



JÉSSICA GRACIELLE SILVA SPURI

**ESQUEMAS DE ASSOCIAÇÃO E DELINEAMENTOS
EXPERIMENTAIS**

**LAVRAS - MG
2024**

JÉSSICA GRACIELLE SILVA SPURI

ESQUEMAS DE ASSOCIAÇÃO E DELINEAMENTOS EXPERIMENTAIS

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

Prof. Dr. Renato Ribeiro de Lima
Orientador

Prof. Dr. Lucas Monteiro Chaves
Coorientador

**LAVRAS - MG
2024**

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

Spuri, Jéssica Gracielle Silva.
Esquemas de associação e delineamentos experimentais /
Jéssica Gracielle Silva Spuri. - 2024.
206 p. : il.

Orientador(a): Renato Ribeiro Lima.
Coorientador(a): Lucas Monteiro Chaves.
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2024.
Bibliografia.

1. Álgebra de Bose-Mesner. 2. Diagramas de Hasse. 3. Grafos.
I. Lima, Renato Ribeiro. II. Chaves, Lucas Monteiro. III. Título.

JÉSSICA GRACIELLE SILVA SPURI

**ESQUEMAS DE ASSOCIAÇÃO E DELINEAMENTOS EXPERIMENTAIS
ASSOCIATION SCHEMES AND EXPERIMENTAL DESIGN**

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

APROVADA em 18 de março de 2024.

Prof. Dr. Júlio Silvio de Sousa Bueno Filho	UFLA
Prof. Dr(a). Maria do Carmo Pacheco de Toledo Costa	UFLA
Prof. Dr(a). Renata Alcarde Sermarini	ESALQ

Prof. Dr. Renato Ribeiro de Lima
Orientador

Prof. Dr. Lucas Monteiro Chaves
Coorientador

**LAVRAS - MG
2024**

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

RESUMO

Uma área importante da Estatística é a que estuda delineamentos experimentais. Os delineamentos experimentais referem-se ao desenho no qual os experimentos são conduzidos. A teoria Matemática subjacente à construção desses delineamentos muitas vezes é pouco explicitada. Uma abordagem que apresenta de forma equilibrada a análise estatística dos delineamentos experimentais e também a complexidade da matemática envolvida, encontra-se nos trabalhos de Rosemary A. Bailey. O presente trabalho visa esclarecer e tornar mais acessível a relação entre a Estatística e a Teoria Matemática subjacente. Em particular, a teoria dos esquemas de associação e sua conexão com os delineamentos experimentais. Diagramas de Hasse e suas relações com a análise de variância são exemplificados. O uso de grafos em delineamentos, teoria relativamente recente na literatura, é também abordado. Neste contexto, o presente trabalho tem por objetivo abordar a teoria dos delineamentos experimentais utilizando esquemas de associação. A partir desta abordagem temos as seguintes contribuições: um exemplo geométrico para o esquema de associação cíclico é proposto; um novo algoritmo para o cálculo do strata de um delineamento é mostrado em detalhes; apresenta-se uma discussão sobre as distintas definições de delineamentos ortogonais; utilizando a teoria dos grafos, tem-se resultados sobre delineamentos solúveis; e grafos são utilizados como redes elétricas em delineamentos ótimos. Além disso, algumas novas demonstrações alternativas são apresentadas.

Palavras-chave: Álgebra de Bose-Mesner; Diagramas de Hasse; Grafos.

ABSTRACT

An important area of Statistics is that which studies experimental designs. Experimental designs refer to the design in which experiments are conducted. The mathematical theory underlying the construction of these designs is often little explained. An approach that presents in a balanced way the statistical analysis of experimental designs and also the complexity of the mathematics involved can be found in the works of Rosemary A. Bailey. The present work aims to clarify and make more accessible the relationship between Statistics and the underlying Mathematical Theory. In particular, the theory of association schemes and its connection with experimental designs. Hasse diagrams and their relationships with variance analysis are exemplified. The use of graphs in designs, a relatively recent theory in the literature, is also addressed. In this context, the present work aims to address the theory of experimental designs using association schemes. From this approach, we have the following contributions: a geometric example for the cyclic association scheme is proposed; a new algorithm for calculating the strata of a design is shown in detail; a discussion is presented on the different definitions of orthogonal designs; using graph theory, we have results on soluble designs; and graphs are used as electrical networks in optimal designs. Furthermore, some new alternative demonstrations are presented.

Keywords: Bose-Mesner Algebra; Hasse Diagrams; Graphs.

INDICADORES DE IMPACTO

A tese apresenta impactos sociais e tecnológicos. Por se tratar de um texto de aspecto teórico, tem por finalidade impactar principalmente pesquisadores e educadores de diversas áreas do conhecimento. Uma vez que a tese apresenta uma revisão de literatura sobre os textos abordados e contribuições teóricas, as áreas temáticas de tecnologia e produção podem ser atingidas. O texto aborda as áreas da Matemática e Estatística, em particular os delineamentos experimentais são enfatizados e estes são utilizados em diversas linhas de pesquisa. O trabalho visa esclarecer e tornar mais acessível a relação entre a Estatística e a Teoria Matemática subjacente. Neste contexto, a tese teve por objetivo abordar a teoria dos delineamentos experimentais utilizando esquemas de associação. Como resultado tem-se um texto amplo com valor didático que pode ser utilizado por acadêmicos e pesquisadores da UFLA e também por toda população que trabalha de forma direta e/ou indireta com pesquisas relacionadas à experimentação.

IMPACT INDICATORS

The thesis presents social and technological impacts. It is a text presenting theoretical aspects and it impact mainly researchers and educators from different areas of knowledge. The thematic areas of technology and production are addressed, since the thesis presents a literature review of the main texts which cover the experimental designs, including theoretical contributions. Aspects of Mathematics and Statistics are covered, in particular, experimental designs are emphasized, which are used in different research areas. The work aimed to clarify and to do more accessible the relationship between Statistics and the underlying Mathematical Theory considered in experimental designs. In this context, the thesis aimed to address the theory of experimental designs using association schemes. As a result, we have a broad text with didactic value that can be used by academics and researchers that works directly and/or indirectly with experimentation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Delineamento em blocos.	34
Figura 2.2 – Ordem parcial.	48
Figura 2.3 – Partição F com 4 classes em Ω	49
Figura 2.4 – Diagrama de Hasse para o exemplo 2.6.3.	50
Figura 2.5 – Subespaços ortogonais.	54
Figura 2.6 – Classes de H_i de $F \vee G$	58
Figura 2.7 – Croqui do exemplo 2.6.6.	62
Figura 2.8 – Fatores de tratamento para o exemplo 2.6.7.	67
Figura 2.9 – Fatores de tratamento para o exemplo 2.6.8.	69
Figura 2.10 – Fatores de tratamento para o exemplo 2.6.7.	71
Figura 2.11 – Ordem parcial em $\mathfrak{F}_1/\mathfrak{F}_2$	74
Figura 2.12 – Partições de $\mathfrak{F}_1 \times \mathfrak{F}_2$	74
Figura 2.13 – Diagramas de Hasse exemplo 2.6.10.	75
Figura 2.14 – Delineamento $(\underline{2}/\underline{3}) \times (\underline{2}/\underline{3})$	75
Figura 2.15 – $\Omega_1 \times \Omega_2$ para $(\underline{2}/\underline{3}) \times (\underline{2}/\underline{3})$	76
Figura 2.16 – Diagramas de Hasse para fatores de parcela de $(\underline{2}/\underline{3}) \times (\underline{2}/\underline{3})$	76
Figura 2.17 – Delineamento $(\underline{4} \times \underline{12})/\underline{2}$	77
Figura 2.18 – Diagramas de Hasse para $(\underline{4} \times \underline{12})/\underline{2}$	77
Figura 2.19 – Delineamento linha e coluna e grafo de Petersen.	80
Figura 2.20 – Representação geométrica de delineamentos.	84
Figura 2.21 – W_1^\ominus	99
Figura 2.22 – Diagrama para Q	102
Figura 2.23 – Diagrama de Hasse para tratamentos do exemplo 2.7.2.	104
Figura 2.24 – Diagrama de Hasse para parcelas do exemplo 2.7.2.	104
Figura 2.25 – Diagrama de Hasse combinado para o exemplo 2.7.2.	105
Figura 2.26 – Bloco do exemplo 2.7.3.	106
Figura 2.27 – Diagrama de Hasse para tratamentos do exemplo 2.7.3.	107
Figura 2.28 – Diagrama de Hasse para parcelas do exemplo 2.7.3.	108
Figura 2.29 – Diagrama de Hasse combinado para o exemplo 2.7.3.	109
Figura 2.30 – Croqui do exemplo 2.7.4.	111
Figura 2.31 – Diagramas de Hasse para tratamentos e parcelas do exemplo 2.7.4.	111

Figura 2.32 – Diagramas de Hasse combinado do exemplo 2.7.4.	112
Figura 2.33 – Casas de vegetação do exemplo 2.7.5.	115
Figura 2.34 – Diagramas de Hasse para o exemplo 2.7.5.	115
Figura 2.35 – Diagramas de Hasse para decomposição de $(V_F + V_G)^\perp$ do exemplo 2.7.5.	117
Figura 2.36 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item a).	118
Figura 2.37 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item b).	118
Figura 2.38 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item c).	119
Figura 2.39 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item d).	119
Figura 2.40 – Delineamento confundido $F + G$ em uma casa e $F + 2G$ em outra casa para o exemplo 2.7.5, item e).	120
Figura 2.41 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item d), considerando que cada casa é um experimento distinto.	120
Figura 2.42 – $a_i = 5$	122
Figura 2.43 – $ \mathcal{C}_i(\alpha) \cap \mathcal{C}_j(\beta) = 2$	122
Figura 2.44 – Configuração item c).	123
Figura 2.45 – Grafo de Petersen	123
Figura 2.46 – Proposição 2.8.1 item ii).	124
Figura 2.47 – Blocos do exemplo 2.8.2.	127
Figura 2.48 – Grafo de concorrência do exemplo 2.8.2.	127
Figura 2.49 – Componentes conexas do grafo G	144
Figura 2.50 – Grafo estrela.	146
Figura 4.1 – $l_1(\alpha) = \alpha + 3$ (à esquerda) $l_2(\alpha) = \alpha$ (à direita).	149
Figura 4.2 – D_Δ	150
Figura 4.3 – Pontos p_{ij}^k sobre D_{Δ_i} e D_{Δ_j}	151
Figura 4.4 – Pontos da reta $\theta \in \mathbb{Z}_t$	153
Figura 4.5 – Definição de ortogonalidade.	169
Figura 4.6 – Grafo completo e superblocos para $t = 4$ e $k = 2$	171
Figura 4.7 – Grafo completo para $t = 6$	172
Figura 4.8 – Superblocos da figura 4.7.	172
Figura 4.9 – Grafo regular e superblocos para $t = 8$	173
Figura 4.10 – Grafo regular e superblocos para $t = 8$ (outra configuração).	173
Figura 4.11 – $I = I_1 + I_2 = I_3 + I_4$	174

Figura 4.12 – Associação em série e paralelo.	175
Figura 4.13 – Delineamentos \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2	176
Figura 4.14 – Grafos \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2	176
Figura 4.15 – Resistências \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2	177
Figura 4.16 – Triângulos \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2	177
Figura 4.17 – Árvore com $t > 4$	181
Figura 4.18 – Árvore com $t = 4$	181
Figura 4.19 – Queen-bee com $t = 9$	182
Figura 4.20 – Pares de tratamentos para queen-bee.	182
Figura 4.21 – Comaparação para queen-bee.	183
Figura 4.22 – Grafos unicíclicos com $t = 5$	184
Figura 4.23 – Grafo unicíclico com árvore em algum vértice.	185
Figura 4.24 – Grafos unicíclicos com uma aresta adicionada ao grafo estrela.	185
Figura 4.25 – Grafo com um ciclo e $t = 5$	186
Figura 4.26 – Vértices adjacentes a um único vértice do ciclo.	186
Figura 1 – Superblocos.	200

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Exemplo 2.3.1.	27
Tabela 2.2 – Exemplo 2.3.3.	31
Tabela 2.3 – Fatores de tratamento para exemplo 2.6.7.	67
Tabela 2.4 – Fatores de tratamento para o exemplo 2.6.8.	69
Tabela 2.5 – Esquema de análise de variância para o exemplo 2.7.2.	106
Tabela 2.6 – Esquema de análise de variância para o exemplo 2.7.3.	110
Tabela 2.7 – Esquema de análise de variância para o exemplo 2.7.4.	112
Tabela 2.8 – Caracteres do exemplo 2.7.5.	116
Tabela 4.1 – Tabela de diferenças.	155
Tabela 4.2 – Delineamento usando as translações.	155
Tabela 4.3 – Autovetores e autovalores.	159
Tabela 4.4 – Blocos incompletos para $t = 4$ e $k = 2$	170
Tabela 4.5 – Superblocos da figura 4.6.	171

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	REFERENCIAL TEÓRICO	17
2.1	Esquemas de associação	17
2.2	Álgebra de Bose-Mesner	21
2.2.1	Definindo a álgebra de Bose-Mesner	21
2.2.2	Tabela de caracteres	23
2.3	Combinando esquemas de associação	25
2.3.1	<i>Crossing</i>	26
2.3.2	<i>Nesting</i>	29
2.4	Delineamento em blocos incompletos	31
2.4.1	Função de delineamento	32
2.4.2	Matrizes de tratamento-bloco e de concorrência	33
2.4.3	Estimando os efeitos dos tratamentos	35
2.4.4	Estimando os efeitos dos tratamentos supondo que a soma dos efeitos dos tratamentos é nula	38
2.4.5	Fatores de eficiência	42
2.5	Delineamento em blocos incompletos balanceados e parcialmente balanceados	43
2.5.1	Esquemas de associação e delineamentos	43
2.5.2	Uma propriedade dos delineamentos simétricos	45
2.6	Delineamentos com vários tipos de blocagens (família de partições)	47
2.6.1	Definindo partições	49
2.6.2	Partições ortogonais	53
2.6.3	Estrutura ortogonal em blocos no contexto de esquemas de associação	60
2.6.4	Exemplos de estrutura ortogonal em blocos	66
2.6.5	<i>Crossing</i> e <i>nesting</i> em estrutura ortogonal em blocos	72
2.7	Delineamento para conjuntos estruturados	78
2.7.1	Delineamentos parcialmente balanceados	80
2.7.2	Modelos de efeitos fixos e modelos de efeitos aleatórios	82
2.7.3	Delineamentos ortogonais parcialmente balanceados	92
2.7.4	Delineamentos ortogonais balanceados	95
2.7.5	Exemplos, diagrama de Hasse combinado e análise de variância	102

2.7.6	Decompondo interações	112
2.8	Grafos em teoria dos delineamentos	121
2.8.1	Esquemas de associação e grafos	121
2.8.2	Delineamentos e grafos	124
2.8.2.1	Matriz Laplaceana	125
2.8.2.2	Relação entre a matriz de Laplaceana e a matriz de informação	128
2.8.3	Otimidade de delineamentos e grafos	132
2.8.4	Variância balanceada	136
2.8.5	Autovalores da matriz Laplaceana	141
3	METODOLOGIA	147
4	RESULTADOS	149
4.1	Abordagem geométrica aos esquemas de associação cíclico	149
4.2	Álgebra de Bose-Mesner como uma álgebra de matrizes diagonais	156
4.2.1	Exemplo de aplicação do algoritmo	160
4.3	Discussões sobre a definição de delineamentos ortogonais	166
4.4	Aplicações de grafos em delineamentos solúveis	169
4.4.1	Delineamentos solúveis para grafos completos	170
4.4.2	Delineamentos solúveis para grafos regulares	172
4.5	Grafos como circuitos elétricos aplicados a problemas de otimalidade de delineamentos	174
4.5.1	Grafos unicíclicos	184
4.5.2	Uma aplicação do teorema de Foster	187
5	CONCLUSÃO	191
	REFERÊNCIAS	192
	APENDICE A – Glossário	193
	APENDICE B – Matrizes utilizadas em delineamentos	194
	APENDICE C – O teorema de Bose para delineamentos balanceados solúveis	200
	APENDICE D – Demonstração do teorema 2.7.3	204

1 INTRODUÇÃO

O planejamento de experimentos torna possível a análise estatística dos dados coletados. O início da Estatística Experimental ocorreu na estação experimental de Rothamsted, na Inglaterra, no início do século passado. Já nessa época desenvolveu-se a teoria dos delineamentos em blocos incompletos e uma particularidade de experimentos foram elaborados. Desenvolveu-se então a teoria dos delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados e na década de 1950, Bose e Shimamoto criaram o conceito de esquemas de associação, posteriormente relacionado à álgebra de Bose-Mesner. Tem-se então conceitos que originam da prática, mas que sua aplicabilidade ultrapassa os problemas que os produziram. Nesse sentido, apesar de ser desenvolvida para abordar problemas experimentais, a teoria dos delineamentos experimentais está relacionada com problemas matemáticos bastante complexos, como teoria dos grupos de permutação, aritmética modular, ordem parcial em conjuntos, entre outros.

Atualmente os estatísticos utilizam resultados dos esquemas de associação sem considerar sua teoria diretamente, uma vez que se trata de uma teoria matemática abstrata. Já os matemáticos, utilizam a teoria desconhecendo que esta foi criada no contexto da Estatística Experimental. Para sanar esta situação, que limita seu desenvolvimento, Bailey (2004) escreveu o livro "Association schemes: designed experiments, algebra and combinatorics". Nesse livro, que provavelmente pode ser considerado um clássico, existe uma abordagem que tenta equilibrar aspectos estatísticos e matemáticos. Nessa obra são apresentados os aspectos mais importantes do estágio atual da teoria. Como se trata de um texto abrangente, alguns aspectos são resumidos como demonstrações e alguns conceitos apresentados. Talvez, para equilibrar o fato do aspecto teórico dessa obra, a autora publicou outro livro "Design of comparative experiments" (Bailey, 2008). Este último trabalho dialoga bem com o estatístico, uma vez que possui vários experimentos que foram utilizados em situações reais, apesar de utilizar álgebra linear e os conceitos abstratos de aritmética modular. Nessa obra todas as demonstrações são omitidas.

Em Bailey (2004) a análise de variância não é abordada e o uso de diagramas de Hasse é quase inexistente. Por outro lado, a função de Moebius é extensivamente utilizada. Já em Bailey (2008), o termo "esquemas de associação" não é citado em nenhum momento e o diagrama de Hasse é amplamente utilizado conjuntamente com a análise de variância.

Nesse contexto é que se insere o presente trabalho. Seguindo essencialmente Bailey (2004), são desenvolvidas demonstrações alternativas, demonstrações não apresentadas e explicações que esclarecem as relações entre alguns dos conceitos apresentados. Em relação ao texto de Bailey (2008), mas com menor ênfase, também são apresentadas demonstrações, diagramas de Hasse e tabelas de análise de variância que não foram apresentadas.

Outro conceito utilizado extensivamente em ambos os livros é o da ortogonalidade entre partições e subespaços. Tal conceito foi tratado com especial cuidado no presente trabalho.

O texto está organizado como segue: capítulo 2 referencial teórico, capítulo 3 metodologia e capítulo 4 resultados. O referencial teórico é extenso e está dividido em várias seções, as quais são descritas brevemente a seguir:

- a) na seção 2.1, as definições e algumas demonstrações são apresentadas. Os exemplos particulares de esquemas de associação estão muito bem exemplificados em Bailey (2004) e, portanto, não são apresentados;
- b) a seção 2.2 apresenta as definições básicas sobre a álgebra de Bose-Mesner;
- c) a seção 2.3 deste texto se restringe a desenvolver alguns exemplos simples utilizando explicitamente matrizes para combinar esquemas de associação, uma vez que Bailey (2004) é bastante completo e detalhado;
- d) na seção 2.4 deste trabalho é apresentada a teoria dos delineamentos em blocos incompletos, variância e fatores de eficiência. Nesse sentido, apresenta-se uma demonstração elaborada dos passos propostos em Bailey (2008, p. 226), para a estimação de efeitos dos tratamentos;
- e) na seção 2.5 são apresentadas as relações entre delineamentos em blocos incompletos balanceados e parcialmente balanceados e esquemas de associação. São apresentadas algumas observações sobre fatores de eficiência e para o caso de delineamentos balanceados simétricos;
- f) na seção 2.6 tem-se a preocupação de enfatizar o conceito de partições ortogonais. É apresentada a demonstração detalhada do teorema de Bailey (2008, p. 180). A relação entre estrutura ortogonal em blocos e esquemas de associação é descrita. São desenvolvidos também exemplos para explicar a construção “*crossing*” e “*nesting*” no contexto de estrutura ortogonal em blocos;
- g) a seção 2.7 é a mais complexa, onde são apresentados os delineamentos ortogonais parcialmente balanceados e modelos de efeitos fixos e de efeitos aleatórios. Este segue

essencialmente Bailey (2004). Essa termina com o desenvolvimento de vários exemplos de experimentos que são apresentados nos livros de Bailey (2004, 2008);

- h) a seção 2.8, última do referencial teórico, descreve como esquemas de associação podem ser definidos em termos de grafos. Esta seção foi baseada nos artigos de Bailey e Cameron (2009, 2011).

Como já mencionado, no capítulo 4 têm-se os resultados. Neste são apresentadas as contribuições para os temas abordados. Este capítulo é organizado em 4 seções, as quais são apresentadas a seguir:

- a) a seção 4.1 apresenta uma abordagem geométrica aos esquemas de associação cíclicos. Este depende da aritmética modular e é apresentado de forma bastante algébrica em Bailey (2004). Nesse sentido, propõe-se uma nova abordagem, a geométrica;
- b) na seção 4.2 uma contribuição à abordagem da Álgebra de Bose-Mesner como uma álgebra de matrizes diagonais é apresentada. Nesse sentido, um novo algoritmo para o cálculo dos caracteres é apresentado e um exemplo é desenvolvido em detalhes;
- c) a seção 4.3 apresenta uma discussão sobre delineamentos ortogonais. Nesse momento são apresentadas as diferenças entre as definições de Bailey (2004, 2008);
- d) na seção 4.4 para delineamentos em blocos de tamanho dois, utilizando grafos completos e regulares, apresenta-se a obtenção de delineamentos solúveis;
- e) a seção 4.5 utiliza grafos como redes elétricas no estudo de delineamentos ótimos.

Para tornar a leitura do texto mais clara, tem-se um apêndice com as definições das principais matrizes utilizadas no texto. A demonstração do Teorema de Bose para delineamentos solúveis também é apresentada no apêndice, sendo a mesma do artigo original, porém mais detalhada. A demonstração do teorema 2.7.3 também encontra-se no apêndice D, devido sua complexidade.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Neste capítulo encontra-se o referencial teórico do presente trabalho.

2.1 Esquemas de associação

Neste tópico tem-se por objetivo definir os esquemas de associação. São apresentadas duas definições; a primeira baseada em classes associadas e a segunda baseada em matrizes.

Definição 2.1.1. (Bailey, 2004, p. 1) Um esquema de associação é uma relação entre pares de elementos de um conjunto Ω . É simplesmente uma partição $\mathfrak{C} = \{\mathfrak{C}_0, \mathfrak{C}_1, \dots, \mathfrak{C}_s\}$ do conjunto $\Omega \times \Omega$, isto é,

$$\bigcup_{i=0}^s \mathfrak{C}_i = \Omega \times \Omega,$$

com propriedades particulares, a saber:

- a) $\mathfrak{C}_0 = \text{diag}(\Omega \times \Omega) = \{(\alpha, \alpha) : \alpha \in \Omega\}$;
- b) \mathfrak{C}_i é simétrico, se $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_i$ implica que $(\beta, \alpha) \in \mathfrak{C}_i$;
- c) para todo $i, j, k \in \{0, 1, \dots, s\}$ existem inteiros p_{ij}^k tais que para todo $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_k$,

$$p_{ij}^k = |\{\gamma \in \Omega : (\alpha, \gamma) \in \mathfrak{C}_i \text{ e } (\gamma, \beta) \in \mathfrak{C}_j\}|.$$

Alguns valores p_{ij}^k são obtidos de forma geral para todos os esquemas de associação. Se $i \neq j$, $p_{ij}^0 = 0$; se $j \neq k$, $p_{0j}^k = 0$; se $i \neq k$, $p_{i0}^k = 0$; $p_{0j}^j = p_{i0}^i = 1$.

Diremos que β é i -associado de α se $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_i$. Tem-se pela propriedade c) que

$$\begin{aligned} p_{ii}^0 &= |\{\gamma \in \Omega : (\alpha, \gamma) \in \mathfrak{C}_i \text{ e } (\gamma, \alpha) \in \mathfrak{C}_i\}| = |\{\gamma \in \Omega : (\alpha, \gamma) \in \mathfrak{C}_i\}| \\ &= \text{número de } i\text{-associados de } \alpha. \end{aligned}$$

Como p_{ii}^0 não depende de α , o número de i -associados de um elemento qualquer de Ω é p_{ii}^0 , que será denominado a_i , valência da i -classe de associação.

Existe uma longa lista de esquemas de associação de interesse: esquema de associação trivial \underline{n} , esquema de associação retangular $R(n, m)$, esquema de associação grupo divisível $GD(b, m)$, esquema de associação triangular $T(n)$, esquema de associação cíclico em \mathbb{Z}_n , entre

outros. Veja esses exemplos em Bailey (2004). O esquema de associação cíclico é apresentado também na seção 4.1 utilizando uma nova abordagem.

Lema 2.1.1. (Bailey, 2004, p. 5) Para os esquemas de associação tem-se as seguintes relações:

- a) $\sum_{i=0}^s a_i = |\Omega| = n$;
- b) $\sum_j p_{ij}^k = a_i$, para todo i e k .

Demonstração.

- a) como $\{\mathfrak{C}_0, \mathfrak{C}_1, \dots, \mathfrak{C}_s\}$ é uma partição de $\Omega \times \Omega$, segue que

$$\begin{aligned} n &= |\{(\alpha, \beta) : \beta \in \Omega\}| = \left| \bigcup_{i=0}^s (\{(\alpha, \beta) : \beta \in \Omega\} \cap \mathfrak{C}_i) \right| \\ &= \sum_{i=0}^s |\{(\alpha, \beta) : \beta \in \Omega\} \cap \mathfrak{C}_i| = \sum_{i=0}^s a_i; \end{aligned}$$

- b) dado $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_k$

$$\sum_j p_{ij}^k = \sum_j |\{\gamma \in \Omega : (\alpha, \gamma) \in \mathfrak{C}_i \text{ e } (\gamma, \beta) \in \mathfrak{C}_j\}|.$$

Para qualquer $\gamma \in \Omega$ com $(\gamma, \alpha) \in \mathfrak{C}_i$, como $\mathfrak{C} = \{\mathfrak{C}_0, \mathfrak{C}_1, \dots, \mathfrak{C}_s\}$ é uma partição de $\Omega \times \Omega$, vai existir um j_0 tal que $(\gamma, \beta) \in \mathfrak{C}_{j_0}$ e, portanto, este γ é contado na soma. Como se tem $a_i = |\{\gamma : (\alpha, \gamma) \in \mathfrak{C}_i\}|$, destes elementos temos $a_i = \sum_j p_{ij}^k$. \square

É possível obter uma definição de esquemas de associação totalmente baseada em matrizes. Vamos definir para o esquema de associação com classes $\mathfrak{C} = \{\mathfrak{C}_0, \mathfrak{C}_1, \dots, \mathfrak{C}_s\}$, as matrizes

$$A_i(\alpha, \beta) = \begin{cases} 1, & \text{se } (\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_i, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Observe que A_i é a matriz de adjacência do conjunto \mathfrak{C}_i . Essas matrizes serão denominadas simplesmente de matrizes de adjacência. Dessa forma, as matrizes A_i são $n \times n$, simétricas e $A_0 = I_\Omega$.

As matrizes de adjacência nos permitem recuperar os conjuntos \mathfrak{C}_i . Logo, para que toda informação contida em um esquema de associação possa ser traduzida pelas matrizes A_i é necessário relacioná-las aos coeficientes p_{ij}^k . De fato, isso ocorre de maneira útil e possibilitará usar toda uma teoria de álgebra linear.

Veamos como se comporta o produto entre as matrizes A_i e A_j . Se $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_k$ tem-se que:

$$\begin{aligned} A_i A_j(\alpha, \beta) &= \sum_{\gamma \in \Omega} A_i(\alpha, \gamma) A_j(\gamma, \beta) \\ &= |\{\gamma \in \Omega : \text{em que } A_i(\alpha, \gamma) = 1 \text{ e } A_j(\gamma, \beta) = 1\}| \\ &= |\{\gamma \in \Omega : \text{em que } (\alpha, \gamma) \in \mathfrak{C}_i \text{ e } (\gamma, \beta) \in \mathfrak{C}_j\}| \\ &= p_{ij}^k. \end{aligned}$$

Conhecida então a entrada (α, β) da matriz produto $A_i A_j$ tem-se

$$A_i A_j(\alpha, \beta) = p_{ij}^k \cdot 1 = p_{ij}^k A_k(\alpha, \beta),$$

e, portanto, a igualdade de matrizes

$$A_i A_j = \sum_{k=0}^s p_{ij}^k A_k.$$

Logo, o produto contém toda a informação sobre os coeficientes p_{ij}^k . Pode-se então, dar uma nova definição para os esquemas de associação.

Definição 2.1.2. (Bailey, 2004, p. 13) Um esquema de associação com s classes associadas em um conjunto finito Ω é um conjunto de matrizes A_0, A_1, \dots, A_s em $\mathbb{R}^{\Omega \times \Omega}$, com todas as entradas iguais a 0 ou 1, de modo que:

- $A_0 = I_\Omega$;
- A_i é simétrica para $i = 1, \dots, s$;
- para todo i, j em $\{1, \dots, s\}$ o produto $A_i A_j$ é uma combinação linear de A_0, A_1, \dots, A_s ,

$$A_i A_j = \sum_{k=0}^s p_{ij}^k A_k;$$

- nenhum dos A_i é a matriz nula e $\sum_{i=0}^s A_i = J_\Omega$, em que J_Ω é uma matriz $n \times n$ de uns.

Observe que não é necessário definir que os p_{ij}^k sejam inteiros não negativos, pois as entradas de A_i são sempre 0 ou 1.

A condição d) da definição 2.1.2 é o análogo do fato de $\mathfrak{C} = \{\mathfrak{C}_0, \mathfrak{C}_1, \dots, \mathfrak{C}_s\}$ ser uma partição de $\Omega \times \Omega$.

As matrizes A_i possuem as propriedades:

a) $A_i^2(\alpha, \alpha) = a_i$. De fato,

$$A_i^2(\alpha, \alpha) = \sum_{\beta \in \Omega} A_i(\alpha, \beta)A_i(\beta, \alpha),$$

sendo $A_i(\alpha, \beta) = 1$ sempre que $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_i$, e portanto, a soma conta os elementos β tal que $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_i$, de onde segue o resultado;

b) as matrizes A_i tem soma linha e soma coluna constantes iguais a a_i . De fato,

$$A_i J_\Omega = J_\Omega A_i = a_i J_\Omega.$$

Os casos mais simples de esquemas de associação são: o trivial ($s = 1$) e o caso ($s = 2$). Para ($s = 2$), tem-se $A_0 = I_\Omega$ e como $A_0 + A_1 + A_2 = J_\Omega$, segue que $A_2 = J_\Omega - A_1 - I_\Omega$.

Lema 2.1.2. (Bailey, 2004, p. 16) Se A é uma matriz simétrica de zeros e uns, $A \neq 0$ e $A \neq J_\Omega - I_\Omega$. Então, $\{I_\Omega, A, J_\Omega - A - I_\Omega\}$ é um esquema de associação em Ω se, e somente se, A^2 é uma combinação linear de I_Ω , A e J_Ω .

Demonstração. Da autora (2024)

(\Rightarrow) Primeiramente, se $\{I_\Omega, A, J_\Omega - A - I_\Omega\}$ é um esquema de associação, então A^2 é uma combinação linear de I_Ω , A e J_Ω pela definição (2.1.2).

(\Leftarrow) Supondo que A^2 seja uma combinação linear de I_Ω , A e J_Ω . Para uniformizar a notação vamos denotar $A = A_1$ e $J_\Omega - A_1 - I_\Omega = A_2$. Portanto, a hipótese é que $A_1^2 = b_0 I_\Omega + b_1 A_1 + b_2 A_2$. Temos que provar que $A_1 A_2$ e A_2^2 também são combinações lineares de I_Ω , A_1 e J_Ω .

$$A_1 A_2 = A_1 (J_\Omega - A_1 - I_\Omega) = A_1 J_\Omega - A_1^2 - A_1 \text{ e}$$

$$A_2^2 = (J_\Omega - A_1 - I_\Omega)^2 = nJ_\Omega - J_\Omega A_1 - J_\Omega - A_1 J_\Omega + A_1^2 - J_\Omega + I_\Omega + 2A_1.$$

O resultado segue se provarmos que $J_\Omega A_1$ e $A_1 J_\Omega$ são combinações lineares de I_Ω , A_1 e J_Ω , pois todos os outros termos o são. Como $A_1^2 = b_0 I_\Omega + b_1 A_1 + b_2 A_2$ e A_1 e A_2 possuem entradas na diagonal nulas, a diagonal de A_1^2 é formada apenas por b_0 . Como $A_1^2 = A_1 A_1$, este fato implica que A_1 tem soma linha constante igual a b_0 , pois

$$b_0 = A_1^2(\alpha, \alpha) = \sum_{\beta \in \Omega} A_1(\alpha, \beta)A_1(\beta, \alpha) = \sum_{\beta \in \Omega} A_1^2(\alpha, \beta) = \text{soma linha (e coluna) de } A_1.$$

Tal fato implica que $A_1 J_\Omega = J_\Omega A_1 = b_0 J_\Omega$. \square

A definição de esquemas de associação utilizando grafos, (segunda definição de Bailey, 2004), será apresentada na seção 2.8.1.

2.2 Álgebra de Bose-Mesner

Esquemas de associação são objetos essencialmente combinatórios. Porém, como admitem uma definição em termos de matrizes, a ferramenta natural para seu estudo compreende técnicas de álgebra linear. Neste tópico é necessário trabalhar apenas com uma álgebra de matrizes.

2.2.1 Definindo a álgebra de Bose-Mesner

Dado um esquema de associação $\mathfrak{C} = \{\mathfrak{C}_0, \mathfrak{C}_1, \dots, \mathfrak{C}_s\}$ ou de forma equivalente dadas as matrizes A_0, A_1, \dots, A_s , considere o subespaço $(s+1)$ -dimensional, \mathfrak{A} , do espaço vetorial das matrizes $n \times n$, gerado pelas matrizes A_i , definido por Bailey (2004, p. 34) como

$$\mathfrak{A} = \left\{ \sum_{i=0}^s \mu_i A_i : \mu_0, \dots, \mu_s \in \mathbb{R} \right\}.$$

Como $A_i A_j$ é uma combinação linear das matrizes A_0, A_1, \dots, A_s , tem-se que o espaço vetorial \mathfrak{A} é fechado pelo produto e, portanto, é uma álgebra, denominada álgebra de Bose-Mesner. As propriedades desse esquema de associação podem ser obtidas a partir das propriedades algébricas da sua álgebra de Bose-Mesner. Em razão disso, é essencial um estudo aprofundado de suas propriedades. Vejamos primeiramente as propriedades mais importantes.

Se $M = \sum_{i=0}^s \mu_i A_i$, então, para $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_j$,

$$M(\alpha, \beta) = \sum_{i=0}^s \mu_i A_i(\alpha, \beta) = \mu_j A_j(\alpha, \beta) = \mu_j.$$

Tem-se também que

$$M' = \sum_{i=0}^s \mu_i A_i' = \sum_{i=0}^s \mu_i A_i = M,$$

e, portanto, todas as matrizes de \mathfrak{A} são simétricas.

Um resultado básico de álgebra linear, que pode ser encontrado em Boldrini (1980), garante que para uma matriz simétrica M , existe uma matriz ortogonal H , tal que HMH' é uma matriz diagonal

$$D = \text{diag}(d) = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & d_n \end{pmatrix}.$$

Seja e_i o vetor canônico de \mathbb{R}^n , então

$$\begin{aligned} D(e_i) &= HMH'(e_i) \Rightarrow \\ d_i(e_i) &= H(MH'(e_i)) \Rightarrow \\ H^{-1}d_i(e_i) &= M(H'(e_i)) \Rightarrow \\ d_iH'(e_i) &= M(H'(e_i)), \end{aligned}$$

pois para uma matriz ortogonal, a transposta é igual sua inversa, $H' = H^{-1}$. Portanto, d_i é um autovalor de M , relativo ao autovetor $v_i = H(e_i)$.

Outro fato fundamental é que as matrizes da álgebra comutam, ou seja,

$$\begin{aligned} A_iA_j &= \sum_{k=0}^s p_{ij}^k A_k \Rightarrow \\ A_jA_i &= (A_iA_j)' = \left(\sum_{k=0}^s p_{ij}^k A_k \right)' = \sum_{k=0}^s p_{ij}^k A_k' = \sum_{k=0}^s p_{ij}^k A_k = A_iA_j. \end{aligned}$$

Um resultado importante de álgebra linear se refere ao fato de que dadas duas matrizes simétricas A_1, A_2 que comutam, então existe uma matriz ortogonal H que diagonaliza simultaneamente A_1, A_2 e A_1A_2 , isto é, se

$$A_1A_2 = A_2A_1,$$

existe H ortogonal tal que

$$\begin{aligned} HA_1H' &= D_1 \text{ e } HA_2H' = D_2 \\ HA_1A_2H' &= HA_1H'HA_2H' = D_1D_2. \end{aligned}$$

Portanto, vai existir uma transformação ortogonal H que diagonaliza simultaneamente todas as matrizes da álgebra \mathfrak{A} (tal fato será apresentado nos resultados da seção 4.2).

2.2.2 Tabela de caracteres

Vamos usar a notação $\kappa = \{0, 1, \dots, s\}$ e $\varepsilon = \{0, 1, \dots, s\}$. Apesar de ambos serem o mesmo conjunto, o uso de κ e ε tornarão mais claras as construções necessárias no desenvolvimento do texto. κ será utilizado para indexar as classes \mathfrak{C}_i do esquema de associação e ε será utilizado para indexar os subespaços do strata. Como

$$A_i = \sum_{e \in \varepsilon} C(i, e)S_e,$$

em que $C(i, e)$ é o autovalor de A_i em W_e e S_e é projeção no subespaço W_j (veja a seção 4.2).

Os projetores pertencem à álgebra, logo, existem números $D(i, e)$, tais que

$$S_e = \sum_{i \in \kappa} D(i, e)A_i.$$

Temos então as matrizes com entradas definidas por

$$C = (C(i, e)) \text{ matriz } (s+1) \times (s+1) \text{ e}$$

$$D = (D(e, i)) \text{ matriz } (s+1) \times (s+1).$$

É imediato que $CD = DC = I_{(s+1) \times (s+1)}$. Alguns valores de $C(i, e)$ e $D(e, i)$ são os mesmos para qualquer esquema de associação e são dados por:

$$\begin{aligned} C(0, e) &= 1 \text{ pois } A_0 = I_\Omega \\ C(i, 0) &= a_i \text{ pois } A_i \vec{1} = a_i \\ D(0, i) &= \frac{1}{n} \text{ pois } S_0 = \frac{1}{n} J_\Omega \\ D(e, 0) &= \frac{d_e}{n} \text{ pois } d_e = \dim(W_e), \end{aligned}$$

em que

$$\begin{aligned} \dim(W_e) &= \text{traço}(S_e) = \text{traço} \left(\sum_{i=0}^s D(e, i) A_i \right) \\ &= \sum_{i=0}^s D(e, i) \text{traço}(A_i) = D(e, 0) \text{traço}(A_0) = D(e, 0)n, \end{aligned}$$

pois $\text{traço}(A_i) = 0$ para $i \neq 0$.

As boas propriedades da base $\{S_0, S_1, \dots, S_s\}$ em relação ao produto $S_e S_f = 0$ para $e \neq f$, implicam em relações de ortogonalidade entre as linhas de C e de D . De fato,

$$\begin{aligned} A_i A_j &= \left(\sum_{e=0}^s C(i, e) S_e \right) \left(\sum_{f=0}^s C(j, f) S_f \right) = \sum_{e=0}^s C(i, e) D(j, e) S_e \\ A_i A_j &= \sum_{k=0}^s p_{ij}^k A_k. \end{aligned}$$

Calculando o traço utilizando as duas igualdades, obtemos

$$\begin{aligned} \text{traço}(A_i A_j) &= \text{traço} \left(\sum_{e=0}^s C(i, e) D(j, e) S_e \right) = \sum_{e=0}^s C(i, e) D(j, e) \text{traço}(S_e) \\ \text{traço}(A_i A_j) &= \text{traço} \left(\sum_{k=0}^s p_{ij}^k A_k \right) = \sum_{k=0}^s p_{ij}^k \text{traço}(A_k). \end{aligned}$$

De onde vem que,

$$\begin{aligned}\sum_{e=0}^s C(i, e)C(j, e)\text{traço}(S_e) &= \sum_{k=0}^s p_{ij}^k \text{traço}(A_k) \Rightarrow \\ \sum_{e=0}^s C(i, e)C(j, e)d_e &= \sum_{k=0}^s p_{ij}^k \text{traço}(A_k) \Rightarrow \\ \sum_{e=0}^s C(i, e)C(j, e)d_e &= p_{ij}^0 \text{traço}(A_0),\end{aligned}$$

pois, $\text{traço}(A_k) = 0$ se $k \geq 1$. Como $p_{ij}^0 = 0$, se $i \neq j$, e $p_{ii}^0 = a_i n$, tem-se então a relação de ortogonalidade a seguir.

