BG + DF = -1,75 \\
 l_F &\longrightarrow F + BC + AB + DE = 0,75 \\
 l_G &\longrightarrow G + CD + BE + AF = -3,75
 \end{aligned}$$

Convém lembrar que, para o cálculo dos efeitos, utilizam-se as combinações lineares das observações. Por exemplo:

$$\hat{A} = \frac{1}{4}(-86 + 77 - 95 + 150 - 80 + 75 - 98 + 142) = 21,25.$$

2.1.12 *Foldover* de um fatorial fracionário

Combinando-se delineamentos fatoriais fracionários em que certos sinais são trocados, pode-se, sistematicamente, isolar efeitos de potencial interesse. Esse tipo de experimento sequencial é chamado de *foldover* do delineamento original. A estrutura dos aliases de qualquer fração com os sinais para um ou mais fatores invertidos é obtida fazendo-se mudanças dos sinais nos fatores apropriados na estrutura dos aliases da fração original.

Tratando-se novamente do delineamento 2_{III}^{7-4} dado na Tabela 9, supõe-se, junto com essa fração principal, um segundo delineamento fatorial fracionário com os sinais da coluna do fator D invertidos, como apresentado na Tabela 10.

TABELA 10 Delineamento *foldover* 2_{III}^{7-4} com os geradores $D = -AB$, $E = AC$, $F = BC$ e $G = ABC$ com uma variável resposta fictícia (Y)

Comb. trat.	D. básico			D=-AB	E=AC	F=BC	G=ABC	Y
	A	B	C					
ef	-	-	-	-	+	+	-	92
adfg	+	-	-	+	-	+	+	137
bdeg	-	+	-	+	+	-	+	95
ab	+	+	-	-	-	-	-	140
cg	-	-	+	-	-	-	+	10
acde	+	-	+	+	+	-	-	85
bcdf	-	+	+	+	-	+	-	90
abcefg	+	+	+	-	+	+	+	72

Supondo-se que as interações de três ou mais fatores sejam desprezíveis, os efeitos que podem ser estimados da primeira fração estão mostrados na equação 1, e os obtidos da segunda fração são dados pela equação 2, abaixo:

$$\begin{aligned}
 l'_A &\longrightarrow A - \mathbf{BD} + CE + FG = 36,75 \\
 l'_B &\longrightarrow B - \mathbf{AD} + CF + EG = 18,25 \\
 l'_C &\longrightarrow C + AE + BF - \mathbf{DG} = -51,75 \\
 l'_D &\longrightarrow \mathbf{D} - \mathbf{AB} - \mathbf{CG} - \mathbf{EF} = 23,25 \quad (2) \\
 l'_E &\longrightarrow E + AC + BG - \mathbf{DF} = -8,25 \\
 l'_F &\longrightarrow F + BC + AB - \mathbf{DE} = 15,25 \\
 l'_G &\longrightarrow G - \mathbf{CD} + BE + AF = -23,25
 \end{aligned}$$

Tomando-se como combinações lineares dos efeitos, $\frac{1}{2}(l_i + l'_i)$ e $\frac{1}{2}(l_i - l'_i)$, tem-se:

i	A partir de $(1/2)(l_i + l'_i)$	A partir de $(1/2)(l_i - l'_i)$
A	$A + CE + FG = 29$	$\mathbf{BD} = -7,75$
B	$B + CF + EG = 30$	$\mathbf{AD} = 11,75$
C	$C + AE + BF = -27,5$	$\mathbf{DG} = 24,25$
D	$\mathbf{D} = 25,75$	$AB + CG + EF = 2,50$
E	$E + AC + BG = -5,00$	$\mathbf{DF} = 3,25$
F	$F + BC + AG = 8,00$	$\mathbf{DE} = -7,25$
G	$G + BE + AF = -13,50$	$\mathbf{CD} = 9,75$

Portanto, foram isolados tanto o efeito principal D como todas as suas interações de dois fatores. Esse é um exemplo especial do princípio geral de Box & Wilson (1951) no qual se afirma que, se qualquer delineamento fracionário é repetido com sinais invertidos, então toda ligação (*link*) de aliases entre efeitos principais e interação de dois fatores é quebrada.

Caso se adicione a um delineamento de resolução III uma segunda fração, na qual todos os sinais dos fatores são invertidos, tem-se um tipo de *foldover* (algumas vezes chamado de *foldover* completo ou reflexo) que quebra todas as ligações dos aliases entre efeitos principais e interações de dois fatores; isto é, podem-se usar os delineamentos combinados para se estimarem todos os efeitos principais livres de qualquer interação de dois fatores.

O delineamento combinado, obtido pela junção do delineamento inicial e o *foldover* completo, tem no mínimo resolução IV. Entretanto, como apontado por Li & Lin (2003), outros *foldovers* podem resultar em um delineamento tendo maior resolução, ou de mesma resolução, mas com menor aberração do que o *foldover* completo. Li & Mee (2002) também consideraram delineamentos *foldover* como um ponto de vista de otimalidade e forneceram condições suficientes sobre as quais um plano *foldover* alternativo é uma escolha melhor do que um *foldover* completo. Tabelas contendo planos *foldover* ótimos para delineamentos fatoriais fracionários bloqueados 2^{k-p} , obtidos por meio de dois critérios, aberração mínima e máxima aberração de posto mínimo, são dadas por Li & Jacroux (2007).

A relação definidora para o delineamento *foldover*, quando os sinais de todos os fatores são invertidos, é idêntica ao 2_{III}^{7-4} , exceto quando todas as palavras com número ímpar de letras sejam de sinais negativos.

Adicionando-se o delineamento 2_{III}^{7-4} junto ao *foldover* e combinando-se as duas relações definidoras, tem-se $I = ABCG = ACDF = ABEF = ADEG = BCDE = BDFG = CDFG$, em que a menor palavra na relação definidora possui quatro letras. Assim, o delineamento combinado é de resolução IV; nesse caso, um 2_{IV}^{7-3} .

Em geral, um delineamento *foldover* pode ser formado por qualquer fração de um experimento fatorial no qual se deseja mais informação nos efeitos principais e interações. Contudo, o uso de *foldovers*, com delineamento de resolução IV ou mais, é raro, porque os efeitos e interações de dois fatores não são aliases uns com os outros nesses experimentos; portanto, pouco se ganharia com o seu uso.

2.1.13 Fatoriais fracionários 3^{k-p}

Da mesma forma como se obteve uma fração de um delineamento da série 2^k , podem-se construir frações para o experimento 3^k . A construção dos delineamentos 3^{k-p} é mais complexa e a interpretação da natureza física das interações é, algumas vezes, obscura; no entanto, em pesquisas de otimização de processos utilizando modelos quadráticos de superfície de resposta, os fracionários 3^{k-p} são extremamente úteis e de fácil interpretação.

Existem várias notações diferentes usadas para representar os níveis dos fatores, dentre as quais duas possibilidades para a codificação dos níveis dada pelos algarismos (0, 1, 2) ou (-1, 0, 1), que representam os níveis baixo, intermediário e alto, respectivamente, em cada caso.

Entre as frações que podem ser obtidas do delineamento 3^k , a maior fração é um terço, contendo 3^{k-1} tratamentos. Para se construir um delineamento fatorial fracionário 3^{k-1} , seleciona-se uma componente da interação de dois graus de liberdade (geralmente a interação de maior ordem) e particiona-se o delineamento fatorial completo 3^k em três blocos. Cada um desses blocos resultantes é um delineamento fracionário 3^{k-1} e qualquer um desses blocos pode ser selecionado para uso. Se $AB^{\alpha_2}C^{\alpha_3} \dots K^{\alpha_k}$ (em que $\alpha_i, i = 2, \dots, k$ indica o grau do efeito do fator na interação) é a componente da interação usada para definir os blocos, então $I = AB^{\alpha_2}C^{\alpha_3} \dots K^{\alpha_k}$ é chamada de relação definidora do delineamento fatorial fracionário. Cada efeito principal ou componente da interação estimada do delineamento 3^{k-1} tem dois aliases, os quais podem ser encontrados multiplicando-se o efeito por I e I^2 módulo 3.

Considere-se, por exemplo, o processo de construção de uma fração um terço do delineamento 3^3 . Pode-se escolher qualquer componente da interação ABC para construí-lo, ou seja, ABC , AB^2C , ABC^2 e AB^2C^2 . Portanto, existem realmente doze diferentes frações um terço do delineamento 3^3 definidas por

$$x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_3 = u \pmod{3},$$

em que $\alpha = 1$ ou 2 e $u = 0, 1$ ou 2 .

Suponha-se que tenha sido selecionada a componente de AB^2C^2 . Dessa forma, cada fração do delineamento resultante conterá exatamente nove combinações de tratamentos que devem satisfazer

$$x_1 + 2x_2 + 2x_3 = u \pmod{3},$$

em que $u = 0, 1$ ou 2 .

Todas as combinações dos tratamentos das três frações um terço, juntamente com suas visões geométricas, podem ser visualizadas por meio da Figura 6.

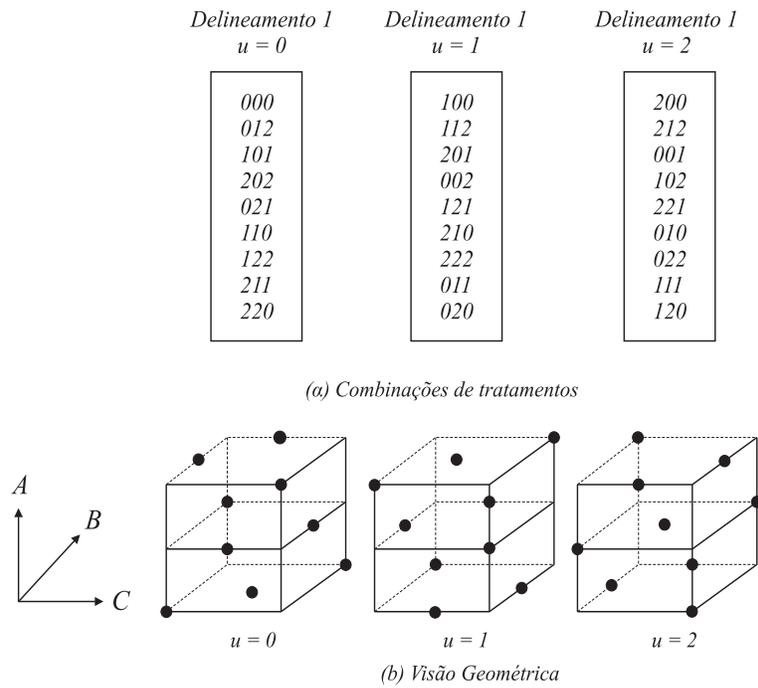


FIGURA 6 As três frações um terço do delineamento 3^3 com a relação definidora $I = AB^2C^2$

Se qualquer um dos delineamentos da Figura 6 é executado, a estrutura aliás resultante é:

$$\begin{array}{lclclcl}
A & = & A(AB^2C^2) & = & A^2B^2C^2 & = & ABC \\
A & = & A(AB^2C^2)^2 & = & A^3B^4C^4 & = & BC \\
B & = & B(AB^2C^2) & = & AB^3C^2 & = & AC^2 \\
B & = & B(AB^2C^2)^2 & = & A^2B^5C^4 & = & ABC^2 \\
C & = & C(AB^2C^2) & = & AB^2C^3 & = & AB^2 \\
C & = & C(AB^2C^2)^2 & = & A^2B^4C^5 & = & AB^2C \\
AB & = & AB(AB^2C^2)^2 & = & A^2B^3C^2 & = & AC \\
AB & = & AB(AB^2C^2)^2 & = & A^3B^5C^4 & = & BC^2
\end{array}$$

Conseqüentemente, os quatro efeitos que são realmente estimados dos oito graus de liberdade do delineamento são $A + BC + ABC$, $B + AC^2 + ABC^2$, $C + AB^2 + AB^2C$. Esse delineamento será de interesse prático apenas se todas as interações forem pequenas em relação aos efeitos principais. Já que os efeitos principais são aliases com interações de dois fatores, esse delineamento é de resolução III.

Note-se como é complexa a estrutura dos aliases e observe-se, também, que cada efeito principal é aliás com uma componente da interação. Se, por exemplo, o efeito da interação de dois fatores BC fosse grande, isso potencialmente destoaria a estimativa do efeito principal A , o que faria com que o efeito $AB + AC + BC^2$ fosse muito difícil de se interpretar.

Retornando ao delineamento 3_{III}^{3-1} , note-se que, no delineamento com $u = 0$ da Figura 6, tratando A como linhas e B como colunas, tem-se um delineamento que pode ser escrito como

$00\underline{0}$ $01\underline{2}$ $02\underline{1}$
 $10\underline{1}$ $11\underline{0}$ $12\underline{2}$,
 $20\underline{2}$ $21\underline{1}$ $22\underline{0}$

que é um quadrado latino 3×3 . Contudo, os dois delineamentos surgem de motivos diferentes: um da consequência da repetição fracionada e o outro de restrições na aleatorização.

Montgomery (2001) apresenta uma tabela com número total de quadrados latinos de vários tamanhos, inclusive para esse caso, em que se pode verificar a existência de um total de doze quadrados latinos, e em que cada um corresponde a um dos doze diferentes delineamentos fatoriais fracionários.

2.1.14 Outros delineamentos fatoriais fracionários 3^{k-p}

Em geral, pode-se construir uma fração $\left(\frac{1}{3}\right)^p$ do delineamento 3^k para $p < k$, em que a fração contém 3^{k-p} tratamentos. Tais delineamentos são chamados de delineamentos fatoriais 3^{k-p} . Portanto, um 3^{k-2} é uma fração um nono, um 3^{k-3} é uma fração um vinte e sete avos, e assim por diante.

O procedimento para se construírem delineamentos fatoriais fracionários 3^{k-p} consiste em selecionar p componentes da interação e usá-las para particionar as 3^k combinações de tratamentos dentro de 3^p blocos. Cada bloco é, então, um delineamento fatorial fracionário 3^{k-p} . A relação definidora I de qualquer fração consiste dos p efeitos inicialmente escolhidos e suas $(3^p - 2p - 1)/2$ interações generalizadas. O aliás de qualquer efeito principal ou componente da interação é obtido pela multiplicação dos efeitos por I e I^2 (módulo 3).

Podem-se gerar os tratamentos definindo-se um delineamento fatorial fracionário 3^{k-p} , como será apresentado na próxima seção.

2.1.15 O fatorial fracionário 3^{k-1} de máxima resolução

As combinações dos tratamentos em um delineamento 3^{k-1} com a relação definidora $I = AB^{\alpha_2}C^{\alpha_3} \dots K^{\alpha_K}$ podem ser construídas usando-se o método similar empregado nas séries 2^{k-p} . Primeiramente, compõem-se os tratamentos do delineamento 3^{k-1} para um delineamento fatorial completo de três níveis para $k-1$ fatores, com a notação (0,1,2) ou (-1,0,1), isto é, o delineamento básico. Então, introduz-se o k -ésimo fator igualando-se os seus níveis à componente apropriada da interação de maior ordem, ou seja, $AB^{\alpha_2}C^{\alpha_3} \dots (K-1)^{\alpha_{k-1}}$, por meio da relação:

$$x_k = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_{k-1} x_{k-1},$$

em que $\beta_i = (3 - \alpha_k)\alpha_i \pmod{3}$ para $1 \leq i \leq k-1$, o que fornece um delineamento de maior resolução possível.

2.1.16 Delineamento composto central

O delineamento composto central (DCC) introduzido por Box & Wilson (1951) é um dos delineamentos mais populares para o ajuste de modelos de superfície de resposta. Ele consiste de n_f pontos de um fatorial de 2^k ou um fatorial fracionário de resolução V ou mais, $2k$ pontos axiais e n_c pontos centrais (nível intermediário "0" de cada fator). Os pontos centrais fornecem uma estimativa do erro puro e também informam sobre a existência, ou não, da curvatura no sistema sob estudo. Caso exista, a adição de pontos axiais permite uma estimação eficiente dos termos quadráticos puros.

Os pontos axiais são colocados a uma distância α do centro do delineamento. A escolha α e n_c depende das propriedades exigidas do delineamento, tais como rotacionalidade.² A Figura 7 mostra um DCC para $k = 3$ fatores com os níveis codificados em -1 e 1. Os pontos axiais têm coordenadas $(\pm\alpha, 0, 0)$, $(0, \pm\alpha, 0)$ e $(0, 0, \pm\alpha)$; e o ponto central, $(0, 0, 0)$.

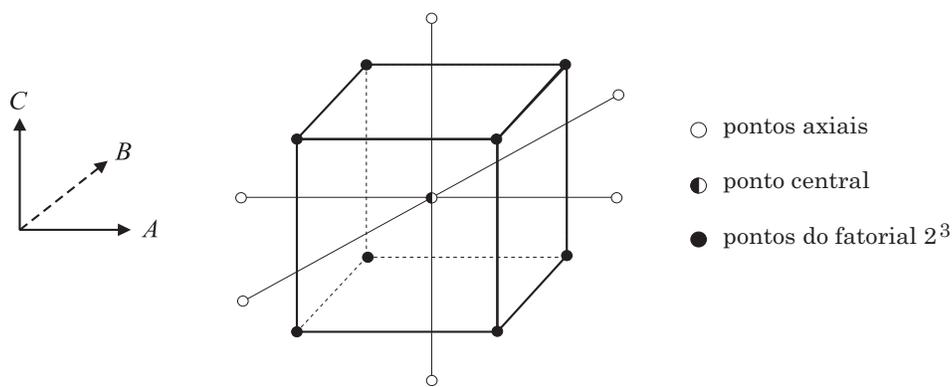


FIGURA 7 Delineamento composto central para $k = 3$ fatores, 6 pontos axiais α e um ponto central

Os valores da distância axial geralmente variam de 1 a \sqrt{k} . O primeiro coloca todos os pontos axiais na face do cubo (também chamado de cubo de face centrada) ou hiper-cubo, enquanto o último coloca todos os pontos em uma esfera comum.

²Maiores detalhes sobre os valores de α e n_c associados com algumas propriedades podem ser encontradas em Box & Draper (1987) e Box et al. (2005).

2.1.17 Delineamentos de Box-Behnken

Algumas vezes é desejável (ou necessário) que os fatores sejam executados apenas em 3 níveis, como é o caso do delineamento de Box-Behnken (1960) em que os pontos são especificamente escolhidos de forma a se obter uma estimação eficiente dos coeficientes de um modelo de segunda ordem. As matrizes desses delineamentos para $k = 3$ e 4 fatores são, respectivamente, dadas a seguir:

$$\begin{pmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

A notação ± 1 é usada para indicar os 4 tratamentos do fatorial 2^2 e a notação 0 significa um vetor-coluna paralelo de 0's. Para cada delineamento de k fatores a última linha de 0's identifica um ou mais pontos centrais. As linhas pontilhadas indicam como o delineamento pode ser bloqueado.³

³A estrutura de bloqueio dos delineamentos de Box-Behnken não será detalhada neste trabalho. Maiores informações podem ser consultadas na obra de Giesbrecht & Gumpertz (2004), a qual fornece planos de 3 até 10 fatores com esquemas de bloqueio para cada um.

Para ajudar a apreciar as simetrias de tais delineamentos, as Figuras 8(a) e 8(b) ilustram duas diferentes representações do mesmo delineamento de Box-Behnken para $k = 3$ fatores.

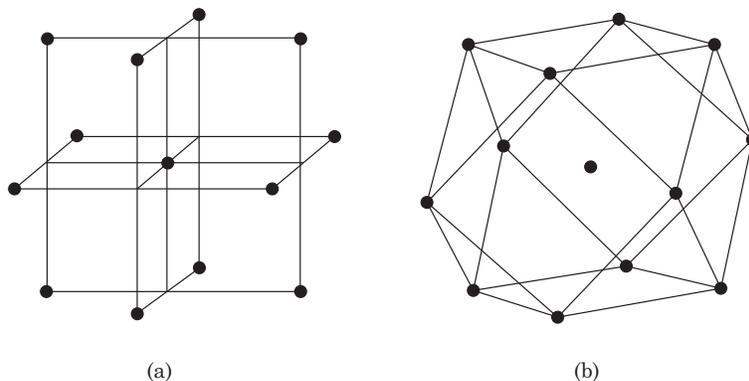


FIGURA 8 Duas representações do delineamento de Box-Behnken para três fatores

Uma importante característica dos delineamentos de Box-Behnken é que eles são considerados delineamentos esféricos. Note-se que, por exemplo, na Figura 9, com 3 fatores, todos os pontos são chamados de “pontos arestas” (isto é, pontos que estão na aresta do cubo). Assim, todos os pontos estão a uma distância de $\sqrt{2}$ do centro do delineamento. Não existe nenhum ponto do fatorial 2^2 ou pontos nas faces.

