



**ALLAN ALVES FERNANDES**

**OTIMIZAÇÃO DE FATORIAIS  $2^k$  OBTIDOS POR BUSCA  
ALEATÓRIA CONSIDERANDO MÍNIMA VARIÂNCIA DAS  
ESTIMATIVAS**

**LAVRAS - MG  
2018**

**ALLAN ALVES FERNANDES**

**OTIMIZAÇÃO DE FATORIAIS  $2^k$  OBTIDOS POR BUSCA ALEATÓRIA  
CONSIDERANDO MÍNIMA VARIÂNCIA DAS ESTIMATIVAS**

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

Prof. Dr. Marcelo Ângelo Cirillo  
Orientador

Prof. Dr. Renato Ribeiro de Lima  
Coorientador

**LAVRAS – MG  
2018**

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca  
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

Fernandes, Allan Alves.

Otimização de fatoriais  $2^k$  obtidos por busca aleatória  
considerando mínima variância das estimativas: / Allan Alves  
Fernandes. - 2018.

100 p. : il.

Orientador(a): Marcelo Ângelo Cirillo.

Coorientador(a): Renato Ribeiro de Lima.

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

Bibliografia.

1. Delineamentos ótimos. 2. Critérios de otimalidade. 3. Nova  
ordem. 4. *Exchange*. 5. *Simulated annealing*. I. Cirillo, Marcelo  
Ângelo. II. de Lima, Renato Ribeiro. III. Título.

**ALLAN ALVES FERNANDES**

**OTIMIZAÇÃO DE FATORIAIS  $2^k$  OBTIDOS POR BUSCA ALEATÓRIA  
CONSIDERANDO MÍNIMA VARIÂNCIA DAS ESTIMATIVAS  
OPTIMIZATION OF  $2^k$  FACTORIAL DESIGNS OBTAINED BY RANDOM  
SEARCH CONSIDERING MINIMUM VARIANCE OF THE ESTIMATES**

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

APROVADA em 20 de Junho de 2018.

Dr. Marcelo Ângelo Cirillo

UFLA

Dra. Carla Regina Guimarães Brighenti

UFSJ

Dr. Eduardo Yoshio Nakano

UnB

Dr. Fortunato Silva de Menezes

UFLA

Dr. Luiz Alberto Beijo

UNIFAL-MG

Prof. Dr. Marcelo Ângelo Cirillo  
Orientador

Prof. Dr. Renato Ribeiro de Lima  
Coorientador

**LAVRAS – MG  
2018**

A Deus,  
à minha família,  
pelo amor incondicional.

**DEDICO.**

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus (por TUDO), pela vida, saúde e por Sua constante presença, me fazendo alcançar lugares onde sozinho jamais chegaria.

Aos meus pais, Pedro Alves Fernandes e Marlene Maria Félix Fernandes, pelos ensinamentos, carinho, apoio e força.

Ao meu irmão, Alysson Alves Fernandes, pela amizade e companheirismo.

À Elayne, meu amor, por estar SEMPRE ao meu lado, e pela ajuda fundamental para a concretização desse trabalho.

Aos meus avós, Francisco Alves do Couto (*in memoriam*) e Maria Azarias Fernandes, que sempre estiveram ao meu lado.

Aos professores Dr. Marcelo Ângelo Cirillo e Dr. Renato Ribeiro de Lima, pela orientação, paciência e compreensão para a concretização desse trabalho.

A todos os membros da banca, pelas contribuições essenciais que foram realizadas.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária da UFLA, pelos conhecimentos transmitidos.

À Universidade Federal de Lavras pelos dez anos em que passei na instituição, indiscutivelmente, essenciais à minha carreira profissional.

Ao Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária.

Aos colegas do curso de doutorado pelo apoio e disponibilidade, em especial ao Alex.

Aos funcionários do Departamento de Estatística (DES) e do Departamento de Ciências Exatas (DEX).

À FAPEMIG, pela concessão de bolsa de estudos.

Por fim, a todos que contribuíram de forma direta ou indireta para execução desta tese.

**MUITO OBRIGADO!**

“E conhecereis a verdade, e a verdade vos libertará.”  
João 8:32 – Bíblia Sagrada

## RESUMO

A importância de otimizar um experimento fatorial é justificada pelo fato de que sua execução nem sempre neutraliza o efeito de fatores desconhecidos e/ou indesejáveis que variam de acordo com a natureza do experimento e, quando não neutralizados, podem influenciar na variável resposta dependendo de como é conduzido o processo experimental. Nesse sentido, esse trabalho teve por objetivo realizar um estudo de otimização dos delineamentos de Nova Ordem (NO), obtidos por Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012), gerados por método exaustivo de busca aleatória e pelo algoritmo de Dickinson (1974) e adaptações. Tal estudo considerou o algoritmo *exchange* na obtenção de delineamentos A-ótimos e D-ótimos e a busca por delineamentos vizinhos por meio do algoritmo *simulated annealing*. Como resultados, observou-se através da eficiência dos delineamentos ótimos obtidos que houve ganho em relação aos valores dos critérios A e D; e, além disso, observou-se que os delineamentos de Nova Ordem herdaram propriedades ótimas em relação aos critérios estudados e que tanto as matrizes de Nova Ordem quanto as A-ótimas e D-ótimas, obtidas a partir das matrizes de Nova Ordem, estabilizaram de forma razoável a Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF). Em função dos resultados obtidos em relação ao Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV) e Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) – medidas que apresentaram relação direta em alguns casos específicos – novas ordens de execução foram propostas para os delineamentos  $2^3$ ,  $2^4$ ,  $2^5$ ,  $2^6$  e  $2^7$ .

**Palavras-chave:** Delineamentos ótimos. Critérios de otimalidade. Nova Ordem. *Exchange*. *Simulated annealing*.



## ABSTRACT

Optimize factorial experiments is important, and its importance is justified by the fact that the process not always can neutralize unknown or undesirable factors which vary according to the nature of these experiments and can influence the response variable. In these terms, the purpose this paper was to perform a study of the optimization of the New Order (NO) designs from Adams, Cintas and Llabrés (2005) and Correa, Grima and Tort-Martorell (2012), generated by exhaustive method of random search and Dickinson's algorithm (1974) and adaptations. This study considered the exchange algorithm in the obtaining of A-optimal, D-optimal designs, and the search for neighboring designs using the simulated annealing algorithm. As a result, it was noted that, by the efficiency of the obtained optimal designs, there was an increase with regard to the values of the A-criteria and D-criteria. It was also noted that New Order designs inherited optimal properties with regard to the studied criteria and that both the New Order matrices and the A-optimal and D-optimal matrices, obtained from the New Order matrices, fairly stabilized the Factor Effect Estimates Variance (VEEF). New orders of execution were proposed for the  $2^3$ ,  $2^4$ ,  $2^5$ ,  $2^6$  e  $2^7$  designs due to the results obtained with regard to the Maximum Bias Absolute Value (MBAV) and Variance of Factor Effect Estimates (VEEF) - measures that were directly linked in some cases.

**Keywords:** Optimal designs. Optimality criteria. New Order. Exchange. Simulated annealing.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema de convergência do algoritmo <i>simulated annealing</i> .....	33
Figura 2 – Estrutura do algoritmo <i>simulated annealing</i> .....	44
Figura 3 – Esquema da metodologia proposta.....	48
Figura 4 – Comportamento do VEEF para os delineamentos na Ordem Padrão de execução.	56
Figura 5 – Comportamento do MBAV para os delineamentos na Ordem Padrão de execução. .....	56
Figura 6 – Convergência do algoritmo <i>simulated annealing</i> para os delineamentos gerados pelo critério A-ótimo a partir da Ordem Padrão.....	57
Figura 7 – Convergência do algoritmo <i>simulated annealing</i> para os delineamentos gerados pelo critério D-ótimo a partir da Ordem Padrão.....	58
Figura 8 – Comportamento do VEEF e MBAV para os delineamentos A-ótimos obtidos pelo algoritmo <i>simulated annealing</i> a partir da Ordem Padrão.....	64
Figura 9 – Comportamento do VEEF e MBAV para os delineamentos D-ótimos obtidos pelo algoritmo <i>simulated annealing</i> a partir da Ordem Padrão.....	64

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Representação dos níveis dos fatores em um fatorial $2^2$ .....	21
Tabela 2 – Delineamento $2^3$ na Ordem Padrão.....	36
Tabela 3 – Possíveis sucessoras da linha 6.....	36
Tabela 4 – Nova Ordem de execução obtida pelo método de busca. ....	37
Tabela 5 – Ordem requerida pelo algoritmo de Dickinson * .....	38
Tabela 6 – Matriz de delineamento fatorial $2^3$ na Ordem Padrão. ....	38
Tabela 7 – Possíveis linhas sucessoras para cada linha na Ordem Padrão.....	39
Tabela 8 – Escolha do número de linhas até a obtenção da 1ª sequência. ....	39
Tabela 9 – Nova Ordem com a troca do sucessor na linha 6.....	40
Tabela 10 – Nova Ordem com a troca do sucessor na linha 3.....	40
Tabela 11 – Delineamento $2^3$ na Ordem Padrão.....	47
Tabela 12 – Máximo do Absoluto do Viés de Ordem calculado para o delineamento $2^3$ .....	48
Tabela 13 – Eficiência dos principais delineamentos A-ótimos e D-ótimos obtidos pelo algoritmo <i>exchange</i> (E). ....	50
Tabela 14 – Valores dos critérios A-ótimo e D-ótimo para os delineamentos de referência e para os delineamentos obtidos pelo algoritmo <i>exchange</i> (E). ....	53
Tabela 15 – Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) para os delineamentos A-ótimos e D-ótimos gerados pelo algoritmo <i>exchange</i> (E) a partir dos delineamentos de Nova Ordem. ....	54
Tabela 16 – Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV) para os delineamentos A-ótimos e D-ótimos gerados pelo algoritmo <i>exchange</i> (E) a partir dos delineamentos de Nova Ordem. ....	55
Tabela 17 – Eficiência dos principais delineamentos A-ótimos e D-ótimos obtidos pelo algoritmo <i>simulated annealing</i> (SA). ....	58
Tabela 18 – Valores dos critérios A-ótimo e D-ótimo para os delineamentos de referência e para os delineamentos obtidos pelo algoritmo <i>simulated annealing</i> (SA). ....	59
Tabela 19 – Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) para os delineamentos obtidos pelo algoritmo <i>simulated annealing</i> (SA).....	62
Tabela 20 – Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV) para os delineamentos obtidos pelo algoritmo <i>simulated annealing</i> (SA). ....	63

Tabela 21 – Ordens (48) obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005) com mínimo valor do Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV=2) e número mínimo de mudanças (7) para delineamentos $2^3$ .....	70
Tabela 22 – Ordens semente (16) obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005), para o delineamento $2^4$ , com mínimo valor do Máximo Do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV=4) e número mínimo de mudanças (15). .....	70
Tabela 23 – Ordens semente com número mínimo de mudanças dos níveis e menor valor do MBAV para delineamentos $2^5$ , encontradas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) por meio da busca exaustiva. ....	71
Tabela 24 – Ordens que oferecem o mínimo valor do MBAV encontradas pelo algoritmo de Dickinson com alimentação forçada para delineamentos $2^6$ obtidas por de Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). ....	71
Tabela 25 – Ordens (2) com mínimo MBAV e mínimo número de mudanças para delineamentos $2^7$ obtidas pelo algoritmo de Dickinson com alimentação forçada obtidas por de Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).....	72
Tabela 26 – Delineamento $2^3$ na Ordem Padrão.....	73
Tabela 27 – Ordens A-ótimas e D-ótimas (144) obtidas através de busca exaustiva para o delineamento $2^3$ (continua).....	73
Tabela 28 – Matriz de delineamento $2^4$ na Ordem Padrão.....	75
Tabela 29 – Ordem (4F OP A <sub>E</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>exchange</i> para o delineamento $2^4$ a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.....	75
Tabela 30 – Ordem (4F OP D <sub>E</sub> ) D-ótima obtida por meio do algoritmo <i>exchange</i> para o delineamento $2^4$ a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.....	75
Tabela 31 – Ordens (16) A-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento $2^4$ , a partir das ordens semente (16) obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005). .....	76
Tabela 32 – Ordens (16) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento $2^4$ , a partir das ordens semente (16) obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005). .....	76
Tabela 33 – Valores do Critério A e D para as 16 ordens obtidas a partir das ordens semente (16) obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005) para o delineamento $2^4$ .....	77
Tabela 34 – Matriz de delineamento $2^5$ na Ordem Padrão.....	78
Tabela 35 – Ordem (5F OP A <sub>E</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>exchange</i> para o delineamento $2^5$ a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.....	78

Tabela 36 – Ordem (5F OP D <sub>E</sub> ) D-ótima obtida por meio do algoritmo <i>exchange</i> para o delineamento 2 <sup>5</sup> a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.....	78
Tabela 37 – Ordens (5F NO1 A <sub>E</sub> e 5F NO2 A <sub>E</sub> ) A-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento 2 <sup>5</sup> , a partir das ordens semente (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). .....	79
Tabela 38 – Ordens (5F NO1 D <sub>E</sub> e 5F NO2 D <sub>E</sub> ) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento 2 <sup>5</sup> , a partir das ordens semente (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). .....	79
Tabela 39 – Matriz de delineamento 2 <sup>6</sup> na Ordem Padrão (continua).....	79
Tabela 40 – Ordem (6F OP A <sub>E</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>exchange</i> para o delineamento 2 <sup>6</sup> a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.....	80
Tabela 41 – Ordens (6F NO1 A <sub>E</sub> e 6F NO2 A <sub>E</sub> ) A-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento 2 <sup>6</sup> , a partir das ordens semente (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). .....	81
Tabela 42 – Ordens (6F NO1 D <sub>E</sub> e 6F NO2 D <sub>E</sub> ) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento 2 <sup>6</sup> , a partir das ordens semente (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). .....	81
Tabela 43 – Matriz de delineamento 2 <sup>7</sup> na ordem padrão (continua).....	82
Tabela 44 – Ordem (7F OP A <sub>E</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento 2 <sup>7</sup> , a partir da Ordem Padrão.....	84
Tabela 45 – Ordens (7F NO1 A <sub>E</sub> e 7F NO2 A <sub>E</sub> ) A-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento 2 <sup>7</sup> , a partir das ordens (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). .....	85
Tabela 46 – Ordens (7F NO1 D <sub>E</sub> e 7F NO2 D <sub>E</sub> ) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>exchange</i> , para o delineamento 2 <sup>7</sup> , a partir das ordens (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). .....	86
Tabela 47 – Ordem (4F OP A <sub>SA</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>4</sup> , a partir da Ordem Padrão.....	86
Tabela 48 – Ordem (4F OP D <sub>SA</sub> ) D-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>4</sup> , a partir da Ordem Padrão.....	87
Tabela 49 – Ordem (4F NO15 A <sub>SA</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>4</sup> , a partir da matriz 4F NO15.....	87
Tabela 50 – Ordem (4F NO15 D <sub>SA</sub> ) D-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>4</sup> , a partir da matriz 4F NO15.....	87

Tabela 51 – Ordem (5F OP A <sub>SA</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>5</sup> , a partir da Ordem Padrão. ....	87
Tabela 52 – Ordem (5F OP D <sub>SA</sub> ) D-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>5</sup> , a partir da Ordem Padrão. ....	88
Tabela 53 – Ordem (5F NO2 A <sub>SA</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>5</sup> , a partir da matriz 5F NO2. ....	88
Tabela 54 – Ordens (5F NO1 D <sub>SA</sub> e 5F NO2 D <sub>SA</sub> ) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>5</sup> , a partir das ordens (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). ....	88
Tabela 55 – Ordem (6F OP A <sub>SA</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>6</sup> , a partir da Ordem Padrão. ....	89
Tabela 56 – Ordem (6F OP D <sub>SA</sub> ) D-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>6</sup> , a partir da Ordem Padrão. ....	89
Tabela 57 – Ordem (6F NO1 D <sub>SA</sub> ) D-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>6</sup> , a partir da matriz 6F NO1. ....	89
Tabela 58 – Ordem (7F OP A <sub>SA</sub> ) A-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>7</sup> , a partir da Ordem Padrão. ....	90
Tabela 59 – Ordem (7F OP D <sub>SA</sub> ) D-ótima obtida por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>7</sup> , a partir da Ordem Padrão. ....	90
Tabela 60 – Ordens (7F NO1 D <sub>SA</sub> e 7F NO2 D <sub>SA</sub> ) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo <i>simulated annealing</i> para o delineamento 2 <sup>7</sup> , a partir das ordens (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012). ....	91

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	15
2. REFERENCIAL TEÓRICO.....	17
2.1 Experimentos .....	17
2.1.1 Planejamento de experimentos .....	17
2.1.2 Experimentos Industriais .....	19
2.1.3 Experimentos Fatoriais e Fatoriais $2^k$ .....	20
2.2 Otimalidade.....	22
2.2.1 Critérios de otimalidade.....	27
2.2.1.1 A-ótimo .....	28
2.2.1.2 D-ótimo .....	29
2.3 Algoritmos de busca por delineamentos ótimos .....	31
2.3.1 <i>Exchange</i> .....	31
2.3.2 <i>Simulated Annealing</i> .....	31
2.3.3 Aplicações do algoritmo <i>simulated annealing</i> .....	33
2.4 Nova Ordem de execução em delineamentos fatoriais $2^k$ .....	34
2.4.1 Busca aleatória com restrições .....	35
2.4.2 Busca exaustiva por ordens semente de execução usando o algoritmo de Dickinson.....	37
2.4.2.1 Ilustração da execução do algoritmo de Dickinson.....	38
3. METODOLOGIA.....	41
3.1 Algoritmo <i>exchange</i> .....	42
3.2 Algoritmo <i>simulated annealing</i> .....	43
3.3 Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores.....	45
3.4 Máximo do Absoluto do Viés de ordem.....	46
4. RESULTADOS .....	49
4.1 Delineamentos $2^3$ .....	49
4.2 <i>Exchange</i> .....	49
4.3 <i>Simulated annealing</i> .....	57
5. CONCLUSÃO.....	66
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	67
ANEXO A – Matrizes de Nova Ordem propostas por Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) para os delineamentos $2^3$ , $2^4$ , $2^5$ , $2^6$ e $2^7$ .....	70
APÊNDICE A – Matrizes na Ordem Padrão e ordens de execução obtidas pelo algoritmo <i>exchange</i> e <i>simulated annealing</i> .....	73
APÊNDICE B – Scripts dos Algoritmos <i>exchange</i> e <i>simulated annealing</i> .....	92

## 1. INTRODUÇÃO

O planejamento de experimentos consiste, em síntese, na proposta de arranjos de pontos experimentais que satisfazem basicamente dois objetivos: obtenção de maior precisão estatística na resposta e menor custo possível de operação.

Em concordância com esses objetivos têm-se, entre outros, os experimentos industriais em que os tratamentos são vistos como pontos experimentais. Tais experimentos geralmente apresentam número elevado de fatores, o que ocasiona em um número excessivo de execuções dos tratamentos e, por consequência, pode gerar alto custo.

Assim, pode-se constatar que o uso de repetições torna-se inviável e, além disso, qualquer mudança na ordem de execução dos tratamentos pode agregar custo ainda maior, assim como, afetar a eficiência de determinado processo de fabricação.

Uma alternativa para solucionar tais problemas é a otimização de delineamentos que busca, entre outros objetivos, reduzir de forma expressiva o número de tratamentos, simplificando o planejamento experimental e fazendo com que a execução dos experimentos otimizados resulte em dados mais informativos (FRANCESCHINI; MACCHIETTO, 2008).

A metodologia desenvolvida na obtenção de delineamentos ótimos iniciou-se com os estudos de Kiefer (1959), que teve como objetivo encontrar delineamentos que maximizam a informação a partir da otimização de algumas características dos estimadores dos parâmetros de um modelo de interesse como, por exemplo, sua variância. Seu trabalho teve grande influência na área de delineamentos experimentais, generalizando e formalizando matematicamente diversos critérios de otimização.

Em se tratando do uso de recursos computacionais, procedimentos de busca aleatória e algoritmos são usualmente empregados na pesquisa de delineamentos ótimos. Assim, um dos métodos computacionais mais conhecidos na literatura, usado para construir delineamentos ótimos, é o algoritmo de troca (*exchange*) proposto por Fedorov (1972) que consiste em um método heurístico que parte de um delineamento inicial e, a partir dele, realiza trocas substituindo seus pontos experimentais por novos candidatos. Esse procedimento é repetido, mediante um processo iterativo, até que algum critério estatístico de interesse seja atendido.

A importância em otimizar um experimento justifica-se pelo fato de que a execução de um experimento fatorial nem sempre neutraliza o efeito de fatores indesejáveis. Tais fatores variam de acordo com a natureza do experimento e, quando não neutralizados, podem influenciar na variável resposta dependendo de como é conduzido o processo experimental.



Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) mencionam que qualquer fator que seja executado no mesmo nível repetidamente na ordem de execução de um experimento  $2^k$  e, portanto, apresente um agrupamento de sinais, pode gerar estimativas equivocadas. Por outro lado, alterações excessivas nos níveis dos fatores podem acarretar um alto custo na prática e dificultar a condução do experimento.

Por essa razão e pelo fato de que, geralmente, nos experimentos industriais os tratamentos são executados sequencialmente, têm sido amplamente procuradas ordens de execução que oferecem número mínimo de mudanças nos níveis dos fatores e que, ao mesmo tempo, minimizam a influência de fatores indesejáveis.

Com essa motivação, esse trabalho teve por objetivo realizar um estudo de otimização dos delineamentos de Nova Ordem (NO), obtidos por Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012), gerados por método exaustivo de busca aleatória e pelo algoritmo de Dickinson (1974) e adaptações. Tal estudo considerou o algoritmo *exchange* na obtenção de delineamentos A-ótimos e D-ótimos e a busca por delineamentos em sua vizinhança por meio do algoritmo *simulated annealing*.

Em função dos resultados obtidos em relação ao Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV) e a Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF), novas ordens de execução foram propostas.

## 2. REFERENCIAL TEÓRICO

### 2.1 Experimentos

O estudo de alguma característica, evento ou teste de alguma hipótese específica, nas mais diversas áreas, pode ser feito através da obtenção de dados ou observações a partir do que chamamos de experimentos.

Experimentos são trabalhos previamente planejados, seguindo determinados princípios básicos, com o objetivo de estudar e comparar efeitos de tratamentos e de suas interações. Em geral, a formulação e verificação de hipóteses se dá através de observações ou dados e neste sentido, o planejamento experimental é essencial pois indica o esquema sob o qual estas hipóteses podem ser testadas (BANZATTO; KRONKA, 2006).

#### 2.1.1 Planejamento de experimentos

O planejamento experimental é de suma importância, independente da área em que se realiza o estudo, pois um planejamento mal feito pode levar o pesquisador a resultados e interpretações equivocadas, causando grandes transtornos. Por outro lado, um planejamento bem executado leva a resultados fiéis à realidade estudada e contribui significativamente para a montagem do experimento, sua condução e análise dos dados obtidos, entre outras vantagens.

No planejamento de experimentos, conhecimentos *a priori* podem acrescentar informações importantes e devem ser levados em consideração, como por exemplo, fatores que apresentam dificuldades na troca de níveis e de manejo, interferências externas conhecidas que podem ser controladas, custo de matéria prima, mão de obra etc.

Os experimentos variam de uma área de pesquisa para outra, porém, todos eles são regidos por princípios básicos que são necessários para que os resultados obtidos sejam válidos.

Os três princípios básicos da experimentação são: casualização, repetição e controle local, os quais foram sugeridos por Fisher (1925), para propiciarem resultados ou a obtenção de dados não tendenciosos. O uso de um ou mais deles vai determinar o esquema ou delineamento que será utilizado e são os pontos principais para o planejamento de experimentos.

O princípio da casualização consiste em atribuir aos tratamentos a mesma probabilidade de serem alocados às unidades experimentais; o princípio da repetição, em aplicar o mesmo tratamento a duas ou mais parcelas e o princípio do controle local em dividir um ambiente heterogêneo em subambientes homogêneos. A repetição proporciona a estimativa do erro experimental e a casualização a torna válida. O controle local isola uma fonte de variação conhecida, reduzindo o erro experimental.

Os dois primeiros princípios podem ser considerados obrigatórios em algumas áreas da ciência como, por exemplo, a agropecuária, e resultam no delineamento mais simples chamado de Delineamento Interiramente Casualizado. Um delineamento experimental é um plano utilizado na experimentação que define a forma como os tratamentos serão designados às parcelas, além de um amplo entendimento das análises a serem feitas quando todos os dados estiverem disponíveis (BANZATTO; KRONKA, 2006).

Quando o princípio do controle local também é utilizado, para controlar apenas uma fonte de variação, tem-se o chamado Delineamento em Blocos Casualizados, que “separa” a heterogeneidade presente nas unidades experimentais em blocos homogêneos. Existem outros delineamentos que vão ser caracterizados de acordo com o esquema de aleatorização das unidades experimentais, como o delineamento em quadrado latino, Lattice, experimentos fatoriais etc.

Os dados obtidos são, geralmente, submetidos à análise de variância, uma técnica desenvolvida por Ronald Aylmer Fisher (1890 – 1962) que consiste na decomposição do número de graus de liberdade e da variância total de um material heterogêneo em partes atribuídas a causas conhecidas e independentes (fatores controlados), e a uma porção residual de origem desconhecida e de natureza aleatória (fatores não controlados). É a técnica mais utilizada na estatística experimental e depende dos pressupostos de aditividade dos efeitos dos fatores, independência dos erros experimentais e que estes sejam, também, normalmente distribuídos com variância constante. Estes pressupostos e os princípios citados acima garantem que a análise de variância possa ser utilizada para análise de dados oriundos de experimentos.

Por outro lado, existem algumas situações na experimentação em que os experimentos não necessariamente seguem alguns ou todos os princípios e pressupostos mencionados, mas também são passíveis de análises válidas. São experimentos que possuem características específicas que inviabilizam a utilização de um ou outro princípio ou pressuposto. Dentre eles, estão os experimentos industriais em que, muitas vezes, a repetição e a casualização não são factíveis devido a limitações em sua execução.

### 2.1.2 Experimentos Industriais

Muitas vezes na indústria, seja ela química, farmacêutica, automobilística, de materiais etc., torna-se necessário obter informações sobre produtos e processos de forma empírica. Para tanto, emprega-se experimentos para decidir entre diferentes processos de manufatura, resolver problemas de fabricação, compreender a influência de determinados fatores etc. Isso se torna cada vez mais importante devido à intensificação da base tecnológica de produtos e aumento das exigências dos clientes, o que requer maior controle de qualidade durante todas as etapas do ciclo de vida do produto.

O planejamento experimental na indústria busca satisfazer, principalmente, maior precisão estatística possível na resposta e menor custo. Diante disso, torna-se uma técnica de extrema importância, fornecendo resultados mais confiáveis e parâmetros fundamentais em tempos de concorrência acirrada, economizando tempo e, conseqüentemente, dinheiro.

Segundo Coleman e Montgomery (1993), o planejamento de experimentos na indústria, assim como em outras áreas, deve seguir as seguintes etapas: caracterização do problema ou situação de interesse, escolha dos fatores de influência e níveis, seleção das variáveis resposta de interesse, determinação de um modelo de planejamento, condução do experimento, análise dos dados, conclusões e recomendações.

Os experimentos podem ser utilizados tanto no desenvolvimento de processos de produção quanto na solução de problemas desses processos, melhorando seu desempenho e tornando-os robustos às fontes externas de variabilidade. O uso das técnicas de planejamento experimental no desenvolvimento de um processo industrial pode resultar em: maior produção, redução da variabilidade, tempo de desenvolvimento reduzido e conseqüentemente, custos reduzidos.

Os experimentos industriais possuem algumas características particulares que devem ser levadas em consideração durante seu planejamento e execução. Bortolini (2012) apresenta algumas de suas limitações e, entre elas, podemos citar as seguintes: dificuldades de interromper o processo produtivo, complicações ou impossibilidade de modificar constantemente características do processo, obstáculos para manter constantes algumas características do processo e inviabilidade em realizar repetições.

Diante de tais limitações, fica evidente a importância de se buscar delineamentos que minimizam o número de mudanças nos níveis dos fatores e proporcionem resultados válidos mesmo sem uso de repetições.

Uma maneira utilizada para tentar contornar os problemas citados é o uso da estratégia de experimentação um-fator-por-vez, que consiste em modificar os níveis de um fator específico a cada teste, enquanto os demais permanecem fixos (MONTGOMERY, 2017; WU; HAMADA, 2015). O problema do uso desta técnica é que ela não estima satisfatoriamente os efeitos fatoriais, principalmente das interações (SUDARSANAM; FREY, 2011; MONTGOMERY, 2017).

Montgomery (2017) indica o planejamento de experimentos fatoriais alternativamente ao uso da estratégia um-fator-por-vez. Segundo Wu e Hamada (2015) a melhor maneira de determinar a influência de dois ou mais fatores sobre a variável resposta é a utilização do experimento fatorial devido aos seguintes aspectos: requer menos recursos (tempo, material), fornece estimativas dos efeitos mais precisas, estima os efeitos das interações sistematicamente e fornece informações para uma região experimental mais ampla, pois cada efeito fatorial é calculado sobre todas as combinações possíveis dos efeitos dos outros fatores.

Um tipo de planejamento fatorial muito útil no desenvolvimento e melhoria de processos é o fatorial  $2^k$ , que consiste em um planejamento com  $k$  fatores ( $k \in \mathbb{N}$ ), cada um com dois níveis. Esses fatores podem assumir tanto valores quantitativos (pressão, temperatura etc) quanto valores qualitativos (tipo de máquina, operador etc) (MONTGOMERY, 2017).

### 2.1.3 Experimentos Fatoriais e Fatoriais $2^k$

De acordo com Cirillo (2015), pesquisadores de variadas áreas de pesquisa, principalmente da área industrial, se deparam com situações em que as variáveis em estudo são obtidas em função de dois ou mais fatores. Em geral, os experimentos fatoriais são mais eficientes nesses casos, já que o interesse é estudar o efeito de cada um dos fatores principais e das possíveis interações entre eles.

Nos experimentos fatoriais, os tratamentos são dados pelas combinações dos níveis dos fatores e isso faz com que o número de tratamentos cresça exponencialmente na medida em que se aumenta o número de fatores.

Os experimentos fatoriais podem ser completos ou fracionários. Os fatoriais completos incluem todas as possíveis combinações dos níveis dos fatores e os fatoriais fracionários desprezam interações de ordem mais elevada desde que o pesquisador assuma que essas interações não são relevantes para os resultados do experimento. Observa-se, portanto, que os

efeitos principais e as interações de baixa ordem são fundamentais e, dessa forma, devem ser obtidos mesmo que se realize apenas uma fração do experimento (MONTGOMERY, 2017).

Em alguns experimentos fatoriais, pode-se observar que a diferença na resposta provocada pelos níveis de um fator combinado com outro não é a mesma para todas as combinações e isto é um indício de que existe interação entre os fatores. Quando isto ocorre, deve-se realizar o desdobramento de um fator dentro de cada nível do outro, observando a significância para cada desdobramento. O delineamento fatorial apresenta várias vantagens e a principal delas é o fato de permitir que os efeitos de um fator sejam avaliados em vários níveis de outros fatores, produzindo conclusões válidas sobre uma gama de condições experimentais (FISHER, 1966).

Um tipo de planejamento fatorial especial que será destacado nesta pesquisa é o fatorial  $2^k$ , que consiste em um planejamento com  $k$  fatores ( $k \in \mathbb{N}$ ), cada um com dois níveis.

Em um fatorial  $2^k$ , os níveis de cada fator são chamados de “baixo” e “alto”, e são representados por “-“ e “+”, ou “0” e “1”, ou “-1” e “+1” (MONTGOMERY, 2017). A notação utilizada nessa pesquisa foi a última citada.

Na Tabela 1 é representado, como exemplo, um fatorial  $2^2$  em que se tem 2 fatores, A e B, com dois níveis cada. É importante salientar que cada linha representa um tratamento.

Tabela 1 – Representação dos níveis dos fatores em um fatorial  $2^2$ .

A	B	A	B
baixo	baixo	-1	-1
alto	baixo	1	-1
baixo	alto	-1	1
alto	alto	1	1

Segundo Box, Hunter e Hunter (2005), entre as vantagens da utilização dos planejamentos fatoriais  $2^k$  está a capacidade de proporcionar uma análise simplificada e, além disso, são base para outros planejamentos úteis, como os fatoriais fracionários. Os fatoriais fracionários são muito úteis em algumas situações peculiares aos experimentos industriais como tempo e recursos escassos, e número elevado de fatores.

Os experimentos fatoriais  $2^k$  podem ainda ser utilizados em conjunto com os critérios de otimalidade, garantindo maior eficiência na condução e análise.

## 2.2 Otimalidade

Segundo Ryan (2007), a formulação de um delineamento experimental pode ser vista como uma estratégia que viabiliza a realização de inferências estatísticas no sentido de determinar quais efeitos poderão ser confundidos ou estimados. Nesse contexto, surge a demanda de utilizar métodos que proporcionem a otimização de delineamentos e que atendam à maximização ou minimização de algum critério estatístico de interesse.

Para introduzir as ideias básicas de otimização de um delineamento, utiliza-se inicialmente o contexto da teoria de modelos lineares, onde a componente sistemática é descrita como a soma de funções das variáveis independentes e seus parâmetros associados (CHARNET et al., 2008).

Desse modo, considera-se um conjunto de  $m$  covariáveis, denotando-as pelo vetor  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m)$ , em que  $\{x_i \in \mathbb{R}; i = 1, \dots, m\}$ . Suponha-se ainda, que o valor esperado,  $\eta(\mathbf{x})$ , da resposta associada a uma unidade experimental qualquer  $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ , em que  $\mathcal{X}$  é uma região experimental pré-determinada, é uma combinação linear das funções conhecidas de  $\mathbf{x}$ , ou seja,

$$\eta(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x}) = \beta_1 f_1(\mathbf{x}) + \beta_2 f_2(\mathbf{x}) + \dots + \beta_p f_p(\mathbf{x}), \quad (1)$$

em que  $\boldsymbol{\beta}' = (\beta_1 \beta_2 \dots \beta_p)$  é um vetor de parâmetros desconhecidos, tal que  $\boldsymbol{\beta} \in \Omega$ , o espaço paramétrico  $p$ -dimensional. Nota-se que  $f_1(\mathbf{x}) = 1$  representa o intercepto. Em termos matriciais, a parte sistemática do modelo (1) é representada por

$$\eta(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})' \boldsymbol{\beta},$$

em que  $\mathbf{f}(\mathbf{x})' = (f_1(\mathbf{x}) \dots f_p(\mathbf{x}))$  e  $\boldsymbol{\beta}' = (\beta_1 \dots \beta_p)$ .