Teorema 2.2.1. (Bailey, 2004, p. 41) Relações de ortogonalidade para classes associadas

$$\sum_{e \in \mathcal{E}} C(i, e)C(j, e)d_e = \begin{cases} a_i n, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$$

Esta relação de ortogonalidade pode ser expressa como produto de matrizes. Se $\text{diag}(d)$ é uma matriz diagonal com entradas d_e e $\text{diag}(a)$ uma matriz diagonal com entradas a_i segue que

$$\begin{aligned}C \text{diag}(d)C' &= n \text{diag}(a) \Rightarrow \\ C \frac{1}{n} \text{diag}(d)C' \text{diag}(a)^{-1} &= I_{\Omega},\end{aligned}$$

e, portanto, tem-se o corolário a seguir.

Corolário 2.2.1. (Bailey, 2004, p. 41)

$$D = C^{-1} = \frac{1}{n} \text{diag}(d)C' \text{diag}(a)^{-1}.$$

2.3 Combinando esquemas de associação

Nesta seção são apresentados dois métodos para combinar dois, ou mais, esquemas de associação. Esses métodos permitem que se obtenham esquemas de associação mais complexos a partir de esquemas mais simples. Para esquemas em Ω_1 e Ω_2 tem-se um esquema em $\Omega_1 \times \Omega_2$.

Um esquema de associação em Ω_1 é uma partição em $\Omega_1 \times \Omega_1$ e um esquema de associação em Ω_2 é uma partição em $\Omega_2 \times \Omega_2$. O esquema de associação combinando um esquema em Ω_1 com um esquema em Ω_2 , como veremos neste capítulo, é uma partição em

$(\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2)$. Nesse sentido, é necessário uma notação para dois esquemas de associação diferentes. Esta notação é apresentada no quadro 2.1.

Quadro 2.1 – Notação para dois esquemas de associação.

	primeiro esquema	segundo esquema
conjunto	Ω_1	Ω_2
tamanho do conjunto	n_1	n_2
classes associadas	\mathcal{C}	\mathcal{D}
indexada por	κ_1	κ_2
número de classes	s_1	s_2
parâmetros	p_{ij}^k	q_{xy}^z
matrizes de adjacência	A_i	B_x
strata	U_e	V_f
indexada por	ε_1	ε_2
projeter no stratum	S_e	T_f
dimensão	d_e	não usa
tabela de caracteres	C_1	C_2
inversa	D_1	D_2

Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Como temos uma partição em $\Omega_1 \times \Omega_1$ e uma partição em $\Omega_2 \times \Omega_2$, precisamos transformar um subconjunto de $(\Omega_1 \times \Omega_1) \times (\Omega_2 \times \Omega_2)$ em um subconjunto de $(\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2)$. Para tanto, fazemos a identificação

$$(\Omega_1 \times \Omega_1) \times (\Omega_2 \times \Omega_2) = \{((\alpha_1, \alpha_2), (\beta_1, \beta_2)) : (\alpha_1, \beta_1) \in \Omega_1 \times \Omega_1 \text{ e } (\alpha_2, \beta_2) \in \Omega_2 \times \Omega_2\}.$$

Para definir os métodos *crossing* e *nesting* primeiramente é necessário definir o produto tensorial de matrizes. Considere M uma matriz em $\mathbb{R}^{\Omega_1 \times \Omega_1}$ e N uma matriz em $\mathbb{R}^{\Omega_2 \times \Omega_2}$. O produto tensorial de M por N deve ser uma matriz em $\mathbb{R}^{(\Omega_1 \times \Omega_1) \times (\Omega_2 \times \Omega_2)}$. Aqui usamos a mesma convenção adotada anteriormente para combinação de esquemas de associação, ou seja,

$$M \otimes N((\alpha_1, \alpha_2), (\beta_1, \beta_2)) = M(\alpha_1, \beta_1)N(\alpha_2, \beta_2),$$

para $\alpha_1, \beta_1 \in \Omega_1$ e $\alpha_2, \beta_2 \in \Omega_2$.

2.3.1 Crossing

Dados dois esquemas de associação, digamos, Ω_1 em Ω_1 e Ω_2 em Ω_2 o método *crossing* é dado pelo produto cruzado $\Omega_1 \times \Omega_2$. Quando cruzamos Ω_1 com Ω_2 , o novo conjunto subjacente pode ser pensado como o retângulo $\Omega_1 \times \Omega_2$.

Definição 2.3.1. (Bailey, 2004 p. 62) Para $t = 1, 2$, seja Ω_t um conjunto de subconjuntos de $\Omega_t \times \Omega_t$. O produto cruzado $\Omega_1 \times \Omega_2$ de Ω_1 e Ω_2 é o conjunto

$$\{\mathcal{C} \times \mathcal{D} : \mathcal{C} \in \Omega_1 \text{ e } \mathcal{D} \in \Omega_2\}.$$

Note que se Ω_t é uma partição de $\Omega_t \times \Omega_t$ para $t = 1, 2$ então $\Omega_1 \times \Omega_2$ é uma partição de $(\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2)$. As propriedades do produto cruzado são dadas pelo teorema a seguir.

Teorema 2.3.1. (Bailey, 2004, p. 62) Seja Ω_1 um esquema de associação em Ω_1 com s_1 classes associadas, valências a_i para i em κ_1 e matrizes de adjacência A_i para i em κ_1 . Seja Ω_2 um esquema de associação em Ω_2 com s_2 classes associadas, valências b_x para x em κ_2 e matrizes de adjacência B_x para x em κ_2 . Então $\Omega_1 \times \Omega_2$ é um esquema de associação em $\Omega_1 \times \Omega_2$ com $s_1 s_2 + s_1 + s_2$ classes associadas, valências $a_i b_x$ para (i, x) em $\kappa_1 \times \kappa_2$ e matrizes de adjacência $A_i \otimes B_x$ para (i, x) em $\kappa_1 \times \kappa_2$.

Exemplo 2.3.1. O esquema de associação retangular $R(2, 3)$ pode ser obtido pelo método crossing de dois esquemas de associação triviais, ou seja, $\underline{2} \times \underline{3}$. Seja Ω_1 o esquema de associação trivial $\underline{2}$ e Ω_2 o esquema de associação trivial $\underline{3}$, (veja tabela 2.1).

Tabela 2.1 – Exemplo 2.3.1.

	primeiro esquema	segundo esquema
conjunto	$\Omega_1 = \{\alpha, \beta\}$	$\Omega_2 = \{a, b, c\}$
classes associadas	$\mathcal{C}_0 = \{(\alpha, \alpha) \in \Omega_1 \times \Omega_1, \alpha = \alpha\}$ $\mathcal{C}_1 = \{(\alpha, \beta) \in \Omega_1 \times \Omega_1, \alpha \neq \beta\}$	$\mathcal{D}_0 = \{(a, a) \in \Omega_2 \times \Omega_2, a = a\}$ $\mathcal{D}_1 = \{(a, b) \in \Omega_2 \times \Omega_2, a \neq b\}$
número de classes	$s_1 = 1$	$s_2 = 1$
matrizes de adjacência	$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ $A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$B_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ $B_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

Fonte: Da autora (2024).

O produto cruzado $\Omega_1 \times \Omega_2$ é um esquema de associação em

$$\Omega_1 \times \Omega_2 = \{(\alpha, a), (\alpha, b), (\alpha, c), (\beta, a), (\beta, b), (\beta, c)\},$$

com classes associadas $\{\mathcal{C} \times \mathcal{D} : \mathcal{C} \in \Omega_1 \text{ e } \mathcal{D} \in \Omega_2\}$. A partir do teorema 2.3.1 as classes associadas são determinados pelo produto tensorial das matrizes de adjacência. Note que

$\Omega_1 \times \Omega_2$ possui $s_1 s_2 + s_1 + s_2 = 1 \cdot 1 + 1 + 1 = 3$, em que as matrizes de adjacência são:

$$A_0 \otimes B_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & 1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$A_0 \otimes B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} & 0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ 0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} & 1 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_1 \otimes B_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & 1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ 1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_1 \otimes B_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} & 1 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ 1 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} & 0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Logo, as classes associadas são:

- $(\mathcal{C} \times \mathcal{D})_0 = \{((\alpha, a), (\alpha, a)) \in (\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2)\}$, para $A_0 \otimes B_0 = I_2 \otimes I_3$;
- $(\mathcal{C} \times \mathcal{D})_1 = \{((\alpha, a), (\alpha, b)) \in (\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2) : a \neq b\}$, para $A_0 \otimes B_1 = I_2 \otimes (J_3 - I_3)$;
- $(\mathcal{C} \times \mathcal{D})_2 = \{((\alpha, a), (\beta, a)) \in (\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2) : \alpha \neq \beta\}$, para $A_1 \otimes B_0 = (J_2 - I_2) \otimes I_3$;
- $(\mathcal{C} \times \mathcal{D})_3 = \{((\alpha, a), (\beta, b)) \in (\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2) : \alpha \neq \beta \text{ e } a \neq b\}$, para $A_1 \otimes B_1 = (J_2 - I_2) \otimes (J_3 - I_3)$.

Um esquema de associação retangular qualquer, $R(m, n)$, com $m \geq 2$ e $n \geq 2$, pode ser obtido explicitando suas classes associadas sem utilizar *crossing*, veja Bailey (2004, p. 4). Entretanto, como exposto no exemplo, pode ser obtido também da combinação de dois esquemas de associação triviais. Vale destacar que um delineamento experimental em linhas e colunas define um esquema de associação retangular.

2.3.2 Nesting

Dados dois esquemas de associação, digamos, Ω_1 em Ω_1 e Ω_2 em Ω_2 o método *nesting* é dado pelo produto aninhado Ω_1/Ω_2 . Quando aninhamos Ω_2 dentro de Ω_1 , substituímos cada elemento de Ω_1 por uma cópia de Ω_2 .

Definição 2.3.2. (Bailey, 2004, p. 69) Para $t = 1, 2$, seja Ω_t um conjunto de subconjuntos de $\Omega_t \times \Omega_t$. Suponha que Ω_1 contenha $\text{Diag}(\Omega_1)$. O produto aninhado Ω_1/Ω_2 de Ω_1 e Ω_2 é o conjunto de subconjuntos

$$\{\mathcal{C} \times (\Omega_2 \times \Omega_2) : \mathcal{C} \in \Omega_1, \mathcal{C} \neq \text{Diag}(\Omega_1)\} \cup \{\text{Diag}(\Omega_1) \times \mathcal{D} : \mathcal{D} \in \Omega_2\}$$

de $(\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2)$.

O produto aninhado resulta em um esquema de associação em $\Omega_1 \times \Omega_2$ com propriedades dadas pelo teorema a seguir.

Teorema 2.3.2. (Bailey, 2004, p. 69) Seja Ω_1 um esquema de associação em Ω_1 de tamanho n_1 com s_1 classes associadas, valências a_i para i em κ_1 e matrizes de adjacência A_i para i em κ_1 . Seja Ω_2 um esquema de associação em Ω_2 de tamanho n_2 com s_2 classes associadas, valências b_x para x em κ_2 e matrizes de adjacência B_x para x em κ_2 . Então Ω_1/Ω_2 é um esquema de associação em $\Omega_1 \times \Omega_2$ com $s_1 + s_2$ classes associadas, valências $a_i n_2$ para i em $\kappa_1 \setminus \{0\}$ e b_x para x em κ_2 , e matrizes de adjacência $A_i \otimes J_{\Omega_2}$ para i em $\kappa_1 \setminus \{0\}$ e $I_{\Omega_1} \otimes B_x$ para x em κ_2 .

Exemplo 2.3.2. O esquema de associação grupo divisível $\text{GB}(2, 3)$ pode ser obtido pelo método nesting de dois esquemas de associação triviais, ou seja, $\underline{\underline{2}}/\underline{\underline{3}}$. Considere Ω_1 o esquema de associação trivial $\underline{\underline{2}}$ e Ω_2 o esquema de associação trivial $\underline{\underline{3}}$, estes esquemas de associação triviais são os mesmos dos exemplo 2.3.1, veja tabela 2.1.

O produto aninhado Ω_1/Ω_2 é um esquema de associação em

$$\Omega_1 \times \Omega_2 = \{(\alpha, a), (\alpha, b), (\alpha, c), (\beta, a), (\beta, b), (\beta, c)\},$$

com classes associadas

$$\{\mathcal{C} \times (\Omega_2 \times \Omega_2) : \mathcal{C} \in \Omega_1, \mathcal{C} \neq \text{Diag}(\Omega_1)\} \cup \{\text{Diag}(\Omega_1) \times \mathcal{D} : \mathcal{D} \in \Omega_2\}.$$

A partir do teorema 2.3.2 as classes associadas são determinadas. Note que Ω_1/Ω_2 possui $s_1 + s_2 = 1 + 1 = 2$ com matrizes de adjacência dadas por:

$$A_0 \otimes B_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & 1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$A_0 \otimes B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} & 0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ 0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} & 1 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_1 \otimes J_{\Omega_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} & 1 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ 1 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} & 0 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Logo, as classes associadas são:

- $(\mathcal{C} \times \mathcal{D})_0 = \{((\alpha, a), (\alpha, a)) \in (\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_1) : (\alpha, a) = (\alpha, a)\}$, para $A_0 \otimes B_0 = I_2 \otimes I_3$;
- $(\mathcal{C} \times \mathcal{D})_1 = \{((\alpha, a), (\alpha, b)) \in (\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_1) : \alpha = \alpha \text{ e } a \neq b\}$, para $A_0 \otimes B_1 = I_2 \otimes (J_3 - I_3)$;
- $(\mathcal{C} \times \mathcal{D})_2 = \{((\alpha, a), (\beta, b)) \in (\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_1) : \alpha \neq \beta\}$, para $A_1 \otimes J_{\Omega_2} = (J_2 - I_2) \otimes J_3$.

Esquemas de associação grupo divisível $GB(b, m)$, com $b \geq 2$ e $m \geq 2$ são facilmente obtidos, veja Bailey (2004, p. 2). Vale destacar que um delineamento experimental com estrutura em blocos define um esquema de associação grupo divisível.

Exemplo 2.3.3. Seja Ω_1 o esquema de associação trivial $\underline{\underline{3}}$ e Ω_2 o esquema de cíclico em \mathbb{Z}_5 , veja tabela 2.2. O esquema de associação dado pelo produto aninhado de $\underline{\underline{3}}/\mathbb{Z}_5$ é um esquema de

associação em

$$\begin{aligned}\Omega_1 \times \Omega_2 = & \{(\alpha, \bar{0}), (\alpha, \bar{1}), (\alpha, \bar{2}), (\alpha, \bar{3}), (\alpha, \bar{4}), \\ & (\beta, \bar{0}), (\beta, \bar{1}), (\beta, \bar{2}), (\beta, \bar{3}), (\beta, \bar{4}), \\ & (\gamma, \bar{0}), (\gamma, \bar{1}), (\gamma, \bar{2}), (\gamma, \bar{3}), (\gamma, \bar{4})\},\end{aligned}$$

com classes associadas dadas pelo teorema 2.3.2, sendo $s_1 + s_2 = 1 + 2 = 3$ classes e matrizes de adjacência

$$A_0 \otimes B_0 = I_{(15 \times 15)}, A_0 \otimes B_1, A_2 \otimes B_2 \text{ e } A_1 \otimes J_{\Omega_2}.$$

Tabela 2.2 – Exemplo 2.3.3.

	primeiro esquema	segundo esquema
conjunto	$\Omega_1 = \{\alpha, \beta, \gamma\}$	$\Omega_2 = \{\bar{0}, \bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}\}$
classes associadas	$\mathcal{C}_0 = \{(\alpha, \alpha) \in \Omega_1 \times \Omega_1, \alpha = \alpha\}$ $\mathcal{C}_1 = \{(\alpha, \beta) \in \Omega_1 \times \Omega_1, \alpha \neq \beta\}$	$\mathcal{D}_0 = \{(m, m) \in \Omega_2 \times \Omega_2, m = m\}$ $\mathcal{D}_1 = \{(m, n) \in \Omega_2 \times \Omega_2, m - n = \pm 1\}$ $\mathcal{D}_2 = \{(m, n) \in \Omega_2 \times \Omega_2, m - n = \pm 2\}$
número de classes	$s_1 = 1$	$s_2 = 2$
matrizes de adjacência	$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ $A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$B_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ $B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ $B_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Fonte: Da autora (2024).

Do ponto de vista matemático, o processo de construção de esquemas de associação pelos métodos *crossing* e *nesting* é formal. Do ponto de vista estatístico, os métodos *crossing* e *nesting* definidos em estruturas ortogonais em blocos se tornam mais naturais quando os dois métodos são utilizados em delineamentos experimentais. Tal assunto será desenvolvido com mais detalhes na seção 2.6.5.

2.4 Delineamento em blocos incompletos

Em Estatística, ao conduzir um experimento, os tratamentos são aplicados às parcelas com a finalidade de medir respostas e aplicar testes. Dessa maneira, as parcelas devem ser

semelhantes, no sentido de não afetar as respostas aos tratamentos. Entretanto, em situações práticas isso não acontece, uma vez que a área experimental dificilmente é homogênea. Uma maneira de tornar a área experimental mais semelhante possível é agrupar as parcelas em blocos que sejam homogêneos. No entanto, esses blocos afetam os dados coletados do experimento. Essa questão nos leva a essencialmente todas as questões abordadas neste texto.

2.4.1 Função de delineamento

Para qualquer delineamento experimental tem-se Ω (conjunto das parcelas experimentais) e Θ (conjuntos dos tratamentos). Os tratamentos são alocados às parcelas pela função ψ , ou seja,

$$\psi : \Omega \rightarrow \Theta.$$

Esta função pode ser totalmente descrita pela matriz $X \in \mathbb{R}^{\Omega \times \Theta}$, denominada matriz de delineamento

$$X(\omega, \theta) = \begin{cases} 1, & \text{se } \psi(\omega) = \theta, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Dessa forma, ψ pode ser representada pela transformação linear $\mathbb{R}^{\Theta} \rightarrow \mathbb{R}^{\Omega}$ através da matriz X . Para n parcelas e t tratamentos, tem-se $X_{n \times t}$.

Em um primeiro momento a teoria dos esquemas de associação e a partição de Ω em blocos não estão diretamente relacionadas. De fato, essa relação não é imediata e de certa forma é bastante complexa. Por exemplo, em Bailey (2008) existe uma teoria extensa dos delineamentos experimentais sem se referir aos esquemas de associação em nenhuma ocasião.

Uma primeira relação entre as duas teorias é observar que a partição de Ω em blocos define um esquema de associação grupo divisível, $\text{GD}(b, k)$, com b blocos de tamanho k , em que as matrizes de adjacência são

$$I_{\Omega}, A_1 = B - I_{\Omega} \text{ e } A_2 = J_{\Omega} - B,$$

em que J_{Ω} é uma matriz de uns e $B_{n \times n}$ é a matriz de relação para os blocos dada por

$$B(\alpha, \beta) = \begin{cases} 1, & \text{se } \alpha \text{ e } \beta \text{ estão no mesmo bloco,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Na seção 2.6.1 B será definida como R_B .

A replicação de um tratamento θ , denotada por r_θ conta o número de parcelas que receberam o mesmo tratamento, ou seja, $|\{\omega \in \Omega, \psi(\omega) = \theta\}|$. Se $r_\theta = r$, para todo $\theta \in \Omega$, o delineamento é dito equireplicado, assim, $X'X = rI_\Theta$.

Para delineamentos equireplicados se existem b blocos com k parcelas e t tratamentos, então, o número de parcelas é

$$n = bk = tr.$$

2.4.2 Matrizes de tratamento-bloco e de concorrência

Seja Δ o conjunto dos blocos, a matriz de incidência de tratamento por blocos é uma matriz $N \in \mathbb{R}^{\Theta \times \Delta}$, definida por

$$N(\theta, \delta) = |\{\omega \in \delta, \psi(\omega) = \theta\}|,$$

ou seja, conta o número de vezes que o tratamento θ ocorreu no bloco δ . Note que N é uma matriz $N_{t \times b}$. Se $N(\theta, \delta)$ assume apenas valores 0 e 1 o delineamento é dito binário, isto é, se todo tratamento ocorre no máximo uma vez em um mesmo bloco.

Se todos os tratamentos ocorrem em todos os blocos o delineamento é dito em bloco completo. Caso contrário, temos o delineamento em blocos incompletos, sobre o qual toda esta seção se fundamenta.

A matriz de concorrência $\Lambda \in \mathbb{R}^{\Theta \times \Theta}$ é definida por:

$$\Lambda(\theta, \eta) = |\{(\alpha, \beta) \in \Omega \times \Omega, \text{ para } \alpha \text{ e } \beta \text{ em um mesmo bloco, } \psi(\alpha) = \theta \text{ e } \psi(\beta) = \eta\}|.$$

Note que Λ é uma matriz $t \times t$ cuja entrada $\Lambda(\theta, \eta)$ conta o número de vezes que o par de tratamento θ e η ocorreram juntos nos blocos, as entradas dessa matriz também são indicadas por λ_{ij} , para tratamentos i e j .

As matrizes de concorrência classificam os delineamentos em blocos completos e incompletos:

- a) Blocos completos, N possui todas as entradas iguais a 1 e $\Lambda = rJ_\Theta$;
- b) Blocos incompletos, podem ser binários e não binários:

- Binários, N tem entradas 0 ou 1, desse modo, $\Lambda(\theta, \eta)$ conta o número de blocos nos quais os tratamentos θ e η ocorreram e $\Lambda(\theta, \theta)$ conta o número de vezes que o tratamento foi aplicado, isto é, r_θ ;
- Não binários, N tem entradas diferentes de 0 ou 1 e assim, suas entradas referem à contagem com repetição e $\Lambda(\theta, \eta)$ podem assumir diferentes valores.

Lema 2.4.1. (Bailey, 2004, p. 82):

a) $\sum_{\eta \in \Theta} \Lambda(\theta, \eta) = kr_\theta$, em particular, em um delineamento binário equireplicado

$$\sum_{\substack{\eta \in \Theta, \\ \eta \neq \theta}} \Lambda(\theta, \eta) = r(k-1);$$

b) $\Lambda = X'BX = NN'$.

Exemplo 2.4.1. Considere o delineamento com dois blocos de tamanho três, ou seja, um esquema de associação $GD(2,3)$, como na figura 2.1.

Figura 2.1 – Delineamento em blocos.



Fonte: Da autora (2024).

$$N = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ t_1 & 2 & 1 \\ t_2 & 1 & 1 \\ t_3 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda = NN' = \begin{pmatrix} t_1 & t_2 & t_3 \\ t_1 & 5 & 3 & 1 \\ t_2 & 3 & 2 & 1 \\ t_3 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Observe que 5 representa os pares (ω_1, ω_1) , (ω_1, ω_2) , (ω_2, ω_1) , (ω_2, ω_2) , (ω_3, ω_3) que receberam o tratamento 1.

Um caso particularmente importante de delineamento em blocos incompletos corresponde aos delineamentos balanceados. Nestes, todo par de tratamentos ocorre com igual frequência

nos blocos, isto é,

$$\Lambda = \begin{pmatrix} r & \lambda & \dots & \lambda \\ \lambda & r & \dots & \lambda \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda & \lambda & \dots & r \end{pmatrix}.$$

Na literatura esses delineamentos são denominados delineamento em blocos incompletos balanceados (BIBD) ou 2-delineamentos. Uma generalização desse conceito inclui os delineamentos em blocos incompletos parcialmente balanceados (PBIBD), que serão estudados na seção 2.5.

2.4.3 Estimando os efeitos dos tratamentos

Indexando as coordenadas de \mathbb{R}^Ω pelas parcelas temos que $Y \in \mathbb{R}^\Omega$ é um vetor aleatório, no qual estamos interessados em estudar seu comportamento. Após a alocação dos tratamentos tem-se o vetor de respostas, $y \in \mathbb{R}^\Omega$, em que y_ω é a resposta na parcela ω . Vamos definir o subespaço de blocos como em Bailey (2004, p. 85) por

$$V_B = \{v \in \mathbb{R}^\Omega, v(\alpha) = v(\beta) \text{ se } \alpha \text{ e } \beta \text{ estão em um mesmo bloco}\}.$$

Segue que $\dim(V_B) = b$.

Vamos definir \mathbb{R}^Θ no qual as coordenadas são indexadas pelos tratamentos. É razoável supor que o vetor de efeitos dos tratamentos seja um vetor desconhecido τ . Portanto, as respostas nas parcelas seriam dadas por $X\tau$. Mas, como temos a presença de aleatoriedade é possível supor uma variância comum σ^2 para todas as respostas. Temos então o modelo

$$Y = X\tau + \xi, \text{ em que } E(\xi) = 0 \text{ e } \text{Var}(\xi) = \sigma^2 I_\Omega.$$

No entanto, os blocos certamente afetam a resposta. Sendo assim, temos o modelo que considera o efeito dos blocos, h , ou seja,

$$Y = X\tau + h + \xi, \text{ em que } E(Y) = X\tau + h.$$

Bailey (2004) destaca que para variáveis aleatórias, a suposição mais simples que podemos fazer é que respostas em diferentes parcelas não estão correlacionadas e têm a mesma variância em comum, σ^2 , em que σ^2 é uma constante positiva desconhecida. Desse modo, $\text{Var}(Y_\omega) = \sigma^2$ para cada parcela ω e $\text{Cov}(Y_\alpha, Y_\beta) = 0$, sempre que α e β forem parcelas diferentes. Sob essas suposições temos

$$\text{Cov}(Y) = \sigma^2 I_\Omega.$$

O vetor h pertence ao subespaço vetorial V_B e $\text{Cov}(Y) = \sigma^2 I_\Omega$. Existe um confundimento entre o vetor $X\tau$ e o vetor h , de modo que ambos não podem ser estimados separadamente. Assim, o que se pode fazer é estimar diferenças entre os efeitos de tratamentos, $\tau(\theta) - \tau(\eta)$. De forma mais geral, se $x \in \mathbb{R}^\Theta$ é um vetor perpendicular a $V_0 = \text{span}(\vec{1})$, isto é, $\sum_{\theta \in \Theta} x(\theta) = 0$, (x é dito um contraste) é possível estimar $x'\tau$. A ideia para eliminar o efeito dos blocos é projetar ortogonalmente o vetor de respostas y no subespaço V_B^\perp .

Se P e Q são projeções ortogonais nos subespaços V_B e V_B^\perp , respectivamente, então, $P = \frac{1}{k}B$ e $Q = I_\Omega - P$. De modo que para $w \in V_B^\perp$, tem-se que $\sum_{\alpha \in \delta} w(\alpha) = 0$, para todo bloco δ .

Definição 2.4.1. (Bailey, 2004, p. 86) Um estimador não viesado de $x'\tau$ é uma função de y e do delineamento (mas não de τ , h ou σ^2) cuja esperança é $x'\tau$.

Teorema 2.4.1. (Bailey, 2004, p. 86) Se existe um vetor $z \in \mathbb{R}^\Theta$ com $X'QXz = x$, então $z'X'Qy$ é um estimador não viesado de $x'\tau$ cuja variância é $\text{Var}(z'X'Qy) = z'X'QXz\sigma^2$.

A matriz $L = X'QX$ é uma matriz $t \times t$ denominada matriz de informação do delineamento. Utilizando essa matriz, a variância do estimador de $x'\tau$ é $\text{Var}(z'X'Qy) = z'Lz\sigma^2$. Trabalhando com inversas generalizadas, ($LL^{-}L = L$), temos a forma alternativa

$$z'Lz\sigma^2 = z'LL^{-}Lz\sigma^2 = (Lz)'L^{-}(Lz)\sigma^2 = x'L^{-}x\sigma^2,$$

então obtemos a variância do estimador de $x'\tau$ em termos de x e não de z . Para o contraste simples da forma $\tau(\theta) - \tau(\eta)$, a variância do estimador é dada por

$$\text{Var}(\widehat{\tau(\theta) - \tau(\eta)}) = (L^{-}(\theta, \theta) - L^{-}(\theta, \eta) - L^{-}(\eta, \theta) + L^{-}(\eta, \eta)) \sigma^2.$$

A matriz de informação, L , para um delineamento equireplicado se relaciona com a matriz de concorrência, Λ , pois

$$L = X' QX = X'(I_{\Omega} - P)X = X'X - X'PX = rI_{\Theta} - \frac{1}{k}X'BX = rI_{\Theta} - \frac{1}{k}\Lambda.$$

Uma propriedade interessante sobre as matrizes de informação é dada a seguir.

Proposição 2.4.1. Os autovalores da matriz de informação $L = rI_{\Theta} - \frac{1}{k}\Lambda$ estão contidos no intervalo $[0, r]$.

Demonstração. Se

$$\alpha v = Lv$$

$$\alpha v = \left(rI_{\Theta} - \frac{1}{k}\Lambda \right) v$$

$$\alpha v = rv - \frac{1}{k}\Lambda v$$

$$\alpha v - rv = -\frac{1}{k}\Lambda v$$

$$k(rv - \alpha v) = \Lambda v$$

$$k(r - \alpha)v = \Lambda v$$

$$\beta v = \Lambda v.$$

Como $\Lambda = NN'$, temos que

$$\langle w, NN'w \rangle = \langle N'w, N'w \rangle \geq 0,$$

isto é, Λ é positiva semidefinida, logo, $\beta \geq 0$. Assim,

$$\alpha v = rv - \frac{1}{k}\Lambda v$$

$$\alpha v = rv - \frac{1}{k}\beta v$$

$$\alpha v = \left(r - \frac{1}{k}\beta \right) v$$

$$\alpha = r - \frac{1}{k}\beta.$$

Note que L também é positiva semidefinida, pois,

$$\langle Lv, v \rangle = \langle X' QXv, v \rangle = \langle QXv, Xv \rangle = \langle Qw, w \rangle \geq 0$$

pois Q é um projetor ortogonal, logo, $\alpha \geq 0$. Portanto, $0 \leq \alpha \leq r$. \square

2.4.4 Estimando os efeitos dos tratamentos supondo que a soma dos efeitos dos tratamentos é nula

Outra maneira de analisar os BIBD é supor que $\sum_i \tau_i = 0$. Nesse caso é possível obter um estimador não viesado de τ . O algoritmo apresentado em Bailey (2008) apresenta a obtenção desses estimadores, sem uma demonstração. Apresentamos aqui uma demonstração completa, uma vez que esta deixa explícita as características de um delineamento balanceado.

Supondo um delineamento em blocos, no qual

$$E(Y_\omega) = \tau_i + h_j,$$

em que ω é uma parcela que recebeu o tratamento i e encontra-se no bloco j . Podemos somar c a τ_i e subtrair c a h_j que o resultado permanece o mesmo. Seja $c = -\frac{\sum_{i=1}^t \tau_i}{t}$ a média dos efeitos de todos os tratamentos. Como apresentado em Bailey (2008, p. 226), o algoritmo a seguir estima $\tau_i + c$:

- a) em y subtraia a média de cada bloco para cada observação, obtendo o vetor $y^{(B)} = y - \bar{y}_B$, isto é, projete y no espaço de blocos V_B e tome a diferença, $y^{(B)}$ que tem média nos blocos nula;
- b) calcule a média dos tratamentos para $y^{(B)}$, isto é, projete $y^{(B)}$ no espaço de tratamentos V_T , obtendo $\bar{y}^{(B)}$;
- c) multiplique o vetor $\bar{y}^{(B)}$ por

$$\left(\frac{t-1}{t} \right) \left(\frac{k}{k-1} \right);$$

obtendo uma estimativa do tratamento $\hat{\tau}_i$;

- d) em y subtraia as estimativas $\hat{\tau}_i$ de todas as observações do tratamento i , para obter um novo vetor $y^{(T)}$;
- e) obtenha as estimativas de \hat{h}_j como a média das entradas do bloco j em $y^{(T)}$;

- f) em $y^{(T)}$ subtraia \hat{h}_j de cada entrada no bloco j para obter o vetor de resíduos $y^{(E)}$;
g) estime a variância das parcelas σ^2 por

$$\frac{\text{soma de quadrados dos resíduos}}{N - t - b + 1}.$$

Demonstração. Vamos utilizar a seguinte notação:

- a) $i = i_{(l,s)}$ parcela i que recebeu o tratamento l e está no bloco s , com $l = 1, \dots, t$ e $s = 1, \dots, b$;
b) $y_{i_{(l,s)}}$, resposta da i -ésima parcela, com $i = 1, \dots, n$;
c) $\sum_s y_{i_{(l,s)}}$ soma das respostas nas parcelas que receberam o tratamento l ;
d) $\sum_l y_{i_{(l,s)}}$ soma das respostas de todas as parcelas no bloco s ;
e) Para $i_0 = i_0(l_0, s_0)$, $\sum_{s'}$ significa a soma das coordenadas de todas as parcelas que receberam o tratamento l_0 e $\sum_{l'}$ significa a soma das coordenadas de todas as parcelas que receberam um tratamento que ocorreu no bloco s_0 .

Se $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ é o vetor de dados, vamos projetar ortogonalmente y no espaço de blocos V_B , ou seja, $P_{V_B}y$, que nos dá um vetor de médias das respostas nos blocos, isto é, se $i_0 = i(l_0, s_0)$ então

$$(P_{V_B}y)_{i_0} = \frac{1}{k} \sum_l y_{i_{(l,s_0)}}$$

Agora vamos projetar $y^{(B)} = y - P_{V_B}y$ no espaço de tratamentos V_T ,

$$P_{V_T}y^{(B)} = P_{V_T}y - P_{V_T}(P_{V_B}y),$$

em que $P_{V_T}(P_{V_B}y)$ possui coordenadas que são médias de tratamentos de médias de blocos.

Tem-se que para $i_0 = i(l_0, s_0)$

$$(P_{V_T}(P_{V_B}Y))_{i_0} = \frac{1}{t} \sum_s (P_{V_B}y)_{i_{(l_0,s)}} = \frac{1}{tk} \left(\sum_{s'} \sum_{l'} y_{i_{(l',s')}} \right),$$

logo,

$$\left(P_{V_T}y^{(B)} \right)_{i_0} = (P_{V_T}y)_{i_0} - (P_{V_T}(P_{V_B}Y))_{i_0} = \frac{1}{k} \sum_l y_{i_{(l,s_0)}} - \frac{1}{tk} \left(\sum_{s'} \sum_{l'} y_{i_{(l',s')}} \right).$$

Vamos agora utilizar o fato de que o delineamento é balanceado, ou seja, cada par de tratamentos ocorre em λ blocos e também que $\sum_l \tau_l = 0$.

Usando a notação $\tau_{(l,s)}$ se o tratamento l foi aplicado na parcela que está no bloco s . Por hipótese $\tau_{(l,s_i)} = \tau_{(l,s_j)}$ para todo s_i e s_j , isto é, não depende do bloco. Numerando os blocos que possuem uma parcela na qual foi aplicado o tratamento l , com $s = 1, 2, \dots, r$, a média no bloco s é

$$\frac{1}{k} \sum_l (\tau_{(l,s)} + h_s).$$

A média do tratamento l é

$$\frac{1}{r} \sum_s (\tau_{(l,s)} + h_s) = \tau_{(l,s)} + \frac{1}{r} \sum_s h_s.$$

A média dupla é dada por

$$\begin{aligned} \frac{1}{kr} \sum_s \sum_l (\tau_{(l,s)} + h_s) &= \frac{1}{kr} \sum_s \left(\sum_l \tau_{(l,s)} + \sum_l h_s \right) \\ &= \frac{1}{kr} \sum_s \left(\sum_l \tau_{(l,s)} + kh_s \right) \\ &= \frac{1}{kr} \sum_s \underbrace{\left(\sum_l \tau_{(l,s)} \right)}_{(*)} + \frac{1}{r} \sum_s h_s, \end{aligned}$$

em que $(*)$ é a soma em todas as parcelas que receberam o tratamento i e estão no bloco s .

Vamos fixar o tratamento l_0 para esse somatório, assim

$$\begin{aligned} \frac{1}{kr} \left(\sum_s \sum_l \tau_{(l,s)} + h_s \right) &= \frac{1}{kr} \left(\sum_s \left(\sum_l \tau_{(l,s)} \right) \right) + \frac{1}{kr} \sum_s \sum_l h_s \\ &= \frac{1}{kr} \left(\sum_s \left(\tau_{(l_0,s)} + \sum_{l \neq l_0} \tau_{(l,s)} \right) - \tau_{(l_0,s_0)} \right) + \frac{1}{r} \sum_s h_s \\ &= \frac{1}{kr} \left(r\tau_{(l_0,s)} + \sum_s \sum_{l \neq l_0} \tau_{(l,s)} \right) + \frac{1}{r} \sum_s h_s. \end{aligned}$$

Para o caso balanceado, cada tratamento l_0 ocorre conjuntamente com o tratamento l em λ blocos, ou seja, $\tau_{(l,s)}$ é contado λ vezes. Além disso, todos os tratamentos ocorrem, pois todo

tratamento aparece em λ blocos com l_0 , logo,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{kr} \sum_s \sum_l (\tau_{(l,s)} + h_s) &= \frac{1}{kr} \left(r\tau_{(l_0,s)} + \left(\sum_s \sum_{l \neq l_0} \tau_{(l,s)} \right) \right) + \frac{1}{r} \sum_s h_s \\
&= \frac{1}{kr} \left(r\tau_{(l_0,s)} + \left(\lambda \sum_{l \neq l_0} \tau_l \right) \right) + \frac{1}{r} \sum_s h_s \\
&= \frac{1}{kr} \left(r\tau_{(l_0,s)} + \left(\underbrace{\lambda \sum_l \tau_l}_{\sum \tau_l = 0} - \lambda \tau_{l_0} \right) \right) + \frac{1}{r} \sum_s h_s \\
&= \frac{1}{kr} (r\tau_{(l_0,s)} - \lambda \tau_{l_0}) + \frac{1}{r} \sum_s h_s \\
&= \frac{1}{rk} ((r - \lambda)\tau_{(l_0,s)}) + \frac{1}{r} \sum_s h_s.
\end{aligned}$$

Como $P_{V_T y^{(B)}} = P_{V_T y} - P_{V_T}(P_{V_B y})$, temos que

$$\begin{aligned}
E(P_{V_T y^{(B)}}) &= E(P_{V_T y} - P_{V_T}(P_{V_B y})) \\
&= E(P_{V_T y}) - E(P_{V_T}(P_{V_B y})) \\
&= \tau_{l_0} - \frac{1}{kr} (r - \lambda) \tau_{l_0} \\
&= \left(1 - \frac{r - \lambda}{kr} \right) \tau_{l_0} \\
&= \left(\frac{kr - r + \lambda}{kr} \right) \tau_{l_0} \\
&= \left(\frac{r(k - 1)(t - 1) + \lambda(t - 1)}{kr(t - 1)} \right) \tau_{l_0}.
\end{aligned}$$

Para delineamentos tem-se $\lambda(t - 1) = r(k - 1)$ (particularmente para os delineamentos em blocos completos balanceados, que serão vistos na seção 2.5), assim

$$\begin{aligned}
E(P_{V_T y^{(B)}}) &= \left(\frac{r(k - 1)(t - 1) + r(k - 1)}{kr(t - 1)} \right) \tau_{l_0} \\
&= \frac{(k - 1)t}{k(t - 1)} \tau_{l_0}.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\left(\frac{t - 1}{t} \right) \left(\frac{k}{k - 1} \right) P_{V_T y^{(B)}}$$

é um estimador não viesado de τ_{i_0} . A obtenção para o estimador de σ^2 segue de forma semelhante. \square

2.4.5 Fatores de eficiência

Um delineamento em que todos os t tratamentos foram aplicados em um bloco, ou seja, $t = k$, é um delineamento em bloco completo. Assim os tratamentos foram replicados b vezes e uma vez em cada bloco. Nesse caso todo par de tratamento ocorre nos $r = b$ blocos, portanto, $\Lambda = rJ_{\Theta}$ e a matriz de informação é dada por

$$L = rI_{\Theta} - \frac{1}{t}rJ_{\Theta} = r \left(I_{\Theta} - \frac{1}{t}J_{\Theta} \right),$$

e sua inversa é dada por

$$L^{-} = \frac{1}{r} \left(I_{\Theta} - \frac{1}{t}J_{\Theta} \right).$$

Portanto, os estimadores de $x' \tau$ tem variância

$$x' L^{-} x \sigma^2 = \frac{1}{r} x' \left(I_{\Theta} - \frac{1}{t} J_{\Theta} \right) x \sigma^2 = \frac{1}{t} \left(x' x - \frac{1}{t} x' J_{\Theta} x \right) \sigma^2 = \frac{1}{r} x' x \sigma^2,$$

pois $J_{\Theta} x = 0$, uma vez que x é um contraste, $\sum_{i=1}^t x_i = 0$.

Para comparar delineamentos em blocos incompletos é razoável compará-los aos delineamentos em blocos completos. Vamos denominar σ^2 a variância de blocos incompletos e σ_{CBD}^2 a variância de blocos completos.

Definição 2.4.2. (Bailey, 2004, p. 90) A eficiência para um contraste x em um delineamento em blocos incompletos equireplicado com variância σ^2 e replicação r em relação a um delineamento em blocos completos com variância σ_{CBD}^2 e mesma replicação é

$$\frac{x' x}{rx' L^{-} x} \frac{\sigma_{CBD}^2}{\sigma^2}$$

e o fator de eficiência para x é

$$\frac{x' x}{rx' L^{-} x}.$$

Teorema 2.4.2. (Bailey, 2004, p. 90) Seja ε o fator de eficiência para um contraste x . Então $0 \leq \varepsilon \leq 1$.