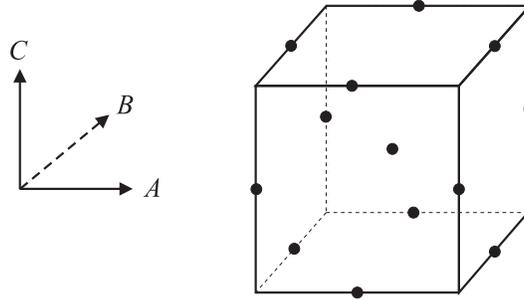


FIGURA 9 Delineamento de Box-Behnken com $k = 3$ fatores e um ponto central

2.1.18 Eficiência como critério para construção de delineamentos

O trabalho em delineamentos ótimos de experimentos foi iniciado por Wald (1943) e mais tarde se desenvolveu, em grande parte, em uma série de artigos a partir de Kiefer (1959).

Ao se observar a alocação dos tratamentos às unidades experimentais dos blocos, percebe-se que vários arranjos são possíveis. Segundo Hinkelmann & Kempthorne (2005), esses possíveis arranjos (alocações dos tratamentos aos blocos) podem levar a diferentes eficiências do delineamento, de tal forma que poderão existir delineamentos melhores do que outros.

Definidos os principais critérios de otimização e os respectivos delineamentos ótimos, pode-se medir a eficiência relativa entre dois delineamentos quaisquer ξ_1 e ξ_2 associados a um mesmo modelo, sendo Ψ a função desejada da variância do BLUE de θ , $V(\hat{\theta}|\xi)$. Nas seções 4.1, 4.2 e 4.4, θ será igual a $[\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{23}]'$, $[\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{23}]'$ e $[\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{34}]'$, respectivamente.

Então, uma medida da eficiência relativa $E(\xi_1, \xi_2)$ do primeiro em relação ao segundo pode ser obtida por meio de:

$$E(\xi_1, \xi_2) = \frac{\Psi[V(\hat{\theta}|\xi_1)]}{\Psi[V(\hat{\theta}|\xi_2)]}.$$

Se Ψ for a média das variâncias de θ , então $\Psi = \sum_i^v (\text{autovalores})$
 $= \text{traço} \left(V(\hat{\theta}|\xi) \right)$, ou, se Ψ for a variância generalizada de θ , então $\Psi =$
 $\prod_i^v (\text{autovalores}) = \text{Det} \left(V(\hat{\theta}|\xi) \right)$, em que v é o número de tratamentos
ou de níveis de interesse do fator em estudo. Note-se que, para problemas
específicos, Ψ pode ser a variância de qualquer combinação linear de interesse
de (um ou mais) elementos de $V(\hat{\theta}|\xi)$.

Segundo Nguyen & Miller (1992), o objetivo de todos os métodos
numéricos para se encontrarem delineamentos ótimos ou quase ótimos é
selecionar v pontos (tratamentos), a serem incluídos no delineamento, de
um conjunto finito de N pontos possíveis, que são chamados de pontos
candidatos, cujo número pode ser bastante grande em algumas situações
práticas.

A tarefa de construção de delineamentos experimentais, então, con-
siste em escolher v linhas de X (tratamentos) dos N pontos candidatos (con-
junto de todas as possíveis combinações dos níveis dos fatores), de forma que
a matriz de informação resultante $X'X$ seja ótima em algum sentido. A me-
lhor combinação desses pontos é chamada de ótima e a matriz delineamento
correspondente, de matriz delineamento ótima.

Podem-se citar vários critérios de otimalidade tais como: A, D, E
e outros, também chamados de critérios alfabéticos de otimalidade (Kiefer,
1959; Chaloner & Verdinelli, 1995; Atkinson et al., 2007). Uma descrição
desses critérios, associados à variância das estimativas dos parâmetros, pode
ser assim resumida:

A-otimalidade - minimiza o traço da matriz de covariâncias dos parâmetros estimados, ou, equivalentemente, o total ou média das variâncias dos parâmetros estimados. O critério equivale a minimizar a soma ou média dos autovalores da matriz de covariâncias.

D-otimalidade - o volume da região de confiança multidimensional (elipsóide) para um conjunto de parâmetros pode ser encontrado para a matriz de covariâncias dos parâmetros estimados, por meio do determinante dessa matriz. Um delineamento D-ótimo minimiza o determinante da matriz de covariâncias dos parâmetros inicialmente estimados (consequentemente, o volume da região de confiança multidimensional) e é referido como a variância generalizada.

E-otimalidade - o delineamento que minimiza o maior dos autovalores da matriz de covariâncias dos parâmetros estimados é um delineamento E-ótimo. Isso equivale a minimizar a variância do contraste menos precisamente estimado.

Portanto, os critérios de otimalidade baseiam-se em funções da matriz de informação e de sua inversa, que é proporcional à matriz de covariâncias dos parâmetros do modelo. O delineamento ótimo é aquele que maximiza (ou minimiza) uma função dessa matriz.

2.2 Estrutura das unidades experimentais

2.2.1 Delineamentos em blocos incompletos

Nesta seção são apresentadas definições e algumas formas de construção de delineamentos em blocos incompletos (DBI).

Experimentos bloqueados são tipicamente usados quando nem todos os tratamentos de um experimento podem ser conduzidos sob circunstâncias homogêneas. Em tais experimentos, as unidades experimentais são particionadas em grupos de modo que a variabilidade dentro dos grupos seja considerada menor do que a variabilidade entre os grupos. A cada grupo de unidade experimental (blocos) aplica-se, então, um subconjunto dos tratamentos.

A bloqueagem é uma alternativa útil para se reduzir a influência de fontes de variação sistemática e melhorar a eficiência dos experimentos, arranjando as unidades experimentais em grupos homogêneos.

A maioria dos pesquisadores práticos gosta de se prender ao princípio da ortogonalidade, pois a solução mais simples de planejamento é, em geral, o delineamento em blocos casualizados completos. No entanto, em algumas situações experimentais, o número de tratamentos é bastante elevado, o que torna difícil acomodá-los aos blocos, pois, nesse caso, necessita-se de blocos de tamanho cada vez maior, o que pode ser difícil de se obter na prática. Desse modo, uma alternativa seria o emprego de delineamentos em blocos incompletos.

Situações que requerem experimentos em blocos incompletos ocorrem, frequentemente, devido às dificuldades de se encontrarem áreas experimentais que sejam uniformes em toda a sua extensão; suficientes, portanto, para abrigarem blocos que contenham todos os tratamentos a serem avaliados, ou até mesmo pela carência de instrumentos ou aparelhos experimentais.

O emprego de um delineamento em blocos casualizados completos, nessa situação, faz com que sua eficiência seja sensivelmente prejudicada e diminuída à medida que o número de parcelas por bloco aumenta. A heterogeneidade dentro do bloco tende a aumentar o erro experimental, dificultando, assim, a discriminação dos tratamentos em teste, ou a obtenção de estimativas mais exatas, em razão de uma menor precisão do experimento.

Nos DBI, v tratamentos são distribuídos em b blocos de tamanho $k < v$ e o i -ésimo tratamento ($i = 1, 2, \dots, v$) aparece em r unidades experimentais, isto é, têm-se r repetições desses tratamentos; o j -ésimo bloco contém k unidades experimentais, das quais n_{ij} recebem o i -ésimo tratamento (John, 1980). Nesse caso, n_{ij} é uma variável indicadora da presença de um tratamento em um bloco.

Em tais situações, podem-se utilizar, em geral, duas classes desses delineamentos: a primeira, os chamados blocos incompletos balanceados (BIB), introduzidos por Yates (1936), que satisfaçam as seguintes condições:

1. o material experimental é dividido em b blocos de k unidades cada, com tratamentos diferentes sendo aplicados às unidades no mesmo bloco;
2. existem v tratamentos, sendo que cada um ocorre em r blocos;
3. quaisquer dois tratamentos ocorrem juntos em exatos λ blocos.

A segunda classe são os delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados que serão tratados na próxima seção.

Seja $N_{v \times b}$ a matriz de incidência dos tratamentos nos blocos cujos elementos $n_{ij} = 0$ ou 1, indicando a ausência ou a presença do tratamento no bloco. Portanto, $\Lambda = NN'_{v \times v}$ é a matriz de concorrência dos tratamentos.⁴

No passado recente, era complicado analisar experimentos utilizando esses tipos de delineamento. Assim, por exemplo, Oliveira (1990) apresentou, por meio de um exemplo numérico, as expressões para as várias somas de quadrado na análise de variância, as médias de tratamentos ajustadas para blocos e a variância da estimativa de um contraste entre as médias de tratamentos, considerando os métodos de análise intrablocos e com recuperação de informação interblocos para o caso de um ensaio em blocos incompletos parcialmente balanceados (PBIB), aumentado pela adição de tratamentos comuns a todos os blocos.

Hoje, pacotes genéricos para a análise REML (Patterson & Thompson, 1971) podem ser encontradas nos *softwares*-padrão de análise estatística, tais como o R (lme4) e o SAS (proc mixed).

Os delineamentos em blocos incompletos podem ser classificados em duas categorias, conforme o agrupamento dos seus blocos:

1. *resolvable designs* - casos em que os blocos podem ser agrupados em repetições;
2. *non-resolvable designs* - casos em que os blocos não podem ser agrupados em repetições.

⁴No Anexo encontram-se algumas identidades matriciais úteis como referência à teoria de blocos incompletos.

Um delineamento *resolvable* é interessante porque o pesquisador prático vê a semelhança com a estrutura ortogonal do delineamento em blocos casualizados em um delineamento que pode ainda ser eficiente quanto à blocagem. Dentre os delineamentos *resolvable* mais utilizados encontram-se os látices quadrados (Cochran & Cox, 1968). Os sistemas triplos de Steiner são também excelentes alternativas para blocos incompletos *resolvable* de tamanho 3. Um sistema triplo de Steiner (STS) de ordem v , $S(2,3,v)$, é um conjunto de triplas (blocos), construídas sobre o conjunto de v pontos (tratamentos), tal que cada par de pontos distintos ocorrem juntos em um único bloco. Um delineamento famoso na literatura é o sistema triplo de Kirkman ($v = 15$) que constitui um delineamento balanceado (Ray-Chaudury & Wilson, 1971).

2.2.2 Delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados (PBIB)

Bose & Nair (1939) desenvolveram uma nomenclatura geral para delineamentos em blocos incompletos. De acordo com Nair (1952), um delineamento é parcialmente balanceado se:

1. há v tratamentos arranjados em b blocos e cada bloco contém k diferentes tratamentos ($k < v$);
2. cada tratamento ocorre em r blocos;

3. fixando-se um tratamento qualquer, os restantes podem ser agrupados em m grupos contendo n_1, n_2, \dots, n_m tratamentos, de modo que os n_i tratamentos do i -ésimo grupo ocorram com esse tratamento λ_i vezes. (Os tratamentos do i -ésimo grupo são chamados de i -ésimos associados do tratamento em questão. Os valores de $n_1, n_2, \dots, n_m, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ são independentes do tratamento inicialmente considerado. Alguns dos λ 's podem ser iguais.);
4. o tratamento A é i -ésimo associado de B , o tratamento B é também i -ésimo associado de A . (Se A e B são i -ésimos associados, p_{jk}^i representa o número de tratamentos comuns aos j -ésimos associados de A e k -ésimos associados de B , e são independentes do par de tratamentos que se considera.)

Verificam-se as seguintes relações entre os parâmetros, de acordo com Hinkelmann & Kempthorne (2005):

$$\begin{aligned}
 rv &= bk \\
 \sum_{i=0}^m n_i &= v \\
 \sum_{i=0}^m n_i \lambda_i &= rk \\
 \sum_{i=0}^m p_{ij}^k &= n_j \\
 p_{ij}^k &= p_{ji}^k \\
 n_k p_{ji}^k &= n_i p_{kj}^i = n_j p_{ik}^j
 \end{aligned}$$

Os termos $v, b, r, k, n_1, n_2, \dots, n_m, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ são chamados de parâmetros de primeiro tipo, enquanto os p_{ij}^k são os parâmetros de segundo tipo.

Inicialmente, a teoria dos PBIB dedicou-se ao estudo das propriedades de eficiência de delineamentos ou métodos de construção particulares. Com o advento de algoritmos de buscas implementados em computadores pessoais, tornou-se mais importante definir o critério, segundo o qual se julgue o delineamento bem ou mal, e buscar um delineamento que satisfaça de forma “ótima” ou “quase-ótima” a esse critério.

Em resumo, quanto menor o número de classes de associação, tão mais próximo do balanceamento está o delineamento. Isso implica, conseqüentemente, em maior eficiência.

2.2.3 Blocagem de delineamentos fatoriais fracionários em modelos de superfície de resposta

O delineamento de experimentos de superfície de resposta em blocos tem recebido considerável atenção. Referências padrão como Box & Draper (1987) e Khuri & Cornell (1996) concentram-se em condições de blocagem ortogonal que, por sua vez, requer frequentemente blocos muito grandes. Recentemente, muitos trabalhos têm sido feitos para arranjar os delineamentos de superfície de resposta em blocos pequenos não ortogonais; veja-se, por exemplo Atkinson & Donev (1989), Cook & Nachtsheim (1989) e Trinca & Gilmour (2000).

Uma classe de delineamentos para se ajustarem modelos de segunda ordem de superfície de resposta de 3 níveis foi introduzida por Box & Behnken (1958, 1960). São 17 delineamentos de Box-Behnken que são utilizados para 3-12 e 16 fatores. Embora esses delineamentos tenham sido desenvolvidos aproximadamente há 50 anos, são recomendados, assim como os delineamentos de Box-Wilson (1951), para modelos de superfícies de resposta. Dentre esses 17 delineamentos, 10 foram construídos em blocos incompletos balanceados e os outros 7, em blocos incompletos parcialmente balanceados. Nguyen & Borkowski (2008) mostraram que esses 7 delineamentos podem ser melhorados em termos de rotacionalidade, assim como o critério D-otimalidade. Além disso, os autores também forneceram novas soluções de blocagem ortogonal para 5, 8, 9, 11 e 13 fatores.

Mead (1990) apresentou algumas sugestões para bloquear delineamento composto central (DCC) para vários tamanhos de blocos, usando confundimento total ou confundimento parcial fracionário (no qual diferentes efeitos estão confundidos em diferentes frações do delineamento fatorial) dos efeitos menos importantes do fatorial de dois níveis e a distribuição dos pontos axiais em pares dentro dos blocos.

Quando se usa confundimento parcial fracionário, é suposto que alguns efeitos são menos importantes do que outros; então, o delineamento pode ser muito pobre para se estimarem alguns efeitos. Além disso, não existe um confundimento padrão óbvio para delineamentos fatoriais de dois níveis para blocos de tamanho 2 e 3 ou se o número de fatores é maior do que 3 (blocos de tamanho igual a 4).

De acordo com Cheng & Wu (2002) para se estudarem os delineamentos fatoriais fracionários blocados, algumas suposições⁵ hierárquicas geralmente assumidas são:

1. efeitos de tratamentos de ordem inferior são mais prováveis de serem significativos do que efeitos de ordem superior;
2. efeitos de tratamentos de mesma ordem são igualmente importantes;
3. interações entre os fatores blocos e tratamentos são desprezíveis;
4. interações entre os fatores blocos são tão importantes quanto os efeitos principais dos fatores blocos.

2.2.4 Notações e definições

O estudo da blocagem em delineamentos fatoriais fracionários é complicado pela presença de dois grupos de geradores: um para definir a fração e outro para definir o esquema de blocagem, o que, portanto, resulta em dois tipos do tamanho padrão da palavra das relações definidoras, um para tratamentos (W_t) e outro para blocos (W_b).

Seja $D(2^{k-p} : 2^n)$ um delineamento 2^{k-p} em blocos de tamanho 2^{k-p-n} , ($n < k - p$). Isso pode ser visto como um delineamento fatorial fracionário $2^{(k+n)-(p+n)}$, em que os fatores são divididos em diferentes tipos: k fatores tratamentos e n fatores blocos b_1, \dots, b_n . As 2^n combinações dos fatores blocos são usadas para dividir as 2^{k-p} combinações dos tratamentos dentro dos 2^n blocos. Em tal delineamento, existem dois tipos de palavras que são chamadas de palavras definidoras de tratamentos e palavras definidoras de blocos.

⁵Essas suposições têm sido discutidas por Sun et al. (1997); Sitter et al. (1997) e Wu & Hamada (2000).

Dispor um delineamento fatorial fracionário 2^{k-p} em 2^n blocos é equivalente a selecionar n relações definidoras independentes para os n fatores blocos b_1, \dots, b_n . Portanto, pode-se formalmente escolher

$$B_1 = v_1, \dots, B_n = v_n \quad (\text{em que } v_1, \dots, v_n \text{ são fatores tratamentos})$$

ou pode-se escrever como

$$I = B_1 = v_1 = \dots = B_n = v_n,$$

que se chama esquema de blocagem. Os v_i 's e todas as suas interações $v_1 v_2, \dots, v_1 \cdots v_n$, estão, respectivamente, confundidos com os $2^n - 1$ efeitos de blocos representados na notação pelos B_i 's e seus produtos $B_1 B_2, B_1 B_3, \dots, B_1 \cdots B_n$, e, pela suposição 4, qualquer um desses blocos é tratado como um efeito principal de bloco, denotado por B . Retirando-se todos os B 's de $B_i v_i$, $i = 1, \dots, n$, todas as palavras $v_i, v_i v_j, \dots, v_1 \cdots v_n$ e a identidade I formam grupo de tamanho 2^n . Desse modo, chama-se o grupo

$$\{I, v_1, v_2, v_1 v_2, \dots, v_1 \cdots v_n\} \text{ ou } \{I, v_1, v_2, \dots, v_{2^n-1}\}$$

de subgrupo de contraste de definição de blocos e denota-se por G_b , em que $v_1, v_2, v_1 v_2, \dots, v_1 \cdots v_n$ são ainda chamados de palavras definidoras de blocos. Cabe reiterar que o número de letras em uma palavra é chamado de tamanho da palavra e o vetor $W_b = (A_{1,1}, \dots, A_{2^n-1,1})$ é chamado de tamanho padrão da palavra, em que $A_{i,1}$ denota o número de palavras com tamanho i em G_b .

Multiplicando-se v_i ao subgrupo de contraste de definição de tratamentos $\{I, w_1, \dots, w_{2^p-1}\}$, vê-se que um efeito de bloco confunde o seguinte conjunto de efeitos:

$$\{v_i, v_i w_1, v_i w_2, \dots, v_i w_{2^p-1}\}.$$

Fazendo-se isso para cada elemento em G_b , exceto para I , obtém-se o conjunto dos efeitos, que estão confundidos com os efeitos de blocos. Seu tamanho é $2^p(2n-1)$ e denota-se o conjunto por G_{bt} . O seu tamanho padrão da palavra é definido por:

$$W_{bt} = (A_{1,2}, \dots, A_{n,2}),$$

em que $A_{i,2}$ é o número de palavras com tamanho i em G_{bt} . O W_{bt} indica a influência dos fatores blocos nos efeitos dos tratamentos.