Adicionando a componente do erro aleatório, denotada por  $\epsilon_x$ , tal que  $\forall \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathcal{X}$ ,  $E(\epsilon_x) = 0$ ;  $cov(\epsilon_x, \epsilon_{x'}) = 0$ , se  $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$ ; e  $var(\epsilon_x) = \sigma^2$ , sendo  $\sigma^2 > 0$  desconhecida. Dessa forma o modelo linear geral fica escrito como

$$Y_x = \eta(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x}) + \epsilon_x, \quad (2)$$

em que  $\eta(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x})$  é a parte sistemática do modelo, enquanto  $\epsilon_x$  é o efeito aleatório. O conjunto de vetores  $\{\mathbf{x}_l; l = 1, \dots, N\}$  é constituído por uma escolha de  $N$  unidades experimentais, nas quais  $N$  respostas serão observadas. Esse conjunto pode ser representado por

$$\xi_N = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_k \\ w_1 & w_2 & \cdots & w_k \end{pmatrix}, \quad (3)$$

de forma que  $w_l = r_l/N$  é o peso atribuído *a priori* pelo pesquisador em relação à relevância de determinado ponto experimental,  $\sum_{l=1}^k w_l = 1$  e  $r_l$  é o número de repetições das unidades experimentais  $\{\mathbf{x}_l; l = 1, \dots, k\}$ , com  $1 \leq k \leq N$  (ATKINSON; DONEV; TOBIAS, 2007).

É importante notar que em (3),  $\xi_N$  é referenciado como o delineamento do experimento, as unidades experimentais  $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k\}$  são os pontos de suporte do experimento, e os números reais  $\{w_1, w_2, \dots, w_k\}$  são os pesos associados a cada ponto. Dessa forma, dados  $N$  pontos, o delineamento ótimo que atenda a algum critério, é formado pelos pontos  $\mathbf{x}'_l$ s e  $r'_l$ s que otimizam alguma propriedade estatística de interesse sobre os estimadores dos parâmetros do modelo considerado.

Na teoria de modelos lineares, o estimador de mínimos quadrados do vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$ , baseado no experimento  $\xi_N$  e no modelo representado por  $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$ , é obtido através de

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{y}, \quad (4)$$

em que

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}(\xi_N) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}_1) & f_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & f_p(\mathbf{x}_1) \\ f_1(\mathbf{x}_2) & f_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & f_p(\mathbf{x}_2) \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ f_1(\mathbf{x}_k) & f_2(\mathbf{x}_k) & \cdots & f_p(\mathbf{x}_k) \end{pmatrix},$$

$\mathbf{W} = \mathbf{V}^{-1} = N \text{diag}(w_1, w_2, \dots, w_k)^{-1}$ , e  $(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})$  é a matriz experimental e é não singular.

Os resultados da esperança e variância de  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  dados por

$$E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{\beta}, \quad (5)$$

$$\text{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \Sigma_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} \hat{\sigma}^2 (\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1} \quad (6)$$

e o Teorema de Gauss-Markov garantem que o estimador apresentado em (4) seja não-viesado e de variância mínima, mais comumente conhecido como BLUE (*Best Linear Unbiased Estimator*).

Ao observar a expressão da covariância apresentada em (6), pode-se notar que  $\Sigma_{\hat{\boldsymbol{\beta}}}$  exibe uma dependência no experimento  $\xi_N$ . Neste sentido, como é do interesse usar estimadores mais precisos para o vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$ , é importante atentar-se à escolha do



experimento  $\xi_N$ . Ponce de Leon (1993) cita um exemplo da importância dessa escolha quando comenta que para obter maior precisão nos estimadores de  $\boldsymbol{\beta}$  é viável que os elementos da diagonal da matriz  $\Sigma_{\hat{\boldsymbol{\beta}}}$ , assim como os elementos fora da diagonal, fossem próximos de zero. No caso dos elementos fora da diagonal, que representam as covariâncias dos estimadores, é interessante que sejam tão próximos de zero quanto possível, pois assim os parâmetros seriam não-correlacionados.

Pela expressão (6), a matriz de covariâncias de  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ ,  $\Sigma_{\hat{\boldsymbol{\beta}}}$ , exibe uma dependência no experimento  $\xi_N$  e é baseada nessa dependência que a teoria de planejamento de experimentos ótimos foi desenvolvida.

Fundamentado nessa dependência citada nos parágrafos anteriores, o Teorema de Cramer-Rao estabelece um importante resultado sobre a variância de estimadores.

**Teorema 1.** Quando as condições de regularidade estão satisfeitas, a covariância de quaisquer estimadores não viesados  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  e  $\hat{\tau}$  dos parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$  e  $\tau$  satisfaz a desigualdade

$$\text{cov}[\hat{\boldsymbol{\beta}}; \hat{\tau}] \geq \frac{1}{N J(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\beta}, \tau)},$$

em que  $J(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\beta}, \tau)$  é a Matriz de Informação de Fisher que é dada por

$$\begin{pmatrix} E \left[ \frac{-\partial^2 \log\{p_Y(y|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\beta}, \tau)\}}{\partial \beta_j \partial \beta_t} \right] & E \left[ \frac{-\partial^2 \log\{p_Y(y|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\beta}, \tau)\}}{\partial \beta_j \partial \tau_r} \right] \\ E \left[ \frac{-\partial^2 \log\{p_Y(y|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\beta}, \tau)\}}{\partial \tau_r \partial \beta_t} \right] & E \left[ \frac{-\partial^2 \log\{p_Y(y|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\beta}, \tau)\}}{\partial \tau_r \partial \tau_s} \right] \end{pmatrix} \quad (7)$$

$p_Y(y|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\beta}, \tau)$  é uma família de distribuições de probabilidades,  $\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$  é uma unidade experimental,  $\boldsymbol{\beta} \in \Omega$  é o vetor de parâmetros de interesse,  $\tau \in Y$  é o vetor de parâmetros de ruído.  $\Omega$  e  $Y$  são os espaços paramétricos de  $\boldsymbol{\beta}$  e  $\tau$  respectivamente e  $j, t = 1, \dots, p$  e  $r, s = 1, \dots, q$ .

O Teorema 1 afirma que a inversa da Matriz de Informação de Fisher estabelece um limite inferior importante para a matriz de covariâncias do estimador não viesado de um parâmetro.

Neste sentido, Ponde de Leon (1993) comenta que se o pesquisador tiver controle sobre os elementos desta matriz de Informação, experimentos podem ser escolhidos com o objetivo de minimizar tal limite inferior, ou seja, estimar os parâmetros do modelo com a

maior precisão possível e conseqüente “otimização” do experimento. O autor introduz a ideia para um experimento  $\xi_N$  como apresentado anteriormente em (3), fazendo a matriz de informação de Fisher ser denotada por  $L(\xi_N|\boldsymbol{\beta}, \tau)$  e, considerando a hipótese de independência das respostas, é determinada pela soma das matrizes simples correspondentes à cada unidade experimental, isto é

$$L(\xi_N|\boldsymbol{\beta}, \tau) = \sum_{l=1}^N J(\mathbf{x}_l|\boldsymbol{\beta}, \tau) = N \sum_{l=1}^k w_l J(\mathbf{x}_l|\boldsymbol{\beta}, \tau).$$

Usando como referência (7), pode-se reescrever a matriz de informação de Fisher como

$$L(\xi_N|\boldsymbol{\beta}, \tau) = \begin{pmatrix} L_{\beta\beta}(\xi_N) & L_{\beta\tau}(\xi_N) \\ L_{\tau\beta}(\xi_N) & L_{\tau\tau}(\xi_N) \end{pmatrix}.$$

Considerando o Teorema 1 apresentado anteriormente, a inversa da matriz  $L(\xi_N|\boldsymbol{\beta}, \tau)$  estabelece um limite inferior pra a matriz de covariâncias de  $(\boldsymbol{\beta}, \tau)$  e restringindo o interesse do pesquisador apenas ao vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$ , por exemplo, a submatriz  $p \times p$ , que corresponde às  $p$  primeiras linhas e colunas de  $L^{-1}(\xi_N|\boldsymbol{\beta}, \tau)$ , estabelece um limite inferior para a matriz de covariâncias de  $\boldsymbol{\beta}$ .

Para modelos de regressão linear múltipla, por exemplo,  $L(\xi_N|\boldsymbol{\beta}, \tau) = \sigma^2(X'WX)^{-1}$  e como o valor da variância dos erros,  $\sigma^2$ , não pode ser ‘controlada’ pelo pesquisador, controla-se os níveis das variáveis experimentais com o objetivo de tornar os elementos da matriz  $X'WX$  ‘ótimos’ em algum sentido (PONCE DE LEON, 1993).

Os experimentos ótimos geralmente são separados em dois tipos: experimentos exatos ou discretos e contínuos ou aproximados.

Os experimentos exatos são caracterizados por uma distribuição de probabilidades discreta, uma vez que o número de valores da distribuição associada é igual a  $k$ , que está limitado por um número finito de respostas a ser observado  $N$ .

Atkinson, Donev e Tobias (2007) definem  $\mathcal{D}$  como a classe de todas as possíveis distribuições discretas de probabilidade que podem ser associadas aos pontos experimentais (3), isto é, para as quais  $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k; \mathbf{x}_l \in \mathcal{X}, l = 1, \dots, k\}$  representa o conjunto de valores possíveis da variável aleatória e  $\{w_1, w_2, \dots, w_k; 0 < w_l < 1, l = 1, \dots, k\}$  é o conjunto de probabilidades correspondentes. Qualquer experimento que pertence à classe  $\mathcal{D}$  é denominado

experimento exato, e ainda, se o critério de otimalidade for definido sobre o conjunto  $\mathcal{D}$ , o experimento resultante é denominado ótimo exato.

Os experimentos aproximados ou contínuos consistem em estender a classe de distribuições de probabilidades  $\mathcal{D}$  para uma classe de distribuições mais geral, denotada por  $\mathcal{C}$ , definida nos Borelianos (conjunto de Borel, isto é, um elemento da  $\sigma$ -álgebra de Borel na região  $\mathcal{X}$ , que é definida como a menor  $\sigma$ -álgebra que contém todas as sub-regiões da região experimental) da região experimental  $\mathcal{X}$  (Ponce de Leon, 1993).

Ao estender a classe de experimentos de  $\mathcal{D}$  para  $\mathcal{C}$ , novos conceitos devem ser introduzidos. Desta forma, dado  $\xi$  um experimento da classe  $\mathcal{C}$ , a matriz análoga à matriz experimental  $M(\xi_N) = \frac{1}{N} X'WX$  passa a ser denotada por  $M(\xi)$ , que tem o  $(j, t)$ -ésimo elemento dado por  $\int_{\mathcal{X}} f_j(x)f_t(x)\xi(dx)$  e assim, é dada por

$$\begin{bmatrix} \int_{\mathcal{X}} [f_1(x)]^2 \xi(dx) & \int_{\mathcal{X}} f_1(x)f_2(x)\xi(dx) & \cdots & \int_{\mathcal{X}} f_1(x)f_p(x)\xi(dx) \\ \int_{\mathcal{X}} f_2(x)f_1(x)\xi(dx) & \int_{\mathcal{X}} [f_2(x)]^2 \xi(dx) & \cdots & \int_{\mathcal{X}} f_2(x)f_p(x)\xi(dx) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_{\mathcal{X}} f_p(x)f_1(x)\xi(dx) & \int_{\mathcal{X}} f_p(x)f_2(x)\xi(dx) & \cdots & \int_{\mathcal{X}} [f_p(x)]^2 \xi(dx) \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Por construção, a matriz (8) é simétrica e sob a teoria de experimentos exatos, se torna a matriz experimental original  $M(\xi_N)$ . Matematicamente, isto ocorre quando o experimento  $\xi$  corresponde a uma distribuição discreta de probabilidades e, portanto, a integral  $\int_{\mathcal{X}} f_j(x)f_t(x)\xi(dx)$  que é uma soma infinitesimal, se torna uma soma discreta (ATKINSON; DONEV; TOBIAS, 2007).

Na teoria de experimentos ótimos todos os critérios de otimalidade são definidos em função da matriz experimental  $M(\xi)$ . A cada critério de otimalidade está associada uma função real específica  $\phi\{M(\xi)\}$ , denominada função critério. Uma característica importante da maior parte dos critérios de otimalidade é que, se considerarmos que o problema de otimização é um problema de maximização, a função  $\phi\{M(\xi)\}$  pode ser escrita como uma função côncava de  $\int_{\mathcal{X}} f_j(x)f_t(x)\xi(dx)$  (Ponce de Leon, 1993).

Para melhor compreensão, suponha que a função critério  $\phi$  (que associa números reais aos elementos do conjunto  $\mathcal{M}$  de matrizes) é tal que  $\phi: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ , sendo  $\mathcal{M} = \{M(\xi): \xi \in \mathcal{C}\}$ , ou seja, o conjunto  $\mathcal{M}$  de matrizes está definido a partir da classe de experimentos  $\mathcal{C}$ .

Além disso, considera-se por hipótese que a função  $\phi$  é côncava em  $\mathcal{M}$ , isto é, para  $0 \leq \lambda \leq 1$  e  $M_1, M_2 \in \mathcal{M}$ , então

$$\phi\{\lambda M_1 + (1 - \lambda)M_2\} \geq \lambda\phi\{M_1\} + (1 - \lambda)\phi\{M_2\} \quad (9)$$

Se para  $0 < \lambda < 1$  e ambos  $\phi\{M_1\}$  e  $\phi\{M_2\}$  finitos, a desigualdade (9) é estrita, então se diz que a função  $\phi$  é estritamente côncava. Neste caso, a solução do problema  $\max_{\{M \in \mathcal{M}\}} \phi\{M\}$  é única.

Vale a pena ressaltar algumas propriedades do conjunto  $\mathcal{M}$  de matrizes experimentais, referenciadas por Ponce de Leon (1993):

1. Todo elemento  $M \in \mathcal{M}$  é uma matriz não-negativa definida;
2.  $\mathcal{M}$  é um conjunto convexo;
3. Para todo  $M \in \mathcal{M}$  existe uma combinação linear convexa  $\sum_{i=1}^I \lambda_i \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i'$ , tal que  $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}$ ,  $i = 1, \dots, I$ ; e  $I \leq \frac{1}{2}p(p+1) + 1$ , se  $M$  está no interior do conjunto  $\mathcal{M}$  ou  $I \leq \frac{1}{2}p(p+1)$ , se  $M$  está na fronteira de  $\mathcal{M}$ .

A terceira propriedade garante a existência de um experimento discreto associado a cada matriz experimental. Portanto, o experimento que soluciona o problema de maximização, no contexto da teoria de experimentos aproximados, terá um número finito de pontos de suporte segundo Ponce de Leon (1993).

Diante do exposto, observa-se que a maioria dos critérios de otimalidade são enunciados em forma de um problema de maximização. Por outro lado, qualquer critério de minimização pode ser reescrito como um de maximização e vice-versa; por exemplo, no critério D-ótimo, maximizar o determinante da matriz de informação corresponde ao mesmo que minimizar o determinante de sua inversa (RADY; EL-MONSEF; SEYAM, 2009).

### 2.2.1 Critérios de otimalidade

Os delineamentos ótimos têm sido utilizados em muitas aplicações e são úteis, principalmente, quando existem regiões restritas de operabilidade como ocorre na indústria em geral. Muitos critérios de otimalidade estão especificados na literatura e são usualmente conhecidos como “*Alphabetic Optimality*” (RADY; EL-MONSEF; SEYAM, 2009).

Em geral, esses critérios concentram suas características ótimas na matriz do delineamento  $M(\xi_N) = \frac{1}{N}X'WX$ , onde ocorre o ajuste de mínimos quadrados de uma dada função resposta (RYAN, 2007).

Os critérios de otimalidade para delineamentos, denotados genericamente por  $\phi\{M(\xi)\}$ , são funções da matriz de informação ou de sua inversa e influenciam as medidas de precisão das estimativas dos parâmetros do modelo assumido.

Por meio da teoria de delineamentos ótimos torna-se possível planejar experimentos que proporcionam máxima informação a respeito de importantes aspectos que se deseja investigar. Dessa forma, seu principal objetivo é garantir que um experimento, especificado *a priori*, seja eficiente (ATKINSON; DONEV; TOBIAS, 2007).

Pode-se citar alguns critérios como A-ótimo, D-ótimo, E-ótimo, G-ótimo e V-ótimo, entre outros (RADY; EL-MONSEF; SEYAM, 2009). Nesse trabalho são abordados os critérios A-ótimo e D-ótimo, bastante utilizados na literatura.

### 2.2.1.1 A-ótimo

Segundo Atkinson, Donev e Tobias (2007), o delineamento A-ótimo é recomendado quando o interesse está concentrado nas variâncias dos estimadores de mínimos quadrados dos parâmetros do modelo, não importando muito as interferências globais a respeito deles, ou seja, indiferente quanto aos valores das covariâncias entre os estimadores. Assim, controlar os valores numéricos dos elementos fora da diagonal principal da matriz  $\{M(\xi)\}^{-1}$  fica em segundo plano. Na prática, um delineamento A-ótimo busca minimizar a variância das estimativas dos efeitos dos fatores de um experimento.

Dessa forma, esse critério visa minimizar o traço da matriz de variâncias e covariâncias, ou seja, minimizar a soma das variâncias, que é equivalente a

$$tr\{M^{-1}(\xi^*)\} = \min tr\{M^{-1}(\xi)\} \quad \forall \xi \in \mathcal{C},$$

em que  $\xi^*$  é o delineamento A-ótimo e  $\mathcal{C}$  é a classe de distribuições de experimentos aproximados. Como forma equivalente, tem-se que um delineamento  $\xi^*$  é dito A-ótimo se

$$\sum_{i=1}^p \left\{ \frac{1}{\lambda_i(\xi^*)} \right\} = \min \left\{ \sum_{i=1}^p \frac{1}{\lambda_i(\xi)} \right\} \quad \forall \xi \in \mathcal{C}, \quad (10)$$

em que  $\lambda_i$  com  $i = 1, \dots, p$  são os autovalores da matriz experimental  $M(\xi)$ .

Na função critério (10), nota-se facilmente que a soma dos elementos da diagonal de  $\{M(\xi)\}^{-1}$  é expressa de forma conveniente como a soma dos autovalores de  $\{M(\xi)\}^{-1}$ .

Segundo Rady, EL-Monsef e Seyam (2009), a eficiência do delineamento A-ótimo é definida por:

$$A(\xi) = \frac{\text{tr}[M^{-1}(\xi^*)]}{\text{tr}[M^{-1}(\xi)]}, \quad (11)$$

em que o numerador do quociente em (11) corresponde ao traço da matriz A-ótima obtida e o denominador corresponde ao traço da matriz inicial, a partir da qual a matriz A-ótima foi obtida. Da forma como foi definida, um valor de eficiência igual a 1 significa que o valor do critério para a matriz obtida é igual ao valor do critério para a matriz inicial; por outro lado, um valor de eficiência menor que 1 significa que o valor do critério para a matriz obtida é menor que o valor para a matriz inicial, ou seja, a matriz obtida é mais eficiente em relação ao critério A-ótimo. É importante ressaltar que quanto mais próximo de 1 o valor da eficiência, mais próximas são as matrizes em relação ao critério.

### 2.2.1.2 D-ótimo

O critério D-ótimo corresponde à minimização do determinante da matriz de variâncias e covariâncias dos parâmetros ou, em outros termos, minimiza o volume do elipsóide de confiança dos  $p$  parâmetros no vetor  $\beta$ . Esse elipsóide de confiança é uma versão  $p$ -dimensional do intervalo de confiança para um efeito. De acordo com Goos e Jones (2011) o critério D-ótimo garante o menor intervalo de confiança possível para os parâmetros do modelo. O critério é enunciado por

$$|M^{-1}(\xi^*)| = \min |M^{-1}(\xi)| \quad \forall \xi \in \mathcal{C},$$

em que  $\xi^*$  é o delineamento D-ótimo e  $\mathcal{C}$  é a classe de distribuições de experimentos aproximados. Dado que o determinante da matriz de variâncias e covariâncias é inversamente proporcional ao determinante da matriz de informação, uma forma alternativa para o critério D é

$$|M(\xi^*)| = \max |M(\xi)| \quad \forall \xi \in \mathcal{C}.$$

Dessa maneira, pode-se evitar o processo de inversão de matrizes, que pode ser computacionalmente complexo. Em geral, maximiza-se

$$\phi\{M(\xi)\} = \ln |M(\xi)|,$$

ou seja,

$$\ln|M(\xi^*)| = \max\{\ln|M(\xi)|\} \forall \xi \in \mathcal{C}.$$

A função  $\phi$  de D-otimalidade pode ainda ser definida de forma equivalente; denotando os autovalores da matriz experimental  $M(\xi)$  por  $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ , tem-se que

$$\ln|M(\xi)| = \ln \prod_{i=1}^p \lambda_i = \sum_{i=1}^p \ln(\lambda_i).$$

Logo, por considerar os autovalores, essa maneira de escrever a função torna-se atrativa no sentido de facilitar a comparação com outras funções critério. Observa-se, por exemplo, que o que distingue os critérios D e A é o fato de que no primeiro, a função critério é igual ao produto dos autovalores da matriz  $\{M(\xi)\}^{-1}$  ou de seu logaritmo natural, enquanto que no segundo, a função critério é dada pela soma dos autovalores da matriz  $\{M(\xi)\}^{-1}$ .

Segundo Rady, EL-Monsef e Seyam (2009), a eficiência do delineamento D-ótimo é definida por:

$$D(\xi) = \frac{\{|M(\xi)|\}^{\frac{1}{p}}}{\{|M(\xi^*)|\}}, \quad (12)$$

em que o numerador do quociente em (12) é dado pelo determinante da matriz inicial, o denominador é dado pelo determinante da matriz D-ótima obtida e  $p$  corresponde ao número de colunas da matriz  $M$ . De forma similar à interpretação da eficiência relativa ao critério A-ótimo, um valor de eficiência igual a 1 significa que o valor do critério D-ótimo para a matriz obtida é igual ao valor do critério para a matriz inicial; por outro lado, um valor de eficiência menor que 1 significa que o valor do critério para a matriz obtida é maior que o valor para a matriz inicial, ou seja, a matriz obtida é mais eficiente em relação ao critério D-ótimo. Quanto mais próximo de 1 o valor da eficiência, mais próximas são as matrizes em relação ao critério.

Ainda em relação à eficiência, Khinkis et al. (2003) afirmam que a eficiência de um delineamento D-ótimo pode ser interpretada como o fator pelo qual um dado delineamento deve ser replicado para obter precisão das estimativas dos parâmetros igual à do delineamento D-ótimo obtido. Por exemplo, se é obtido um delineamento D-ótimo com eficiência igual a 0,5, significa que o delineamento inicial, a partir do qual o delineamento D-ótimo foi obtido, precisa ser replicado 2 vezes para alcançar a mesma precisão do D-ótimo.

## 2.3 Algoritmos de busca por delineamentos ótimos

A busca por delineamentos ótimos, geralmente, é feita computacionalmente por meio de algoritmos de busca que podem ser dos mais variados tipos. Nessa pesquisa, o destaque foi dado a dois algoritmos utilizados para obtenção das matrizes de delineamentos ótimas: o algoritmo *exchange* e o *simulated annealing*.

### 2.3.1 *Exchange*

Devido ao avanço computacional nos últimos anos, o uso de delineamentos ótimos tem crescido substancialmente, porém o tamanho dos delineamentos que podem ser otimizados pode ser limitado já que à medida que o número de fatores aumenta, a capacidade computacional requerida é proporcionalmente aumentada. De acordo com Meyer e Nachtsheim (1995) já em 1995, todos os *softwares* disponíveis no mercado usavam algoritmos *exchange*.

Apesar de haver muitos tipos de algoritmos *exchange*, como por exemplo o algoritmo de Fedorov elaborado por Fedorov (1972), o algoritmo de Fedorov modificado de Cook e Nachtsheim (1980) o *k-exchange* proposto por Johnson e Nachtsheim (1983) e o *kl-exchange* de Atkinson e Donev (1989), todos eles compartilham as mesmas operações básicas, quais sejam: troca (*exchange*) de linhas do delineamento atual por outras de uma lista de possíveis candidatas e, aquelas trocas que melhoram a “performance” do delineamento, de acordo com alguma função objetivo (critério), são aceitas; caso contrário são rejeitadas.

### 2.3.2 *Simulated Annealing*

Grande parte dos problemas científicos pode ser formulada como problemas de minimização ou maximização. Por exemplo, considere um experimento na área industrial em que o objetivo é avaliar o efeito de uma série de fatores que influenciam o desempenho de determinado processo. Esses fatores podem assumir um número limitado ou ilimitado de valores e, geralmente, estão sujeitos a restrições. É de interesse do pesquisador encontrar a melhor combinação desses fatores, ou seja, a combinação que proporcione a otimização do processo.



*Simulated Annealing* ou Recozimento Simulado é um método constituído por etapas cognitivas para a solução de problemas de otimização e se fundamenta em uma analogia com a termodinâmica (KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983).

O recozimento é o processo de aquecimento de um sólido até seu ponto de fusão, seguido de um resfriamento gradual e lento até o seu enrijecimento. Nesse processo, o resfriamento lento é essencial para manter o equilíbrio térmico, de forma que os átomos se reorganizem em uma estrutura uniforme com energia mínima. Como resultado prático tem-se a redução dos defeitos do material, isso se dá pelo fato de que os átomos desse material ganham energia para se movimentar livremente e, ao resfriar de forma controlada, se organizam em uma configuração com menor energia interna (BROOKS; MORGAN, 1995).

De forma similar, o algoritmo *Simulated Annealing* substitui uma solução inicial qualquer por uma solução próxima, ou seja, na vizinhança do espaço de soluções. Tal solução é escolhida de acordo com uma função denominada função objetivo e com uma variável  $T$ , em analogia com temperatura. O valor de  $T$ , que inicialmente é escolhido de forma que seja elevado, diminui à medida que o algoritmo progride e, dessa forma, o algoritmo converge para uma solução ótima global.

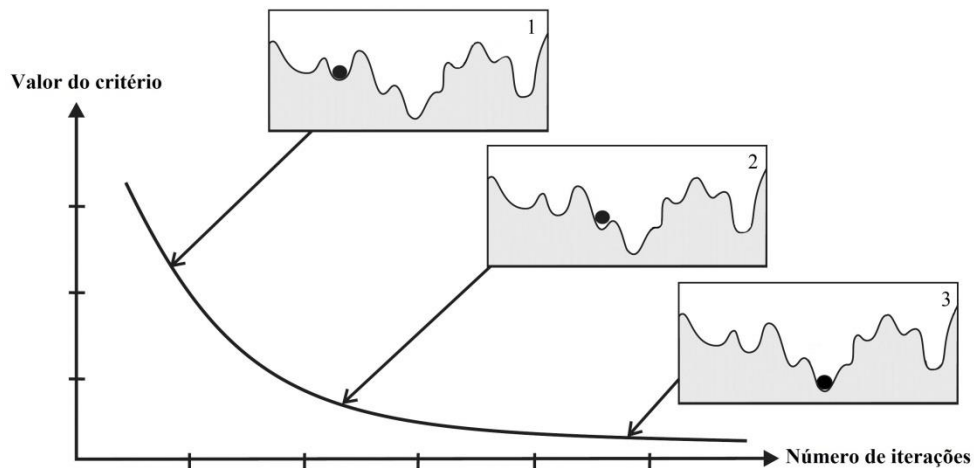
O algoritmo *Simulated Annealing* pode ser visto como uma técnica de otimização geral para resolver problemas de otimização combinatória e é baseado em técnicas de aleatorização. Incorpora aspectos relacionados a algoritmos de melhora iterativa (JOHNSON et al., 1989).

Um algoritmo de melhora iterativa pressupõe a definição de configurações, função custo e mecanismo de geração, e é uma simples receita para gerar uma “transição” a partir de uma configuração para outra com menor perturbação. O mecanismo de geração define a vizinhança  $R_i$  para cada configuração  $i$ , que consiste em todas as configurações que podem ser alcançadas a partir de  $i$  em uma transição.

A Figura 1, adaptada de Ledesma, Ruiz e Garcia (2012), mostra como funciona a convergência do algoritmo. A situação inicial é a seguinte: suponha uma paisagem 2D, com vales e colinas, conforme mostrado na Figura 1 e suponha também que se deseja encontrar o vale mais profundo dessa paisagem. A bolinha no quadro 1 representa a configuração inicial, ou seja, o valor do critério ótimo de interesse para a matriz de delineamento de entrada, e o quadro representa uma população de delineamentos pré-definida. A partir da matriz de delineamento inicial, uma sequência de iterações é gerada, sendo que cada iteração consiste em uma possível transição a partir da matriz de delineamento atual para uma matriz selecionada na vizinhança da atual. Se essa matriz vizinha tem valor do critério mais baixo, a

matriz atual é trocada por essa vizinha, caso contrário, outra vizinha é selecionada e os valores do critério são comparados. O algoritmo termina a busca quando a matriz de delineamento obtida tem valor para o critério de interesse menor entre todas as vizinhas, ou seja, quando o mínimo global é encontrado.

Figura 1 – Esquema de convergência do algoritmo *simulated annealing*.



Fonte: Adaptada de Ledesma, Ruiz e Garcia (2012).

### 2.3.3 Aplicações do algoritmo *simulated annealing*

Essa seção destaca algumas das principais considerações e aplicações do algoritmo *simulated annealing* encontradas na literatura, principalmente no que diz respeito à experimentação.

Brooks e Morgan (1995) discutem duas diferentes implementações do algoritmo *simulated annealing* na otimização de funções e, além disso, apresentam uma variação híbrida do algoritmo combinado com técnicas tradicionais.

Elliott, Eccleston e Martin (1999) propuseram um algoritmo baseado no *simulated annealing* com o objetivo de fornecer delineamentos ótimos e quase ótimos para fatoriais simétricos, assimétricos e para uma variedade de estruturas de dependência.

Loranca e Avendaño (2012) apresentaram uma nova proposta para solucionar problemas de otimização territorial, que consiste basicamente na classificação de unidades geográficas sujeitas ao cumprimento de algum tipo de critério. Para solucionar tais problemas, os autores utilizaram delineamentos fatoriais em conjunto um algoritmo de particionamento com a adição do *simulated annealing* para escapar de soluções ótimas locais.

Yang, Mandal e Majundar (2016) estudaram delineamentos ótimos para fatoriais  $2^k$  com resposta binária e, para tal, propuseram um algoritmo chamado *lift one*. Porém, para comparar a eficiência do algoritmo utilizado, consideraram outros e entre eles o *simulated annealing* que apresentou redução da eficiência à medida que o número de fatores aumentava.

Ledesma, Ruiz e Garcia (2012) utilizaram o algoritmo *simulated annealing* no treinamento de Redes Neurais Artificiais (RNA) em um amplo conjunto de casos, entre eles, utilizaram o algoritmo para treinar uma RNA que deveria dirigir um carro em uma estrada simples. Quando o algoritmo atingiu seu valor final (mínimo) a RNA foi capaz de conduzir o carro com sucesso até o fim da estrada.

Observou-se que o algoritmo *simulated annealing* pode ser aplicado visando a solução de diversos problemas de otimização, seguindo sempre a ideia básica de se obter um mínimo global. Na maioria dos casos apresentados, o algoritmo ou adaptações do mesmo, obtiveram sucesso na solução dos problemas propostos, o que fornece precedentes para sua utilização.

#### **2.4 Nova Ordem de execução em delineamentos fatoriais $2^k$**

O planejamento de experimentos fatoriais pode encontrar algumas limitações em determinadas áreas como, por exemplo, dificuldades na troca dos níveis dos fatores quando se passa da execução de um tratamento para outro. Isso acontece com frequência em experimentos na indústria, que geralmente utilizam um número elevado de fatores e, dentre estes, fatores que apresentam dificuldades de manejo ou que requerem período de estabilização para obter condições adequadas de operação como, por exemplo, a troca de moldes e alteração de temperatura, respectivamente. Isso pode gerar impacto significativo no esforço e custos necessários para a execução do experimento, além de dificultar sua condução.

Uma maneira de contornar o problema citado é alocar os fatores com maior dificuldade de alteração dos níveis nas colunas da matriz do delineamento em que há um número menor de mudanças de uma linha para outra. Um exemplo disso é alocar tal fator na última coluna da matriz de delineamento na Ordem Padrão de execução, pois tal coluna apresenta apenas uma troca de nível durante a execução do experimento.

Autores como Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) afirmam que a execução de experimentos fatoriais na Ordem Padrão nem sempre neutraliza o efeito de fatores desconhecidos e/ou indesejáveis. Além disso, afirmam que qualquer fator que apresente um agrupamento de sinais correspondentes aos níveis, na ordem de execução do experimento, pode gerar estimativas equivocadas.

Por essas razões, têm sido amplamente procuradas ordens de execução que oferecem o número mínimo de mudanças nos níveis dos fatores e que ao mesmo tempo minimizem a influência de fatores desconhecidos e/ou indesejáveis.

Diante disso, Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) propuseram uma Nova Ordem (NO) determinada pela geração de novas sequências de execução dos pontos experimentais, que correspondem aos tratamentos em fatoriais  $2^k$ . Os autores mencionados utilizam dois algoritmos de pesquisa aleatória com restrições na obtenção das sequências. A ideia é gerar ordens aleatórias e manter aquelas que apresentam o número mínimo de mudanças na ordem de execução. Entretanto, é ressaltada uma limitação aos procedimentos, uma vez que as ordens que apresentam número mínimo de mudanças são extremamente escassas.

Diante dessa limitação, utilizam-se métodos de busca aleatória que determinam o número de ordens que fornecem o número mínimo de mudanças nos níveis. Dessa forma, pode-se realizar um procedimento que permita obter sequências com o número mínimo de mudanças, baseado numa geração sequencial de ordens, linha por linha. Fixa-se a primeira linha e, em seguida, para a escolha da linha sucessora atenta-se às restrições do algoritmo.