Um contraste é dito básico se é um autovetor da matriz L . Logo, para tais contrastes tem-se $Lx = cx$, e se $c \neq 0$, então $L^{-1}x = \frac{1}{c}x$ e

$$\frac{x'x}{rx'L^{-1}x} = \frac{x'x}{r\frac{x'x}{c}} = \frac{c}{r}.$$

Como todo contraste é a soma de contrastes básicos, fica fácil o cálculo de seus fatores de eficiência.

Definição 2.4.3. (Bailey, 2004, p. 91) Os fatores de eficiência canônicos em um delineamento em blocos incompletos equireplicado com replicação r são $\frac{c_1}{r}, \frac{c_2}{r}, \dots, \frac{c_{t-1}}{r}$, em que c_1, c_2, \dots, c_{t-1} são os autovalores de L em V_0^\perp , contados com suas multiplicidades.

Voltaremos a falar sobre fatores de eficiência ao longo do texto. A discussão sobre otimalidade de delineamentos será vista na seção 2.8.3.

2.5 Delineamento em blocos incompletos balanceados e parcialmente balanceados

Para que um delineamento experimental admita análise estatística adequada é razoável supor que o delineamento tenha boas propriedades, por exemplo, ser equireplicado. Outra propriedade desejável é que todo par de tratamentos ocorra em um mesmo número de blocos, isto é, $\Lambda(\theta, \eta) = \lambda$ para todo θ e η , com $\theta \neq \eta$. A forma geral de obter simetrias é utilizar a construção combinatória dos esquemas de associação.

2.5.1 Esquemas de associação e delineamentos

Seja \mathfrak{G} um esquema de associação no conjunto dos tratamentos Θ com classes associadas não diagonais $\mathfrak{C}_1, \mathfrak{C}_2, \dots, \mathfrak{C}_s$ e matrizes de adjacência A_0, A_1, \dots, A_s . Um delineamento em bloco incompleto é dito parcialmente balanceado (PBIBD) em relação a \mathfrak{G} se existem inteiros $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_s$ tais que

$$(\theta, \eta) \in \mathfrak{C}_i \Rightarrow \Lambda(\theta, \eta) = \lambda_i, \text{ isto é, } \Lambda = \sum_{i=0}^s \lambda_i A_i.$$

Outra vantagem de relacionar a matriz Λ com as matrizes de adjacência A_0, A_1, \dots, A_s é que nesse contexto Λ pertence a álgebra de Bose-Mesner de \mathfrak{G} e conseqüentemente a matriz de informação L também. Logo, L comporta-se bem em relação ao strata, o que permite a simplificação do cálculo da variância dos estimadores de determinados contrastes.

Lema 2.5.1. (Bailey, 2004, p. 112) Em um delineamento em bloco incompleto parcialmente balanceado,

$$\sum_{i=1}^s a_i \lambda_i = r(k-1).$$

Em particular, em um delineamento em bloco incompleto balanceado,

$$(t-1)\lambda = r(k-1).$$

Teorema 2.5.1. (Bailey, 2004, 114) Em um delineamento em blocos incompletos parcialmente balanceado com classes associadas não diagonais $\mathfrak{C}_1, \mathfrak{C}_2, \dots, \mathfrak{C}_s$ existem constantes k_1, k_2, \dots, k_s tais que a variância do estimador de $\tau(\theta) - \tau(\eta)$ é igual a $k_i \sigma^2$ se $(\theta, \eta) \in \mathfrak{C}_i$.

Em particular, para delineamentos em blocos incompletos balanceados (BIBD ou 2-delineamentos) tem-se o esquema de associação trivial e

$$\Lambda = \lambda_0 I_{\Theta} + \lambda_1 (J_{\Theta} - I_{\Theta}) = r I_{\Theta} - \lambda (J_{\Theta} - I_{\Theta}),$$

então,

$$\begin{aligned} L &= r I_{\Theta} - \frac{1}{k} \Lambda = r I_{\Theta} - \frac{1}{k} (r I_{\Theta} + \lambda (J_{\Theta} - I_{\Theta})) \\ &= \left(r - \frac{r}{k} + \frac{\lambda}{k} \right) I_{\Theta} - \frac{\lambda}{k} J_{\Theta} = \left(\frac{r(k-1) + \lambda}{k} \right) I_{\Theta} - \frac{\lambda}{k} J_{\Theta}. \end{aligned}$$

Como $\lambda(t-1) = r(k-1)$ segue que

$$L = \frac{\lambda t}{k} \left(I_{\Theta} - \frac{1}{t} J_{\Theta} \right).$$

Por substituição tem-se

$$L^{-} = \frac{k}{\lambda t} \left(I_{\Theta} - \frac{1}{t} J_{\Theta} \right).$$

Por fim, para um BIBD a variância é:

$$\begin{aligned}
 \text{var} \left(\widehat{\tau(\theta)} - \widehat{\tau(\eta)} \right) &= (L^-(\theta, \theta) - L^-(\theta, \eta) - L^-(\eta, \theta) + L^-(\eta, \eta)) \sigma^2 \\
 &= \left(\frac{k}{\lambda t} - \frac{k}{\lambda t^2} - \left(-\frac{k}{\lambda t^2} \right) - \left(-\frac{k}{\lambda t^2} \right) + \frac{k}{\lambda t} - \frac{k}{\lambda t^2} \right) \sigma^2 \\
 &= \frac{k}{\lambda t} (1 + 1) \sigma^2 = \frac{2k}{\lambda t} \sigma^2 = 2 \frac{k}{(k-1)} \frac{(k-1)}{\lambda t} \sigma^2 \\
 &= \left(2 \frac{k}{(k-1)} \left(\frac{\lambda(t-1)}{r} \frac{1}{\lambda t} \right) \right) \sigma^2 \\
 &= \left(\frac{2}{r} \frac{k}{(k-1)} \frac{(t-1)}{t} \right) \sigma^2.
 \end{aligned}$$

Portanto, o fator de eficiência de um contraste simples para um BIBD é igual

$$\varepsilon = \frac{x'x}{rx'Lx} = \frac{2}{r \frac{2}{r} \frac{k}{(k-1)} \frac{(t-1)}{t}} = \frac{t}{t-1} \frac{k-1}{k},$$

e como $t > k$ (bloco incompleto) tem-se, como verificado no teorema 2.4.2, que $\varepsilon < 1$.

Um delineamento ser balanceado é desejável. No entanto, é necessário que o número de blocos seja grande, o que pode ser inviável em situações experimentais. Um resultado clássico sobre este fato em delineamentos experimentais é a desigualdade de Fisher apresentada no teorema a seguir.

Teorema 2.5.2. (apud Fisher; Bailey, 2004, p. 115) **Desigualdade de Fisher:** Em um delineamento em blocos incompletos balanceado com t tratamentos e b blocos tem-se $b \geq t$.

Uma demonstração algébrica deste teorema pode ser encontrada em Lint e Wilson (1992, p. 194).

Um delineamento em que o número de tratamentos é igual ao número de blocos, isto é, $t = b$ é dito simétrico.

2.5.2 Uma propriedade dos delineamentos simétricos

A propriedade apresentada na proposição a seguir é citada em Bose (1942) sem apresentação de sua demonstração.

Proposição 2.5.1. Em um delineamento em blocos incompletos balanceado simétrico ($b = t$ e $r = k$) o número de tratamentos iguais que ocorrem em dois blocos quaisquer é constante.

Demonstração. Vamos enumerar os blocos da forma B_0, B_1, \dots, B_{t-1} . Seja l_j o número de tratamentos que ocorrem conjuntamente em B_0 e B_j , $l_j = |B_0 \cap B_j|$ com $j = 1, 2, \dots, t-1$. Vamos calcular a média e a variância do conjunto de números $\{l_j, j = 1, 2, \dots, t-1\}$. Como cada tratamento tem replicação $r = k$ em B_0 , este ocorre em $k-1$ blocos. Logo, no somatório

$$\sum_{j=1}^{t-1} l_j$$

temos que cada tratamento em $B_0 \cap B_j$ foi contado $k-1$ vezes. Como todos os tratamentos de B_0 foram contados, temos que

$$\sum_{j=1}^{t-1} l_j = k(k-1).$$

Portanto, a média é

$$\mu = \frac{\sum_{j=1}^{t-1} l_j}{t-1} = \frac{k(k-1)}{t-1} = \frac{\lambda(t-1)}{t-1} = \lambda,$$

pois, $k(k-1) = \lambda(t-1)$. Como cada par de tratamentos ocorre em λ blocos, temos que os $\frac{k(k-1)}{2}$ pares de tratamentos do bloco B_0 estão contidos em $\frac{1}{2}(\lambda-1)k(k-1)$ blocos diferentes de B_0 , contados permitindo-se repetição.

Para os tratamentos em $B_0 \cap B_j$, temos $\frac{1}{2}l_j(l_j-1)$ pares. Somando

$$\sum_{j=1}^{t-1} \frac{1}{2}l_j(l_j-1)$$

temos que o total de $\frac{1}{2}(\lambda-1)k(k-1)$, pois cada par em $B_0 \cap B_j$ está em $\lambda-1$ dos blocos B_1, B_2, \dots, B_{t-1} . Logo,

$$\sum_{j=1}^{t-1} l_j(l_j-1) = (\lambda-1)k(k-1).$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=1}^{t-1} l_j^2 - \sum_{j=1}^{t-1} l_j &= (\lambda - 1)k(k - 1) \Rightarrow \\
 \sum_{j=1}^{t-1} l_j^2 &= \sum_{j=1}^{t-1} l_j + (\lambda - 1)k(k - 1) \\
 &= k(k - 1) + (\lambda - 1)k(k - 1) \\
 &= \lambda k(k - 1).
 \end{aligned}$$

A variância σ^2 é dada por

$$\begin{aligned}
 \sigma^2 &= \frac{\sum_{j=1}^{t-1} (l_j - \mu)^2}{t - 1} = \frac{\sum_{j=1}^{t-1} l_j^2}{t - 1} - \mu^2 \\
 &= \frac{\lambda k(k - 1)}{t - 1} - \lambda^2 = \frac{\lambda^2(t - 1)}{t - 1} - \lambda^2 \\
 &= \lambda^2 - \lambda^2 = 0.
 \end{aligned}$$

Segue então que $l_j = \lambda$ para todo $j = 1, 2, \dots, t - 1$. Portanto, $B_i \cap B_j$ para $i \neq j, i \in 0, 1, \dots, t - 1$ sempre contém λ tratamentos em comum. \square

Corolário 2.5.1. Para um delineamento balanceado e simétrico com $\lambda = 1$ a interseção entre dois blocos quaisquer possui exatamente um elemento.

Demonstração. De fato, se t_0 e t_1 pertencem a $B_0 \cap B_1$ então t_0 e t_1 estão simultaneamente em B_0 e B_1 , o que é absurdo pois ambos estão juntos em apenas $\lambda = 1$ blocos. Resta então mostrar que a interseção não pode ser vazia. Como a replicação é $r = k$, para cada tratamento em B_0 , tem-se $k - 1$ blocos que interceptam B_0 nesse tratamento. Logo, considerando todos os tratamentos em B_0 temos $k(k - 1)$ blocos, Mas, $k(k - 1) = \lambda(t - 1) = t - 1 = b - 1$. Como o número de blocos é igual ao total de tratamentos e todos são distintos segue o resultado. \square

2.6 Delineamentos com vários tipos de blocagens (família de partições)

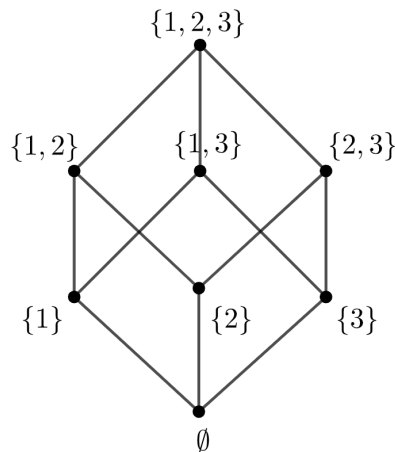
Em delineamentos experimentais as parcelas podem não ter apenas uma estrutura de blocos, mas várias. Por exemplo: canteiros contidos em casas de vegetação, faixas de terra contidas em campos, que por sua vez estão contidos em fazendas distintas, entre outros. Para um mesmo delineamento pode ocorrer também que uma estrutura em blocos não esteja contida

em outra estrutura de blocos. Nesse último caso tem-se relações mais complexas. Para modelar essas situações utiliza-se o conceito matemático de ordem parcial.

O exemplo mais simples de ordem parcial ocorre quando tem-se um conjunto formado de subconjuntos de outro conjunto. Nesse caso temos a ordem parcial definida pela inclusão. Uma ordem parcial fica totalmente representada por um recurso gráfico denominado diagrama de Hasse. Para mais detalhes veja Lipschutz (1968).

Exemplo 2.6.1. Para o conjunto $\{1, 2, 3\}$, tem-se o conjunto de subconjuntos $A = \{\emptyset, \{1\}, \{2\}, \{3\}, \{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{1, 2, 3\}\}$. No qual obtém-se a ordem parcial definida pela inclusão, cujo diagrama de Hasse é mostrado na figura 2.2.

Figura 2.2 – Ordem parcial.



Fonte: Da autora (2024).

Outra maneira de representar uma ordem parcial é utilizando matrizes. Indexando uma matriz ζ pelos elementos da ordem parcial do diagrama de Hasse tem-se que

$$\zeta(H, F) = \begin{cases} 1, & \text{se } H \subseteq F, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Para o exemplo 2.6.1, se os elementos de A são ordenados como no diagrama de Hasse da figura 2.2, a matriz ζ é dada por

$$\zeta = \begin{pmatrix} & \emptyset & \{1\} & \{2\} & \{3\} & \{1,2\} & \{1,3\} & \{2,3\} & \{1,2,3\} \\ \emptyset & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \{1\} & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ \{2\} & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ \{3\} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ \{1,2\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ \{1,3\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ \{2,3\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ \{1,2,3\} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

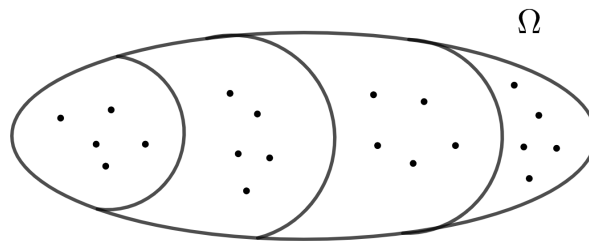
A inversa da matriz ζ é denominada função de Moebius, μ , que é também uma matriz triangular superior.

2.6.1 Definindo partições

Uma partição de um conjunto A é uma união disjunta de subconjuntos não vazios. Estes subconjuntos são denominados classes. Tais partições serão denotadas por F, G, H . Uma partição é uniforme se o número de elementos em cada classe é o mesmo.

Notação: n_F é o número de classes da partição F e k_F o número de elementos de cada classe.

Figura 2.3 – Partição F com 4 classes em Ω .



Fonte: Da autora (2024).

Na figura 2.3 $n_F = 4$ e $k_F = 5$.

Uma partição F qualquer é definida pela sua matriz de relação, que é dada por

$$R_F(\alpha, \beta) = \begin{cases} 1, & \text{se } \alpha \text{ e } \beta \text{ estão em uma mesma classe } F, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se a cardinalidade de Ω é dada por $|\Omega| = n$, a matriz de relação R_F é uma matriz $n \times n$. Vale destacar também que R_F é simétrica e a soma dos valores de uma linha é k_F , ou seja,

$$\sum_{\beta \in \Omega} R_F(\alpha, \beta) = k_F,$$

pois temos k_F elementos de Ω (contando o próprio α) que estão na mesma classe de F em que está o elemento α .

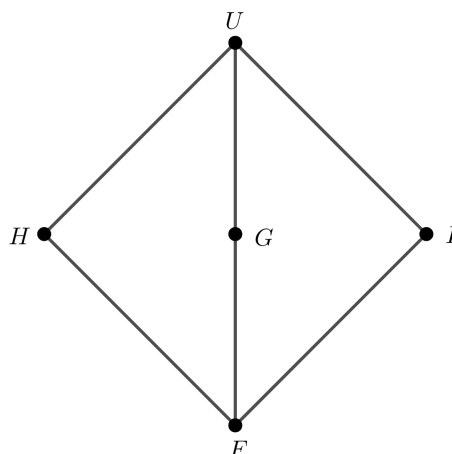
Dadas duas partições F e G de Ω tem-se a partição ínfimo $F \wedge G$. As classes de $F \wedge G$ são dadas pelas intersecções das classes de F com as classes de G . Tem-se também a partição supremo $F \vee G$. Essa partição é definida como a menor partição, no sentido que as classes de $F \vee G$ são formadas de classes de F e G . A partição $F \vee G$ é mais complicada de ser visualizada. Um algoritmo para sua obtenção é apresentado em (Bailey, 2008, p. 172).

Exemplo 2.6.2. Seja $\Omega = \{1, 2, \dots, 10\}$ com partições $F = \{\{1, 2\}, \{3, 4\}, \{5, 6\}, \{7, 8\}, \{9, 10\}\}$ e $G = \{\{1, 2, 3\}, \{4, 5, 6\}, \{7, 8, 9, 10\}\}$. Assim, $F \vee G = \{\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}, \{7, 8, 9, 10\}\}$.

Se as classes de F estão contidas nas classes de G denotamos que $F \preceq G$. Um conjunto de partições é um conjunto parcialmente ordenado pela relação de inclusão das classes e pode ser descrito pelo diagrama de Hasse.

Exemplo 2.6.3. Considere todas as partições de $\{1, 2, 3\}$, ou seja, $F = \{\{1\}, \{2\}, \{3\}\}$, $G = \{\{1, 2\}, \{3\}\}$, $H = \{\{1, 3\}, \{2\}\}$, $I = \{\{2, 3\}, \{1\}\}$, $U = \{\{1, 2, 3\}\}$. O diagrama de Hasse para estas partições está representado na figura 2.4, em que $F \prec H$, $F \prec G$, $F \prec I$, $H \prec U$, $G \prec U$ e $I \prec U$.

Figura 2.4 – Diagrama de Hasse para o exemplo 2.6.3.



Fonte: Da autora (2024).

Como afirmado anteriormente, o diagrama de Hasse nos dá uma boa ideia das propriedades da ordem parcial de um conjunto de partições. Pode-se também utilizar matrizes como observado anteriormente.

Seja \mathfrak{F} um conjunto de partições de um conjunto Ω . A matriz ζ em $\mathbb{R}^{\mathfrak{F} \times \mathfrak{F}}$, tal que, se \mathfrak{F} tem m partições, a matriz ζ é $m \times m$ e é dada por

$$\zeta(F, G) = \begin{cases} 1, & \text{se } F \preceq G, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se a matriz ζ é obtida seguindo a sequência do diagrama de Hasse ela será uma matriz triangular superior. As matrizes ζ e μ (função de Moebius) do exemplo 2.6.3 são dadas respectivamente por

$$\zeta = \begin{pmatrix} & F & H & G & I & U \\ F & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ H & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ G & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ I & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ U & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \zeta^{-1} = \mu = \begin{pmatrix} & F & H & G & I & U \\ F & 1 & -1 & -1 & -1 & 2 \\ H & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ G & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ I & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ U & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Outra forma de se trabalhar com partições de um conjunto Ω é considerar o espaço Euclidiano $\mathbb{R}^\Omega = \{(x_1, x_2, \dots, x_n), x_i \in \mathbb{R}\}$, em que cada coordenada x_i corresponde a um elemento de Ω . No caso das parcelas (elementos) serem numerados $\Omega = \{1, 2, \dots, n\}$, a coordenada x_i corresponde à parcela i . É possível então definir o subespaço vetorial relativo a partição F por

$$V_F = \{(x_1, x_2, \dots, x_n) \text{ em que as coordenadas correspondentes às parcelas em uma mesma classe de } F \text{ são iguais}\}.$$

A grande vantagem dessa abordagem é que pode-se utilizar ferramentas de álgebra linear em relação a problemas combinatórios.

Exemplo 2.6.4. Considere $\Omega = \{1, 2, 3, 4\}$ e a partição $F = \{\{1\}, \{2, 4\}, \{3\}\}$. O subespaço V_F é dado por $\{(a, b, c, b) : a, b, c \in \mathbb{R}\}$.

Note que a dimensão de V_F é igual a n_F . A matriz de relação de F , R_F , define o projetor ortogonal em V_F , ou seja, a matriz de projeção P_{V_F} .

Proposição 2.6.1. (Bailey, 2004, p. 146) Se F é uma partição uniforme com classes de tamanho k_F , então a matriz de projeção no subespaço V_F é dada por

$$P_{V_F} = \frac{1}{k_F} R_F.$$

Demonstração. Um projetor ortogonal é caracterizado por ser simétrico e idempotente. Claramente $\frac{1}{k_F} R_F$ é simétrico. Vejamos que ele é idempotente:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{k_F} R_F \right)^2 (\alpha, \beta) &= \sum_{\gamma \in \Omega} \frac{1}{k_F} R_F(\alpha, \gamma) \frac{1}{k_F} R_F(\gamma, \beta) \\ &= \frac{1}{k_F^2} \sum_{\gamma \in \Omega} R_F(\alpha, \gamma) R_F(\gamma, \beta). \end{aligned}$$

Considere que α e β estão em classes diferentes de F . Se $R_F(\alpha, \gamma) = 1$ temos que γ está na mesma classe de α , logo, γ não pode estar na mesma classe de β , e portanto, $R_F(\gamma, \beta) = 0$.

Logo,

$$\left(\frac{1}{k_F} R_F \right)^2 (\alpha, \beta) = 0.$$

Agora considere que α e β estão na mesma classe F . Nesse caso, para todo γ nesta classe $R_F(\alpha, \gamma) = 1$ e $R_F(\gamma, \beta) = 1$, e portanto,

$$\left(\frac{1}{k_F} R_F \right)^2 (\alpha, \beta) = \frac{1}{k_F^2} \sum_{\gamma \in \Omega} R_F(\alpha, \gamma) R_F(\gamma, \beta) = \frac{1}{k_F^2} k_F = \frac{1}{k_F} = \frac{1}{k_F} R_F(\alpha, \beta).$$

Portanto, $\left(\frac{1}{k_F} R_F \right)^2 = \frac{1}{k_F} R_F$. \square

Vamos denominar E a partição elementar em que cada classe da partição é formada por um único elemento. Por exemplo, para a partição $E = \{\{1\}, \{2\}, \{3\}, \{4\}\}$ de $\Omega = \{1, 2, 3, 4\}$ tem-se que $V_E = \mathbb{R}^4$.

Lema 2.6.1. (Bailey, 2004, p. 146) Se $F \preceq G$ então $V_G \subseteq V_F$.

Lema 2.6.2. (Bailey, 2004, p. 149) Para partições F e G temos que $V_F \cap V_G = V_{F \vee G}$.

Demonstração. Se ω_i e ω_j são elementos de Ω , relativos a i -ésima e j -ésima coordenadas de v e que estão em uma mesma classe F , então, $v_i = v_j$. Tomando um índice k , tal que o elemento ω_k relativo a k -ésima coordenada de v e ω_i estejam em uma mesma classe G , temos $v_k = v_i$ e,

portanto, $v_k = v_i = v_j$. Mas, se ω_i e ω_j estão em uma mesma classe F e ω_k em uma mesma classe G , então ω_i , ω_j e ω_k estão na mesma classe dada pelo $F \vee G$. Repetindo a construção para outras coordenadas segue que $V_F \cap V_G = V_{F \vee G}$. \square

Exemplo 2.6.5. Sejam as partições $F = \{\{1, 2, 3\}, \{4, 5, 6\}, \{7, 8, 9\}, \{10, 11, 12\}\}$ e $G = \{\{1, 2\}, \{3, 4\}, \{5, 6\}, \{7, 8\}, \{9, 10\}, \{11, 12\}\}$. Nesse caso temos a partição dada pelo supremo $F \vee G = \{\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}, \{7, 8, 9, 10, 11, 12\}\}$. Os subespaços gerados por essas partições são respectivamente.

$$V_F = \{(a, a, a, b, b, b, c, c, c, d, d, d) : a, b, c, d \in \mathbb{R}\},$$

$$V_G = \{(e, e, f, f, g, g, h, h, i, i, j, j) : e, f, g, h, i, j \in \mathbb{R}\},$$

$$V_F \cap V_G = V_{F \vee G} = \{(\alpha, \alpha, \alpha, \alpha, \alpha, \alpha, \beta, \beta, \beta, \beta, \beta, \beta) : \alpha, \beta \in \mathbb{R}\}.$$

Trabalhar com projeções, em geral, mesmo utilizando apenas as uniformes, é matematicamente difícil, já que o número de partições é relativamente grande. Nesse sentido, pode-se trabalhar com partições que estão relacionadas entre si de forma simplificada. Essa simplificação ocorre para partições ortogonais.

2.6.2 Partições ortogonais

Definição 2.6.1. (Bailey, 2004, p. 149) Sejam F e G partições em Ω . Então, F é ortogonal a G se V_F é geometricamente ortogonal a V_G , ou seja, se $P_{V_F} P_{V_G} = P_{V_G} P_{V_F}$.

Se duas projeções ortogonais comutam significa geometricamente que $P_{V_F} P_{V_G}$ também é uma projeção ortogonal. Pela simetria tem-se $(P_{V_F} P_{V_G})' = P_{V_G}' P_{V_F}' = P_{V_G} P_{V_F} = P_{V_F} P_{V_G}$ e pela idempotência tem-se $(P_{V_F} P_{V_G})^2 = P_{V_F} P_{V_G} P_{V_F} P_{V_G} = P_{V_F} P_{V_F} P_{V_G} P_{V_G} = P_{V_F}^2 P_{V_G}^2 = P_{V_F} P_{V_G}$. Note que $P_{V_F} P_{V_G}$ é a projeção no subespaço $V_F \cap V_G$, e portanto a ortogonalidade implica que $P_{V_F} P_{V_G} = P_{V_{F \vee G}}$.

Lema 2.6.3. (Bailey, 2004, p. 149) Se F é ortogonal a G , então:

- a) $P_{V_F} P_{V_G} = P_{V_{F \vee G}}$;
- b) $V_F \cap (V_{F \vee G})^\perp$ é ortogonal a V_G .

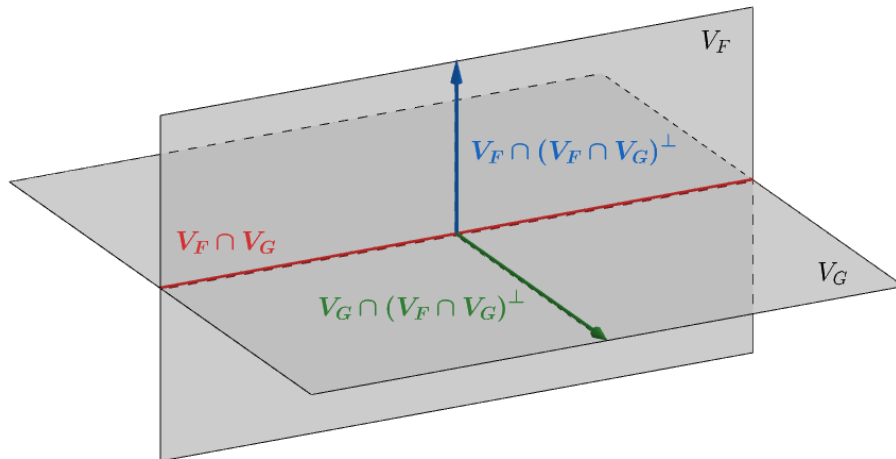
Demonstração. Sejam $W_F = V_F \cap (V_{F \vee G})^\perp$, $W_G = V_G \cap (V_{F \vee G})^\perp$ e $W = (V_F \oplus V_G)^\perp$. Se F é ortogonal a G então o espaço todo é soma de $V_{F \vee G} \oplus W_F \oplus W_G \oplus W$. Assim, qualquer vetor v pode ser expresso como soma de $v = x + v_F + v_G + w$, com $x \in V_{F \vee G}$, $v_F \in W_F$, $v_G \in W_G$ e

$w \in W$. Agora, $P_{V_G}v = x + v_G$, porque x e v_G estão em V_G , enquanto v_F e w são ortogonais a V_G . Portanto, $P_{V_F}(P_{V_G}v) = P_{V_F}(x + v_G) = x$, porque v_G é ortogonal a V_F . De modo análogo $P_{V_G}(P_{V_F}v) = P_{V_G}(x + v_F) = x$. Isso é verdade para todo v , então $P_{V_F}P_{V_G} = P_{V_G}P_{V_F}$. Além disso, $(V_{F \vee G})^\perp = W_F \oplus W_G \oplus W$, então, $P_{V_{F \vee G}}v = x$. Portanto, $P_{V_F}P_{V_G} = P_{V_{F \vee G}}$.

Por outro lado, suponha que $P_{V_F}P_{V_G} = P_{V_{F \vee G}}$. Então $P_{V_F}P_{V_G}v \in V_F \cap V_G = V_{F \vee G}$ para todo vetor v . Em particular, se $v \in W_G$, então $v \in V_G$. Assim, $P_{V_G}v = v$ e então $P_{V_F}v = P_{V_F}P_{V_G}v \in V_{F \vee G}$, que é ortogonal a v . A única maneira de a projeção de um vetor ser ortogonal a esse vetor é se a projeção for nula, então $P_{V_F}v = 0$. Em outras palavras, v é ortogonal a V_F . Assim, W_G é ortogonal a V_F , o que implica que F é ortogonal a G . \square

Temos que $V_F \cap (V_F \cap V_G)^\perp$ e $V_G \cap (V_F \cap V_G)^\perp$ são subespaços mutuamente ortogonais, (veja figura 2.5). Lembre-se do lema 2.6.2, que diz que $V_F \cap V_G = V_{F \vee G}$.

Figura 2.5 – Subespaços ortogonais.



Fonte: Da autora (2024).

Teorema 2.6.1. (Bailey, 2004, p. 150) Seja \mathfrak{F} um conjunto de partições ortogonais aos pares de Ω que é fechado sob \vee . Para F em \mathfrak{F} , seja

$$W_F = V_F \cap \left(\sum_{F \prec G} V_G \right)^\perp.$$

Então:

- os subespaços W_F e W_G são ortogonais entre si sempre que F e G são partições diferentes em \mathfrak{F} ;

b) para cada F em \mathfrak{F}

$$V_F = \bigoplus_{F \preceq G} W_G.$$

A ideia é que podemos obter uma sequência de subespaços ortogonais W_F com boas propriedades utilizando a ordem parcial das partições em \mathfrak{F} . Observe que se $F \prec G$ então $V_G \subset V_F$. Dessa forma, W_F é "o que resta" de V_F ao retirar os subespaços V_G , que estão contidos em V_F .

O diagrama de Hasse definido por \mathfrak{F} nos permite obter cada um dos subespaços V_F como soma direta de subespaços W_G com $F \preceq G$. Trabalhar com partições ortogonais nos permite utilizar técnicas de álgebra linear de forma eficaz.

A questão principal é: o que a ortogonalidade implica do ponto de vista de delineamentos experimentais? O pesquisador certamente está interessado que seu experimento possua uma série de simetrias, o que vai permitir maior controle da aleatoriedade. Por exemplo, que o número de parcelas na intersecção de duas blocagens diferentes sejam sempre o mesmo.

Dadas duas partições F e G de um mesmo conjunto Ω , vamos enumerar de forma arbitrária as classes de F e G como $F = \{F_1, F_2, \dots, F_{n_F}\}$ e $G = \{G_1, G_2, \dots, G_{n_G}\}$. Seja H a partição supremo de F e G , $H = F \vee G = \{H_1, H_2, \dots, H_{n_H}\}$, Por definição

$$H_l = \bigcup_{i \in S_l^F} F_i = \bigcup_{i \in S_l^G} G_i,$$

em que, $S_l^F \subset \{1, 2, \dots, n_F\}$ e $S_l^G \subset \{1, 2, \dots, n_G\}$.

A ortogonalidade implicará em boas propriedades em relação a intersecção das classes, como afirma o teorema a seguir.

Teorema 2.6.2. (Bailey, 2008, p. 180) F e G são ortogonais se, e somente se:

- $F_i \cap G_j \neq \emptyset$, para todo $i \in S_l^F$, para todo $j \in S_l^G$ e todo $l \in \{1, 2, \dots, n_H\}$;
- $|F_i \cap G_j| = c_l p_i q_j$, em que $p_i = |F_i|$, $q_j = |G_j|$ e c_l é uma constante de proporcionalidade que depende apenas da classe H_l .

Demonstração. Seja $y \in \mathbb{R}^\Omega$. As coordenadas de $P_{V_F}y$ relativas às parcelas em F_i são dadas pela média dos valores das parcelas em F_i , isto é,

$$\frac{1}{p_i} \sum_{\omega \in F_i} y_\omega.$$

Seja $s_{ij} = |F_i \cap G_j|$. As coordenadas de $P_{V_G}P_{V_F}y$ relativas às parcelas $\omega \in F_i \cap G_j, i \in S_i^F$ são dadas por

$$\sum_{i \in S_i^F} \frac{s_{ij}}{q_j} \left(\frac{1}{p_i} \sum_{\omega \in F_i} y_\omega \right).$$

Se F e G são ortogonais $P_{V_F}P_{V_G} = P_{V_{F \vee G}}$ e como estamos considerando as classes de F e G que estão contidas na classe H_l de $H = F \vee G$, temos que

$$\frac{1}{q_j} \sum_{i \in S_i^F} s_{ij} \left(\frac{1}{p_i} \sum_{\omega \in F_i} y_\omega \right)$$

deve ser constante para todo $j \in S_j^G$. Assim, para $j' \in S_j^G$ tem-se

$$\sum_i \frac{s_{ij}}{q_j} \left(\frac{\sum_{\omega \in F_i} y_\omega}{p_i} \right) = \sum_i \frac{s_{ij'}}{q_{j'}} \left(\frac{\sum_{\omega \in F_i} y_\omega}{p_i} \right),$$

qualquer que sejam os valores de y_ω . Tal fato implica que

$$\frac{s_{ij}}{q_j} = \frac{s_{ij'}}{q_{j'}}.$$

De forma simétrica, para $i \in S_i^F$ temos que

$$\frac{s_{ij}}{p_i} = \frac{s_{i'j}}{p_{i'}}.$$

Somando em j' temos que

$$\begin{aligned}\sum_{j'} s_{ij} q_{j'} &= \sum_{j'} q_j s_{ij'} \Rightarrow \\ s_{ij} \sum_{j'} q_{j'} &= q_j \sum_{j'} s_{ij'} \Rightarrow \\ s_{ij} |H_l| &= q_j p_i \Rightarrow \\ s_{ij} &= \frac{1}{|H_l|} q_j p_i,\end{aligned}$$

e o resultado segue fazendo $c_l = \frac{1}{|H_l|}$.

Vejam agora a recíproca. Seja H_l uma classe de $F \vee G$ que contenha as classes F_i e G_j .

Temos então que

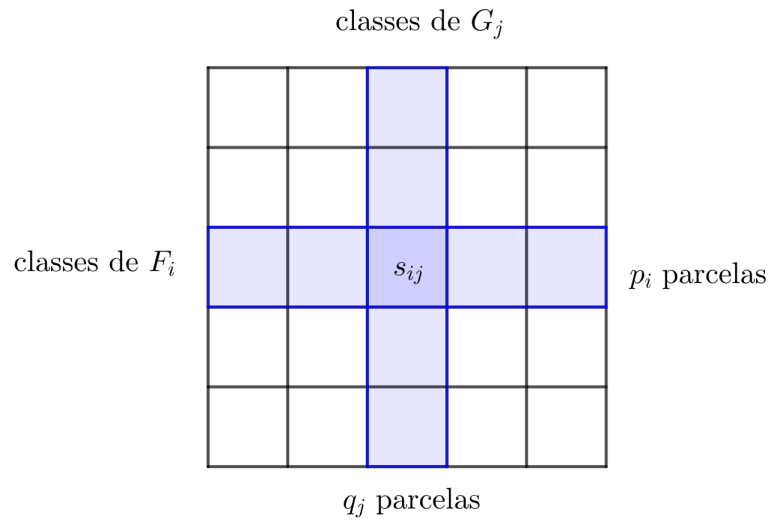
$$\begin{aligned}s_{ij} &= \frac{1}{|H_l|} p_i q_j \Rightarrow \\ s_{ij} \left(\sum_{\omega \in F_i} y_\omega \right) &= \frac{1}{|H_l|} p_i q_j \left(\sum_{\omega \in F_i} y_\omega \right),\end{aligned}$$

logo,

$$\frac{1}{q_j} \sum_i s_{ij} \frac{\sum_{\omega \in F_i} y_\omega}{p_i} = \frac{1}{p_i q_j} \frac{1}{|H_l|} \sum_i p_i q_j \left(\sum_{\omega \in F_i} y_\omega \right) = \frac{1}{|H_l|} \sum_i \left(\sum_{\omega \in F_i} y_\omega \right) = \frac{1}{|H_l|} \sum_{\omega \in H_l} y_\omega.$$

Portanto, o valor de $P_{V_F} P_{V_G} y$ é igual a $P_{V_{F \vee G}} y$. De modo análogo $P_{V_G} P_{V_F} y$ é igual $P_{V_{F \vee G}} y$. De onde vem que $P_{V_F} P_{V_G} = P_{V_G} P_{V_F}$. \square

Observe que o resultado foi provado para o caso geral, no qual as partições não são necessariamente uniformes.

Figura 2.6 – Classes de H_l de $F \vee G$.

Fonte: Da autora (2024).

Corolário 2.6.1. (Bailey, 2008, p. 76) Se cada combinação de níveis dos fatores F e G ocorrem em um número igual de parcelas então $W_F \perp W_G$.

Com o objetivo de deixar mais clara a abordagem sobre ortogonalidade entre os dois textos Bailey (2004, 2008) vamos demonstrar o corolário anterior utilizando o teorema a seguir. (A definição de delineamento ortogonal será vista em 2.7.2).

Teorema 2.6.3. (Bailey, 2008, p. 57) Dado um delineamento com b blocos de tamanho k e t tratamentos, seja s_{ij} o número de vezes que o tratamento i ocorre no bloco j , para $i = 1, 2, \dots, t$ e $j = 1, 2, \dots, b$. Então o delineamento em blocos é ortogonal se, e somente se, $s_{ij} = \frac{r_i}{b}$ para $i = 1, 2, \dots, t$ e $j = 1, 2, \dots, b$.

Demonstração. Corolário 2.6.1. Considere como blocos as parcelas que receberam o mesmo nível do fator G , isto é, os blocos são da forma $B_j = \{\omega \in \Omega : \psi(\omega) = \text{tratamento}\{i, j\}\}$. Dessa consideração segue que $V_B = V_G$ e $W_B = W_G$. Pelo teorema 2.6.3 W_G é ortogonal a W_F se, e somente se, $s_{ij} = \frac{r_i}{b}$, em que s_{ij} é quantas vezes o tratamento i ocorreu no bloco j e b é a quantidade de blocos. Observe agora que os tratamentos são os níveis do fator F , isto é, $F = T$. Como s_{ij} é o número de vezes que o tratamento $\{i, j\}$ ocorreu e r_i é a quantidade de parcelas que receberam o nível i de F . Note que todo nível j de G ocorre com o nível i , logo,

$$r_i = \sum_{j=1}^{n_G} s_{ij}$$

e b é igual ao número de classes de G , $b = n_G$. Portanto,

$$s_{ij} = \frac{\sum_{j=1}^{n_G} s_{ij}}{n_G}.$$

Logo,

$$\sum_{i=1}^{n_F} s_{ij} = \frac{\sum_{i=1}^{n_F} \sum_{j=1}^{n_G} s_{ij}}{n_G} = \frac{|\Omega|}{n_G}.$$

Podemos agora inverter a construção. Supor que os blocos são as classes de F e os tratamentos são os níveis de G . Repetindo o raciocínio temos que

$$s_{ij} = \frac{\sum_{i=1}^{n_F} s_{ij}}{n_F} = \frac{\frac{|\Omega|}{n_G}}{n_F} = \frac{|\Omega|}{n_F n_G},$$

e, portanto, todos os tratamentos dados por um nível de F e um nível de G são igualmente replicados. \square

Corolário 2.6.2. (Bailey, 2004, p. 150) As partições F e G são ortogonais entre si se, e somente se:

- a) dentro de cada classe de $F \vee G$, cada classe F encontra cada classe G , e;
- b) para cada elemento ω de Ω

$$\frac{|\text{classe de } F \text{ que contém } \omega|}{|\text{classe de } F \vee G \text{ que contém } \omega|} = \frac{|\text{classe de } F \wedge G \text{ contendo } \omega|}{|\text{classe de } G \text{ contendo } \omega|}.$$

Para o caso que F , G e $F \vee G$ são uniformes o teorema anterior implica que

$$\frac{k_F}{k_{F \vee G}} = \frac{k_{F \wedge G}}{k_G}.$$

Portanto, $F \wedge G$ também é uniforme e $k_F k_G = k_{F \vee G} k_{F \wedge G}$. Vale também que

$$R_F R_G(\alpha, \beta) = \sum_{\gamma \in \Omega} R_F(\alpha, \gamma) R_G(\gamma, \beta) = k_{F \wedge G} R_{F \vee G}(\alpha, \beta).$$

Quando se têm duas ou mais blocagens a interseção entre dois blocos tem propriedades particulares e, portanto, o pesquisador deve considerar o $F \wedge G$ e o $F \vee G$ como estruturas de blocagens no experimento. Desse modo, deve-se utilizar uma estrutura ortogonal em blocos de

tal forma que se F e $G \in \mathfrak{F}$, vale que $F \wedge G$ e $F \vee G \in \mathfrak{F}$. Note que as partições triviais E e U pertencem a \mathfrak{F} .