Por causa da relação intrínseca entre W_t e W_b , um delineamento 2^{k-p} com maior resolução pode ser menos desejável quando a blocagem é necessária. Por exemplo: é simples verificar que um delineamento 2^{5-1} com aberração mínima com a relação definidora $I = ABCDE$ não pode ser arranjado em 8 blocos sem se confundirem efeitos principais dos tratamentos, mas o delineamento 2^{5-1} de resolução IV com $I = ABCE$ pode ser arranjado em 8 blocos com o esquema de blocagem definido por

$$B_1 = AB, \quad B_2 = AC, \quad B_3 = AD.$$

Igualmente, para delineamentos 2^{k-p} com a mesma resolução, um delineamento pode ser julgado “pior” de acordo com o critério de aberração, mas pode ser capaz de acomodar mais blocos do que um “melhor” delineamento fatorial fracionário. Por exemplo: o delineamento 2^{7-2} de aberração mínima definido por $I = ABCF = ABDEG$ (com resolução IV) não pode ser arranjado em 16 blocos sem se confundirem alguns efeitos principais de tratamentos, enquanto que o segundo melhor delineamento 2^{7-2} definido por $I = ABCF = ADEG$ (com resolução IV) pode ser arranjado em 16 blocos com o esquema de blocagem definido como:

$$B_1 = AB, \quad B_2 = AC, \quad B_3 = AD, \quad B_4 = AE.$$

Idealmente, deve-se procurar por um delineamento que tenha aberração mínima com respeito aos tratamentos e blocos. Entretanto, baseando-se em uma análise da relação entre os dois tamanhos das palavras padrão W_t e W_{bt} , Zhang & Park (2000) provaram que não existe tal delineamento. Esses autores propuseram modificações nos critérios de resolução e aberração para a escolha de delineamentos fatoriais fracionários blocados.

Da mesma forma como os efeitos livres foram definidos por Wu & Chen (1992); Wu & Hamada (2000) definiram os efeitos livres para os fatoriais fracionários blocados e usaram o número total de efeitos livres para compararem e classificarem diferentes delineamentos 2^{k-p} blocados.

Um efeito principal ou interação de dois fatores são livres, se nenhum dos seus aliases são efeitos principais ou interações de dois fatores, como também não estão confundidos com qualquer efeito de bloco. Um efeito de bloco é livre se não é aliás com qualquer efeito principal de tratamentos ou qualquer interação de dois fatores de tratamentos.

Considerando-se que as interações entre os fatores tratamentos e blocos e as interações de ordem três ou superior são desprezíveis, todos os efeitos livres são estimáveis no delineamento fatorial fracionário bloqueado. Então, é importante discutirem-se delineamentos que envolvam um número máximo de efeitos livres e, sob essas suposições, o critério de efeitos livres é mais adequado em algumas situações do ponto de vista operacional, pois o conceito do critério tem um significado mais direto e interpretável do que o tamanho das palavras definidoras. Chen et al. (2006) propuseram métodos para se construir delineamentos bloqueados com mais interações de 2 fatores livres e provaram que os delineamentos resultantes têm um número máximo de interações de dois fatores livres para alguns k, p e n .

Assim, conforme visto, os critérios de resolução e aberração mínima não podem ser aplicados diretamente em delineamentos fatoriais fracionários bloqueados; além disso, tanto o número de tratamentos (v) das frações como o tamanho dos blocos (k) são potências dos níveis do fatorial. Em situações nas quais o pesquisador deseja trabalhar com quantidades diferentes de (v) ou (k) que não sejam potências dos níveis, podem-se utilizar algoritmos para se construir delineamentos experimentais ótimos.

É importante notar que, seguindo a lógica de sua construção, espera-se que um delineamento ótimo para efeitos livres deva ser também bom segundo o critério de eficiência na estimação dos efeitos dos fatores (incluindo efeitos de blocos). No entanto, construir algoritmos que contemplassem critérios baseados no número de efeitos livres seria extremamente complicado (Sun et al., 1997).

Como bloquear um delineamento em uma forma ótima é um problema de importância prática, vários algoritmos para a construção de ótimos delineamentos de superfície de resposta bloqueados envolvendo uma variável bloqueagem têm sido descritos na literatura. Por exemplo: Atkinson & Donev (1989); Cook & Nachtsheim (1989); Miller & Nguyen (1994) e Trinca & Gilmour (2000) discutiram a construção dos delineamentos com a variável bloqueagem fixada e Goos & Vandebroek (2001) apresentaram um algoritmo para calcular delineamentos ótimos na presença de uma variável bloqueagem aleatória.

Embora um modelo com efeitos de blocos aleatórios possa ser melhor para análise, as estimativas das variâncias dos parâmetros dos tratamentos dependem da razão de variâncias entre e dentro de blocos. Já que essa razão é desconhecida, é mais seguro planejar para o pior caso, ou seja, aquele que leva a maior variância dos parâmetros de tratamentos estimados. Isso ocorre quando a variância entre blocos tende a infinito, o que é equivalente ao caso de blocos fixos (Bueno Filho & Gilmour, 2003).

3 METODOLOGIA

3.1 Modelo para seleção dos tratamentos e critérios alfabéticos de otimalidade

Na forma matricial, os modelos polinomiais podem ser escritos como $\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$, em que \mathbf{y} é o vetor das observações ($n \times 1$); X é uma matriz cujas colunas são expansões dos níveis de cada fator para acomodar o polinômio a ser ajustado; $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de parâmetros do modelo e $\boldsymbol{\varepsilon}$ é o vetor dos erros aleatórios correspondentes às observações ($n \times 1$).

O estimador de mínimos quadrados de $\boldsymbol{\beta}$ é $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (X'X)^{-1}X'\mathbf{y}$ e sua matriz de covariâncias é dada por: $\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = (X'X)^{-1}\sigma^2$. Na prática, σ^2 também deve ser estimado e uma estimativa é obtida pelo quadrado médio do resíduo da análise de variância dos resultados do experimento. Note-se que σ^2 não depende de X e, portanto, pode-se escolher X de tal forma a otimizar alguma propriedade da matriz $X'X$ que reflita em precisão de $\boldsymbol{\beta}$. Dentre os critérios de otimalidade disponíveis na literatura para tal otimização, os de maior interesse neste trabalho são os critérios A e D.

Geralmente, os algoritmos de construção desses delineamentos são do tipo *exchange*, que consiste na geração aleatória de um delineamento inicial, a partir dos N pontos candidatos, de tamanho v . Cada combinação do delineamento inicial é sequencialmente substituída por uma combinação do conjunto de pontos candidatos. A troca que resultar em uma melhora do delineamento é aceita. O procedimento somente para quando não houver mais trocas que resultem em uma melhora.

Como é comum em algoritmos para seleção de delineamentos, o procedimento descrito anteriormente é repetido várias vezes para um número fixo e é também chamado de tentativas de delineamentos iniciais para aumentar a chance de se obter o delineamento ótimo global, ou seja, uma alternativa para se evitar a seleção de um delineamento ótimo local.

3.2 Implementação do algoritmo *exchange*

O algoritmo *exchange* foi implementado na linguagem *R*. Para uma melhor compreensão da sua implementação, são descritos, a seguir, seus passos.⁶

Definidos o número total de tratamentos (N pontos candidatos) e o número de tratamentos v a serem alocados às unidades experimentais, o algoritmo inicialmente sorteia um delineamento do conjunto ξ dos delineamentos possíveis. Após o sorteio, é, então, construída a matriz de delineamento X do modelo adotado. O próximo passo consiste em obter-se a matriz de informação e, a partir dessa, determinar o valor do determinante da matriz $X'X$, que é armazenado.

Um novo passo consiste na troca entre linhas da matriz X do delineamento e outras linhas candidatas. Após ser montada a nova matriz de informação do delineamento, é obtido o novo valor do determinante 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 aumento no determinante, a troca é efetivada. Caso contrário, é mantida a configuração anterior. O processo é repetido até que não haja mais aumento do

⁶O programa desenvolvido encontra-se no Apêndice A.

determinante.

Para se evitar problema de ótimos locais, procede-se ao sorteio de vários delineamentos iniciais, obtendo-se vários delineamentos ao ser percorrido todo o domínio.

3.3 Passos do algoritmo *exchange*

1. Sorteio

Definidos o número de fatores do ensaio fatorial para s níveis, o número de parâmetros do modelo e o número de unidades experimentais, o algoritmo, então, constrói a matriz base ξ_N , com todos os pontos candidatos e, então, sorteia um delineamento inicial qualquer ξ_1 , contendo os tratamentos a serem alocados às unidades experimentais.

2. Matriz do delineamento

Definido o delineamento ξ_1 , o algoritmo, então, encontra a sua respectiva matriz de delineamento X_1 .

3. Matriz de informação

A matriz de informação $(X_1'X_1)$ é encontrada a partir da matriz de delineamento e armazenada.

4. Critério

Calcula-se o determinante de $(X_1'X_1)$.

5. Troca

Na matriz do delineamento X_1 de ξ_1 é efetivada a troca de uma de suas linhas com uma linha da matriz dos pontos candidatos ξ_N .

6. Construção do delineamento ξ_2

Após o intercâmbio, obtém-se um novo delineamento. A partir daí, segue-se o mesmo passo efetivado em ξ_1 .

7. Construção da matriz do delineamento ξ_2

$$X_2$$

8. Construção da matriz de informação para o delineamento ξ_2

$$(X_2'X_2)$$

9. Decisão

Compararam-se os valores obtidos pelo critério de otimização que foram encontrados nos delineamentos ξ_1 e ξ_2 . Assim, a decisão é tomada comparando-se o critério obtido pelo ξ_1 versus ξ_2 .

O delineamento escolhido será aquele que possuir maior determinante para a matriz de informação. Ao se maximizar o determinante, obtém-se um elipsóide de menor volume para os coeficientes do modelo.

Comparando-se os dois delineamentos por meio do determinante das respectivas matrizes de informação, o algoritmo encaminha uma das seguintes decisões:

- Se $\det(X_1'X_1) > \det(X_2'X_2)$, o melhor delineamento é ξ_1 . Assim, o algoritmo o mantém.
- Se $\det(X_1'X_1) < \det(X_2'X_2)$, neste caso o delineamento ξ_2 é melhor do que ξ_1 . Logo, é armazenado.

10. Ciclo

Encontrando-se o melhor delineamento, uma nova troca é efetuada, repetindo-se, assim, todo o processo.

11. Fim

O algoritmo repete todo o procedimento para um número pré-determinado de sorteios iniciais. Terminado o processo, o melhor delineamento encontrado pelo algoritmo é, então, apresentado e armazenado.

3.4 O algoritmo para blocagem de delineamentos de superfície de resposta

Nesta seção, demonstra-se como bloquear delineamentos em geral utilizando-se critérios adequados. Na subseção 3.4.2 apresenta-se a construção de delineamentos em blocos incompletos e, na subseção 3.4.4, a construção de delineamentos em blocos incompletos *resolvable*.

3.4.1 O modelo estatístico

Um modelo linear geral para um delineamento em b blocos, supondo-se que os efeitos de blocos são fixos, é apresentado da seguinte forma:

$$\mathbf{y} = Z\boldsymbol{\beta} + X\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon},$$

em que:

- \mathbf{y} é o vetor da variável resposta ($n \times 1$);
- Z é a matriz de delineamento dos blocos ($n \times b$);
- $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor dos parâmetros dos efeitos de blocos ($b \times 1$);
- X é a matriz de regressão para os fatores em questão ($n \times p$);
- $\boldsymbol{\theta}$ é o vetor dos parâmetros do polinômio a ser ajustado ($p \times 1$);
- $\boldsymbol{\epsilon}$ é o vetor de erros aleatórios ($n \times 1$), $E(\boldsymbol{\epsilon}) = 0$ e $\text{Var}(\boldsymbol{\epsilon}) = I\sigma^2$.

Para os experimentos blocados neste trabalho, a matriz de delineamento de blocos Z é matriz de 0's e 1's, em que o elemento $z_{ij} = 1$, ($i = 1 \dots, n$; $j = 1, \dots, b$) se a i -ésima unidade experimental pertence ao j -ésimo bloco e $z_{ij} = 0$, caso não pertença.

3.4.2 O algoritmo *interchange* - construção dos fatoriais fracionários em blocos incompletos

Após a seleção de alguns tratamentos do fatorial completo por meio do algoritmo *exchange*, procedeu-se à alocação dos mesmos aos blocos para a construção do fatorial fracionário em blocos incompletos por meio do algoritmo *interchange*, que também foi implementado na linguagem *R* e encontra-se no Apêndice B com suas etapas detalhadas. Para uma melhor compreensão do algoritmo efetuado, são descritos, a seguir, os passos necessários para a sua implementação.

Definidos a quantidade e quais os tratamentos selecionados, número de blocos, tamanho dos blocos e o número de repetições dos tratamentos, o algoritmo inicialmente sorteia um delineamento do conjunto ξ dos delineamentos possíveis. Após o sorteio, é, então, calculada a matriz de delinea-

mento X_1 do modelo adotado.

O próximo passo consiste em calcular a matriz de informação e, a partir dessa, a matriz de covariâncias. Obtém-se o valor do critério da matriz de covariâncias, que é armazenado.

Um novo passo (intercâmbio) é efetuado. Esse consiste na troca de linhas da matriz de delineamento referentes apenas às colunas dos efeitos principais e interações, conservando-se, portanto, as linhas das colunas referentes aos blocos. Após a montagem da nova matriz de delineamento, de informação e de covariâncias, 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 novo obtido pelo intercâmbio. Se a troca resultar em uma melhora de acordo com o critério adotado, ela é efetivada. Caso contrário, é mantida a configuração anterior. O processo é repetido várias vezes até que não haja mais melhoras.

3.4.3 Passos do algoritmo *interchange*

1. Sorteio

Definidos o número de tratamentos do fatorial fracionário, o número de repetições dos tratamentos, o tamanho do bloco e o número total de blocos, o algoritmo sorteia um delineamento inicial qualquer ξ_1 contendo os tratamentos a serem alocados aos blocos aleatoriamente.

2. Matriz do delineamento

Definido o delineamento ξ_1 , o algoritmo, então, encontra a sua respectiva matriz de delineamento X_1 .

3. Matriz de informação

Consideram-se as seguintes partições da matriz de delineamento X_1 :

$$X_1 = (Z \parallel X),$$

em que: Z representa o espaço descrito pelas colunas referentes aos efeitos de blocos e X tem significado análogo para os efeitos dos tratamentos. Dessa forma, a matriz de informação $(X_1'X_1)$ pode ser escrita como:

$$(X_1'X_1) = \begin{pmatrix} Z'Z & Z'X \\ X'Z & X'X \end{pmatrix};$$

sua inversa é, portanto,

$$(X_1'X_1)^{-1} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix},$$

em que C_{22} é proporcional à variância dos efeitos de tratamentos $V(\hat{\theta}|\xi_1)$ conforme demonstrado no Anexo.

4. Critério

Toma-se o traço (ou o determinante) da porção C_{22} .

5. Troca

Na matriz do delineamento X_1 de ξ_1 é efetuada a troca de duas linhas referentes aos efeitos de tratamentos. Ao intercâmbio só interessa se as linhas referentes aos efeitos de tratamentos forem de blocos diferentes, pois trocar linhas (tratamentos) no mesmo bloco não modifica o delineamento.

É importante notar que a troca é feita de forma sequencial, começando da primeira unidade experimental (UE_1) do primeiro bloco (B_1) versus a primeira unidade experimental (UE_1) do segundo bloco (B_2); depois, (UE_1) do (B_1) com (UE_2) do (B_2) e assim por diante, até (UE_k) do (B_{b-1}) versus (UE_k) do (B_b).

6. Construção do delineamento ξ_2

Após o intercâmbio, obtém-se uma nova matriz X_* do delineamento. A partir daí, segue-se o mesmo passo efetuado em ξ_1 .

7. Construção da matriz do delineamento ξ_2

$$X_2 = (Z \parallel X_*)$$

8. Construção da matriz de informação para o delineamento ξ_2

$$(X_2'X_2) = \begin{pmatrix} Z'Z & Z'X_* \\ X_*'Z & X_*'X_* \end{pmatrix}.$$

Sua inversa é, portanto,

$$(X_2'X_2)^{-1} = \begin{pmatrix} C_{11}^* & C_{12}^* \\ C_{21}^* & C_{22}^* \end{pmatrix}.$$

9. Decisão

Compararam-se os valores obtidos pelo critério de otimização que foram encontrados nos delineamentos ξ_1 e ξ_2 . Assim, a decisão é tomada comparando-se o critério obtido pelo ξ_1 versus o valor do critério obtido pelo ξ_2 .

O delineamento escolhido será aquele que possuir menor determinante ou traço para a inversa da matriz de informação. Ao se minimizar o determinante ou traço, obtém-se um elipsóide de menor volume para os coeficientes do modelo ou uma menor variância nos efeitos das estimativas dos tratamentos, respectivamente.

Comparando-se os dois delineamentos por meio do determinante ou traço nas inversas das respectivas matrizes de informação, o algoritmo encaminha uma das seguintes decisões:

- Se $\Psi^7(C_{22}) < \Psi(C_{22}^*)$, o melhor delineamento é ξ_1 . Assim, o algoritmo o mantém.
- Se $\Psi(C_{22}) > \Psi(C_{22}^*)$, neste caso o delineamento ξ_2 é melhor do que ξ_1 . Logo, é armazenado.

10. Ciclo

Encontrando-se o melhor delineamento, uma nova troca é efetuada, repetindo-se, assim, todo o processo.

11. Fim

O algoritmo repete todo o procedimento para um número pré-determinado de sorteios iniciais. Terminado o processo, o melhor delineamento encontrado pelo algoritmo é, então, armazenado e apresentado.

⁷Função indicadora das operações de traço ou determinante.

3.4.4 O algoritmo *S-interchange* - construção dos fatoriais fracionários em BIB do tipo *resolvable*

Uma outra maneira adicional para a construção de fatoriais fracionários bloqueados é a aplicação do algoritmo *S-interchange*, do qual se podem obter delineamentos em blocos incompletos balanceados do tipo *resolvable*. A forma de construção é similar à anterior, com algumas pequenas alterações.

3.4.5 O modelo estatístico para análise de delineamentos *resolvable*

Um modelo linear geral para um delineamento com v tratamentos em b blocos e que possa ser arranjando em r superblocos (repetições completas), supondo-se os efeitos de blocos e superblocos fixos, é apresentado da seguinte forma:

$$\mathbf{y} = W\boldsymbol{\rho} + Z\boldsymbol{\beta} + X\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon},$$

em que:

- \mathbf{y} é o vetor da variável resposta ($n \times 1$);
- W é a matriz de delineamento dos superblocos ($n \times r$);
- $\boldsymbol{\rho}$ é o vetor dos parâmetros dos efeitos de superblocos ($r \times 1$);
- Z é a matriz de delineamento dos blocos ($n \times b$);
- $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor dos parâmetros dos efeitos de blocos ($b \times 1$);
- X é a matriz de regressão dos fatores em questão ($n \times p$);
- $\boldsymbol{\theta}$ é o vetor dos parâmetros dos tratamentos ($p \times 1$);
- $\boldsymbol{\epsilon}$ é o vetor de erros aleatórios ($n \times 1$), $E(\boldsymbol{\epsilon}) = 0$ e $\text{Var}(\boldsymbol{\epsilon}) = I\sigma^2$.

A matriz de incidência de superblocos W é uma matriz de 0's e 1's, em que o elemento $w_{ij} = 1$, ($i = 1, \dots, n$; $j = 1, \dots, r$) se a i -ésima unidade experimental pertence ao j -ésimo superbloco e, $w_{ij} = 0$, caso não pertença.

O procedimento para a construção de fatoriais fracionários em delineamentos em blocos incompletos do tipo *resolvable* difere daquele da subseção 3.4.2 apenas na troca e distribuição dos tratamentos nos blocos (superblocos). Para tanto, são aleatoriamente distribuídos v tratamentos em cada um dos r superblocos (agrupamentos de blocos de tamanho k), sendo que a troca é feita entre tratamentos alocados em blocos diferentes dentro de cada superbloco, ou seja, aplica-se a função troca do algoritmo *interchange* aos blocos dentro de cada superbloco. Para uma melhor compreensão do algoritmo efetuado, são descritos, a seguir, os passos necessários para sua implementação. O programa resultante encontra-se no Apêndice C.

3.4.6 Passos do algoritmo *S-interchange (resolvable)*

1. Sorteio

Definidos o número de tratamentos do fatorial fracionário, o número de repetições de cada tratamento (número de superblocos), o tamanho do bloco e o número total de blocos, o algoritmo sorteia um delineamento inicial qualquer ξ_1 , contendo os tratamentos a serem alocados aos blocos aleatoriamente dentro de cada superbloco.