Para uma matriz de delineamento que apresente um número mínimo de mudanças, não se pode colocar qualquer outra linha como sucessora, pois isso deve ser feito de forma eficaz, a fim de garantir que exista somente uma mudança entre uma linha qualquer e sua sucessora.

Seguindo esse propósito, Dickinson (1974) propôs um algoritmo que permite encontrar todas as ordens que têm número mínimo de mudanças nos níveis dos fatores em fatoriais  $2^k$ . Adams, Cintas e Llabrés (2005) implementaram computacionalmente um procedimento baseado no algoritmo de Dickinson para alguns delineamentos, tornando possível a obtenção de resultados melhores em relação aos obtidos por meio de busca aleatória.

Nas Seções 2.4.1 e 2.4.2 encontram-se descritas, respectivamente, a busca aleatória com restrições e a busca exaustiva por ordens de execução usando o algoritmo de Dickinson.

#### **2.4.1 Busca aleatória com restrições**

Visando uma compreensão mais didática do algoritmo de busca aleatória com restrições, considera-se um fatorial  $2^3$ , cuja matriz do delineamento em Ordem Padrão (OP) é apresentada na Tabela 2, sendo este utilizado como base para obter uma nova sequência de execução dos tratamentos.

Tabela 2 – Delineamento  $2^3$  na Ordem Padrão.

Ordem Padrão	A	B	C
1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	1	1	-1
5	-1	-1	1
6	1	-1	1
7	-1	1	1
8	1	1	1

Assume-se aleatoriamente que a primeira linha da nova sequência a ser gerada seja dada pela linha 6, correspondendo a matriz do delineamento em Ordem Padrão:

$$1 \quad -1 \quad 1$$

Para que a matriz do delineamento apresente número mínimo de mudanças, não se pode colocar qualquer outra linha como sucessora. A fim de garantir apenas uma mudança entre a primeira e segunda linha, pode-se escolher apenas entre as linhas 2, 5 e 8 da matriz na Ordem Padrão. É importante observar que quando se refere a um número mínimo de mudanças da primeira para a segunda linha, escolhe-se a linha sucessora de forma que mude o sinal de apenas uma das colunas referentes aos fatores, como pode ser observado na Tabela 3.

Dessa forma, escolhe-se uma das possíveis linhas sucessoras aleatoriamente, por exemplo, a número 2, então se escolhe a próxima entre as possíveis sucessoras da linha 2, sendo que a 6 não pode mais ser escolhida, e assim por diante até que a matriz esteja completa ou até chegar a uma linha que não tenha outras sucessoras possíveis, pelo fato de todas terem sido usadas nas linhas anteriores. Neste caso, o processo deve ser reiniciado.

Tabela 3 – Possíveis sucessoras da linha 6.

Ordem de Execução	Ordem Padrão	Fatores		
		A	B	C
1	6	1	-1	1
Possibilidades para a segunda linha	2	1	-1	-1
	5	-1	-1	1
	8	1	1	1

Na Tabela 4 é apresentada uma das ordens obtidas utilizando-se esse procedimento.

Tabela 4 – Nova Ordem de execução obtida pelo método de busca.

Ordem de execução	Ordem Padrão	Fatores		
		A	B	C
1	6	1	-1	1
2	2	1	-1	-1
3	4	1	1	-1
4	3	-1	1	-1
5	1	-1	-1	-1
6	5	-1	-1	1
7	7	-1	1	1
8	8	1	1	1

#### 2.4.2 Busca exaustiva por ordens semente de execução usando o algoritmo de Dickinson

A característica mais notável do algoritmo de Dickinson (1974) é dada pela redução da ordem de busca em um grupo de estratégias a partir das quais todas as outras são determinadas. As ordens obtidas são chamadas “ordens semente”, pois, a partir delas, novas ordens podem ser obtidas com as mesmas características em relação ao número de mudanças. Tal resultado é alcançado pela permutação da ordem das linhas da matriz do delineamento e/ou multiplicação de algumas por -1. Com o propósito de obter somente ordens semente, é necessário que a busca seja conduzida utilizando as seguintes restrições:

1. A primeira linha deve ter somente sinais negativos, isto é, deve estar na Ordem Padrão. Isso assegura que uma Nova Ordem não pode ser obtida a partir de outra pela multiplicação de uma coluna por -1.

2. Uma determinada sequência deve ser dada pelas linhas que têm um sinal positivo. Especificamente, isso exige que os sinais positivos dessas linhas sejam movidos da esquerda para direita, por exemplo, em um fatorial  $2^5$  corresponde à Ordem Padrão da sequência 2, 3, 5, 9 e 17, conforme pode ser visto na Tabela 5. Isso assegura que as ordens que não são obtidas podem ser deduzidas a partir de outras pela permutação das colunas. Essas restrições exigem que as primeiras duas linhas correspondam à Ordem Padrão.

3. As possíveis linhas sucessoras são procuradas de maneira similar, seguindo o roteiro da busca aleatória com restrições, adicionando a condição explicada no ponto anterior.

Tabela 5 – Ordem requerida pelo algoritmo de Dickinson\*.

Ordem Padrão	Fatores				
	A	B	C	D	E
1	-1	-1	-1	-1	-1
2	<b>1</b>	-1	-1	-1	-1
3	-1	<b>1</b>	-1	-1	-1
⋮					
5	-1	-1	<b>1</b>	-1	-1
⋮					
9	-1	-1	-1	<b>1</b>	-1
⋮					
17	-1	-1	-1	-1	<b>1</b>
⋮					

\* As caselas marcadas em cinza correspondem aos sinais positivos movidos da esquerda para direita como requerido pelo algoritmo

4. Uma vez que a primeira ordem é obtida, a busca por novas ordens inicia-se pela exploração das possíveis linhas sucessoras que satisfazem as condições impostas, mas que não foram escolhidas pela primeira sequência, começando pelas linhas finais.

#### 2.4.2.1 Ilustração da execução do algoritmo de Dickinson

Nessa seção será exemplificado o funcionamento do algoritmo de Dickinson (1974) aplicado a um delineamento fatorial  $2^3$ .

Tabela 6 – Matriz de delineamento fatorial  $2^3$  na Ordem Padrão.

Ordem Padrão	Fatores		
	A	B	C
1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	1	1	-1
5	-1	-1	1
6	1	-1	1
7	-1	1	1
8	1	1	1

Em primeiro lugar, é necessário listar as possíveis sucessoras para cada linha, como indicado na Tabela 7.

Tabela 7 – Possíveis linhas sucessoras para cada linha na Ordem Padrão.

Ordem Padrão	Possíveis sucessoras
1	2
2	4 / 6
3	4 / 7
4	3 / 8
5	6 / 7
6	5 / 8
7	3 / 5 / 8
8	4 / 6 / 7

Como já foi mencionado, a linha 1 é sempre colocada como primeira, sendo que somente a linha 2 pode ser colocada como sua sucessora. As linhas 4 ou 6 podem ser escolhidas aleatoriamente como sucessoras da linha 2. Neste exemplo, a linha 4 foi escolhida. O processo continua até que se obtenha uma sequência como indicada na Tabela 8.

Tabela 8 – Escolha do número de linhas até a obtenção da 1ª sequência.

Posição da linha	Escolhas possíveis	Número das linhas (OP)
1	①	1
2	②	2
3	④6	4
4	③8	3
5	4⑦	7
6	3⑤8	5
7	⑥7	6
8	5⑧	8

No exemplo, a primeira sequência foi concluída sem a necessidade de repetir o processo, mas é possível que a escolha das linhas sucessoras chegue a uma linha que não tenha sucessora possível, pois todas foram utilizadas anteriormente. Nesse caso, é necessário voltar e reiniciar a seleção a partir da última linha acima, onde existam possíveis sucessoras.

Uma vez que se obtém a primeira sequência completa, segue-se até a antepenúltima linha (é certo que a penúltima escolheu o único sucessor disponível, desde que não se tenha duas opções para colocar na última linha) e observa-se se existem alternativas. Se uma sucessora não pode ser mudada na antepenúltima linha, deve-se “subir” até uma linha onde essa mudança seja possível. No exemplo, devemos ir à linha 6 e trocar a linha 5 pela linha 8,



como pode ser visto na Tabela 9 e então explorar as possíveis possibilidades de mudança a partir daí.

Tabela 9 – Nova Ordem com a troca do sucessor na linha 6.

Posição da linha	Escolhas possíveis	Número das linhas (OP)
1	①	1
2	②	2
3	④6	4
4	③8	3
5	4⑦	7
6	3 5⑧ ←	8
7	4⑥7	6
8	⑤8	5

Depois de completar a segunda sequência, segue-se o mesmo procedimento até explorar todas as alternativas restantes. Na linha 4, quando troca-se a linha 3 pela 8, chega-se a um caminho que não é possível concluir, uma vez que, chega-se a um ponto onde não existem possíveis sucessoras.

Na linha 3, trocando a linha 4 pela 6, chega-se a uma nova sequência que também atende ao que é requerido pelo algoritmo, como pode ser visto na Tabela 10.

Tabela 10 – Nova Ordem com a troca do sucessor na linha 3.

Posição da linha	Escolhas possíveis	Número das linhas (Ordem Padrão)
1	①	1
2	②	2
3	4⑥ ←	6
4	5⑧	8
5	④67	4
6	③8	3
7	4⑦	7
8	3⑤8	5

No exemplo exposto, foram encontradas três ordens de execução que produzem o número mínimo de mudanças.

Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) utilizam ainda, o que denominam de “Algoritmo de Dickinson com alimentação forçada”, que consiste basicamente, em executar novamente o algoritmo de Dickinson partindo das melhores sequências obtidas. Segundo os autores, um dos problemas com o Algoritmo de Dickinson, da maneira como implementado anteriormente, é que as possíveis sucessoras de cada linha são introduzidas de baixo para cima, e dessa forma, a primeira sequência encontrada, na qual as mudanças são baseadas, está muito distante das sequências desejadas, apresentando um alto viés.

Se uma busca exaustiva fosse viável, esse fato não importaria tanto, uma vez que começando de uma ordem desfavorável terminaria encontrando as melhores. Mas tal busca é computacionalmente inviável para delineamentos com 64 ou mais tratamentos. Se o algoritmo começar com uma sequência com um viés muito alto, ou seja, uma sequência muito diferente da que se deseja encontrar, as mudanças que ocorrem durante um período razoável de tempo não são capazes de produzir as melhores sequências.

A solução para este problema consiste em colocar as sucessoras em tal ordem que a primeira sequência encontrada dará o menor viés entre todos aqueles encontrados usando o procedimento anterior. Fazendo as mudanças nesta primeira sequência, já estabelecida como boa, melhores sequências serão provavelmente obtidas.

### 3. METODOLOGIA

Para alcançar os objetivos propostos nesse trabalho, a metodologia empregada consistiu em gerar delineamentos ótimos seguindo os critérios A-ótimo e D-ótimo. Tais delineamentos foram gerados a partir de matrizes na Ordem Padrão (OP) e da Nova Ordem (NO), utilizando os algoritmos *exchange* e *simulated annealing*. Todas as ordens obtidas correspondem a experimentos fatoriais  $2^k$ , sendo que foi considerado  $k = 3, 4, 5, 6, 7$ .

Para comparação entre as matrizes de delineamento utilizou-se a Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) e o Máximo do Absoluto do Viés de ordem (MBAV).

As ordens definidas como Ordem Padrão (OP) utilizadas nesse trabalho são apresentadas no Apêndice A, nas Tabelas 26, 28, 34, 39 e 43. E as matrizes de Nova Ordem (NO) são apresentadas no Anexo A.

### 3.1 Algoritmo *exchange*

No presente trabalho, a aplicação do algoritmo *exchange* em relação à geração de delineamentos A-ótimos considerando a matriz de entrada  $M$  com dimensões  $k \times (p + 1)$ , pesos iniciais  $w_0$  e margem de erro dada por  $eps$ , foi dada nos seguintes passos:

1. A partir da matriz de entrada  $M$ , seleciona-se aleatoriamente 2 das  $k$  linhas. A probabilidade atribuída a cada uma das linhas é igual a  $w_0 = 1/k$ ;
2. As linhas selecionadas no passo 1 são trocadas entre si na matriz  $M$ , gerando a matriz  $M_{teste}$  e, a partir dessa matriz, calcula-se o traço de  $M_{teste}^{-1}$ ;
3. Se  $tr(M_{teste}^{-1}) < tr(M^{-1})$ , então  $M = M_{teste}$ , caso contrário, retorna-se ao passo 1. O critério de parada é dado por  $crit = abs(tr(M_{teste}^{-1}) - tr(M^{-1}))$  e se  $crit < eps$ , para; caso contrário, retorna ao passo 1 considerando  $M_{teste}$  como matriz inicial (nesse trabalho  $eps = 0,001$ );
4. Os pesos  $w_0$  são atualizados através de  $k$  valores gerados a partir de uma distribuição uniforme da seguinte maneira:

$$w_0 = \text{uniforme}(k); w_0^* = w_0 * 1/\text{soma}(w_0),$$

em que  $w_0^*$  é o peso atualizado. O comando utilizado pelo R (R Development Core Team, 2018) para gerar  $k$  valores aleatórios de uma distribuição uniforme é o "*runif*" e a soma dos pesos é feita pela função "*sum*".

A eficiência do delineamento A-ótimo é calculada por

$$A(\xi) = \frac{tr[M^{-1}(\xi^*)]}{tr[M^{-1}(\xi)]},$$

em que o numerador do quociente corresponde ao traço da matriz A-ótima obtida e o denominador corresponde ao traço da matriz de entrada. Como visto na Seção 2.2.1.1, um valor de eficiência igual a 1 significa que o valor do critério para a matriz obtida é igual ao valor do critério para a matriz inicial; por outro lado, um valor de eficiência menor que 1 significa que o valor do critério para a matriz obtida é menor que o valor para a matriz inicial, ou seja, a matriz obtida é mais eficiente em relação ao critério A-ótimo. Quanto mais próximo de 1 o valor da eficiência, mais próximas são as matrizes em relação ao critério.

Para os delineamentos D-ótimos, considerando a matriz de entrada  $M$  com dimensões  $k \times (p + 1)$ , pesos iniciais  $w_0$  e margem de erro dada por  $eps$ , procede-se de forma similar, seguindo os seguintes passos:

1. A partir da matriz de entrada  $M$ , seleciona-se aleatoriamente 2 das  $k$  linhas. A probabilidade atribuída a cada uma das linhas é igual a  $w_0 = 1/k$ ;
2. As linhas selecionadas no passo 1 são trocadas entre si na matriz  $M$  e a partir daí, calculado o determinante da matriz permutada, denominada  $Mteste$ ;
3. Se  $Det(Mteste) > Det(M)$ , então  $M = Mteste$ , caso contrário, retorna-se ao passo 1. O critério de parada é dado por  $crit = abs(Det(Mteste) - Det(M))$  e se  $crit < eps$ , para; caso contrário, retorna ao passo 1 considerando  $Mteste$  como matriz inicial (nesse trabalho  $eps = 0,001$ );
5. Os pesos  $w_0$  são atualizados através de  $k$  valores gerados a partir de uma distribuição uniforme da seguinte maneira:

$$w_0 = \text{uniforme}(k); w_0^* = w_0 * 1/\text{soma}(w_0),$$

em que  $w_0^*$  é o peso atualizado. O comando utilizado pelo R (R Development Core Team, 2018) para gerar  $k$  valores aleatórios de uma distribuição uniforme é o "*runif*" e a soma dos pesos é feita pela função "*sum*".

A eficiência do delineamento D-ótimo é calculada por

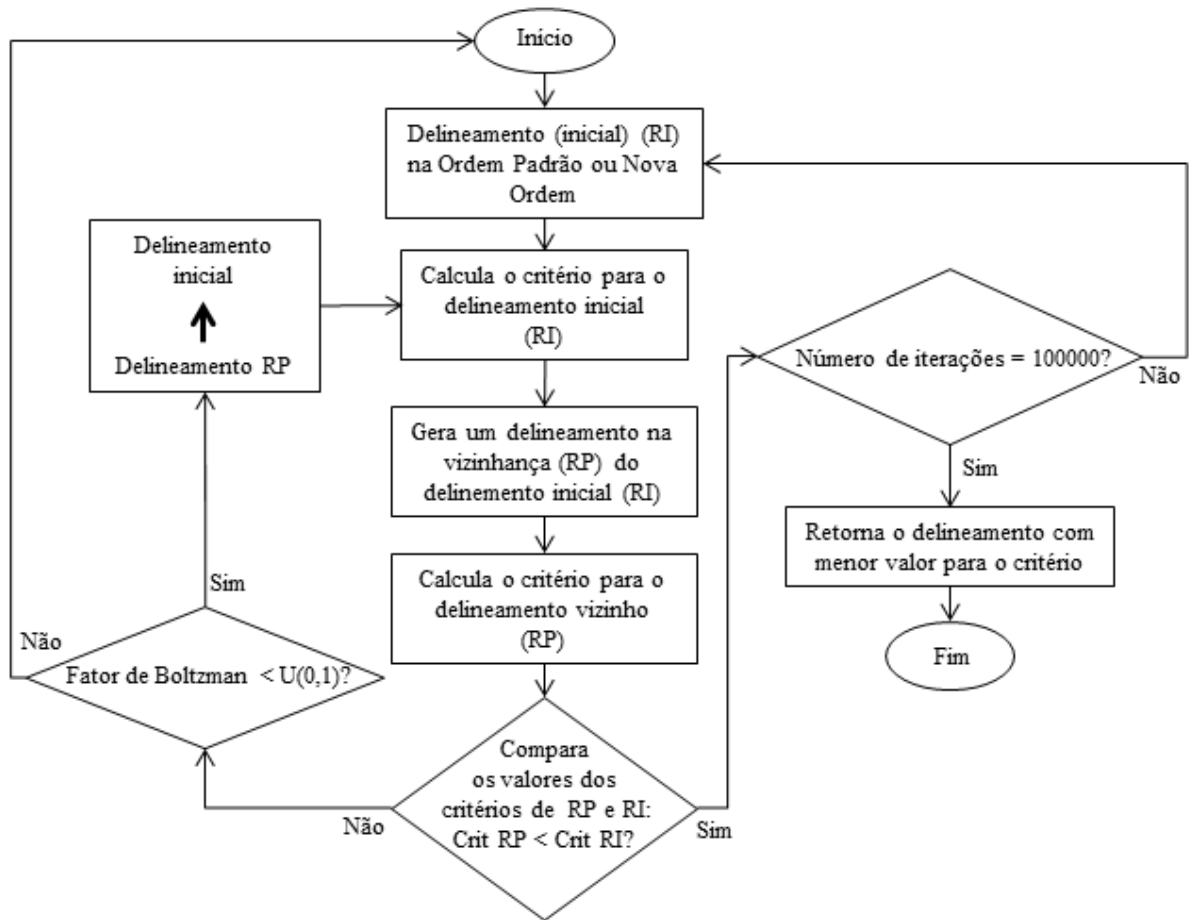
$$D(\xi) = \left\{ \frac{|M(\xi)|}{|M(\xi^*)|} \right\}^{\frac{1}{p}},$$

em que o numerador do quociente é dado pelo determinante da matriz inicial, o denominador é dado pelo determinante da matriz D-ótima obtida e  $p$  corresponde ao número de fatores da matriz de entrada  $M$ . A interpretação da eficiência para o delineamento D-ótimo é feita de forma similar à interpretação da eficiência para o delineamento A-ótimo.

O número de iterações utilizado para ambos os critérios foi 100000.

### 3.2 Algoritmo *simulated annealing*

O algoritmo *simulated annealing*, com estrutura apresentada na Figura 2, foi utilizado com o propósito de investigar a existência de delineamentos ótimos na vizinhança dos delineamentos na Ordem Padrão e Nova Ordem. Cada delineamento representou uma rede com distribuição aleatória de “-1” e “+1”.

Figura 2 – Estrutura do algoritmo *simulated annealing*.

Numericamente, a execução do algoritmo foi realizada nos seguintes passos:

- A rede inicial (RI) é determinada pelo delineamento de entrada, ou seja, o delineamento na Ordem Padrão ou Nova Ordem;
- Gera-se uma rede na vizinhança do delineamento inicial, chamada rede *a posteriori* (RP);
- Atualiza-se o  $tr[((XZ)'(XZ))^{-1}]$  no caso do delineamento A-ótimo e o  $Det[((XZ)'(XZ))^{-1}]$  no caso do delineamento D-ótimo, em que Z é a covariável de ordem acrescentada à matriz de delineamento X;
- Aplica-se a regra de decisão definida da seguinte forma:
  - Para delineamento A-ótimo, se  $tr(RP) < tr(RI)$  então aceita-se a rede proposta, por outro lado, se  $tr(RP) > tr(RI)$ , calcula-se o fator de Boltzmann dado por:

$$e^{-\frac{(tr(RP)-tr(RI))}{T}}$$

- Para delineamento D-ótimo, se  $Det(RP) < Det(RI)$  então aceita-se a rede proposta, por outro lado, se  $Det(RP) > Det(RI)$ , calcula-se o fator de Boltzmann dado por:

$$e^{-\frac{Det(RP)-Det(RI)}{T}}$$

sendo que T indica a função de temperatura dada por  $T = (1 - passo)^c$ , sendo c a constante de resfriamento e “passo” o tamanho do passo para o resfriamento.

- Gera-se um valor de uma distribuição uniforme  $U[0,1]$ ;

Se  $U[0,1] < e^{-\frac{tr(RP)-tr(RI)}{T}}$ , no caso do A-ótimo ou  $U[0,1] < e^{-\frac{Det(RP)-Det(RI)}{T}}$ , no caso do D-ótimo, então aceita-se a rede a *posteriori* (RP) como rede inicial (RI) e inicia-se novamente o processo. Nessas condições, adotou-se o tamanho do passo  $passo = 0,5$  e número de iterações igual a 100000.

É importante ressaltar que dada a geração de delineamentos na vizinhança, possivelmente alguns pontos experimentais podem ser repetidos pelo algoritmo *simulated annealing*. Em termos práticos, esses pontos podem ser utilizados para estimar o erro puro.

### 3.3 Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores

A Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) foi obtida com base na matriz de Informação de Fisher. A matriz de informação mede a quantidade de informação a respeito de um parâmetro de interesse e pode ser utilizada para encontrar a estimativa de sua variância, e, mais especificamente, maximizar a informação significa minimizar a variância.

A matriz de delineamento X, foi acrescida de uma coluna Z correspondente à ordem de execução, ou seja, uma covariável correspondente à ordem. Dessa forma, a matriz de informação de Fisher foi dada por

$$I = (XZ)'XZ,$$

e sua inversa dada por

$$V = I^{-1} = \begin{bmatrix} V_{XX} & V_{XZ} \\ V_{ZX} & V_{ZZ} \end{bmatrix}.$$

Segundo Pukelsheim (1993), a inversa da matriz de informação pode ser particionada de forma que a diagonal principal da submatriz  $V_{XX}$  que tem dimensões  $p \times p$ , corresponde à Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores.

Portanto, a Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores foi dada por cada um dos valores correspondentes à diagonal principal da submatriz  $V_{XX}$ . De forma a exemplificar

esse cálculo, para a matriz de delineamento na Ordem Padrão de um fatorial  $2^3$ , considerando apenas os efeitos principais, procedeu-se como segue abaixo.

A matriz de delineamento acrescida da covariável de ordem,  $XZ$ , foi dada por

$$XZ = \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 2 \\ -1 & 1 & -1 & 3 \\ 1 & 1 & -1 & 4 \\ -1 & -1 & 1 & 5 \\ 1 & -1 & 1 & 6 \\ -1 & 1 & 1 & 7 \\ 1 & 1 & 1 & 8 \end{bmatrix},$$

em que as três primeiras colunas correspondem aos fatores A, B e C, respectivamente, e a última coluna corresponde a covariável de ordem Z. Assim, a matriz de informação de Fisher foi dada por

$$I = (XZ)'(XZ) = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 8 & 0 & 8 \\ 0 & 0 & 8 & 16 \\ 4 & 8 & 16 & 204 \end{bmatrix},$$

e sua inversa

$$V = I^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{0,126543} & \mathbf{0,003086} & \mathbf{0,006173} & -0,003086 \\ \mathbf{0,003086} & \mathbf{0,131173} & \mathbf{0,012346} & -0,006173 \\ \mathbf{0,006173} & \mathbf{0,012346} & \mathbf{0,149691} & -0,012346 \\ -0,003086 & -0,006173 & -0,012346 & 0,006173 \end{bmatrix}.$$

Então, a submatriz  $V_{XX}$ , é dada por

$$V_{XX} = \begin{bmatrix} \mathbf{0,126543} & 0,003086 & 0,006173 \\ 0,003086 & \mathbf{0,131173} & 0,012346 \\ 0,006173 & 0,012346 & \mathbf{0,149691} \end{bmatrix},$$

e a variância das estimativas dos efeitos dos fatores A, B e C são, respectivamente iguais a: 0,126543; 0,131173 e 0,149691.

### 3.4 Máximo do Absoluto do Viés de ordem

O Máximo do Absoluto do Viés de ordem (MBAV) como sugerido por Adams, Cintas e Llabrés (2005), foi calculado considerando um delineamento em esquema fatorial, assumindo uma dada ordem particular de execução dos tratamentos. Visando melhor entendimento, segue uma ilustração dada em um fatorial  $2^3$ , na Ordem Padrão, cuja forma é dada na Tabela 11.

Tabela 11 – Delineamento  $2^3$  na Ordem Padrão.

Ordem de execução Padrão	Fatores e Interações						
	A	B	C	AB	AC	BC	ABC
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
2	1	-1	-1	-1	-1	1	1
3	-1	1	-1	-1	1	-1	1
4	1	1	-1	1	-1	-1	-1
5	-1	-1	1	1	-1	-1	1
6	1	-1	1	-1	1	-1	-1
7	-1	1	1	-1	-1	1	-1
8	1	1	1	1	1	1	1

Em função desse delineamento, seguem as estimativas do M<sub>BAV</sub> para os fatores A, B, C e a interação AB. Sendo que o Máximo do Absoluto do Viés de Ordem para o delineamento  $2^3$  é igual a 4. De maneira geral, para cada fator e interações, o cálculo do M<sub>BAV</sub> é dado pelo absoluto da média entre as posições em que o sinal do fator é positivo e as ordens em que o sinal é negativo.

O M<sub>BAV</sub> para o fator A é dado por:

$$M_{BAV_A} = \left| \frac{1}{4}(2 + 4 + 6 + 8) - \frac{1}{4}(1 + 3 + 5 + 7) \right| = 1$$

Nesse caso, para o M<sub>BAV</sub> do fator A, os números 2, 4, 6 e 8 correspondem às ordens nas quais o fator A recebe “+1” e os números 1, 3, 5 e 7 às ordens nas quais o fator A recebe “-1”. Da mesma forma ocorre o cálculo do M<sub>BAV</sub> para os demais fatores.

O M<sub>BAV</sub> para o fator B é dado por:

$$M_{BAV_B} = \left| \frac{1}{4}(3 + 4 + 7 + 8) - \frac{1}{4}(1 + 2 + 5 + 6) \right| = 2$$

O M<sub>BAV</sub> para o fator C é dado por:

$$M_{BAV_C} = \left| \frac{1}{4}(5 + 6 + 7 + 8) - \frac{1}{4}(1 + 2 + 3 + 4) \right| = 4$$

O M<sub>BAV</sub> para a interação AB é dado por:

$$M_{BAV_{AB}} = \left| \frac{1}{4}(1 + 4 + 5 + 8) - \frac{1}{4}(2 + 3 + 6 + 7) \right| = 0$$



Nota-se que quando a ordem de execução é tal que, o efeito de um fator é associado a uma coluna da matriz de delineamento com quatro sinais negativos seguidos por quatro sinais positivos, ou vice e versa,  $MBAV = 4$ .

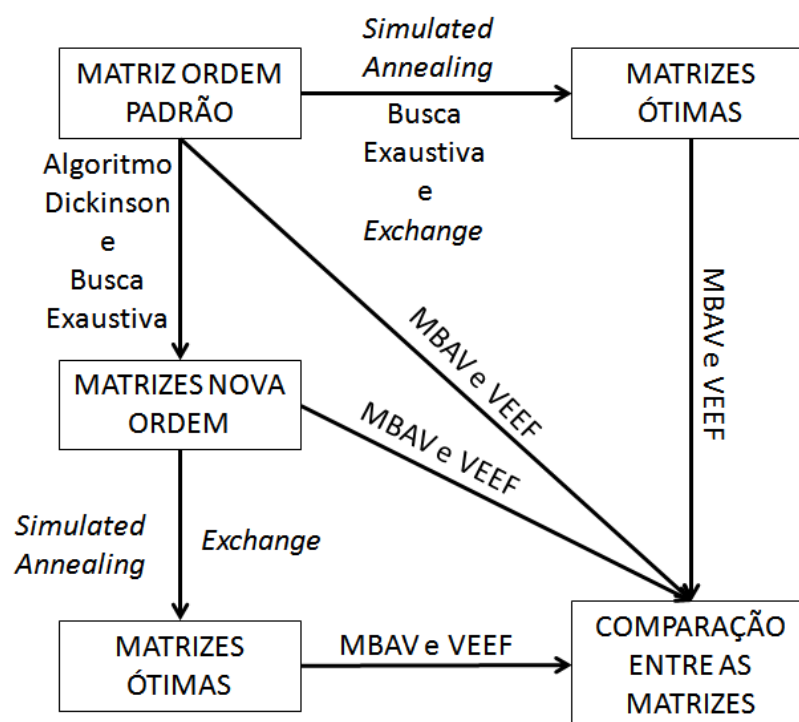
O cálculo para as demais interações segue de forma análoga, e com a finalização do procedimento obtêm-se um resumo do MBAV, para o delineamento  $2^3$  na Ordem Padrão, como descrito na Tabela 12.

Tabela 12 – Máximo do Absoluto do Viés de Ordem calculado para o delineamento  $2^3$ .

Tratamentos	MBAV
A	1
B	2
C	4
AB	0
AC	0
BC	0
ABC	0

Dessa forma, com todos os procedimentos descritos, cujos algoritmos em R (R Development Core Team, 2018) encontram-se no Apêndice B, a Figura 3 ilustra o esquema simplificado da metodologia proposta, juntamente com as respectivas estatísticas de estudo utilizadas.

Figura 3 – Esquema da metodologia proposta.



## 4. RESULTADOS

### 4.1 Delineamentos $2^3$

Para os delineamentos  $2^3$ , o número de todas as possíveis ordens de execução para a matriz de delineamento,  $X$ , é  $8! = 40.320$ , dessa maneira, optou-se por investigar todo o espaço dessas possíveis ordens, através de busca exaustiva, para encontrar as matrizes ótimas segundo os critérios A-ótimo e D-ótimo. A matriz na Ordem Padrão (OP) apresenta valor para o critério A igual a 0,413580 e valor para o critério D igual a 82.944. Ambos os critérios considerando a matriz com adição da covariável de ordem.

A Tabela 21, do Anexo A, contém todas as 48 ordens obtidas por de Adams, Cintas e Llabrés (2005). Essa tabela apresenta as ordens encontradas pelos autores com o número mínimo de mudanças nos níveis dos fatores e mínimo valor do Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV=2), sendo a primeira delas uma ordem semente a partir da qual todas as outras foram geradas mantendo as mesmas características com relação ao número de mudanças e valor do MBAV.

Na otimização do delineamento, ao considerar a matrix  $X$  composta apenas pelos efeitos principais dos fatores e a covariável de ordem, tanto o critério A-ótimo quanto o critério D-ótimo selecionaram as mesmas matrizes ótimas. Das 40.320, 144 foram selecionadas como ótimas sendo que nenhuma delas coincide com as 48 matrizes de Nova Ordem obtidas pelos autores citados no parágrafo anterior, como pode ser visto na Tabela 27 do Apêndice A. O valor do critério A-ótimo apresentado pelas 144 ordens de execução é 0,379902 e o do critério D-ótimo é 104.448. O valor do critério A-ótimo para as 48 ordens de execução apresentadas pelos mesmos autores é 0,397222 e o valor do critério D-ótimo é 92.160, ou seja, todas as 144 ordens obtidas através da busca exaustiva apresentam ganho em relação aos critérios A e D.

### 4.2 *Exchange*

Em concordância com a metodologia proposta, realizou-se preliminarmente um estudo da eficiência dos delineamentos gerados com base nos critérios A-ótimo e D-ótimo. Tais delineamentos foram gerados pelo algoritmo *exchange*, a partir da Ordem Padrão (OP) de execução e a partir das principais matrizes de Nova Ordem (NO) propostas por Adams, Cintas

e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) que se encontram disponíveis no Anexo A. As ordens obtidas, que se encontram no Apêndice A, correspondem a experimentos fatoriais  $2^k$ , sendo considerado  $k = 4, 5, 6, 7$ . A Tabela 13 apresenta um resumo para os valores de eficiência obtidos.

Tendo como referência os delineamentos na Ordem Padrão e Nova Ordem, nota-se por meio das medidas de eficiência que, em geral, os delineamentos ótimos obtidos apresentaram eficiência similar aos delineamentos de origem. Observa-se na Tabela 13 que todos os delineamentos A-ótimos obtidos apresentaram ganho em relação ao critério, ou seja, todos os delineamentos obtidos apresentaram valores para o critério A menores do que os valores de referência.

Tabela 13 – Eficiência dos principais delineamentos A-ótimos e D-ótimos obtidos pelo algoritmo *exchange* (E).

Delineamentos**	Critério	
	A <sub>E</sub>	D <sub>E</sub>
4F OP	0,9548	0,9731
4F NO15***	0,9953	0,9998
5F OP	0,9431	0,9805
5F NO1	0,9953	1
5F NO2	0,9950	0,9937
6F OP	0,9546	0,9912
6F NO1	0,9930	0,9999
6F NO2	0,9945	1
7F OP	0,9572	0,9952
7F NO1	0,9969	0,9998
7F NO2	0,9955	0,9998

\*\* 4F OP – Delineamento  $2^4$  Ordem Padrão; 4F NO15 – Delineamento  $2^4$  Nova Ordem 15; 5F OP – Delineamento  $2^5$  Ordem Padrão; 5F NO1 – Delineamento  $2^5$  Nova Ordem 1; 5F NO2 – Delineamento  $2^5$  Nova Ordem 2; 6F OP – Delineamento  $2^6$  Ordem Padrão; 6F NO1 – Delineamento  $2^6$  Nova Ordem 1; 6F NO2 – Delineamento  $2^6$  Nova Ordem 2; 7F OP – Delineamento  $2^7$  Ordem Padrão; 7F NO1 – Delineamento  $2^7$  Nova Ordem 1; 7F NO2 – Delineamento  $2^7$  Nova Ordem 2.