Como consequência do teorema 2.6.3 um delineamento com apenas uma blocagem só pode ser ortogonal se é equireplicado e os blocos contém todos os tratamentos. Considere T a partição tratamentos, ou seja, parcelas que receberam o mesmo tratamento. Para o caso de delineamentos com uma estrutura ortogonal em blocos \mathfrak{F} , como $P_{V_F}P_{V_T} = P_{V_T}P_{V_F} = P_{V_{F \vee T}}$, se $F \vee T = U$ então, como consequência do teorema 2.6.2, toda classe de F conterá todos os tratamentos e vale que

$$s_{ij} = c_{\Delta} p_i q_i = \frac{1}{|\Omega|} r_i k_F = \frac{1}{k_F n_F} r_i k_F = \frac{r_i}{n_F}.$$

Temos então um resultado análogo ao teorema 2.6.3.

Uma estrutura ortogonal em blocos é uma forma conveniente para distinguir as várias particularidades que afetam as parcelas de um experimento.

2.6.3 Estrutura ortogonal em blocos no contexto de esquemas de associação

Dada uma estrutura ortogonal em blocos $\{E, F, G, \dots, U\}$ em um conjunto Ω , vamos construir um esquema de associação compatível com a estrutura ortogonal, de modo que seja possível utilizar toda a teoria matricial da álgebra de Bose-Mesner para obter a análise da estrutura ortogonal utilizada no contexto da experimentação.

Definição 2.6.2. (Bailey, 2004, p. 152) Uma estrutura ortogonal em bloco em um conjunto Ω é um conjunto \mathfrak{F} de partições uniformes ortogonais aos pares em Ω que é fechada sob \wedge e \vee (em particular, \mathfrak{F} contém U e E).

A ortogonalidade entre as partições F e G é fácil de verificar. Sempre que $\{\alpha, \beta\}$ estiver contido em uma classe F e $\{\beta, \gamma\}$ estiver contido em uma classe G , deve haver algum elemento δ tal que $\{\alpha, \delta\}$ esteja contido em uma classe G e $\{\delta, \gamma\}$ esteja contido em uma classe F .

Teorema 2.6.4. (Bailey, 2004, p. 153) Seja \mathfrak{F} uma estrutura ortogonal em blocos em Ω . Para cada F em \mathfrak{F} definimos o subconjunto \mathfrak{C}_F de $\Omega \times \Omega$ por

$$(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_F \text{ se } F = \bigwedge \{G \in \mathfrak{F} : \alpha \text{ e } \beta \text{ pertencem a uma mesma classe de } G\}.$$

Então, $\{\mathfrak{C}_F : F \in \mathfrak{F}, \mathfrak{C}_F \neq \emptyset\}$ define um esquema de associação em Ω com valências dada por

$$a_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G)k_G.$$

Demonstração. Os conjuntos $\{\mathfrak{C}_F : F \in \mathfrak{F}, \mathfrak{C}_F \neq \emptyset\}$ definem uma partição em $\Omega \times \Omega$ pois \mathfrak{F} é fechado por \wedge e, portanto, todo par (α, β) pertence a algum \mathfrak{C}_F . Os conjuntos \mathfrak{C}_F são simétricos. Para a partição elementar E tem-se que

$$\mathfrak{C}_E = \{(\alpha, \alpha) : \alpha \in \Omega\} = \text{diagonal de } \Omega \times \Omega.$$

Observe que α e β estão em uma mesma classe F se, e somente se, existe $G \preceq F$ com $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_G$.

As matrizes de adjacência, A_i , desse esquema de associação, são indexadas pelas partições F e denotadas por A_F . Agora a matriz de relação de F , R_F , relaciona-se com as outras matrizes da forma

$$R_F = \sum_{G \preceq F} A_G = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \zeta(G, F)A_G.$$

Significa que a entrada da matriz R_F , $R_F(\alpha, \beta)$, é igual a exatamente a entrada da matriz de A_G , $A_G(\alpha, \beta)$, para alguma blocagem G mais fina que F . Utilizando a função de Moebius μ , que inverte a matriz ζ , é possível obter as matrizes de adjacência A_G (que são desconhecidas) como função das matrizes de relação R_F (que são conhecidas), ou seja,

$$A_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(G, F)R_G.$$

A valência a_F , que é a soma dos elementos de uma linha de A_F , é dada por

$$a_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(G, F)k_G.$$

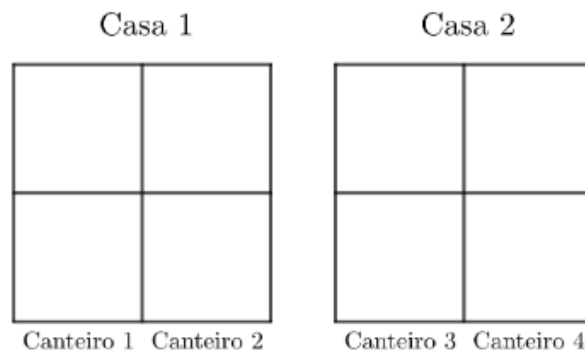
Como a álgebra de Bose-Mesner, \mathfrak{A} , é definida pelas matrizes A_F e como cada A_F é combinação das matrizes R_G , as partições são uniformes e definem projetores ortogonais P_{V_F} tais que $P_{V_F}P_{V_G} = P_{P_{V \vee G}}$. Sendo assim, \mathfrak{F} ser fechado por \vee e segue \mathfrak{A} é uma álgebra. Portanto, a partição \mathfrak{C}_F de $\Omega \times \Omega$ define um esquema de associação. \square

A ideia é que para qualquer par de elementos α e β de Ω , vamos tomar todas as partições G de \mathfrak{F} tal que α e β pertencem a uma mesma classe de G . Como \mathfrak{F} é fechado pela operação ínfimo \wedge , existe uma partição $F \in \mathfrak{F}$ que contém α e β em uma mesma classe.

O teorema 2.6.4 é essencial, pois relaciona duas construções fundamentais: a estrutura ortogonal em blocos (usual na Estatística) e os esquemas de associação (usual na Matemática abstrata).

Exemplo 2.6.6. Suponha uma estrutura ortogonal em blocos dada por duas casas de vegetação na qual cada casa possui dois canteiros e cada canteiro possui duas parcelas. Sejam então as partições F e G dadas por canteiros e casas de vegetação, respectivamente. Temos o croqui do experimento na figura 2.7.

Figura 2.7 – Croqui do exemplo 2.6.6.



Fonte: Da autora (2024).

As classes associadas são:

$$\mathfrak{C}_F = \{(\alpha, \beta) : \alpha \text{ e } \beta \text{ estão no mesmo canteiro}\},$$

$$\mathfrak{C}_G = \{(\alpha, \beta) : \alpha \text{ e } \beta \text{ estão na mesma casa de vegetação, porém, em canteiros diferentes}\},$$

$$\mathfrak{C}_U = \{(\alpha, \beta) : \alpha \text{ e } \beta \text{ estão em casas de vegetação diferentes e canteiros diferentes}\}.$$

Em termos de matrizes, ordenando de forma conveniente as 8 parcelas, temos as matrizes de adjacência $A_E = I_\Omega$, A_F , A_G e A_U . É possível obter as matrizes de relação pela recorrência

$$R_F = \sum_{G \preceq F} A_G = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \zeta(G, F) A_G \Rightarrow$$

$$A_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(G, F) R_G.$$

As matrizes ζ e μ são:

$$\zeta = \begin{pmatrix} & E & F & G & U \\ E & 1 & 1 & 1 & 1 \\ F & 0 & 1 & 1 & 1 \\ G & 0 & 0 & 1 & 1 \\ U & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \zeta^{-1} = \mu = \begin{pmatrix} & E & F & G & U \\ E & 1 & -1 & 0 & 0 \\ F & 0 & 1 & -1 & 0 \\ G & 0 & 0 & 1 & -1 \\ U & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

De onde vem que as matrizes de adjacência, usando as entradas de μ e somando de acordo com as colunas as matrizes de relação são:

$$A_E = R_E, \quad A_F = -R_E + R_F, \quad A_G = -R_F + R_G, \quad A_U = -R_G + R_U.$$

A grande vantagem dos esquemas de associação é que eles herdam as propriedades relativas a ordem parcial \mathfrak{F} . Isso permite um cálculo mais fácil do strata, em que se pode utilizar fórmulas de recorrência.

Teorema 2.6.5. (Bailey, 2004, p. 154). Se \mathfrak{F} é uma estrutura ortogonal em blocos em Ω . Para cada $F \in \mathfrak{F}$, seja

$$W_F = V_F \cap \left(\sum_{F \prec G} V_G \right)^\perp.$$

Então o strata do esquema de associação definido por F em \mathfrak{F} é dado pelos subespaços $W_F \neq \emptyset$.

Os projetores S_{W_F} são

$$S_{W_F} = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) P_{V_G},$$

com dimensões d_F dadas por

$$d_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) n_G.$$

Demonstração. Temos que

$$V_F = \bigoplus_{F \preceq G} W_G,$$

de onde segue que os W_F são ortogonais entre si e

$$P_{V_F} = \sum_{F \preceq G} S_{W_G} = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \zeta(F, G) S_{V_G}.$$

Utilizando a inversa de Moebius tem-se que

$$S_{W_F} = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) P_{V_G}.$$

Como as projeções P_{V_G} geram a álgebra \mathfrak{A} , os projetores S_{W_F} também estão nessa álgebra. Uma vez que todo projetor é idempotente e S_{W_F} é soma de projetores no stratum, ele também é idempotente. Se $F \neq G$, então $W_F \perp W_G$ e, portanto, $S_{W_F} S_{W_G} = 0$. Isto implica que nenhuma combinação linear de $\{S_{W_F}, F \in \mathfrak{F}\}$ projeta sobre algum subespaço próprio de W_G , para qualquer $G \in \mathfrak{F}$. Mas, $\mathfrak{A} = \text{span}\{S_{W_F}, F \in \mathfrak{F}\}$, e portanto os subespaços $W_F \neq \emptyset$ devem ser precisamente o strata. Tem-se também que

$$\begin{aligned} \text{traço}(S_{W_F}) &= \text{traço} \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) P_{V_G} \right) = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \text{traço}(P_{V_G}) \\ &= \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \dim(V_G) = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) n_G. \quad \square \end{aligned}$$

Podemos agora obter uma expressão mais simples para as matrizes C e D apresentadas na seção 2.2.2. Observe que

$$A_F = \sum_G \mu'(F, G) R_G = \sum_G \mu'(F, G) k_G P_{V_G} = \sum_G \mu'(F, G) k_G \sum_H \zeta(G, H) S_{W_H},$$

mas,

$$\sum_G \mu'(F, G) k_G \sum_H \zeta(G, H) S_{W_H}$$

é o produto de três matrizes $\mu' \text{diag}(k) \zeta$, portanto

$$C = \mu' \text{diag}(k) \zeta \text{ e } D = C^{-1} = \mu(\text{diag}(k))^{-1} \zeta'.$$

Tem-se que

$$a_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(G, F) k_G \Rightarrow \text{diag}(a) = \mu' \text{diag}(k) = \text{diag}(k) \mu \text{ e}$$

$$d_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) n_G \Rightarrow \text{diag}(d) = \mu \text{diag}(n).$$

Como visto no corolário 2.2.1 tem-se que

$$D = \frac{1}{n} \text{diag}(d) C' (\text{diag}(a))^{-1}$$

$$= \frac{1}{n} \underbrace{\mu \text{diag}(n)}_{\text{diag}(d)} \underbrace{\zeta' \text{diag}(k) \mu}_{C'} \underbrace{(\mu' \text{diag}(k))^{-1}}_{\text{diag}(a^{-1})}$$

$$= \frac{1}{n} \mu \text{diag}(n) \zeta' = \mu (\text{diag}(k))^{-1} \zeta',$$

pois $n_F k_F = n$ para todo $F \in \mathfrak{F}$.

Para os cálculos é adequado utilizar a recorrência que vem de

$$R_F = \sum_{G \succeq F} A_G = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \zeta(G, F) A_G$$

para encontrar as matrizes de adjacência e suas valências, assim

$$A_F = R_F - \sum_{G \prec F} A_G$$

$$a_F = k_F - \sum_{G \prec F} a_G.$$

A recorrência também fornece os prejetores nos stratum e seus graus de liberdade,

$$S_{W_F} = P_{V_F} - \sum_{G \prec F} S_{W_G}$$

$$d_F = n_F - \sum_{G \prec F} d_G.$$

Esta recorrência pode ser realizada percorrendo-se o diagrama de Hasse para a ordem parcial de \mathfrak{F} . Iniciamos na base do diagrama com A_F e a_F e no topo do diagrama com S_{W_F} e d_F .

2.6.4 Exemplos de estrutura ortogonal em blocos

A partir de agora vamos nos referir às partições como fatores, termo usualmente utilizado em Estatística Experimental. Partições em Θ serão denominadas fatores de tratamento, partições em Ω serão denominadas fatores de parcelas. Vale destacar que no diagrama de Hasse fatores de tratamento serão indicados com pontos abertos e fatores de parcela serão indicados com pontos fechados. As projeções V_i e W_j serão ambas indicadas por P_{V_i} e P_{W_j} .

O exemplo a seguir tem por finalidade verificar se os fatores de tratamento existentes no experimento formam uma estrutura ortogonal.

Exemplo 2.6.7. (Bailey, 2008, p. 185) **Medicamentos em diferentes estágios de desenvolvimento:** Uma empresa que desenvolve e fabrica produtos farmacêuticos deseja comparar seis tratamentos para uma determinada doença. O teste inicial usará voluntários saudáveis, simplesmente para medir a quantidade de certos produtos químicos liberados no sangue duas horas após os tratamentos serem administrados. Três tratamentos são três doses diferentes de uma formulação (denominada A) que está em desenvolvimento há algum tempo. Os outros três tratamentos são doses diferentes de uma nova formulação (denominada B) que ainda não foi testada. O principal objetivo do experimento é comparar as doses da formulação A; o objetivo secundário é comparar a nova formulação com a antiga; e a prioridade menos relevante é comparar as doses da nova formulação.

O objetivo principal no experimento deve ser a comparação das doses da formulação A. Deve-se usar replicação suficiente para esses três tratamentos. A empresa decide utilizar 12 voluntários para cada dose, utilizando assim 36 voluntários. No entanto, a empresa dispõe de recursos suficientes para utilizar 48 voluntários desse modo as três doses da formulação B serão atribuídas a quatro voluntários cada.

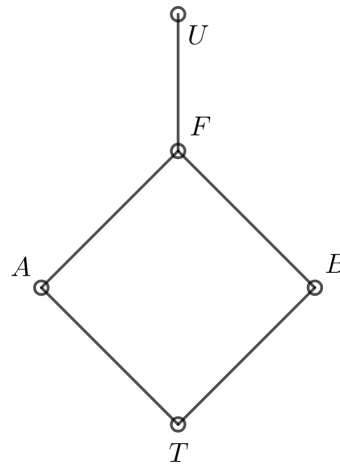
Como já dito, os tratamentos consistem em três doses da formulação A e três doses (não comparáveis com as três primeiras) de uma nova formulação B. A tabela 2.3 apresenta um fator F que distingue as duas formulações e os fatores A e B que são projetados para testar as diferenças entre as diferentes doses de cada formulação. Veja o diagrama de Hasse da figura 2.8.

Tabela 2.3 – Fatores de tratamento para exemplo 2.6.7.

Tratamento	Formulação antiga			Formulação nova		
	1	2	3	4	5	6
<i>F</i>	1	1	1	2	2	2
<i>A</i>	1	2	3	0	0	0
<i>B</i>	0	0	0	1	2	3

Fonte: Bailey (2008, p. 185).

Figura 2.8 – Fatores de tratamento para o exemplo 2.6.7.



Fonte: Adaptado de Bailey (2008)

Como mencionado, não se deseja comparar as drogas *A* e *B*, mas sim os níveis de cada. Como apresentado na tabela 2.3 temos o fator *F* com dois níveis, o fator *A* com três níveis e o fator *B* com três níveis. Note que as partições *A* e *B* são uniformes. Note também que o número de tratamentos é igual ao número de parcelas.

Veja que $A \vee B = F$ e $A \wedge B = E$, sendo $E = T$. Uma vez que $T \preceq A$ e $T \preceq B$ temos que $P_{V_T}P_{V_A} = P_{V_A}P_{V_T}$ e $P_{V_T}P_{V_B} = P_{V_B}P_{V_T}$. Como $E = T$ a matriz de projeção em V_T é dada pela matriz identidade $I_{(6 \times 6)}$. Logo, $P_{V_T}P_{V_A} = IP_{V_A} = P_{V_A}$ e $P_{V_T}P_{V_B} = IP_{V_B} = P_{V_B}$.

Vamos verificar agora se E, A, B, F e U formam uma estrutura ortogonal em blocos. Para tanto, basta verificar que as partições A e B são ortogonais, isto é, $V_A \cap V_F^\perp \perp V_B \cap V_F^\perp$. Vejamos:

$$V_F = V_{A \vee B} = \{(a, a, a, b, b, b) \mid a, b \in \mathbb{R}\}$$

$$V_A = \{(a, b, c, d, d, d) \mid a, b, c, d \in \mathbb{R}\}$$

$$V_B = \{(\alpha, \alpha, \alpha, \beta, \gamma, \delta) \mid \alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}\}.$$

Agora note que

$$V_F^\perp = \{(x, y, z, w, l, s) \mid x, y, z, w, l, s \in \mathbb{R}\},$$

tal que

$$\begin{aligned} \langle (a, a, a, b, b, b), (x, y, z, w, l, s) \rangle = 0 &\Leftrightarrow \\ a(x + y + z) + b(w + l + s) = 0, \forall a, b &\Leftrightarrow \\ x + y + z = 0 \text{ e } w + l + s = 0. \end{aligned}$$

Temos também que

$$\begin{aligned} V_A \cap V_F^\perp &= \{(a, b, c, d, d, d) \mid a + b + c = 0\} \Rightarrow 3d = 0 \\ V_B \cap V_F^\perp &= \{(\alpha, \alpha, \alpha, \beta, \gamma, \delta) \mid \beta + \gamma + \delta = 0\} \Rightarrow 3\alpha = 0, \end{aligned}$$

tais que

$$\langle (a, b, c, d, d, d), (\alpha, \alpha, \alpha, \beta, \gamma, \delta) \rangle = \alpha(a + b + c) + d(\beta + \gamma + \delta) = \alpha \cdot 0 + d \cdot 0 = 0.$$

Portanto, $V_A \cap V_F^\perp \perp V_B \cap V_F^\perp$ e as partições são ortogonais. Note também que

$$V_A \cap V_B = \{(\alpha, \alpha, \alpha, d, d, d) \mid \alpha, d \in \mathbb{R}\} = V_F$$

e portanto $\dim(V_F) = 2$.

Agora relacionamos a ordem parcial, ou seja, as relações de inclusão, os diagramas de Hasse e as matrizes de projeção com as matrizes diagonais (que serão vistas na seção 4.2). Se $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ é uma base que diagonaliza todas as matrizes de projeção, uma permutação dos vetores dessa base é também uma base em que todas as matrizes de projeção são diagonais. Dessa forma, é possível, através de uma sequência de permutações obter uma base definida para o subespaço V_F que satisfaça a ordem parcial de \mathfrak{F} .

Dado um fator F em um experimento, é possível obter a diagonalização simultânea das matrizes de projeção nos subespaços V_F e W_F , isto é, P_{V_F} e P_{W_F} . No diagrama de Hasse, para cada fator, vamos representar o tamanho das classes, k_F , e os graus de liberdade, d_F . A

partir do diagrama de Hasse obtemos as matrizes de projeção P_{V_F} e P_{W_F} . Vejamos o exemplo a seguir, em que são apresentadas essas matrizes de projeção na forma diagonal para cada fator do experimento.

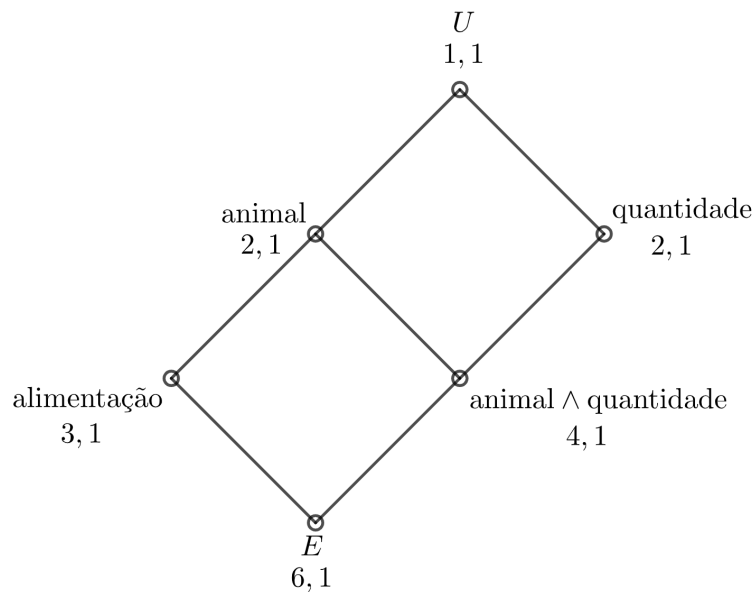
Exemplo 2.6.8. (Bailey, 2008, p. 185) **Ratos:** Seis dietas diferentes foram fornecidas a 60 ratos, dez ratos por dieta. Os ratos foram pesados no início e no final do experimento e seu ganho de peso foi registrado. As seis dietas consistiam em três fontes de proteína, cada uma em uma quantidade alta ou baixa. As fontes de proteína foram carne bovina, suína e cereais. Portanto, existe um fator de tratamento que distingue os animais entre as duas fontes de alimentação animal e o cereal. Os fatores de tratamento são exibidos na tabela 2.4 e o diagrama de Hasse na figura 2.9.

Tabela 2.4 – Fatores de tratamento para o exemplo 2.6.8.

Tratamento	1	2	3	4	5	6
alimentação	bovina		porco		cereal	
quantidade	baixo	alto	baixo	alto	baixo	alto
proteína animal	1	1	1	1	2	2
animal \wedge quantidade	1	2	1	2	3	4

Fonte: Bailey (2008, p. 186).

Figura 2.9 – Fatores de tratamento para o exemplo 2.6.8.



Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Temos $\mathfrak{F} = \{E, \text{alimentação}, \text{animal} \wedge \text{quantidade}, \text{animal}, \text{quantidade}, U\}$. Na figura 2.9 estão representados o número de classes e os graus de liberdade para cada fator. Para simplificar,

vamos considerar que existem apenas seis ratos. Assim, as matrizes de projeção (que seriam de tamanho 60×60) são reduzidas para matrizes 6×6 . Essas matrizes de projeção são:

$$P_{V_U} = P_{V_0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = P_{W_U}$$

$$P_{V_{\text{animal}}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_{W_{\text{animal}}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P_{V_{\text{quantidade}}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_{W_{\text{quantidade}}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P_{V_{\text{alimentação}}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_{W_{\text{alimentação}}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P_{V_{\text{animal} \wedge \text{quantidade}}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_{W_{\text{animal} \wedge \text{quantidade}}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P_{V_F} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_{W_F} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P_{V_A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_{W_A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P_{V_B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad P_{W_B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$P_{V_E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad P_{W_E} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

2.6.5 *Crossing e nesting* em estrutura ortogonal em blocos

Dois métodos para obter delineamentos mais complexos a partir de delineamentos simples são *crossing* e *nesting*, apresentados na seção 2.3. Esses métodos podem ser descritos do ponto de vista dos esquemas de associação e das estruturas ortogonais em blocos.

Primeiramente deve-se ressaltar a identificação

$$(\Omega_1 \times \Omega_1) \times (\Omega_2 \times \Omega_2) \approx (\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2)$$

$$((\alpha_1, \beta_1), (\alpha_2, \beta_2)) \implies ((\alpha_1, \alpha_2), (\beta_1, \beta_2)).$$

Se F é uma partição em Ω_1 e G é uma partição em Ω_2 , como na seção 2.3, define-se a partição $F \times G$ de $(\Omega_1 \times \Omega_2) \times (\Omega_1 \times \Omega_2)$ da forma

$$F \times G = \{((\alpha_1, \alpha_2), (\beta_1, \beta_2)) : (\alpha_1, \beta_1) \in F \text{ e } (\alpha_2, \beta_2) \in G\}.$$

Lema 2.6.4. (Bailey, 2004, p. 163) Sejam F e G partições em Ω_1 e Ω_2 , respectivamente. Então $F \times G$ é uma partição em $\Omega_1 \times \Omega_2$. Além disso, $R_{F \times G} = R_F \otimes R_G$ e $P_{F \times G} = P_F \otimes P_G$. O número de classes de $F \times G$ é $n_F n_G$. Se F e G são uniformes então $F \times G$ é uniforme.

É possível estender essa construção para estruturas ortogonais em blocos. Sejam \mathfrak{F}_1 e \mathfrak{F}_2 estruturas ortogonais em blocos em Ω_1 e Ω_2 respectivamente, o *crossing* para essas estruturas é dado por

$$\mathfrak{F}_1 \times \mathfrak{F}_2 = \{F_1 \times F_2, F_1 \in \mathfrak{F}_1 \text{ e } F_2 \in \mathfrak{F}_2\}.$$

Teorema 2.6.6. (Bailey, 2004, p. 165) Para $i = 1, 2$. Seja \mathfrak{F}_i uma estrutura ortogonal em blocos em Ω_i . Então $\mathfrak{F}_1 \times \mathfrak{F}_2$ é uma estrutura ortogonal em blocos em $\Omega_1 \times \Omega_2$.

As partições em $\mathfrak{F}_1 \times \mathfrak{F}_2$ admitem uma ordem parcial, obtida a partir das ordens parciais em \mathfrak{F}_1 e \mathfrak{F}_2 da forma

$$F_1 \times F_2 \preceq G_1 \times G_2 \Leftrightarrow F_1 \preceq G_1 \text{ e } F_2 \preceq G_2.$$

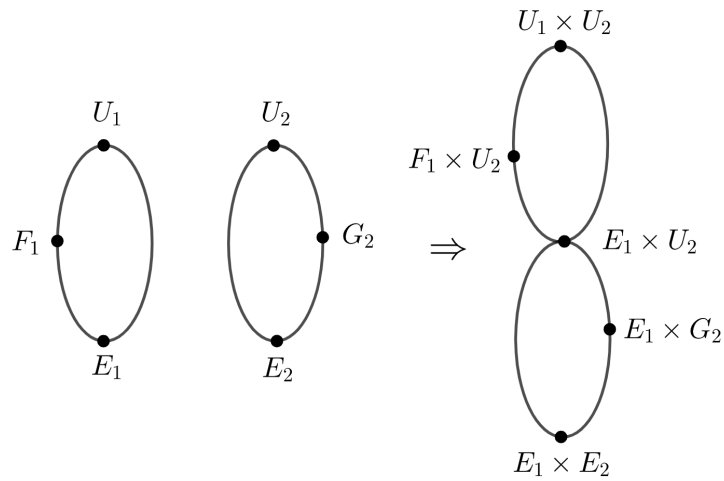
Também é possível estender o método *nesting* para estruturas ortogonais em blocos. As classes de $\mathfrak{F}_1/\mathfrak{F}_2$ são formadas por partições de $\Omega_1 \times \Omega_2$ da forma

$$\begin{aligned} & \{(\alpha, \beta), \alpha \text{ está em uma mesma classe de } F_1 \text{ e } \beta \text{ é qualquer elemento de } \Omega_2\} \\ & \{(\alpha, \beta), \alpha \text{ é qualquer elemento de } \Omega_1 \text{ e } \beta \text{ está em uma mesma classe de } F_2\}. \end{aligned}$$

Teorema 2.6.7. (Bailey, 2004, p. 166) Para $t = 1, 2$. Seja \mathfrak{F}_i uma estrutura ortogonal em blocos em Ω_i . Então $\mathfrak{F}_1/\mathfrak{F}_2$ é uma estrutura ortogonal em blocos em $\Omega_1 \times \Omega_2$.

A ordem parcial em $\mathfrak{F}_1/\mathfrak{F}_2$ é definida de forma que todas as partições de \mathfrak{F}_2 precedem as partições de \mathfrak{F}_1 e a partição E_1 em \mathfrak{F}_1 é identificada com a partição universal U_2 em \mathfrak{F}_2 (veja figura 2.11).

Figura 2.11 – Ordem parcial em $\mathfrak{F}_1/\mathfrak{F}_2$.



Fonte: Adaptado de Bailey (2004).

Bailey (2004) destaca que as estruturas que ocorrem com mais frequência nas aplicações experimentais são aquelas formadas a partir de esquemas de associação triviais dados por *crossing* e *nesting*. Para essas, as mais interessantes são derivadas da combinação de três esquemas de associação.

Exemplo 2.6.10. O caso mais simples ocorre quando se tem apenas a partição elementar E e a partição universal U . Nesse caso, $\mathfrak{F} = \{E, U\}$. Supondo $\Omega_1 = \{a, b\}$, $\Omega_2 = \{\alpha, \beta, \gamma\}$, $\mathfrak{F}_1 = \{E_1, U_1\}$, $\mathfrak{F}_2 = \{E_2, U_2\}$, então $\mathfrak{F}_1 \times \mathfrak{F}_2 = \{E_1 \times E_2, E_1 \times U_2, U_1 \times E_2, U_1 \times U_2\}$. Todas as partições podem ser visualizadas na figura 2.12. Note que o delineamento resultante é um $\underline{\underline{2}} \times \underline{\underline{3}}$, no qual $B_1 = E_1 \times U_2$ (blocos colunas) e $B_2 = U_1 \times E_2$ (blocos linhas).

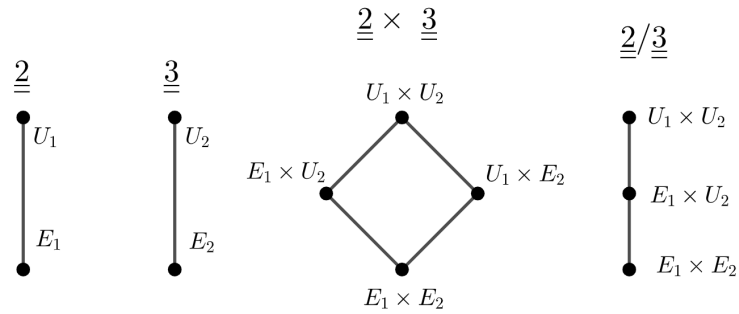
Figura 2.12 – Partições de $\mathfrak{F}_1 \times \mathfrak{F}_2$.

γ	(a, γ)	(b, γ)
β	(a, β)	(b, β)
α	(a, α)	(b, α)
	a	b

Fonte: Da autora (2024).

Agora $\mathfrak{F}_1/\mathfrak{F}_2 = \{E_1 \times E_2, U_1 \times U_2, E_1 \times U_2\}$ resulta em um delineamento $\underline{\underline{2}}/\underline{\underline{3}}$ (dois blocos de tamanho três). Os diagramas de Hasse para para ambos os casos são mostrados na figura 2.13.

Figura 2.13 – Diagramas de Hasse exemplo 2.6.10.



Fonte: Da autora (2024).

Exemplo 2.6.11. (Bailey, 2004, p. 181) Um delineamento com nove tratamentos em uma estrutura ortogonal em blocos $(\underline{\underline{2}}/\underline{\underline{3}}) \times (\underline{\underline{2}}/\underline{\underline{3}})$ é apresentado na figura 2.14. Se $\Omega_1 = \{a, b\}$ e $\Omega_2 = \{\alpha, \beta, \gamma\}$ tem-se que $(\underline{\underline{2}}/\underline{\underline{3}}) \times (\underline{\underline{2}}/\underline{\underline{3}})$ é um esquema de associação em

$$\Omega_1 \times \Omega_2 = \{(a, \alpha), (a, \beta), (a, \gamma), (b, \alpha), (b, \beta), (b, \gamma)\},$$

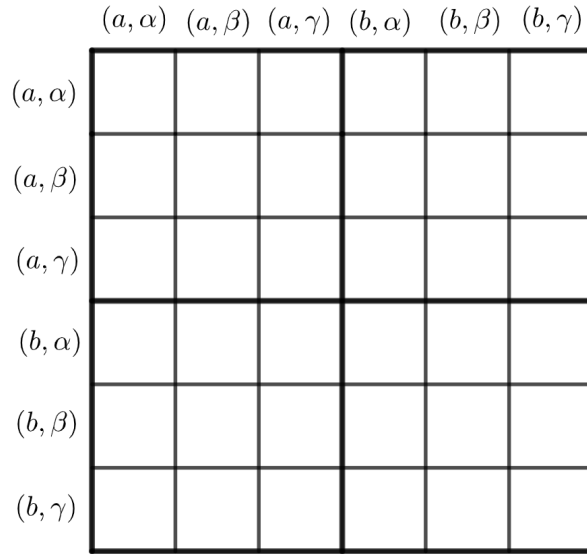
veja figura 2.15.

Figura 2.14 – Delineamento $(\underline{\underline{2}}/\underline{\underline{3}}) \times (\underline{\underline{2}}/\underline{\underline{3}})$.

1	2	3	5	6	4
5	6	4	7	8	9
9	7	8	3	1	2
2	8	5	6	9	3
6	3	9	1	4	7
7	4	1	8	2	5

Fonte: Bailey (2004, p. 181).

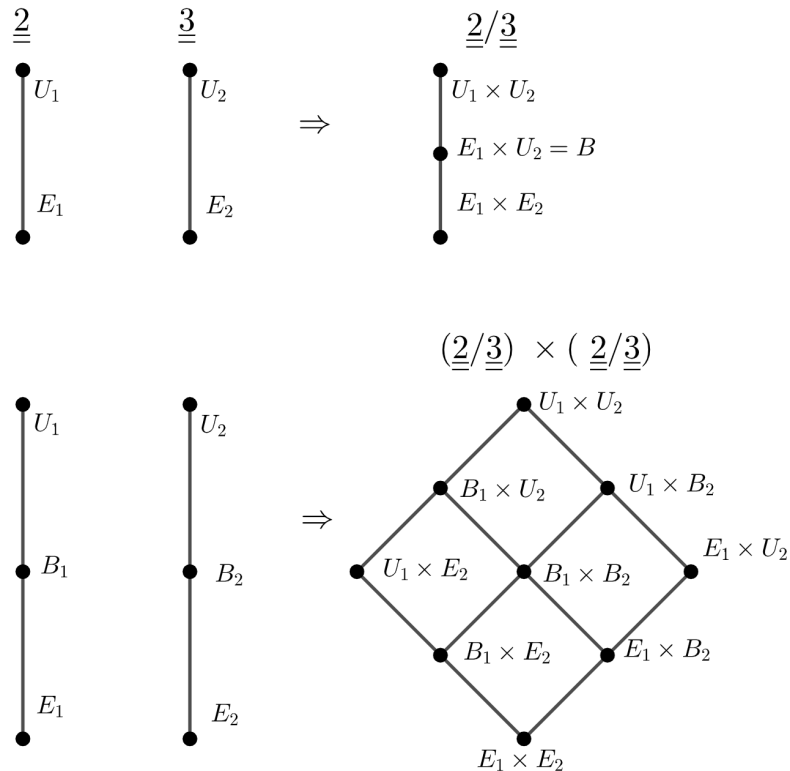
Figura 2.15 – $\Omega_1 \times \Omega_2$ para $(\underline{2}/\underline{3}) \times (\underline{2}/\underline{3})$.



Fonte: Da autora (2024).

Combinando os teoremas 2.3.1 e 2.3.2 temos que $(\underline{2}/\underline{3})$ possui $1 + 1 = 2$ classes. Portanto, $(\underline{2}/\underline{3}) \times (\underline{2}/\underline{3})$ possui $2 \cdot 2 + 2 + 2 = 8$ classes. O diagrama de Hasse segue da ordem parcial em $\mathfrak{F} \times \mathfrak{F}$ (veja figura 2.16). Temos ao todo nove fatores de parcela, contando a partição elementar.

Figura 2.16 – Diagramas de Hasse para fatores de parcela de $(\underline{2}/\underline{3}) \times (\underline{2}/\underline{3})$.



Fonte: Da autora (2024).

Exemplo 2.6.12. (Bailey, 2004, p. 76) Doze pessoas testam dois novos aspiradores por semana, durante quatro semanas, teremos $(\underline{4} \times \underline{12})/\underline{2}$, figura 2.17.

Figura 2.17 – Delineamento $(\underline{4} \times \underline{12})/\underline{2}$.

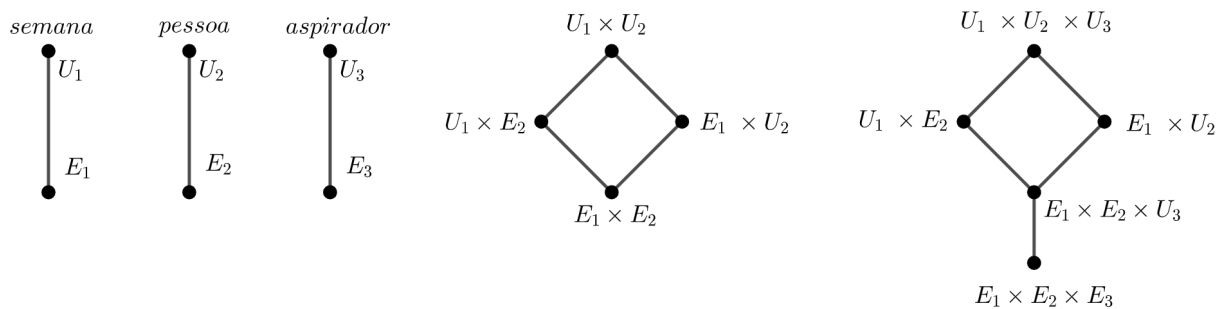
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**
2	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**
3	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**
4	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**	**

Fonte: Bailey (2004, p. 76).

As quantidades de classes nas parcelas são:

- $\underline{4}$, a classe não trivial corresponde às semanas;
- $\underline{12}$, a classe não trivial corresponde as pessoas;
- $\underline{2}$, a classe não trivial corresponde aos testes;
- $\underline{4} \times \underline{12}$, 3 classes;
- $(\underline{4} \times \underline{12})/\underline{2}$, 4 classes.

Figura 2.18 – Diagramas de Hasse para $(\underline{4} \times \underline{12})/\underline{2}$.



Fonte: Da autora (2024).

Renomeando as classes:

- $U_1 \times U_2 \times U_3 = U$, mesma semana, mesma pessoas, mesmo teste;
- $U_1 \times E_2 = S$, mesma pessoa, semana diferente;
- $E_1 \times U_2 = P$, mesma semana, pessoa diferente;
- $E_1 \times E_2 \times U_3 = T$, mesma semana, mesma pessoa, teste diferente;
- $E_1 \times E_2 \times E_3 = E$, pessoa diferente, semana diferente.

2.7 Delineamento para conjuntos estruturados

Até este ponto consideramos uma maneira adequada de particionar o conjunto das parcelas em uma estrutura ortogonal em blocos, de forma que estas formem blocos mais uniformes possíveis.

Lembre-se da função de delineamento definida na seção 2.4.1 que diz que se Θ é o conjunto dos tratamentos, a matriz X é definida a partir da função $\psi : \Omega \rightarrow \Theta$, tal que

$$X(\omega, \theta) = \begin{cases} 1, & \text{se } \psi(\omega) = \theta \\ 0, & \text{se } \psi(\omega) \neq \theta. \end{cases}$$

Portanto, um delineamento é dado por um conjunto de parcelas Ω , a organização das parcelas em uma estrutura de blocos \mathfrak{F} , um conjunto de tratamento Θ e a alocação dos tratamentos pela função ψ , isto é, quádrupla $(\Omega, \mathfrak{F}, \Theta, \psi)$.

O conjunto de tratamentos $\Theta = \{\theta, \eta, \dots\}$ também será considerado como $\Theta = \{1, 2, \dots, t\}$ e cada tratamento pode ser referido de forma indistinta por θ ou i . A função de delineamento ψ define uma partição em Ω , cujas classes são dadas por $\psi^{-1}(\theta) = \{\alpha \in \Omega, \psi(\alpha) = \theta\}$. Note que $|\psi^{-1}(\theta)| = r_\theta$ é o número de parcelas nas quais foi aplicado o tratamento θ (r_i no caso de se referir ao tratamento i), ou seja, a replicação de θ .

Na seção 2.4.2 definiu-se a matriz de concorrência para blocos. Considerando uma estrutura ortogonal em blocos \mathfrak{F} definimos também a matriz de concorrência para cada $F \in \mathfrak{F}$ nos tratamentos (θ, η) , como segue:

$$\Lambda_F(\theta, \eta) = |\{(\alpha, \beta) \in \Omega \times \Omega : \alpha \text{ e } \beta \text{ estão em uma mesma classe de } F, \psi(\alpha) = \theta, \psi(\beta) = \eta\}|.$$

As entradas da matriz Λ_F contam quantas vezes o par de tratamento (θ, η) ocorreram juntos nas classes de F .

Proposição 2.7.1. (Bailey, 2004, p. 171) $\Lambda_F = X' R_F X$.

Demonstração. Note que

$$(R_F)_{n \times n} (X)_{n \times t}(\alpha, \theta) = \sum_{\delta \in \Omega} R_F(\alpha, \delta) X(\delta, \theta).$$

Sempre que (α, δ) estiver na mesma classe, isto é, no mesmo bloco, $R_F(\alpha, \delta) = 1$ e se a parcela δ recebeu o tratamento θ , então $X(\delta, \theta) = 1$. Logo, a soma corresponde ao número de parcelas

que ocorrem juntas na mesma classe que α e que receberam o tratamento θ . Agora note que

$$(X)'_{t \times n} (R_F X)_{n \times t} (\theta, \eta) = \sum_{\alpha \in \Omega} X'(\theta, \alpha) R_F X(\alpha, \eta),$$

em que $X'(\theta, \alpha) = 1$ se a parcela α recebeu o tratamento θ e $R_F X(\alpha, \eta)$ corresponde ao número de parcelas no mesmo bloco que α e que receberam o tratamento η . Logo, a soma conta o número de pares de parcelas em um mesmo bloco que receberam os tratamentos θ e η e é portanto $\Lambda_F(\theta, \eta)$. \square

Para os casos triviais temos:

a) $\Lambda_E = X' R_E X = X' I_\Omega X = \text{diag}(r)$;

b) $\Lambda_U(\theta, \eta) = r_\theta r_\eta$.