2. Matriz do delineamento

Definido o delineamento ξ_1 , o algoritmo, então, encontra a sua respectiva matriz de delineamento X_1 .

3. Matriz de informação

Consideram-se as seguintes partições da matriz de delineamento X_1 :

$$X_1 = (W \parallel Z \parallel X),$$

em que W representa o espaço descrito pelas colunas referentes aos efeitos de superblocos, Z e X têm significado análogo para os efeitos dos blocos e tratamentos, respectivamente. Dessa forma, a matriz de informação $(X_1'X_1)$ pode ser escrita como:

$$(X_1'X_1) = \begin{pmatrix} W'W & W'Z & W'X \\ Z'W & Z'Z & Z'X \\ X'W & X'Z & X'X \end{pmatrix}.$$

Sua inversa é, portanto,

$$(X_1'X_1)^{-1} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix},$$

em que C_{33} é proporcional à variância dos efeitos de tratamentos $V(\hat{\theta}|\xi_1)$.

4. Critério

Toma-se o traço (ou o determinante) da porção C_{33} .

5. Troca

Na matriz do delineamento X_1 de ξ_1 é efetivada a troca de duas linhas referentes aos efeitos de tratamentos. Ao intercâmbio só interessa se as linhas referentes aos efeitos de tratamentos forem de blocos diferentes pertencentes ao mesmo superbloco, pois trocar linhas (tratamentos) no mesmo bloco não modifica o delineamento.

É importante notar que a troca é feita de forma sequencial, começando da primeira unidade experimental (UE_1) no primeiro bloco (Z_1) do primeiro superbloco (W_1) versus a primeira unidade experimental (UE_1) no segundo bloco (Z_2) do primeiro superbloco (W_1); depois, (UE_1) no (Z_1) do (W_1) com (UE_2) no (Z_2) do (W_1) e assim por diante, até (UE_k) no (Z_{b-1}) do (W_r) versus (UE_k) no (Z_b) do (W_r).

Desse momento em diante, os passos 6 até 11 são análogos ao da subseção 3.4.3.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Escolha de tratamentos

Como visto, a escolha de um subconjunto de tratamentos é um dos objetivos do experimento e da região de interesse. Em um fatorial, geralmente existem diferentes conjuntos de combinações de níveis dos fatores que podem ser usados, tais como os delineamentos composto central, Box-Behnken e muitos outros compostos de fatoriais fracionários. Desse modo, os critérios revisados como resolução e aberração buscam atender a princípios como os de ortogonalidade e estimabilidade. Note-se que a estimabilidade está implícita na presença de colunas da matriz de delineamento correspondentes aos efeitos do modelo. Assim, o compromisso de se encontrar um subconjunto de tratamentos com propriedades desejáveis pode, em geral, ser traduzido pela busca de maior eficiência, pois essa propriedade implica em estimabilidade, estrutura de confundimento mais favorável, etc.

O delineamento otimizado (segundo o critério D), encontrado pelo algoritmo de busca, para 15 tratamentos escolhidos, entre os 27 tratamentos de um fatorial completo 3^3 com os fatores A, B e C, considerando o ajuste do modelo de segunda ordem, está apresentado na Tabela 11.

TABELA 11 Delineamento D-ótimo com 15 tratamentos selecionados para efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores e o delineamento composto central (DCC: $2^k + 2k + 1$) com ponto axial sendo $\alpha = 1$

Delineamento D-ótimo			DCC com $\alpha = 1$		
Fatores			Fatores		
A	B	C	A	B	C
-1	-1	-1	-1	-1	-1
1	-1	-1	1	-1	-1
1	1	-1	-1	1	-1
-1	1	-1	1	1	-1
-1	-1	1	1	-1	1
-1	1	1	-1	-1	1
-1	0	0	-1	1	1
0	1	0	1	1	1
1	-1	0	0	0	0
0	-1	-1	-1	0	0
1	-1	1	1	0	0
1	0	-1	0	-1	0
0	0	1	0	1	0
1	0	1	0	0	-1
1	1	1	0	0	1

Apesar de os dois delineamentos possuírem 11 tratamentos em comum, o delineamento D-ótimo foi mais eficiente, $EF = \frac{24192 \times 10^4}{18432 \times 10^4} = 1,3125$, ou seja, aproximadamente 31% mais eficiente do que o delineamento composto central. Além disso, a estrutura dos aliases dos dois delineamentos é um pouco complexa, devido ao fato de ambos possuírem confundimento parcial dos efeitos, sendo complicado estabelecer, assim, o conjunto de aliases de cada um.

Observando-se apenas as inversas das matrizes de informação (matriz de dispersão) dos delineamentos ótimo e composto central, respectivamente, tem-se:

$$\left(X'_{\text{ótimo}} X_{\text{ótimo}} \right)^{-1} = \frac{\sigma_e^2}{100} \times$$

	β_0	β_1	β_2	β_3	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
β_0	67	0	-1	-2	-28	-22	-28	2	0	-2
β_1		9	1	0	-1	2	-2	1	0	0
β_2			9	0	1	0	1	-1	0	1
β_3				9	0	3	0	0	-2	1
β_{11}					45	-3	-8	1	0	4
β_{22}						36	-3	1	-1	-1
β_{33}							45	-5	0	-2
β_{12}								12	0	0
β_{13}									10	0
β_{23}										12

em que “*Sim*” indica que a matriz é simétrica.

$$\left(X'_{\text{DCC}}X_{\text{DCC}}\right)^{-1} = \frac{\sigma_{\epsilon}^2}{100} \times$$

$$\begin{matrix} & \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{33} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{23} \\ \beta_0 & \mathbf{29} & 0 & 0 & 0 & -11 & -11 & -11 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1 & & \mathbf{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_2 & & & \mathbf{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_3 & & & & \mathbf{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{11} & & & & & \mathbf{39} & -11 & -11 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{22} & & & & & & \mathbf{39} & -11 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{33} & & & & & & & \mathbf{39} & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{12} & & & & & & & & \mathbf{13} & 0 & 0 \\ \beta_{13} & & & & & & & & & \mathbf{13} & 0 \\ \beta_{23} & & & & & & & & & & \mathbf{13} \end{matrix}$$

Note-se que cada linha ou coluna representam os coeficientes do modelo de regressão, sendo que os elementos da matriz de dispersão são as covariâncias dos coeficientes, de forma que os elementos na diagonal principal representam as variâncias e os que se situam fora dela são as covariâncias. Apesar de a estrutura de covariância do delineamento ótimo apresentar mais covariâncias do que a do DCC, as variâncias dos seus coeficientes são, na maioria, inferiores. O fato de que a matriz de covariâncias do DCC está mais próxima da ortogonalidade do que do delineamento otimizado não impede de obterem-se combinações lineares no delineamento otimizado mais precisas. Por exemplo: caso o pesquisador esteja interessado na combinação $\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_2$, as variâncias do seu estimador nos delineamentos otimizado e DCC são, respectivamente, iguais a $(\mathbf{16} = 9 + 9 - 2 \times 1)$ e $(\mathbf{20} = 10 + 10 - 2 \times 0) \times \frac{\sigma^2}{1000}$.

Outra informação adicional é que a variância média dos coeficientes do modelo, ou seja, o traço da matriz de covariâncias dos delineamentos ótimo e DCC, foram iguais a 2,54 e 2,13, respectivamente. Ou seja, o delineamento D-ótimo é 19% menos eficiente do que o DCC. Como o critério D leva em conta a estrutura de variâncias e covariâncias dos coeficientes e, como o modelo de superfície de resposta é uma combinação linear desses coeficientes, seria interessante utilizar-se um critério que levasse em consideração não só as variâncias, como também as covariâncias dos coeficientes para o melhor ajuste do modelo para a descrição da relação entre a variável resposta e os fatores.

O D-ótimo minimiza a variância generalizada das estimativas dos componentes de β , o que equivale a minimizar o volume da região de confiança multidimensional para os componentes de β . Ou ainda, minimiza a variância de todas as combinações lineares entre os parâmetros de β .

O mesmo resultado obtido com o DCC pode ser generalizado para situações experimentais mais complexas, pois eficiência e ortogonalidade não são sinônimos (Mead, 1990).

Assim, podem-se construir delineamentos fatoriais fracionários ótimos por meio do algoritmo *exchange* mais eficientes do que os clássicos da literatura, além da flexibilidade de sua construção para qualquer quantidade de pontos experimentais.

4.2 Escolha de tratamentos e blocagem

4.2.1 Delineamento A-ótimo

A Tabela 12 apresenta o delineamento A-ótimo encontrado pelo algoritmo *interchange* após a seleção dos $v = 24$ tratamentos de um fatorial completo 3^4 por meio do algoritmo *exchange*, sendo que o ponto central dos fatores foi incluído e repetido 3 vezes, alocados em $b = 3$ blocos de tamanho $k = 9$, além da combinação dos níveis dos fatores aos tratamentos indicados pela notação $0, 1, 2, 3, \dots, 24$. O delineamento de Box-Behnken, compilado de Giesbrecht & Gumpertz (2004), também está apresentado na mesma tabela.

Verificando-se a estrutura de confundimento parcial dos níveis dos fatores no delineamento otimizado, pode-se notar cada um desses níveis está confundido em diferentes blocos. Para o fator A, seu nível alto está confundido nos bloco I e III. Enquanto que, para o fator B, o seu nível alto está confundido apenas no bloco III, entretanto o seu nível baixo está confundido no bloco I. Já o fator C possui o seu nível alto confundido com os blocos I e II, ao passo que, no bloco III, foi confundido o seu nível baixo. Por fim, o fator D confundiu o seu nível alto no bloco III e o nível baixo no bloco I. Com exceção do fator C, nenhum dos demais fatores teve os seus níveis confundidos no bloco II, dessa forma os níveis desses fatores foram ortogonais apenas nesse bloco.

TABELA 12 Delineamento A-ótimo encontrado pelo algoritmo de busca otimizado para efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores e atribuição dos tratamentos às combinações dos níveis dos fatores do delineamento otimizado e o de Box-Behnken

Delineamento A-ótimo		Delineamento de Box-Behnken								
Blocos	Trat	Fatores				Trat	Fatores			
		A	B	C	D		A	B	C	D
I	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	0
	2	1	-1	1	0	2	1	-1	0	0
	3	0	-1	1	-1	3	-1	1	0	0
	4	-1	-1	-1	-1	4	1	1	0	0
	5	1	-1	-1	1	5	0	0	-1	-1
	6	-1	1	-1	-1	6	0	0	1	-1
	7	-1	1	1	1	7	0	0	-1	1
	8	1	0	1	-1	8	0	0	1	1
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
II	9	-1	-1	1	1	9	-1	0	0	-1
	0	0	0	0	0	10	1	0	0	-1
	0	0	0	0	0	11	-1	0	0	1
	10	1	0	1	1	12	1	0	0	1
	11	1	-1	-1	-1	13	0	-1	-1	0
	12	-1	1	-1	1	14	0	1	-1	0
	13	0	1	0	-1	15	0	-1	1	0
	14	1	1	1	0	16	0	1	1	0
	15	-1	-1	1	-1	0	0	0	0	0
III	16	-1	0	0	0	17	0	-1	0	-1
	17	-1	1	1	-1	18	0	1	0	-1
	18	1	-1	0	-1	19	0	-1	0	1
	19	1	1	-1	-1	20	0	1	0	1
	20	1	1	-1	1	21	-1	0	-1	0
	21	1	-1	1	1	22	1	0	-1	0
	22	-1	-1	-1	1	23	-1	0	1	0
	23	0	0	-1	0	24	1	0	1	0
	24	0	1	1	1	0	0	0	0	0

As respectivas matrizes de covariâncias $V(\hat{\theta}|\xi)$ (ver Anexo) dos coeficientes dos delineamentos de Box-Behnken e A-ótimo são apresentadas a seguir.

Verifique-se que, com exceção dos coeficientes dos efeitos quadráticos, todas as demais variâncias do delineamento otimizado foram inferiores as do Box-Behnken. Assim, as diferenças dos efeitos quadráticos são melhores estimadas no Box-Behnken do que no delineamento otimizado. Isso se deve ao fato de que o de Box-Behnken é construído em blocos incompletos para comparação de pares de interações de dois fatores. Como esse não é o principal objetivo da pesquisa na fase de otimização de processos, os delineamentos propostos tendem a ser mais eficientes do que os de Box-Behnken para a estimação da superfície de resposta.

$$V(\theta_{A-6\text{tmo}}) = \frac{\sigma_e^2}{1000} \times$$

β_1	β_2	β_3	β_4	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{44}	β_{12}	β_{13}	β_{14}	β_{23}	β_{24}	β_{34}
52,45	2,76	-2,02	-2,43	-10,32	4,48	7,84	4,48	2,90	-1,20	-2,94	3,51	-4,00	-3,55
β_2	53,08	2,11	-5,61	11	-5,09	11,22	-5,09	-1,82	1,09	-4,12	-2,35	-0,37	-3,58
β_3		53,42	-2,99	6,77	3,67	-11,71	3,67	3,71	-0,54	-3,6	2,7	-2,56	-2,6
β_4			53,34	-11,02	4,71	-10,84	4,71	-2,64	-3,21	-3,33	-3,63	-1,84	-2,34
β_{11}				277,03	-59,07	-62	-59,07	-0,62	-13,25	0,63	0,30	8,52	-0,29
β_{22}					347,14	-58,8	-152,86	2,57	21,47	-2,53	4,03	-8,54	-3,98
β_{33}						277,85	-58,8	-0,89	-13,47	0,85	0,56	8,04	-0,61
β_{44}							347,14	2,57	21,47	-2,53	4,03	-8,54	-3,98
β_{12}								62,92	2,28	-6,11	3,89	-5,53	2,91
β_{13}									67,17	-2,01	4,37	3,21	-4,11
β_{14}										63,29	3,10	5,81	4,08
β_{23}											61,3	-4,24	-4,31
β_{24}												60,7	4,52
β_{34}													61,3

As matrizes de concorrência dos tratamentos nos blocos NN' para os delineamentos otimizado e de Box-Behnken têm grande dimensão, 25×25 (24 tratamentos mais 1 ponto central repetido 3 vezes), e serão omitidas, mas, para uma melhor visualização dos tratamentos que ocorrem num mesmo bloco, os grafos dos respectivos delineamentos estão apresentados nas Figuras 10 e 11. Para a representação dos tratamentos no grafo foi utilizada a seguinte atribuição dos tratamentos aos níveis dos fatores, de acordo com a Tabela 12.

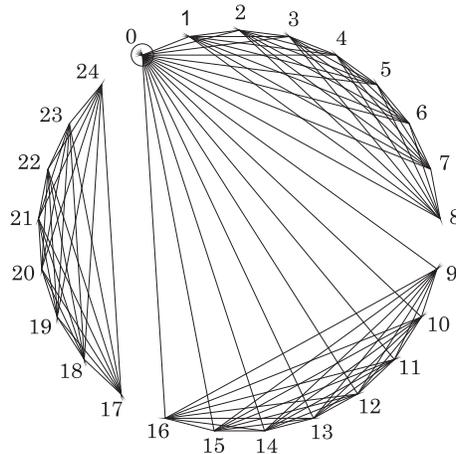


FIGURA 10 Representação do grafo do delineamento A-ótimo com 25 tratamentos (vértices) - (Os tratamentos que ocorrem em um mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.)

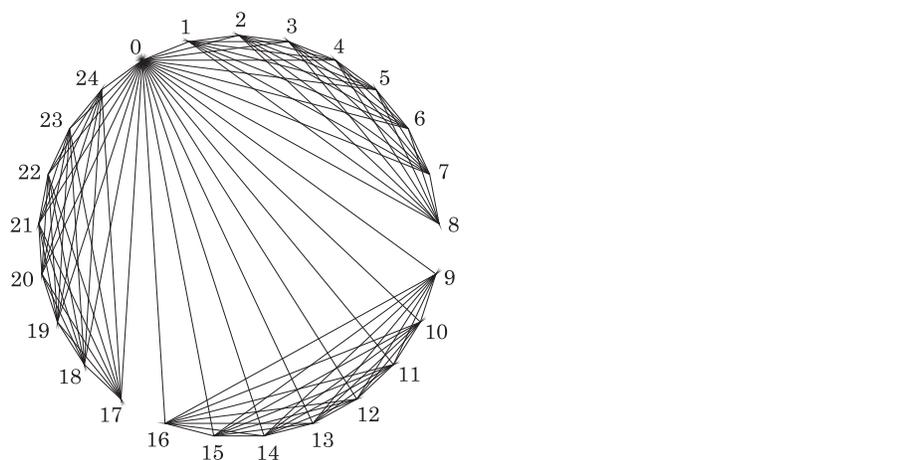


FIGURA 11 Representação do grafo do delineamento de Box-Behnken com 25 tratamentos (vértices) - (Os tratamentos que ocorrem em um mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.)

Observe-se que os dois grafos não são regulares, pois alguns tratamentos, em determinados pares, tiveram uma quantidade de pares diferente dos demais. Por exemplo: no grafo da Figura 10, o tratamento 0 (ponto central) ocorreu em 8 pares no bloco I e em 7 pares no bloco II, totalizando 15 pares, ao passo que o tratamento 16 ocorreu apenas em 8 pares. Além disso, pode-se averiguar que o grafo é desconexo (em relação aos 25 tratamentos), pois o único tratamento repetido, o ponto central, foi alocado apenas nos blocos I e II. Entretanto, o grafo da Figura 11 é conexo⁸, ao menos para os 25 tratamentos considerados. Quando a conexão é complicada para um modelo como o de regressão, a representação simplificada não é adequada, pois o grafo procura representar os tratamentos na forma não estruturada.

Assim, para uma melhor compreensão, os grafos das Figuras 12 e 13 representam a alocação dos tratamentos na forma estruturada em cada um dos blocos dos delineamentos Box-Behnken e A-ótimo, respectivamente. Nesses grafos, os tratamentos são representados por quadriláteros com vértice em cada fator e nível correspondente. Espera-se ilustrar que os grafos com maior número de malhas correspondem a delineamentos de maior interesse para o modelo de superfície de resposta.

Pode-se notar que, na Figura 12, há maior conexão dos pontos centrais, ou seja, o delineamento privilegia os pontos centrais e interações de dois fatores, ao passo que, na Figura 13, houve maior conexão dos níveis alto e baixo dos fatores, sendo assim indicado para se estimarem efeitos principais e interações de maior interesse para o modelo de superfície de resposta.

⁸A ideia de conexão empregada neste trabalho para esses delineamentos está ligada ao fato de que o único tratamento repetido (ponto central) seja primeiro associado a todos os outros. O laço em torno do ponto central, na Figura 10, significa suas duas repetições no mesmo bloco.

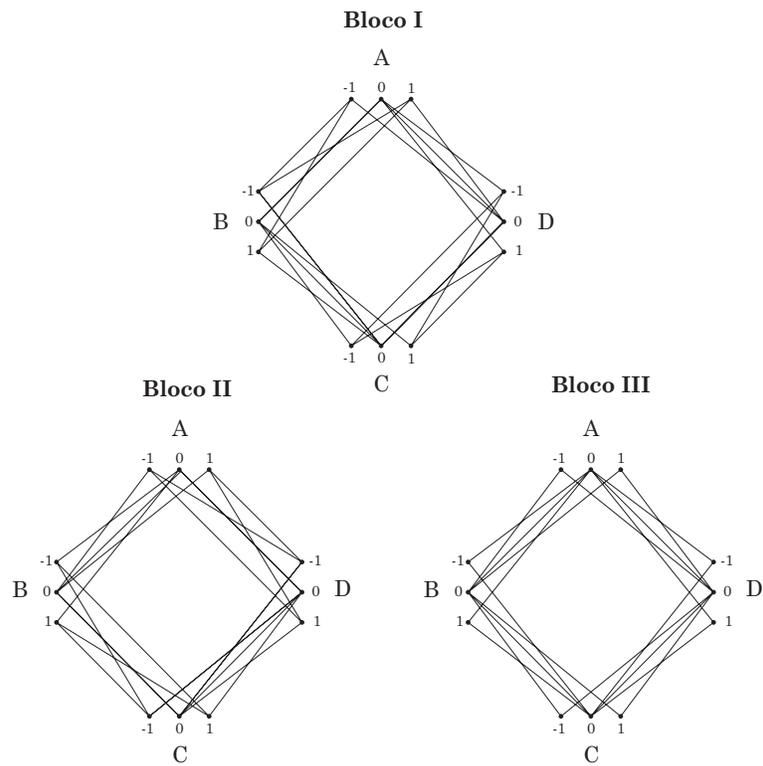


FIGURA 12 Representação dos grafos do delineamento de Box-Behnken com 25 tratamentos - (Os tratamentos na forma estruturada são representados pelos quadriláteros.)