\*\*\* 4F NO15 corresponde à 15ª ordem de execução dentre as 16 obtidas por Adams, Cintas e Llabrés (2005).

Com exceção dos delineamentos D-ótimos obtidos a partir do delineamento  $2^5$  Nova Ordem 1 (5F NO1) e do delineamento  $2^6$  Nova Ordem 2 (6F NO2), todos os delineamentos D-ótimos obtidos também apresentaram ganho em relação ao critério, ou seja, todos os delineamentos obtidos apresentaram valores para o critério D maiores do que os valores de referência. Para as exceções apresentadas, o valor da eficiência obtido (igual a 1) significa que

o algoritmo não obteve valor para o critério D maior do que o valor para a matriz de entrada, ou seja, retornou a própria matriz de entrada como resultado.

A importância desse resultado, que foi obtido por meio de permutações entre as linhas das matrizes, sugere que o procedimento proposto por Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) não menciona que seus algoritmos geram delineamentos de Nova Ordem que herdaram propriedades ótimas, o que pode ser observado na Tabela 13, pois todos os delineamentos obtidos a partir das matrizes de Nova Ordem apresentam maior proximidade em relação aos delineamentos de referência, ou seja, valores de eficiência mais próximos de 1 do que os demais.

Com relação aos valores dos critérios de otimalidade têm-se que, para os delineamentos  $2^4$ , cuja matriz na Ordem Padrão de execução é apresentada na Tabela 28 do Apêndice A, o valor do critério A é 0,269247 e o valor do critério D é 75.759.616. O número de todas as possíveis ordens de execução para sua matriz de delineamento é  $16! = 2,09 \times 10^{13}$ .

Considerando a busca a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão e o critério A-ótimo, o algoritmo forneceu a matriz ótima apresentada na Tabela 29 do Apêndice A e valor do critério igual a 0,257075. Ao considerar o critério D-ótimo, o algoritmo forneceu a matriz ótima apresentada na Tabela 30 do Apêndice A e valor do critério igual a 86.835.200.

A busca pelos delineamentos D-ótimos a partir das 16 ordens semente obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005) apresentadas na Tabela 22 do Anexo A, mostrou que as ordens #2, #3, #4, #5, #7, #9, #10, #11, #14, #15, #16 tiveram valores para o critério D melhores (maiores) que a obtida a partir da matriz na Ordem Padrão; as demais obtiveram valores inferiores.

Ao considerar o critério A, a ordem que apresentou menor valor para o critério (0,250859) foi a ordem #15 (11, 6, 16, 14, 3, 10, 1, 7, 9, 5, 8, 12, 4, 13, 15, 2). A única ordem que apresentou valor para o critério A superior àquela obtida a partir da matriz na Ordem Padrão foi a #5. As ordens de execução obtidas estão na Tabela 31 do Apêndice A. Dentre as 16 ordens obtidas, aquela que apresentou maior valor para o critério D (96.026.624) foi a ordem #15 (1, 2, 3, 14, 16, 15, 7, 10, 11, 12, 4, 8, 6, 5, 13, 9). As ordens de execução obtidas estão na Tabela 32 do Apêndice A. Os valores do critério A e D para as 16 ordens obtidas são apresentados na Tabela 33 do Apêndice A.

Para os delineamentos  $2^5$ , o número de todas as possíveis ordens de execução para a matriz de delineamento, X, é  $32! = 2,63 \times 10^{35}$ . A matriz na Ordem Padrão é apresentada na Tabela 34 do Apêndice A e o valor do critério A é 0,166150 e o valor do critério D é 292.326.211.584.

Considerando a busca a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão e o critério A-ótimo, o algoritmo forneceu a matriz ótima apresentada na Tabela 35 do Apêndice A e o valor do critério igual a 0,156696. Ao considerar o critério D-ótimo, a matriz ótima obtida é apresentada na Tabela 36 do Apêndice A e o valor do critério igual a 329.018.000.000.

A busca pelos delineamentos A-ótimos a partir das 2 ordens semente obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012), apresentadas na Tabela 23 do Anexo A, obteve 2 matrizes, apresentadas na Tabela 37 do Apêndice A, que apresentaram valores para o critério A de 0,156807 e 0,157968, respectivamente. Ambos os valores para o critério A maiores (piores) que o obtido a partir da matriz na Ordem Padrão.

Ao considerar o critério D, as duas ordens obtidas estão apresentadas na Tabela 38 do Apêndice A, e seus valores são 369.367.187.456 e 374.635.233.280, respectivamente. Ambas obtiveram valores para o critério D melhores que a obtida a partir da matriz na Ordem Padrão.

Para os delineamentos  $2^6$ , o número de todas as possíveis ordens para a matriz de delineamento,  $X$ , é  $64! = 1,27 \times 10^{89}$ . O valor do critério A para a matriz de delineamento na Ordem Padrão é 0,098813 e o valor do critério D é  $4,645437 \times 10^{15}$ .

Considerando a busca a partir dessa matriz, que é apresentada na Tabela 39 do Apêndice A, e o critério A-ótimo, o algoritmo forneceu a matriz ótima apresentada na Tabela 40 do Apêndice A e o valor do critério é 0,094328. Ao considerar o critério D-ótimo, o algoritmo forneceu uma matriz ótima com as linhas 2 e 50 trocadas e o valor do critério igual a  $4,942305 \times 10^{15}$ .

A busca pelos delineamentos A-ótimos a partir das 2 ordens obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) por meio do algoritmo de Dickinson, apresentadas na Tabela 24 do Anexo A, obteve 2 matrizes, apresentadas na Tabela 41 do Apêndice A, que apresentaram valores para o critério A de 0,093842 e 0,093952, respectivamente. Ambas obtiveram valores para o critério A menores (melhores) que a obtida a partir da matriz na Ordem Padrão.

Ao considerar o critério D, as duas ordens obtidas estão apresentadas na Tabela 42 do Apêndice A, e seus valores são respectivamente  $5,868815 \times 10^{15}$  e  $5,878264 \times 10^{15}$ . Ambas melhores, com relação ao critério D, do que aquela obtida a partir da matriz na Ordem Padrão.

Para os delineamentos  $2^7$ , o número de todas as possíveis ordens para a matriz de delineamento,  $X$ , é  $128! = 3,86 \times 10^{215}$ . O valor do critério A para a matriz de delineamento na Ordem Padrão, apresentada na Tabela 43 do Apêndice A, é 0,057253 e o valor do critério D é  $2,997776 \times 10^{20}$ .

Considerando a busca a partir dessa matriz e o critério A-ótimo, o algoritmo forneceu a matriz ótima apresentada na Tabela 44 do Apêndice A e o valor do critério é 0,054803. Ao

considerar o critério D-ótimo, o algoritmo forneceu uma matriz ótima com as linhas 1 e 107 trocadas, e o valor do critério igual a  $3,116376 \times 10^{20}$ .

A busca pelos delineamentos A-ótimos a partir das 2 ordens obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) por meio do algoritmo de Dickinson, apresentadas na Tabela 25 do Anexo A, obteve 2 matrizes, apresentadas na Tabela 45 do Apêndice A, com valores para o critério A de 0,054844 e 0,054777, respectivamente. Somente a segunda ordem obteve valor para o critério A menor (melhor) que a obtida a partir da matriz na Ordem Padrão.

Ao considerar o critério D, as duas ordens obtidas estão apresentadas na Tabela 46 do Apêndice A e seus valores são  $3,829239 \times 10^{20}$  e  $3,824351 \times 10^{20}$ , respectivamente. Ambas melhores, com relação ao critério D, do que aquela obtida a partir da matriz na Ordem Padrão.

A Tabela 14 fornece um resumo dos valores dos critérios A-ótimo e D-ótimo para os delineamentos de referência, que são aqueles a partir dos quais os delineamentos ótimos foram obtidos pelo algoritmo *exchange* e os valores dos critérios para as ordens obtidas, apresentados nos parágrafos anteriores.

Tabela 14 – Valores dos critérios A-ótimo e D-ótimo para os delineamentos de referência e para os delineamentos obtidos pelo algoritmo *exchange* (E).

Delineamentos**	Valores de referência		Valores obtidos ( <i>exchange</i> )	
	A <sub>E</sub>	D <sub>E</sub>	A <sub>E</sub>	D <sub>E</sub>
4F OP	0,269247	75.759.616	0,257075	86.835.200
4F NO15	0,252049	95.944.704	0,250859	96.026.624
5F OP	0,166150	292.326.211.584	0,156696	329.018.000.000
5F NO1	0,157541	369.669.177.344	0,156807	369.367.187.456
5F NO2	0,158756	360.621.277.184	0,157968	374.635.233.280
6F OP	0,098813	$4,645437 \times 10^{15}$	0,094328	$4,942305 \times 10^{15}$
6F NO1	0,094501	$5,868678 \times 10^{15}$	0,093842	$5,868815 \times 10^{15}$
6F NO2	0,094471	$5,879501 \times 10^{15}$	0,093952	$5,878264 \times 10^{15}$
7F OP	0,057253	$2,997776 \times 10^{20}$	0,054803	$3,116376 \times 10^{20}$
7F NO1	0,055015	$3,822046 \times 10^{20}$	0,054844	$3,829239 \times 10^{20}$
7F NO2	0,055024	$3,817794 \times 10^{20}$	0,054777	$3,824351 \times 10^{20}$

\*\* 4F OP – Delineamento 2<sup>4</sup> Ordem Padrão; 4F NO15 – Delineamento 2<sup>4</sup> Nova Ordem 15;  
 5F OP – Delineamento 2<sup>5</sup> Ordem Padrão; 5F NO1 – Delineamento 2<sup>5</sup> Nova Ordem 1;  
 5F NO2 – Delineamento 2<sup>5</sup> Nova Ordem 2; 6F OP – Delineamento 2<sup>6</sup> Ordem Padrão;  
 6F NO1 – Delineamento 2<sup>6</sup> Nova Ordem 1; 6F NO2 – Delineamento 2<sup>6</sup> Nova Ordem 2;  
 7F OP – Delineamento 2<sup>7</sup> Ordem Padrão; 7F NO1 – Delineamento 2<sup>7</sup> Nova Ordem 1;  
 7F NO2 – Delineamento 2<sup>7</sup> Nova Ordem 2.

Os resultados descritos na Tabela 15 correspondem à Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) para os delineamentos A-ótimos e D-ótimos obtidos a partir dos delineamentos de Nova Ordem. Observa-se que, em geral, à medida que o número de fatores

umenta, o valor do VEEF é reduzido. Outro ponto importante a ser destacado é o fato de que as matrizes de Nova Ordem, obtidas por Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012), estabilizam de forma razoável a variância das estimativas dos efeitos dos fatores.

Tabela 15 – Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) para os delineamentos A-ótimos e D-ótimos gerados pelo algoritmo *exchange* (E) a partir dos delineamentos de Nova Ordem.

Matrizes	Delineamento 2 <sup>7</sup>						
	Fatores						
	A	B	C	D	E	F	G
7F OP	0,007813	0,007814	0,007820	0,007843	0,007933	0,008293	0,009735
7F NO1	0,007813	0,007827	0,007876	0,007878	0,007834	0,007893	0,007893
7F NO2	0,007813	0,007832	0,007871	0,007882	0,007840	0,007895	0,007891
7F NO1 A <sub>E</sub>	0,007860	0,007819	0,007814	0,007813	0,007813	0,007909	0,007815
7F NO2 A <sub>E</sub>	0,007818	0,007826	0,007813	0,007830	0,007851	0,007826	0,007813
7F NO1 D <sub>E</sub>	0,007813	0,007823	0,007876	0,007878	0,007834	0,007892	0,007883
7F NO2 D <sub>E</sub>	0,007813	0,007829	0,007871	0,007881	0,007837	0,00789	0,007887
Delineamento 2 <sup>6</sup>							
6F OP	0,015629	0,015640	0,015684	0,015862	0,016572	0,019412	-
6F NO1	0,015675	0,015722	0,015774	0,015706	0,015801	0,015812	-
6F NO2	0,015675	0,015709	0,015773	0,015706	0,015784	0,015812	-
6F NO1 A <sub>E</sub>	0,015669	0,015649	0,015636	0,015627	0,015625	0,015625	-
6F NO2 A <sub>E</sub>	0,015645	0,015692	0,015657	0,015639	0,015637	0,015670	-
6F NO1 D <sub>E</sub>	0,015675	0,015722	0,015779	0,015706	0,015795	0,015812	-
6F NO2 D <sub>E</sub>	0,015675	0,015735	0,015806	0,015684	0,015784	0,015779	-
Delineamento 2 <sup>5</sup>							
5F OP	0,031279	0,031365	0,031709	0,033087	0,038596	-	-
5F NO1	0,031710	0,031613	0,031273	0,031285	0,031569	-	-
5F NO2	0,031285	0,031613	0,031710	0,031273	0,031569	-	-
5F NO1 A <sub>E</sub>	0,031403	0,031292	0,031503	0,031259	0,031262	-	-
5F NO2 A <sub>E</sub>	0,031419	0,031780	0,031585	0,031436	0,031659	-	-
5F NO1 D <sub>E</sub>	0,031569	0,031762	0,031320	0,031256	0,031569	-	-
5F NO2 D <sub>E</sub>	0,031285	0,031452	0,031524	0,031340	0,031419	-	-
Delineamento 2 <sup>4</sup>							
4F OP	0,062716	0,063365	0,065960	0,076341	-	-	-
4F NO15	0,063183	0,0625	0,063183	0,0625	-	-	-
4F NO15 A <sub>E</sub>	0,062510	0,062500	0,062510	0,062668	-	-	-
4F NO15 D <sub>E</sub>	0,062596	0,062767	0,063182	0,062767	-	-	-

Em se tratando dos resultados referentes ao Máximo do Absoluto do Viés de Ordem, apresentados na Tabela 16, observa-se que para o delineamento 2<sup>4</sup>, que apresenta menor número de fatores, os delineamentos ótimos apresentaram menor valor do viés para todos os

fatores quando comparados ao delineamento de referência, que foi o delineamento 2<sup>4</sup> na Ordem Padrão (4F OP). No caso dos demais delineamentos, essa característica se manteve para os três últimos fatores na maioria dos casos, que são aqueles que apresentam maiores valores de referência na Ordem Padrão.

Tabela 16 – Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV) para os delineamentos A-ótimos e D-ótimos gerados pelo algoritmo *exchange* (E) a partir dos delineamentos de Nova Ordem.

Matrizes	Delineamento 2 <sup>7</sup>						
	A	B	C	D	E	F	G
7F OP	1	2	4	8	16	32	64
7F NO1	1	6,25	13,125	13,375	7,5625	14,75	14,8125
7F NO2	0,5	7,1875	12,625	13,6875	8,5625	14,9375	14,625
7F NO1 A <sub>E</sub>	11,53125	4,34375	1,84375	1,0625	0,375	16,375	2,40625
7F NO2 A <sub>E</sub>	3,75	6,03125	0,46875	7	10,3125	6,1875	0,96875
7F NO1 D <sub>E</sub>	0,03125	5,28125	13,125	13,375	7,5625	14,75	13,84375
7F NO2 D <sub>E</sub>	0,09375	6,78125	12,625	13,6875	8,15625	14,53125	14,21875
Matrizes	Delineamento 2 <sup>6</sup>						
	A	B	C	D	E	F	G
6F OP	1	2	4	8	16	32	-
6F NO1	4,125	5,75	7,125	5,25	7,75	8	-
6F NO2	4,125	5,375	7,125	5,25	7,375	8	-
6F NO1 A <sub>E</sub>	4	2,9375	1,9375	0,8125	0,125	0,0625	-
6F NO2 A <sub>E</sub>	2,625	4,875	3,375	2,25	2,0625	4	-
6F NO1 D <sub>E</sub>	4,125	5,75	7,25	5,25	7,625	8	-
6F NO2 D <sub>E</sub>	4,125	6,125	7,875	4,5	7,375	7,25	-
Matrizes	Delineamento 2 <sup>5</sup>						
	A	B	C	D	E	F	G
5F OP	1	2	4	8	16	-	-
5F NO1	4,5	4	1	1,25	3,75	-	-
5F NO2	1,25	4	4,5	1	3,75	-	-
5F NO1 A <sub>E</sub>	2,625	1,375	3,375	0,625	0,75	-	-
5F NO2 A <sub>E</sub>	1,5	1	3	1,75	3,5	-	-
5F NO1 D <sub>E</sub>	3,75	4,75	1,75	0,5	3,75	-	-
5F NO2 D <sub>E</sub>	1,25	3	3,5	2,25	2,75	-	-
Matrizes	Delineamento 2 <sup>4</sup>						
	A	B	C	D	E	F	G
4F OP	1	2	4	8	-	-	-
4F NO15	4	4	4	4	-	-	-
4F NO15 A <sub>E</sub>	0,25	0	0,25	1	-	-	-
4F NO15 D <sub>E</sub>	0,75	1,25	2	1,25	-	-	-

Tais resultados sugerem que é plausível a utilização das matrizes obtidas a partir das matrizes de Nova Ordem, no tocante a uma nova proposta de ordens de execução composta pelos delineamentos obtidos considerando os critérios A-ótimo e D-ótimo.



Em se tratando da relação entre a Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores e o Máximo do Absoluto do Viés de Ordem, notou-se uma tendência quando os resultados foram comparados. As duas medidas apresentaram relação direta, ou seja, à medida que uma delas aumenta ou diminui, a outra se comporta da mesma maneira. As Figuras 4 e 5 ilustram tal comportamento para os delineamentos na Ordem Padrão.

Figura 4 – Comportamento do VEEF para os delineamentos na Ordem Padrão de execução.

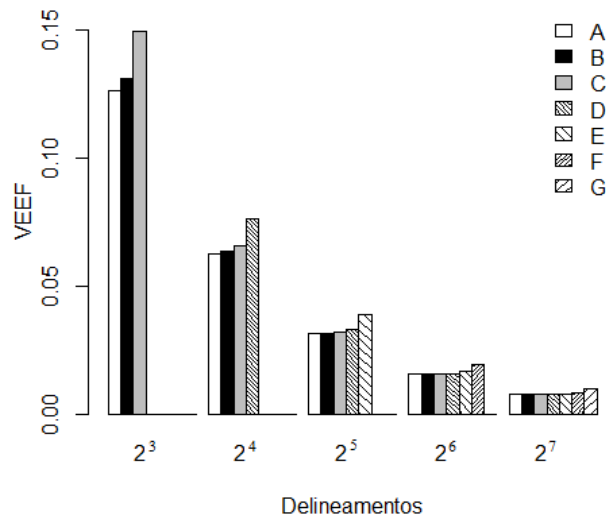
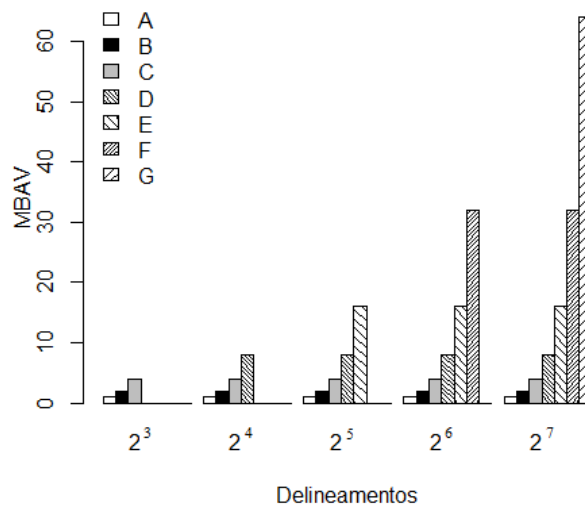


Figura 5 – Comportamento do MBAV para os delineamentos na Ordem Padrão de execução.



Dados os resultados de equivalência entre os delineamentos de Nova Ordem, obtidos por Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012), e os delineamentos A-ótimos e D-ótimos gerados a partir da Nova Ordem, procedeu-se com a implementação do algoritmo *simulated annealing* com o propósito de pesquisar por novos delineamentos na vizinhança do delineamento inicial. Além do que foi mencionado

anteriormente, o algoritmo *simulated annealing* foi utilizado com o objetivo de encontrar resultados melhores que os obtidos pelo *exchange* em relação à variância e aos vieses.

Desta forma, a aplicação desse método foi feita pela construção de um “caminho” que indica sucessivas melhorias, assumindo funções de minimização até a convergência para um delineamento ótimo de acordo com o critério de interesse, mais especificamente, os critérios A-ótimo e D-ótimo com respectivas funções  $tr(X'X)^{-1}$  e  $Det(X'X)^{-1}$ . Os resultados obtidos são descritos na seção seguinte.

### 4.3 *Simulated annealing*

Nessa seção são apresentados os resultados obtidos por meio do algoritmo *simulated annealing* para os delineamentos  $2^4$ ,  $2^5$ ,  $2^6$  e  $2^7$ . Assim como foi feito para o algoritmo *exchange*, descrito na Seção 4.2, as buscas foram realizadas a partir das respectivas matrizes na Ordem Padrão (OP) e Nova Ordem (NO) e considerados os critérios A-ótimo e D-ótimo. Preliminarmente à discussão dos resultados, observa-se nas Figuras 6 e 7 que o algoritmo alcançou convergência para os delineamentos obtidos a partir da Ordem Padrão, minimizando os critérios A e D especificados pelas funções  $tr(X'X)^{-1}$  e  $Det(X'X)^{-1}$ , respectivamente. Observou-se resultados semelhantes para a maioria dos delineamentos obtidos a partir da Nova Ordem.

Figura 6 – Convergência do algoritmo *simulated annealing* para os delineamentos gerados pelo critério A-ótimo a partir da Ordem Padrão.

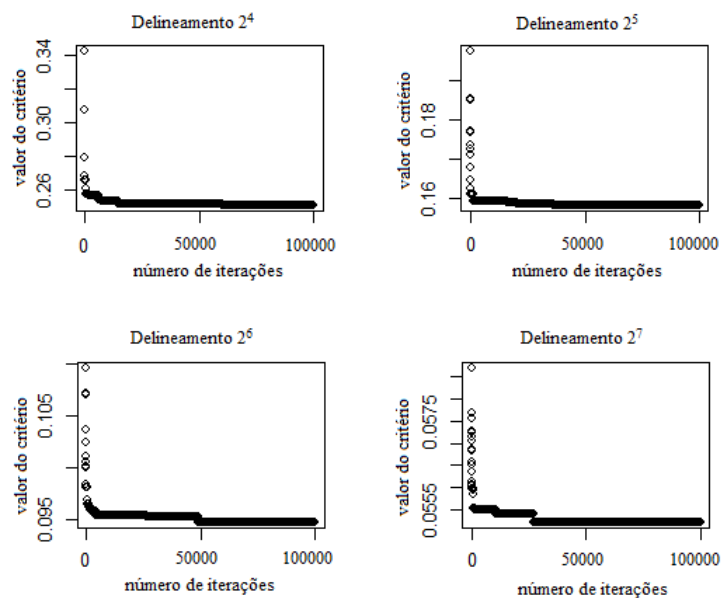
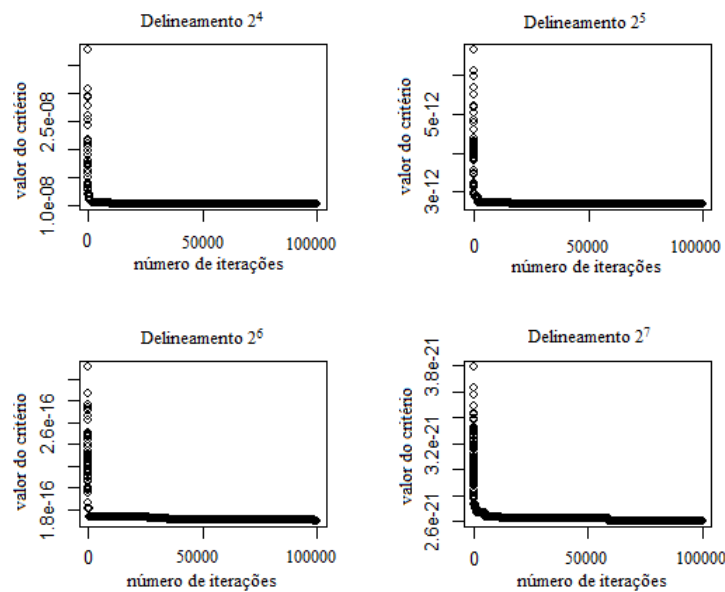


Figura 7 – Convergência do algoritmo *simulated annealing* para os delineamentos gerados pelo critério D-ótimo a partir da Ordem Padrão.



Tendo como referência os delineamentos na Ordem Padrão e Nova Ordem, nota-se por meio das medidas de eficiência, apresentadas na Tabela 17, que os delineamentos ótimos apresentaram eficiência similar aos delineamentos de origem e, de um modo geral, não houve perda de informação ao considerar as diferentes matrizes na obtenção dos delineamentos.

Tabela 17 – Eficiência dos principais delineamentos A-ótimos e D-ótimos obtidos pelo algoritmo *simulated annealing* (SA).

Delineamentos**	Critério	
	$A_{SA}$	$D_{SA}$
4F OP	0,9320	0,9504
4F NO15	0,9989	0,9982
5F OP	0,9532	0,9602
5F NO1	1	0,9987
5F NO2	0,9966	0,9948
6F OP	0,9592	0,9667
6F NO1	1	0,9978
6F NO2	1	1
7F OP	0,9645	0,9695
7F NO1	1	0,9999
7F NO2	1	0,9986

\*\* 4F OP – Delineamento  $2^4$  Ordem Padrão; 4F NO15 – Delineamento  $2^4$  Nova Ordem 15; 5F OP – Delineamento  $2^5$  Ordem Padrão; 5F NO1 – Delineamento  $2^5$  Nova Ordem 1; 5F NO2 – Delineamento  $2^5$  Nova Ordem 2; 6F OP – Delineamento  $2^6$  Ordem Padrão; 6F NO1 – Delineamento  $2^6$  Nova Ordem 1; 6F NO2 – Delineamento  $2^6$  Nova Ordem 2; 7F OP – Delineamento  $2^7$  Ordem Padrão; 7F NO1 – Delineamento  $2^7$  Nova Ordem 1; 7F NO2 – Delineamento  $2^7$  Nova Ordem 2.

Com exceção dos delineamentos que apresentaram eficiência igual a 1, ou seja, aqueles em que o algoritmo retornou a própria matriz de entrada, todos obtiveram ganho em relação aos critérios A e D. Além disso, a covariável de ordem que foi acrescentada à matriz não prejudicou a eficiência dos delineamentos, já que as matrizes obtidas apresentaram eficiência semelhante a eficiência dos delineamentos sem a covariável, permanecendo próximas de 1.

Assim como ocorreu com os delineamentos obtidos pelo algoritmo *exchange*, observa-se que os delineamentos de Nova Ordem herdaram propriedades ótimas. Tal fato pode ser observado na Tabela 17, pois todos os delineamentos obtidos a partir das matrizes de Nova Ordem apresentam maior proximidade em relação aos delineamentos de referência.

A Tabela 18 fornece um resumo dos valores dos critérios A-ótimo e D-ótimo para os delineamentos de referência, que são aqueles a partir dos quais os delineamentos ótimos foram obtidos pelo algoritmo *simulated annealing* e os valores dos critérios para as ordens obtidas.

Tabela 18 – Valores dos critérios A-ótimo e D-ótimo para os delineamentos de referência e para os delineamentos obtidos pelo algoritmo *simulated annealing* (SA).

Delineamentos**	Valores de referência		Valores obtidos ( <i>annealing</i> )	
	A <sub>SA</sub>	D <sub>SA</sub>	A <sub>SA</sub>	D <sub>SA</sub>
4F OP	0,269247	75.759.616	0,250394	97.714.176
4F NO15	0,252049	95.944.704	0,251775	96.813.056
5F OP	0,166150	292.326.211.584	0,158372	372.982.627.328
5F NO1	0,157541	369.669.177.344	-	372.514.765.824
5F NO2	0,158756	360.621.277.184	0,158210	371.987.251.200
6F OP	0,098813	4,645437 x 10 <sup>15</sup>	0,094782	5,889884 x 10 <sup>15</sup>
6F NO1	0,094501	5,868678 x 10 <sup>15</sup>	-	5,959861 x 10 <sup>15</sup>
6F NO2	0,094471	5,879501 x 10 <sup>15</sup>	-	-
7F OP	0,057253	2,997776 x 10 <sup>20</sup>	0,055220	3,839823 x 10 <sup>20</sup>
7F NO1	0,055015	3,822046 x 10 <sup>20</sup>	-	3,824842 x 10 <sup>20</sup>
7F NO2	0,055024	3,817794 x 10 <sup>20</sup>	-	3,862101 x 10 <sup>20</sup>

\*\* 4F OP – Delineamento 2<sup>4</sup> Ordem Padrão; 4F NO15 – Delineamento 2<sup>4</sup> Nova Ordem 15;  
 5F OP – Delineamento 2<sup>5</sup> Ordem Padrão; 5F NO1 – Delineamento 2<sup>5</sup> Nova Ordem 1;  
 5F NO2 – Delineamento 2<sup>5</sup> Nova Ordem 2; 6F OP – Delineamento 2<sup>6</sup> Ordem Padrão;  
 6F NO1 – Delineamento 2<sup>6</sup> Nova Ordem 1; 6F NO2 – Delineamento 2<sup>6</sup> Nova Ordem 2;  
 7F OP – Delineamento 2<sup>7</sup> Ordem Padrão; 7F NO1 – Delineamento 2<sup>7</sup> Nova Ordem 1;  
 7F NO2 – Delineamento 2<sup>7</sup> Nova Ordem 2.

Em relação aos valores dos critérios de otimalidade para os delineamentos 2<sup>4</sup> e considerando a busca a partir da matriz na Ordem Padrão, foi obtida a matriz com ordem de execução apresentada na Tabela 47 do Apêndice A e valor do critério A-ótimo igual a

0,250934. Para o critério D-ótimo, foi obtida a ordem de execução apresentada na Tabela 48 do Apêndice A e o valor do critério foi igual a 97.714.176.

A busca por delineamentos ótimos a partir da matriz 4F NO15, que foi a que mais se destacou em relação aos valores dos critérios quando utilizado o algoritmo *exchange*, obteve as matrizes apresentadas nas Tabelas 49 e 50 do Apêndice A, e valores para os critérios A-ótimo e D-ótimo de 0,251775 e 96.813.056, respectivamente. Ambas obtiveram valores para os critérios piores do que as obtidas a partir da matriz na Ordem Padrão.

Para os delineamentos  $2^5$ , os valores para os critérios A-ótimo e D-ótimo obtidos a partir da Ordem Padrão foram 0,158372 e 372.982.627.328, e as ordens de execução são apresentadas nas Tabelas 51 e 52 do Apêndice A, respectivamente.

A busca pelos delineamentos A-ótimos a partir das 2 ordens sementes obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012), apresentadas na Tabela 23 do Anexo A, obteve somente uma matriz, já que quando a matriz de entrada foi a 5F NO1 o algoritmo retornou a própria matriz como resultado. A matriz obtida a partir da matriz 5F NO2 é apresentada na Tabela 53 do Apêndice A, e o valor para o critério A é igual a 0,158210, ou seja, melhor (menor) que o da matriz obtida a partir da Ordem Padrão. Ao considerar o critério D-ótimo, as duas ordens obtidas são apresentadas na Tabela 54 do Apêndice A, e os valores para o critério são 372.514.765.824 e 371.987.251.200, respectivamente. Ambas obtiveram valores para o critério D piores (menores) do que a obtida a partir da matriz na Ordem Padrão.

Considerando os delineamentos  $2^6$ , os valores para os critérios A-ótimo e D-ótimo obtidos a partir da Ordem Padrão foram 0,094782 e  $5,889884 \times 10^{15}$ , e as Tabelas 55 e 56 do Apêndice A apresentam, respectivamente, as ordens de execução.

A busca pelos delineamentos A-ótimos a partir das 2 ordens sementes obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012), apresentadas na Tabela 24 do Anexo A, não obteve nenhuma matriz, pois o algoritmo retornou as próprias matrizes de entrada, ou seja, não encontrou matrizes melhores em relação ao critério. Ao considerar o critério D-ótimo, foi obtida somente uma matriz, já que quando a matriz de entrada foi a 6F NO2 o algoritmo retornou a própria matriz como resultado. A ordem obtida a partir da matriz 6F NO1 é apresentada na Tabela 57 do Apêndice A, e o valor para o critério D é igual a  $5,959861 \times 10^{15}$ , ou seja, melhor (maior) que o da matriz obtida a partir da Ordem Padrão.

Ao considerar os delineamentos  $2^7$ , os valores para os critérios A-ótimo e D-ótimo obtidos a partir da Ordem Padrão foram 0,055220 e  $3,839823 \times 10^{20}$ , e as ordens de execução são apresentadas nas Tabelas 58 e 59 do Apêndice A, respectivamente.

Considerando a busca por delineamentos A-ótimos a partir das 2 ordens obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012), apresentadas na Tabela 25 do Anexo A, o algoritmo retornou as mesmas matrizes de entrada, ou seja, não obteve matrizes melhores em relação ao critério. Ao considerar o critério D-ótimo, as duas ordens obtidas estão apresentadas na Tabela 60 do Apêndice A, e os valores para o critério são  $3,824842 \times 10^{20}$  e  $3,862101 \times 10^{20}$ , respectivamente. Apenas o valor obtido para a segunda matriz (7F NO2) foi melhor (maior) do que o da matriz obtida a partir da Ordem Padrão.

As Tabelas 19 e 20 apresentam, respectivamente, os valores das Variâncias das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) e o Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV) para as ordens de execução obtidas pelo algoritmo *simulated annealing*.

Assim como ocorreu no caso das matrizes obtidas pelo algoritmo *exchange*, observa-se que a medida em que o tamanho do delineamento aumenta, o valor do VEEF é reduzido. Comparando os valores com aqueles obtidos anteriormente, nas Tabelas 15 e 16, observa-se que eles se mostram próximos.