Segue a demonstração do item b).

Demonstração.

$$\begin{aligned} \Lambda_U(\theta, \eta) &= (X' J_\Omega X)(\theta, \eta) \\ &= \sum_{\alpha \in \Omega} X'(\theta, \alpha) (J_\Omega X)(\alpha, \eta) \\ (J_\Omega X)(\alpha, \eta) &= \sum_{\gamma \in \Omega} J_\Omega(\alpha, \gamma) X(\gamma, \eta). \end{aligned}$$

Como $X(\gamma, \eta) = 1$ se γ recebe o tratamento η e $J_\Omega(\alpha, \gamma) = 1$ implica que $\sum_{\gamma \in \Omega} J_\Omega(\alpha, \gamma) X(\gamma, \eta)$ conta quantas parcelas receberam o tratamento η , isto é, r_η . Logo,

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha \in \Omega} X'(\theta, \alpha) J_\Omega X(\alpha, \eta) &= \sum_{\alpha \in \Omega} X'(\theta, \alpha) r_\eta \\ &= r_\eta \sum_{\alpha \in \Omega} X'(\theta, \alpha). \end{aligned}$$

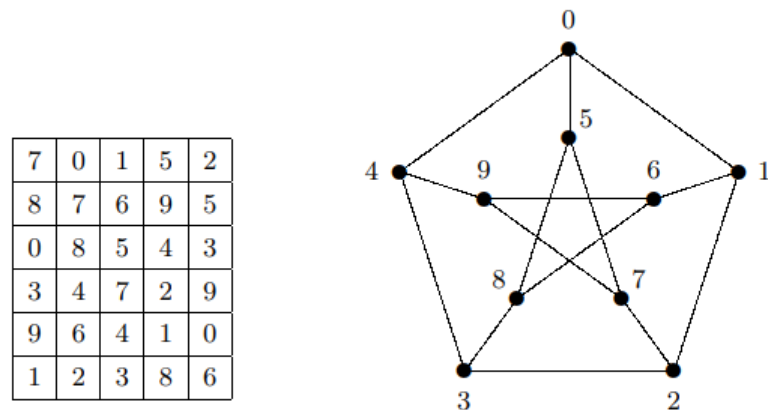
Como $X'(\theta, \alpha) = 1$ quando a parcela α recebe o tratamento θ , portanto, a soma é $r_\eta r_\theta$. \square

O caso mais utilizado na prática ocorre quando tem-se apenas uma estrutura de blocos, isto é, $\mathfrak{F} = \{E, B, U\}$. Como já mencionado no texto, temos os delineamentos em blocos completos quando cada classe de B contém todos os tratamentos, ou seja, todos os tratamentos ocorrem no mesmo bloco. E temos também o caso em que nem todos os tratamentos ocorrem no mesmo bloco. Nesse último caso tem-se o delineamento em blocos incompletos.

Alocar os tratamentos às parcelas após estas estarem agrupadas pelas estruturas em blocos é um problema combinatório. O número de possibilidades, mesmo no caso de poucos tratamentos e poucas parcelas, é enorme. Além disso, como o objetivo é analisar o efeito dos tratamentos, têm-se várias restrições, algumas por razões estatísticas, outras por razões econômicas ou temporais. Que os tratamentos tenham replicações iguais, que pares de tratamentos ocorram em um mesmo número de blocos, e outras situações onde existam simetrias são restrições usuais. Como são enfrentados esses problemas combinatórios? Nos textos básicos, Bailey (2004, 2008), são utilizados quadrados latinos mutuamente ortogonais, aritmética modular, grafos, além de grupos abelianos. Com exceção do último, os outros são abordados neste trabalho.

Exemplo 2.7.1. (Bailey, 2004, p. 172) Um delineamento com $r = 3$ na estrutura $\underline{6} \times \underline{5}$ (delineamento linha coluna). Tem-se dois sistemas de blocos, as linhas e as colunas. O conjunto de tratamentos $\{0, 2, \dots, 9\}$ é organizado utilizando o grafo de Petersen (figura 2.19).

Figura 2.19 – Delineamento linha e coluna e grafo de Petersen.



Fonte: Bailey (2004, p. 172).

Observe que para cada bloco linha tem-se dois vizinhos para cada tratamento no grafo e outros dois tratamentos não vizinhos. Nos blocos coluna para cada tratamento tem-se dois vizinhos no grafo e três não vizinhos.

2.7.1 Delineamentos parcialmente balanceados

Um bom delineamento certamente apresenta uma série de simetrias. Essas simetrias facilitam a análise e nos permitem inferências mais eficazes. Por esta razão, utilizamos experimentos equireplicados. Além disso, os tratamentos devem ser distribuídos entre os blocos de maneira uniforme.

Uma classe importante de delineamentos são os delineamentos parcialmente balanceados, termo utilizado quando se tem apenas uma estrutura de bloco, $\mathfrak{F} = \{E, B, U\}$. Para vários tipos de blocagens o termo utilizado é parcialmente balanceado no sentido geral. Entretanto, para simplificar, vamos expressar o termo parcialmente balanceado no sentido geral apenas como parcialmente balanceado.

De maneira geral, vamos considerar que Θ também possui um esquema de associação, além do esquema de associação em Ω . Como afirma Bailey (2004), buscamos delineamentos onde todas as matrizes de concorrência das partições $F \in \mathfrak{F}$ são combinações lineares das matrizes de adjacência de um esquema de associação nos tratamentos. Nesse sentido, precisaremos de uma notação para esquemas de associação em Θ e em Ω . A notação utilizada nesta seção está apresentada no quadro 2.2.

Quadro 2.2 – Notação para esquemas de associação nas parcelas e nos tratamentos.

	parcelas	tratamentos
conjunto	Ω	Θ
elementos	α, β, \dots	θ, η, \dots
tamanho do conjunto	n_E	t
classes associadas	\mathfrak{C}_F^Ω para $F \in \mathfrak{F}$	\mathfrak{C}_i^Θ para $i \in \kappa$
matrizes de associação	A_F para $F \in \mathfrak{F}$	A_i para $i \in \kappa$
valências	não usa	a_i para $i \in \kappa$
matrizes de relação	R_F para $F \in \mathfrak{F}$	não utilizado
partição dos subespaços	V_F para $F \in \mathfrak{F}$	não utilizado
projetores nas partições	P_F para $F \in \mathfrak{F}$	não utilizado
projetores nos stratum	Q_F para $F \in \mathfrak{F}$	S_e para $e \in \varepsilon$
stratum	W_F^Ω para $F \in \mathfrak{F}$	W_e^Θ para $e \in \varepsilon$
dimensões	d_F^Ω para $F \in \mathfrak{F}$	d_e^Θ para $e \in \varepsilon$
álgebra de Bose-Mesner	não utilizado	\mathfrak{A}
tabela de caracteres	não utilizado	C

Fonte: Adaptado de Bailey (2004).

Definição 2.7.1. (Bailey, 2004, p. 176) Seja \mathfrak{Q} um esquema de associação em Θ com classes associadas $\{\mathfrak{C}_0^\Theta, \mathfrak{C}_1^\Theta, \dots, \mathfrak{C}_s^\Theta\}$, seja \mathfrak{F} uma estruturas ortogonal em blocos em Ω e seja ψ a função de Ω em Θ com matrizes Λ_F para F em \mathfrak{F} . A quádrupla $(\Omega, \mathfrak{F}, \Theta, \psi)$ é um delineamento parcialmente balanceado em relação a \mathfrak{Q} se Λ_F pertence a álgebra de Bose-Mesner \mathfrak{A} de \mathfrak{Q} para todo F em \mathfrak{F} , isto é, existem inteiros λ_{Fi} para F em \mathfrak{F} e i em κ tais que

$$\Lambda_F = \sum_{i \in \kappa} \lambda_{Fi} A_i,$$

para todo F em \mathfrak{F} .

Vejamos o significado da definição anterior.

Se $(\theta, \eta) \in \mathfrak{C}_j^\Theta$ como $A_j(\theta, \eta) = 1$ e $A_i(\theta, \eta) = 0$ se $j \neq i$ e

$$\Lambda_F(\theta, \eta) = \sum_{i \in \kappa} \lambda_{Fi} A_i(\theta, \eta) = \lambda_{Fj},$$

$A_F(\theta, \eta)$ é o número de blocos de F em que θ e η ocorrem juntos.

Essa definição implica que delineamentos parcialmente balanceados possuem igual replicação, pois para a partição elementar $E \in \mathfrak{F}$ tem-se

$$\begin{aligned} \Lambda_E &= \lambda_{E0} I_\Theta = \lambda_{E0} A_0 = r_\theta A_0, \\ r_\theta &= \Lambda_E(\alpha, \alpha) = \lambda_{E0} A_0(\alpha, \alpha) = \lambda_{E0}. \end{aligned}$$

Uma relação que envolve a partição trivial U é

$$\Lambda_U = X' R_U X = X' J_\Omega X = r^2 J_\Theta.$$

A soma das linhas de A_F satisfaz

$$\sum_{\beta \in \Omega} A_F(\alpha, \beta) = \sum_{\beta \in \Omega} \sum_{i \in \kappa} \lambda_{Fi} A_i(\alpha, \beta).$$

Note que $\sum_{\beta \in \Omega} A_F(\alpha, \beta)$ conta quantas vezes α aparece com qualquer β em um mesmo F -bloco. Como α está com k_F outros elementos em um bloco (contando o próprio α) e como ele é repetido r vezes temos

$$rk_F = \sum_{\beta \in \Omega} \sum_{i \in \kappa} \lambda_{Fi} A_i(\alpha, \beta) = \sum_{i \in \kappa} \sum_{\beta \in \Omega} \lambda_{Fi} A_i(\alpha, \beta) = \sum_{i \in \kappa} \lambda_{Fi} a_i.$$

2.7.2 Modelos de efeitos fixos e modelos de efeitos aleatórios

Para um delineamento experimental $(\Omega, \mathfrak{F}, \Theta, \psi)$ as condições particulares das várias blocagens em \mathfrak{F} certamente afetam as respostas da variável aleatória Y . É necessário então um modelo probabilístico para estudar o comportamento de Y . Dois modelos são amplamente considerados para Y quando \mathfrak{F} é uma estrutura ortogonal em blocos.

Modelo de efeito fixo

Uma hipótese que simplifica o modelo é considerar que as blocagens afetam apenas a média de Y . Dessa forma, toda a aleatoriedade fica concentrada na variabilidade do vetor de erros experimentais ξ . Assim, para uma parcela ω , a esperança da resposta Y_ω depende apenas do tratamento aplicado nessa parcela e de todos os blocos nos quais este tratamento também ocorre, sendo assim

$$E(Y_\omega) = \tau_{\psi(\omega)} + \sum_{\substack{F \in \mathfrak{F}, \\ F \neq E}} h_F(\omega).$$

De maneira geral, se $\tau \in \mathbb{R}^\Theta$ é o vetor de efeitos dos tratamentos, tem-se que o vetor de respostas, Y , é dado por

$$Y = X\tau + \sum_{\substack{F \in \mathfrak{F}, \\ F \neq E}} h_F + \xi$$

em que $E(\xi) = 0$ e $\text{Var}(Y) = \sigma^2 I_\Omega$. Este é o modelo considerado na seção 2.4.3 para $\mathfrak{F} = \{E, B, U\}$.

Note que $X\tau$ é um vetor desconhecido em \mathbb{R}^Ω com coordenadas iguais nas parcelas que receberam o mesmo tratamento, $X\tau \in V_T$. Já h_F é um vetor desconhecido em \mathbb{R}^Ω com coordenadas iguais nas parcelas que estão em um mesmo bloco de F , isto é, $h_F \in V_F$.

Como o vetor $\vec{1}$ está em V_T e está em V_F para todo blocagem F , temos que

$$E(Y) = X\tau - \vec{1} + \sum_{\substack{F \in \mathfrak{F}, \\ F \neq E}} h_F + \vec{1},$$

e não é possível estimar $X\tau$ e h_F individualmente. Uma maneira de estimar τ é projetar o vetor Y no subespaço perpendicular a todo V_F , ou seja,

$$\left(\bigoplus_{\substack{F \in \mathfrak{F}, \\ F \neq E}} V_F \right)^\perp.$$

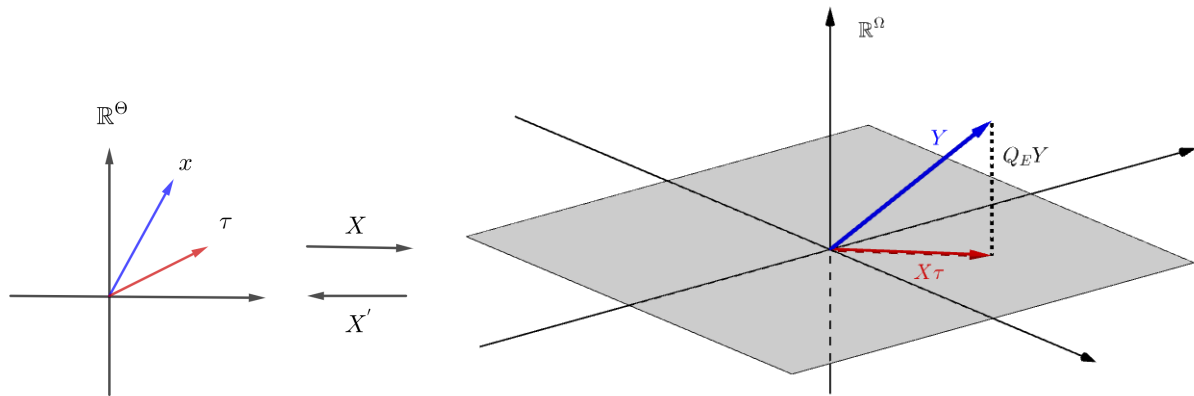
Este é o subespaço do stratum, W_E^Ω , denominado também subespaço do resíduo. Tomando o projetor Q_E em W_E^Ω temos que

$$E(Q_E Y) = Q_E E(Y) = Q_E \left(X\tau + \sum_{\substack{F \in \mathfrak{F}, \\ F \neq E}} h_F \right) = Q_E X\tau.$$

Portanto, a esperança do vetor aleatório $Q_E Y$ não é afetada pelas blocagens. Segue então que é possível obter estimativas relativas a τ , desde que estas estejam relacionadas a $Q_E X\tau$. Se x é um vetor em \mathbb{R}^Θ , então $x'\tau = \sum_{i=1}^t x_i \tau_i$ apresenta informações sobre o vetor τ .

É possível estimar combinações lineares de $x'\tau$. Um caso de interesse é quando x é, por exemplo, da forma $x = (1, -1, 0, \dots, 0)$. Neste caso, $x'\tau = (\tau_1 - \tau_2)$ e este número compara os tratamentos 1 e 2. De forma geral, se $x' = (x_1, x_2, \dots, x_t)$ é tal que $\sum_{i=1}^t x_i = 0$, temos que x é dito um contraste. Em razão de ser possível comparar tratamentos, por exemplo, saber se um novo remédio é melhor que um remédio já existente, é importante obter bons estimadores de contrastes. De fato, grande parte da teoria dos delineamentos experimentais é exatamente para obter bons estimadores de $x'\tau$ com baixa variabilidade. A ideia para obter tais estimadores pode ser representada graficamente, como apresentado na figura 2.20.

Figura 2.20 – Representação geométrica de delineamentos.



Fonte: Da autora (2024).

Seja $L_E = X'Q_E X$ a matriz de informação para o stratum W_E^Ω , pelo teorema 2.4.1 obtemos um estimador não viesado de $x'\tau$. Se existe $z \in \mathbb{R}^\Theta$ tal que $L_E z = x$, então, $z'X'Q_E Y$ é o estimador não viesado de $x'\tau$ e sua esperança e variância são dadas respectivamente por

$$E(z'X'Q_E Y) = z'X'Q_E E(Y) = z'X'Q_E X\tau = z'L_E\tau = x'\tau,$$

$$\begin{aligned}\text{Var}(z'X'Q_EY) &= (z'X'Q_E)\text{Var}(Y)(z'X'Q_E)' = z'X'Q_EQ'_EXz\sigma^2 \\ &= z'X'Q_E^2Xz\sigma^2 = z'X'Q_EXz\sigma^2 = z'L_Ez\sigma^2.\end{aligned}$$

É possível provar também que este estimador é o de menor variância entre todos os estimadores lineares não viesados de $x'\tau$. Observe que se não existe z tal que $L_Ez = x$, então, $x'\tau$ não é estimável. Utilizando a inversa de Moore-Penrose L_E^- , na qual vale que $L_EL_E^-L_E = L_E$, temos que

$$z'L_Ez = z'L_EL_E^-L_Ez = z'L'_EL_E^-L_Ez = (L_Ez)'L_E^-(L_Ez) = x'L_E^-x,$$

e portanto a variância pode ser expressa em termos do vetor x .

Como visto no lema 2.4.1, item ii), $\Lambda_F = X'R_FX$, agora considerando a matriz de relação para qualquer bloco F temos que a matriz de informação L_E codifica as propriedades do delineamento, pois,

$$\begin{aligned}L_E &= X'Q_EX = X'\left(\sum_{F \in \mathfrak{F}} \mu(E, F)P_{V_F}\right)X = \sum_{F \in \mathfrak{F}} \mu(E, F)X'P_{V_F}X \\ &= \sum_{F \in \mathfrak{F}} \mu(E, F)X'\left(\frac{1}{k_F}R_F\right)X = \sum_{F \in \mathfrak{F}} \mu(E, F)\frac{1}{k_F}(X'R_FX) \\ &= \sum_{F \in \mathfrak{F}} \mu(E, F)\frac{1}{k_F}\Lambda_F.\end{aligned}$$

Se o delineamento é parcialmente balanceado em relação a um esquema de associação Ω em Θ , então como Λ_F pertence à álgebra de Bose-Mesner deste esquema, o mesmo vale para a matriz de informação L_E .

Um delineamento que tem apenas uma estrutura de bloco e que cada bloco contém todos os tratamentos (bloco completo) é um bom delineamento. Nesse caso, $\mathfrak{F} = \{E, B, U\}$ e o strata é dado pelos subespaços $W_U^\Omega = V_0 = \text{span}(\vec{1})$, W_B^Ω e W_E^Ω . A matriz de informação para W_E^Θ é

$$\begin{aligned}L_E &= X'Q_EX = X'(I_\Omega - P_{V_B})X = X'\left(I_\Omega - \frac{1}{k_B}R_B\right)X \\ &= X'X - \frac{1}{k_B}X'R_BX = rI_\Theta - \frac{1}{k_B}\Lambda_B = n_BI_\Theta - \frac{1}{t}\Lambda_B \\ &= n_BI_\Theta - \frac{n_B}{t}J_\Theta = n_B\left(I_\Theta - \frac{1}{t}J_\Theta\right).\end{aligned}$$

Note que a partição B possui n_B blocos e cada bloco contém exatamente uma parcela para cada tratamento e, portanto, a replicação é $r = n_B$. Dessa forma, o estimador de $z'X'Q_EY$ tem variância

$$z' L_E z \sigma^2 = z' \left(n_B (I_\Theta - \frac{1}{t} J_\Theta) \right) z \sigma^2,$$

com

$$\begin{aligned} L_E z &= \left(n_B (I_\Theta - \frac{1}{t} J_\Theta) \right) z = x \Rightarrow \\ n_B z - \frac{n_B}{t} J_\Theta z &= x \Rightarrow \\ n_B (z - \bar{z}) &= x. \end{aligned}$$

Como x é um contraste, $z = \frac{x}{n_B}$ é solução. Portanto a variância para o bloco completo é

$$(z' L_E z) \sigma^2 = z' x \sigma^2 = \frac{1}{n_B} x' x \sigma^2 = \frac{1}{r} x' x \sigma^2.$$

Já a variância do contraste do delineamento em blocos incompletos é

$$(z' L_E z) \sigma^2 = x' L_E^- x \sigma^2.$$

Vimos na seção 2.4.5 que se a variância de um delineamento em blocos incompletos é dada por σ^2 e a variância de um delineamento em blocos completos é dada por σ_{CBD}^2 .

Uma boa medida de comparação é dividir as variâncias relativas a blocos completo e incompleto

$$\frac{\frac{x'x}{r} \sigma_{CBD}^2}{x' L_E^- x \sigma^2} = \frac{x'x}{rx' L_E^- x} \frac{\sigma_{CBD}^2}{\sigma^2},$$

em que o termo $\frac{x'x}{rx' L_E^- x}$ é fator de eficiência para o contraste x do delineamento em estudo.

Modelo de efeito aleatório

De acordo com Bailey (2004) o modelo de efeitos fixos geralmente é apropriado para experimentos em estruturas ortogonais em blocos razoavelmente simples. No entanto, pode não ser apropriado para casos mais complicados.

Nesse sentido, outro modelo que pode ser considerado é o de efeitos aleatórios. Esse modelo considera que o bloco (ou partição) F pode não afetar a esperança de Y , mais sim a covariância. Desse modo as suposições são

$$E(Y) = X\tau,$$

em que τ é um vetor em \mathbb{R}^Θ e existem números reais desconhecidos γ_F para F em \mathfrak{F} tais que

$$\text{Cov}(Y_\alpha, Y_\beta) = \gamma_F \text{ se } (\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_F^\Omega,$$

ou seja,

$$\text{Cov}(Y) = \sum_{F \in \mathfrak{F}} \gamma_F A_F,$$

em que A_F é a matriz de adjacência de \mathfrak{C}_F^Ω . Como $\text{span}\{A_F, F \in \mathfrak{F}\} = \text{span}\{Q_F, F \in \mathfrak{F}\}$, é possível expressar $\text{Cov}(Y)$ como

$$\text{Cov}(Y) = \sum_{F \in \mathfrak{F}} \zeta_F Q_F,$$

em que ζ_F é a variância no stratum W_F^Ω .

Se o modelo aleatório é considerado para a estrutura ortogonal com apenas uma blocagem $\mathfrak{F} = \{E, B, U\}$, o esquema de associação definido por \mathfrak{F} é dado por:

$$\mathfrak{C}_E^\Omega = \{(\alpha, \alpha) : \alpha \in \Omega\},$$

$$\mathfrak{C}_B^\Omega = \{(\alpha, \beta) : \alpha \text{ e } \beta \text{ estão em um mesmo bloco}\},$$

$$\mathfrak{C}_U^\Omega = \{(\alpha, \beta) : \alpha \text{ e } \beta \text{ estão em blocos diferentes}\}.$$

Nesse caso,

$$\text{Cov}(Y) = \sum_{F \in \mathfrak{F}} \gamma_F A_F = \gamma_E A_E + \gamma_B A_B + \gamma_U A_U = \gamma_E I_\Omega + \gamma_B A_B + \gamma_U A_U.$$

Para simplificar a exposição, vamos supor três blocos com três parcelas cada. Enumerando as parcelas de forma que as parcelas do primeiro, segundo e terceiro blocos resultem em $\text{Cov}(Y)$

da seguinte forma

$$\text{Cov}(Y) = \begin{pmatrix} \gamma_E & \gamma_B & \gamma_B & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U \\ \gamma_B & \gamma_E & \gamma_B & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U \\ \gamma_B & \gamma_B & \gamma_E & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U \\ \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_E & \gamma_B & \gamma_B & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U \\ \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_B & \gamma_E & \gamma_B & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U \\ \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_E & \gamma_B & \gamma_B \\ \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_B & \gamma_E & \gamma_B \\ \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_U & \gamma_B & \gamma_B & \gamma_E \end{pmatrix}.$$

Agora vamos utilizar a inversa de Moebius, ou seja,

$$\zeta = \begin{pmatrix} & E & B & U \\ E & 1 & 1 & 1 \\ B & 0 & 1 & 1 \\ U & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ e } \mu = \begin{pmatrix} & E & B & U \\ E & 1 & -1 & 0 \\ B & 0 & 1 & -1 \\ U & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Lembre-se que

$$A_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(G, F) R_G,$$

de onde vem que $A_E = R_E$, $A_B = -R_E + R_B$ e $A_U = -R_B + R_U$. Logo, temos que

$$\begin{aligned} \text{Cov}(Y) &= \gamma_E I_\Omega + \gamma_B (R_B - I_\Omega) + \gamma_U (R_U - R_B) \\ &= (\gamma_E - \gamma_B) I_\Omega + (\gamma_B - \gamma_U) R_B + \gamma_U R_U, \end{aligned}$$

e, portanto,

$$\zeta_E = \gamma_E - \gamma_B, \quad \zeta_B = \gamma_B - \gamma_U \text{ e } \zeta_U = \gamma_U.$$

Utilizando L_B , a variância do estimador de $z' X' Q_B Y$ é $z' L_B z \zeta_B = z' L_B z (\gamma_B - \gamma_U)$. Note que γ_E é a variância de cada parcela Y_ω . Já γ_B é a covariância entre parcelas do mesmo bloco, e γ_U é a covariância entre parcelas que estão em blocos distintos.

Voltamos ao problema de estimar $x' \tau$. Ao contrário do caso de efeitos fixos, em que o vetor Y era projetado no stratum W_E^Ω que é ortogonal a todos os espaços W_F^Ω , $F \neq E$. Agora projetamos Y em W_F^Ω para obter a variância dada pela partição F . Considere então $Q_F Y$, projetando o vetor de dados no stratum W_F^Ω para F em \mathfrak{F} tem-se

$$\begin{aligned} E(Q_F Y) &= Q_F X \tau \quad \text{e} \\ \text{Cov}(Q_F Y) &= Q_F \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \zeta_G Q_G \right) Q_F = \zeta_F Q_F, \end{aligned}$$

pois $Q_F Q_G = 0$ se $F \neq G$ e Q_G^2 .

Novamente vamos definir $L_F = X' Q_F X$ como a matriz de informação para o stratum W_F^Ω . Se existe $z \in \mathbb{R}^\Theta$ tal que $L_F z = x$, então $z' X' Q_F Y$ é um estimador não viesado de $x' \tau$ pois

$$E(z' X' Q_F Y) = z' X' Q_F E(Y) = z' X' Q_F X \tau = z' L_F \tau = (L_F z)' \tau = x' \tau.$$

Assim, a variância do estimador é dada por

$$\begin{aligned} \text{Var}(z' X' Q_F Y) &= (z' X' Q_F) \text{Cov}(Y) (z' X' Q_F)' = z' X' Q_F \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \zeta_G Q_G \right) (z' X' Q_F)' \\ &= z' X' Q_F \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \zeta_G Q_G \right) Q_F X z = z' X' \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} Q_F \zeta_G Q_G Q_F \right) X z \\ &= z' X' (\zeta_F Q_F^2) X z = z' X' (\zeta_F Q_F) X z \\ &= \zeta_F z' (X' Q_F X) z = \zeta_F (z' L_F z). \end{aligned}$$

Logo, ζ_F faz o papel de σ^2 no modelo de efeito fixo e por esta razão ζ_F é denominado variância do stratum W_F^Ω . Prova-se que este estimador é o de menor variância entre os estimadores lineares não viesados em $Q_F Y$. Se $x \notin \text{Im}(L_F)$ dizemos que o stratum W_F^Ω não contém informações sobre $x' \tau$.

Assim, combinações lineares dos efeitos de tratamentos $x' \tau$, para modelos de efeitos fixos, podem ser estimadas por $z' X' Q_E Y$ com variância $z' L_E z \sigma^2$, em que $L_E z = x$. Já para modelos de efeitos aleatórios, as combinações lineares de $x' \tau$ podem ser estimadas por $z' X' Q_F Y$, com variância $z' L_F z \zeta_F$ com ζ_F a variância no stratum W_F^Ω . Note que para cada $F \in \mathfrak{F}$ teremos um estimador diferente, sempre que F contiver informações sobre $x' \tau$, isto é, se $x \in \text{Im}(L_F)$.

Novamente para F em \mathfrak{F} tem-se

$$\begin{aligned} L_F &= X' Q_F X = X' \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) P_G \right) X = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) X' P_G X \\ &= \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) X' \left(\frac{1}{k_G} R_G \right) X = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \frac{1}{k_G} \Lambda_G. \end{aligned}$$

Se o delineamento é parcialmente balanceado em relação a um esquema de associação Ω em Θ , então as matrizes de informação L_F pertencem à álgebra de Bose-Mesner de Ω . Portanto, são simultaneamente diagonalizáveis e tem-se que os stratum de tratamentos W_e^Θ , para e em ε , são subespaços comuns de todas as matrizes de informação. Em outras palavras, para todo e em ε , todo vetor não nulo no stratum de tratamento W_e^Θ é um contraste básico em todo stratum de parcelas W_F^Ω .

Para e em ε , seja $r\varepsilon_{Fe}$ autovalores de L_F em W_e^Θ , de modo que se $x \in W_e^\Theta$ então $L_F x = r\varepsilon_{Fe} x$. Se $r\varepsilon_{Fe} = 0$ não é possível estimar $x' \tau$ para $Q_F Y$. Entretanto, se $r\varepsilon_{Fe} \neq 0$ tem-se que $\frac{1}{r\varepsilon_{Fe}} x' X Q_F Y$ é um estimador linear não viesado de $x' \tau$ com variância $\frac{x' x}{r\varepsilon_{Fe}}$. Desse modo, o fator de eficiência canônico para x no stratum W_F^Ω é

$$\varepsilon_{Fe} = \frac{\frac{x' x}{r}}{\frac{x' x}{r\varepsilon_{Fe}}}.$$

Teorema 2.7.1. (Bailey, 2004, p. 187) Se $e \in \varepsilon$ então $\sum_{F \in \mathfrak{F}} \varepsilon_{Fe} = 1$.

Demonstração. Para $x \in W_e^\Theta$ e $x \neq 0$, temos que

$$\begin{aligned} \left(\sum_{F \in \mathfrak{F}} \varepsilon_{Fe} \right) x &= \sum_{F \in \mathfrak{F}} (\varepsilon_{Fe} x) = \frac{1}{r} \sum_{F \in \mathfrak{F}} (L_F x) = \frac{1}{r} \left(\sum_{F \in \mathfrak{F}} L_F \right) x = \frac{1}{r} \sum_{F \in \mathfrak{F}} (X' Q_F X) x \\ &= \frac{1}{r} X' \left(\sum_{F \in \mathfrak{F}} Q_F \right) X x = \frac{1}{r} X' I_\Omega X x = \frac{1}{r} r I_\Theta x = x. \quad \square \end{aligned}$$

Para $e \in \varepsilon$ se $x \in W_e^\Theta$, seja $\mathfrak{F}_e = \{F \in \mathfrak{F} : \varepsilon_{Fe} \neq 0\}$. O contraste $x' \tau$ pode ser estimado em cada stratum W_F^Ω , $F \in \mathfrak{F}_e$, por $x' X' Q_F Y$. É razoável então tomar uma combinação linear de todos esses estimadores, da forma

$$Z = \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F \frac{1}{r\varepsilon_{Fe}} (x' X' Q_F Y).$$

Então,

$$E(Z) = \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F E\left(\frac{1}{r\mathcal{E}_{F_e}}(x'X'Q_F Y)\right) = \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F x' \tau = \left(\sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F\right) x' \tau,$$

e para que se tenha um estimador não viesado é, necessário que $\sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F = 1$. Agora temos que

$$\begin{aligned} \text{Var}(Z) &= \text{Var}\left(\sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F \frac{1}{r\mathcal{E}_{F_e}}(x'X'Q_F Y)\right) \\ &= \left(\sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F \frac{1}{r\mathcal{E}_{F_e}} x'X'Q_F\right) \left(\sum_{H \in \mathfrak{F}} \zeta_H Q_H\right) \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}_e} c_G \frac{1}{r\mathcal{E}_{G_e}} Q_G X x\right) \\ &= \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} \frac{c_F^2}{(r\mathcal{E}_{F_e})^2} x' L_F X \zeta_F = \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F^2 \frac{\zeta_F}{r\mathcal{E}_{F_e}} x' x. \end{aligned}$$

Como estamos interessados em um estimador da variância mínima, temos um problema de minimização com restrição, que pode ser resolvido pelo multiplicador de Lagrange.

O mínimo ocorre quando c_F é proporcional a

$$\begin{aligned} c_F &= a \frac{r\mathcal{E}_{F_e}}{\zeta_F} \Rightarrow \\ \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} c_F &= a r \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} \frac{r\mathcal{E}_{F_e}}{\zeta_F} \Rightarrow \\ a &= \frac{1}{r \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} \frac{r\mathcal{E}_{F_e}}{\zeta_F}}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} \frac{\mathcal{E}_{F_e}}{\zeta_F \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} \frac{\mathcal{E}_{F_e}}{\zeta_F}} x' X' Q_F Y \\ &= \frac{1}{\sum_{F \in \mathfrak{F}_e} \frac{\mathcal{E}_{F_e}}{\zeta_F}} \sum_{F \in \mathfrak{F}_e} \frac{\mathcal{E}_{F_e}}{\zeta_F} x' X' Q_F Y. \end{aligned}$$

Como ζ_F é uma grandeza populacional, este é substituído pelo seu estimador $\hat{\zeta}_F$ para F em \mathfrak{F}_e .

Lema 2.7.1. (Bailey, 2004, p. 96) Para todo $F \in \mathfrak{F}$:

- a) a dimensão da imagem de $Q_F X S_e$ é igual a dimensão de W_e^\ominus ;
- b) $\text{Im}(Q_F X S_e) \perp \text{Im}(Q_F X S_l)$ para $e \neq l$;

c) a matriz de projeção ortogonal sobre $\text{Im}(Q_F X S_e)$ é igual a

$$\frac{1}{r\mathcal{E}_{F_e}} Q_F X S_e X' Q_F;$$

d) a matriz de projeção ortogonal sobre $V_B^\perp \cap \text{Im}(X)^\perp$ é

$$Q_F - \sum_{e \in \mathcal{E}} \frac{1}{r\mathcal{E}_{F_e}} Q_F X S_e X' Q_F$$

e a dimensão desse subespaço é igual a

$$d_F^* = \dim(V_B^\perp) - \sum_{e \in \mathcal{E}} \dim(W_e^{(\Theta)}).$$

Agora temos um estimador de ζ_F .

Proposição 2.7.2. (Bailey, 2004, p. 194) Seja $d_F^* = d_F^\Omega - \sum_{e \in \mathcal{E}_e} d_e^\Theta$. Se $d_F^* \neq 0$ então

$$\frac{1}{d_F^*} \left(\langle Q_F Y, Q_F Y \rangle - \sum_{e \in \mathcal{E}} \frac{1}{r\mathcal{E}_{F_e}} \langle S_e X' Q_F Y, S_e X' Q_F Y \rangle \right).$$

é um estimador não viesado para ζ_F .

Sobre estimabilidade de contrastes tem-se que um delineamento é dito conexo se, $\ker(L_E) = \text{span}(\vec{1})$. Portanto, para os delineamentos conexos como L_E é simétrica, temos que $\langle L_E w, \vec{1} \rangle = \langle w, L_E \vec{1} \rangle = \langle w, \vec{0} \rangle = 0$, o que implica que imagem L_E é igual ao subespaço $(W_0^\Theta)^\perp$. Logo, para todo contraste $x \in (W_0^\Theta)^\perp$ existe $z \in (W_0^\Theta)^\perp$ tal que $L_E z = x$. Assim, para delineamentos conexos qualquer contraste é estimável.

2.7.3 Delineamentos ortogonais parcialmente balanceados

Para um delineamento parcialmente balanceado $(\Omega, \mathfrak{F}, \Theta, \psi)$ tem-se que

$$\Lambda_F = \sum_{i \in \mathcal{K}} \lambda_{Fi} A_i,$$

em que $\{A_i, i = 0, \dots, s\}$ são matrizes de associação para um esquema de associação em Θ .

Para o modelo de efeito fixo, se Q_E é a projeção em W_E^Ω de \mathbb{R}^Ω , então a matriz de informação é $L_E = X' Q_E X$. Temos que $x' \tau$ é estimado por $z' X' Q_E Y$, com variância $z' L_E z \sigma^2$, em que $L_E z = x$.

Para o modelo de efeito aleatório, se Q_F é a projeção em W_F^Ω com $F \in \mathfrak{F}$, então a matriz de informação é $L_F = X'Q_F X$. Nesse caso, $x'\tau$ é estimado por $z'X'Q_F Y$, com variância $z'L_F z \zeta_F$, em que ζ_F é a variância no stratum W_F^Ω .

Se o delineamento é parcialmente balanceado, as matrizes Λ_F pertencem à álgebra de Bose- Mesner de Ω e, portanto, todas as matrizes de informação L_F são simultaneamente diagonalizáveis, isto é, existe uma base $\{x_1, x_2, \dots, x_t\}$ de \mathbb{R}^Θ tal que $L_F x_i = \lambda_F x_i$, para todo $F \in \mathfrak{F}$. Além disso, $\{x_1, x_2, \dots, x_t\}$ é uma base adaptada ao strata, ou seja, todo vetor x_i pertence a algum stratum W_e^Θ .

Como $L_F = X'Q_F X$ temos que

$$\sum_{F \in \mathfrak{F}} L_F = \sum_{F \in \mathfrak{F}} X'Q_F X = X' \left(\sum_{F \in \mathfrak{F}} Q_F \right) X.$$

Mas somar todos os projetores Q_F nos dá a identidade

$$X'I_\Theta X = X'X = rI_\Theta.$$

Portanto,

$$\sum_{F \in \mathfrak{F}} \frac{1}{r} L_F = I_\Theta.$$

Considerando as matrizes L_F diagonais com entradas $r\varepsilon_{F_e}$ temos uma nova demonstração do resultado do teorema 2.7.1

$$\sum_{e \in \mathcal{K}} \varepsilon_{F_e} = 1.$$

Como todas as matrizes L_F , com $F \in \mathfrak{F}$ estão na álgebra, então elas podem ser simultaneamente diagonalizáveis. É possível então utilizar o algoritmo que será apresentado na seção 4.2. Assim, para L_F, L_G e L_H , por exemplo, primeiramente diagonalize L_F , em seguida aplique em L_G e por fim em L_H .

Para utilizar o algoritmo temos que ter L_F na forma $L_F = X'Q_F X$, em que é necessária a expressão de Q_F . Não podemos utilizar o algoritmo para os Q_F separadamente, pois perderíamos o controle das bases envolvidas. Contudo, as matrizes Q_F podem ser obtidas explicitamente por recorrência. Para tanto é necessário saber apenas qual é o esquema de associação nas parcelas

para obter essas Q_F . Uma vez que o esquema de associação nos tratamentos afeta apenas o fato de as matrizes L_F comutarem.

Ao aplicar o algoritmo, a matriz L_F deve ter soma linha r , pois como demonstrado $\sum_{e \in \mathcal{E}} \varepsilon_{F_e} = 1$. Já os autovalores, isto é, as entradas das matrizes L_F na forma diagonal satisfazem $\sum_{e \in \mathcal{E}} r \varepsilon_{F_e} = r$.

Lema 2.7.2. (Bailey, 2004, p. 196) Seja X a matriz de delineamento para um delineamento com replicação r e seja $L = X'QX$, em que Q é qualquer projeção ortogonal em $\mathbb{R}^{\Omega \times \Omega}$. Então XX' comuta com Q se, e somente se, todos os autovalores de $\frac{1}{r}L$ são $\{0, 1\}$.

Demonstração. (\implies) Temos que

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{r}L\right)^2 &= \left(\frac{1}{r}X'QX\right)^2 = \frac{1}{r^2}(X'QX)(X'QX) \\ &= \frac{1}{r^2}X'Q(XX')QX = \frac{1}{r^2}X'QQ(XX')X \\ &= \frac{1}{r^2}X'QX(X'X) = \frac{1}{r^2}X'QX(rI_{\Theta}) \\ &= \frac{1}{r}X'QX = \frac{1}{r}L. \end{aligned}$$

Portanto, a comutatividade de L com XX' implica que $\frac{1}{r}L$ é um projetor e é ortogonal, pois $\frac{1}{r}L$ é simétrico. Como todo projetor ortogonal é diagonalizável os autovalores são 0 e 1.

(\impliedby) Note que $\frac{1}{r}L$ é um operador simétrico e portanto diagonalizável. Como por hipótese os autovalores são 0 e 1, então, em uma base de autovetores $\frac{1}{r}L$ pode ser expressa por uma matriz da forma

$$\left(\begin{array}{c|c} I & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right)$$

e portanto $\frac{1}{r}L$ é um projetor ortogonal. Temos também que para todo $x, y \in \mathbb{R}^{\Theta}$

$$\begin{aligned} \langle Xx, Xy \rangle &= \langle x, X'Xy \rangle = \langle x, ry \rangle = r \langle x, y \rangle = \langle QXx, QXy \rangle \\ &= \langle x, X'QQXy \rangle = \langle x, X'QXy \rangle = \langle x, Ly \rangle, \end{aligned}$$

note que $r \langle x, y \rangle = \langle QXx, QXy \rangle$ pois Q é ortogonal. Para todo $y \in \ker(L)$ temos que

$$\langle QXy, QXy \rangle = \langle y, Ly \rangle = \langle y, 0 \rangle \Rightarrow QXy = 0.$$

Para y autovetor de $\frac{1}{r}L$ relativo ao autovalor 1 temos que

$$\langle QXy, QXy \rangle = \langle y, Ly \rangle = \langle y, ry \rangle = \langle y, X'Xy \rangle = \langle Xy, Xy \rangle.$$

Isto é,

$$\|QXy\|^2 = \|Xy\|^2 \Rightarrow QXy = Xy,$$

e como Q é um projetor ortogonal só preserva comprimento se $Qz = z$ e portanto $QXy = Xy$.