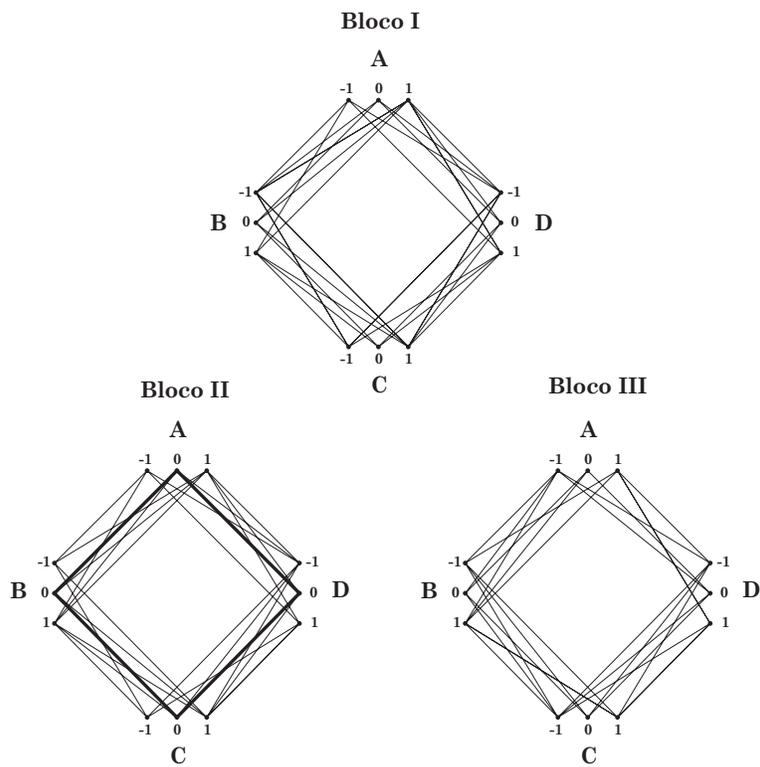


FIGURA 13 Representação dos grafos do delineamento A-ótimo com 25 tratamentos - (Os tratamentos na forma estruturada são representados pelos quadriláteros. O quadrilátero em destaque no bloco II indica a repetição do ponto central.)

4.2.2 Delineamento D-ótimo

Da mesma forma como ocorreu com o delineamento A-ótimo, a Tabela 13 apresenta o delineamento D-ótimo para fins de comparação da eficiência com o delineamento de Box-Behnken. A matriz de covariâncias do delineamento D-ótimo é apresentada logo após os delineamentos da Tabela 13.

Analisando-se a estrutura de confundimento parcial dos níveis dos fatores do delineamento D-ótimo, constata-se que, no bloco I, o nível alto dos fatores A e C foram confundidos. No bloco II, houve o confundimento do nível alto dos fatores A, C e D e também do nível baixo do fator C. Por fim, no bloco III, os níveis alto e baixo dos fatores B e D, respectivamente, estão confundidos.

Pode-se verificar também que algumas covariâncias negativas entre os coeficientes contribuem para inflacionar a variância de algumas combinações. Por exemplo: os coeficientes $\hat{\beta}_{22}$ e $\hat{\beta}_{44}$ possuem uma covariância negativa no delineamento A-ótimo igual a $-\frac{152,86}{1000}\sigma^2$, o que resulta na combinação $\hat{\beta}_{22} - \hat{\beta}_{44}$ uma variância igual a $1\sigma^2$, e que é igual à sua variância no D-ótimo. E, para o caso da combinação $\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_{12}$, sua variância no D-ótimo $\left(\frac{121,56}{1000}\sigma^2\right)$ é superior ao A-ótimo $\left(\frac{119,64}{1000}\sigma^2\right)$. Assim, diante dessas situações, resta ao pesquisador decidir sobre qual dos dois delineamentos adotar, a partir de suas combinações de interesse.

TABELA 13 Delineamento D-ótimo encontrado pelo algoritmo de busca otimizado para efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores e atribuição dos tratamentos às combinações dos níveis dos fatores do delineamento otimizado e o de Box-Behnken

Blocos	D-ótimo					Box-Behnken				
	Trat	Fatores				Trat	Fatores			
		A	B	C	D		A	B	C	D
I	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	0	0
	2	1	1	1	0	2	1	-1	0	0
	3	0	0	-1	0	3	-1	1	0	0
	4	-1	0	0	0	4	1	1	0	0
	5	1	0	1	-1	5	0	0	-1	-1
	6	1	1	0	1	6	0	0	1	-1
	7	1	-1	-1	1	7	0	0	-1	1
	8	0	-1	1	-1	8	0	0	1	1
	9	-1	1	-1	-1	0	0	0	0	0
II	10	-1	-1	1	-1	9	-1	0	0	-1
	11	-1	-1	-1	1	10	1	0	0	-1
	12	1	-1	1	0	11	-1	0	0	1
	13	1	1	-1	1	12	1	0	0	1
	14	1	0	1	1	13	0	-1	-1	0
	0	0	0	0	0	14	0	1	-1	0
	15	1	-1	-1	-1	15	0	-1	1	0
	16	0	1	0	-1	16	0	1	1	0
	17	-1	1	1	1	0	0	0	0	0
III	18	1	-1	1	1	17	0	-1	0	-1
	0	0	0	0	0	18	0	1	0	-1
	19	1	1	-1	-1	19	0	-1	0	1
	20	1	-1	0	-1	20	0	1	0	1
	0	0	0	0	0	21	-1	0	-1	0
	21	-1	-1	-1	-1	22	1	0	-1	0
	22	0	1	1	1	23	-1	0	1	0
	23	-1	1	1	-1	24	1	0	1	0
	24	-1	1	-1	1	0	0	0	0	0

$$V(\hat{\theta}_{D\text{-otimo}}) = \frac{\sigma_e^2}{1000} \times \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{33} & \beta_{44} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} & \beta_{23} & \beta_{24} & \beta_{34} \\ \mathbf{52,38} & 2,36 & -1,19 & -2,36 & -9,46 & 3,27 & 8,40 & 3,27 & 3,88 & -1,47 & -3,17 & 3,17 & -3,80 & -3,88 \\ \mathbf{53,20} & \mathbf{53,20} & 2,36 & -6,69 & 10,19 & -4,64 & 10,19 & -4,64 & -2,72 & 2,85 & -3,38 & -2,43 & 0,13 & -3,09 \\ \mathbf{52,38} & \mathbf{52,38} & \mathbf{52,38} & -2,36 & 8,40 & 3,27 & -9,46 & 3,27 & 3,88 & -1,47 & -3,17 & 3,17 & -3,80 & -3,88 \\ \mathbf{53,20} & \mathbf{53,20} & \mathbf{53,20} & \mathbf{53,20} & -10,19 & 4,64 & -10,19 & 4,64 & -3,09 & -2,85 & -2,43 & -3,38 & -0,13 & -2,72 \\ \mathbf{282,51} & \mathbf{282,51} & \mathbf{282,51} & \mathbf{282,51} & \mathbf{282,51} & -64,37 & -56,78 & -64,37 & 3,36 & -15,19 & 0,42 & -0,42 & 7,03 & -3,36 \\ \mathbf{351,02} & \mathbf{351,02} & \mathbf{351,02} & \mathbf{351,02} & \mathbf{351,02} & \mathbf{351,02} & -64,37 & -148,98 & 0,62 & 21,87 & -4,01 & 4,01 & -6,99 & -0,62 \\ \mathbf{282,51} & \mathbf{282,51} \\ \mathbf{351,02} & \mathbf{351,02} \\ \mathbf{62,92} & \mathbf{62,92} \\ \mathbf{66,35} & \mathbf{66,35} \\ \mathbf{60,99} & \mathbf{60,99} \\ \mathbf{60,99} & \mathbf{60,99} \\ \mathbf{59,97} & \mathbf{59,97} \\ \mathbf{5,34} & \mathbf{5,34} \\ \mathbf{62,92} & \mathbf{62,92} \end{pmatrix}$$

Pode-se observar, nessa matriz, que as variâncias dos coeficientes do modelo de superfície de resposta são, em sua maioria, inferiores às do delineamento A-ótimo. Além disso, as variâncias dos coeficientes correspondentes aos efeitos quadráticos no delineamento A-ótimo são todas menores em relação ao D-ótimo.

Na Figura 14, está ilustrado o grafo para se demonstrar o esquema de blocagem do delineamento D-ótimo. O ponto central é novamente repetido duas vezes num mesmo bloco (III) e está representado por um círculo no grafo. Depreende-se, pela figura, que o grafo não é regular para os 25 tratamentos e também não é conexo, pois o ponto central não foi alocado em todos os blocos. Da mesma maneira como foram representados os tratamentos na forma estruturada nos delineamentos A-ótimo e Box-Behnken, a Figura15 representa a alocação dos tratamentos nos blocos para o delineamento D-ótimo. As mesmas conclusões sobre a conexão dos tratamentos estruturados do delineamento A-ótimo se aplicam para o D-ótimo.

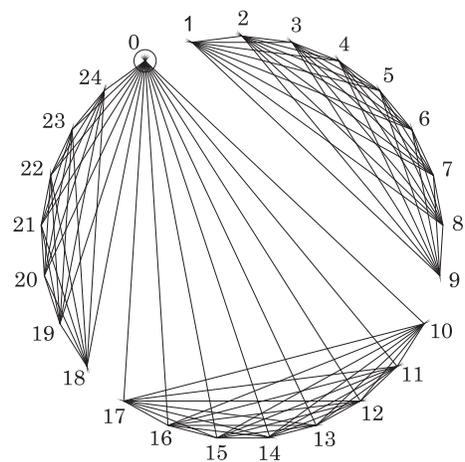


FIGURA 14 Representação do grafo não regular para o delineamento D-ótimo com 25 tratamentos (vértices) - (Os tratamentos que ocorrem em um mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.)

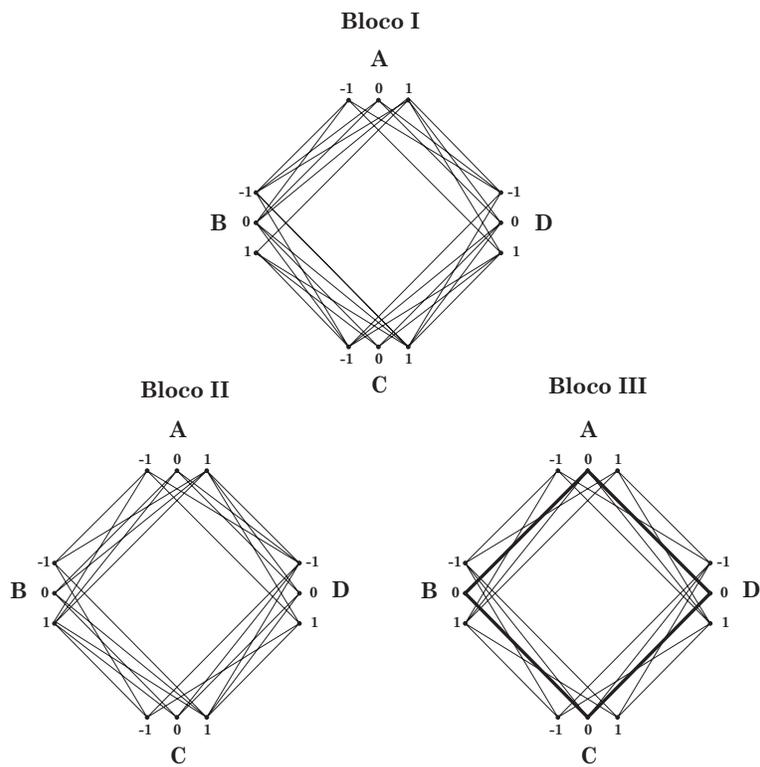


FIGURA 15 Representação dos grafos do delineamento D-ótimo com 25 tratamentos - (Os tratamentos na forma estruturada são representados pelos quadriláteros. O quadrilátero em destaque no bloco III indica a repetição do ponto central.)

4.3 Eficiência dos delineamentos otimizados

Utilizou-se o critério A por ser proporcional à variância média das estimativas do modelo. Assim, buscou-se um delineamento que minimizasse o valor do critério, por minimizar a variância associada aos efeitos do modelo. Os valores obtidos pelo traço da inversa da submatriz referente aos efeitos dos tratamentos, para os delineamentos ótimo e de Box-Behnken são: 1,852 e 2,583, respectivamente.

Na Tabela 14, estão apresentados os valores dos critérios A e D dos delineamentos otimizados. Um fato interessante foi que os valores dos critérios A e D dos delineamentos otimizados resultantes A-ótimo e D-ótimo foram iguais. Na parte superior dessa tabela, os delineamentos otimizados foram bloqueados de acordo com os critérios A e D. Os valores correspondentes à parte inferior da mesma tabela são os dos delineamentos otimizados, desconsiderando-se os blocos.

Portanto, o delineamento A-ótimo é aproximadamente 40% mais eficiente do que de o Box-Behnken. O delineamento A-ótimo possui uma estrutura de confundimento parcial dos níveis dos fatores principais, sendo, assim, impossível a obtenção de estimativas livres dos efeitos, ao passo que o delineamento de Box-Behnken apresenta confundimento total do nível intermediário dos seus fatores em cada um dos seus blocos. Em relação ao critério D, o delineamento A-ótimo é cerca de $\sqrt[14]{260 \times 10^3} = 144\%$ mais eficiente que o de Box-Behnken.

Na Tabela 14, percebe-se que o delineamento D-ótimo é igualmente eficiente ao A-ótimo e se aplicam as mesmas conclusões. A ideia de que um tal delineamento possa ser mais eficiente é bastante contraintuitiva, no entanto resultados semelhantes são comuns na literatura, usando-se outros

critérios (Qu et al., 2004).

Uma comparação adicional, ignorando-se a blocagem, pode ser realizada entre a eficiência dos 3 conjuntos de tratamentos (A, D e Box-Behnken). Os valores dos critérios assim obtidos estão localizados na parte inferior da Tabela 14. É possível perceber que os delineamentos otimizados foram igualmente mais eficientes do que o de Box-Behnken (em torno de 29% e 140%), de acordo com os critérios A e D, respectivamente. Dessa forma, são melhores delineamentos para escolha de tratamentos e, além disso, podem ser bloqueados.

TABELA 14 Valores dos critérios A e D para os delineamentos otimizados segundo os critérios A e D e do delineamento de Box-Behnken. (Situações em que se considera ou não a estrutura em blocos das unidades experimentais.)

Estrutura das unidades (blocos)	Delineamento	Valores dos critérios	
		A	D
presente	A-ótimo	1,852	$1,662 \times 10^{-15}$
	D-ótimo	1,852	$1,662 \times 10^{-15}$
	Box-Behnken	2,583	$8,623 \times 10^{-12}$
ausente	A-ótimo	1,750	$2,208 \times 10^{-16}$
	D-ótimo	1,750	$2,208 \times 10^{-16}$
	Box-Behnken	2,250	$9,582 \times 10^{-13}$

Para se evitar a ocorrência de repetições do ponto central em um bloco e, assim, garantir conexão, o algoritmo pode ser facilmente modificado para que se busquem apenas os oito pontos complementares em cada bloco. Assim, a aplicação do algoritmo *interchange*, fixando-se os pontos centrais em cada um dos blocos, é também comparada ao delineamento de Box-Behnken.

Na Tabela 15, estão dispostos os delineamentos resultantes da aplicação do algoritmo utilizando-se os critérios A e D, respectivamente. Note-se que a eficiência, em geral, está associada à conexão e que, além disso, muitas vezes, as estruturas ótimas são de difícil obtenção por algoritmos de trocas simples, em especial em estruturas fatoriais ou outras estruturas complexas em que ocorrem ótimos locais ou ótimo global, o que não pode ser alcançado com uma só troca.

Pela Tabela 15, vê-se que cada fator teve os seus níveis confundidos em blocos distintos. Além disso, a estrutura de confundimento parcial dos fatores foram diferentes nos dois delineamentos. Por exemplo: o fator A teve o seu nível alto confundido nos blocos I e II e o nível baixo confundido no bloco III no delineamento A-ótimo. Entretanto, no delineamento D-ótimo, o seu nível alto foi confundido nos blocos II e III, e o nível baixo, no bloco I.

Na Tabela 16, encontram-se os valores dos critérios A e D dos delineamentos otimizados. De acordo com os valores dos critérios, observa-se que ambos os delineamentos são mais eficientes do que o delineamento de Box-Behnken. O delineamento A-ótimo é aproximadamente 40% e 142% mais eficiente do que do delineamento de Box-Behnken, pelos critérios A e D, respectivamente. E o delineamento D-ótimo também é mais eficiente do que o delineamento de Box-Behnken, cerca de 38% e 143%, pelos critérios A e D, respectivamente.

Comparando-se a eficiência entre os dois delineamentos otimizados, o delineamento A-ótimo é 1,4% mais eficiente do que o D-ótimo, segundo o critério A; porém, pelo critério D, a eficiência do D-ótimo é 7% superior ao outro.

TABELA 15 Delineamentos otimizados encontrados pelo algoritmo de busca com o ponto central fixado em cada um dos blocos

Blocos	A-ótimo					D-ótimo				
	Trat	Fatores				Trat	Fatores			
		A	B	C	D		A	B	C	D
I	1	1	-1	1	0	1	1	1	1	0
	2	-1	-1	-1	1	2	1	-1	1	1
	3	-1	-1	1	-1	3	-1	-1	-1	-1
	4	-1	1	1	1	4	-1	1	-1	1
	5	0	1	0	-1	5	1	-1	0	-1
	6	1	1	-1	1	6	-1	1	1	-1
	7	1	-1	-1	-1	7	-1	-1	1	1
	8	1	0	1	1	8	0	0	-1	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
II	9	1	0	1	-1	9	0	1	0	-1
	10	-1	1	-1	-1	10	1	0	1	1
	11	-1	0	0	0	11	1	-1	1	0
	12	1	1	1	0	12	-1	-1	-1	1
	13	1	1	0	1	13	-1	1	1	1
	14	0	1	1	1	14	1	1	-1	1
	15	1	-1	-1	1	15	-1	-1	1	-1
	16	0	-1	1	-1	16	1	-1	-1	-1
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
III	17	0	0	-1	0	17	1	-1	-1	1
	18	1	-1	1	1	18	0	-1	1	-1
	19	-1	-1	-1	-1	19	1	0	1	-1
	20	-1	-1	1	1	20	-1	1	-1	-1
	21	1	1	-1	-1	21	0	1	1	1
	22	1	-1	0	-1	22	1	1	-1	-1
	23	-1	1	1	-1	23	-1	0	0	0
	24	-1	1	-1	1	24	1	1	0	1
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

TABELA 16 Valores dos critérios A e D dos delineamentos otimizados com os pontos centrais fixados em cada um dos blocos

Valores dos critérios	Delineamentos	
	A-ótimo	D-ótimo
A	1,842410	1,868263
D	$1,804 \times 10^{-15}$	$1,679 \times 10^{-15}$

Comparando-se, ainda, o procedimento de restringir as trocas ao de deixar as trocas livres, encontra-se que, em ao menos um caso (algoritmo com critério A) o delineamento resultante foi ligeiramente mais eficiente do que deixar livres as trocas ($EF = 1,852/1,8424 = 1,005$ ou 0,5% mais eficiente). Nos demais casos isso não ocorreu, embora os delineamentos resultantes sejam sempre melhores que o de Box-Behnken.

A matriz de covariâncias do delineamento D-ótimo possui, em sua maioria, variâncias menores (elementos da diagonal principal) em relação ao A-ótimo. Apesar de as matrizes não possuírem uma estrutura de covariância tão esparsa quanto a de Box-Behnken, ambos os delineamentos otimizados possuem variâncias, na maioria dos casos, inferiores às variâncias do de Box-Behnken.