De modo geral, os algoritmos *exchange* e *simulated annealing* obtiveram resultados próximos, em se tratando dos critérios de otimalidade A e D, para todos os delineamentos. Por outro lado, as ordens de execução obtidas se diferem bastante, ficando a cargo do pesquisador escolher aquela que, na prática, seja mais adequada diante de determinado experimento. É importante ressaltar que, da forma como foram implementados ambos os algoritmos, as ordens obtidas pelo algoritmo *exchange* consideram todos os tratamentos e, por outro lado, o algoritmo *simulated annealing* repete alguns tratamentos em detrimento de outros.

Observa-se também que, para todos os delineamentos avaliados, os valores dos critérios A e D apresentaram uma variação considerável. Algumas ordens de execução se destacaram com valores ótimos para o critério A e D, sendo que essas podem ser sugeridas como as melhores. Porém, nada impede que na prática, o pesquisador utilize qualquer uma das outras obtidas. A escolha dependerá do experimento, pois ele determinará se é possível ou não trabalhar com maior variabilidade, mesmo que o ideal seja sempre uma variância tão baixa quanto possível.

Tabela 19 – Variância das Estimativas dos Efeitos dos Fatores (VEEF) para os delineamentos obtidos pelo algoritmo *simulated annealing* (SA).

Delineamento 2 <sup>7</sup>							
Matrizes	Fatores						
	A	B	C	D	E	F	G
7F OP	0,007813	0,007814	0,007820	0,007843	0,007933	0,008293	0,009735
7F NO1	0,007813	0,007827	0,007876	0,007878	0,007834	0,007893	0,007893
7F NO2	0,007813	0,007832	0,007871	0,007882	0,007840	0,007895	0,007891
7F OP A <sub>SA</sub>	0,007888	0,007863	0,007874	0,007902	0,007858	0,007899	0,007934
7F NO1 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
7F NO2 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
7F OP D <sub>SA</sub>	0,007873	0,007851	0,007903	0,007934	0,007923	0,007857	0,007851
7F NO1 D <sub>SA</sub>	0,007913	0,007897	0,007918	0,007879	0,007942	0,007883	0,007871
7F NO2 D <sub>SA</sub>	0,007839	0,007839	0,007883	0,007885	0,007840	0,007905	0,007871
Delineamento 2 <sup>6</sup>							
6F OP	0,015629	0,015640	0,015684	0,015862	0,016572	0,019412	-
6F NO1	0,015675	0,015722	0,015774	0,015706	0,015801	0,015812	-
6F NO2	0,015675	0,015709	0,015773	0,015706	0,015784	0,015812	-
6F OP A <sub>SA</sub>	0,015665	0,015749	0,015883	0,015827	0,015805	0,015842	-
6F NO1 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
6F NO2 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
6F OP D <sub>SA</sub>	0,015764	0,015960	0,015763	0,015758	0,015874	0,015779	-
6F NO1 D <sub>SA</sub>	0,015708	0,015778	0,015758	0,015889	0,015760	0,015792	-
6F NO2 D <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
Delineamento 2 <sup>5</sup>							
5F OP	0,031279	0,031365	0,031709	0,033087	0,038596	-	-
5F NO1	0,031710	0,031613	0,031273	0,031285	0,031569	-	-
5F NO2	0,031285	0,031613	0,031710	0,031273	0,031569	-	-
5F OP A <sub>SA</sub>	0,031698	0,031611	0,031836	0,031625	0,031512	-	-
5F NO1 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
5F NO2 A <sub>SA</sub>	0,031539	0,031679	0,031526	0,031832	0,031544	-	-
5F OP D <sub>SA</sub>	0,031737	0,031515	0,031525	0,031510	0,031625	-	-
5F NO1 D <sub>SA</sub>	0,031499	0,031570	0,031591	0,031655	0,031621	-	-
5F NO2 D <sub>SA</sub>	0,031637	0,031626	0,031645	0,031500	0,031573	-	-
Delineamento 2 <sup>4</sup>							
4F OP	0,062716	0,063365	0,065960	0,076341	-	-	-
4F NO15	0,063183	0,0625	0,063183	0,0625	-	-	-
4F OP A <sub>SA</sub>	0,062500	0,062500	0,062668	0,062594	-	-	-
4F NO15 A <sub>SA</sub>	0,063021	0,063021	0,062511	0,062543	-	-	-
4F OP D <sub>SA</sub>	0,062500	0,062668	0,062500	0,062542	-	-	-
4F NO15 D <sub>SA</sub>	0,062765	0,062595	0,062764	0,062669	-	-	-

Tabela 20 – Máximo do Absoluto do Viés de Ordem (MBAV) para os delineamentos obtidos pelo algoritmo *simulated annealing* (SA).

Delineamento 2 <sup>7</sup>							
Matrizes	Fatores						
	A	B	C	D	E	F	G
7F OP	1	2	4	8	16	32	64
7F NO1	1	6,25	13,125	13,375	7,5625	14,75	14,8125
7F NO2	0,5	7,1875	12,625	13,6875	8,5625	14,9375	14,625
7F OP A <sub>SA</sub>	0,391485	0,782014	1,578510	0,218964	4,8	2,990947	4,079121
7F NO1 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
7F NO2 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
7F OP D <sub>SA</sub>	0,062561	14,950626	11,665025	0,609524	1,080499	6,130987	8,998270
7F NO1 D <sub>SA</sub>	1,470186	14,912320	8,477028	6,381232	1,094819	3,499507	1,393687
7F NO2 D <sub>SA</sub>	14,38095	0,25	7,876197	3,391453	6,776471	11,14616	1,063539
Delineamento 2 <sup>6</sup>							
6F OP	1	2	4	8	16	32	-
6F NO1	4,125	5,75	7,125	5,25	7,75	8	-
6F NO2	4,125	5,375	7,125	5,25	7,375	8	-
6F OP A <sub>SA</sub>	6,349206	0,281525	0,281525	0,062745	1,882353	4,141176	-
6F NO1 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
6F NO2 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
6F OP D <sub>SA</sub>	15,064615	6,913001	2,5	3,847507	8,571429	2,220919	-
6F NO1 D <sub>SA</sub>	0,406647	1,375	0,4375	2,949020	3,952941	1,443137	-
6F NO2 D <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
Delineamento 2 <sup>5</sup>							
5F OP	1	2	4	8	16	-	-
5F NO1	4,5	4	1	1,25	3,75	-	-
5F NO2	1,25	4	4,5	1	3,75	-	-
5F OP A <sub>SA</sub>	0,188235	2,031750	4	2,070590	3,555556	-	-
5F NO1 A <sub>SA</sub>	-	-	-	-	-	-	-
5F NO2 A <sub>SA</sub>	2,539683	4,728745	1,375	1,066667	1,125	-	-
5F OP D <sub>SA</sub>	0,062745	8	3,174603	3,555556	1,568627	-	-
5F NO1 D <sub>SA</sub>	0,125	6,933333	2,031746	0,815686	1,945098	-	-
5F NO2 D <sub>SA</sub>	3,174603	0,5	0,564706	2,070588	0,188235	-	-
Delineamento 2 <sup>4</sup>							
4F OP	1	2	4	8	-	-	-
4F NO15	4	4	4	4	-	-	-
4F OP A <sub>SA</sub>	2,158730	2,158730	3,174603	1,396825	-	-	-
4F NO15 A <sub>SA</sub>	0,380952	0,380952	1,904762	2,666667	-	-	-
4F OP D <sub>SA</sub>	0	1	0	0,5	-	-	-
4F NO15 D <sub>SA</sub>	0,888889	1,396825	3,428571	1,142857	-	-	-

O comportamento das medidas VEEF e MBAV, diferente do que ocorreu com as matrizes na Ordem Padrão e com as matrizes obtidas pelo algoritmo *exchange*, não



apresentou relação direta como pode ser observado nas Tabelas 19 e 20 e nas Figuras 8 e 9, que ilustram o comportamento de ambas as medidas para os delineamentos obtidos a partir da Ordem Padrão.

Figura 8 – Comportamento do VEEF e MBAV para os delineamentos A-ótimos obtidos pelo algoritmo *simulated annealing* a partir da Ordem Padrão.

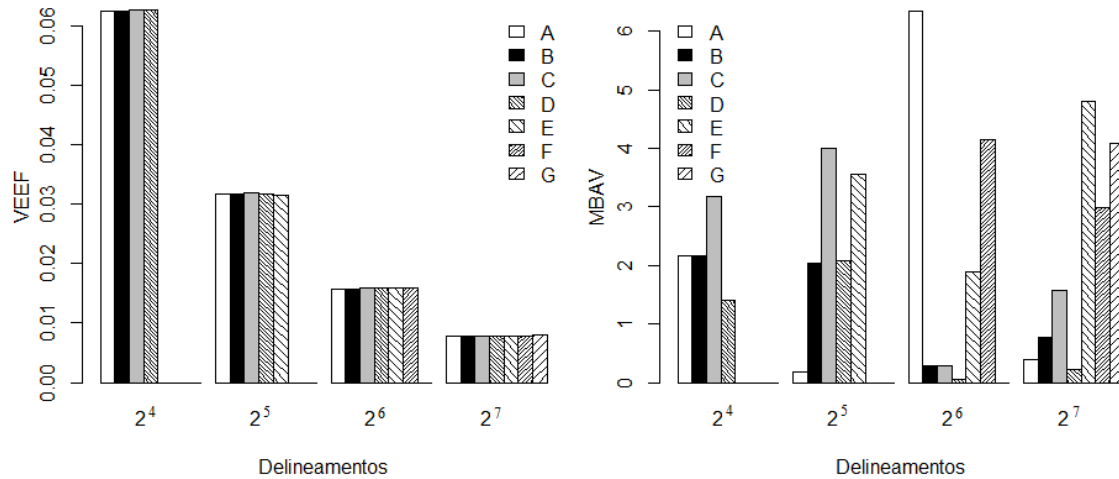
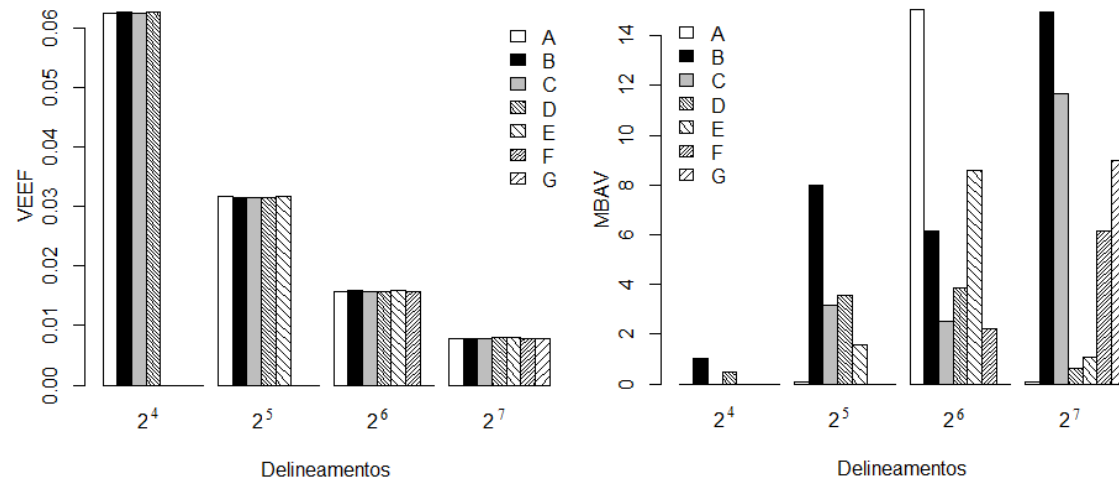


Figura 9 – Comportamento do VEEF e MBAV para os delineamentos D-ótimos obtidos pelo algoritmo *simulated annealing* a partir da Ordem Padrão.



O que pode justificar tal comportamento é que tanto as matrizes na Ordem Padrão, quanto àquelas obtidas pelo algoritmo *exchange*, são compostas por todos os tratamentos, já àquelas obtidas pelo algoritmo *simulated annealing*, da forma como foi implementado, apresentam repetições de alguns tratamentos em detrimento de outros.

Ainda com relação ao VEEF e MBAV, são medidas úteis na escolha da ordem de execução, sendo mais conveniente a escolha por aquelas ordens que apresentam menores valores para ambas, pois isso implicará em menor variabilidade.

## 5. CONCLUSÃO

Como proposto, foi realizado o estudo de otimização e os resultados com relação à eficiência dos delineamentos mostraram que, no geral, houve ganho de eficiência em relação aos critérios A e D.

Os delineamentos de Nova Ordem propostos por Adams, Cintas e Llabrés (2005) e Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) herdaram propriedades ótimas em relação aos critérios A e D.

O VEEF e o MBAV apresentaram relação direta para os delineamentos compostos por todos os tratamentos. O mesmo não aconteceu para aqueles que apresentaram repetição de alguns tratamentos em detrimento de outros.

Tanto as matrizes de Nova Ordem quanto as A-ótimas e D-ótimas obtidas a partir das matrizes de Nova Ordem estabilizaram de forma razoável a variância das estimativas dos efeitos dos fatores.

Foram obtidas matrizes A-ótimas e D-ótimas para os delineamentos  $2^3$ ,  $2^4$ ,  $2^5$ ,  $2^6$  e  $2^7$ , que na prática, podem fornecer ótimos resultados. Todas essas ordens estão disponibilizadas em anexo.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ADAMS, G. de L.; CINTAS, P. G.; LLABRÉS, X. T-M. Experimentation order in factorial designs with 8 or 16 runs. **Journal of Applied Statistics**, [s.l.], v. 32, n. 3, p.297-313, abr. 2005. Informa UK Limited. <http://dx.doi.org/10.1080/02664760500054731>.
- ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N.; TOBIAS, R. D. **Optimum experimental designs, with SAS**. Oxford University Press, 2007. 511 p.
- ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N. The construction of exact D-optimum experimental designs with application to blocking response surface designs. **Biometrika**, v. 76, n. 3, p. 515-526, 1989.
- BANZATTO, D. A.; KRONKA, S. do N. **Experimentação Agrícola**. 4. ed. Jaboticabal: Funep, 2006. 237 p.
- BORTOLINI, J. **Estudo de experimentos fatoriais 2k aplicados em um processo industrial**. 2012. 143 p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária) - Universidade Federal de Lavras, 2012.
- BOX, G. E. P.; HUNTER, J. S.; HUNTER, W. G. **Statistics for experimenters: design, innovation, and discovery**. 2nd ed. Hoboken, NJ: J. Wiley, 2005. xvii, 639 p. (Wiley series in probability and statistics ;).
- BROOKS, S. P.; MORGAN, B. JT. Optimization using simulated annealing. **The Statistician**, p. 241-257, 1995.
- CHARNET, R. et al. **Análise de modelos de regressão linear: com aplicações**. 2. ed. Campinas, SP: Ed. da UNICAMP, 2008. v, 356 p.
- CIRILLO, M. A. **Otimização na experimentação: aplicações nas engenharias e ciências agrárias**. Lavras, MG: Ed. UFLA, 2015. 226 p.
- COLEMAN, D. E.; MONTGOMERY, D. C. A systematic approach to planning for a designed industrial experiment. **Technometrics**, v. 35, n. 1, p. 1-12, 1993.
- COOK, R. D.; NACHTSHEIM, C. J. A Comparison of Algorithms for Constructing Exact D-optimal Designs. **Technometrics**, v. 22, n. 3, p. 315-324, 1980.
- CORREA, A. A.; GRIMA, P.; TORT-MARTORELL, X. Experimentation order in factorial designs: new findings. **Journal Of Applied Statistics**, [s.l.], v. 39, n. 7, p.1577-1591, jul. 2012. Informa UK Limited. <http://dx.doi.org/10.1080/02664763.2012.661706>.
- DICKINSON, A. W. Some orders requiring a minimum number of factor level changes for  $2^4$  and  $2^5$  main effects plans, **Technometrics**. v. 16, p. 31-37, 1974.
- ELLIOTT, L. J.; ECCLESTON, J. A.; MARTIN, R. J. An algorithm for the design of factorial experiments when the data are correlated. **Statistics and Computing**, v. 9, n. 3, p. 195-201, 1999.

FEDOROV, V. V. Theory of optimal experiments. **Academic Press**, 1972.

FISHER, R. A. (1966) **Design of Experiments**, 8th edn (Hafner: Macmillan).

FRANCESCHINI, G.; MACCHIETTO, S. Model-based design of experiments for parameter precision: State of the art. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 19, p. 4846-4872, 2008.

GOOS, P.; JONES, B. **Optimal design of experiments: a case study approach**. John Wiley & Sons, 2011. 287 p.

JOHNSON, D. S.; ARAGON, C. R.; McGEOCH, L. A.; SCHEVON, C. Optimization by simulated annealing: an experimental evaluation; part I, graph partitioning. **Operations research**, v. 37, n. 6, p. 865-892, 1989.

JOHNSON, M. E.; NACHTSHEIM, C. J. Some Guidelines for Constructing Exact D-Optimal Designs on Convex Design Spaces. **Technometrics**, v. 25, n.3, p. 271-277, 1983.

KHINKIS, Leonid A. et al. Optimal design for estimating parameters of the 4-parameter hill model. **Nonlinearity in biology, toxicology, medicine**, v. 1, n. 3, p. 363-377, jul. 2003.  
<http://dx.doi.org/10.1080/15401420390249925>.

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

KIRKPATRICK, S.; GELATT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by Simulated Annealing. **Science. New Series**, v. 220, n. 4598, p. 671-680, 1983.

LEDESMA S.; RUIZ J.; GARCIA G. Simulated annealing evolution. **Simulated annealing - advances, applications and hybridizations**. InTech Publishing; 2012.

LORANCA, M. B. B.; AVENDAÑO, D. P. Evaluating factorial experiments with simulated annealing for territorial optimization. **Journal of Applied Operational Research**, v. 4, n. 2, p. 91-108, 2012.

MEYER, R. K; NACHTSHEIM, C. J. The Coordinate-Exchange Algorithm for Constructing Exact Optimal Experimental Designs. **Technometrics**, v. 37, n.1, p. 60-69, 1995.

MONTGOMERY, D. C. **Design and analysis of experiments**. John Wiley & Sons, 2017.

PONCE DE LEON, A.C.M.. **Optimum experimental design for model discrimination and generalized linear models**. 1993. Tese (Doutorado). London School of Economics and Political Science, United Kingdom. 1993.

PUKELSHEIM, F. **Optimal design of experiments**. siam, 1993.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. **R: A language and environment for statistical computing**. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2018.

RADY, E. A.; EL-MONSEF, M. M. E. A.; SEYAM, M. M. Relationships among several optimality criteria. **InterStat**, v. 247, p. 1-11, 2009.

RYAN, T. P. **Modern experimental design**. Hoboken, NJ: Wiley-Interscience, c2007. xvi, 593 p. (Wiley series in probability and statistics ;).

SUDARSANAM, N.; FREY, D. D. Using ensemble techniques to advance adaptive one-factor-at-a-time experimentation. **Quality and Reliability Engineering International**, v. 27, n. 7, p. 947-957, 2011.

WU, CF J.; HAMADA, M. S. **Experiments: planning, analysis, and optimization**. 2nd ed. John Wiley & Sons, 2015.

YANG, J.; MANDAL, A.; MAJUMDAR, D. Optimal designs for  $2^k$  factorial experiments with binary response. **Statistica Sinica**, p. 385-411, 2016.



Tabela 23 – Ordens semente com número mínimo de mudanças dos níveis e menor valor do MBAV para delineamentos  $2^5$ , encontradas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012) por meio da busca exaustiva.

#1				#2			
1 <sup>(1)</sup>	13 <sup>(9)</sup>	30 <sup>(17)</sup>	7 <sup>(25)</sup>	1 <sup>(1)</sup>	19 <sup>(9)</sup>	16 <sup>(17)</sup>	28 <sup>(25)</sup>
2 <sup>(2)</sup>	29 <sup>(10)</sup>	26 <sup>(18)</sup>	5 <sup>(26)</sup>	2 <sup>(2)</sup>	3 <sup>(10)</sup>	15 <sup>(18)</sup>	20 <sup>(26)</sup>
4 <sup>(3)</sup>	21 <sup>(11)</sup>	28 <sup>(19)</sup>	6 <sup>(27)</sup>	18 <sup>(3)</sup>	11 <sup>(11)</sup>	7 <sup>(19)</sup>	24 <sup>(27)</sup>
8 <sup>(4)</sup>	22 <sup>(12)</sup>	27 <sup>(20)</sup>	14 <sup>(28)</sup>	22 <sup>(4)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	5 <sup>(20)</sup>	32 <sup>(28)</sup>
16 <sup>(5)</sup>	18 <sup>(13)</sup>	31 <sup>(21)</sup>	10 <sup>(29)</sup>	30 <sup>(5)</sup>	4 <sup>(13)</sup>	13 <sup>(21)</sup>	31 <sup>(29)</sup>
12 <sup>(6)</sup>	20 <sup>(14)</sup>	23 <sup>(22)</sup>	9 <sup>(30)</sup>	29 <sup>(6)</sup>	8 <sup>(14)</sup>	9 <sup>(22)</sup>	23 <sup>(30)</sup>
11 <sup>(7)</sup>	24 <sup>(15)</sup>	19 <sup>(23)</sup>	25 <sup>(31)</sup>	25 <sup>(7)</sup>	6 <sup>(15)</sup>	10 <sup>(23)</sup>	21 <sup>(31)</sup>
15 <sup>(8)</sup>	32 <sup>(16)</sup>	3 <sup>(24)</sup>	17 <sup>(32)</sup>	27 <sup>(8)</sup>	14 <sup>(16)</sup>	26 <sup>(24)</sup>	17 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 24 – Ordens que oferecem o mínimo valor do MBAV encontradas pelo algoritmo de Dickinson com alimentação forçada para delineamentos  $2^6$  obtidas por de Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1				#2			
1 <sup>(1)</sup>	13 <sup>(17)</sup>	37 <sup>(33)</sup>	52 <sup>(49)</sup>	1 <sup>(1)</sup>	13 <sup>(17)</sup>	37 <sup>(33)</sup>	52 <sup>(49)</sup>
2 <sup>(2)</sup>	9 <sup>(18)</sup>	45 <sup>(34)</sup>	51 <sup>(50)</sup>	2 <sup>(2)</sup>	9 <sup>(18)</sup>	45 <sup>(34)</sup>	51 <sup>(50)</sup>
34 <sup>(3)</sup>	25 <sup>(19)</sup>	47 <sup>(35)</sup>	35 <sup>(51)</sup>	34 <sup>(3)</sup>	25 <sup>(19)</sup>	61 <sup>(35)</sup>	35 <sup>(51)</sup>
36 <sup>(4)</sup>	26 <sup>(20)</sup>	15 <sup>(36)</sup>	33 <sup>(52)</sup>	36 <sup>(4)</sup>	26 <sup>(20)</sup>	29 <sup>(36)</sup>	33 <sup>(52)</sup>
4 <sup>(5)</sup>	58 <sup>(21)</sup>	31 <sup>(37)</sup>	41 <sup>(53)</sup>	4 <sup>(5)</sup>	58 <sup>(21)</sup>	31 <sup>(37)</sup>	41 <sup>(53)</sup>
20 <sup>(6)</sup>	62 <sup>(22)</sup>	29 <sup>(38)</sup>	42 <sup>(54)</sup>	20 <sup>(6)</sup>	62 <sup>(22)</sup>	15 <sup>(38)</sup>	42 <sup>(54)</sup>
24 <sup>(7)</sup>	54 <sup>(23)</sup>	61 <sup>(39)</sup>	10 <sup>(55)</sup>	24 <sup>(7)</sup>	54 <sup>(23)</sup>	47 <sup>(39)</sup>	10 <sup>(55)</sup>
8 <sup>(8)</sup>	53 <sup>(24)</sup>	63 <sup>(40)</sup>	14 <sup>(56)</sup>	8 <sup>(8)</sup>	53 <sup>(24)</sup>	63 <sup>(40)</sup>	14 <sup>(56)</sup>
16 <sup>(9)</sup>	49 <sup>(25)</sup>	64 <sup>(41)</sup>	46 <sup>(57)</sup>	16 <sup>(9)</sup>	49 <sup>(25)</sup>	64 <sup>(41)</sup>	46 <sup>(57)</sup>
12 <sup>(10)</sup>	57 <sup>(26)</sup>	56 <sup>(42)</sup>	38 <sup>(58)</sup>	12 <sup>(10)</sup>	57 <sup>(26)</sup>	56 <sup>(42)</sup>	38 <sup>(58)</sup>
11 <sup>(11)</sup>	59 <sup>(27)</sup>	55 <sup>(43)</sup>	6 <sup>(59)</sup>	11 <sup>(11)</sup>	59 <sup>(27)</sup>	55 <sup>(43)</sup>	6 <sup>(59)</sup>
27 <sup>(12)</sup>	43 <sup>(28)</sup>	23 <sup>(44)</sup>	22 <sup>(60)</sup>	27 <sup>(12)</sup>	43 <sup>(28)</sup>	23 <sup>(44)</sup>	22 <sup>(60)</sup>
19 <sup>(13)</sup>	44 <sup>(29)</sup>	21 <sup>(45)</sup>	30 <sup>(61)</sup>	19 <sup>(13)</sup>	44 <sup>(29)</sup>	21 <sup>(45)</sup>	30 <sup>(61)</sup>
3 <sup>(14)</sup>	48 <sup>(30)</sup>	17 <sup>(46)</sup>	32 <sup>(62)</sup>	3 <sup>(14)</sup>	48 <sup>(30)</sup>	17 <sup>(46)</sup>	32 <sup>(62)</sup>
7 <sup>(15)</sup>	40 <sup>(31)</sup>	18 <sup>(47)</sup>	28 <sup>(63)</sup>	7 <sup>(15)</sup>	40 <sup>(31)</sup>	18 <sup>(47)</sup>	28 <sup>(63)</sup>
5 <sup>(16)</sup>	39 <sup>(32)</sup>	50 <sup>(48)</sup>	60 <sup>(64)</sup>	5 <sup>(16)</sup>	39 <sup>(32)</sup>	50 <sup>(48)</sup>	60 <sup>(64)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos



Tabela 25 – Ordens (2) com mínimo MBAV e mínimo número de mudanças para delineamentos  $2^7$  obtidas pelo algoritmo de Dickinson com alimentação forçada obtidas por de Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1				#2			
1 <sup>(1)</sup>	25 <sup>(33)</sup>	73 <sup>(65)</sup>	44 <sup>(97)</sup>	1 <sup>(1)</sup>	25 <sup>(33)</sup>	73 <sup>(65)</sup>	103 <sup>(97)</sup>
2 <sup>(2)</sup>	26 <sup>(34)</sup>	74 <sup>(66)</sup>	12 <sup>(98)</sup>	2 <sup>(2)</sup>	26 <sup>(34)</sup>	74 <sup>(66)</sup>	101 <sup>(98)</sup>
4 <sup>(3)</sup>	18 <sup>(35)</sup>	90 <sup>(67)</sup>	76 <sup>(99)</sup>	4 <sup>(3)</sup>	18 <sup>(35)</sup>	90 <sup>(67)</sup>	69 <sup>(99)</sup>
3 <sup>(4)</sup>	17 <sup>(36)</sup>	89 <sup>(68)</sup>	92 <sup>(100)</sup>	3 <sup>(4)</sup>	17 <sup>(36)</sup>	89 <sup>(68)</sup>	65 <sup>(100)</sup>
67 <sup>(5)</sup>	49 <sup>(37)</sup>	93 <sup>(69)</sup>	91 <sup>(101)</sup>	67 <sup>(5)</sup>	49 <sup>(37)</sup>	93 <sup>(69)</sup>	81 <sup>(101)</sup>
68 <sup>(6)</sup>	50 <sup>(38)</sup>	94 <sup>(70)</sup>	83 <sup>(102)</sup>	68 <sup>(6)</sup>	50 <sup>(38)</sup>	94 <sup>(70)</sup>	83 <sup>(102)</sup>
72 <sup>(7)</sup>	52 <sup>(39)</sup>	30 <sup>(71)</sup>	84 <sup>(103)</sup>	72 <sup>(7)</sup>	52 <sup>(39)</sup>	30 <sup>(71)</sup>	91 <sup>(103)</sup>
71 <sup>(8)</sup>	51 <sup>(40)</sup>	29 <sup>(72)</sup>	82 <sup>(104)</sup>	71 <sup>(8)</sup>	51 <sup>(40)</sup>	29 <sup>(72)</sup>	75 <sup>(104)</sup>
7 <sup>(9)</sup>	115 <sup>(41)</sup>	61 <sup>(73)</sup>	81 <sup>(105)</sup>	7 <sup>(9)</sup>	115 <sup>(41)</sup>	61 <sup>(73)</sup>	76 <sup>(105)</sup>
8 <sup>(10)</sup>	116 <sup>(42)</sup>	62 <sup>(74)</sup>	65 <sup>(106)</sup>	8 <sup>(10)</sup>	116 <sup>(42)</sup>	62 <sup>(74)</sup>	92 <sup>(106)</sup>
40 <sup>(11)</sup>	124 <sup>(43)</sup>	58 <sup>(75)</sup>	66 <sup>(107)</sup>	40 <sup>(11)</sup>	124 <sup>(43)</sup>	58 <sup>(75)</sup>	84 <sup>(107)</sup>
39 <sup>(12)</sup>	123 <sup>(44)</sup>	57 <sup>(76)</sup>	70 <sup>(108)</sup>	39 <sup>(12)</sup>	123 <sup>(44)</sup>	57 <sup>(76)</sup>	82 <sup>(108)</sup>
47 <sup>(13)</sup>	107 <sup>(45)</sup>	121 <sup>(77)</sup>	69 <sup>(109)</sup>	47 <sup>(13)</sup>	107 <sup>(45)</sup>	121 <sup>(77)</sup>	66 <sup>(109)</sup>
48 <sup>(14)</sup>	108 <sup>(46)</sup>	122 <sup>(78)</sup>	101 <sup>(110)</sup>	48 <sup>(14)</sup>	108 <sup>(46)</sup>	122 <sup>(78)</sup>	70 <sup>(110)</sup>
16 <sup>(15)</sup>	106 <sup>(47)</sup>	126 <sup>(79)</sup>	102 <sup>(111)</sup>	16 <sup>(15)</sup>	106 <sup>(47)</sup>	126 <sup>(79)</sup>	102 <sup>(111)</sup>
15 <sup>(16)</sup>	105 <sup>(48)</sup>	125 <sup>(80)</sup>	104 <sup>(112)</sup>	15 <sup>(16)</sup>	105 <sup>(48)</sup>	125 <sup>(80)</sup>	104 <sup>(112)</sup>
31 <sup>(17)</sup>	97 <sup>(49)</sup>	127 <sup>(81)</sup>	100 <sup>(113)</sup>	31 <sup>(17)</sup>	97 <sup>(49)</sup>	127 <sup>(81)</sup>	100 <sup>(113)</sup>
32 <sup>(18)</sup>	98 <sup>(50)</sup>	128 <sup>(82)</sup>	99 <sup>(114)</sup>	32 <sup>(18)</sup>	98 <sup>(50)</sup>	119 <sup>(82)</sup>	99 <sup>(114)</sup>
24 <sup>(19)</sup>	114 <sup>(51)</sup>	120 <sup>(83)</sup>	35 <sup>(115)</sup>	24 <sup>(19)</sup>	114 <sup>(51)</sup>	120 <sup>(83)</sup>	35 <sup>(115)</sup>
23 <sup>(20)</sup>	113 <sup>(52)</sup>	119 <sup>(84)</sup>	43 <sup>(116)</sup>	23 <sup>(20)</sup>	113 <sup>(52)</sup>	128 <sup>(84)</sup>	43 <sup>(116)</sup>
21 <sup>(21)</sup>	117 <sup>(53)</sup>	103 <sup>(85)</sup>	59 <sup>(117)</sup>	21 <sup>(21)</sup>	117 <sup>(53)</sup>	112 <sup>(85)</sup>	11 <sup>(117)</sup>
22 <sup>(22)</sup>	118 <sup>(54)</sup>	111 <sup>(86)</sup>	63 <sup>(118)</sup>	22 <sup>(22)</sup>	118 <sup>(54)</sup>	110 <sup>(86)</sup>	12 <sup>(118)</sup>
54 <sup>(23)</sup>	86 <sup>(55)</sup>	112 <sup>(87)</sup>	55 <sup>(119)</sup>	54 <sup>(23)</sup>	86 <sup>(55)</sup>	46 <sup>(87)</sup>	28 <sup>(119)</sup>
53 <sup>(24)</sup>	85 <sup>(56)</sup>	110 <sup>(88)</sup>	56 <sup>(120)</sup>	53 <sup>(24)</sup>	85 <sup>(56)</sup>	42 <sup>(88)</sup>	60 <sup>(120)</sup>
37 <sup>(25)</sup>	87 <sup>(57)</sup>	109 <sup>(89)</sup>	64 <sup>(121)</sup>	37 <sup>(25)</sup>	87 <sup>(57)</sup>	44 <sup>(89)</sup>	64 <sup>(121)</sup>
38 <sup>(26)</sup>	88 <sup>(58)</sup>	45 <sup>(90)</sup>	60 <sup>(122)</sup>	38 <sup>(26)</sup>	88 <sup>(58)</sup>	36 <sup>(90)</sup>	56 <sup>(122)</sup>
6 <sup>(27)</sup>	96 <sup>(59)</sup>	46 <sup>(91)</sup>	28 <sup>(123)</sup>	6 <sup>(27)</sup>	96 <sup>(59)</sup>	34 <sup>(91)</sup>	55 <sup>(123)</sup>
5 <sup>(28)</sup>	95 <sup>(60)</sup>	42 <sup>(92)</sup>	20 <sup>(124)</sup>	5 <sup>(28)</sup>	95 <sup>(60)</sup>	33 <sup>(92)</sup>	63 <sup>(124)</sup>
13 <sup>(29)</sup>	79 <sup>(61)</sup>	41 <sup>(93)</sup>	19 <sup>(125)</sup>	13 <sup>(29)</sup>	79 <sup>(61)</sup>	41 <sup>(93)</sup>	59 <sup>(125)</sup>
14 <sup>(30)</sup>	80 <sup>(62)</sup>	33 <sup>(94)</sup>	27 <sup>(126)</sup>	14 <sup>(30)</sup>	80 <sup>(62)</sup>	45 <sup>(94)</sup>	27 <sup>(126)</sup>
10 <sup>(31)</sup>	78 <sup>(63)</sup>	34 <sup>(95)</sup>	11 <sup>(127)</sup>	10 <sup>(31)</sup>	78 <sup>(63)</sup>	109 <sup>(95)</sup>	19 <sup>(127)</sup>
9 <sup>(32)</sup>	77 <sup>(64)</sup>	36 <sup>(96)</sup>	75 <sup>(128)</sup>	9 <sup>(32)</sup>	77 <sup>(64)</sup>	111 <sup>(96)</sup>	20 <sup>(128)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

**APÊNDICE A – Matrizes na Ordem Padrão e ordens de execução obtidas pelo  
algoritmo *exchange* e *simulated annealing***

Tabela 26 – Delineamento  $2^3$  na Ordem Padrão.