Para $z' = (z_1, z_2)$ com z_1 autovetor e $z_2 \in \text{Ker}(\frac{1}{r}L)$ temos que

$$QX(z) = QX(z_1 + z_2) = QXz_1 + QXz_2 = QXz_1 = Xz_1 = X \frac{1}{r}Lz_1 = \frac{1}{r}XL(z).$$

Portanto,

$$\begin{aligned} QX &= \frac{1}{r}XL \Rightarrow \\ QXX' &= \frac{1}{r}XLX' \Rightarrow \\ QXX' &\text{ é simétrico } \Rightarrow \\ (QXX')' &= QXX' \Rightarrow \\ XX'Q &= QXX'. \quad \square \end{aligned}$$

Como $\sum_{F \in \mathfrak{F}} \varepsilon_{F_e} = 1$, temos que $\varepsilon_{F_e} = 1$ apenas para um valor e zero para os demais valores. Segue então que dado um vetor canônico x , ou seja, x um vetor em algum stratum, existe apenas uma blocagem $F \in \mathfrak{F}$ tal que $\frac{1}{r}L_F x = x$ e $\frac{1}{r}L_G x = 0$, com $G \neq F$. Desse modo, a variância do estimador de $x' \tau$, se o modelo aleatório é considerado, é estimada apenas na blocagem F . Logo, para um determinado contraste a variância depende apenas de uma das blocagens.

Assim, em um delineamento parcialmente balanceado para uma estrutura ortogonal todo fator de eficiência canônico é igual a 0 ou 1.

2.7.4 Delineamentos ortogonais balanceados

Se $(\Omega, \mathfrak{F}, \Theta, \psi)$ é um delineamento em uma estrutura ortogonal em blocos parcialmente balanceada, em relação ao esquema de associação \underline{t} em Θ , o delineamento é dito balanceado.

O esquema de associação \underline{t} possui como matrizes da álgebra de Bose-Mesner I_Θ e $J_\Theta - I_\Theta$. Portanto, para cada $F \in \mathfrak{F}$, existem números inteiros λ_{F0} e λ_{F1} tais que

$$\Lambda_F = \lambda_{F0}I + \lambda_{F1}(J_\Theta - I_\Theta).$$

Como

$$\Lambda_F(\theta_1, \theta_2) = |\{(\omega_1, \omega_2), \psi(\omega_1) = \theta_1 \text{ e } \psi(\omega_2) = \theta_2 \text{ com } \omega_1 \text{ e } \omega_2 \text{ em uma mesma classe de } F\}|,$$

para nosso exemplo tem-se

$$\Lambda_E = \lambda_{E0}I_{z_\Theta} + \lambda_{E1}(J_\Theta - I_\Theta),$$

o que implica que $\lambda_{E0} = r$ e $\lambda_{E1} = 1$, em que r é o número de replicação de qualquer tratamento, sendo assim o delineamento é equireplicado. Logo,

$$\sum_{\theta_2 \in \Theta} \Lambda_F(\theta_1, \theta_2) = rk_F,$$

somando as linhas obtemos

$$\sum_{\theta_2 \in \Theta} (\lambda_{F0}I_\Theta + \lambda_{F1}(J_\Theta - I_\Theta))(\theta_1, \theta_2) = \lambda_{F0} + \lambda_{F1}(t - 1)$$

e tem-se que

$$\lambda_{F0} + \lambda_{F1}(t - 1) = rk_F \Rightarrow (t - 1)\lambda_{F1} = rk_F - \lambda_{F0}.$$

Agora é possível expressar as matrizes Λ_F em termos das projeções no strata do esquema de associação \underline{t} , isto é, $S_0 = \frac{1}{t}J_\Theta$ e $S_1 = I_\Theta - \frac{1}{t}J_\Theta$. De onde vem que

$$\begin{aligned}
\Lambda_F &= \lambda_{F0}I_\Theta + \lambda_{F1}(J_\Theta - I_\Theta) \\
&= (\lambda_{F0} - \lambda_{F1})I_\Theta + \lambda_{F1}J_\Theta \\
&= (\lambda_{F0} - \lambda_{F1})\left(I_\Theta - \frac{1}{t}J_\Theta\right) + (\lambda_{F0} - \lambda_{F1})\frac{1}{t}J_\Theta + \lambda_{F1}J_\Theta \\
&= (\lambda_{F0} - \lambda_{F1})S_1 + (\lambda_{F0} - \lambda_{F1} + t\lambda_{F1})\frac{1}{t}J_\Theta \\
&= (\lambda_{F0} - \lambda_{F1})S_1 + (\lambda_{F0} + (t-1)\lambda_{F1})\frac{1}{t}J_\Theta \\
&= (\lambda_{F0} - \lambda_{F1})S_1 + (\lambda_{F0} + rk_F - \lambda_{F0})S_0 \\
&= (\lambda_{F0} - \lambda_{F1})S_1 + rk_FS_0.
\end{aligned}$$

Vamos agora relacionar as matrizes de informação L_F com as matrizes Λ_G e em seguida obter as relações com os projetores S_0 e S_1 . Isso permite obter os autovalores e autovetores de L_F e calcular os fatores de eficiência canônicos. Primeiramente observe que

$$\Lambda_U = \lambda_{U0}I_\Theta + \lambda_{U1}(J_\Theta - I_\Theta).$$

Como Λ_U é igual a um múltiplo de J_Θ , $\Lambda_U = r^2J_\Theta$, e tem-se que $\lambda_{U0} = \lambda_{U1} = r^2$.

Se Q_F é o projetor ortogonal no stratum W_F^Ω , como a dimensão do espaço de parcelas é $n = tr$, tem-se que a dimensão da matriz W_F^Ω é $n \times n$, então

$$\begin{aligned}
L_F &= X'Q_FX = X'\left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G)P_G\right)X = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G)X'P_GX \\
&= \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G)\left(X'\frac{1}{k_G}R_GX\right) = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G)\frac{1}{k_G}\Lambda_G.
\end{aligned}$$

Como μ é uma matriz triangular superior, para o cálculo de L_U apenas um termo do somatório é não nulo, isto é

$$\begin{aligned} L_U &= \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(U, G) \frac{1}{k_G} \Lambda_G = \mu(U, U) \frac{1}{k_U} \Lambda_U \\ &= \frac{1}{rt} \Lambda_U = \frac{1}{rt} X' R_U X = \frac{1}{rt} X' J_\Omega X \\ &= \frac{1}{rt} r^2 J_\Theta = r \left(\frac{1}{t} J_\Theta \right) = r S_0, \end{aligned}$$

observando que $X'_{t \times n} J_{n \times n} X_{n \times t} = r J_{t \times n} X_{n \times t} = r^2 J_{t \times t}$.

Para a blocagem $F \neq U$ tem-se que

$$\begin{aligned} L_F &= \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \frac{1}{k_G} \Lambda_G \\ &= \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \frac{1}{k_G} ((\lambda_{G0} - \lambda_{G1}) S_1 + r k_G S_0) \\ &= \sum_{G \in \mathfrak{F}} \left(\mu(F, G) \frac{1}{k_G} (\lambda_{G0} - \lambda_{G1}) S_1 \right) + r \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) S_0 \\ &= \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \frac{1}{k_G} (\lambda_{G0} - \lambda_{G1}) \right) S_1 + r \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \right) S_0 \\ &= \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \frac{1}{k_G} (\lambda_{G0} - \lambda_{G1}) \right) S_1, \end{aligned}$$

pois $\sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) = 0$.

Lembre-se que $L_F = X' Q_F X$, de onde vem que

$$\langle L_F v, \vec{1} \rangle = \langle X' Q_F X, \vec{1} \rangle = \langle Q_F X v, X \vec{1} \rangle = \langle Q_F X v, r \vec{1} \rangle = 0,$$

pois W_F^Ω é ortogonal a $\text{span}\{\vec{1}\} = W_U^\Omega$. Portanto, L_F é um múltiplo de S_1 . Segue então que

$$\begin{aligned} \varepsilon_{F_1} &= \frac{1}{r} \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \frac{1}{k_G} (\lambda_{G0} - \lambda_{G1}) \\ &= \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \left(1 - \frac{t \lambda_{G1}}{r k_G} \right), \end{aligned}$$

pois,

$$\begin{aligned} rk_G &= \lambda_{G0} + (t-1)\lambda_{G1} = \lambda_{G0} - \lambda_{G1} + t\lambda_{G1} \Rightarrow \\ \lambda_{G0} - \lambda_{G1} &= rk_G - t\lambda_{G1} \Rightarrow \\ \frac{1}{k_G}(\lambda_{G0} - \lambda_{G1}) &= \frac{1}{k_G}(rk_G - t\lambda_{G1}) = \left(r - \frac{t\lambda_{G1}}{k_G}\right) = r \left(1 - \frac{t\lambda_{G1}}{rk_G}\right). \end{aligned}$$

Pode-se utilizar a expressão de ε_{F_1} para demonstrar uma generalização da desigualdade de Fisher, a qual garante que para um delineamento balanceado com b blocos, t tratamentos e apenas uma estrutura de blocagem tem-se que $b \geq t$.

Teorema 2.7.2. (aput Fisher; Bailey, 2004, p. 200) **Desigualdade de Fisher generalizada:** Seja F uma partição em uma estrutura ortogonal em blocos para a qual existe um delineamento balanceado para t tratamentos. Se $F \neq U$ e $L_F \neq 0$ então $d_F^\Omega \geq t - 1$.

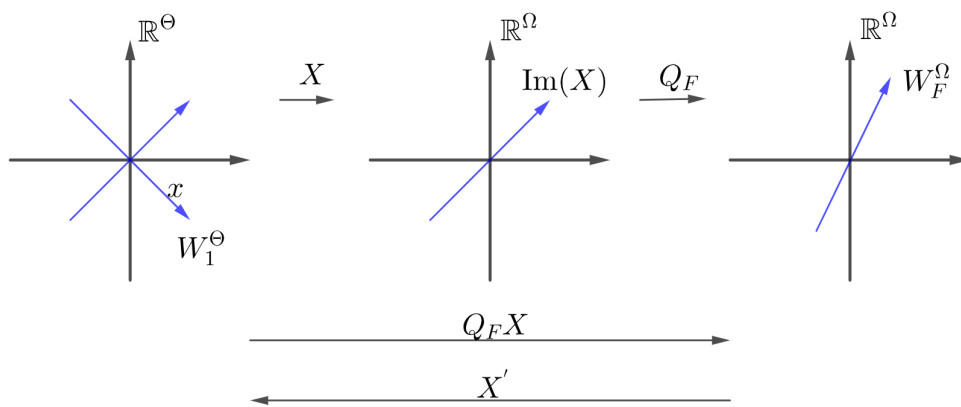
Demonstração. Note que

$$L_F = \sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(F, G) \frac{1}{k_G} (\lambda_{G0} - \lambda_{G1}) S_1,$$

isto é, $L_F = r\varepsilon_{F_1} S_1$. Se $L_F \neq 0$ então $\varepsilon_{F_1} \neq 0$.

Se Q_F é a projeção ortogonal em W_F^Ω . Definindo W_1^Θ como na figura 2.21.

Figura 2.21 – W_1^Θ .



Fonte: Da autora (2024).

Para $x \in W_1^\Theta$ temos que $X' Q_F X(x) = L_F x = \varepsilon_{F_1} x$, de onde vem que $\varepsilon_{F_1} x = X'(Q_F X(x))$. Logo, X' restrita à $\text{Im}(Q_F X(x))$ é sobrejetiva. Portanto,

$$t - 1 = \dim(W_1^\Theta) \leq \dim(\text{Im}(Q_F X)) \leq \dim(Q_F) = d_F^\Omega. \quad \square$$

Vale destacar que, de fato se tem uma generalização da desigualdade de Fisher, pois, se $\mathfrak{F} = \{E, F, U\}$ então o strata é dado por W_U^Ω , $W_F^\Omega = W_B^\Omega$ e $W_E^\Omega = V_B^\perp$, em que V_B é o espaço de blocos. Assim, $d_B^\Omega = \dim(W_B^\Omega) = b - 1$ e $b - 1 \geq t - 1$, o que implica que $b \geq t$, e temos a desigualdade de Fisher.

Um corolário do teorema anterior é apresentado em Bailey (2004) sem demonstração.

Corolário 2.7.1. (Bailey, 2004, p. 200) Um delineamento em linha-coluna balanceado, $\underline{n} \times \underline{m}$, em t tratamentos satisfaz $t \leq n$ ou t divide m .

Demonstração. Note que W_{linhas}^Ω tem dimensão $n - 1$, e portanto, $n - 1 \geq t - 1$ pela desigualdade de Fisher generalizada, se $L_{\text{linhas}} \neq 0$. A função de Moebius para esse delineamento é da forma

$$\zeta = \begin{pmatrix} & E & \text{linha} & \text{coluna} & U \\ E & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \text{linha} & 0 & 1 & 0 & 1 \\ \text{coluna} & 0 & 0 & 1 & 1 \\ U & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mu = \begin{pmatrix} & E & \text{linha} & \text{coluna} & U \\ E & 1 & -1 & -1 & 1 \\ \text{linha} & 0 & 1 & 0 & -1 \\ \text{coluna} & 0 & 0 & 1 & -1 \\ U & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{aligned} L_{\text{linha}} &= \left(\sum_{G \in \mathfrak{F}} \mu(\text{linha}, G) \frac{1}{k_G} (\lambda_{G0} - \lambda_{G1}) \right) S_1 \\ &= \left(\frac{1}{k_{\text{linha}}} (\lambda_{\text{linha}_0} - \lambda_{\text{linha}_1}) - \frac{1}{k_U} (\lambda_{U0} - \lambda_{U1}) \right) S_1, \end{aligned}$$

logo, $L_{\text{linha}} = 0$ se, e somente se,

$$\frac{1}{m} (\lambda_{\text{linha}_0} - \lambda_{\text{linha}_1}) = \frac{1}{mn} (\lambda_{U0} - \lambda_{U1}).$$

Mas como $\Lambda_U = r^2 J_\Theta$, segue que $\lambda_{U0} = \lambda_{U1}$, de onde vem que $\lambda_{\text{linha}_0} = \lambda_{\text{linha}_1}$. Assim, $\Lambda_{\text{linha}} = \lambda_{\text{linha}_0} I_\Theta + \lambda_{\text{linha}_1} (J_\Theta - I_\Theta) = \lambda_{\text{linha}_0} J_\Theta$.

Tem-se então que $\Lambda_{\text{linha}}(\theta_1, \theta_2) = \lambda_{\text{linha}_0}$ para todo $\theta_1, \theta_2 \in \Theta$. Como $\Lambda_{\text{linha}}(\theta, \theta) = r^2$ temos que $\lambda_{\text{linha}_0} = r^2$. Somando uma linha de Λ_{linha} tem-se que

$$\sum_{\theta_2 \in \Theta} \Lambda_{\text{linha}}(\theta_1, \theta_2) = rm$$

e

$$\sum_{\theta_2 \in \Theta} r^2 J_{\Theta}(\theta_1, \theta_2) = tr^2.$$

Logo, $rm = tr^2 \Rightarrow m = tr \Rightarrow \frac{m}{t} = r$, provando que t divide m . \square

De fato, o colorário acima prova também que a replicação de cada tratamento nas linhas é a mesma. Como $\Lambda_{\text{linha}}(\theta_1, \theta_2) = r^2$ para todo $\theta_1, \theta_2 \in \Theta$, se a ocorrência de dois tratamentos δ e η não é a mesma em duas linhas quaisquer do delineamento, então, $\Lambda_{\text{linha}}(\delta, \theta) \neq \Lambda_{\text{linha}}(\eta, \theta)$ para algum tratamento θ .

Definição 2.7.2. (Bailey, 2004, p. 196) Um delineamento em uma estrutura em blocos (Ω, \mathfrak{F}) é dito ortogonal se T é ortogonal a F para todo $F \in \mathfrak{F}$, isto é $P_{V_T}P_{V_F} = P_{V_F}P_{V_T}$

Observe que $P_{V_T} = \frac{1}{r}XX'$. Esta definição de delineamento ortogonal é equivalente à definição de delineamentos em blocos ortogonais a seguir.

Definição 2.7.3. (Bailey, 2008, p. 57) Um delineamento em blocos é ortogonal se W_T^{Ω} e W_B^{Ω} são ortogonais.

Para o caso de uma única blocagem $\{E, B, U\}$, $V_B = W_U^{\Omega} \oplus W_B^{\Omega}$ e $V_T = W_U^{\Omega} \oplus W_T^{\Omega}$ e se W_T^{Ω} e W_B^{Ω} são ortogonais tem-se $P_{V_B}P_{V_T} = P_{V_T}P_{V_B}$.

A função de delineamento, $\psi : \Omega \rightarrow \Theta$, induz uma partição T em Ω . Se ψ é equireplicado então T é uniforme. Note que ψ induz uma partição em Ω , dada por $\psi^{-1}(T)$. As classes dessa partição são as parcelas que receberam o mesmo tratamento, os quais definem o subespaço vetorial V_T . Vale destacar que a imagem de X em \mathbb{R}^{Ω} , $\text{Im}(X)$, é exatamente o subespaço V_T . Por exemplo, se $v' = (1, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{\Theta}$ representa o tratamento θ , então o vetor $Xv = (X(\omega_1, \theta), X(\omega_2, \theta), \dots, X(\omega_n, \theta))$ possui coordenadas iguais a 1 para parcelas ω_i que receberam o tratamento θ e, portanto, $Xv \in V_T$. Segue de forma imediata que $\text{Im}(X) = V_T$.

A matriz $X_{n \times t}$ é uma transformação de \mathbb{R}^{Θ} em \mathbb{R}^{Ω} . Se consideramos sua transposta $X'_{t \times n}$ temos uma transformação de \mathbb{R}^{Ω} em \mathbb{R}^{Θ} ,

$$\mathbb{R}^{\Theta} \rightarrow \mathbb{R}^{\Omega} \text{ transformação } X$$

$$\mathbb{R}^{\Omega} \leftarrow \mathbb{R}^{\Theta} \text{ transformação } X'$$

Desse modo, para $z \in (\text{Im}(X))^\perp$, z é ortogonal a $\text{Im}(X)$, então $z'Xx = 0$, para todo $x \in \mathbb{R}^\Theta$. Tomando a transposta temos que

$$0 = z'Xx = (z'Xx)' = x'X'z, \forall x \in \mathbb{R}^\Theta$$

e, portanto, $z \in \ker(X')$, de onde vem que $\ker(X') \subseteq (\text{Im}(X))^\perp$. De fato, $\ker(X') = (\text{Im}(X))^\perp$. Observe que X é uma aplicação injetiva e, portanto, $\text{posto}(X) = t$ e $\ker(X) = \{0\}$. Como $\text{posto}(X) = \text{posto}(X')$ segue que $\text{Im}(X') = \mathbb{R}^\Theta$.

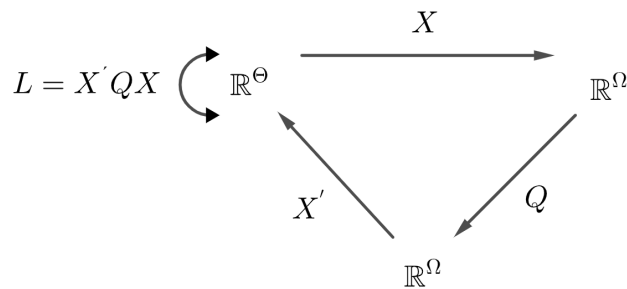
Para delineamentos equireplicados, com replicação r , tem-se que $\frac{1}{r}X'X = I_\Theta$. Deste fato segue que $\frac{1}{r}XX'$ é um projetor ortogonal em $\text{Im}(X)$, pois

$$\left(\frac{1}{r}XX'\right)^2 = \left(\frac{1}{r}XX'\right)\left(\frac{1}{r}XX'\right) = \frac{1}{r^2}X(X'X)X' = \frac{1}{r^2}X(rI_\Theta)X' = \frac{1}{r}XX',$$

como visto no lema 2.7.2.

Agora se $Q : \mathbb{R}^\Omega \rightarrow \mathbb{R}^\Omega$ é um projetor ortogonal qualquer, considere a transformação $L_{t \times t} = X'QX$, apresentada no diagrama da figura 2.22.

Figura 2.22 – Diagrama para Q .



Fonte: Da autora (2024).

Se Q comuta com XX' , então $\frac{1}{r}L$ é um projetor ortogonal. De fato, L é simétrica

$$\frac{1}{r^2}LL = \frac{1}{r^2}X'QXX'QX = \frac{1}{r^2}X'XX'QQX = \frac{1}{r^2}rI_\Theta X'QX = \frac{1}{r}L.$$

2.7.5 Exemplos, diagrama de Hasse combinado e análise de variância

O objetivo de toda a teoria anteriormente apresentada é essencialmente aplicá-la à análise de delineamentos experimentais, efetivamente utilizados na experimentação.

Nesta seção são desenvolvidos alguns exemplos que pretendem ilustrar a teoria vista. O diagrama de Hasse combinado dos delineamentos é apresentado em detalhes, conjuntamente com o esquema de análise de variância.

Para relacionar as partições nos conjuntos de parcelas e as partições nos conjuntos de tratamentos, vamos utilizar a função que aloca os tratamentos às parcelas. $\psi : \Omega \rightarrow \Theta$. Utilizamos também a notação $\psi^{-1}(T) = \{\alpha \in \Omega; \psi(\alpha) \in T\}$, isto é, a pré-imagem de T .

Todos os exemplos apresentados nesta seção encontram-se em Bailey (2008).

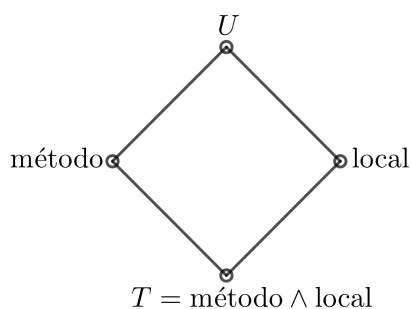
Exemplo 2.7.2. Uma organização de arqueologia deseja examinar a consistência de três métodos diferentes de datação por carbono: contagem de cintilação líquida, contagem proporcional de gás e espectrometria de massa do acelerador. Trinta laboratórios estão dispostos a participar do experimento. A organização disponibiliza 11 conjuntos de equipamentos para contagem de cintilação líquida, 6 para contagem proporcional de gás e 13 para espectrometria de massa com acelerador. Esses conjuntos de equipamentos são alocados aleatoriamente para os 30 laboratórios e os técnicos de cada um são treinados para seu uso. A organização tem oito itens de teste para datação, retirados de diferentes sítios arqueológicos e compostos por diferentes substâncias. Em cada laboratório, um único técnico treinado usará seu equipamento para datar com carbono cada um dos itens de teste.

No exemplo 2.7.2 os tratamentos consistem dos métodos de datação do carbono combinados com os locais diferentes. Logo, temos um experimento fatorial 3. O diagrama de Hasse para fatores de tratamento fica como na figura 2.23.

No conjunto dos tratamentos Θ temos as partições:

- a) U , com apenas uma classe;
- b) método, com 3 classes (cintilação, contagem de gás e espectrometria);
- c) local, com 8 classes (8 sítios arqueológicos diferentes);
- d) $T = \text{método} \wedge \text{local}$, com 24 classes (tratamentos).

Figura 2.23 – Diagrama de Hasse para tratamentos do exemplo 2.7.2.



Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

O conjunto de parcelas Ω consiste de 30 amostras retiradas de 8 locais diferentes, totalizando 240 parcelas. Cada uma das amostras retiradas de um mesmo local é enviada a cada um dos 30 laboratórios. O diagrama de Hasse para os fatores de parcelas é apresentado na figura 2.24.

No conjunto Ω temos as partições:

- a) U , uma classe com todos as 240 parcelas;
- b) laboratórios, 30 classes com 8 parcelas em cada classe;
- c) E , 240 classes com uma parcela em cada classe.

Figura 2.24 – Diagrama de Hasse para parcelas do exemplo 2.7.2.



Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

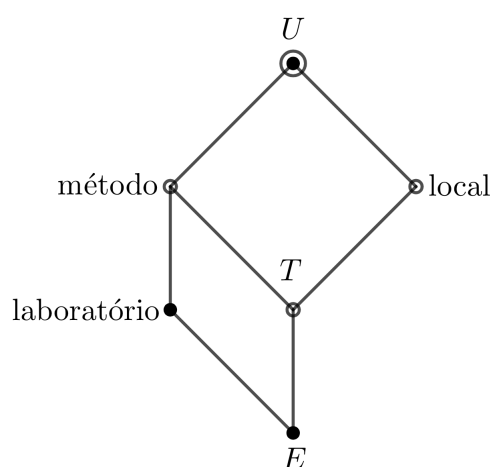
Para obter o diagrama de Hasse combinado vamos utilizar as pré-imagens das partições nos tratamentos. Note que o experimento não é equireplicado, uma vez que as quantidades dos tipos de equipamentos são diferentes. Sendo assim, qualquer combinação dos locais com os métodos tem replicações específicas de acordo com a quantidade de aparelho:

- a) $\psi^{-1}(T)$ tem 24 classes com replicações diferentes:
 - 8 classes com 11 parcelas em cada classe (cintilação);
 - 8 classes com 6 parcelas em cada classe (proporcional);
 - 8 classes com 13 parcelas em cada classe (espectometria);

- b) $\psi^{-1}(\text{local})$ tem 8 classes com 30 parcelas em cada classe;
 c) $\psi^{-1}(\text{método})$ tem 3 classes, uma com 88 parcelas (cintilação), outra com 48 parcelas (gás) e a última com 104 parcelas (espectometria).

Note que parcelas de um mesmo local estão em laboratórios diferentes, logo, laboratório $\not\subseteq \psi^{-1}(\text{local})$. Cada laboratório utiliza apenas um tipo de método, logo, laboratório $\subseteq \psi^{-1}(\text{método})$. Por fim, $\psi^{-1}(T) \not\subseteq \text{laboratório}$. Obtemos então o diagrama de Hasse combinado do exemplo 2.7.2 na figura 2.25.

Figura 2.25 – Diagrama de Hasse combinado para o exemplo 2.7.2.



Fonte: Da autora (2024).

Como esse experimento não é equirreplicado deve-se tomar o cuidado em constatar que trata-se de um delineamento ortogonal. Pelo diagrama de Hasse da figura 2.25 temos que comprovar que T e laboratório são ortogonais e o mesmo ocorre para local e laboratório. Tais fatos podem ser comprovados utilizando o teorema 2.6.2. Como $T \vee \text{laboratório} = \text{método}$, tomando a classe cintilação de método, esta partição contém 8 classes de T dadas por $\text{cintilação} \vee \text{local}$ e 11 classes de laboratório. Portanto, $s_{ij} = \frac{1}{88} \cdot 8 \cdot 11 = 1$ para a interseção entre essas classes. Agora note que $\text{local} \vee \text{laboratório} = U$ e, portanto, temos apenas uma classe Δ e $s_{ij} = \frac{1}{240} \cdot 8 \cdot 30 = 1$.

A partir do diagrama de Hasse combinado apresentado na figura 2.25 obtemos o esquema de análise de variância, conforme tabela 2.5.

Exemplo 2.7.3. Um instituto de agronomia no Brasil conduziu um experimento fatorial com feijão. Os fatores de tratamento foram cultivares (havia três cultivares), semeaduras (convencional ou sem preparo do solo) e molibidênio (aplicado ou não). A área experimental foi dividida em quatro blocos. Cada bloco era um retângulo 3×4 . As três linhas foram chamadas de faixas;

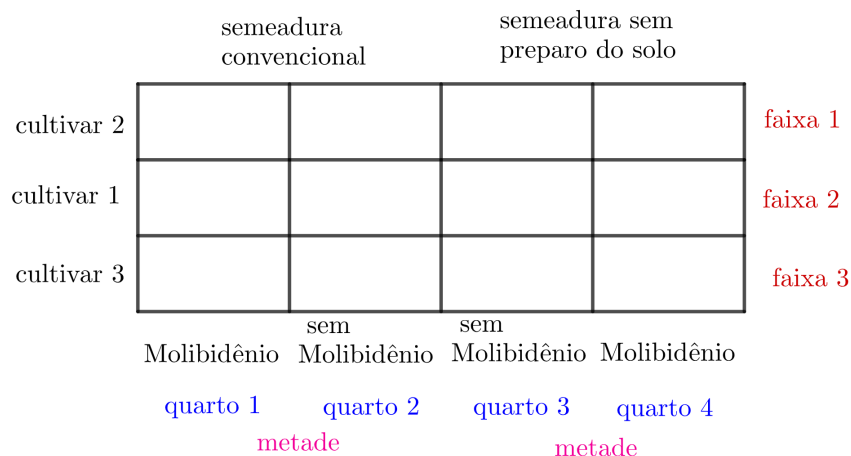
Tabela 2.5 – Esquema de análise de variância para o exemplo 2.7.2.

Stratum	Fonte de variação	Graus de liberdade
média U	média	1
laboratório	método	2
	resíduo	27
	total	29
parcelas E	local	7
	método \wedge local T	14
	resíduo	189
	total	210
Total		240

Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

cultivares foram aplicadas a estas. As quatro colunas, chamadas de quartos, foram agrupadas em duas metades. Os diferentes métodos de semeadura foram usados nas duas metades de cada bloco, e o Molibdênio foi aplicado a um quarto de cada metade. A figura 2.26 mostra um bloco típico.

Figura 2.26 – Bloco do exemplo 2.7.3.



Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

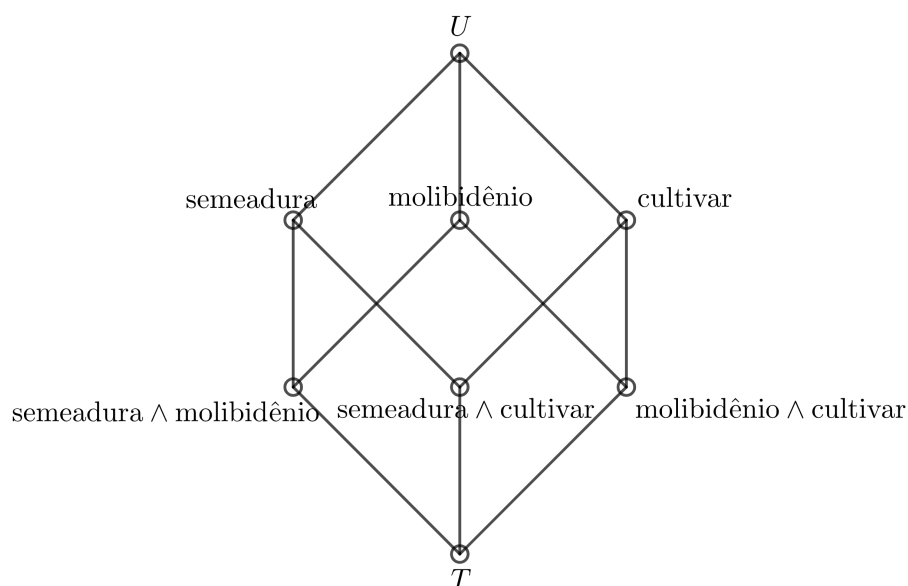
Para esse exemplo temos um fatorial triplo cujo diagrama de Hasse para fatores de tratamento é apresentado na figura 2.27.

As partições em Θ são:

- U , apenas uma classe;
- semeadura, 2 classes (convencional e sem preparo do solo);
- molibidênio, 2 classes (aplicado ou não);
- cultivar, 3 classes (cultivares 1, 2 e 3);

- e) $\text{semeadura} \wedge \text{molibidênio}$, 4 classes;
- f) $\text{semeadura} \wedge \text{cultivar}$, 6 classes;
- g) $\text{molibidênio} \wedge \text{cultivar}$, 6 classes;
- h) $T = \text{cultivar} \wedge \text{molibidênio} \wedge \text{semeadura}$, 12 classes (tratamentos).

Figura 2.27 – Diagrama de Hasse para tratamentos do exemplo 2.7.3.



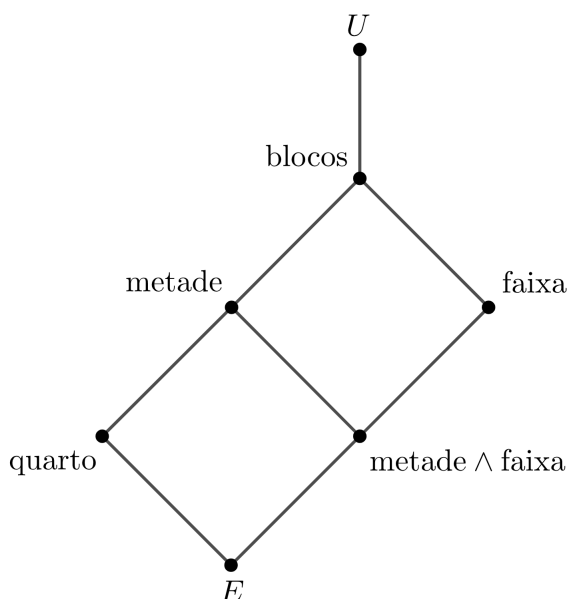
Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Considere agora as partições em Ω :

- a) U , uma classe com todas as 48 parcelas;
- b) blocos, 4 classes com 12 parcelas em cada classe;
- c) faixa, 12 classes com 4 parcelas em cada classe;
- d) quarto, 16 classes com 3 parcelas em cada classe;
- e) metade, 8 classes com 6 parcelas em cada classe;
- f) $\text{metade} \wedge \text{faixa}$, 24 classes com 2 parcelas em cada classe;
- g) $E = \text{parcelas}$, 48 classes com uma parcela em cada classe.

Note que as partições faixa e metade estão contidas nos blocos. Note também que quarto \subseteq metade. Por fim, existe o ínfimo $\text{metade} \wedge \text{faixa}$. Obtemos o diagrama de Hasse para fatores de parcela como mostra a figura 2.28.

Figura 2.28 – Diagrama de Hasse para parcelas do exemplo 2.7.3.



Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Para obter o diagrama de Hasse combinado deve-se relacionar partições dos tratamentos com as partições nas parcelas, para tanto usamos ψ^{-1} , vejamos:

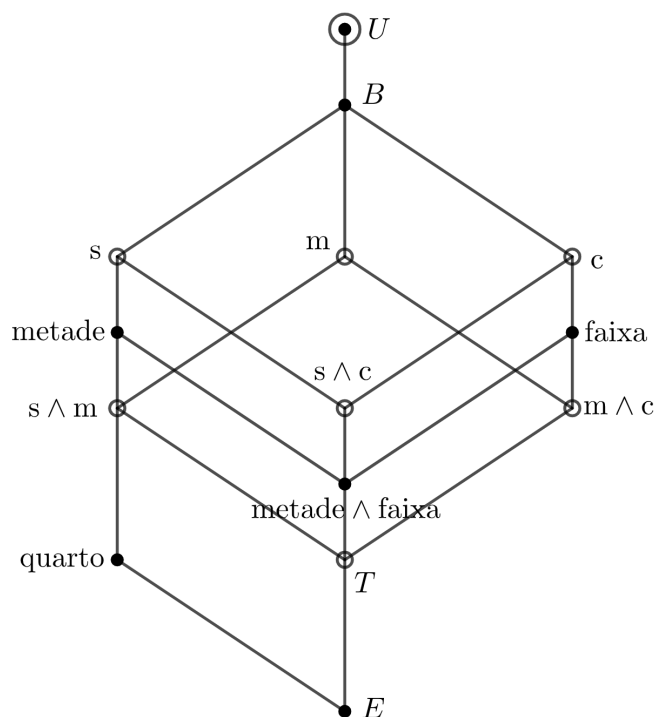
- a) ψ^{-1} (semeadura), 2 classes com 24 parcelas em cada classe;
- b) ψ^{-1} (molibidênio), 2 classes com 24 parcelas em cada classe;
- c) ψ^{-1} (cultivar), 3 classes com 16 parcelas em cada classe;
- d) ψ^{-1} (semeadura \wedge molibidênio), 4 classes com 12 parcelas em cada classe;
- e) ψ^{-1} (semeadura \wedge cultivar), 6 classes com 8 parcelas em cada classe;
- f) ψ^{-1} (molibidênio \wedge cultivar), 6 classes com 8 parcelas em cada classe;
- g) $\psi^{-1}(T)$, 12 classes com 4 parcelas em cada classe;

Agora é possível verificar as relações existentes entre as partições nos tratamentos e as partições nas parcelas:

- a) faixa $\subseteq \psi^{-1}$ (cultivar);
- b) metade $\subseteq \psi^{-1}$ (semeadura);
- c) metade \wedge faixa $\subseteq \psi^{-1}$ (semeadura \wedge cultivar);
- d) quarto $\subseteq \psi^{-1}$ (molibidênio);
- e) quarto $\subseteq \psi^{-1}$ (semeadura \wedge molibidênio);
- f) E $\subseteq \psi^{-1}$ (molibidênio \wedge cultivar);
- g) E $\subseteq \psi^{-1}(T)$.

Das relações acima obtemos o diagrama de Hasse combinado, como mostrado na figura 2.29 (para simplificar abreviamos os fatores sementeira, molibidênio e cultivar respectivamente por: s, m e c).

Figura 2.29 – Diagrama de Hasse combinado para o exemplo 2.7.3.



Fonte: Da autora (2024).

Do diagrama de Hasse combinado 2.29 obtém-se o esquema de análise de variância na tabela 2.6.

Exemplo 2.7.4. Um fabricante de eletrodomésticos deseja saber qual a melhor combinação de temperatura de lavagem e temperatura de secagem para lençóis de algodão, de tal maneira que esses não amarrotam ao final da lavagem. Ele quer comparar quatro temperaturas de lavagem e três temperaturas de secagem. No experimento, ele usa oito máquinas de lavar e seis secadoras.

Primeiro, em cada máquina são alocados seis lençóis, resultando num total de 48 lençóis. Nesse momento, as temperaturas das máquinas de lavar são escolhidas aleatoriamente, de modo que duas lavadoras são executadas com as mesmas temperaturas.

Em seguida, após a lavagem, os seis lençóis de cada máquina são alocados, um em cada secadora, aleatoriamente. Nesse momento, as temperaturas de secagem são escolhidas, aleatoriamente, nas secadoras, de modo que duas secadoras são executadas com as mesmas temperaturas.

Tabela 2.6 – Esquema de análise de variância para o exemplo 2.7.3.

Stratum	Fonte de variação	Graus de liberdade
média U	média	1
bloco B	bloco	3
faixa	cultivar	2
	resíduo	6
	total	8
metade	semeadura	1
	resíduo	3
	total	4
metade \wedge faixa	cultivar \wedge semeadura	2
	resíduo	6
	total	8
quarto	molibidênio	1
	semeadura \wedge molibdênio	1
	resíduo	6
	total	8
parcelas E	cultivar \wedge molibdênio	2
	T	2
	resíduo	12
	total	16
Total		48

Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

No final os 48 lençóis são pontuados por especialistas, pelo quanto estão amarrotados.

As partições em Θ são:

- U , apenas uma classe;
- temperatura de lavagem (TL), 4 classes (A, B, C, D);
- temperatura de secagem (TS), 3 classes (a, b, c);
- $T = TL \wedge TS$, 12 classes (tratamentos).

As partições em Ω são:

- U , apenas uma classe com 48 parcelas;
- máquina, 8 classes (8 máquinas diferentes) com 6 parcelas em cada classe;
- secadora, 6 classes (6 secadoras diferentes) com 8 parcelas em cada classe;
- $E =$ parcela, 48 classes com uma parcela em cada classe.

O croqui desse experimento é apresentado na figura 2.30.

Figura 2.30 – Croqui do exemplo 2.7.4.