As respectivas matrizes de covariâncias dos delineamentos A e D ótimo são apresentadas a seguir.

$$V(\hat{\theta}_{A-6timo}) = \frac{\sigma_e^2}{1000} \times \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{33} & \beta_{44} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} & \beta_{23} & \beta_{24} & \beta_{34} \\ \mathbf{53,90} & 4,10 & 0,33 & -2,32 & -11,51 & 3,96 & 6,35 & 3,96 & 3,89 & 0,19 & -1,65 & 5,53 & -2,53 & -5,48 \\ \mathbf{54,79} & \mathbf{54,79} & 4,10 & -6,54 & 9,60 & -5,23 & 9,60 & -5,23 & -1,86 & 4,17 & -1,77 & -0,26 & 0,84 & -5,51 \\ \mathbf{53,90} & & \mathbf{53,90} & -2,32 & 6,35 & 3,96 & -11,51 & 3,96 & 3,89 & 0,19 & -1,65 & 5,53 & -2,53 & -5,48 \\ \mathbf{53,18} & & & \mathbf{53,18} & -10,67 & 4,99 & -10,67 & 4,99 & -3,30 & -2,66 & -2,36 & -3,18 & 0,09 & -2,63 \\ \mathbf{277,62} & & & & \mathbf{277,62} & -59,29 & -61,66 & -59,29 & -0,31 & -14,87 & -1,04 & -1,30 & 8,50 & 1,27 \\ \mathbf{346,61} & & & & & \mathbf{346,61} & -59,29 & -153,39 & 3,49 & 20,61 & -3,79 & 3,27 & -8,91 & -3,28 \\ \mathbf{277,62} & & & & & & \mathbf{277,62} & -59,29 & -0,31 & -14,87 & -1,04 & -1,30 & 8,50 & 1,27 \\ \mathbf{346,61} & & & & & & & \mathbf{346,61} & 3,49 & 20,61 & -3,79 & 3,27 & -8,91 & -3,28 \\ \mathbf{61,18} & & & & & & & & \mathbf{61,18} & 4,31 & -3,38 & 5,53 & -3,82 & 1,46 \\ \mathbf{67,32} & & & & & & & & & \mathbf{67,32} & -2,41 & 5,71 & 0,92 & -5,66 \\ \mathbf{62,48} & & & & & & & & & & \mathbf{62,48} & 4,43 & 4,99 & 2,60 \\ \mathbf{63,97} & & & & & & & & & & & \mathbf{63,97} & -2,96 & -0,92 \\ \mathbf{59,70} & & & & & & & & & & & & \mathbf{59,70} & 2,99 \\ \mathbf{63,83} & & & & & & & & & & & & & \mathbf{63,83} \end{pmatrix}$$

$$V(\hat{\theta}_{D\text{-otimo}}) = \frac{\sigma_e^2}{1000} \times \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{33} & \beta_{44} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} & \beta_{23} & \beta_{24} & \beta_{34} \\ \mathbf{54,16} & 4,08 & -1,85 & -3,02 & -12,56 & -0,74 & 6,10 & 10,61 & 3,77 & -2,34 & -2,77 & 2,64 & -3,71 & -3,90 \\ \mathbf{54,53} & \mathbf{54,53} & 2,05 & -7,14 & 8,87 & -9,11 & 9,55 & 0,34 & -2,05 & 1,86 & -2,93 & -2,99 & -0,27 & -3,88 \\ \mathbf{52,30} & & \mathbf{52,30} & -2,30 & 7,86 & 5,36 & -10,19 & 2,68 & 3,14 & -1,00 & -3,38 & 3,41 & -3,35 & -3,11 \\ \mathbf{53,34} & & & \mathbf{53,34} & -9,99 & 6,47 & -10,23 & 3,11 & -3,49 & -2,44 & -2,62 & -3,16 & 0,11 & -2,28 \\ \mathbf{279,20} & & & & \mathbf{279,20} & -54,22 & -60,94 & -66,21 & -0,47 & -12,86 & -0,59 & 0,73 & 9,34 & 0,61 \\ \mathbf{358,94} & & & & & \mathbf{358,94} & -56,25 & -169,51 & 2,30 & 23,53 & -4,82 & 5,15 & -8,07 & -1,97 \\ \mathbf{277,82} & & & & & & -63,57 & -63,57 & -0,26 & -13,30 & -0,38 & 0,47 & 9,22 & 0,35 \\ \mathbf{367,53} & & & & & & & \mathbf{367,53} & 5,23 & 17,27 & -1,96 & 1,53 & -9,73 & -5,66 \\ \mathbf{61,08} & & & & & & & & \mathbf{61,08} & 3,50 & -3,85 & 4,54 & -4,22 & 2,11 \\ & & & & & & & & & \mathbf{66,69} & -4,06 & 4,13 & 0,33 & -3,43 \\ & & & & & & & & & & \mathbf{61,07} & 2,12 & 4,07 & 4,54 \\ & & & & & & & & & & & \mathbf{61,15} & -4,05 & -3,77 \\ & & & & & & & & & & & & \mathbf{59,28} & 4,24 \\ & & & & & & & & & & & & & \mathbf{61,16} \end{pmatrix}$$

Em resumo, observou-se que os delineamentos otimizados são sempre mais eficientes do que o de Box-Behnken. No entanto, eles apresentaram uma estrutura de confundimento parcial dos níveis de cada fator mais complexa do que o de Box-Behnken, o qual confundiu apenas o nível intermediário de cada fator. Pode-se depreender um padrão geral de que delineamentos com uma estrutura de confundimento parcial dos diversos níveis dos fatores sob estudo tendem a ser mais eficientes. O uso de algum critério de eficiência no algoritmo *interchange* leva em conta esses fatores de forma indireta e é, portanto, uma boa alternativa para a construção de delineamentos de superfície de resposta em blocos incompletos.

4.4 Blocagem e superblocos

O exemplo aqui apresentado é inspirado em um problema proposto por Kirkman em 1850 (Rees & Wallis, 2003): “15 garotas saem durante os 7 dias da semana em grupos de 3. De quantas maneiras podem ser arranjados esses grupos durante a semana de forma que não haja mais de uma repetição de um par de garotas?” Pode-se, a partir desse problema, construir um delineamento em blocos incompletos do tipo *resolvable* com tais parâmetros: $v = 15$ (garotas), $k = 3$ (tamanho de cada grupo) e $r = 7$ (dias da semana), $\lambda_i = 1$ (par sai junto uma única vez) e $b = 35$ (número total de grupos). Ou seja: um $\xi(v = 15, b = 35, k = 3, r = 7, \lambda_1 = 1)$, que é uma das soluções do sistema triplo de Steiner “STS”, $S(2,3,15)$, obtido por meio do algoritmo denotado “S-*interchange*” do Anexo C.

Inicialmente, com o objetivo de se verificar se o algoritmo acha uma solução para o STS, o delineamento encontrado do sistema triplo é um A-ótimo com a matriz de tratamentos (X) sem estrutura, ou seja, uma matriz

cujos elementos são 0's e 1's, em que $x_{ij} = 1$, se a i -ésima unidade experimental recebeu o j -ésimo tratamento e $x_{ij} = 0$, caso contrário. O valor do critério A foi igual a 2,87.

Após a seleção de 15 tratamentos, de um fatorial completo 3^3 - considerados bons pelo critério D via algoritmo *exchange*, seguindo o ajuste do modelo de superfície de resposta - os mesmos foram nomeados conforme a combinação dos níveis dos fatores do delineamento de acordo com a Tabela 17 e, para o sistema triplo, foram designados à matriz X de tratamentos não estruturados. A seguir, aplicou-se o algoritmo *S-interchange* para a construção dos delineamentos A e D ótimos com os 15 tratamentos selecionados e que estão apresentados nas Tabelas 18 e 19, juntamente com o STS.

TABELA 17 Tratamentos selecionados pelo algoritmo *exchange* aplicados ao sistema triplo de Steiner e delineamentos otimizados

Tratamentos	Fatores		
	A	B	C
A	-1	-1	-1
B	1	-1	-1
C	0	0	-1
D	-1	1	-1
E	-1	0	1
F	1	1	-1
G	-1	-1	0
H	-1	0	-1
I	1	0	0
J	0	1	0
K	-1	-1	1
L	0	-1	1
M	1	-1	1
N	-1	1	1
O	1	1	1

TABELA 18 Delineamento ótimo balanceado do tipo *resolvable* como uma solução ao problema de Kirkman e o delineamento otimizado pelo algoritmo *S-interchange* pelo critério A com os fatores (A,B,C) em 7 repetições ou superblocos (REP) em 35 blocos de tamanho 3

REP	STS					A-ótimo				
	Blocos	Trat	Fatores			Blocos	Trat	Fatores		
			A	B	C			A	B	C
I	1	A	-1	-1	-1	1	A	-1	-1	-1
	1	B	1	-1	-1	1	B	1	-1	-1
	1	C	0	0	-1	1	C	0	0	-1
	2	D	-1	1	-1	2	D	-1	1	-1
	2	E	-1	0	1	2	E	-1	0	1
	2	F	1	1	-1	2	F	1	1	-1
	3	G	-1	-1	0	3	G	-1	-1	0
	3	H	-1	0	-1	3	H	-1	0	-1
	3	I	1	0	0	3	I	1	0	0
	4	J	0	1	0	4	J	0	1	0
	4	K	-1	-1	1	4	K	-1	-1	1
	4	L	0	-1	1	4	L	0	-1	1
	5	M	1	-1	1	5	M	1	-1	1
	5	N	-1	1	1	5	N	-1	1	1
	5	O	1	1	1	5	O	1	1	1
II	6	O	1	1	1	6	M	1	-1	1
	6	B	1	-1	-1	6	A	-1	-1	-1
	6	I	1	0	0	6	F	1	1	-1
	7	H	-1	0	-1	7	J	0	1	0
	7	C	0	0	-1	7	H	-1	0	-1
	7	N	-1	1	1	7	K	-1	-1	1
	8	E	-1	0	1	8	O	1	1	1
	8	G	-1	-1	0	8	C	0	0	-1
	8	J	0	1	0	8	G	-1	-1	0
	9	A	-1	-1	-1	9	L	0	-1	1
	9	L	0	-1	1	9	I	1	0	0
	9	F	1	1	-1	9	N	-1	1	1
	10	D	-1	1	-1	10	D	-1	1	-1
	10	K	-1	-1	1	10	B	1	-1	-1
	10	M	1	-1	1	10	E	-1	0	1

Tabela 18. Continuação

	11	A	-1	-1	-1	11	E	-1	0	1
	11	O	1	1	1	11	D	-1	1	-1
	11	K	-1	-1	1	11	A	-1	-1	-1
	12	J	0	1	0	12	L	0	-1	1
	12	M	1	-1	1	12	F	1	1	-1
	12	I	1	0	0	12	I	1	0	0
	13	E	-1	0	1	13	J	0	1	0
III	13	N	-1	1	1	13	H	-1	0	-1
	13	L	0	-1	1	13	B	1	-1	-1
	14	F	1	1	-1	14	M	1	-1	1
	14	G	-1	-1	0	14	C	0	0	-1
	14	C	0	0	-1	14	N	-1	1	1
	15	B	1	-1	-1	15	K	-1	-1	1
	15	D	-1	1	-1	15	O	1	1	1
	15	H	-1	0	-1	15	G	-1	-1	0
	16	C	0	0	-1	16	A	-1	-1	-1
	16	K	-1	-1	1	16	E	-1	0	1
	16	I	1	0	0	16	M	1	-1	1
	17	B	1	-1	-1	17	N	-1	1	1
	17	G	-1	-1	0	17	G	-1	-1	0
	17	L	0	-1	1	17	C	0	0	-1
	18	D	-1	1	-1	18	J	0	1	0
IV	18	N	-1	1	1	18	K	-1	-1	1
	18	A	-1	-1	-1	18	H	-1	0	-1
	19	H	-1	0	-1	19	I	1	0	0
	19	E	-1	0	1	19	F	1	1	-1
	19	M	1	-1	1	19	L	0	-1	1
	20	J	0	1	0	20	D	-1	1	-1
	20	F	1	1	-1	20	O	1	1	1
	20	O	1	1	1	20	B	1	-1	-1

Tabela 18. Continuação

	21	K	-1	-1	1	21	H	-1	0	-1
	21	G	-1	-1	0	21	B	1	-1	-1
	21	N	-1	1	1	21	K	-1	-1	1
	22	E	-1	0	1	22	I	1	0	0
	22	C	0	0	-1	22	L	0	-1	1
	22	O	1	1	1	22	N	-1	1	1
	23	F	1	1	-1	23	A	-1	-1	-1
V	23	B	1	-1	-1	23	E	-1	0	1
	23	M	1	-1	1	23	D	-1	1	-1
	24	H	-1	0	-1	24	G	-1	-1	0
	24	J	0	1	0	24	C	0	0	-1
	24	A	-1	-1	-1	24	O	1	1	1
	25	L	0	-1	1	25	J	0	1	0
	25	D	-1	1	-1	25	M	1	-1	1
	25	I	1	0	0	25	F	1	1	-1
	26	B	1	-1	-1	26	M	1	-1	1
	26	N	-1	1	1	26	G	-1	-1	0
	26	J	0	1	0	26	C	0	0	-1
	27	A	-1	-1	-1	27	H	-1	0	-1
	27	E	-1	0	1	27	J	0	1	0
	27	I	1	0	0	27	F	1	1	-1
	28	F	1	1	-1	28	K	-1	-1	1
VI	28	K	-1	-1	1	28	O	1	1	1
	28	H	-1	0	-1	28	B	1	-1	-1
	29	M	1	-1	1	29	D	-1	1	-1
	29	C	0	0	-1	29	A	-1	-1	-1
	29	L	0	-1	1	29	E	-1	0	1
	30	G	-1	-1	0	30	N	-1	1	1
	30	O	1	1	1	30	I	1	0	0
	30	D	-1	1	-1	30	L	0	-1	1

Tabela 18. Continuação

	31	G	-1	-1	0	31	I	1	0	0
	31	A	-1	-1	-1	31	N	-1	1	1
	31	M	1	-1	1	31	A	-1	-1	-1
	32	I	1	0	0	32	M	1	-1	1
	32	N	-1	1	1	32	G	-1	-1	0
	32	F	1	1	-1	32	C	0	0	-1
	33	D	-1	1	-1	33	F	1	1	-1
VII	33	J	0	1	0	33	J	0	1	0
	33	C	0	0	-1	33	H	-1	0	-1
	34	O	1	1	1	34	O	1	1	1
	34	L	0	-1	1	34	B	1	-1	-1
	34	H	-1	0	-1	34	K	-1	-1	1
	35	K	-1	-1	1	35	D	-1	1	-1
	35	B	1	-1	-1	35	E	-1	0	1
	35	E	-1	0	1	35	L	0	-1	1

TABELA 19 Delineamento ótimo balanceado do tipo *resolvable* como uma solução ao problema de Kirkman e o delineamento otimizado pelo algoritmo *S-interchange* pelo critério D com os fatores (A,B,C) em 7 repetições ou superblocos (REP) em 35 blocos de tamanho 3

REP	STS					D-ótimo				
	Blocos	Trat	Fatores			Blocos	Trat	Fatores		
			A	B	C			A	B	C
I	1	A	-1	-1	-1	1	A	-1	-1	-1
	1	B	1	-1	-1	1	B	1	-1	-1
	1	C	0	0	-1	1	C	0	0	-1
	2	D	-1	1	-1	2	D	-1	1	-1
	2	E	-1	0	1	2	E	-1	0	1
	2	F	1	1	-1	2	F	1	1	-1
	3	G	-1	-1	0	3	G	-1	-1	0
	3	H	-1	0	-1	3	H	-1	0	-1
	3	I	1	0	0	3	I	1	0	0
	4	J	0	1	0	4	J	0	1	0
	4	K	-1	-1	1	4	K	-1	-1	1
	4	L	0	-1	1	4	L	0	-1	1
	5	M	1	-1	1	5	M	1	-1	1
	5	N	-1	1	1	5	N	-1	1	1
	5	O	1	1	1	5	O	1	1	1
II	6	O	1	1	1	6	N	-1	1	1
	6	B	1	-1	-1	6	M	1	-1	1
	6	I	1	0	0	6	F	1	1	-1
	7	H	-1	0	-1	7	D	-1	1	-1
	7	C	0	0	-1	7	I	1	0	0
	7	N	-1	1	1	7	L	0	-1	1
	8	E	-1	0	1	8	G	-1	-1	0
	8	G	-1	-1	0	8	O	1	1	1
	8	J	0	1	0	8	C	0	0	-1
	9	A	-1	-1	-1	9	A	-1	-1	-1
	9	L	0	-1	1	9	E	-1	0	1
	9	F	1	1	-1	9	J	0	1	0
	10	D	-1	1	-1	10	B	1	-1	-1
	10	K	-1	-1	1	10	H	-1	0	-1
	10	M	1	-1	1	10	K	-1	-1	1

Tabela 19. Continuação

III	11	A	-1	-1	-1	11	E	-1	0	1
	11	O	1	1	1	11	D	-1	1	-1
	11	K	-1	-1	1	11	B	1	-1	-1
	12	J	0	1	0	12	L	0	-1	1
	12	M	1	-1	1	12	N	-1	1	1
	12	I	1	0	0	12	I	1	0	0
	13	E	-1	0	1	13	H	-1	0	-1
	13	N	-1	1	1	13	J	0	1	0
	13	L	0	-1	1	13	K	-1	-1	1
	14	F	1	1	-1	14	A	-1	-1	-1
	14	G	-1	-1	0	14	M	1	-1	1
	14	C	0	0	-1	14	F	1	1	-1
	15	B	1	-1	-1	15	C	0	0	-1
	15	D	-1	1	-1	15	O	1	1	1
	15	H	-1	0	-1	15	G	-1	-1	0
IV	16	C	0	0	-1	16	M	1	-1	1
	16	K	-1	-1	1	16	E	-1	0	1
	16	I	1	0	0	16	A	-1	-1	-1
	17	B	1	-1	-1	17	J	0	1	0
	17	G	-1	-1	0	17	H	-1	0	-1
	17	L	0	-1	1	17	K	-1	-1	1
	18	D	-1	1	-1	18	G	-1	-1	0
	18	N	-1	1	1	18	C	0	0	-1
	18	A	-1	-1	-1	18	N	-1	1	1
	19	H	-1	0	-1	19	B	1	-1	-1
	19	E	-1	0	1	19	O	1	1	1
	19	M	1	-1	1	19	D	-1	1	-1
	20	J	0	1	0	20	I	1	0	0
	20	F	1	1	-1	20	F	1	1	-1
	20	O	1	1	1	20	L	0	-1	1

Tabela 19. Continuação

	21	K	-1	-1	1	21	O	1	1	1
	21	G	-1	-1	0	21	B	1	-1	-1
	21	N	-1	1	1	21	D	-1	1	-1
	22	E	-1	0	1	22	C	0	0	-1
	22	C	0	0	-1	22	M	1	-1	1
	22	O	1	1	1	22	G	-1	-1	0
	23	F	1	1	-1	23	L	0	-1	1
V	23	B	1	-1	-1	23	I	1	0	0
	23	M	1	-1	1	23	N	-1	1	1
	24	H	-1	0	-1	24	K	-1	-1	1
	24	J	0	1	0	24	J	0	1	0
	24	A	-1	-1	-1	24	H	-1	0	-1
	25	L	0	-1	1	25	F	1	1	-1
	25	D	-1	1	-1	25	A	-1	-1	-1
	25	I	1	0	0	25	E	-1	0	1
	26	B	1	-1	-1	26	C	0	0	-1
	26	N	-1	1	1	26	M	1	-1	1
	26	J	0	1	0	26	G	-1	-1	0
	27	A	-1	-1	-1	27	J	0	1	0
	27	E	-1	0	1	27	B	1	-1	-1
	27	I	1	0	0	27	E	-1	0	1
	28	F	1	1	-1	28	H	-1	0	-1
VI	28	K	-1	-1	1	28	F	1	1	-1
	28	H	-1	0	-1	28	L	0	-1	1
	29	M	1	-1	1	29	K	-1	-1	1
	29	C	0	0	-1	29	D	-1	1	-1
	29	L	0	-1	1	29	O	1	1	1
	30	G	-1	-1	0	30	I	1	0	0
	30	O	1	1	1	30	N	-1	1	1
	30	D	-1	1	-1	30	A	-1	-1	-1