Ordem Padrão	A	B	C
1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	1	1	-1
5	-1	-1	1
6	1	-1	1
7	-1	1	1
8	1	1	1

Tabela 27 - Ordens A-ótimas e D-ótimas (144) obtidas através de busca exaustiva para o delineamento  $2^3$  (continua).

1	8	8	1	1	7	1	7	1	7	7	1	7	1	1	
8	1	1	8	7	1	7	1	7	1	6	7	1	8	4	4
7	2	2	7	8	2	8	2	6	6	1	4	4	4	8	7
2	7	7	2	2	8	2	8	4	4	4	6	6	5	5	6
6	3	5	4	4	4	6	6	8	2	2	8	2	7	7	8
3	6	4	5	6	6	4	4	2	8	3	2	8	2	6	5
4	5	3	6	5	5	3	3	3	3	8	5	5	6	2	2
5	4	6	3	3	3	5	5	5	5	5	3	3	3	3	3
8	8	5	5	4	4	4	4	4	7	7	7	6	6	6	4
1	5	4	8	5	7	1	7	1	4	4	6	7	4	4	1
5	1	8	4	1	6	7	1	5	1	6	4	4	1	7	5
4	4	1	1	8	1	6	6	8	6	1	1	1	7	1	8
2	2	2	2	7	5	5	5	7	2	2	2	3	3	3	6
7	3	7	3	2	2	8	2	6	5	5	3	2	5	5	7
3	7	3	7	6	3	2	8	2	8	3	5	5	8	2	3
6	6	6	6	3	8	3	3	3	3	8	8	8	2	8	2
4	4	4	4	5	5	8	8	1	1	1	1	6	6	6	1
1	6	6	5	8	4	5	1	4	4	8	6	1	1	7	6
6	1	7	1	4	8	1	5	6	8	4	4	4	7	1	7
7	7	1	8	1	1	4	4	7	5	5	7	7	4	4	4
5	5	5	6	3	3	3	3	8	6	6	8	3	3	3	8
8	3	3	3	2	6	2	6	5	7	3	3	8	8	2	3
3	8	2	7	6	2	6	2	3	3	7	5	5	2	8	2
2	2	8	2	7	7	7	7	2	2	2	2	2	5	5	5
1	6	6	1	1	8	8	1	6	3	3	8	8	3	3	6
6	1	1	6	8	1	1	8	3	6	8	3	3	8	6	3
8	3	3	8	6	3	3	6	1	8	6	1	1	6	8	1
3	8	8	3	3	6	6	3	8	1	1	6	6	1	1	8
7	7	4	4	4	5	2	7	7	2	2	2	5	5	5	4
4	4	7	7	5	4	7	2	2	7	5	5	2	2	4	5
2	2	5	5	7	2	5	4	4	5	7	7	4	4	2	7
5	5	2	2	2	7	4	5	5	4	4	4	7	7	7	2

Tabela 27 – Ordens A-ótimas e D-ótimas (144) obtidas através de busca exaustiva para o delineamento  $2^3$  (conclusão).

6	3	5	4	4	4	6	6	4	5	5	5	3	3	3	6
3	6	4	5	6	6	4	4	5	4	3	3	5	5	6	3
4	5	3	6	5	5	3	3	6	3	4	4	6	6	5	4
5	4	6	3	3	3	5	5	3	6	6	6	4	4	4	5
1	8	8	1	1	7	1	7	7	2	2	8	2	8	2	7
8	1	1	8	7	1	7	1	2	7	8	2	8	2	7	2
7	2	2	7	8	2	8	2	1	8	7	1	7	1	8	1
2	7	7	2	2	8	2	8	8	1	1	7	1	7	1	8
6	6	3	3	3	3	3	5	5	5	8	8	3	3	3	3
7	3	2	2	6	5	5	8	3	3	5	3	8	2	2	8
3	7	5	6	2	2	8	3	2	8	3	5	5	6	8	2
2	2	8	7	7	8	2	2	8	2	2	2	2	7	5	5
4	4	6	5	5	6	6	4	4	4	1	1	6	8	6	6
1	5	7	8	4	4	4	1	6	6	4	6	1	5	7	1
5	1	4	4	8	7	1	6	7	1	6	4	4	1	1	7
8	8	1	1	1	1	7	7	1	7	7	7	7	4	4	4
8	3	6	6	7	7	2	2	8	2	2	2	8	8	5	5
3	6	3	7	2	6	7	8	2	3	3	8	2	5	2	2
2	2	7	3	6	2	3	3	3	8	7	5	5	2	3	8
5	7	2	2	3	3	6	5	5	5	6	3	3	3	8	3
1	8	1	1	1	1	8	7	1	7	8	7	1	1	4	4
6	1	8	4	8	4	1	1	7	6	5	1	7	4	7	7
7	5	4	8	4	8	5	6	6	1	1	4	4	7	6	1
4	4	5	5	5	5	4	4	4	4	4	6	6	6	1	6
5	2	2	2	2	2	7	7	7	2	2	2	5	5	5	4
8	5	5	3	7	3	2	6	2	5	7	5	2	2	4	5
2	8	3	7	3	5	6	2	4	7	5	7	4	4	2	7
3	3	8	6	6	8	3	3	5	4	4	4	7	7	7	2
4	7	7	5	5	7	4	4	6	3	3	8	8	3	3	6
1	4	4	8	4	6	5	1	3	8	6	3	3	8	6	3
7	1	6	4	8	4	1	5	1	6	8	1	1	6	8	1
6	6	1	1	1	1	8	8	8	1	1	6	6	1	1	8
7	7	4	4	4	5	2	7	7	2	2	8	2	8	2	7
4	4	7	5	7	4	7	2	2	7	8	2	8	2	7	2
2	2	5	7	5	2	5	4	1	8	7	1	7	1	8	1
5	5	2	2	2	7	4	5	8	1	1	7	1	7	1	8
1	6	6	1	1	8	8	1	4	5	5	5	3	3	3	6
6	1	1	8	6	1	1	8	5	4	3	3	5	5	6	3
8	3	3	6	8	3	3	6	6	3	4	4	6	6	5	4
3	8	8	3	3	6	6	3	3	6	6	6	4	4	4	5

Tabela 28 – Matriz de delineamento  $2^4$  na Ordem Padrão.

Ordem Padrão	A	B	C	D
1	-1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1	-1
3	-1	1	-1	-1
4	1	1	-1	-1
5	-1	-1	1	-1
6	1	-1	1	-1
7	-1	1	1	-1
8	1	1	1	-1
9	-1	-1	-1	1
10	1	-1	-1	1
11	-1	1	-1	1
12	1	1	-1	1
13	-1	-1	1	1
14	1	-1	1	1
15	-1	1	1	1
16	1	1	1	1

Tabela 29 – Ordem (4F OP A<sub>E</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *exchange* para o delineamento  $2^4$  a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.

#1			
16 <sup>(1)</sup>	2 <sup>(5)</sup>	5 <sup>(9)</sup>	12 <sup>(13)</sup>
14 <sup>(2)</sup>	11 <sup>(6)</sup>	4 <sup>(10)</sup>	15 <sup>(14)</sup>
10 <sup>(3)</sup>	8 <sup>(7)</sup>	1 <sup>(11)</sup>	9 <sup>(15)</sup>
6 <sup>(4)</sup>	3 <sup>(8)</sup>	7 <sup>(12)</sup>	13 <sup>(16)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 30 – Ordem (4F OP D<sub>E</sub>) D-ótima obtida por meio do algoritmo *exchange* para o delineamento  $2^4$  a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.

#1			
1 <sup>(1)</sup>	5 <sup>(5)</sup>	9 <sup>(9)</sup>	13 <sup>(13)</sup>
15 <sup>(2)</sup>	6 <sup>(6)</sup>	10 <sup>(10)</sup>	14 <sup>(14)</sup>
3 <sup>(3)</sup>	7 <sup>(7)</sup>	11 <sup>(11)</sup>	2 <sup>(15)</sup>
4 <sup>(4)</sup>	8 <sup>(8)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	16 <sup>(16)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 31 – Ordens (16) A-ótimas obtidas por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento  $2^4$ , a partir das ordens semente (16) obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005).

#1	#2	#3	#4	#5	#6	#7	#8	#9	#10	#11	#12	#13	#14	#15	#16
2	11	12	15	12	4	5	10	5	4	4	2	14	9	11	4
4	3	2	11	11	1	14	11	14	3	2	16	9	10	6	7
15	13	13	6	15	14	12	7	7	8	16	3	15	12	16	3
5	12	7	8	9	7	11	5	13	1	14	11	13	13	14	11
6	6	8	3	7	11	8	13	2	12	6	8	4	3	3	16
7	1	9	9	13	16	9	14	9	10	3	7	6	5	10	15
14	5	15	12	14	3	16	8	16	15	5	6	7	6	1	13
12	2	6	16	1	9	6	15	1	6	13	1	5	1	7	2
16	15	14	13	3	13	1	16	4	13	10	15	16	14	9	14
9	14	5	2	5	12	15	12	8	9	9	12	3	7	5	6
10	9	16	1	6	15	4	2	12	7	15	5	2	4	8	10
3	4	4	4	16	2	13	4	3	14	11	9	12	11	12	9
8	16	3	10	2	10	7	9	11	11	1	4	1	15	4	1
13	10	1	5	8	5	2	3	6	16	8	14	11	8	13	5
1	7	10	14	10	8	3	1	15	5	7	13	8	2	15	8
11	8	11	7	4	6	10	6	10	2	12	10	10	16	2	12

Tabela 32 – Ordens (16) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento  $2^4$ , a partir das ordens semente (16) obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005).

#1	#2	#3	#4	#5	#6	#7	#8	#9	#10	#11	#12	#13	#14	#15	#16
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	2	2	2	2	2	2	2	13	2	2	2	2	2	2	9
4	4	4	4	4	4	9	4	4	4	10	10	10	10	3	10
3	8	3	8	8	8	12	7	12	12	12	12	14	5	14	14
11	11	11	16	16	11	11	11	11	16	4	4	16	16	16	16
12	12	14	10	15	3	3	3	3	8	14	7	12	12	15	15
16	16	7	11	7	7	7	12	7	7	7	3	4	11	7	11
8	15	8	3	3	5	8	15	15	3	5	8	3	15	10	12
7	7	16	7	11	13	16	13	16	11	13	16	11	7	11	4
15	3	12	15	12	15	15	5	8	5	3	14	15	3	12	3
6	6	10	13	6	16	13	6	6	13	6	6	9	4	4	7
5	5	15	5	14	12	5	8	5	15	8	5	8	8	8	8
13	13	6	6	10	6	6	16	2	6	16	13	6	6	6	6
14	14	5	14	5	14	14	14	14	14	15	15	5	14	5	5
10	10	13	12	13	10	10	10	10	10	11	11	13	13	13	13
9	9	9	9	9	9	4	9	9	9	9	9	7	9	9	2

Tabela 33 – Valores do Critério A e D para as 16 ordens obtidas a partir das ordens semente (16) obtidas por Adams, Cintas, Llabrés (2005) para o delineamento 2<sup>4</sup>.

Ordem	Valor para Critério A	Valor para Critério D
#1	0,253932	84279296
#2	0,254249	87425024
#3	0,252259	87425024
#4	0,253285	90816512
#5	0,260431	86900736
#6	0,253469	85327872
#7	0,252493	90783744
#8	0,254249	86392832
#9	0,254712	91045888
#10	0,254450	87293952
#11	0,254261	88604672
#12	0,255842	85966848
#13	0,254856	85803008
#14	0,256705	95027200
#15	0,250859	96026624
#16	0,254108	90308608

Tabela 34 – Matriz de delineamento  $2^5$  na Ordem Padrão.

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

Tabela 35 – Ordem (5F OP A<sub>E</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *exchange* para o delineamento  $2^5$  a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.

#1							
1 <sup>(1)</sup>	22 <sup>(5)</sup>	29 <sup>(9)</sup>	31 <sup>(13)</sup>	30 <sup>(17)</sup>	26 <sup>(21)</sup>	14 <sup>(25)</sup>	12 <sup>(29)</sup>
10 <sup>(2)</sup>	27 <sup>(6)</sup>	28 <sup>(10)</sup>	21 <sup>(14)</sup>	20 <sup>(18)</sup>	19 <sup>(22)</sup>	2 <sup>(26)</sup>	13 <sup>(30)</sup>
3 <sup>(3)</sup>	32 <sup>(7)</sup>	16 <sup>(11)</sup>	11 <sup>(15)</sup>	25 <sup>(19)</sup>	17 <sup>(23)</sup>	15 <sup>(27)</sup>	18 <sup>(31)</sup>
8 <sup>(4)</sup>	5 <sup>(8)</sup>	23 <sup>(12)</sup>	9 <sup>(16)</sup>	7 <sup>(20)</sup>	4 <sup>(24)</sup>	24 <sup>(28)</sup>	6 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 36 – Ordem (5F OP D<sub>E</sub>) D-ótima obtida por meio do algoritmo *exchange* para o delineamento  $2^5$  a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.

#1							
1 <sup>(1)</sup>	5 <sup>(5)</sup>	9 <sup>(9)</sup>	13 <sup>(13)</sup>	17 <sup>(17)</sup>	21 <sup>(21)</sup>	25 <sup>(25)</sup>	29 <sup>(29)</sup>
2 <sup>(2)</sup>	6 <sup>(6)</sup>	10 <sup>(10)</sup>	14 <sup>(14)</sup>	18 <sup>(18)</sup>	22 <sup>(22)</sup>	26 <sup>(26)</sup>	30 <sup>(30)</sup>
3 <sup>(3)</sup>	7 <sup>(7)</sup>	11 <sup>(11)</sup>	15 <sup>(15)</sup>	19 <sup>(19)</sup>	23 <sup>(23)</sup>	27 <sup>(27)</sup>	4 <sup>(31)</sup>
31 <sup>(4)</sup>	8 <sup>(8)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	16 <sup>(16)</sup>	20 <sup>(20)</sup>	24 <sup>(24)</sup>	28 <sup>(28)</sup>	32 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 37 – Ordens (5F NO1 A<sub>E</sub> e 5F NO2 A<sub>E</sub>) A-ótimas obtidas por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento 2<sup>5</sup>, a partir das ordens semente (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1				#2			
13 <sup>(1)</sup>	4 <sup>(9)</sup>	6 <sup>(17)</sup>	26 <sup>(25)</sup>	11 <sup>(1)</sup>	31 <sup>(9)</sup>	21 <sup>(17)</sup>	15 <sup>(25)</sup>
30 <sup>(2)</sup>	24 <sup>(10)</sup>	12 <sup>(18)</sup>	8 <sup>(26)</sup>	23 <sup>(2)</sup>	7 <sup>(10)</sup>	10 <sup>(18)</sup>	3 <sup>(26)</sup>
5 <sup>(3)</sup>	25 <sup>(11)</sup>	28 <sup>(19)</sup>	14 <sup>(27)</sup>	13 <sup>(3)</sup>	9 <sup>(11)</sup>	26 <sup>(19)</sup>	4 <sup>(27)</sup>
11 <sup>(4)</sup>	3 <sup>(12)</sup>	21 <sup>(20)</sup>	29 <sup>(28)</sup>	24 <sup>(4)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	1 <sup>(20)</sup>	32 <sup>(28)</sup>
16 <sup>(5)</sup>	19 <sup>(13)</sup>	17 <sup>(21)</sup>	15 <sup>(29)</sup>	19 <sup>(5)</sup>	5 <sup>(13)</sup>	25 <sup>(21)</sup>	29 <sup>(29)</sup>
18 <sup>(6)</sup>	1 <sup>(14)</sup>	10 <sup>(22)</sup>	20 <sup>(30)</sup>	17 <sup>(6)</sup>	6 <sup>(14)</sup>	22 <sup>(22)</sup>	20 <sup>(30)</sup>
31 <sup>(7)</sup>	32 <sup>(15)</sup>	22 <sup>(23)</sup>	2 <sup>(31)</sup>	18 <sup>(7)</sup>	28 <sup>(15)</sup>	19 <sup>(23)</sup>	27 <sup>(31)</sup>
23 <sup>(8)</sup>	7 <sup>(16)</sup>	9 <sup>(24)</sup>	27 <sup>(32)</sup>	8 <sup>(8)</sup>	2 <sup>(16)</sup>	30 <sup>(24)</sup>	14 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 38 – Ordens (5F NO1 D<sub>E</sub> e 5F NO2 D<sub>E</sub>) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento 2<sup>5</sup>, a partir das ordens semente (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1				#2			
1 <sup>(1)</sup>	13 <sup>(9)</sup>	30 <sup>(17)</sup>	7 <sup>(25)</sup>	1 <sup>(1)</sup>	19 <sup>(9)</sup>	16 <sup>(17)</sup>	28 <sup>(25)</sup>
15 <sup>(2)</sup>	29 <sup>(10)</sup>	26 <sup>(18)</sup>	5 <sup>(26)</sup>	2 <sup>(2)</sup>	3 <sup>(10)</sup>	15 <sup>(18)</sup>	20 <sup>(26)</sup>
4 <sup>(3)</sup>	21 <sup>(11)</sup>	28 <sup>(19)</sup>	6 <sup>(27)</sup>	18 <sup>(3)</sup>	11 <sup>(11)</sup>	7 <sup>(19)</sup>	24 <sup>(27)</sup>
8 <sup>(4)</sup>	22 <sup>(12)</sup>	27 <sup>(20)</sup>	14 <sup>(28)</sup>	22 <sup>(4)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	5 <sup>(20)</sup>	32 <sup>(28)</sup>
16 <sup>(5)</sup>	18 <sup>(13)</sup>	31 <sup>(21)</sup>	10 <sup>(29)</sup>	30 <sup>(5)</sup>	4 <sup>(13)</sup>	13 <sup>(21)</sup>	31 <sup>(29)</sup>
12 <sup>(6)</sup>	20 <sup>(14)</sup>	23 <sup>(22)</sup>	9 <sup>(30)</sup>	29 <sup>(6)</sup>	8 <sup>(14)</sup>	23 <sup>(22)</sup>	9 <sup>(30)</sup>
11 <sup>(7)</sup>	24 <sup>(15)</sup>	19 <sup>(23)</sup>	25 <sup>(31)</sup>	25 <sup>(7)</sup>	6 <sup>(15)</sup>	10 <sup>(23)</sup>	21 <sup>(31)</sup>
2 <sup>(8)</sup>	32 <sup>(16)</sup>	3 <sup>(24)</sup>	17 <sup>(32)</sup>	27 <sup>(8)</sup>	14 <sup>(16)</sup>	26 <sup>(24)</sup>	17 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 39 – Matriz de delineamento 2<sup>6</sup> na Ordem Padrão (continua).

Ordem Padrão	A	B	C	D	E	F
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1	-1	-1	-1
3	-1	1	-1	-1	-1	-1
4	1	1	-1	-1	-1	-1
5	-1	-1	1	-1	-1	-1
6	1	-1	1	-1	-1	-1
7	-1	1	1	-1	-1	-1
8	1	1	1	-1	-1	-1
9	-1	-1	-1	1	-1	-1
10	1	-1	-1	1	-1	-1
11	-1	1	-1	1	-1	-1
12	1	1	-1	1	-1	-1
13	-1	-1	1	1	-1	-1
14	1	-1	1	1	-1	-1
15	-1	1	1	1	-1	-1
16	1	1	1	1	-1	-1
17	-1	-1	-1	-1	1	-1
18	1	-1	-1	-1	1	-1
19	-1	1	-1	-1	1	-1
20	1	1	-1	-1	1	-1
21	-1	-1	1	-1	1	-1
22	1	-1	1	-1	1	-1
23	-1	1	1	-1	1	-1
24	1	1	1	-1	1	-1



Tabela 39 – Matriz de delineamento  $2^6$  na Ordem Padrão (conclusão).

Ordem Padrão	A	B	C	D	E	F
25	-1	-1	-1	1	1	-1
26	1	-1	-1	1	1	-1
27	-1	1	-1	1	1	-1
28	1	1	-1	1	1	-1
29	-1	-1	1	1	1	-1
30	1	-1	1	1	1	-1
31	-1	1	1	1	1	-1
32	1	1	1	1	1	-1
33	-1	-1	-1	-1	-1	1
34	1	-1	-1	-1	-1	1
35	-1	1	-1	-1	-1	1
36	1	1	-1	-1	-1	1
37	-1	-1	1	-1	-1	1
38	1	-1	1	-1	-1	1
39	-1	1	1	-1	-1	1
40	1	1	1	-1	-1	1
41	-1	-1	-1	1	-1	1
42	1	-1	-1	1	-1	1
43	-1	1	-1	1	-1	1
44	1	1	-1	1	-1	1
45	-1	-1	1	1	-1	1
46	1	-1	1	1	-1	1
47	-1	1	1	1	-1	1
48	1	1	1	1	-1	1
49	-1	-1	-1	-1	1	1
50	1	-1	-1	-1	1	1
51	-1	1	-1	-1	1	1
52	1	1	-1	-1	1	1
53	-1	-1	1	-1	1	1
54	1	-1	1	-1	1	1
55	-1	1	1	-1	1	1
56	1	1	1	-1	1	1
57	-1	-1	-1	1	1	1
58	1	-1	-1	1	1	1
59	-1	1	-1	1	1	1
60	1	1	-1	1	1	1
61	-1	-1	1	1	1	1
62	1	-1	1	1	1	1
63	-1	1	1	1	1	1
64	1	1	1	1	1	1

Tabela 40 – Ordem (6F OP A<sub>E</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *exchange* para o delineamento  $2^6$  a partir da matriz de delineamento na Ordem Padrão.

#1							
36 <sup>(1)</sup>	30 <sup>(9)</sup>	55 <sup>(17)</sup>	19 <sup>(25)</sup>	38 <sup>(33)</sup>	5 <sup>(41)</sup>	41 <sup>(49)</sup>	37 <sup>(57)</sup>
8 <sup>(2)</sup>	49 <sup>(10)</sup>	56 <sup>(18)</sup>	25 <sup>(26)</sup>	7 <sup>(34)</sup>	39 <sup>(42)</sup>	4 <sup>(50)</sup>	51 <sup>(58)</sup>
24 <sup>(3)</sup>	26 <sup>(11)</sup>	53 <sup>(19)</sup>	1 <sup>(27)</sup>	54 <sup>(35)</sup>	6 <sup>(43)</sup>	42 <sup>(51)</sup>	21 <sup>(59)</sup>
33 <sup>(4)</sup>	23 <sup>(12)</sup>	17 <sup>(20)</sup>	52 <sup>(28)</sup>	62 <sup>(36)</sup>	48 <sup>(44)</sup>	31 <sup>(52)</sup>	61 <sup>(60)</sup>
46 <sup>(5)</sup>	20 <sup>(13)</sup>	47 <sup>(21)</sup>	43 <sup>(29)</sup>	45 <sup>(37)</sup>	3 <sup>(45)</sup>	32 <sup>(53)</sup>	29 <sup>(61)</sup>
35 <sup>(6)</sup>	34 <sup>(14)</sup>	18 <sup>(22)</sup>	40 <sup>(30)</sup>	57 <sup>(38)</sup>	14 <sup>(46)</sup>	22 <sup>(54)</sup>	27 <sup>(62)</sup>
50 <sup>(7)</sup>	64 <sup>(15)</sup>	60 <sup>(23)</sup>	13 <sup>(31)</sup>	59 <sup>(39)</sup>	63 <sup>(47)</sup>	58 <sup>(55)</sup>	12 <sup>(63)</sup>
10 <sup>(8)</sup>	44 <sup>(16)</sup>	16 <sup>(24)</sup>	9 <sup>(32)</sup>	28 <sup>(40)</sup>	11 <sup>(48)</sup>	15 <sup>(56)</sup>	2 <sup>(64)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 41 – Ordens (6F NO1 A<sub>E</sub> e 6F NO2 A<sub>E</sub>) A-ótimas obtidas por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento 2<sup>6</sup>, a partir das ordens semente (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1				#2			
17 <sup>(1)</sup>	29 <sup>(17)</sup>	6 <sup>(33)</sup>	62 <sup>(49)</sup>	47 <sup>(1)</sup>	40 <sup>(17)</sup>	62 <sup>(33)</sup>	28 <sup>(49)</sup>
23 <sup>(2)</sup>	11 <sup>(18)</sup>	18 <sup>(34)</sup>	54 <sup>(50)</sup>	6 <sup>(2)</sup>	15 <sup>(18)</sup>	5 <sup>(34)</sup>	9 <sup>(50)</sup>
34 <sup>(3)</sup>	57 <sup>(19)</sup>	52 <sup>(35)</sup>	55 <sup>(51)</sup>	59 <sup>(3)</sup>	64 <sup>(19)</sup>	43 <sup>(35)</sup>	24 <sup>(51)</sup>
40 <sup>(4)</sup>	56 <sup>(20)</sup>	31 <sup>(36)</sup>	20 <sup>(52)</sup>	31 <sup>(4)</sup>	50 <sup>(20)</sup>	3 <sup>(36)</sup>	13 <sup>(52)</sup>
25 <sup>(5)</sup>	36 <sup>(21)</sup>	48 <sup>(37)</sup>	4 <sup>(53)</sup>	26 <sup>(5)</sup>	12 <sup>(21)</sup>	10 <sup>(37)</sup>	25 <sup>(53)</sup>
58 <sup>(6)</sup>	43 <sup>(22)</sup>	3 <sup>(38)</sup>	26 <sup>(54)</sup>	51 <sup>(6)</sup>	39 <sup>(22)</sup>	60 <sup>(38)</sup>	36 <sup>(54)</sup>
1 <sup>(7)</sup>	44 <sup>(23)</sup>	50 <sup>(39)</sup>	45 <sup>(55)</sup>	27 <sup>(7)</sup>	49 <sup>(23)</sup>	45 <sup>(39)</sup>	44 <sup>(55)</sup>
53 <sup>(8)</sup>	35 <sup>(24)</sup>	7 <sup>(40)</sup>	51 <sup>(56)</sup>	34 <sup>(8)</sup>	14 <sup>(24)</sup>	48 <sup>(40)</sup>	52 <sup>(56)</sup>
12 <sup>(9)</sup>	16 <sup>(25)</sup>	59 <sup>(41)</sup>	19 <sup>(57)</sup>	17 <sup>(9)</sup>	8 <sup>(25)</sup>	57 <sup>(41)</sup>	37 <sup>(57)</sup>
64 <sup>(10)</sup>	8 <sup>(26)</sup>	30 <sup>(42)</sup>	42 <sup>(58)</sup>	4 <sup>(10)</sup>	11 <sup>(26)</sup>	54 <sup>(42)</sup>	21 <sup>(58)</sup>
46 <sup>(11)</sup>	22 <sup>(27)</sup>	2 <sup>(43)</sup>	15 <sup>(59)</sup>	22 <sup>(11)</sup>	58 <sup>(27)</sup>	56 <sup>(43)</sup>	23 <sup>(59)</sup>
32 <sup>(12)</sup>	39 <sup>(28)</sup>	27 <sup>(44)</sup>	5 <sup>(60)</sup>	16 <sup>(12)</sup>	55 <sup>(28)</sup>	42 <sup>(44)</sup>	35 <sup>(60)</sup>
63 <sup>(13)</sup>	49 <sup>(29)</sup>	13 <sup>(45)</sup>	60 <sup>(61)</sup>	19 <sup>(13)</sup>	20 <sup>(29)</sup>	46 <sup>(45)</sup>	38 <sup>(61)</sup>
24 <sup>(14)</sup>	9 <sup>(30)</sup>	33 <sup>(46)</sup>	37 <sup>(62)</sup>	7 <sup>(14)</sup>	33 <sup>(30)</sup>	61 <sup>(46)</sup>	30 <sup>(62)</sup>
47 <sup>(15)</sup>	14 <sup>(31)</sup>	28 <sup>(47)</sup>	61 <sup>(63)</sup>	1 <sup>(15)</sup>	41 <sup>(31)</sup>	32 <sup>(47)</sup>	18 <sup>(63)</sup>
38 <sup>(16)</sup>	10 <sup>(32)</sup>	21 <sup>(48)</sup>	41 <sup>(64)</sup>	53 <sup>(16)</sup>	2 <sup>(32)</sup>	29 <sup>(48)</sup>	63 <sup>(64)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 42 – Ordens (6F NO1 D<sub>E</sub> e 6F NO2 D<sub>E</sub>) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento 2<sup>6</sup>, a partir das ordens semente (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1				#2			
1 <sup>(1)</sup>	25 <sup>(17)</sup>	37 <sup>(33)</sup>	52 <sup>(49)</sup>	1 <sup>(1)</sup>	13 <sup>(17)</sup>	37 <sup>(33)</sup>	52 <sup>(49)</sup>
2 <sup>(2)</sup>	9 <sup>(18)</sup>	45 <sup>(34)</sup>	51 <sup>(50)</sup>	2 <sup>(2)</sup>	9 <sup>(18)</sup>	45 <sup>(34)</sup>	51 <sup>(50)</sup>
34 <sup>(3)</sup>	13 <sup>(19)</sup>	47 <sup>(35)</sup>	35 <sup>(51)</sup>	34 <sup>(3)</sup>	25 <sup>(19)</sup>	61 <sup>(35)</sup>	35 <sup>(51)</sup>
36 <sup>(4)</sup>	26 <sup>(20)</sup>	15 <sup>(36)</sup>	33 <sup>(52)</sup>	36 <sup>(4)</sup>	26 <sup>(20)</sup>	29 <sup>(36)</sup>	33 <sup>(52)</sup>
4 <sup>(5)</sup>	58 <sup>(21)</sup>	31 <sup>(37)</sup>	41 <sup>(53)</sup>	4 <sup>(5)</sup>	58 <sup>(21)</sup>	31 <sup>(37)</sup>	41 <sup>(53)</sup>
20 <sup>(6)</sup>	62 <sup>(22)</sup>	29 <sup>(38)</sup>	42 <sup>(54)</sup>	20 <sup>(6)</sup>	62 <sup>(22)</sup>	15 <sup>(38)</sup>	42 <sup>(54)</sup>
24 <sup>(7)</sup>	54 <sup>(23)</sup>	61 <sup>(39)</sup>	10 <sup>(55)</sup>	24 <sup>(7)</sup>	54 <sup>(23)</sup>	47 <sup>(39)</sup>	10 <sup>(55)</sup>
8 <sup>(8)</sup>	53 <sup>(24)</sup>	63 <sup>(40)</sup>	14 <sup>(56)</sup>	8 <sup>(8)</sup>	53 <sup>(24)</sup>	63 <sup>(40)</sup>	14 <sup>(56)</sup>
16 <sup>(9)</sup>	49 <sup>(25)</sup>	64 <sup>(41)</sup>	46 <sup>(57)</sup>	16 <sup>(9)</sup>	49 <sup>(25)</sup>	64 <sup>(41)</sup>	46 <sup>(57)</sup>
12 <sup>(10)</sup>	57 <sup>(26)</sup>	56 <sup>(42)</sup>	38 <sup>(58)</sup>	12 <sup>(10)</sup>	57 <sup>(26)</sup>	56 <sup>(42)</sup>	38 <sup>(58)</sup>
11 <sup>(11)</sup>	59 <sup>(27)</sup>	55 <sup>(43)</sup>	6 <sup>(59)</sup>	11 <sup>(11)</sup>	59 <sup>(27)</sup>	55 <sup>(43)</sup>	6 <sup>(59)</sup>
27 <sup>(12)</sup>	43 <sup>(28)</sup>	23 <sup>(44)</sup>	22 <sup>(60)</sup>	27 <sup>(12)</sup>	5 <sup>(28)</sup>	23 <sup>(44)</sup>	22 <sup>(60)</sup>
19 <sup>(13)</sup>	44 <sup>(29)</sup>	21 <sup>(45)</sup>	30 <sup>(61)</sup>	19 <sup>(13)</sup>	44 <sup>(29)</sup>	21 <sup>(45)</sup>	30 <sup>(61)</sup>
3 <sup>(14)</sup>	48 <sup>(30)</sup>	17 <sup>(46)</sup>	32 <sup>(62)</sup>	3 <sup>(14)</sup>	48 <sup>(30)</sup>	17 <sup>(46)</sup>	32 <sup>(62)</sup>
7 <sup>(15)</sup>	40 <sup>(31)</sup>	18 <sup>(47)</sup>	28 <sup>(63)</sup>	7 <sup>(15)</sup>	40 <sup>(31)</sup>	18 <sup>(47)</sup>	28 <sup>(63)</sup>
5 <sup>(16)</sup>	39 <sup>(32)</sup>	50 <sup>(48)</sup>	60 <sup>(64)</sup>	5 <sup>(16)</sup>	39 <sup>(32)</sup>	50 <sup>(48)</sup>	60 <sup>(64)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 43 – Matriz de delineamento  $2^7$  na ordem padrão (continua).