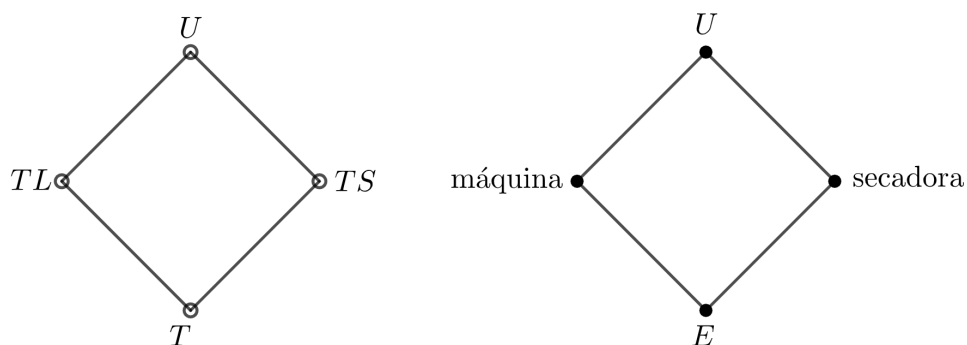
Máquina de lavar	1	2	3	4	5	6	7	8
Temperatura	3	4	2	3	4	1	1	2

Secadora	Temperatura									
1	1	<table border="1" style="display: inline-table; border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td><i>Ca</i></td><td><i>Da</i></td><td><i>Ba</i></td><td><i>Ca</i></td><td><i>Da</i></td><td><i>Aa</i></td><td><i>Aa</i></td><td><i>Ba</i></td></tr></table>	<i>Ca</i>	<i>Da</i>	<i>Ba</i>	<i>Ca</i>	<i>Da</i>	<i>Aa</i>	<i>Aa</i>	<i>Ba</i>
<i>Ca</i>	<i>Da</i>	<i>Ba</i>	<i>Ca</i>	<i>Da</i>	<i>Aa</i>	<i>Aa</i>	<i>Ba</i>			
2	3	<table border="1" style="display: inline-table; border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td><i>Cc</i></td><td><i>Dc</i></td><td><i>Bc</i></td><td><i>Cc</i></td><td><i>Dc</i></td><td><i>Ac</i></td><td><i>Ac</i></td><td><i>Bc</i></td></tr></table>	<i>Cc</i>	<i>Dc</i>	<i>Bc</i>	<i>Cc</i>	<i>Dc</i>	<i>Ac</i>	<i>Ac</i>	<i>Bc</i>
<i>Cc</i>	<i>Dc</i>	<i>Bc</i>	<i>Cc</i>	<i>Dc</i>	<i>Ac</i>	<i>Ac</i>	<i>Bc</i>			
3	2	<table border="1" style="display: inline-table; border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td><i>Cb</i></td><td><i>Db</i></td><td><i>Bb</i></td><td><i>Cb</i></td><td><i>Db</i></td><td><i>Ab</i></td><td><i>Ab</i></td><td><i>Bb</i></td></tr></table>	<i>Cb</i>	<i>Db</i>	<i>Bb</i>	<i>Cb</i>	<i>Db</i>	<i>Ab</i>	<i>Ab</i>	<i>Bb</i>
<i>Cb</i>	<i>Db</i>	<i>Bb</i>	<i>Cb</i>	<i>Db</i>	<i>Ab</i>	<i>Ab</i>	<i>Bb</i>			
4	3	<table border="1" style="display: inline-table; border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td><i>Cc</i></td><td><i>Dc</i></td><td><i>Bc</i></td><td><i>Cc</i></td><td><i>Dc</i></td><td><i>Ac</i></td><td><i>Ac</i></td><td><i>Bc</i></td></tr></table>	<i>Cc</i>	<i>Dc</i>	<i>Bc</i>	<i>Cc</i>	<i>Dc</i>	<i>Ac</i>	<i>Ac</i>	<i>Bc</i>
<i>Cc</i>	<i>Dc</i>	<i>Bc</i>	<i>Cc</i>	<i>Dc</i>	<i>Ac</i>	<i>Ac</i>	<i>Bc</i>			
5	2	<table border="1" style="display: inline-table; border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td><i>Cb</i></td><td><i>Db</i></td><td><i>Bb</i></td><td><i>Cb</i></td><td><i>Db</i></td><td><i>Ab</i></td><td><i>Ab</i></td><td><i>Bb</i></td></tr></table>	<i>Cb</i>	<i>Db</i>	<i>Bb</i>	<i>Cb</i>	<i>Db</i>	<i>Ab</i>	<i>Ab</i>	<i>Bb</i>
<i>Cb</i>	<i>Db</i>	<i>Bb</i>	<i>Cb</i>	<i>Db</i>	<i>Ab</i>	<i>Ab</i>	<i>Bb</i>			
6	1	<table border="1" style="display: inline-table; border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td><i>Ca</i></td><td><i>Da</i></td><td><i>Ba</i></td><td><i>Ca</i></td><td><i>Da</i></td><td><i>Aa</i></td><td><i>Aa</i></td><td><i>Ba</i></td></tr></table>	<i>Ca</i>	<i>Da</i>	<i>Ba</i>	<i>Ca</i>	<i>Da</i>	<i>Aa</i>	<i>Aa</i>	<i>Ba</i>
<i>Ca</i>	<i>Da</i>	<i>Ba</i>	<i>Ca</i>	<i>Da</i>	<i>Aa</i>	<i>Aa</i>	<i>Ba</i>			

Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Os diagrama de Hasse para fatores de tratamento e fatores de parcelas são iguais, veja figura 2.31.

Figura 2.31 – Diagramas de Hasse para tratamentos e parcelas do exemplo 2.7.4.

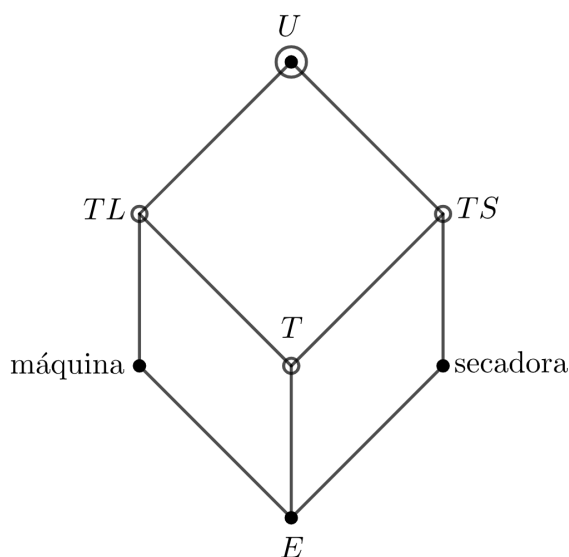


Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Para obter o diagrama combinado, dado na figura 2.32 e em seguida o esquema de análise de variância, dado na tabela 2.7, basta relacionar as pré-imagens das partições de tratamentos com as partições nas parcelas:

- a) máquina $\subseteq \psi^{-1}(TL)$;
- b) secadora $\subseteq \psi^{-1}(TS)$;
- c) $E \subseteq \psi^{-1}(T)$.

Figura 2.32 – Diagramas de Hasse combinado do exemplo 2.7.4.



Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Tabela 2.7 – Esquema de análise de variância para o exemplo 2.7.4.

Stratum	Fonte de variação	Graus de liberdade
média U	média	1
máquina	TL	3
	resíduo	4
	total	7
secadora	TS	2
	resíduo	3
	total	5
parcelas E	T	6
	resíduo	26
	total	35
Total		48

Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

2.7.6 Decompondo interações

Dizemos que F e G são estritamente ortogonais se são ortogonais entre si e $F \vee G = U$. A ortogonalidade, por definição, garante que $V_F \cap (V_{F \vee G})^\perp$ é ortogonal a $V_G \cap (V_{F \vee G})^\perp$, logo, no caso da ortogonalidade estrita $V_G \cap V_U^\perp$ é ortogonal a $V_F \cap V_U^\perp$. Como $V_U = V_0$ então $V_U^\perp = V_0^\perp$, que são todos os vetores x tais que $\sum x_i = 0$. Esse fato implica que todo contraste $x \in V_F$, $\sum x_i = 0$, é ortogonal aos contrastes $y \in V_G$. Além disso, pelo Teorema 2.6.2, todas as classes de F e G se interceptam. Portanto, todas as combinações dos níveis de F e G ocorrem.

Se G é um fator de tratamento e F é um fator de parcelas, considerando G como um fator nas parcelas pela $\psi^{-1}(G)$. Nesse caso G está confundido com F se $W_G^\Omega \subseteq W_F^\Omega$.

Definição 2.7.4. (Bailey, 2008, p. 241) Um subespaço de tratamento contido em um stratum W_F^Ω está confundido com F .

Além disso, se G é um fator nos tratamentos e F é um fator nas parcelas e, se considerarmos G um fator também nas parcelas, o fato de F e G serem estritamente ortogonais implica que $W_G^\Omega \not\subseteq W_F^\Omega$, isto é, G não está confundido com F , como também G não está confundido com nenhum H em que $F \preceq H$.

Em experimentos fatoriais pode ser necessário confundir parte da interação com fatores de parcela. Isso ocorre porque em experimentos fatoriais o número de tratamentos aumenta de acordo com a quantidade de níveis dos fatores. Assim, se faz necessário decompor interações.

Apresentamos uma técnica algébrica para decompor o subespaço V_T . Sejam os tratamentos definidos pelos fatores F_1, F_2, \dots, F_n , com $T = F_1 \wedge F_2 \wedge \dots \wedge F_n$ e $V_T = V_{F_1 \wedge F_2 \wedge \dots \wedge F_n}$. Observe que $V_T = \mathbb{R}^\Theta$. No caso particular, em que não se tem repetição dos tratamentos podemos identificar a parcela pelo tratamento e assim $\mathbb{R}^\Theta = \mathbb{R}^\Omega$.

Vamos supor que os fatores F_i , $i = 1, 2, \dots, n$, possuem p níveis, com p primo. Vamos então codificar os p níveis pelo grupo $\mathbb{Z}_p = \{0, 1, \dots, p-1\}$, o grupo dos inteiros módulo p . Pode-se então identificar o conjunto dos tratamentos Θ por $\mathbb{Z}_p \times \dots \times \mathbb{Z}_p = \mathbb{Z}_p^n$, em que a i -ésima coordenada representa o nível de i de F_i . Com esta identificação F_i pode ser considerado como a função:

$$F_i : \mathbb{Z}_p^n \longrightarrow \mathbb{Z}_p$$

$$(j_1, \dots, j_p) \longrightarrow j_i.$$

Em geral, um caracter é uma função da forma:

$$\phi : \mathbb{Z}_p^n \longrightarrow \mathbb{Z}_p$$

$$\phi = \sum_i a_i F_i, \quad a_i \in \mathbb{Z}_p.$$

Como as pré-imagens de ϕ definem uma partição no conjunto de tratamentos, ϕ pode ser considerada como um fator de tratamento. Por exemplo, se $\phi = 2F + G$ pode-se pensar que

ϕ é a média ponderada entre os fatores de tratamentos reais, mesmo que isso não tenha uma interpretação física no experimento.

Como $\phi = \sum a_i F_i$, $a_i \in \mathbb{Z}_p$, ϕ pode ser identificado à n -upla (a_1, a_2, \dots, a_n) e, portanto, tem-se p^n caracteres, que é também o número de tratamentos. Se ϕ define a mesma partição que um fator A , por exemplo, $2A \equiv A$, dizemos que ϕ está aninhado com A . As relações básicas relativas a esses fatores são dadas pelo teorema a seguir.

Teorema 2.7.3. (Bailey, 2008, p. 244) Sejam F_1, F_2, \dots, F_n , cada um com p níveis codificados pelos inteiros módulo p , com p primo, então:

- a) existem p^n tratamentos e p^n caracteres;
- b) se $G = \sum_i^n g_i F_i$ e $H = \sum_i^n h_i F_i$ e $G \neq I$ e $H \neq I$ então:
 - existe algum $k \neq 0$ em \mathbb{Z}_p tal que $g_i = kh_i$, para $i = 1, 2, \dots, n$, e neste caso, $G \equiv H$;
 - ou
 - os fatores G e H são estritamente ortogonais;
- c) se $G = \sum_i^n g_i F_i$, então G pertence à interação daqueles F_i para os quais $g_i \neq 0$.

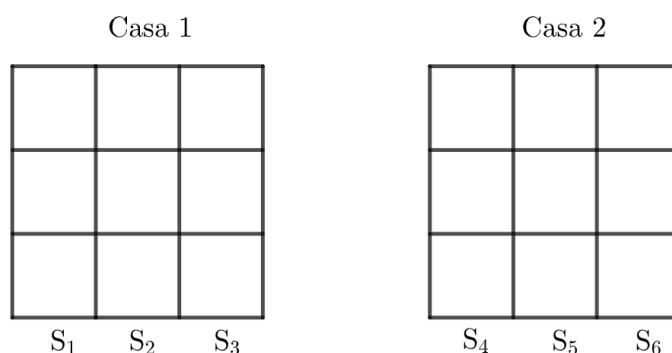
A demonstração desse teorema não apresentada em Bailey (2008), em razão de sua importância é apresentada no apêndice D.

Como resultado do teorema 2.7.3, segue que o conjunto dos $p^n - 1$ fatores, diferentes de I , são divididos em $\frac{p^n - 1}{p - 1}$ conjuntos com $p - 1$ fatores, de forma que fatores no mesmo conjunto são equivalentes entre si e fatores em conjuntos diferentes são ortogonais.

Um delineamento que envolve o conceito de confundimento é apresentado no exemplo a seguir.

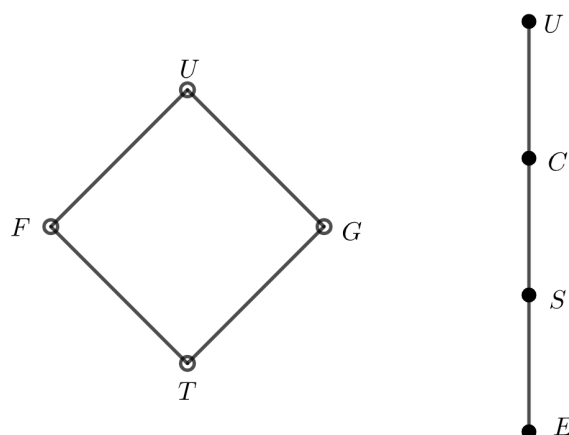
Exemplo 2.7.5. Considere um experimento com uma estrutura fatorial nos tratamentos. Sejam os fatores de tratamento F e G , ambos com 3 níveis. Para as parcelas, vamos considerar os fatores: C (casa de vegetação com 2 classes) e S (salas contidas nas casas de vegetação com 6 classes). Considere que cada casa de vegetação é uma repetição dos tratamentos. Cada sala contida na casa de vegetação possui 3 parcelas, conforme a figura 2.33.

Figura 2.33 – Casas de vegetação do exemplo 2.7.5.



Fonte: Da autora (2024).

Figura 2.34 – Diagramas de Hasse para o exemplo 2.7.5.



Fonte: Da autora (2024).

Temos um fatorial 3×3 , logo, 9 tratamentos. Nesse experimento queremos que todas as combinações de tratamentos sejam aplicadas em cada casa de vegetação.

Primeiramente vamos explicitar subespaço da interação. Os fatores de tratamento F e G possuem ambos 3 níveis. Aqui temos $p = 3$ e $n = 2$. Codificando os níveis dos fatores como

$$F_0, F_1, F_2, G_0, G_1, G_2.$$

Considere que os tratamentos são pares ordenados de inteiros módulo 3, assim $\mathbb{R}^\Theta = \mathbb{R}^9$ e o conjunto dos tratamentos é dado por $\mathbb{Z}_3^2 = \{(a, b), a, b \in \mathbb{Z}_3\}$. Logo, os tratamentos são

$$F_0G_0, F_0G_1, F_0G_2, \dots, F_2G_0, F_2G_1, F_2G_2.$$

Nos quais identificamos o tratamento F_1G_2 como o par $(1, 2)$ e assim por diante, conforme tabela 2.8.

Tabela 2.8 – Caracteres do exemplo 2.7.5.

F	0	0	0	1	1	1	2	2	2
G	0	1	2	0	1	2	0	1	2
$F + G$	0	1	2	1	2	0	2	0	1
$F + 2G$	0	2	1	1	0	2	2	1	0
$2F + G$	0	1	2	2	0	1	1	2	0
$2F + 2G$	0	2	1	2	1	0	1	0	2
$2F$	0	0	0	2	2	2	1	1	1
$2G$	0	2	1	0	2	1	0	2	1
I	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Note que cada caracter possui um valor em cada tratamento, por exemplo:

$$(F + 2G)(2, 1) = 1 \times 2 + 2 \times 1 = 2 + 2 = 4.$$

Note também que I é o caracter cujos coeficientes são todos nulos.

Cada caracter pode ser considerado um fator, pois, ele define uma partição. Por exemplo, da tabela 2.8 temos:

- $(F + G)(0, 0) = (F + G)(1, 2) = (F + G)(2, 1) = 0$, logo, temos os tratamentos F_0G_0 , F_1G_2 , F_2G_1 ;
- $(F + G)(0, 1) = (F + G)(1, 0) = (F + G)(2, 2) = 1$, logo, temos os tratamentos F_0G_1 , F_1G_0 , F_2G_2 ;
- $(F + G)(0, 2) = (F + G)(1, 1) = (F + G)(2, 0) = 2$, logo, temos os tratamentos F_2G_0 , F_1G_1 , F_2G_0 .

Portanto, $F + G$ define a partição nos tratamentos $\{\{F_0G_0, F_1G_2, F_2G_1\}\{F_0G_1, F_1G_0, F_2G_2\}\{F_2G_0, F_1G_1, F_2G_0\}\}$.

Note que $I \equiv U$. Além disso, pela tabela 2.8 temos que $F \equiv 2F$, $G \equiv 2G$, $F + G \equiv 2F + 2G$ e $F + 2G \equiv 2F + G$.

A interação é estimada no subespaço $(V_F + V_G)^\perp$. O teorema 2.7.3 fornece uma forma algébrica de decompor o espaço $V_T = \mathbb{R}^9$. Pelo item c) desse teorema $F + G$ e $F + 2G$ pertencem a interação entre F e G (veja tabela 2.8). Para melhor compreensão considere que os tratamentos

$$F_0G_0, F_0G_1, F_0G_2, F_1G_0, F_1G_1, F_1G_2, F_2G_0, F_2G_1, F_2G_2$$

são aplicados na base \mathbb{R}^9 . Assim,

$$\begin{aligned} V_F &= \{(a, a, a, b, b, b, c, c, c), a, b, c \in \mathbb{R}\}, \\ V_G &= \{(d, e, f, d, e, f, d, e, f) | d, e, f \in \mathbb{R}\} \text{ e} \\ V_F + V_G &= \{(a+d, a+e, a+f, b+d, b+e, b+f, c+d, c+e, c+f)\}. \end{aligned}$$

Se esse vetor está em $V_{F+G} \cap V_0^\perp$, então $\alpha + \beta + \gamma = 0$. Vamos explicitar o subespaço $(V_F + V_G)^\perp$.

Considere $F + G$ dado conforme a tabela 2.8, um vetor em V_{F+G} é da forma

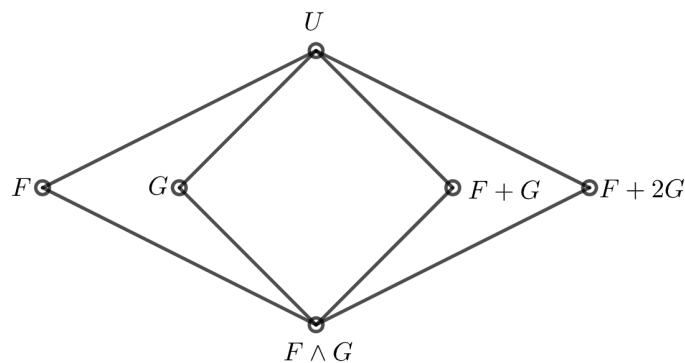
$$V_{F+G} = \{(\alpha, \beta, \gamma, \beta, \gamma, \alpha, \gamma, \alpha, \beta), \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}\}.$$

Fazendo o produto interno entre vetores de $V_F + V_G$ e V_{F+G} , obtemos

$$\begin{aligned} &\alpha(a+d) + \beta(a+c) + \gamma(a+f) + \\ &\beta(b+d) + \gamma(b+e) + \alpha(b+f) + \\ &\gamma(c+d) + \alpha(c+e) + \beta(c+f) = 0, \end{aligned}$$

pois, $\alpha + \beta + \gamma = 0$. Portanto, W_{F+G} e W_{F+2G} são subespaços de dimensão 2, que decompõem o espaço $(V_F + V_G)^\perp$, que possui dimensão 4. Temos então a decomposição dada conforme a figura 2.35.

Figura 2.35 – Diagramas de Hasse para decomposição de $(V_F + V_G)^\perp$ do exemplo 2.7.5.

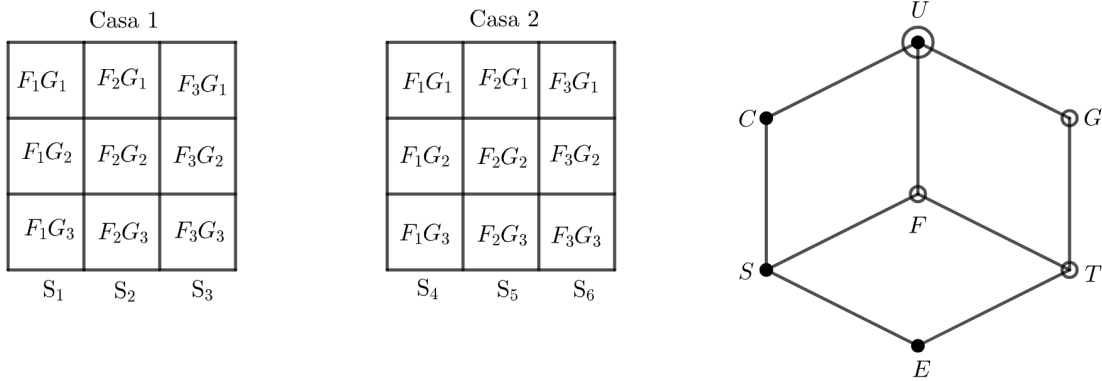


Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Note que existem diferentes possibilidades de alocar os tratamentos para obter todas as combinações que nos permitem estimar efeitos principais e interação. Vejamos:

- a) fixar os níveis do fator F dentro das salas nas duas casas. Confundindo o fator F com o fator S . Nesse caso o efeito principal de G e a interação são estimados com maior precisão;

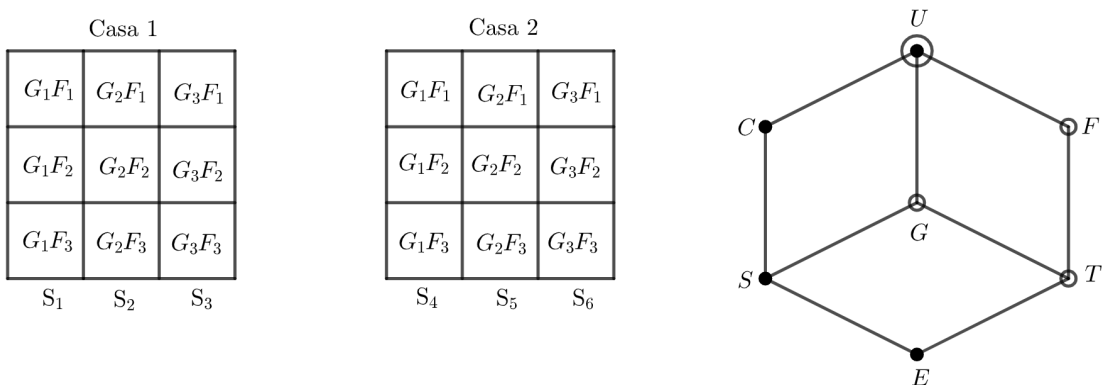
Figura 2.36 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item a).



Fonte: Da autora (2024).

- b) fixar os níveis do fator G dentro das salas nas duas casas. Confundindo o fator G com o fator S . Nesse caso o efeito principal de F e a interação são estimados com maior precisão;

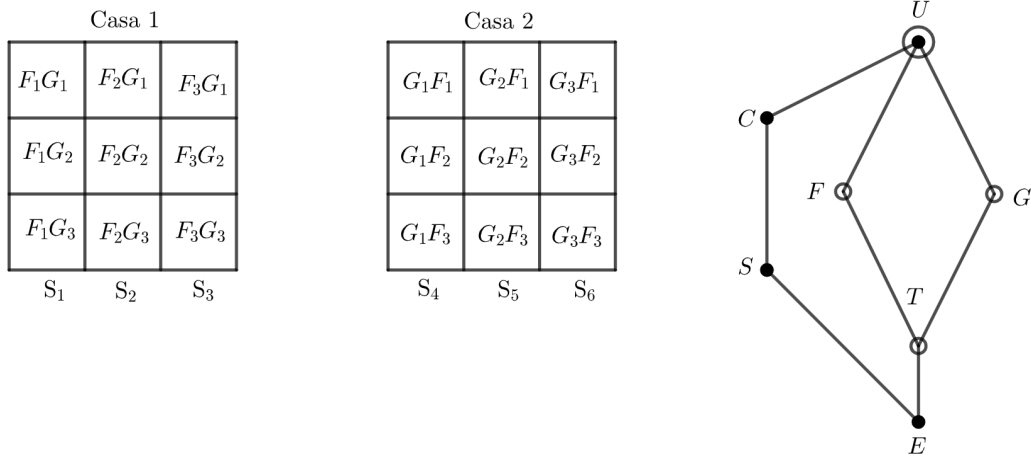
Figura 2.37 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item b).



Fonte: Da autora (2024).

- c) fixar os níveis do fator F dentro das salas na casa 1, fixar os níveis do fator G dentro das salas na casa 2;

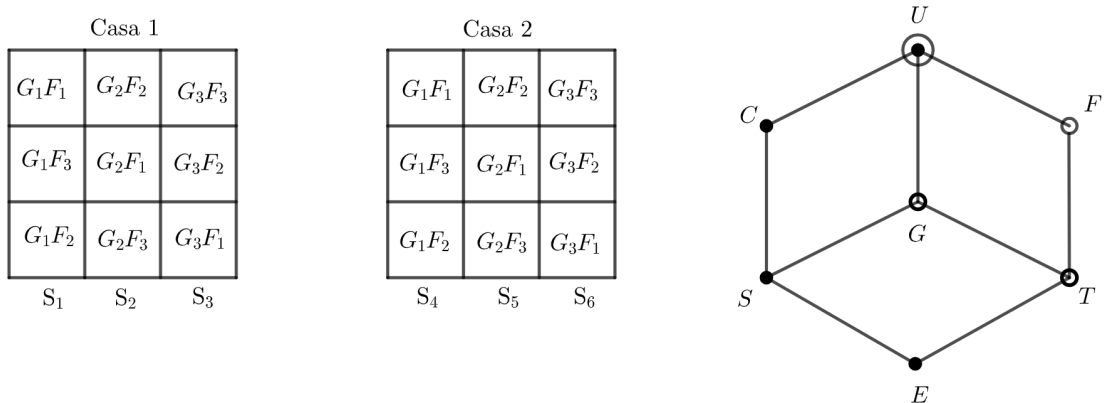
Figura 2.38 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item c).



Fonte: Da autora (2024).

- d) usar um quadrado latino 3×3 para os níveis do fator F e fixar o fator G nas salas.
 Confundindo parte das interação com as salas;

Figura 2.39 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item d).



Fonte: Da autora (2024).

- e) confundir o caracter $F + G$ nas salas na primeira casa de vegetação e $F + 2G$ nas salas na segunda casa de vegetação de acordo com os valores calculados na tabela 2.8, veja figura 2.40.

Figura 2.40 – Delineamento confundido $F + G$ em uma casa e $F + 2G$ em outra casa para o exemplo 2.7.5, item e).

Casa 1			Casa 2		
F	F	F	F	F	F
+	+	+	+	+	+
G	G	G	$2G$	$2G$	$2G$
$\overline{=}$	$\overline{=}$	$\overline{=}$	$\overline{=}$	$\overline{=}$	$\overline{=}$
0	1	2	0	1	2

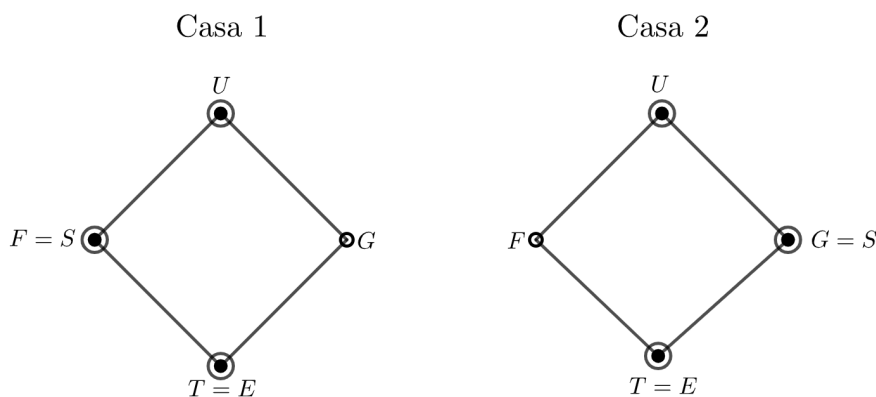
$F_0 G_0$	$F_0 G_1$	$F_0 G_2$	$F_0 G_0$	$F_0 G_2$	$F_0 G_1$
$F_1 G_2$	$F_1 G_0$	$F_1 G_1$	$F_1 G_1$	$F_1 G_0$	$F_1 G_2$
$F_2 G_1$	$F_2 G_2$	$F_2 G_0$	$F_2 G_2$	$F_2 G_1$	$F_2 G_0$
S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6

Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

Note que não há diferença entre diagramas de Hasse combinados para os itens b) e d), (figuras 2.37 e 2.39).

Para o item d), considere que cada casa é um experimento que pode ser analisado separadamente. Nesse caso, os efeitos principais podem ser melhor estimados. Entretanto, a interação não pode ser estimada, pois em cada casa não há repetição dos tratamentos e ela deve ser considerada resíduo. Sob essas considerações, na casa 1, F e salas definem a mesma partição e o efeito principal de G é melhor estimado. Na casa 2, G e salas definem a mesma partição e o efeito principal de F é melhor estimado, conforme figura 2.41.

Figura 2.41 – Diagramas de Hasse combinado para o exemplo 2.7.5, item d), considerando que cada casa é um experimento distinto.



Fonte: Da autora (2024).

2.8 Grafos em teoria dos delineamentos

"Um grafo G é um conjunto finito de pontos denominados vértices, sendo que alguns pares desses vértices estão conectados por arestas. Vamos permitir que dois vértices possam estar ligados por mais de uma aresta" (Bailey, 2004, p. 7).

O número de arestas que incidem em um vértice é denominado grau do vértice. Se todos os vértices possuem o mesmo grau, o grafo é dito regular. Se todos os vértices possuem grau igual a $n - 1$, para n vértices, o grafo é dito completo. Um grafo é conexo se dois pares quaisquer de vértices estão conectados por uma sequência de arestas (caminho).

2.8.1 Esquemas de associação e grafos

Um esquema de associação em um conjunto Ω com s classes associadas pode ser definido em termos da teoria dos grafos como segue.

Definição 2.8.1. (Bailey, 2004, p. 7) Um esquema de associação com s classes associadas em um conjunto finito Ω é um arranjo (ou coloração) de arestas, por s cores, do grafo completo com vértices em Ω tal que:

- a) para todo i, j, \dots, k em $\{1, 2, \dots, s\}$ existem inteiros p_{ij}^k tais que se $\{\alpha, \beta\}$ é uma aresta na cor k , então

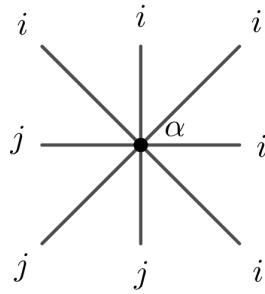
$$p_{ij}^k = |\{\gamma \in \Omega, \{\alpha, \gamma\} \text{ possui cor } i \text{ e } \{\gamma, \beta\} \text{ possui cor } j\}|;$$

- b) cada cor é usada pelo menos uma vez;
- c) existem inteiros a_i para i em $\{1, 2, \dots, s\}$ tais que cada vértice está contido em exatamente a_i arestas de cor i .

Observe que $\Omega \times \Omega$ pode ser identificado como um conjunto de arestas dos grafo completo e $\mathfrak{C}_l \subset \Omega \times \Omega$ com o conjunto das arestas na cor l e $\mathfrak{C}_0 = \{(\theta, \theta), \theta \in \Omega\}$ com o conjunto de vértices. Observe também que a cardinalidade dos vértices que são i -associadas ao vértice α é igual ao número de arestas na cor i que incidem em α (figura 2.42).

$$a_i = \mathfrak{C}_i(\alpha) = |\{\beta, (\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_i\}|.$$

Figura 2.42 – $a_i = 5$.



Fonte: Da autora (2024).

Por definição, $p_{ij}^k = p_{ji}^k$, pois para $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_k$

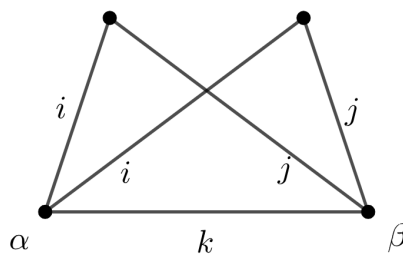
$$p_{ij}^k = |\{\gamma, (\alpha, \gamma) \in \mathfrak{C}_i, (\gamma, \beta) \in \mathfrak{C}_j\}|,$$

note que p_{ij}^k não depende do par (α, β) , logo, como $(\beta, \gamma) \in \mathfrak{C}_k$,

$$p_{ji}^k = |\{\gamma, (\beta, \gamma) \in \mathfrak{C}_j, (\gamma, \alpha) \in \mathfrak{C}_i\}| = p_{ij}^k.$$

Para $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{C}_k$, $p_{ij}^k = |\mathfrak{C}_i(\alpha) \cap \mathfrak{C}_j(\beta)|$ é o número de triângulos com aresta de cor i saindo de α e cor j chegando em β (figura 2.43).

Figura 2.43 – $|\mathfrak{C}_i(\alpha) \cap \mathfrak{C}_j(\beta)| = 2$.

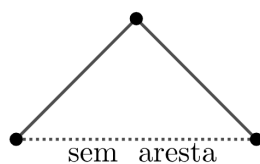


Fonte: Da autora (2024).

Definição 2.8.2. (Bailey, 2004, p. 10) Um grafo é dito fortemente regular se:

- a) é regular no sentido de que todo vértice possui o mesmo grau;
- b) toda aresta está contida no mesmo número de triângulos;
- c) toda não aresta está contida no mesmo número de configurações como na figura 2.44;
- d) não é completo.

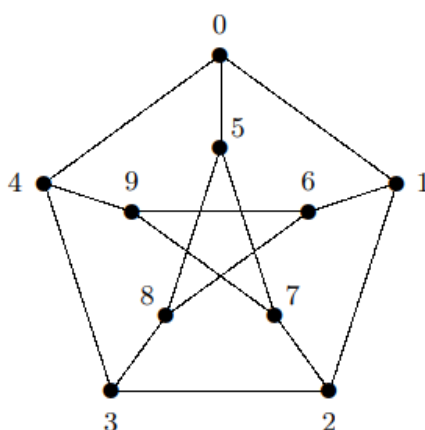
Figura 2.44 – Configuração item c).



Fonte: Adaptado de Bailey (2004).

Exemplo 2.8.1. Vamos construir um esquema de associação com duas classes utilizando grafos. Pela definição 2.8.2 estes grafos são grafos regulares em que toda aresta está contida em um mesmo número de triângulos, todo par de vértices não ligados por uma aresta estão em um mesmo número de configurações. Dado um grafo fortemente regular pinte as arestas de vermelho, complete o grafo para um grafo completo e pinte as novas arestas de azul. Tem-se então as duas classes associadas, das arestas vermelhas e das azuis. Um grafo fortemente regular muito utilizado é o grafo de Petersen, conforme figura 2.45 (apresentado também no exemplo 2.7.1).

Figura 2.45 – Grafo de Petersen



Fonte: Adaptado de Bailey (2004).

Pode-se agora utilizar a linguagem de grafos, que é bastante intuitiva, para provar resultados gerais sobre esquemas de associação. Como exemplo temos a proposição que segue, que também foi apresentada em 2.1.1 .

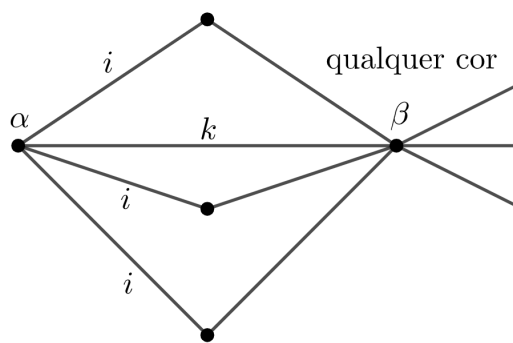
Proposição 2.8.1. Dado um esquema de associação com s classes tem-se:

- a) $\sum_{i=0}^s a_i = |\Omega|$;
- b) $\sum_j p_{ij}^k = a_i$.

Demonstração. A demonstração utiliza a caracterização de um esquema de associação como uma coloração no grafo completo:

- fixando um vértice α temos $|\Omega| - 1$ arestas saindo de α . Tem-se a_1 arestas na cor 1, a_2 arestas na cor 2, \dots , a_s na cor s . Como $a_0 = 1$ temos o resultado;
- fixe os vértices α e β tais que a aresta que liga α a β tenha cor k . Considere todas as arestas que saem de β e são adjacentes a uma aresta de α na cor i . Logo, $\sum_j p_{ij}^k = a_i$ (figura 2.46).

Figura 2.46 – Proposição 2.8.1 item ii).



Fonte: Da autora (2024).

□

2.8.2 Delineamentos e grafos

A relação entre grafos e delineamentos é obtida pela seguinte construção: o grafo de concorrência de um delineamento em blocos é um grafo no qual os vértices são os tratamentos. Se os tratamentos i e j ocorrem juntos em λ_{ij} blocos os vértices i e j estarão ligados por λ_{ij} arestas. Para delineamentos binários, λ_{ij} conta o número de blocos que i e j ocorrem juntos. Dessa forma, λ_{ij} , para $i \neq j$, é exatamente a entrada da matriz de concorrência do delineamento, $\Lambda = (\lambda_{ij})$, que deu origem ao grafo. Para delineamentos não binários o número de blocos deve ser contado de forma apropriada.

Bailey e Cameron (2011) destacam que para delineamentos em blocos de tamanho dois, o delineamento pode ser totalmente recuperado a partir de seu grafo de concorrência, uma vez que cada aresta corresponde a um bloco diferente. Se os blocos são de tamanho maior que dois várias arestas estão relacionadas a um mesmo bloco e não é possível recuperar o delineamento a partir de seu grafo. Apesar disso, o grafo de concorrência possui informações suficientes para obter propriedades relevantes sobre o delineamento.

A matriz de adjacência do grafo G , $A(G)$, é tal que $A(G) = (a_{ij})$, em que a_{ij} é o número de arestas ligando os vértices i e j para $i \neq j$ e $a_{ii} = 0$. Se G é um grafo de um delineamento então, como visto anteriormente, a matriz de concorrência, $\Lambda_{ij} = (\lambda_{ij})$ é tal que $\lambda_{ij} = a_{ij}$, para $i \neq j$. Como λ_{ii} é a replicação do tratamento i pode-se denotá-lo por r_i . Assim, tem-se a matriz $R = (r_{ii})$. Portanto,

$$A(G) = \Lambda - R$$

Em um grafo, quando existem mais de uma aresta ligando dois vértices é usual a denominação multigrafo. Vamos, no entanto, utilizar o termo grafo restringindo apenas que não existem loops, isto é, arestas ligando um vértice a si mesmo.

2.8.2.1 Matriz Laplaceana

Como o número de vértices do grafo de concorrência de um delineamento é igual ao número de tratamentos, utilizamos t para indicar o número de vértices. Dado um grafo G , a matriz Laplaceana de G , $L(G)$, é definida da forma: para $i \neq j$ a entrada (i, j) é o negativo do número de arestas ligando i a j e a entrada (i, i) é o grau do vértice i . Seja $D = (d_{ii})$ a matriz diagonal em d_{ii} é o grau do vértice i , isto é, o número de blocos em que ocorre o tratamento i . Logo,

$$L(G) = D - A(G).$$

Portanto, temos que

$$L(G) = D - A(G) = D - (\Lambda - R) = D + R - \Lambda.$$

Uma observação fundamental sobre $L(G)$ é que cada aresta entre os vértices i e j contribui com a submatriz

$$\begin{pmatrix} & i & j \\ i & 1 & -1 \\ j & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

isto é, $L(G)$ é soma de matrizes dessa forma.

Para a matriz Laplaceana de um grafo G , $L(G)$, valem as seguintes propriedades.

Proposição 2.8.2. (Bailey; Cameron, 2009 , p. 17):

- a) $L(G)$ é positiva semidefinida;
- b) se o grafo G_2 é obtido do grafo G_1 pela adição de uma aresta, então, $L(G_2) - L(G_1)$ é positiva semidefinida.

Demonstração. Seja $x \in \mathbb{R}^\Theta$:

- a) note que

$$x' L(G)x = \sum_{\text{arestas}} x' L(G)_{ij} x = \sum_{\text{arestas}} (x_j - x_i)^2 \geq 0;$$

- b) temos que

$$\begin{aligned} x'(L(G_2) - L(G_1))x &= x'L(G_2)x - x'L(G_1)x \\ &= \sum_{\text{arestas } G_2} (x_j - x_i)^2 - \sum_{\text{arestas } G_1} (x_j - x_i)^2 \\ &= (x_{j_0} - x_{i_0})^2, \end{aligned}$$

em que a nova aresta liga os vértices j_0 e i_0 . \square

Um delineamento é dito conexo se seu grafo de concorrência é conexo. Isso significa que dados dois vértices do grafo, sempre existe um caminho de arestas que os liga. Em termos de delineamentos, dados dois tratamentos i e j é possível obter uma sequência de tratamentos i_1, i_2, \dots, i_l com $i = i_1, j = i_l$, com i_s e i_{s+1} em um mesmo bloco. Dessa forma, é possível uma comparação entre os efeitos dos tratamentos i e j , apesar de ambos não ocorrerem em um mesmo bloco. A conexidade de um delineamento pode ser verificada pela matriz Laplaceana de acordo com a proposição que segue.

Proposição 2.8.3. Um grafo G é conexo se sua matriz Laplaceana tem 0 como autovalor de multiplicidade 1, isto é, $\dim(\ker(L(G))) = 1$.