Tabela 19. Continuação

	31	G	-1	-1	0	31	M	1	-1	1
	31	A	-1	-1	-1	31	C	0	0	-1
	31	M	1	-1	1	31	G	-1	-1	0
	32	I	1	0	0	32	F	1	1	-1
	32	N	-1	1	1	32	H	-1	0	-1
	32	F	1	1	-1	32	N	-1	1	1
	33	D	-1	1	-1	33	B	1	-1	-1
VII	33	J	0	1	0	33	O	1	1	1
	33	C	0	0	-1	33	K	-1	-1	1
	34	O	1	1	1	34	A	-1	-1	-1
	34	L	0	-1	1	34	E	-1	0	1
	34	H	-1	0	-1	34	J	0	1	0
	35	K	-1	-1	1	35	D	-1	1	-1
	35	B	1	-1	-1	35	L	0	-1	1
	35	E	-1	0	1	35	I	1	0	0

As matrizes de concorrência (simétricas) dos tratamentos nos blocos, comumente denotadas por $\Lambda = NN'$ e as matrizes de covariâncias $(V(\hat{\theta}))$ dos coeficientes do modelo adotado, para os delineamentos - sistema triplo $(\Lambda_{STS}, V(\hat{\theta}_{STS}))$, A-ótimo $(\Lambda_A, V(\hat{\theta}_{A-ótimo}))$ e D-ótimo $(\Lambda_D, V(\hat{\theta}_{D-ótimo}))$ - são, respectivamente:

$$\Lambda_{STS} = \begin{matrix} & A & B & C & D & \dots & O \\ \begin{matrix} A \\ B \\ C \\ D \\ \vdots \\ O \end{matrix} & \begin{pmatrix} 7 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 7 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & 7 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 7 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 7 \end{pmatrix} \end{matrix},$$

$$V(\hat{\theta}_{STS}) = \frac{\sigma_e^2}{1000} \times$$

$$\begin{matrix} & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{33} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{23} \\ \begin{matrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_{11} \\ \beta_{22} \\ \beta_{33} \\ \beta_{12} \\ \beta_{13} \\ \beta_{23} \end{matrix} & \begin{pmatrix} \mathbf{18} & -1,20 & 2,15 & 2,35 & -3,54 & 3,40 & 2,00 & 0,04 & 0,16 \\ & \mathbf{19} & 1,40 & 1,53 & 0,88 & 1,54 & 1,95 & 0,28 & -2,00 \\ & & \mathbf{18} & -0,12 & -6,00 & 1,00 & 0,42 & 3,61 & 1,72 \\ & & & \mathbf{90} & -5,80 & -15 & -2,80 & -0,02 & -8,70 \\ & & & & \mathbf{72} & -6,4 & -2,86 & -1,20 & 1,73 \\ & & & & & \mathbf{90} & 9,00 & 0,20 & 3,17 \\ & & & & & & \mathbf{24} & 0,08 & 0,06 \\ & & & & & & & \mathbf{21} & 0,34 \\ & & & & & & & & \mathbf{24} \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Λ_A \parallel

$$\begin{array}{c} A \\ B \\ C \\ D \\ E \\ F \\ G \\ H \\ I \\ J \\ K \\ L \\ M \\ N \\ O \end{array} \begin{pmatrix} 7 & 1 & 1 & 3 & 4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ & 7 & 1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 & 3 \\ & & 7 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 2 & 2 \\ & & & 7 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ & & & & 7 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ & & & & & 7 & 0 & 2 & 2 & 3 & 0 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ & & & & & & 7 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & 3 \\ & & & & & & & 7 & 1 & 5 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & 7 & 0 & 0 & 5 & 0 & 4 & 0 \\ & & & & & & & & & 7 & 3 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & 7 & 1 & 0 & 0 & 3 \\ & & & & & & & & & & & 7 & 0 & 3 & 0 \\ & & & & & & & & & & & & 7 & 2 & 1 \\ & & & & & & & & & & & & & 7 & 1 \\ & & & & & & & & & & & & & & 7 \end{pmatrix},$$

$$V(\hat{\theta}_{A-\delta\text{timo}}) = \frac{\sigma_e^2}{1000} \times$$

	β_1	β_2	β_3	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
β_1	16	-1,06	0,61	1,06	-0,80	2,48	2,41	-0,50	0,08
β_2		16	0,81	1,46	1,12	0,65	1,64	-0,01	-3,25
β_3			17	1,00	-3,80	-0,08	-0,07	3,05	2,03
β_{11}				77	-4,34	-7,11	-2,42	1,17	-5,79
β_{22}					57	-0,81	-1,10	-1,02	1,95
β_{33}						78	5,32	0,40	4,45
β_{12}			<i>Sim</i>				21	0,28	-0,84
β_{13}								17	1,02
β_{23}									23

Λ_D \parallel

$$\begin{array}{c} A \\ B \\ C \\ D \\ E \\ F \\ G \\ H \\ I \\ J \\ K \\ L \\ M \\ N \\ O \end{array} \begin{pmatrix} 7 & 1 & 1 & 0 & 4 & 2 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ & 7 & 1 & 3 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 3 \\ & & 7 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 1 & 2 \\ & & & 7 & 2 & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & 3 \\ & & & & 7 & 2 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ & & & & & 7 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 2 & 2 & 2 & 0 \\ & & & & & & 7 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 3 & 1 & 2 \\ & & & & & & & 7 & 1 & 3 & 4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ & & & & & & & & 7 & 0 & 0 & 5 & 0 & 3 & 0 \\ & & & & & & & & & 7 & 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & 7 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ & & & & & & & & & & & 7 & 0 & 2 & 0 \\ & & & & & & & & & & & & 7 & 2 & 1 \\ & & & & & & & & & & & & & 7 & 1 \\ & & & & & & & & & & & & & & 7 \end{pmatrix},$$

$$V(\hat{\theta}_{D\text{-ótimo}}) = \frac{\sigma_e^2}{1000} \times$$

$$\begin{matrix} & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{33} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{23} \\ \beta_1 & \mathbf{15} & -0,97 & 0,15 & 3,85 & -0,95 & 5,17 & 1,00 & 0,47 & 0,12 \\ \beta_2 & & \mathbf{17} & 1,43 & 3,87 & 2,20 & 3,31 & 1,46 & -0,3 & -2,39 \\ \beta_3 & & & \mathbf{16} & -1,20 & -3,82 & -1,23 & -0,16 & 3,41 & 1,47 \\ \beta_{11} & & & & \mathbf{80} & -2,40 & -4,03 & -3,70 & 0,13 & -7,27 \\ \beta_{22} & & & & & \mathbf{58} & 1,62 & -2,56 & -0,74 & 2,07 \\ \beta_{33} & & & & & & \mathbf{81} & 7,58 & -1,02 & 3,17 \\ \beta_{12} & & & \textit{Sim} & & & & \mathbf{21} & 0,28 & -0,17 \\ \beta_{13} & & & & & & & & \mathbf{17} & 0,23 \\ \beta_{23} & & & & & & & & & \mathbf{23} \end{matrix}$$

Todos os elementos da diagonal principal (variâncias dos coeficientes) da matriz de covariâncias dos delineamentos otimizados foram inferiores aos elementos do STS. Dessa maneira, para um modelo de superfície de resposta, esses delineamentos seriam os melhores.

Os elementos das matrizes Λ correspondem ao número de vezes que cada tratamento ocorre com um outro no mesmo bloco. Os elementos da diagonal principal correspondem aos números de repetições dos tratamentos. Na matriz Λ_{STS} , pode-se averiguar que quaisquer pares de tratamentos ocorreram juntos uma única vez em algum bloco, ou seja, $\lambda = 1$ (uma classe de associados).

Uma propriedade desejável para esse delineamento é que todos os contrastes de tratamentos sejam estimáveis e todos os pares de comparações dos efeitos de tratamentos sejam estimados com a mesma variância, de forma que seus intervalos de confiança possuam o mesmo tamanho. Por essa e outras razões históricas, os delineamentos em blocos incompletos não são uma escolha popular entre os pesquisadores.

Mesmo para o STS balanceado e completo, a matriz $V(\hat{\theta}_{STS})$ envolve falta de ortogonalidade e sua análise seria difícil sem computadores, sendo que os pesquisadores limitam-se à análise dos superblocos que constituem blocos completos ortogonais ($\Lambda_{STS} = 7J$), em que J é uma matriz cujos elementos são iguais a 1.

Para as demais matrizes de concorrência, verifica-se que ambas possuem várias classes de associados, pois há 0, 1, ..., 6 repetições de pares de alguns tratamentos; além disso, são delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados. Por exemplo: na matriz Λ_A , os pares de tratamentos (A,G), (B,F) e (D,H) não ocorreram juntos em nenhum bloco, o que pode ser constatado na Tabela 18. Em contrapartida, o par de tratamentos (D,E) ocorreu em 6 blocos: 2, 10, 11, 23, 29 e 35. Conclusão análoga pode ser feita para a matriz Λ_D para os pares de tratamentos (B,F), (E,H), (F,J) e (C,G)⁹, consultando-se a Tabela 19.

Dessa forma, há 7 grupos de contrastes, dentre os quais tem-se: um grupo de contrastes que envolvem médias de tratamentos que não ocorreram juntos em nenhum bloco, portanto possuem maior variância; por exemplo, no delineamento A-ótimo, $\tau_A - \tau_G, \tau_B - \tau_F$ e $\tau_D - \tau_H$. Um outro grupo são contrastes que ocorreram em 6 blocos, assim tem-se menor variância, logo são estimados com maior precisão; por exemplo: $\tau_D - \tau_E$ no A-ótimo e $\tau_C - \tau_G$ no D-ótimo.

⁹Os pares de tratamentos (D,E) e (C,G) estão destacados nas Tabelas 18 e 19 como indicação de suas ocorrências.

Observe-se que a matriz Λ_{STS} possui apenas uma classe de associados para os tratamentos, o que caracteriza um delineamento em blocos incompletos balanceados, cujo grafo regular pode ser visualizado na Figura 16. Nessa figura, as letras representam os tratamentos sem estrutura e os tratamentos que ocorrem juntos em algum bloco são ligados entre si por uma linha.

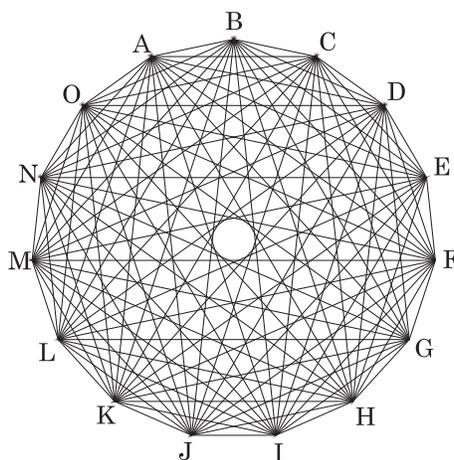


FIGURA 16 Representação do grafo regular para o $\xi(15,35,3,7)$ em que cada tratamento é um ponto (vértice) - (Os tratamentos que ocorrem num mesmo bloco estão ligados entre si por uma linha.)

Os 3 delineamentos são do tipo *resolvable*, ou seja, podem ser agrupados em superblocos ou repetições completas. A matriz de incidência dos tratamentos nos superblocos (dias da semana) obtida é:

$$RR' = \begin{matrix} & A & B & C & D & \dots & O \\ \begin{matrix} A \\ B \\ C \\ D \\ \vdots \\ O \end{matrix} & \left(\begin{matrix} 7 & 7 & 7 & 7 & \dots & 7 \\ 7 & 7 & 7 & 7 & \dots & 7 \\ 7 & 7 & 7 & 7 & \dots & 7 \\ 7 & 7 & 7 & 7 & \dots & 7 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 7 & 7 & 7 & 7 & \dots & 7 \end{matrix} \right) \end{matrix}.$$

Assim, os delineamentos com os 7 superblocos compostos por 5 blocos contendo os 15 tratamentos em cada superbloco podem ser encarados como um delineamento em blocos casualizados. Uma das principais dificuldades é que nem sempre existe BIB para algumas escolhas de v, k, b e r .

Os valores obtidos do traço e determinantes dos delineamentos em questão podem ser observados na Tabela 20.

TABELA 20 Valores dos traços e determinantes da matriz de covariâncias dos delineamentos: sistema triplo e otimizados

Valores	Delineamentos		
	STS	A-ótimo	D-ótimo
Traço	0,328	0,325	0,328
Determinante	$9,717 \times 10^{-15}$	$1,108 \times 10^{-14}$	$9,717 \times 10^{-15}$

Diante dos valores da Tabela 20, deduz-se que o delineamento D-ótimo é igualmente eficiente ao STS, visto que os valores do traço e determinantes são iguais. Já o delineamento A-ótimo é um pouco mais eficiente (0,9%) que os outros dois pelo critério A; no entanto, para o critério D, os outros dois foram 14% mais eficientes do que ele.

Apesar de os delineamentos otimizados possuírem mais classes de associados - portanto, não sendo balanceados - eles mostraram-se tão eficientes quanto o STS. Logo, são delineamentos alternativos e eficientes no emprego de blocos incompletos. Assim, o algoritmo *S-interchange* mostrou ser uma ferramenta útil para a construção de delineamentos eficientes, como o STS, bem como para delineamentos em blocos incompletos com tratamentos estruturados.

Cabe ao pesquisador, diante da situação experimental, adotar o delineamento que seja mais eficiente nas suas estimativas perante as suas escolhas, tais como os contrastes de seu interesse.

No caso específico de o pesquisador não poder montar o STS completo, a solução otimizada para uma fração, por exemplo, 4 repetições, é mais provável de ser ótima se for escolhida via algoritmo de trocas do que se fossem buscadas ao acaso 4 repetições do STS.

5 CONCLUSÕES

Os algoritmos de busca são, como pôde ser observado, uma ferramenta útil e bastante flexível para a construção de delineamentos ótimos para experimentos fatoriais em blocos incompletos, pois permitem a construção de fatoriais fracionários com qualquer quantidade de tratamentos, diferentemente da construção padrão dos livros-texto.

Para a escolha de tratamentos em fatoriais fracionários, em geral, podem-se obter delineamentos otimizados mais eficientes do que os delineamentos já conhecidos, usando-se algoritmos do tipo *exchange*. Isso se aplica tanto na fase inicial de estudos com muitos fatores quanto para delineamentos de superfície de resposta, como os fatoriais com 3 níveis.

Para a alocação de tratamentos em blocos, considerando-se a estrutura dos fatores em modelos de superfície de resposta, algoritmos do tipo *interchange* resultam tão ou mais eficientes que alternativas consagradas, mesmo em exemplos didáticos.

O algoritmo S-*interchange* é uma opção para a construção de delineamentos em blocos incompletos balanceados (ou não), do tipo *resolvable*. O algoritmo encontra delineamentos ótimos em situações clássicas (Sistemas Triplos de Steiner) e resulta em delineamentos eficientes em situações com estrutura complexa de tratamentos e unidades experimentais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N. The construction of exact D-optimum experimental designs with application to blocking response surface designs. **Biometrika**, London, v.76, n.3, p.515-526, Sept. 1989.

ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N.; TOBIAS, R. D. **Optimum experimental designs with SAS**. New York: Oxford University, 2007. 511p.

BOSE, R. C.; NAIR, K. R. Partially balanced incomplete block designs. **Sankhyā**, Calcuttá, v.4, p.337-372, 1939.

BOX, G. E. P.; BEHNKEN, D. W. Some new three level designs for the study of quantitative variables. **Technometrics**, Washington, v.2, n.4, p.455-475, Nov. 1960.

BOX, G. E. P.; BEHNKEN, D. W. **Some new three level second-order designs for surface fitting**. New Jersey: Princeton, 1958. (Statistical Technical Research Group Technical Report. 26).

BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. **Empirical model building and response surfaces**. New York: J. Wiley, 1987. 669p.

BOX, G. E. P.; HUNTER, J. S. The 2^{k-p} fractional factorial designs part I. **Technometrics**, Washington, v.42, n.1, p.28-47, Feb. 1961.

BOX, G. E. P.; HUNTER, J. S.; HUNTER W. G. **Statistics for experimenters: design, innovation, and discovery**. 2. ed. New Jersey: J. Wiley, 2005. 639p.

BOX, G. E. P.; WILSON, K. B. On the experimental attainment of optimum conditions. **Journal of the Royal Statistical Society (Methodological)**: série B, London, v.13, n.1, p.1-45, 1951.

BUENO FILHO, J. S. S.; GILMOUR S. G. Planning incomplete block experiments when treatments are genetically related. **Biometrics**, London, v.59, n.2, p.375-381, June. 2003.

CHALONER, K.; VERDINELLI, I. Bayesian experimental design: a review. **Statistical Science**, Hayward, v.10, n.3, p.237-304, Aug. 1995.

CHEN, B.; LI, P.; LIU, M. Q.; ZHANG, R. Some results on blocked regular 2-level fractional factorial designs with clear effects. **Journal of Statistical Planning and Inference**, Amsterdam, v.136, n.12, p.4436-4449, Dec. 2006.

CHEN, J.; SUN, D. X.; WU, C. F. J. A catalogue of two-level and three-level fractional factorial designs with small runs. **International Statistical Review**, Edinburgh, v.61, n.1, p.131-145, 1993.

CHENG, S.; WU, C. F. J. Choice of optimal blocking schemes in two-level and three-level designs. **Technometrics**, Washington, v.44, n.3, p.269-277, Aug. 2002.

COCHRAN, W. G.; COX, G. M. **Experimental designs**. 2. ed. New York: J. Wiley, 1968. 611p.

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.

FEDOROV, V. V. **Theory of optimal experiments**. New York: Academic, 1972.

FRANKLIN, M. F. Constructing tables of minimum aberration p^{n-m} . **Technometrics**, Washington, v.26, p.225-232, 1984.

FRIES, A.; HUNTER, W. G. Minimum aberration 2^{k-p} designs. **Technometrics**, Washington, v.22, n.4, p.601-608, Nov. 1980.

GIESBRECHT, F. G.; GUMPERTZ, M. L. **Planning, construction, and statistical analysis of comparative experiments.** New Jersey: J. Wiley, 2004. 693p.

GOOS, P.; VANDEBROEK, M. D-optimal response surface designs in the presence of random block effects. **Computational statistics and data analysis**, Amsterdam, v.37, n.4, p.433-453, Oct. 2001.

HINKELMANN, K.; KEMPTHORNE, O. **Design and analysis of experiments: advanced experimental design.** New Jersey: J. Wiley, 2005. v.2, 780p.

JOHN, P. W. M. **Incomplete block designs.** Texas: M. Dekker, 1980. v.1, 101p.

JONES, B.; GOOS, P. D-optimal design of split-split-plot experiments. **Biometrika**, London, v.96, n.1, p.67-82, Mar. 2009.

KHURI, A. I.; CORNELL, J. A. **Response surface: designs and analysis.** 2. ed. New York: Marcel Dekker, 1996. 510p.

KIEFER, J. Optimum experimental designs. **Journal of the Royal Statistical Society (Methodological): série B**, London, v.21, n.2, p.272-319, May. 1959.

LENTH, R. V. Quick and easy analysis of unreplicated factorials. **Technometrics**, Washington, v.31, n.4, p.469-473, Nov. 1989.

LI, F.; JACROUX, M. Optimal foldover plans for blocked 2^{m-k} fractional factorial designs. **Journal of Statistical Planning and Inference**, Amsterdam, v.137, n.7, p.2439-2452, July. 2007.

LI, W.; LIN, D. K. J. Optimal foldover plans for two-level fractional factorial designs. **Technometrics**, Washington, v.45, n.2, p.142-149, May. 2003.

LI, W.; MEE, R. W. Better foldover fractions for resolution III 2^{k-p} designs. **Technometrics**, Washington, v.44, n.3, p.278-283, Aug. 2002.