Ordem Padrão	A	B	C	D	E	F	G
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
3	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
4	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1
5	-1	1	-1	-1	-1	-1	1
6	1	1	-1	-1	-1	-1	1
7	1	1	1	-1	-1	-1	1
8	-1	1	1	-1	-1	-1	1
9	-1	1	1	-1	-1	-1	-1
10	1	1	1	-1	-1	-1	-1
11	1	1	1	-1	-1	1	-1
12	-1	1	1	-1	-1	1	-1
13	-1	1	1	1	-1	1	-1
14	1	1	1	1	-1	1	-1
15	1	1	1	1	-1	-1	-1
16	-1	1	1	1	-1	-1	-1
17	-1	1	1	1	1	-1	-1
18	1	1	1	1	1	-1	-1
19	1	1	1	-1	1	-1	-1
20	-1	1	1	-1	1	-1	-1
21	-1	-1	1	-1	1	-1	-1
22	1	-1	1	-1	1	-1	-1
23	1	-1	1	-1	1	1	-1
24	-1	-1	1	-1	1	1	-1
25	-1	-1	1	-1	-1	1	-1
26	1	-1	1	-1	-1	1	-1
27	1	-1	1	-1	-1	-1	-1
28	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1
29	-1	-1	1	1	-1	-1	-1
30	1	-1	1	1	-1	-1	-1
31	1	-1	-1	1	-1	-1	-1
32	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1
33	-1	-1	-1	1	1	-1	-1
34	1	-1	-1	1	1	-1	-1
35	1	-1	-1	-1	1	-1	-1
36	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1
37	-1	-1	-1	-1	1	1	-1
38	1	-1	-1	-1	1	1	-1
39	1	1	-1	-1	1	1	-1
40	-1	1	-1	-1	1	1	-1
41	-1	1	-1	-1	1	1	1
42	1	1	-1	-1	1	1	1
43	1	1	-1	1	1	1	1
44	-1	1	-1	1	1	1	1
45	-1	1	-1	1	-1	1	1
46	1	1	-1	1	-1	1	1
47	1	-1	-1	1	-1	1	1
48	-1	-1	-1	1	-1	1	1
49	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
50	1	-1	-1	-1	-1	1	1
51	1	-1	-1	-1	1	1	1
52	-1	-1	-1	-1	1	1	1
53	-1	-1	1	-1	1	1	1
54	1	-1	1	-1	1	1	1
55	1	-1	1	-1	1	-1	1
56	-1	-1	1	-1	1	-1	1
57	-1	1	1	-1	1	-1	1

Tabela 43 – Matriz de delineamento  $2^7$  na ordem padrão (continua).

Ordem Padrão	A	B	C	D	E	F	G
58	1	1	1	-1	1	-1	1
59	1	1	1	1	1	-1	1
60	-1	1	1	1	1	-1	1
61	-1	1	1	1	-1	-1	1
62	1	1	1	1	-1	-1	1
63	1	-1	1	1	-1	-1	1
64	-1	-1	1	1	-1	-1	1
65	-1	-1	-1	1	-1	-1	1
66	1	-1	-1	1	-1	-1	1
67	1	-1	-1	1	1	-1	1
68	-1	-1	-1	1	1	-1	1
69	-1	-1	1	1	1	-1	1
70	1	-1	1	1	1	-1	1
71	1	-1	1	1	1	-1	-1
72	-1	-1	1	1	1	-1	-1
73	-1	-1	1	1	1	1	-1
74	1	-1	1	1	1	1	-1
75	1	-1	-1	1	1	1	-1
76	-1	-1	-1	1	1	1	-1
77	-1	-1	-1	1	1	1	1
78	1	-1	-1	1	1	1	1
79	1	-1	1	1	1	1	1
80	-1	-1	1	1	1	1	1
81	-1	1	1	1	1	1	1
82	-1	1	1	-1	1	1	1
83	1	1	1	-1	1	1	1
84	1	1	1	1	1	1	1
85	1	1	1	1	-1	1	1
86	1	-1	1	1	-1	1	1
87	1	-1	1	1	-1	1	-1
88	1	-1	-1	1	-1	1	-1
89	1	1	-1	1	-1	1	-1
90	1	1	-1	-1	-1	1	-1
91	1	-1	-1	-1	-1	1	-1
92	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1
93	-1	-1	-1	1	-1	1	-1
94	-1	-1	1	1	-1	1	-1
95	-1	-1	1	1	-1	1	1
96	-1	1	1	1	-1	1	1
97	-1	1	1	-1	-1	1	1
98	-1	-1	1	-1	-1	1	1
99	-1	-1	1	-1	-1	-1	1
100	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1
101	-1	-1	-1	-1	1	-1	1
102	-1	1	-1	-1	1	-1	1
103	-1	1	-1	1	1	-1	1
104	-1	1	-1	1	-1	-1	1
105	1	1	-1	1	-1	-1	1
106	1	1	-1	1	1	-1	1
107	1	1	-1	-1	1	-1	1
108	1	-1	-1	-1	1	-1	1
109	1	-1	-1	-1	-1	-1	1
110	1	-1	1	-1	-1	-1	1
111	1	-1	1	-1	-1	1	1
112	1	1	1	-1	-1	1	1
113	1	1	-1	-1	-1	1	1
114	-1	1	-1	-1	-1	1	1

Tabela 43 – Matriz de delineamento  $2^7$  na ordem padrão (conclusão).

Ordem Padrão	A	B	C	D	E	F	G
115	-1	1	-1	-1	-1	1	-1
116	-1	1	-1	1	-1	1	-1
117	-1	1	-1	1	-1	-1	-1
118	1	1	-1	1	-1	-1	-1
119	1	1	-1	1	1	-1	-1
120	1	1	-1	1	1	1	-1
121	1	1	1	1	1	1	-1
122	1	1	1	-1	1	1	-1
123	-1	1	1	-1	1	1	-1
124	-1	1	1	1	1	1	-1
125	-1	1	-1	1	1	1	-1
126	-1	1	-1	1	1	-1	-1
127	-1	1	-1	-1	1	-1	-1
128	1	1	-1	-1	1	-1	-1

Tabela 44 – Ordem (7F OP A<sub>E</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento  $2^7$ , a partir da Ordem Padrão.

#1							
11 <sup>(1)</sup>	61 <sup>(17)</sup>	19 <sup>(33)</sup>	124 <sup>(49)</sup>	52 <sup>(65)</sup>	86 <sup>(81)</sup>	74 <sup>(97)</sup>	109 <sup>(113)</sup>
121 <sup>(2)</sup>	64 <sup>(18)</sup>	127 <sup>(34)</sup>	42 <sup>(50)</sup>	76 <sup>(66)</sup>	51 <sup>(82)</sup>	91 <sup>(98)</sup>	89 <sup>(114)</sup>
106 <sup>(3)</sup>	122 <sup>(19)</sup>	22 <sup>(35)</sup>	8 <sup>(51)</sup>	62 <sup>(67)</sup>	90 <sup>(83)</sup>	83 <sup>(99)</sup>	25 <sup>(115)</sup>
15 <sup>(4)</sup>	50 <sup>(20)</sup>	21 <sup>(36)</sup>	24 <sup>(52)</sup>	32 <sup>(68)</sup>	44 <sup>(84)</sup>	4 <sup>(100)</sup>	123 <sup>(116)</sup>
97 <sup>(5)</sup>	116 <sup>(21)</sup>	81 <sup>(37)</sup>	66 <sup>(53)</sup>	17 <sup>(69)</sup>	54 <sup>(85)</sup>	92 <sup>(101)</sup>	39 <sup>(117)</sup>
53 <sup>(6)</sup>	14 <sup>(22)</sup>	100 <sup>(38)</sup>	102 <sup>(54)</sup>	26 <sup>(70)</sup>	77 <sup>(86)</sup>	125 <sup>(102)</sup>	75 <sup>(118)</sup>
27 <sup>(7)</sup>	118 <sup>(23)</sup>	88 <sup>(39)</sup>	120 <sup>(55)</sup>	95 <sup>(71)</sup>	105 <sup>(87)</sup>	69 <sup>(103)</sup>	112 <sup>(119)</sup>
29 <sup>(8)</sup>	2 <sup>(24)</sup>	104 <sup>(40)</sup>	87 <sup>(56)</sup>	6 <sup>(72)</sup>	80 <sup>(88)</sup>	33 <sup>(104)</sup>	63 <sup>(120)</sup>
9 <sup>(9)</sup>	82 <sup>(25)</sup>	5 <sup>(41)</sup>	49 <sup>(57)</sup>	59 <sup>(73)</sup>	78 <sup>(89)</sup>	84 <sup>(105)</sup>	20 <sup>(121)</sup>
113 <sup>(10)</sup>	73 <sup>(26)</sup>	56 <sup>(42)</sup>	13 <sup>(58)</sup>	71 <sup>(74)</sup>	98 <sup>(90)</sup>	12 <sup>(106)</sup>	34 <sup>(122)</sup>
47 <sup>(11)</sup>	57 <sup>(27)</sup>	45 <sup>(43)</sup>	30 <sup>(59)</sup>	3 <sup>(75)</sup>	60 <sup>(91)</sup>	115 <sup>(107)</sup>	68 <sup>(123)</sup>
1 <sup>(12)</sup>	16 <sup>(28)</sup>	94 <sup>(44)</sup>	70 <sup>(60)</sup>	36 <sup>(76)</sup>	7 <sup>(92)</sup>	55 <sup>(108)</sup>	128 <sup>(124)</sup>
31 <sup>(13)</sup>	67 <sup>(29)</sup>	119 <sup>(45)</sup>	23 <sup>(61)</sup>	41 <sup>(77)</sup>	38 <sup>(93)</sup>	72 <sup>(109)</sup>	35 <sup>(125)</sup>
93 <sup>(14)</sup>	110 <sup>(30)</sup>	101 <sup>(46)</sup>	43 <sup>(62)</sup>	107 <sup>(78)</sup>	103 <sup>(94)</sup>	46 <sup>(110)</sup>	65 <sup>(126)</sup>
99 <sup>(15)</sup>	85 <sup>(31)</sup>	18 <sup>(47)</sup>	117 <sup>(63)</sup>	58 <sup>(79)</sup>	40 <sup>(95)</sup>	28 <sup>(111)</sup>	10 <sup>(127)</sup>
111 <sup>(16)</sup>	108 <sup>(32)</sup>	96 <sup>(48)</sup>	126 <sup>(64)</sup>	79 <sup>(80)</sup>	114 <sup>(96)</sup>	37 <sup>(112)</sup>	48 <sup>(128)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 45 – Ordens (7F NO1 A<sub>E</sub> e 7F NO2 A<sub>E</sub>) A-ótimas obtidas por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento 2<sup>7</sup>, a partir das ordens (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1	#2			#2			
93 <sup>(1)</sup>	65 <sup>(33)</sup>	104 <sup>(65)</sup>	46 <sup>(97)</sup>	59 <sup>(1)</sup>	35 <sup>(33)</sup>	102 <sup>(65)</sup>	116 <sup>(97)</sup>
92 <sup>(2)</sup>	42 <sup>(34)</sup>	120 <sup>(66)</sup>	57 <sup>(98)</sup>	14 <sup>(2)</sup>	4 <sup>(34)</sup>	119 <sup>(66)</sup>	16 <sup>(98)</sup>
56 <sup>(3)</sup>	101 <sup>(35)</sup>	79 <sup>(67)</sup>	86 <sup>(99)</sup>	39 <sup>(3)</sup>	34 <sup>(35)</sup>	101 <sup>(67)</sup>	87 <sup>(99)</sup>
83 <sup>(4)</sup>	32 <sup>(36)</sup>	19 <sup>(68)</sup>	49 <sup>(100)</sup>	41 <sup>(4)</sup>	2 <sup>(36)</sup>	73 <sup>(68)</sup>	67 <sup>(100)</sup>
23 <sup>(5)</sup>	21 <sup>(37)</sup>	20 <sup>(69)</sup>	25 <sup>(101)</sup>	107 <sup>(5)</sup>	113 <sup>(37)</sup>	48 <sup>(69)</sup>	85 <sup>(101)</sup>
123 <sup>(6)</sup>	117 <sup>(38)</sup>	115 <sup>(70)</sup>	126 <sup>(102)</sup>	121 <sup>(6)</sup>	71 <sup>(38)</sup>	122 <sup>(70)</sup>	120 <sup>(102)</sup>
66 <sup>(7)</sup>	111 <sup>(39)</sup>	26 <sup>(71)</sup>	33 <sup>(103)</sup>	111 <sup>(7)</sup>	36 <sup>(39)</sup>	1 <sup>(71)</sup>	44 <sup>(103)</sup>
69 <sup>(8)</sup>	31 <sup>(40)</sup>	4 <sup>(72)</sup>	110 <sup>(104)</sup>	78 <sup>(8)</sup>	89 <sup>(40)</sup>	40 <sup>(72)</sup>	83 <sup>(104)</sup>
11 <sup>(9)</sup>	70 <sup>(41)</sup>	96 <sup>(73)</sup>	50 <sup>(105)</sup>	8 <sup>(9)</sup>	9 <sup>(41)</sup>	3 <sup>(73)</sup>	93 <sup>(105)</sup>
81 <sup>(10)</sup>	43 <sup>(42)</sup>	38 <sup>(74)</sup>	103 <sup>(106)</sup>	55 <sup>(10)</sup>	66 <sup>(42)</sup>	56 <sup>(74)</sup>	49 <sup>(106)</sup>
80 <sup>(11)</sup>	75 <sup>(43)</sup>	39 <sup>(75)</sup>	124 <sup>(107)</sup>	97 <sup>(11)</sup>	7 <sup>(43)</sup>	43 <sup>(75)</sup>	95 <sup>(107)</sup>
87 <sup>(12)</sup>	114 <sup>(44)</sup>	37 <sup>(76)</sup>	15 <sup>(108)</sup>	29 <sup>(12)</sup>	115 <sup>(44)</sup>	53 <sup>(76)</sup>	21 <sup>(108)</sup>
10 <sup>(13)</sup>	44 <sup>(45)</sup>	14 <sup>(77)</sup>	113 <sup>(109)</sup>	123 <sup>(13)</sup>	125 <sup>(45)</sup>	128 <sup>(77)</sup>	24 <sup>(109)</sup>
97 <sup>(14)</sup>	76 <sup>(46)</sup>	5 <sup>(78)</sup>	18 <sup>(110)</sup>	47 <sup>(14)</sup>	63 <sup>(46)</sup>	99 <sup>(78)</sup>	17 <sup>(110)</sup>
45 <sup>(15)</sup>	17 <sup>(47)</sup>	64 <sup>(79)</sup>	48 <sup>(111)</sup>	58 <sup>(15)</sup>	70 <sup>(47)</sup>	60 <sup>(79)</sup>	50 <sup>(111)</sup>
62 <sup>(16)</sup>	36 <sup>(48)</sup>	6 <sup>(80)</sup>	95 <sup>(112)</sup>	25 <sup>(16)</sup>	18 <sup>(48)</sup>	45 <sup>(80)</sup>	51 <sup>(112)</sup>
12 <sup>(17)</sup>	118 <sup>(49)</sup>	112 <sup>(81)</sup>	106 <sup>(113)</sup>	100 <sup>(17)</sup>	84 <sup>(49)</sup>	64 <sup>(81)</sup>	49 <sup>(113)</sup>
7 <sup>(18)</sup>	127 <sup>(50)</sup>	125 <sup>(82)</sup>	1 <sup>(114)</sup>	30 <sup>(18)</sup>	127 <sup>(50)</sup>	79 <sup>(82)</sup>	12 <sup>(114)</sup>
78 <sup>(19)</sup>	8 <sup>(51)</sup>	74 <sup>(83)</sup>	84 <sup>(115)</sup>	114 <sup>(19)</sup>	103 <sup>(51)</sup>	106 <sup>(83)</sup>	42 <sup>(115)</sup>
90 <sup>(20)</sup>	105 <sup>(52)</sup>	22 <sup>(84)</sup>	89 <sup>(116)</sup>	69 <sup>(20)</sup>	11 <sup>(52)</sup>	38 <sup>(84)</sup>	27 <sup>(116)</sup>
63 <sup>(21)</sup>	82 <sup>(53)</sup>	28 <sup>(85)</sup>	58 <sup>(117)</sup>	76 <sup>(21)</sup>	37 <sup>(53)</sup>	124 <sup>(85)</sup>	86 <sup>(117)</sup>
3 <sup>(22)</sup>	128 <sup>(54)</sup>	60 <sup>(86)</sup>	88 <sup>(118)</sup>	104 <sup>(22)</sup>	75 <sup>(54)</sup>	92 <sup>(86)</sup>	52 <sup>(118)</sup>
71 <sup>(23)</sup>	85 <sup>(55)</sup>	53 <sup>(87)</sup>	102 <sup>(119)</sup>	57 <sup>(23)</sup>	68 <sup>(55)</sup>	10 <sup>(87)</sup>	91 <sup>(119)</sup>
67 <sup>(24)</sup>	91 <sup>(56)</sup>	35 <sup>(88)</sup>	47 <sup>(120)</sup>	90 <sup>(24)</sup>	81 <sup>(56)</sup>	65 <sup>(88)</sup>	6 <sup>(120)</sup>
121 <sup>(25)</sup>	27 <sup>(57)</sup>	122 <sup>(89)</sup>	55 <sup>(121)</sup>	26 <sup>(25)</sup>	5 <sup>(57)</sup>	62 <sup>(89)</sup>	20 <sup>(121)</sup>
54 <sup>(26)</sup>	29 <sup>(58)</sup>	99 <sup>(90)</sup>	61 <sup>(122)</sup>	46 <sup>(26)</sup>	77 <sup>(58)</sup>	126 <sup>(90)</sup>	108 <sup>(122)</sup>
107 <sup>(27)</sup>	116 <sup>(59)</sup>	34 <sup>(91)</sup>	48 <sup>(123)</sup>	82 <sup>(27)</sup>	112 <sup>(59)</sup>	61 <sup>(91)</sup>	74 <sup>(123)</sup>
41 <sup>(28)</sup>	24 <sup>(60)</sup>	100 <sup>(92)</sup>	68 <sup>(124)</sup>	110 <sup>(28)</sup>	105 <sup>(60)</sup>	80 <sup>(92)</sup>	109 <sup>(124)</sup>
9 <sup>(29)</sup>	2 <sup>(61)</sup>	109 <sup>(93)</sup>	77 <sup>(125)</sup>	94 <sup>(29)</sup>	22 <sup>(61)</sup>	15 <sup>(93)</sup>	117 <sup>(125)</sup>
13 <sup>(30)</sup>	52 <sup>(62)</sup>	40 <sup>(94)</sup>	108 <sup>(126)</sup>	28 <sup>(30)</sup>	32 <sup>(62)</sup>	88 <sup>(94)</sup>	19 <sup>(126)</sup>
94 <sup>(31)</sup>	59 <sup>(63)</sup>	73 <sup>(95)</sup>	119 <sup>(127)</sup>	23 <sup>(31)</sup>	72 <sup>(63)</sup>	54 <sup>(95)</sup>	31 <sup>(127)</sup>
51 <sup>(32)</sup>	72 <sup>(64)</sup>	30 <sup>(96)</sup>	98 <sup>(128)</sup>	118 <sup>(32)</sup>	13 <sup>(64)</sup>	96 <sup>(96)</sup>	98 <sup>(128)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 46 – Ordens (7F NO1 D<sub>E</sub> e 7F NO2 D<sub>E</sub>) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo *exchange*, para o delineamento 2<sup>7</sup>, a partir das ordens (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1				#2			
1 <sup>(1)</sup>	25 <sup>(33)</sup>	73 <sup>(65)</sup>	44 <sup>(97)</sup>	1 <sup>(1)</sup>	25 <sup>(33)</sup>	73 <sup>(65)</sup>	103 <sup>(97)</sup>
2 <sup>(2)</sup>	26 <sup>(34)</sup>	74 <sup>(66)</sup>	12 <sup>(98)</sup>	2 <sup>(2)</sup>	26 <sup>(34)</sup>	74 <sup>(66)</sup>	101 <sup>(98)</sup>
4 <sup>(3)</sup>	18 <sup>(35)</sup>	90 <sup>(67)</sup>	76 <sup>(99)</sup>	4 <sup>(3)</sup>	18 <sup>(35)</sup>	90 <sup>(67)</sup>	69 <sup>(99)</sup>
3 <sup>(4)</sup>	17 <sup>(36)</sup>	89 <sup>(68)</sup>	92 <sup>(100)</sup>	3 <sup>(4)</sup>	17 <sup>(36)</sup>	89 <sup>(68)</sup>	65 <sup>(100)</sup>
67 <sup>(5)</sup>	49 <sup>(37)</sup>	93 <sup>(69)</sup>	91 <sup>(101)</sup>	67 <sup>(5)</sup>	49 <sup>(37)</sup>	93 <sup>(69)</sup>	81 <sup>(101)</sup>
68 <sup>(6)</sup>	50 <sup>(38)</sup>	94 <sup>(70)</sup>	83 <sup>(102)</sup>	68 <sup>(6)</sup>	50 <sup>(38)</sup>	94 <sup>(70)</sup>	83 <sup>(102)</sup>
72 <sup>(7)</sup>	52 <sup>(39)</sup>	30 <sup>(71)</sup>	84 <sup>(103)</sup>	72 <sup>(7)</sup>	52 <sup>(39)</sup>	30 <sup>(71)</sup>	91 <sup>(103)</sup>
71 <sup>(8)</sup>	51 <sup>(40)</sup>	29 <sup>(72)</sup>	82 <sup>(104)</sup>	71 <sup>(8)</sup>	51 <sup>(40)</sup>	29 <sup>(72)</sup>	75 <sup>(104)</sup>
7 <sup>(9)</sup>	115 <sup>(41)</sup>	61 <sup>(73)</sup>	81 <sup>(105)</sup>	7 <sup>(9)</sup>	115 <sup>(41)</sup>	61 <sup>(73)</sup>	76 <sup>(105)</sup>
8 <sup>(10)</sup>	116 <sup>(42)</sup>	62 <sup>(74)</sup>	65 <sup>(106)</sup>	8 <sup>(10)</sup>	116 <sup>(42)</sup>	62 <sup>(74)</sup>	92 <sup>(106)</sup>
40 <sup>(11)</sup>	124 <sup>(43)</sup>	58 <sup>(75)</sup>	66 <sup>(107)</sup>	40 <sup>(11)</sup>	124 <sup>(43)</sup>	58 <sup>(75)</sup>	84 <sup>(107)</sup>
39 <sup>(12)</sup>	123 <sup>(44)</sup>	57 <sup>(76)</sup>	70 <sup>(108)</sup>	39 <sup>(12)</sup>	10 <sup>(44)</sup>	57 <sup>(76)</sup>	82 <sup>(108)</sup>
47 <sup>(13)</sup>	107 <sup>(45)</sup>	121 <sup>(77)</sup>	69 <sup>(109)</sup>	47 <sup>(13)</sup>	107 <sup>(45)</sup>	121 <sup>(77)</sup>	66 <sup>(109)</sup>
48 <sup>(14)</sup>	108 <sup>(46)</sup>	122 <sup>(78)</sup>	101 <sup>(110)</sup>	48 <sup>(14)</sup>	108 <sup>(46)</sup>	122 <sup>(78)</sup>	70 <sup>(110)</sup>
16 <sup>(15)</sup>	106 <sup>(47)</sup>	126 <sup>(79)</sup>	102 <sup>(111)</sup>	16 <sup>(15)</sup>	106 <sup>(47)</sup>	126 <sup>(79)</sup>	102 <sup>(111)</sup>
15 <sup>(16)</sup>	105 <sup>(48)</sup>	125 <sup>(80)</sup>	104 <sup>(112)</sup>	15 <sup>(16)</sup>	105 <sup>(48)</sup>	125 <sup>(80)</sup>	104 <sup>(112)</sup>
31 <sup>(17)</sup>	97 <sup>(49)</sup>	127 <sup>(81)</sup>	100 <sup>(113)</sup>	31 <sup>(17)</sup>	97 <sup>(49)</sup>	127 <sup>(81)</sup>	100 <sup>(113)</sup>
32 <sup>(18)</sup>	98 <sup>(50)</sup>	128 <sup>(82)</sup>	99 <sup>(114)</sup>	32 <sup>(18)</sup>	98 <sup>(50)</sup>	119 <sup>(82)</sup>	99 <sup>(114)</sup>
24 <sup>(19)</sup>	114 <sup>(51)</sup>	120 <sup>(83)</sup>	35 <sup>(115)</sup>	24 <sup>(19)</sup>	114 <sup>(51)</sup>	120 <sup>(83)</sup>	35 <sup>(115)</sup>
23 <sup>(20)</sup>	113 <sup>(52)</sup>	119 <sup>(84)</sup>	43 <sup>(116)</sup>	23 <sup>(20)</sup>	113 <sup>(52)</sup>	128 <sup>(84)</sup>	43 <sup>(116)</sup>
21 <sup>(21)</sup>	117 <sup>(53)</sup>	103 <sup>(85)</sup>	59 <sup>(117)</sup>	21 <sup>(21)</sup>	117 <sup>(53)</sup>	112 <sup>(85)</sup>	11 <sup>(117)</sup>
22 <sup>(22)</sup>	118 <sup>(54)</sup>	111 <sup>(86)</sup>	63 <sup>(118)</sup>	22 <sup>(22)</sup>	118 <sup>(54)</sup>	110 <sup>(86)</sup>	12 <sup>(118)</sup>
54 <sup>(23)</sup>	86 <sup>(55)</sup>	112 <sup>(87)</sup>	55 <sup>(119)</sup>	54 <sup>(23)</sup>	86 <sup>(55)</sup>	46 <sup>(87)</sup>	28 <sup>(119)</sup>
53 <sup>(24)</sup>	85 <sup>(56)</sup>	110 <sup>(88)</sup>	56 <sup>(120)</sup>	53 <sup>(24)</sup>	85 <sup>(56)</sup>	42 <sup>(88)</sup>	60 <sup>(120)</sup>
37 <sup>(25)</sup>	87 <sup>(57)</sup>	109 <sup>(89)</sup>	64 <sup>(121)</sup>	37 <sup>(25)</sup>	87 <sup>(57)</sup>	44 <sup>(89)</sup>	64 <sup>(121)</sup>
38 <sup>(26)</sup>	88 <sup>(58)</sup>	45 <sup>(90)</sup>	60 <sup>(122)</sup>	38 <sup>(26)</sup>	88 <sup>(58)</sup>	36 <sup>(90)</sup>	56 <sup>(122)</sup>
6 <sup>(27)</sup>	96 <sup>(59)</sup>	46 <sup>(91)</sup>	28 <sup>(123)</sup>	6 <sup>(27)</sup>	96 <sup>(59)</sup>	34 <sup>(91)</sup>	55 <sup>(123)</sup>
5 <sup>(28)</sup>	95 <sup>(60)</sup>	42 <sup>(92)</sup>	20 <sup>(124)</sup>	5 <sup>(28)</sup>	95 <sup>(60)</sup>	33 <sup>(92)</sup>	63 <sup>(124)</sup>
13 <sup>(29)</sup>	14 <sup>(61)</sup>	41 <sup>(93)</sup>	19 <sup>(125)</sup>	13 <sup>(29)</sup>	79 <sup>(61)</sup>	41 <sup>(93)</sup>	59 <sup>(125)</sup>
79 <sup>(30)</sup>	80 <sup>(62)</sup>	33 <sup>(94)</sup>	27 <sup>(126)</sup>	14 <sup>(30)</sup>	80 <sup>(62)</sup>	45 <sup>(94)</sup>	27 <sup>(126)</sup>
10 <sup>(31)</sup>	78 <sup>(63)</sup>	34 <sup>(95)</sup>	11 <sup>(127)</sup>	123 <sup>(31)</sup>	78 <sup>(63)</sup>	109 <sup>(95)</sup>	19 <sup>(127)</sup>
9 <sup>(32)</sup>	77 <sup>(64)</sup>	36 <sup>(96)</sup>	75 <sup>(128)</sup>	9 <sup>(32)</sup>	77 <sup>(64)</sup>	111 <sup>(96)</sup>	20 <sup>(128)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 47 – Ordem (4F OP A<sub>SA</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento 2<sup>4</sup>, a partir da Ordem Padrão.

#1			
4 <sup>(1)</sup>	1 <sup>(5)</sup>	11 <sup>(9)</sup>	11 <sup>(13)</sup>
2 <sup>(2)</sup>	16 <sup>(6)</sup>	16 <sup>(10)</sup>	7 <sup>(14)</sup>
14 <sup>(3)</sup>	10 <sup>(7)</sup>	13 <sup>(11)</sup>	4 <sup>(15)</sup>
9 <sup>(4)</sup>	10 <sup>(8)</sup>	5 <sup>(12)</sup>	6 <sup>(16)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 48 – Ordem (4F OP D<sub>SA</sub>) D-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento  $2^4$ , a partir da Ordem Padrão.

#1			
14 <sup>(1)</sup>	15 <sup>(5)</sup>	4 <sup>(9)</sup>	10 <sup>(13)</sup>
9 <sup>(2)</sup>	11 <sup>(6)</sup>	6 <sup>(10)</sup>	7 <sup>(14)</sup>
8 <sup>(3)</sup>	1 <sup>(7)</sup>	15 <sup>(11)</sup>	1 <sup>(15)</sup>
4 <sup>(4)</sup>	5 <sup>(8)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	14 <sup>(16)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 49 – Ordem (4F NO15 A<sub>SA</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento  $2^4$ , a partir da matriz 4F NO15.

#1			
14 <sup>(1)</sup>	4 <sup>(5)</sup>	14 <sup>(9)</sup>	8 <sup>(13)</sup>
16 <sup>(2)</sup>	7 <sup>(6)</sup>	12 <sup>(10)</sup>	13 <sup>(14)</sup>
9 <sup>(3)</sup>	11 <sup>(7)</sup>	2 <sup>(11)</sup>	1 <sup>(15)</sup>
15 <sup>(4)</sup>	6 <sup>(8)</sup>	7 <sup>(12)</sup>	12 <sup>(16)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 50 – Ordem (4F NO15 D<sub>SA</sub>) D-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento  $2^4$ , a partir da matriz 4F NO15.

#1			
15 <sup>(1)</sup>	5 <sup>(5)</sup>	13 <sup>(9)</sup>	2 <sup>(13)</sup>
14 <sup>(2)</sup>	9 <sup>(6)</sup>	13 <sup>(10)</sup>	16 <sup>(14)</sup>
6 <sup>(3)</sup>	7 <sup>(7)</sup>	11 <sup>(11)</sup>	10 <sup>(15)</sup>
12 <sup>(4)</sup>	1 <sup>(8)</sup>	8 <sup>(12)</sup>	3 <sup>(16)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 51 – Ordem (5F OP A<sub>SA</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento  $2^5$ , a partir da Ordem Padrão.

#1							
8 <sup>(1)</sup>	9 <sup>(5)</sup>	3 <sup>(9)</sup>	8 <sup>(13)</sup>	8 <sup>(17)</sup>	31 <sup>(21)</sup>	17 <sup>(25)</sup>	16 <sup>(29)</sup>
32 <sup>(2)</sup>	27 <sup>(6)</sup>	12 <sup>(10)</sup>	11 <sup>(14)</sup>	2 <sup>(18)</sup>	25 <sup>(22)</sup>	21 <sup>(26)</sup>	27 <sup>(30)</sup>
13 <sup>(3)</sup>	18 <sup>(7)</sup>	7 <sup>(11)</sup>	5 <sup>(15)</sup>	30 <sup>(19)</sup>	30 <sup>(23)</sup>	20 <sup>(27)</sup>	20 <sup>(31)</sup>
14 <sup>(4)</sup>	31 <sup>(8)</sup>	23 <sup>(12)</sup>	12 <sup>(16)</sup>	9 <sup>(20)</sup>	3 <sup>(24)</sup>	5 <sup>(28)</sup>	10 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos



Tabela 52 – Ordem (5F OP D<sub>SA</sub>) D-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento 2<sup>5</sup>, a partir da Ordem Padrão.

#1							
24 <sup>(1)</sup>	13 <sup>(5)</sup>	3 <sup>(9)</sup>	14 <sup>(13)</sup>	8 <sup>(17)</sup>	32 <sup>(21)</sup>	3 <sup>(25)</sup>	30 <sup>(29)</sup>
32 <sup>(2)</sup>	15 <sup>(6)</sup>	21 <sup>(10)</sup>	12 <sup>(14)</sup>	24 <sup>(18)</sup>	23 <sup>(22)</sup>	17 <sup>(26)</sup>	6 <sup>(30)</sup>
31 <sup>(3)</sup>	15 <sup>(7)</sup>	28 <sup>(11)</sup>	31 <sup>(15)</sup>	5 <sup>(19)</sup>	29 <sup>(23)</sup>	17 <sup>(27)</sup>	8 <sup>(31)</sup>
20 <sup>(4)</sup>	27 <sup>(8)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	10 <sup>(16)</sup>	19 <sup>(20)</sup>	11 <sup>(24)</sup>	26 <sup>(28)</sup>	9 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 53 – Ordem (5F NO2 A<sub>SA</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento 2<sup>5</sup>, a partir da matriz 5F NO2.

#1							
28 <sup>(1)</sup>	7 <sup>(5)</sup>	13 <sup>(9)</sup>	26 <sup>(13)</sup>	32 <sup>(17)</sup>	30 <sup>(21)</sup>	3 <sup>(25)</sup>	2 <sup>(29)</sup>
21 <sup>(2)</sup>	19 <sup>(6)</sup>	8 <sup>(10)</sup>	10 <sup>(14)</sup>	15 <sup>(18)</sup>	31 <sup>(22)</sup>	15 <sup>(26)</sup>	6 <sup>(30)</sup>
12 <sup>(3)</sup>	32 <sup>(7)</sup>	24 <sup>(11)</sup>	8 <sup>(15)</sup>	1 <sup>(19)</sup>	9 <sup>(23)</sup>	14 <sup>(27)</sup>	24 <sup>(31)</sup>
4 <sup>(4)</sup>	18 <sup>(8)</sup>	19 <sup>(12)</sup>	12 <sup>(16)</sup>	28 <sup>(20)</sup>	29 <sup>(24)</sup>	27 <sup>(28)</sup>	17 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 54 – Ordens (5F NO1 D<sub>SA</sub> e 5F NO2 D<sub>SA</sub>) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento 2<sup>5</sup>, a partir das ordens (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1	#2						
28 <sup>(1)</sup>	30 <sup>(9)</sup>	18 <sup>(17)</sup>	16 <sup>(25)</sup>	7 <sup>(1)</sup>	16 <sup>(9)</sup>	9 <sup>(17)</sup>	7 <sup>(25)</sup>
8 <sup>(2)</sup>	3 <sup>(10)</sup>	28 <sup>(18)</sup>	30 <sup>(26)</sup>	25 <sup>(2)</sup>	12 <sup>(10)</sup>	30 <sup>(18)</sup>	18 <sup>(26)</sup>
15 <sup>(3)</sup>	4 <sup>(11)</sup>	2 <sup>(19)</sup>	23 <sup>(27)</sup>	17 <sup>(3)</sup>	15 <sup>(11)</sup>	16 <sup>(19)</sup>	6 <sup>(27)</sup>
23 <sup>(4)</sup>	31 <sup>(12)</sup>	11 <sup>(20)</sup>	25 <sup>(28)</sup>	9 <sup>(4)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	20 <sup>(20)</sup>	28 <sup>(28)</sup>
11 <sup>(5)</sup>	9 <sup>(13)</sup>	5 <sup>(21)</sup>	4 <sup>(29)</sup>	23 <sup>(5)</sup>	20 <sup>(13)</sup>	30 <sup>(21)</sup>	27 <sup>(29)</sup>
24 <sup>(6)</sup>	13 <sup>(14)</sup>	19 <sup>(22)</sup>	19 <sup>(30)</sup>	29 <sup>(6)</sup>	1 <sup>(14)</sup>	5 <sup>(22)</sup>	2 <sup>(30)</sup>
15 <sup>(7)</sup>	16 <sup>(15)</sup>	32 <sup>(23)</sup>	13 <sup>(31)</sup>	19 <sup>(7)</sup>	30 <sup>(15)</sup>	9 <sup>(23)</sup>	3 <sup>(31)</sup>
8 <sup>(8)</sup>	21 <sup>(16)</sup>	26 <sup>(24)</sup>	6 <sup>(32)</sup>	6 <sup>(8)</sup>	11 <sup>(16)</sup>	29 <sup>(24)</sup>	23 <sup>(32)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 55 – Ordem (6F OP A<sub>SA</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento 2<sup>6</sup>, a partir da Ordem Padrão.

#1							
56 <sup>(1)</sup>	37 <sup>(9)</sup>	47 <sup>(17)</sup>	1 <sup>(25)</sup>	45 <sup>(33)</sup>	8 <sup>(41)</sup>	16 <sup>(49)</sup>	59 <sup>(57)</sup>
61 <sup>(2)</sup>	26 <sup>(10)</sup>	61 <sup>(18)</sup>	46 <sup>(26)</sup>	35 <sup>(34)</sup>	27 <sup>(42)</sup>	48 <sup>(50)</sup>	2 <sup>(58)</sup>
43 <sup>(3)</sup>	9 <sup>(11)</sup>	22 <sup>(19)</sup>	2 <sup>(27)</sup>	64 <sup>(35)</sup>	53 <sup>(43)</sup>	51 <sup>(51)</sup>	44 <sup>(59)</sup>
55 <sup>(4)</sup>	17 <sup>(12)</sup>	13 <sup>(20)</sup>	16 <sup>(28)</sup>	3 <sup>(36)</sup>	26 <sup>(44)</sup>	28 <sup>(52)</sup>	30 <sup>(60)</sup>
39 <sup>(5)</sup>	10 <sup>(13)</sup>	57 <sup>(21)</sup>	49 <sup>(29)</sup>	25 <sup>(37)</sup>	56 <sup>(45)</sup>	13 <sup>(53)</sup>	15 <sup>(61)</sup>
23 <sup>(6)</sup>	41 <sup>(14)</sup>	19 <sup>(22)</sup>	54 <sup>(30)</sup>	58 <sup>(38)</sup>	34 <sup>(46)</sup>	36 <sup>(54)</sup>	34 <sup>(62)</sup>
52 <sup>(7)</sup>	42 <sup>(15)</sup>	20 <sup>(23)</sup>	16 <sup>(31)</sup>	27 <sup>(39)</sup>	3 <sup>(47)</sup>	54 <sup>(55)</sup>	21 <sup>(63)</sup>
35 <sup>(8)</sup>	47 <sup>(16)</sup>	31 <sup>(24)</sup>	42 <sup>(32)</sup>	9 <sup>(40)</sup>	5 <sup>(48)</sup>	63 <sup>(56)</sup>	37 <sup>(64)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 56 – Ordem (6F OP D<sub>SA</sub>) D-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento 2<sup>6</sup>, a partir da Ordem Padrão.

#1							
8 <sup>(1)</sup>	17 <sup>(9)</sup>	54 <sup>(17)</sup>	14 <sup>(25)</sup>	47 <sup>(33)</sup>	27 <sup>(41)</sup>	35 <sup>(49)</sup>	38 <sup>(57)</sup>
25 <sup>(2)</sup>	20 <sup>(10)</sup>	51 <sup>(18)</sup>	2 <sup>(26)</sup>	12 <sup>(34)</sup>	35 <sup>(42)</sup>	21 <sup>(50)</sup>	32 <sup>(58)</sup>
12 <sup>(3)</sup>	56 <sup>(11)</sup>	28 <sup>(19)</sup>	56 <sup>(27)</sup>	57 <sup>(35)</sup>	2 <sup>(43)</sup>	41 <sup>(51)</sup>	39 <sup>(59)</sup>
24 <sup>(4)</sup>	12 <sup>(12)</sup>	32 <sup>(20)</sup>	58 <sup>(28)</sup>	51 <sup>(36)</sup>	21 <sup>(44)</sup>	16 <sup>(52)</sup>	45 <sup>(60)</sup>
62 <sup>(5)</sup>	50 <sup>(13)</sup>	62 <sup>(21)</sup>	8 <sup>(29)</sup>	58 <sup>(37)</sup>	60 <sup>(45)</sup>	17 <sup>(53)</sup>	53 <sup>(61)</sup>
23 <sup>(6)</sup>	45 <sup>(14)</sup>	60 <sup>(22)</sup>	22 <sup>(30)</sup>	42 <sup>(38)</sup>	45 <sup>(46)</sup>	48 <sup>(54)</sup>	33 <sup>(62)</sup>
18 <sup>(7)</sup>	58 <sup>(15)</sup>	52 <sup>(23)</sup>	30 <sup>(31)</sup>	31 <sup>(39)</sup>	31 <sup>(47)</sup>	2 <sup>(55)</sup>	25 <sup>(63)</sup>
36 <sup>(8)</sup>	8 <sup>(16)</sup>	40 <sup>(24)</sup>	63 <sup>(32)</sup>	11 <sup>(40)</sup>	12 <sup>(48)</sup>	18 <sup>(56)</sup>	13 <sup>(64)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 57 – Ordem (6F NO1 D<sub>SA</sub>) D-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento 2<sup>6</sup>, a partir da matriz 6F NO1.

#1							
60 <sup>(1)</sup>	10 <sup>(9)</sup>	52 <sup>(17)</sup>	31 <sup>(25)</sup>	38 <sup>(33)</sup>	34 <sup>(41)</sup>	45 <sup>(49)</sup>	16 <sup>(57)</sup>
48 <sup>(2)</sup>	20 <sup>(10)</sup>	39 <sup>(18)</sup>	58 <sup>(26)</sup>	1 <sup>(34)</sup>	55 <sup>(42)</sup>	51 <sup>(50)</sup>	14 <sup>(58)</sup>
59 <sup>(3)</sup>	27 <sup>(11)</sup>	49 <sup>(19)</sup>	15 <sup>(27)</sup>	2 <sup>(35)</sup>	53 <sup>(43)</sup>	42 <sup>(51)</sup>	35 <sup>(59)</sup>
24 <sup>(4)</sup>	21 <sup>(12)</sup>	54 <sup>(20)</sup>	26 <sup>(28)</sup>	18 <sup>(36)</sup>	40 <sup>(44)</sup>	21 <sup>(52)</sup>	20 <sup>(60)</sup>
33 <sup>(5)</sup>	46 <sup>(13)</sup>	50 <sup>(21)</sup>	17 <sup>(29)</sup>	29 <sup>(37)</sup>	3 <sup>(45)</sup>	8 <sup>(53)</sup>	28 <sup>(61)</sup>
7 <sup>(6)</sup>	6 <sup>(14)</sup>	64 <sup>(22)</sup>	20 <sup>(30)</sup>	13 <sup>(38)</sup>	9 <sup>(46)</sup>	49 <sup>(54)</sup>	22 <sup>(62)</sup>
31 <sup>(7)</sup>	1 <sup>(15)</sup>	11 <sup>(23)</sup>	57 <sup>(31)</sup>	24 <sup>(39)</sup>	27 <sup>(47)</sup>	48 <sup>(55)</sup>	61 <sup>(63)</sup>
53 <sup>(8)</sup>	7 <sup>(16)</sup>	30 <sup>(24)</sup>	3 <sup>(32)</sup>	44 <sup>(40)</sup>	64 <sup>(48)</sup>	45 <sup>(56)</sup>	43 <sup>(64)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 58 – Ordem (7F OP A<sub>SA</sub>) A-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento  $2^7$ , a partir da Ordem Padrão.

#1							
102 <sup>(1)</sup>	74 <sup>(17)</sup>	115 <sup>(33)</sup>	97 <sup>(49)</sup>	115 <sup>(65)</sup>	38 <sup>(81)</sup>	45 <sup>(97)</sup>	14 <sup>(113)</sup>
89 <sup>(2)</sup>	4 <sup>(18)</sup>	16 <sup>(34)</sup>	99 <sup>(50)</sup>	96 <sup>(66)</sup>	103 <sup>(82)</sup>	48 <sup>(98)</sup>	35 <sup>(114)</sup>
79 <sup>(3)</sup>	28 <sup>(19)</sup>	5 <sup>(35)</sup>	51 <sup>(51)</sup>	45 <sup>(67)</sup>	2 <sup>(83)</sup>	126 <sup>(99)</sup>	98 <sup>(115)</sup>
105 <sup>(4)</sup>	52 <sup>(20)</sup>	4 <sup>(36)</sup>	21 <sup>(52)</sup>	119 <sup>(68)</sup>	18 <sup>(84)</sup>	71 <sup>(100)</sup>	8 <sup>(116)</sup>
23 <sup>(5)</sup>	36 <sup>(21)</sup>	73 <sup>(37)</sup>	63 <sup>(53)</sup>	90 <sup>(69)</sup>	99 <sup>(85)</sup>	78 <sup>(101)</sup>	113 <sup>(117)</sup>
108 <sup>(6)</sup>	54 <sup>(22)</sup>	1 <sup>(38)</sup>	58 <sup>(54)</sup>	35 <sup>(70)</sup>	92 <sup>(86)</sup>	46 <sup>(102)</sup>	89 <sup>(118)</sup>
98 <sup>(7)</sup>	15 <sup>(23)</sup>	9 <sup>(39)</sup>	67 <sup>(55)</sup>	39 <sup>(71)</sup>	21 <sup>(87)</sup>	35 <sup>(103)</sup>	127 <sup>(119)</sup>
56 <sup>(8)</sup>	63 <sup>(24)</sup>	69 <sup>(40)</sup>	77 <sup>(56)</sup>	112 <sup>(72)</sup>	51 <sup>(88)</sup>	117 <sup>(104)</sup>	22 <sup>(120)</sup>
117 <sup>(9)</sup>	11 <sup>(25)</sup>	112 <sup>(41)</sup>	64 <sup>(57)</sup>	25 <sup>(73)</sup>	80 <sup>(89)</sup>	7 <sup>(105)</sup>	66 <sup>(121)</sup>
70 <sup>(10)</sup>	126 <sup>(26)</sup>	47 <sup>(42)</sup>	71 <sup>(58)</sup>	96 <sup>(74)</sup>	58 <sup>(90)</sup>	128 <sup>(106)</sup>	92 <sup>(122)</sup>
29 <sup>(11)</sup>	91 <sup>(27)</sup>	111 <sup>(43)</sup>	117 <sup>(59)</sup>	42 <sup>(75)</sup>	72 <sup>(91)</sup>	107 <sup>(107)</sup>	69 <sup>(123)</sup>
46 <sup>(12)</sup>	31 <sup>(28)</sup>	41 <sup>(44)</sup>	2 <sup>(60)</sup>	75 <sup>(76)</sup>	76 <sup>(92)</sup>	24 <sup>(108)</sup>	118 <sup>(124)</sup>
124 <sup>(13)</sup>	46 <sup>(29)</sup>	45 <sup>(45)</sup>	82 <sup>(61)</sup>	99 <sup>(77)</sup>	57 <sup>(93)</sup>	11 <sup>(109)</sup>	54 <sup>(125)</sup>
49 <sup>(14)</sup>	72 <sup>(30)</sup>	24 <sup>(46)</sup>	26 <sup>(62)</sup>	110 <sup>(78)</sup>	52 <sup>(94)</sup>	59 <sup>(110)</sup>	93 <sup>(126)</sup>
36 <sup>(15)</sup>	106 <sup>(31)</sup>	96 <sup>(47)</sup>	127 <sup>(63)</sup>	84 <sup>(79)</sup>	65 <sup>(95)</sup>	75 <sup>(111)</sup>	96 <sup>(127)</sup>
50 <sup>(16)</sup>	81 <sup>(32)</sup>	45 <sup>(48)</sup>	21 <sup>(64)</sup>	61 <sup>(80)</sup>	19 <sup>(96)</sup>	43 <sup>(112)</sup>	90 <sup>(128)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 59 – Ordem (7F OP D<sub>SA</sub>) D-ótima obtida por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento  $2^7$ , a partir da Ordem Padrão.

#1							
24 <sup>(1)</sup>	101 <sup>(17)</sup>	61 <sup>(33)</sup>	38 <sup>(49)</sup>	40 <sup>(65)</sup>	114 <sup>(81)</sup>	78 <sup>(97)</sup>	81 <sup>(113)</sup>
121 <sup>(2)</sup>	42 <sup>(18)</sup>	105 <sup>(34)</sup>	28 <sup>(50)</sup>	127 <sup>(66)</sup>	42 <sup>(82)</sup>	71 <sup>(98)</sup>	4 <sup>(114)</sup>
22 <sup>(3)</sup>	1 <sup>(19)</sup>	114 <sup>(35)</sup>	118 <sup>(51)</sup>	33 <sup>(67)</sup>	29 <sup>(83)</sup>	63 <sup>(99)</sup>	44 <sup>(115)</sup>
34 <sup>(4)</sup>	20 <sup>(20)</sup>	43 <sup>(36)</sup>	35 <sup>(52)</sup>	8 <sup>(68)</sup>	37 <sup>(84)</sup>	66 <sup>(100)</sup>	69 <sup>(116)</sup>
128 <sup>(5)</sup>	53 <sup>(21)</sup>	16 <sup>(37)</sup>	6 <sup>(53)</sup>	99 <sup>(69)</sup>	122 <sup>(85)</sup>	13 <sup>(101)</sup>	89 <sup>(117)</sup>
62 <sup>(6)</sup>	50 <sup>(22)</sup>	25 <sup>(38)</sup>	60 <sup>(54)</sup>	1 <sup>(70)</sup>	52 <sup>(86)</sup>	83 <sup>(102)</sup>	98 <sup>(118)</sup>
28 <sup>(7)</sup>	80 <sup>(23)</sup>	74 <sup>(39)</sup>	18 <sup>(55)</sup>	127 <sup>(71)</sup>	61 <sup>(87)</sup>	80 <sup>(103)</sup>	22 <sup>(119)</sup>
92 <sup>(8)</sup>	13 <sup>(24)</sup>	94 <sup>(40)</sup>	27 <sup>(56)</sup>	82 <sup>(72)</sup>	54 <sup>(88)</sup>	58 <sup>(104)</sup>	11 <sup>(120)</sup>
4 <sup>(9)</sup>	9 <sup>(25)</sup>	117 <sup>(41)</sup>	111 <sup>(57)</sup>	73 <sup>(73)</sup>	7 <sup>(89)</sup>	51 <sup>(105)</sup>	88 <sup>(121)</sup>
41 <sup>(10)</sup>	6 <sup>(26)</sup>	99 <sup>(42)</sup>	86 <sup>(58)</sup>	101 <sup>(74)</sup>	13 <sup>(90)</sup>	63 <sup>(106)</sup>	19 <sup>(122)</sup>
9 <sup>(11)</sup>	83 <sup>(27)</sup>	17 <sup>(43)</sup>	10 <sup>(59)</sup>	110 <sup>(75)</sup>	74 <sup>(91)</sup>	21 <sup>(107)</sup>	56 <sup>(123)</sup>
63 <sup>(12)</sup>	25 <sup>(28)</sup>	118 <sup>(44)</sup>	70 <sup>(60)</sup>	65 <sup>(76)</sup>	44 <sup>(92)</sup>	107 <sup>(108)</sup>	24 <sup>(124)</sup>
50 <sup>(13)</sup>	82 <sup>(29)</sup>	51 <sup>(45)</sup>	46 <sup>(61)</sup>	100 <sup>(77)</sup>	80 <sup>(93)</sup>	51 <sup>(109)</sup>	62 <sup>(125)</sup>
9 <sup>(14)</sup>	128 <sup>(30)</sup>	106 <sup>(46)</sup>	128 <sup>(62)</sup>	114 <sup>(78)</sup>	12 <sup>(94)</sup>	24 <sup>(110)</sup>	95 <sup>(126)</sup>
67 <sup>(15)</sup>	21 <sup>(31)</sup>	83 <sup>(47)</sup>	115 <sup>(63)</sup>	44 <sup>(79)</sup>	91 <sup>(95)</sup>	95 <sup>(111)</sup>	16 <sup>(127)</sup>
49 <sup>(16)</sup>	25 <sup>(32)</sup>	36 <sup>(48)</sup>	105 <sup>(64)</sup>	111 <sup>(80)</sup>	84 <sup>(96)</sup>	103 <sup>(112)</sup>	94 <sup>(128)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

Tabela 60 – Ordens (7F NO1 D<sub>SA</sub> e 7F NO2 D<sub>SA</sub>) D-ótimas obtidas por meio do algoritmo *simulated annealing* para o delineamento 2<sup>7</sup>, a partir das ordens (2) obtidas por Correa, Grima e Tort-Martorell (2012).

#1	#2			#2			
123 <sup>(1)</sup>	115 <sup>(33)</sup>	74 <sup>(65)</sup>	59 <sup>(97)</sup>	108 <sup>(1)</sup>	45 <sup>(33)</sup>	47 <sup>(65)</sup>	27 <sup>(97)</sup>
76 <sup>(2)</sup>	16 <sup>(34)</sup>	100 <sup>(66)</sup>	1 <sup>(98)</sup>	40 <sup>(2)</sup>	58 <sup>(34)</sup>	90 <sup>(66)</sup>	1 <sup>(98)</sup>
12 <sup>(3)</sup>	90 <sup>(35)</sup>	17 <sup>(67)</sup>	102 <sup>(99)</sup>	99 <sup>(3)</sup>	118 <sup>(35)</sup>	61 <sup>(67)</sup>	49 <sup>(99)</sup>
95 <sup>(4)</sup>	128 <sup>(36)</sup>	10 <sup>(68)</sup>	29 <sup>(100)</sup>	100 <sup>(4)</sup>	12 <sup>(36)</sup>	116 <sup>(68)</sup>	63 <sup>(100)</sup>
24 <sup>(5)</sup>	107 <sup>(37)</sup>	75 <sup>(69)</sup>	58 <sup>(101)</sup>	6 <sup>(5)</sup>	111 <sup>(37)</sup>	48 <sup>(69)</sup>	73 <sup>(101)</sup>
51 <sup>(6)</sup>	25 <sup>(38)</sup>	20 <sup>(70)</sup>	5 <sup>(102)</sup>	35 <sup>(6)</sup>	50 <sup>(38)</sup>	106 <sup>(70)</sup>	101 <sup>(102)</sup>
2 <sup>(7)</sup>	47 <sup>(39)</sup>	98 <sup>(71)</sup>	92 <sup>(103)</sup>	41 <sup>(7)</sup>	96 <sup>(39)</sup>	124 <sup>(71)</sup>	100 <sup>(103)</sup>
80 <sup>(8)</sup>	121 <sup>(40)</sup>	101 <sup>(72)</sup>	101 <sup>(104)</sup>	35 <sup>(8)</sup>	46 <sup>(40)</sup>	59 <sup>(72)</sup>	29 <sup>(104)</sup>
48 <sup>(9)</sup>	85 <sup>(41)</sup>	113 <sup>(73)</sup>	65 <sup>(105)</sup>	66 <sup>(9)</sup>	16 <sup>(41)</sup>	3 <sup>(73)</sup>	16 <sup>(105)</sup>
15 <sup>(10)</sup>	3 <sup>(42)</sup>	86 <sup>(74)</sup>	109 <sup>(106)</sup>	85 <sup>(10)</sup>	34 <sup>(42)</sup>	42 <sup>(74)</sup>	113 <sup>(106)</sup>
109 <sup>(11)</sup>	55 <sup>(43)</sup>	92 <sup>(75)</sup>	84 <sup>(107)</sup>	6 <sup>(11)</sup>	72 <sup>(43)</sup>	45 <sup>(75)</sup>	77 <sup>(107)</sup>
89 <sup>(12)</sup>	7 <sup>(44)</sup>	50 <sup>(76)</sup>	73 <sup>(108)</sup>	18 <sup>(12)</sup>	104 <sup>(44)</sup>	64 <sup>(76)</sup>	108 <sup>(108)</sup>
122 <sup>(13)</sup>	86 <sup>(45)</sup>	72 <sup>(77)</sup>	119 <sup>(109)</sup>	2 <sup>(13)</sup>	110 <sup>(45)</sup>	127 <sup>(77)</sup>	50 <sup>(109)</sup>
87 <sup>(14)</sup>	52 <sup>(46)</sup>	97 <sup>(78)</sup>	22 <sup>(110)</sup>	90 <sup>(14)</sup>	96 <sup>(46)</sup>	20 <sup>(78)</sup>	28 <sup>(110)</sup>
30 <sup>(15)</sup>	39 <sup>(47)</sup>	35 <sup>(79)</sup>	103 <sup>(111)</sup>	72 <sup>(15)</sup>	84 <sup>(47)</sup>	118 <sup>(79)</sup>	80 <sup>(111)</sup>
71 <sup>(16)</sup>	96 <sup>(48)</sup>	11 <sup>(80)</sup>	62 <sup>(112)</sup>	44 <sup>(16)</sup>	92 <sup>(48)</sup>	48 <sup>(80)</sup>	104 <sup>(112)</sup>
17 <sup>(17)</sup>	128 <sup>(49)</sup>	36 <sup>(81)</sup>	93 <sup>(113)</sup>	121 <sup>(17)</sup>	38 <sup>(49)</sup>	13 <sup>(81)</sup>	55 <sup>(113)</sup>
94 <sup>(18)</sup>	8 <sup>(50)</sup>	15 <sup>(82)</sup>	123 <sup>(114)</sup>	27 <sup>(18)</sup>	22 <sup>(50)</sup>	81 <sup>(82)</sup>	56 <sup>(114)</sup>
96 <sup>(19)</sup>	23 <sup>(51)</sup>	26 <sup>(83)</sup>	70 <sup>(115)</sup>	52 <sup>(19)</sup>	112 <sup>(51)</sup>	21 <sup>(83)</sup>	7 <sup>(115)</sup>
88 <sup>(20)</sup>	110 <sup>(52)</sup>	59 <sup>(84)</sup>	91 <sup>(116)</sup>	58 <sup>(20)</sup>	5 <sup>(52)</sup>	68 <sup>(84)</sup>	72 <sup>(116)</sup>
5 <sup>(21)</sup>	52 <sup>(53)</sup>	46 <sup>(85)</sup>	75 <sup>(117)</sup>	94 <sup>(21)</sup>	65 <sup>(53)</sup>	10 <sup>(85)</sup>	111 <sup>(117)</sup>
56 <sup>(22)</sup>	121 <sup>(54)</sup>	86 <sup>(86)</sup>	18 <sup>(118)</sup>	51 <sup>(22)</sup>	92 <sup>(54)</sup>	87 <sup>(86)</sup>	125 <sup>(118)</sup>
8 <sup>(23)</sup>	68 <sup>(55)</sup>	69 <sup>(87)</sup>	44 <sup>(119)</sup>	117 <sup>(23)</sup>	126 <sup>(55)</sup>	83 <sup>(87)</sup>	20 <sup>(119)</sup>
30 <sup>(24)</sup>	119 <sup>(56)</sup>	48 <sup>(88)</sup>	87 <sup>(120)</sup>	34 <sup>(24)</sup>	115 <sup>(56)</sup>	99 <sup>(88)</sup>	11 <sup>(120)</sup>
128 <sup>(25)</sup>	64 <sup>(57)</sup>	104 <sup>(89)</sup>	42 <sup>(121)</sup>	102 <sup>(25)</sup>	121 <sup>(57)</sup>	110 <sup>(89)</sup>	1 <sup>(121)</sup>
19 <sup>(26)</sup>	15 <sup>(58)</sup>	96 <sup>(90)</sup>	19 <sup>(122)</sup>	96 <sup>(26)</sup>	3 <sup>(58)</sup>	22 <sup>(90)</sup>	83 <sup>(122)</sup>
117 <sup>(27)</sup>	36 <sup>(59)</sup>	42 <sup>(91)</sup>	82 <sup>(123)</sup>	115 <sup>(27)</sup>	104 <sup>(59)</sup>	87 <sup>(91)</sup>	73 <sup>(123)</sup>
41 <sup>(28)</sup>	13 <sup>(60)</sup>	3 <sup>(92)</sup>	50 <sup>(124)</sup>	121 <sup>(28)</sup>	38 <sup>(60)</sup>	65 <sup>(92)</sup>	117 <sup>(124)</sup>
99 <sup>(29)</sup>	72 <sup>(61)</sup>	98 <sup>(93)</sup>	22 <sup>(125)</sup>	20 <sup>(29)</sup>	102 <sup>(61)</sup>	90 <sup>(93)</sup>	70 <sup>(125)</sup>
61 <sup>(30)</sup>	38 <sup>(62)</sup>	77 <sup>(94)</sup>	81 <sup>(126)</sup>	42 <sup>(30)</sup>	105 <sup>(62)</sup>	58 <sup>(94)</sup>	10 <sup>(126)</sup>
51 <sup>(31)</sup>	78 <sup>(63)</sup>	124 <sup>(95)</sup>	63 <sup>(127)</sup>	75 <sup>(31)</sup>	110 <sup>(63)</sup>	51 <sup>(95)</sup>	58 <sup>(127)</sup>
76 <sup>(32)</sup>	104 <sup>(64)</sup>	68 <sup>(96)</sup>	61 <sup>(128)</sup>	107 <sup>(32)</sup>	76 <sup>(64)</sup>	23 <sup>(96)</sup>	29 <sup>(128)</sup>

( ) Ordem em que devem ser executados os tratamentos

## APÊNDICE B – Scripts dos Algoritmos *exchange* e *simulated annealing*

```
#####
##### Algoritmo exchange para gerar delineamento
##### A-ótimo

rm(list = ls())

gera_A <- function(M,w0,eps,num_iter)

{
  # M: Matriz do Delineamento#
  # w0: Peso inicial #
  # eps: Margem de erro #
  # número de iterações #

  Trf <-sum(diag(t(M)%*%diag(w0)%*%M)) ## Traço matriz MI ##

  nlin <- nrow(M)                ## dimensão da MI ##

  p <- ncol(M)

  iter=1

  while (iter <=num_iter)

  {
    ind_lin<-sample.int(nlin,size=2,prob=w0)

    Mteste <- M
    Mteste[ind_lin[1],] <- M[ind_lin[2],]
    Mteste[ind_lin[2],] <- M[ind_lin[1],]

    Mteste <- Mteste[,-6]

    Mteste <- cbind(Mteste,1:nlin)

    Trest<-sum(diag(solve(t(Mteste)%*%diag(w0)%*%Mteste)))
    # ##### Aplicação do critério de otimização ##### #

    if (Trest<Trf) M=Mteste

    {
      # atualiza o peso #

      w0 <- runif(nlin) ; w0 <- w0*1/sum(w0)

      crit = abs((1/Trf)-(1/Trest))

      if (crit<eps) break
    }
  }
}
```

```
}  
  iter=iter + 1  
}  
  
Aeff = Trest/Trf  
  
(list(n_iter=iter,Eficiencia=Aeff,conv=crit,A_opt=Mteste,A_ref=M,  
trAest=Trest,trAref=Trf))  
  
}  
M <-read.table("MAT5F_NO2.txt", h=F)  
  
attach(M)  
  
M <-as.matrix(M)  
  
w0 <- c(rep(1/32,32))  
  
sum(w0)  
  
ch_A <-gera_A(M,w0,0.001,100000)  
ch_A  
  
#### Fim
```

```
#####
##### Algoritmo exchange para gerar delineamento
##### D-ótimo

rm(list = ls())

gera_D <- function(M,w0,eps,num_iter)

{
  # M: Matriz do Delineamento#
  # w0: Peso inicial #
  # eps: Margem de erro #
  # número de iterações #

  Md <-det(t(M)%*%diag(w0)%*%M) # #### Det matriz MI #### #

  nlin <- nrow(M)                # #### dimensão da MI #### #

  p <- ncol(M)

  iter=1

  while (iter <=num_iter)

  {
    ind_lin<-sample.int(nlin,size=2,prob=w0)

    Mteste <- M
    Mteste[ind_lin[1],] <- M[ind_lin[2],]
    Mteste[ind_lin[2],] <- M[ind_lin[1],]

    Mteste <- Mteste[,-8]

    Mteste <- cbind(Mteste,1:nlin)

    Mdest<-det(t(Mteste)%*%diag(w0)%*%Mteste) # det permutada #
    # ##### Aplicação do critério de otimização ##### #

    if (Mdest>Md) M=Mteste

    {
      # atualiza o peso #

      w0 <- runif(nlin) ; w0 <- w0*1/sum(w0)

      crit = abs(Mdest - Md)

      if (crit<eps) break

    }
  }
}
```

```
    iter=iter + 1
  }

  Deff = (Md/Mdest)^(1/p)

  return (list(n_iter=iter,Eficiencia=Deff,conv=crit,D_opt=Mteste,D_ref=M))
}
# ##### Entrada dos dados ##### #

M <- read.table("MAT7F_NO2.txt", h=F)

attach(M)

M <- as.matrix(M)

w0 <- c(rep(1/128,128))
sum(w0)

ch_D <- gera_D(M,w0,0.01,100000)
ch_D

#### Fim
```



```
#####
##### Algoritmo simulated annealing para gerar
##### delineamento A-ótimo

rm(list=ls(all=TRUE))

(s0_orig <-read.table("MAT7F.txt",h=F))

nlinha=nrow(s0_orig)

ncoluna=ncol(s0_orig) - 1

s0=as.matrix(s0_orig)

modelo <- function(xx)
{
  y <- sum(diag(solve(t(xx)%*(xx))))

  try(solve(t(xx)%*(xx)))
  options(show.error.messages = TRUE)

  return(y)
}

simulated_annealing <- function(func, s0, niter = 100000, step = 0.5)
{
  ## step tamanho do passo para resfriamento
  ## s0 valor inicial
  ## s atualiza estado
  ## f atualiza valor na função
  ## b Estimativa_ótima
  ## c Valor atual
  ## n valor simulado

  s_b <- s_c <- s_n <- s0

  f_b <- f_c <- f_n <- func(s_n)

  message("It\t otimo \t atual \t sim \t Temp")

  message(sprintf("%i\t%.4f\t%.4f\t%.4f\t%.4f", 0L, f_b, f_c, f_n, 100000))

  result <- matrix(nrow=niter, ncol=4) #mudança

  for (k in 1:niter)
  {
    Temp <- (1 - step)^k
```

```

# ##### valor simulado próxima a vizinhança ##### #

### gera matrix com random norm. Elementos de matrizes intermediarias sao + 1 ou -1.

s_n <- cbind(matrix(sign(rnorm((nlinha*ncoluna),s_c,1)),nrow=nlinha),
c(1:128));

f_n <- func(s_n)

# ##### Atualiza o estado ##### #

if (f_n < f_c || runif(1, 0, 1) < exp(-(f_n - f_c) / Temp))

{
  s_c <- s_n

  f_c <- f_n
}

# atualiza estimativa

if (f_n < f_b)

{
  s_b <- s_n

  f_b <- f_n
}

result[k,] <- c(f_b,f_c,f_n,Temp)
message(sprintf("%i\t%.4f\t%.4f\t%.4f\t%.4f", k, f_b, f_c, f_n, Temp))
}

return(list(matriz=result,iteracoes = niter, y_otimo = f_b, coord = s_b))

}
sol <- simulated_annealing(modelo,s0)
sol

crit <- as.matrix(sol$matriz[,2])
length(crit)
iter <- as.matrix(1:100000)
length(iter)

plot(crit~iter)

##### Fim

```

```
#####
##### Algoritmo simulated annealing para gerar
##### delineamento D-ótimo

rm(list=ls(all=TRUE))

(s0_orig <- read.table("MAT7F.txt", h=F))

nlinha = nrow(s0_orig)

ncoluna = ncol(s0_orig) - 1

s0 = as.matrix(s0_orig)

modelo <- function(xx)
{
  y <- det(solve((t(xx))%*%(xx)))

  try(solve(t(xx)%*%(xx)))
  options(show.error.messages = TRUE)

  return(y)
}

simulated_annealing <- function(func, s0, niter = 100000, step = 0.5)
{
  ## step tamanho do passo para resfriamento
  ## s0 valor inicial
  ## s atualiza estado
  ## f atualiza valor na função
  ## b Estimativa_ótima
  ## c Valor atual
  ## n valor simulado

  s_b <- s_c <- s_n <- s0

  f_b <- f_c <- f_n <- func(s_n)

  message("It\t ótimo \t atual \t sim \t Temp")

  message(sprintf("%i\t%.4f\t%.4f\t%.4f\t%.4f", 0L, f_b, f_c, f_n, 100000))

  result <- matrix(nrow=niter, ncol=4) #mudança

  for (k in 1:niter)
  {
    Temp <- (1 - step)^k
  }
}
```

```

# ##### valor simulado próxima a vizinhança ##### #
### gera matrix com random norm. Elementos de matrizes intermediarias sao + 1 ou -1.

s_n <- cbind(matrix(sign(rnorm((nlinha*ncoluna),s_c,1)),nrow=nlinha),
c(1:128));

f_n <- func(s_n)

# ##### Atualiza o estado ##### #

if (f_n < f_c || runif(1, 0, 1) < exp(-(f_n - f_c) / Temp))

{
  s_c <- s_n

  f_c <- f_n
}

# atualiza estimativa

if (f_n < f_b)

{
  s_b <- s_n

  f_b <- f_n
}

result[k,] <- c(f_b,f_c,f_n,Temp)
message(sprintf("%i\t%.4f\t%.4f\t%.4f\t%.4f", k, f_b, f_c, f_n, Temp))
}

return(list(matriz=result,iteracoes = niter, y_otimo = f_b, coord = s_b))

}
sol <- simulated_annealing(modelo,s0)
sol

crit <- as.matrix(sol$matriz[,2])
length(crit)
iter <- as.matrix(1:100000)
length(iter)

plot(crit~iter)

#### Fim

```