- MEAD, R. **The design of experiments:** statistical principles for practical applications. New York. Cambridge University, 1990. 620p.
- MILLER, A. J.; NGUYEN, N. K. Fedorov exchange algorithm for D-optimal design. **Journal of Applied Statistics**, Abingdon, v.43, n.4, p.669-678, 1994.
- MITCHELL, T. J. An algorithm for the construction of D-optimal designs. **Technometrics**, Washington, v.16, n.2, p.203-210, May. 1974.
- MONTGOMERY, D. C. **Design and analysis of experiments.** 5. ed. New York: J. Wiley, 2001. 683p.
- NAIR, K. R. Analysis of partially balanced incomplete block designs illustrated on the simple square and rectangular lattices. **Biometrics**, London, v.8, n.2, p.122-155, June. 1952.
- NGUYEN, N, K.; BORKOWSKI, J. J. New 3-level response surface designs constructed from incomplete block designs. **Journal of Statistical Planning and Inference**, Amsterdam, v.138. n.1, p.294-305, Jan. 2008.
- NGUYEN, N.; MILLER, A. J. A review of some exchange algorithms for constructing discrete D-optimal designs. **Computational Statistics & Data Analysis**, Amsterdam, v.14, n.4, p.489-498, Nov. 1992.
- OLIVEIRA, A. C. Experimentos em blocos incompletos parcialmente balanceados (PBIB) com tratamentos comuns adicionados em cada bloco. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v.25, n.4, p.469-490, abr. 1990.
- PATTERSON, H. D.; THOMPSON, R. Recovery of interblock information when block sizes are unequal. **Biometrika**, London, v.58, n.3, p.545-554, Nov. 1971.
- PLACKETT, R. L.; BURMAN, J. P. The design of optimum multifactorial experiments. **Biometrika**, London, v.33, n.4, p.305-325, June. 1946.

QU, X.; VENTER, G.; HAFTKA, R. T. New formulation of minimum-bias central composite experimental design and Gauss quadrature. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Berlin, v.28, n.4, p.231-242, Oct. 2004.

RAY-CHAUDHURI, D. K.; WILSON, R. M. Solution of kirkman's schoolgirl problem. **Combinatorics**, n.19, p.187-203, 1971.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. **R**: A language and environment for statistical computing.. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2009. Disponível em: <<http://www.R-project.org>>. Acesso em: 7 jul. 2009.

REES, R.; WALLIS, W. D. Kirkman triple system and their generalizations: a survey. In: WALLIS, W. D. **Designs 2002**: further computational and constructive design theory. Norwell: Kluwer Academic, 2003. p.317-368.

SAS INSTITUTE. **SAS/QC Software**: reference, version 6. Cary: SAS Institute, 1995.

SEARLE, S. R. **Matrix algebra useful for statistics**. New York: J. Wiley, 1982. 438p.

SITTLER, R. R.; CHEN, J.; FEDER, M. Fractional resolution and minimum aberration in blocked 2^{n-k} designs. **Technometrics**, Washington, v.39, n.4, p.382-390, Nov. 1997.

SUN, D. X.; WU, C. F. J.; CHEN, Y. Optimal blocking schemes for 2^n and 2^{n-p} designs. **Technometrics**, Washington, v.39, n.3, p.298-307, Aug. 1997.

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.

WALD, A. On the efficient design of statistical investigations. **Annals of Mathematical Statistics**, Ann Arbor, v.14, n.2, p.134-140, June. 1943.

WU, C. F. J.; CHEN, Y. Y. A graph-aided method for planing two-level experiments when certain interactions are important. **Technometrics**, Washington, v.34, n.2, p.162-175, May. 1992.

WU, C. F. J.; HAMADA, M. **Experiments: planning, analysis, and parameter design optimization**. New York: J. Wiley, 2000. 630p.

WU, C. F. J.; ZHANG, R. Minimum aberration designs with two-level and four-level factors. **Biometrika**, London, v.80, n.1, p.203-209, Mar. 1993.

WYNN, H. P. The sequential generation of D-optimal experimental designs. **Annals of Mathematical Statistics**, Ann Arbor, v.41, n.5, p.1655-1664, Oct. 1970.

YATES, F. Incomplete randomized blocks. **Annals of Eugenics**, Londres, v.7, p.121-140, 1936.

ZHANG, R.; PARK, D. Optimal blocking of two-level fractional factorial designs. **Journal of Statistical Planning and Inference**, Amsterdam, v.91, n.1, p.107-121, Nov. 2000.

APÊNDICES

Programa 1: Rotina R para implementação do algoritmo *exchange* para a construção de fatoriais fracionários com k fatores de 3 níveis. 130

Programa 2: Rotina R para implementação do algoritmo *interchange* para a construção de fatoriais fracionários com k fatores de 3 níveis em delineamentos de blocos incompletos. 134

Programa 3: Rotina R para implementação do algoritmo *S-interchange* para a construção de fatoriais fracionários com tratamentos não estruturados em delineamentos de blocos incompletos balanceados do tipo *resolvable* utilizando o critério A. 139

Programa 1: Rotina R para implementação do algoritmo *exchange* para a construção de fatoriais fracionários com k fatores de 3 níveis.

```
#####
# Função que faz as trocas de linhas (tratamentos) entre o deli-
# neamento e o conjunto de pontos candidatos.
#####
Troca      <- function(Xbase,X0,Crit0)
{
  HT1      <- 0
  for (i in 1:v)
  {
    for (j in 1:N)
    {
      X      <- X0
      X[i,] <- Xbase[j,]
      Crit   <- det(t(X)%*%X)
      if (Crit > Crit0)
      {
        Crit0 <- Crit
        X0    <- X
        HT1   <- 1
      }
    }
  }
  list(X0,HT1)
}
```

```

#####
# Construção da matriz do delineamento para o seguinte modelo: #
#   Y = A + B + C + A^2 + B^2 + C^2 + AB + AC + BC + ABC      #
#####
k      <- 3      #          Número de fatores          #
N      <- 3^k # N° total de pontos candidatos (tratamentos)#
v      <- 15    # N° de tratamentos do fatorial fracionário #
Xb     <- matrix(0,N,k)
#   Construção das três primeiras colunas (Efeitos principais) #
Xb[,1:k] <- as.matrix(expand.grid(-1:1,-1:1,-1:1))
#   Construção dos demais efeitos de acordo com o modelo de     #
#   superfície de resposta #
colnames(Xb)<- c(A,B,C)
A      <- Xb[,1]
B      <- Xb[,2]
C      <- Xb[,3]
y      <- rnorm(N)
modelo <- lm(y ~ A+B+C+I(A^2)+I(B^2)+I(C^2)+A*B+A*C+B*C)
Xbase  <- model.matrix(modelo)
#####
#           Repete a otimização até sair do ótimo local       #
#####
inicio <- Sys.time()
TENTA  <- 10000 #           Número de tentativas           #
pontos <- c(1:N)
critvec <- 0*c(1:TENTA)

```

```

critfin    <- 0*c(1:TENTA)
Crit0      <- 0
Crit       <- Crit0 + 1
CritFin    <- Crit0
for(k in 1: TENTA)
  {
    Crit0    <- 0
    while(Crit0 < 10^(-6))
      {
        iX0    <- sort(sample(pontos,v))
        X0     <- Xbase[iX0,]
        Crit0  <- det(t(X0)%*%X0)
      }
    #      Escolher uma linha de X0 para troca com uma de Xbase      #
    HT       <- 1
    while(HT==1)
      {
        invoca <- Troca(Xbase,X0,Crit0)
        X0     <- invoca[[1]]
        Crit0  <- det(t(X0) %*% X0)
        HT     <- invoca[[2]]
      }
    X        <- X0
    Crit     <- det(t(X) %*% X)
    critvec[k]<- Crit
    if(Crit > CritFin)

```

```

    {
      XFinal <- X
      CritFin <- Crit
    }
    critfin[k] <- CritFin
  }
  (tempo <- Sys.time() - inicio)      tempo de execução #
  XFinal                               # melhor delineamento selecionado #
  CritFin
  det(t(XFinal)%*%XFinal)             # Valor do critério (D) #
  write.table(XFinal,file = XFinal do exchange (Critério D).txt,
  append=TRUE)
  sum(diag(t(XFinal)%*%XFinal)) # Traço da matriz de informação do
                                # melhor delineamento encontrado #

  par(mfrow=c(2,1))
  plot(critvec)
  plot(critfin)

```

Programa 2: Rotina R para implementação do algoritmo *interchange* para a construção de fatoriais fracionários com k fatores de 3 níveis em delineamentos de blocos incompletos.

```
#####
# Função da rotina de intercâmbio dos tratamentos alocados nos #
#                               blocos                               #
#####
Troca.entre.blocos  <- function(XT,Crit.X)
{
  HTB                <- 0
  for(i in 1:(b-1))
  {
    for(j in 1:k)
    {
      Lc                <- (i-1)*k+j
      for(ii in (i+1):b)
      {
        for(jj in 1:k)
        {
          Lb            <-(ii-1)*k+jj
          X2            <- XT
          X2[Lc,]       <- XT[Lb,]
          X2[Lb,]       <- XT[Lc,]
          X2            <- cbind(XB,X2)
          M             <- ginv(t(X2) %*% X2)
          Crit.X2       <- sum(diag(M[(b+1):(nc),(b+1):(nc)]))
        }
      }
    }
  }
}
```

```

# Crit.X2  <- det((M[(b+1):(nc),(b+1):(nc)]))
if (Crit.X2 < Crit.X)
{
  Crit.X  <- Crit.X2
  XT      <- X2[, (b+1):ncol(X2)]
  HTB     <- 1
}
}
}
}
list(XT,HTB)
}

Troca.entre.blocos  <- function(XT,Crit.X)
#####
#           Função que constrói o delineamento           #
#####
design          <- function(vetor,niveis)
{
  n              <- length(vetor)
  Xdes           <- matrix(0,n,niveis)
  for(i in 1:length(vetor))
  {
    Xdes[i,vetor[i]] <- 1
  }
  list(Xdes=Xdes)
}

```

```

}

#####
#           Especificação do problema           #
#####

library(MASS)

TENTA          <- 10000          # Número de tentativas #
v              <- 24             # Número de tratamentos #
r              <- 1              # Número de repetições #
b              <- 3              # Número de blocos #
k              <- 9              # Tamanho dos blocos #
#           Amostra aleatória dos tratamentos   #
trat           <- c(1:(v*r))
for ( i in 1:r)
{
  trat[((i-1)*v+1):(i*v)] <- sample(c(1:v))
}

#####
#           Construção das matrizes do delineamento           #
#####

blocos         <- kronecker(c(1:b),c(rep(1,k)))
repet          <- kronecker(c(1:r),c(rep(1,v)))
delB           <- design(blocos,b)
delR           <- design(repet,r)
XB             <- delB$Xdes
XR             <- delR$Xdes
XT             <- as.matrix(read.table('box.txt'))

```

```

XT                <- XT[,2:ncol(XT)]
nulo              <- matrix(0,3,(ncol(XT))) # ptos centrais
XT               <- as.matrix(rbind(XT,nulo))
X                <- cbind(XB,XT)
nc               <- ncol(X)
M                <- ginv(t(X) %*% X)
Crit.X           <- sum(diag(M[(b+1):(nc),(b+1):(nc)]))
#Crit.X         <- det((M[(b+1):(nc),(b+1):(nc)]))
Crit.FIM         <- Crit.X + 1
Crit.BEST        <- Crit.FIM + 1

#####
#Invoca o algoritmo interchange: troca tratamentos entre blocos#
#####

XT.FIM           <- XT
XT.BEST          <- XT
inicio           <- Sys.time()

for(tentativa in 1:TENTA)
{
  trat           <- c(1:(v*r))
  XT             <- XT[trat,]
  X              <- cbind(XB,XT)
  M              <- ginv(t(X) %*% X)
  Crit.X         <- sum(diag(M[(b+1):(nc),(b+1):(nc)]))
  #Crit.X        <- det((M[(b+1):(nc),(b+1):(nc)]))
  Crit.FIM       <- Crit.X + 1
  HTT           <- 1
}

```

```

while(Crit.FIM > Crit.X || HTT==1)
{
  Crit.FIM          <- Crit.X
  invocablocos     <- Troca.entre.blocos(XT,Crit.X)
  XT               <- invocablocos[[1]]
  X               <- cbind(XB,XT)
  M               <- ginv(t(X) %*% X)
  Crit.X          <- sum(diag(M[(b+1):(nc),(b+1):(nc)]))
#Crit.X          <- det((M[(b+1):(nc),(b+1):(nc)]))
  HTT            <- invocablocos[[2]]
}

write(Crit.FIM,file = ‘‘Crit.FIM interchange não resolvável’’,
  append=TRUE)

if(Crit.FIM < Crit.BEST)
{
  Crit.BEST        <- Crit.FIM
  XT.BEST         <- XT
}

write(Crit.BEST,file = ‘‘Crit.BEST interchange não resolvável’’,
  append=TRUE)
}

(tempo           <- Sys.time()- inicio)      # duração #
XT              <- XT.BEST
XT              # matriz dos tratamentos do delineamento ótimo #
N              <- t(XT) %*% XB # matriz de incidên- #
               # cia dos tratamentos nos blocos #

```

```

NNt          <- N %% t(N)
NNt          # matriz de concorrência dos tratamentos #

```

Programa 3: Rotina R para implementação do algoritmo *S-interchange* para a construção de fatoriais fracionários com tratamentos não estruturados em delineamentos de blocos incompletos balanceados do tipo *resolvable* utilizando o critério A.

```

#####
#   Limita a função troca para dentro de cada superbloco   #
#####
Troca.entre.blocos <- function(XT,Crit.X)
{
  HTT          <- 0
  for(i in 2:r)
  {
    for(j in 1:(b/r-1))
    {
      for(kk in 1:k)
      {
        Lc          <- (i-1)*v+(j-1)*k+kk
        for(jj in (j+1):(b/r))
        {
          for(kkk in 1:k)
          {
            Lb          <- (i-1)*v+(jj-1)*k+kkk
            X2          <- XT

```

```

X2[Lc,] <- XT[Lb,]
X2[Lb,] <- XT[Lc,]
X      <- cbind(XB,X2)
M      <- ginv(t(X) %*% X)
Crit.X2 <- det((M[(b+1):(b+nc),(b+1):(b+nc)]))
#Crit.X2 <- sum(diag(M[(b+1):(b+nc),(b+1):(b+nc)]))#
if(Crit.X2 < Crit.X)
  {
    Crit.X <- Crit.X2
    XT     <- X2
    HTT    <- 1
  }
}
}
}
}
list(XT,HTT)
}
#####
#           Função que constrói o delineamento           #
#####
design <- function(vetor,niveis)
{
  n      <- length(vetor)
  Xdes  <- matrix(0,n,niveis)

```

```

for(i in 1:length(vetor))
  {
    Xdes[i,vetor[i]] <- 1
  }
list(Xdes=Xdes)
}

#####
#                               Especificação do problema                               #
#####

library(MASS)

TENTA    <- 10000                # Número de tentativas #
v        <- 15                   # Número de tratamentos #
r        <- 7                    # Número de repetições #
b        <- 35                   # Número de blocos #
k        <- 3                    # Tamanho dos blocos #
#####

#                               Amostra separada em superblocos                               #
#####

trat     <- c(1:(v*r))
for ( i in 1:r)
  {
    trat[((i-1)*v+1):(i*v)] <- sample(c(1:v))
  }

#####

#Construção das matrizes: blocos, superblocos e do delineamento#
#####

```

```

blocos    <- kronecker(c(1:b),c(rep(1,k)))
repet     <- kronecker(c(1:r),c(rep(1,v)))
delB      <- design(blocos,b)
delR      <- design(repet,r)
XB        <- delB$Xdes                # matriz dos blocos #
XR        <- delR$Xdes                # matriz dos superblocos #
XT        <- delT$Xdes                # matriz dos tratamentos #
X         <- cbind(XB,XT)             # matriz do delineamento #
M         <- ginv(t(X) %*% X)
Crit.X    <- sum(diag(M[(b+1):(b+v),(b+1):(b+v)]))
Crit.FIM  <- Crit.X + 1
Crit.BEST <- Crit.FIM +1
#####
#   Invoca o algoritmo interchange: Troca tratamentos entre   #
#           blocos dentro de cada superbloco.                 #
#####
XT.FIM    <- XT
XT.BEST   <- XT
inicio    <-Sys.time()
for(tentativa in 1:TENTA)
{
  trat    <- c(1:(v*r))
  for ( i in 2:r)
  {
    trat[((i-1)*v+1):(i*v)] <- sample(c(1:v))
  }
}

```

```

XT      <- XBase[trat,]
X       <- cbind(XB,XT)
M       <- ginv(t(X) %*% X)
Crit.X  <- sum(diag(M[(b+1):(b+v),(b+1):(b+v)]))
Crit.FIM<- Crit.X + 1
HTT     <- 1
while(Crit.FIM > Crit.X || HTT==1)
  {
    Crit.FIM      <- Crit.X
    invocablocos <- Troca.entre.blocos(XT,Crit.X)
    XT            <- invocablocos[[1]]
    X             <- cbind(XB,XT)
    M            <- ginv(t(X) %*% X)
    Crit.X       <- sum(diag(M[(b+1):(b+v),(b+1):(b+v)]))
    HTT         <- invocablocos[[2]]
  }
  write(Crit.FIM,file = ‘‘Crit.FIM superinterchange
  (Crit rio A).txt’’,ncolumns=(v*r)+1,append=TRUE)
if(Crit.FIM < Crit.BEST)
  {
    Crit.BEST      <- Crit.FIM
    XT.BEST       <- XT
  }
  write(Crit.BEST,file = ‘‘Crit.BEST superinterchange
  (Crit rio A).txt’’,ncolumns=(v*r)+1,append=TRUE)
}

```

```

(tempo          <- Sys.time() - inicio)          # duração #
XT             <- XT.BEST
XT             # matriz dos tratamentos do delineamento ótimo #
N             <- t(XT) %*% XB # matriz de incidência dos #
                cia dos tratamentos nos blocos #
NNt           <- N %*% t(N)
NNt           # matriz de concorrência dos tratamentos #

```

ANEXO

ANEXO A: Inversa de una matriz particionada (Searle, 1982) 146

Anexo A: Inversa de uma matriz particionada (Searle, 1982)

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I & -A^{-1}B \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^{-1} & 0 \\ -(D - CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & (D - CA^{-1}B)^{-1} \end{bmatrix},$$

que pode ser reescrita como:

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -A^{-1}B \\ I \end{bmatrix} (D - CA^{-1}B)^{-1} \begin{bmatrix} -CA^{-1} & I \end{bmatrix}.$$

Note-se que essa propriedade é também válida para a inversa generalizada de Moore-Penrose. Fazendo-se a equivalência com as matrizes usuais do delineamento em blocos incompletos, segundo o modelo da subseção 3.4.1, cujas matrizes estão apresentadas na subseção 3.4.3, tem-se:

$$\begin{bmatrix} Z'Z & Z'X \\ X'Z & X'X \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} KI_b & N' \\ N & rI_v \end{bmatrix}^{-1}.$$

No caso, a matriz desejada é V_{22} .

$$\begin{bmatrix} KI_b & N' \\ N & rI_v \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{k}I_b & \phi \\ \phi & \phi \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{1}{k}N' \\ I \end{bmatrix} (rI_v - \frac{1}{k}NN')^{-1} \begin{bmatrix} -\frac{1}{k}N & I \end{bmatrix}.$$

Portanto, $V(\hat{\theta}|\xi) = (rI_v - \frac{1}{k}\Lambda)^{-1}$, em que $\Lambda = NN' = (r-1)I + J$.

Logo,

$$V(\hat{\theta}|\xi) = \left(rI - \frac{(r-1)I}{k} - \frac{J}{k} \right)^{-1} = k((rk - r + 1)I - J)^{-1} \doteq \frac{k}{rk - r + 1} \times \left(I - \frac{J}{rk - r + 1 + v} \right).$$

Em que:

r : número de repetições;

v : número de tratamentos;

b : número de blocos;

k : tamanho do bloco;

θ : vetor dos parâmetros do polinômio a ser ajustado ($p \times 1$);

ξ : delineamento em estudo;

I : matriz identidade;

J : matriz cujos elementos são iguais a 1;

Λ : matriz de concorrência dos tratamentos

N : matriz de incidência dos tratamentos nos blocos.

(*) Caso especial de inversa: $(aI_n + bJ_n)^{-1} = \frac{1}{a} \left(I_n - \frac{b}{a + nb} J_n \right)$.