Demonstração. As coordenadas de um vetor $x \in \mathbb{R}^\Theta$ são indexadas pelos vértices. Considere um vetor x com coordenadas constantes para os vértices que estão ligados entre si por uma sequência de arestas, isto é, o vetor x tem coordenadas constantes nas componentes conexas do

grafo. Para esses vetores tem-se

$$x' L(G)x = \sum_{\text{arestas}} (x_j - x_i)^2 = 0,$$

o que implica que $x \in \ker(L(G))$, de onde vem que $\dim(\ker(L(G)))$ é igual ao número de componentes conexas do grafo de concorrência. \square

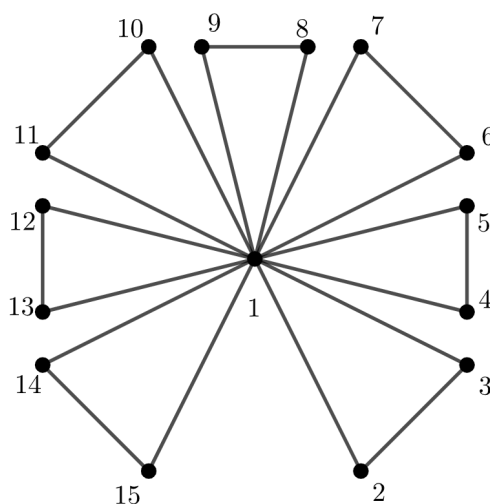
Exemplo 2.8.2. (Bailey; Cameron, 2011, p. 4 e 7) O delineamento com $t = 15$, $b = 7$ e $k = 3$ é apresentado na figura 2.47. Esse delineamento é denominado queen-bee, isso porque o tratamento 1 ocorre em todos os blocos. Seu grafo de concorrência é mostrado na figura 2.48.

Figura 2.47 – Blocos do exemplo 2.8.2.

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

Fonte: Adaptado de Bailey e Cameron (2011).

Figura 2.48 – Grafo de concorrência do exemplo 2.8.2.



Fonte: Adaptado de Bailey (2011).

O grafo apresentado na figura 2.48 também é solução de um problema clássico em teoria dos grafos, denominado Teorema da Amizade, veja (SPURI, CHAVES, 2022).

A matriz Laplaceana, $L(G)$, desse delineamento pode ser obtida através de seu grafo de concorrência como segue

$$L(G) = D - A(G) = \begin{pmatrix} 14 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

2.8.2.2 Relação entre a matriz de Laplaceana e a matriz de informação

Vejamos agora as relações entre a matriz de Laplace e matriz de informação no contexto de delineamentos. Já vimos que a matriz Laplaceana de um grafo G é dada por $L(G) = D - A(G)$, e que a matriz de adjacência é dada por $A(G) = \Lambda - R$. Note que d_{ii} é o grau do vértice i e $A(G) = (a_{ij})$ é o número de arestas que liga o vértice i ao vértice j . Note também que $A(G) = (a_{ii}) = 0$, pois não existe aresta que liga o tratamento i a ele mesmo.

Para delineamentos com uma estrutura de blocagem temos que $\mathfrak{F} = \{E, B, U\}$, com matriz de relação dada por

$$R_B(\alpha, \beta) = \begin{cases} 1, & \text{se } (\alpha, \beta) \text{ estão no mesmo bloco} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

e a matriz de concorrência dada por

$$\Lambda_B = X' R_B X \Rightarrow$$

$$\Lambda_B(i, j) = |\{(\alpha, \beta) \in \Omega \times \Omega; \alpha \text{ e } \beta \text{ estão no mesmo bloco e } \psi(\alpha) = i, \psi(\beta) = j\}|,$$

que é exatamente o número de arestas (contados de forma adequada para o caso do delineamento não binário) que contém os vértices i e j . Portanto, a matriz de concorrência Λ_B é igual à matriz

de adjacência $A(G)$ fora da diagonal, isto é,

$$\Lambda_B - \begin{pmatrix} r_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & r_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & r_t \end{pmatrix} = \Lambda_B - R = A(G).$$

Se Q_E é a projeção no stratum W_E , temos então que a matriz de informação é $L_E = X'Q_EX$. Já provamos que

$$\begin{aligned} L_E &= \sum_{F \in \mathfrak{F}} \mu(E, F) \frac{1}{k_F} \Lambda_F \\ &= \sum_{F \in \{E, B, U\}} \mu(E, F) \frac{1}{k_F} \Lambda_F \\ &= \frac{1}{k_E} \mu(E, E) \Lambda_E + \frac{1}{k_B} \mu(E, B) \Lambda_B + \frac{1}{k_U} \mu(E, U) \Lambda_U \\ &= 1 \mu(E, E) \Lambda_E + \frac{1}{k_B} \mu(E, B) \Lambda_B + \frac{1}{n} \mu(E, U) \Lambda_U \\ &= R - \frac{1}{k_B} \Lambda_B. \end{aligned}$$

A notação acima para as matrizes de informação e concorrência foi utilizada na seção 2.7. Aqui continuamos denotando L_E por L , Λ_B por Λ e também k_B por k .

As considerações acima expostas resultam na seguinte proposição.

Proposição 2.8.4. (Bailey; Cameron, 2009, p. 16) Se um delineamento em blocos tem o tamanho dos blocos constantes k (mas não é necessariamente binário), então sua matriz de informação L é obtida dividindo a matriz de Laplace do grafo de concorrência por k .

Demonstração. Devemos mostrar que $\frac{L(G)}{k} = L$. Para tanto, considere primeiramente os elementos fora da diagonal de $\frac{L(G)}{k}$, ou seja,

$$\begin{aligned} \left(\frac{L(G)}{k} \right)_{ij} &= \frac{D_{ij} - A(G)_{ij}}{k} = 0 - \frac{A(G)_{ij}}{k} \\ &= -\frac{\Lambda_{ij}}{k} = R_{ij} - \frac{1}{k} \Lambda_{ij} = L_{ij} \end{aligned}$$

Agora considere os elementos da diagonal de $\frac{L(G)}{k}$, ou seja,

$$\left(\frac{L(G)}{k}\right)_{ii} = \frac{D_{ii} - A(G)_{ii}}{k} = \frac{D_{ii} - 0}{k} = \frac{D_{ii}}{k}$$

em que D_{ii} é o grau do vértice i . Se λ_{ij} é o número de blocos, contados com multiplicidade, que contém i e j , então teremos λ_{ij} arestas ligando os vértices i e j . Mas, λ_{ij} é obtido por

$$n_{is}n_{js},$$

em que n_{is} é o número de vezes que i aparece no bloco s e n_{js} é o número de vezes que j aparece no bloco s , isto é entradas da matriz de incidência N . Esse produto conta o número de ocorrências do par i, j no bloco s . Somando os blocos, obtemos

$$\lambda_{ij} = \sum_{s=1}^b n_{is}n_{js},$$

que é a quantidade de arestas que ligam i a j . O total de arestas que saem de i é a soma de λ_{ij} para todo $j \neq i$. Assim,

$$\begin{aligned} d_{ii} = D_{ii} &= \sum_{j \neq i} \lambda_{ij} = \sum_{j \neq i} \sum_{s=1}^b n_{is}n_{js} = \sum_{s=1}^b \sum_{j \neq i} n_{is}n_{js} = \sum_{s=1}^b n_{is} \sum_{j \neq i} n_{js} \\ &= \sum_{s=1}^b n_{is}(k - n_{is}) = k \sum_{s=1}^b n_{is} - \sum_{s=1}^b n_{is}^2 = kR_{ii} - \Lambda_{ii}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\left(\frac{L(G)}{k}\right)_{ii} = \frac{kR_{ii} - \Lambda_{ii}}{k} = R_{ii} - \frac{1}{k}\Lambda_{ii} = L_{ii}.$$

Portanto, $\frac{L(G)}{k} = L$. \square

A matriz de informação L possui uma importante propriedade.

Proposição 2.8.5. As somas dos elementos das linhas e das colunas da matriz L são nulas.

Demonstração. Vejamos primeiro a soma dos elementos das linhas da matriz de concorrência Λ . Seja n_{is} uma entrada da matriz de incidência, N ,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^t \lambda_{ij} &= \lambda_{ii} + \sum_{j \neq i} \lambda_{ij} = \sum_{s=1}^b n_{is}^2 + \sum_{j \neq i} \sum_{s=1}^b n_{is} n_{js} \\ &= \sum_{s=1}^b n_{is}^2 + \sum_{s=1}^b \sum_{j \neq i} n_{is} n_{js} = \sum_{s=1}^b n_{is}^2 + \sum_{s=1}^b n_{is} \left(\sum_{j \neq i} n_{js} \right) \\ &= \sum_{s=1}^b n_{is}^2 + \sum_{s=1}^b n_{is} (k - n_{is}) = \sum_{s=1}^b n_{is}^2 + k \sum_{s=1}^b n_{is} - \sum_{s=1}^b n_{is}^2 \\ &= k \sum_{s=1}^b n_{is} = kn_{ii}. \end{aligned}$$

Vejamos agora a soma dos elementos das linhas de L . Seja l_{ij} uma entrada da matriz de informação, L

$$\sum_{j=1}^t l_{ij} = \sum_{j=1}^t \left(r_{ij} - \frac{1}{k} \lambda_{ij} \right) = r_i - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^t \lambda_{ij} = n_{ii} - \frac{1}{k} kn_{ii} = 0.$$

Como a matriz L é simétrica, segue que a soma dos elementos da coluna também é nula. \square

Outra demonstração para a proposição 2.8.5 segue considerando os casos binários e não binários.

Demonstração. Seja l_{ij} uma entrada da matriz de informação, L , e λ_{ij} uma entrada da matriz de concorrência, Λ . Primeiramente, para o caso binário, como λ_{ij} conta em quantos blocos os tratamentos i e j ocorreram juntos, se o tratamento i ocorre em r_i blocos, em cada um dos blocos temos $k - 1$ tratamentos, logo,

$$\sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^t \lambda_{ij} = r_i(k - 1) \quad \text{e} \quad \sum_{j=1}^t \lambda_{ij} = r_i(k - 1) + r_i = kr_i,$$

e, portanto,

$$\sum_{j=1}^t l_{ij} = r_i - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^t \lambda_{ij} = r_i - \frac{1}{k} (kr_i) = 0.$$

Seja agora n_{is} uma entrada da matriz de incidência, N . Assim, para o caso não binário, o resultado segue de forma semelhante, uma vez que,

$$r_i = \sum_{j=1}^b n_{ij},$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^t l_{ij} &= r_i - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^t \lambda_{ij} = r_i - \frac{1}{k} \left(\sum_{j=1}^t \sum_{s=1}^b n_{is} n_{js} \right) \\ &= r_i - \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b n_{is} \left(\sum_{j=1}^t n_{js} \right) = r_i - \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b n_{is} k \\ &= r_i - \frac{1}{k} r_i k = 0. \quad \square \end{aligned}$$

Segue da proposição 2.8.5 que a matriz $L(G)$ também tem somas linha e coluna nulas. A demonstração é dada a seguir.

Demonstração. A soma dos elementos das linhas de $L(G)$ é dada por

$$\begin{aligned} &= \sum_{j=1}^t (L(G))_{ij} = \sum_{j=1}^t (D - A(G))_{ij} = \sum_{j=1}^t D_{ij} - \sum_{j=1}^t (A(G))_{ij} \\ &= d_{ii} - \sum_{j=1}^t \lambda_{ij} = d_{ii} - d_{ii} = 0, \end{aligned}$$

pois λ_{ij} é o número de arestas que saem do vértice i até j , sempre que o tratamento j estiver em um mesmo bloco que i e somando em j tem-se todas as arestas que saem de i e, portanto, é o grau de i . \square

O estudo dos autovalores da matriz Laplaceana é uma ferramenta importante em teoria dos grafos e, portanto, em teoria dos delineamentos.

2.8.3 Otimalidade de delineamentos e grafos

Ao planejar um experimento, em geral, tem-se as principais questões para as quais se deseja respostas. Nesse sentido, o delineamento deve ser adequado para que as análises produzam conclusões confiáveis. Entre os vários modelos que podem ser utilizados, é razoável a procura por aqueles que apresentem vantagens em relação a outros. Tais vantagens são avaliadas por

critérios de otimalidade. Tem-se então uma ampla teoria que propõe definir em que sentido um delineamento é ótimo, os critérios de otimalidade e a obtenção destes.

A teoria dos delineamentos ótimos ultrapassa o escopo deste trabalho, serão apresentadas nesta seção as definições básicas de otimalidade e algumas relações entre delineamentos ótimos e grafos. As referências desta seção são Bailey e Cameron (2009, 2011).

Critério A-ótimo

Vimos na definição 2.4.3, quais são os fatores de eficiência canônicos. Ao tomar a média desses fatores de eficiência canônicos tem-se

$$\begin{aligned} \sum \text{fatores de eficiência canônicos} &= \frac{1}{r} \sum \text{autovalores de } L \\ &= \frac{1}{r} \text{traço}(L) = \frac{1}{r} \left(rt - \frac{rt}{k} \right) = \frac{t(k-1)}{k}. \end{aligned}$$

Note que essa média não depende dos efeitos dos tratamentos e não há como distinguir entre delineamentos com os mesmos valores t e k . Portanto, não se pode utilizar essa média como um critério.

Como um dos objetivos principais de um experimento é comparar tratamentos, é razoável utilizar a variância de um contraste simples para os tratamentos (θ, η) . Como mencionado no teorema 2.5.1, esta variância é dada por

$$\text{Var} \left(\widehat{\tau(\theta) - \tau(\eta)} \right) = (L^-(\theta, \theta) - L^-(\theta, \eta) - L^-(\eta, \theta) + L^-(\eta, \eta)) \sigma^2.$$

A ideia é então tomar a média das variâncias de todos os estimadores dos contrastes simples entre os tratamentos. Como temos um número de pares (θ, η) igual a $t(t-1)$, vamos somar as variâncias dos estimadores $\widehat{\tau(\theta) - \tau(\eta)}$ e dividir por $t(t-1)$. Fixando θ e variando η temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma^2} \sum_{\eta \neq \theta} \text{Var}(\widehat{\tau(\theta) - \tau(\eta)}) &= \sum_{\eta \neq \theta} (L^-(\theta, \theta) + L^-(\eta, \eta) - L^-(\theta, \eta) - L^-(\eta, \theta)) \\ &= (t-1)L^-(\theta, \theta) + \text{traço}(L^-) - L^-(\theta, \theta) - 2 \sum_{\eta \neq \theta} L^-(\theta, \eta) \\ &= tL^-(\theta, \theta) + \text{traço}(L^-) - 2L^-(\theta, \theta) + 2L^-(\theta, \theta) \\ &= tL^-(\theta, \theta) + \text{traço}(L^-), \end{aligned}$$

observando que L^- tem soma linha nula (proposição 2.8.5) e somando em η tem-se que

$$\sum_{\eta \neq \theta} L^-(\theta, \eta) = L^-(\theta, \theta).$$

Agora somando em θ obtemos

$$\sum_{\theta} (tL^-(\theta, \theta) + \text{traço}(L^-)) = t \text{traço}(L^-) + t \text{traço}(L^-) = 2t \text{traço}(L^-).$$

Portanto, a média das variâncias dos contrastes simples é dada por

$$\frac{2t}{t(t-1)} \text{traço}(L^-) \sigma^2 = \frac{2 \text{traço}(L^-)}{t-1} \sigma^2.$$

Seja c_1, c_2, \dots, c_{t-1} os autovalores não nulos de L , então

$$\text{traço}(L^-) = \frac{1}{c_1} + \frac{1}{c_2} + \dots + \frac{1}{c_{t-1}},$$

e assim a variância média de um contraste básico é

$$\bar{V} = \frac{2\sigma^2}{t-1} \left(\frac{1}{c_1} + \frac{1}{c_2} + \dots + \frac{1}{c_{t-1}} \right) = 2\sigma^2 \frac{1}{\text{média harmônica de } c_1, c_2, \dots, c_{t-1}},$$

em que a média harmônica é

$$\frac{t-1}{\frac{1}{c_1} + \frac{1}{c_2} + \dots + \frac{1}{c_{t-1}}}.$$

Dizemos que um delineamento é A-ótimo se ele minimiza \bar{V} , isto é, possui a maior média harmônica entre seus concorrentes.

Critério D-ótimo

Estimativas para diferenças de efeitos de tratamentos geralmente apresentam intervalos de confiança. Quanto menor o intervalo, melhores são as estimativas. O intervalo de confiança é proporcional à variância do estimador, supondo que os dados possuem distribuição normal. Portanto, minimizar a variância é o mesmo que minimizar o intervalo de confiança. Bailey e Cameron (2009).

Vamos considerar o subespaço correspondente a variância dos estimadores, ou seja, o stratum dos resíduos. Seja Q o projetor neste stratum. Como $\text{Var}(Y) = \sigma^2 I_\Omega$, os valores de Y percorrem uma nuvem esférica centrada em $E(Y) = X\tau$. Projetando Y , ou seja, obtendo QY obtemos também uma esfera centrada em $X\tau$. Aplicando X' obtemos

$$\text{Var}(X'QY) = X'Q \text{Var}(Y)(X'Q)' = X'Q(\sigma^2 I_\Omega)QX = \sigma^2 X'QX = \sigma^2 L.$$

Vimos no teorema 2.4.1 que estimativas de $x'\tau$ são obtidas da forma $z'X'QY$ com $Lz = x$. Quando QY "percorre" a esfera centrada em $x'\tau$, o vetor $X'QY$ "percorre" um elipsóide. O volume desse elipsóide é proporcional ao determinante de L , quando restrito ao subespaço $(\ker(L))^\perp$, isto é, proporcional ao inverso do produto dos autovalores não nulos de L , ou seja, $\prod_{i=1}^{t-1} c_i$. Nesse sentido, um delineamento é dito D-ótimo se minimiza o volume do elipsóide, ou se ele maximiza a média geométrica de c_1, c_2, \dots, c_{t-1} . Note que D significa determinante.

O critério D-ótimo é adequado quando os tratamentos são combinações de quantidades diferentes. Como as escalas para diferentes variáveis podem não ser compatíveis pode ser adequado usar uma reparametrização. Sendo assim, se faz necessário um critério que seja invariante para a repametrização do modelo. Entretanto, quando os tratamentos são qualitativos o critério A-ótimo parece mais natural.

Critério E-ótimo

Outro critério de otimalidade é aquele em que a preocupação do usuário é controlar o pior caso, no sentido que a maior variância entre os estimadores dos contrastes simples seja a menor possível.

Para tanto, posicionando os autovalores de L em ordem crescente $c_1 \leq c_2 \leq \dots \leq c_{t-1}$, o menor valor será $\frac{x}{c_1}$, logo, devemos ter o menor autovalor sendo o maior possível.

Se x é tal que $x'x = 1$ e $x = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots, \alpha_{t-1} x_{t-1}$ com $L(x_i) = c_i x_i$ tem-se que

$$\text{Var}(\widehat{x'\tau}) = \frac{\alpha_1^2}{c_1} + \frac{\alpha_2^2}{c_2} + \dots + \frac{\alpha_{t-1}^2}{c_{t-1}} \leq \frac{\alpha_1^2}{c_1} + \frac{\alpha_2^2}{c_1} + \dots + \frac{\alpha_{t-1}^2}{c_1} = \frac{1}{c_1}.$$

Logo, maximizando c_1 temos uma menor variância. Um delineamento é dito E-ótimo (E de extremo) se maximiza o menor autovalor de L .

2.8.4 Variância balanceada

Se a matriz de informação L de um delineamento for completamente simétrica, ou seja, tem entradas diagonais iguais e fora da diagonal com valores iguais, então a variância entre contrastes simples é

$$\begin{aligned}\text{Var}(\widehat{\tau(\theta)} - \widehat{\tau(\eta)}) &= (L^{-}(\theta, \theta) - L^{-}(\theta, \eta) - L^{-}(\eta, \theta) + L^{-}(\eta, \eta))\sigma^2 \\ &= (2L^{-}(\theta, \theta) - 2L^{-}(\theta, \eta))\sigma^2,\end{aligned}$$

para todo par (θ, η) a variância é constante, isto é, todos os contrastes simples apresentam a mesma variância. Neste caso, o delineamento é denominado com variância balanceada, VB.

Considere uma classe particular, $\mathfrak{D}(t, b, k)$, de delineamentos com valores t , b e k . Em termos gerais o Teorema de Kiefer, veja (1975 apud Kiefer, Bailey; Cameron, 2009, p. 14), nos garante que se em $\mathfrak{D}(t, b, k)$ existe um delineamento com matriz de informação L completamente simétrica e que tenha traço máximo em relação a todos os delineamentos em $\mathfrak{D}(t, b, k)$, então esse delineamento é ótimo em relação aos critérios A, E e D. Em particular, se na classe $\mathfrak{D}(t, b, k)$ existe um BIBD ele é A, E e D ótimo. Este é um resultado esperado pelos estatísticos em razão da simetria dos BIBDs.

O teorema de Kiefer justifica a importância dos delineamentos VB e algumas de suas propriedades são apresentadas a seguir.

Em um delineamento VB a matriz de informação $L = R - \frac{1}{k}\Lambda$ é completamente simétrica. Sabemos que $\frac{L(G)}{k} = L$, com $L(G) = D - A(G)$. Lembre-se que $A(G)$ tem zeros na diagonal, logo, D deve ser constante. Vimos também que

$$L_{ii} = R_{ii} - \frac{1}{k}\Lambda_{ii} = R_{ii} - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^b n_{is}n_{js}.$$

No caso em que L é completamente simétrica não se pode deduzir que o delineamento é equireplicado, isto é, que R possui diagonal constante.

Dado um delineamento em $\mathfrak{D}(t, b, k)$ com VB, vamos considerar a divisão de bk por t . Podemos definir r como o quociente dessa divisão e p como o resto. Como $bk = tr + p$, o que implica em $p = bk - tr$, com $0 \leq p < t - 1$. Frequentemente utiliza-se a notação para divisão

em inteiros

$$r = \left\lfloor \frac{bk}{t} \right\rfloor,$$

que significa o menor inteiro. Bailey e Cameron (2009) apresentam o resultado que segue.

Proposição 2.8.6. Se um delineamento possui variância balanceada, seu traço é máximo se a seguinte igualdade for satisfeita

$$r(k-1) = (t-1)\lambda.$$

Demonstração. Note que bk é o número de parcelas e temos a seguinte desigualdade

$$bk = rt + p < rt + t = t(r+1).$$

Assim todos os tratamentos não podem ser repetidos $r+1$ vezes. Portanto, alguns tratamentos são repetidos no máximo r vezes. Cada ocorrência desses tratamentos em um bloco implica que existem $k-1$ arestas saindo desse vértice, isto se esse tratamento aparece apenas uma vez no bloco e os outros tratamentos aparecem também apenas uma vez.

Logo, o grau de um vértice é no máximo $r(k-1)$. Mas em um delineamento VB, a matriz de informação é completamente simétrica. De modo que seu grafo de concorrência é regular de grau $(t-1)\lambda$ (considere um grafo regular aquele em que todos os vértices possuem o mesmo grau). Sabemos que a matriz de concorrência Λ é uma matriz $t \times t$, que é igual à matriz de adjacência $A(G)$ fora da diagonal, ou seja,

$$\begin{pmatrix} 0 & \lambda & \dots & \lambda \\ \lambda & 0 & \dots & \lambda \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda & \lambda & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Desse modo, a ligação do vértice i com os outros tratamentos é de λ arestas. Como temos $t-1$ tratamentos fora i , temos que saem $\lambda(t-1)$ arestas de cada vértice, isto é, o grafo é regular. Portanto, $\lambda(t-1) < r(k-1)$.

Sabemos que o traço da matriz de informação L é dado por

$$\text{traço}(L) = \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js}.$$

Como i e j aparecem juntos λ vezes,

$$\text{traço}(L) = \sum_{i \neq j} \lambda = \lambda t(t-1).$$

Portanto, o maior valor que o traço de L pode ter é

$$\text{traço}(L) = \lambda t(t-1) \leq t\lambda(k-1).$$

Logo, o traço é máximo se $\lambda(t-1) = r(k-1)$. \square

Uma propriedade dos delineamentos VB de traço máximo é que todo tratamento está em pelo menos r blocos (contados com multiplicidade). De fato, suponha um tratamento i que esteja em $\tilde{r} < r$ blocos. O número máximo de arestas que saem desse vértice é $\tilde{r}(k-1)$. Porém, o grafo desse delineamento é regular e o grau de qualquer vértice é $\lambda(t-1)$. Logo, $\lambda(t-1) \leq \tilde{r}(k-1)$. Entretanto, $\lambda(t-1) = r(k-1)$, de onde vem que $r(k-1) \leq \tilde{r}(k-1)$, o que é um absurdo, pois $\tilde{r} < r$. Portanto, todo tratamento está em pelo menos r blocos. Temos também que se um tratamento está em exatamente r blocos ele ocorre apenas uma vez em cada um desses blocos. De fato, pois se ele ocorresse, por exemplo, duas vezes em um mesmo bloco, o número de arestas definidas pelos vértices desse bloco seria igual a $k-2$, e o número total de arestas nesse vértice seria igual a $r(k-2)$, violando a igualdade.

Vejamos agora o que acontece com os tratamentos que estão em mais do que r blocos, por exemplo, um vértice que está em $r+1$ blocos. Nesse caso, o tratamento deve repetir duas vezes em um desses blocos. A seguir prova-se que o número de tratamentos que se repetem em blocos é no máximo igual a p .

O número total de parcelas é $bk = rt + p$, com $0 \leq p \leq t$. Como observado anteriormente esses tratamentos ocorrem em mais que r blocos e, portanto, são aplicados a $r+1$ ou mais parcelas. rt conta todas as parcelas que receberam os tratamentos replicados r vezes. Temos então o restante de p parcelas que receberam os tratamentos que foram replicados mais que r vezes. Portanto, o número máximo desses tratamentos é igual a p . O máximo de p ocorre se exatamente p tratamentos possuem uma replicação a mais em algum bloco.

Proposição 2.8.7. (Bailey; Cameron, 2009, p. 8) Um delineamento com t tratamentos e b blocos de tamanho k maximiza o traço de L (entre todos os delineamentos) se, e somente se, cada tratamento ocorre $\lfloor \frac{k}{t} \rfloor$ ou $\lceil \frac{k}{t} \rceil$ vezes em cada bloco. Em particular, se $k < t$, o traço de L é maximizado pelos delineamentos binários, o valor máximo é $b(k-1)$.

Demonstração. Seja N a matriz de incidência do delineamento, para $i = 1, \dots, t$ e $s = 1, \dots, b$, em que n_{is} é o número de vezes que o tratamento i aparece no bloco s . A matriz de concorrência é tal que $\Lambda = NN'$, em que λ_{ij} é o número de vezes em que os tratamentos i e j aparecem juntos nas classes do bloco contados com multiplicidade (produto das repetições na mesma classe). Agora note que

$$\lambda_{ii} = \sum_{s=1}^b n_{is}n_{is} = \sum_{s=1}^b n_{is}^2 \text{ e}$$

$$\text{traço}(\Lambda) = \sum_{i=1}^t \lambda_{ii} = \sum_{i=1}^t \sum_{s=1}^b n_{is}^2.$$

Considere agora a matriz de informação $L = R - \frac{1}{k}\Lambda$, temos que

$$\begin{aligned} \text{traço}(L) &= \sum_{i=1}^t \left(R_{ii} - \frac{1}{k}\Lambda_{ii} \right) = \sum_{i=1}^t r_{ii} - \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b n_{is}^2 \\ &= \sum_{i=1}^t r_{ii} - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^t \sum_{s=1}^b n_{is}^2 = \sum_{i=1}^t r_{ii} - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^t \sum_{s=1}^b n_{is}^2. \end{aligned}$$

Mas $\sum_{i=1}^t n_{is}^2$ é a soma de todos os tratamentos contados com multiplicidade que ocorrem no bloco s . Logo, essa soma resulta em k , ou seja,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^t n_{is} &= k \Rightarrow \left(\sum_{i=1}^t n_{is} \right)^2 = k^2 \Rightarrow \\ \sum_{i=1}^t n_{is}^2 + \sum_{i \neq j} n_{is}n_{js} &= k^2 \Rightarrow \\ \sum_{i=1}^t n_{is}^2 &= k^2 - \sum_{i \neq j} n_{is}n_{js}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\text{traço}(L) = \sum_{i=1}^t r_{ii} - \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b \left(k^2 - \sum_{i \neq j} n_{is}n_{js} \right).$$

Mas, $\sum_{i=1}^t r_{ii} = bk$, que é o total de parcelas. Portanto,

$$\begin{aligned} \text{traço}(L) &= bk - \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b k^2 + \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js} = bk - \frac{1}{k} k^2 b + \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js} \\ &= \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js} = \frac{1}{k} \sum_{i \neq j} \sum_{s=1}^b n_{is} n_{js} = \frac{1}{k} \sum_{i \neq j} \lambda_{ij}, \end{aligned}$$

que é a soma dos elementos fora da diagonal de Λ .

Fixado t , b e k queremos obter a matriz L de maior traço. Temos aqui um problema de máximo condicionado que será resolvido utilizando o multiplicador de Lagrange. Vamos maximizar o traço de L , restrito a $\sum_{i=1}^t n_{is} = k$, com $s = 1, \dots, b$, ou seja,

$$\max \sum_{i \neq j} \frac{\lambda_{ij}}{k} = \max \sum_{i \neq j} \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b n_{is} n_{js} = \max \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js},$$

com a restrição $\sum_{s=1}^b n_{is} = k$. Temos uma soma com b termos positivos restritos a b condições independentes. Então, é possível maximizar cada uma delas individualmente, ou seja,

$$\max \frac{1}{k} \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js}, \text{ com a restrição } \sum_{i=1}^t n_{is} = k \text{ para cada } s.$$

A Lagrangeana é dada por

$$L = \frac{1}{k} \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js} - \lambda \left(\sum_{i=1}^t n_{is} - k \right) \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial n_{is}} = \frac{1}{k} \sum_{i \neq j} n_{js} - \lambda.$$

Igualando a derivada a zero tem-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \sum_{i \neq j} n_{js} - \lambda &= 0 \Rightarrow \frac{1}{k} (k - n_{is}) - \lambda = 0 \Rightarrow \\ 1 - \frac{n_{is}}{k} &= \lambda \Rightarrow n_{is} = k(-\lambda + 1). \end{aligned}$$

Logo, os n_{is} são os mesmos para todo bloco s e para todo tratamento i . Como eles têm que ser inferiores a $\sum_{i=1}^t n_{is} = k$, então $n_{is} = \lfloor \frac{k}{t} \rfloor$ ou $\lceil \frac{k}{t} \rceil$.

Para o caso que $k < b$ o traço de L é constante e é maximizado pelos delineamentos binários. Resta provar que o valor máximo é $b(k-1)$. Como vimos,

$$\text{traço}(L) = \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js}.$$

Para o caso binário $n_{is} = 0$ ou 1 e $n_{js} = 0$ ou 1 . Fixado o bloco s , se i pertence a este bloco temos $n_{is} = 1$, de modo análogo, se j pertence a este bloco $n_{js} = 1$. Assim, $n_{is} n_{js} = 1$. Se temos $k-1$ tratamentos j no bloco s diferentes de i , então, temos $k-1$ termos em que $n_{is} n_{js} = 1$. Na soma $\sum_{i \neq j} n_{is} n_{js}$ temos $k(k-1)$ pares. Agora, se i e j estão no bloco s , $n_{is} n_{js} = 1$. Logo, a soma tem valor $k(k-1)$ e

$$\text{traço}(L) = \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b \sum_{i \neq j} n_{is} n_{js} = \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b k(k-1) = \frac{bk(k-1)}{k} = b(k-1). \quad \square$$

Para os delineamentos em blocos completos temos $k = t$ e $n_{is} = 1$ para todo i . Assim temos que

$$L = \begin{pmatrix} b & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & b \end{pmatrix} - \frac{1}{k} \begin{pmatrix} b & \dots & b \\ \dots & \dots & \dots \\ b & \dots & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 - \frac{1}{k})b & \dots & -b \\ \dots & \dots & \dots \\ -b & \dots & (1 - \frac{1}{k})b \end{pmatrix},$$

portanto, $\text{traço}(L) = t(1 - \frac{1}{k})b = \frac{t(k-1)b}{k}$.

2.8.5 Autovalores da matriz Laplaceana

Os autovalores da matriz Laplaceana estão fortemente relacionados às propriedades do delineamento correspondente. Vejamos então alguns resultados relativos aos autovalores da matriz Laplaceana.

Se $0 = \mu_0 < \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_{t-1} = \mu_{\max}$, são autovalores de $L(G)$. Então, traço de $L(G)$ é

$$\text{traço}(L(G)) = \sum_{i=1}^{t-1} d_i = \sum_{i=1}^{t-1} \mu_i.$$

Como as somas dos graus dos vértices é igual a duas vezes o número de arestas do grafo (denotado por e) tem-se que

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{t-1} \mu_i &= 2e \Rightarrow \\ \frac{1}{t-1} \sum_{i=1}^{t-1} \mu_i &= \frac{1}{t-1} 2e \Rightarrow \\ \mu_1 &\leq \frac{2e}{t-1} \leq \mu_{\max}.\end{aligned}$$

Se $\Gamma(G)$ é o menor grau e $\Delta(G)$ é o maior dos vértices de um grafo G , então

$$\mu_1 \leq \frac{t\Gamma(G)}{t-1} \leq \frac{t\Delta(G)}{t-1} \leq \mu_{\max} \leq 2\Delta(G).$$

Outro parâmetro relacionado aos grafos é número isoperimétrico. Para um conjunto S de vértices, seja $\partial(S)$ o conjunto de arestas que possuem um vértice em S e o outro o complemento de S . O número isoperimétrico $i(G)$ é definido por

$$i(G) = \min \left\{ \frac{|\partial(S)|}{|S|}; S \subseteq V(G), 0 < |S| \leq \frac{t}{2} \right\},$$

em que $V(G)$ é o conjunto dos vértices de G .

De fato tem-se um resultado mais geral. Vamos definir um conjunto de arestas de corte de tamanho c como um conjunto com c arestas. Quando retiradas essas c arestas, o grafo passa a ter duas componentes conexas, isto é, dois subgrafos que não possuem arestas entre si.

Proposição 2.8.8. (Bailey; Cameron, 2009, p. 19) Seja G um grafo com um conjunto de arestas de corte de tamanho c , cuja remoção dessas c arestas separa o grafo G em duas componentes de tamanho m e n , então $\mu_1 \leq c \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right)$.

Demonstração. Seja x um vetor perpendicular ao vetor $\vec{1}$. Lembre-se que o vetor $\vec{1}$ é autovetor do autovalor 0. Tem-se o resultado de álgebra linear apresentado em Ferreira (2008) que diz que:

$$\mu_1 = \min \left\{ \frac{x' L(G) x}{x' x} : x \text{ perpendicular a } \vec{1} \right\}.$$

Seja x o vetor que assume o valor constante n nos m vértices de uma das componentes e assume o valor $-m$ nos n vértices da outra componente

$$x = \begin{pmatrix} n \\ \dots \\ n \\ -m \\ \dots \\ -m \end{pmatrix}.$$

Como x tem soma das coordenadas zero,

$$\text{soma}(x) = n + \dots + n + (-m) + \dots + (-m) = mn + n(-m) = 0,$$

ele é perpendicular ao vetor $\vec{1}$.

Como já foi visto que

$$x' L(G) x = \sum_{\text{nas arestas}} (x_i - x_j)^2,$$

logo, tem-se que

$$\begin{aligned} \mu_1 &\leq \frac{x' L(G) x}{x' x} = \frac{\sum_{\text{nas arestas}} (x_i - x_j)^2}{mn^2 + nm^2} = \frac{c(n - (-m))^2}{mn^2 + nm^2} = \frac{c(m+n)^2}{mn^2 + nm^2} \\ &= \frac{c(m+n)^2}{mn(n+m)} = \frac{c(n+m)}{mn} = c \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right). \end{aligned}$$

Portanto, $\mu_1 \leq c \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right)$. \square

Teorema 2.8.1. (Bailey; Cameron, 2009, p. 19) Seja μ_1 o segundo autovalor de Laplace de G , então $\frac{\mu_1}{2} \leq i(G)$.

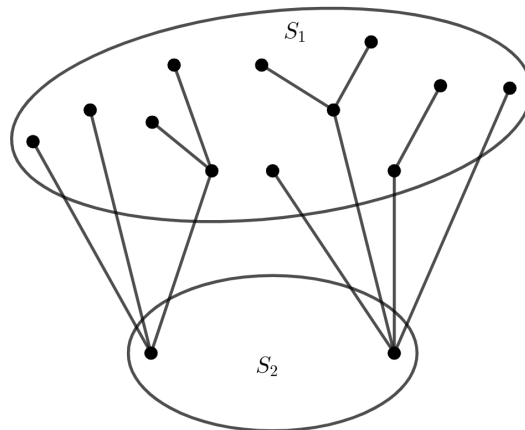
Demonstração. Se S é um conjunto de vértices que tem número isoperimétrico $i(G)$, isto é, $i(G) = \frac{\partial(S)}{|S|}$. Então, ao retirar o conjunto de arestas de corte S , ∂S fica particionado em dois componentes disjuntos do tamanho $|S| = m$ e $|V(G)| - |S| = n$. Portanto, $\partial(S)$ é um conjunto de arestas de corte de tamanho $|\partial(S)| = c$ e pela proposição 2.8.8, $\mu_1 \leq c \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right)$. Podemos supor

$m \leq n$ e, portanto,

$$\mu_1 \leq c \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right) \leq c \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{m} \right) = \frac{2c}{m} = 2i(G). \quad \square$$

Uma aplicação da proposição 2.8.8 é que dado um grafo G com t vértices, no qual para dois vértices tem-se graus arbitrários d_1 e d_2 . A retirada de todas as $d_1 + d_2$ arestas que saem desses vértices, desconecta o grafo em duas componentes S_1 e S_2 (figura 2.49), com S_2 formado pelos dois vértices e S_1 .

Figura 2.49 – Componentes conexas do grafo G .



Fonte: Da autora (2024).

Proposição 2.8.9. Nas condições descritas, $\mu_1 \leq \frac{d_1 + d_2}{2}$.

Demonstração. Considere o vetor x dado por

$$x = \begin{pmatrix} t-2 \\ t-2 \\ -2 \\ \dots \\ -2 \end{pmatrix},$$

que, de fato, possui soma zero nas coordenadas, pois,

$$\text{soma}(x) = (t-2) + (t-2) + (-2) + \dots + (-2) = 2(t-2) + (t-2)(-2) = 0.$$

Agora, note que

$$x' L(G)x = \sum_{\text{nas arestas}} (x_i - x_j)^2 = \sum_{d_1+d_2} (t-2 - (-2))^2 = \sum_{d_1+d_2} t^2 = (d_1 + d_2)t^2.$$

Portanto

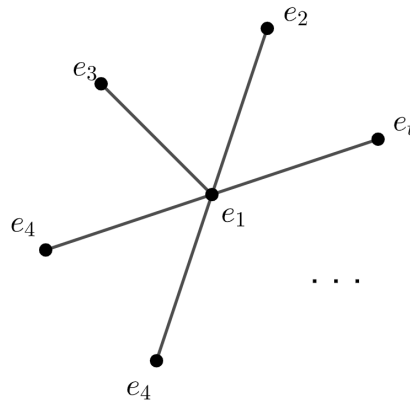
$$\begin{aligned} \mu_1 &\leq \frac{x' L(G)x}{x'x} = \frac{(d_1 + d_2)t^2}{2(t-2)^2 + (t-2)2^2} \\ &= \frac{(d_1 + d_2)t^2}{2(t^2 - 2t + 4) + (t-2)4} \\ &= \frac{(d_1 + d_2)t^2}{2t^2 - 4t + 8 + 4t - 8} \\ &= \frac{(d_1 + d_2)t^2}{2t^2} \\ &= \frac{d_1 + d_2}{2}. \quad \square \end{aligned}$$

Uma propriedade importante para o estudo da otimalidade é o fato de que se o grafo G_2 é obtido a partir do grafo G_1 pela inclusão de uma nova aresta, então $L(G_2) - L(G_1)$ é positiva semi-definida (fato demonstrado na proposição 2.8.2). Como consequência fundamental dessa propriedade, o grafo de um experimento nunca perde sua A e E otimalidade devido ao fato de se acrescentar uma aresta. Isso significa que, se em um delineamento ótimo acrescenta-se um bloco ele continua sendo ótimo. Em particular, ao acrescentar uma aresta a um grafo G_1 , obtendo G_2 , o menor autovalor de $L(G_1)$ é maior ou igual ao menor autovalor de $L(G_2)$.

Lembre-se que para $k = 2$ é possível recuperar o delineamento a partir do grafo. Nesse sentido, é possível referir-se de maneira indistinta como grafo ou delineamento.

Um grafo estrela é apresentado na figura 2.50. Desse grafo segue o resultado apresentado em Bailey e Cameron (2009).

Figura 2.50 – Grafo estrela.



Fonte: Da autora (2024).

Proposição 2.8.10. Os autovalores da Laplaceana do grafo estrela são 1 com multiplicidade $t - 2$ e t com multiplicidade 1.

Demonstração. Os autovalores da Laplaceana do grafo estrela são

$$L(G)v = \begin{pmatrix} t-1 & -1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_t \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} 0 \\ v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_t \end{pmatrix},$$

com $v_1 + v_2 + \dots + v_t = 0$. Note que este subespaço tem dimensão $t - 2$, pois

$$\begin{pmatrix} t-1 & -1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}. \square$$

3 METODOLOGIA

A Estatística, em suas várias áreas como inferência e delineamentos experimentais utiliza as mais variadas técnicas Matemáticas. Entre essas, uma das mais utilizadas é a álgebra linear. Em particular, são numerosos livros com títulos envolvendo “álgebra de matrizes em Estatística”. Entretanto, no trabalho com a álgebra matricial perde-se um pouco o aspecto geométrico. Já na perspectiva geométrica temos transformações lineares, projetores, subespaços e ortogonalidade entre subespaços.

Como mencionado, uma das áreas da Estatística é a que trata dos delineamentos experimentais. Os delineamentos experimentais referem-se aos desenhos nos quais os experimentos são conduzidos.

Como vimos no referencial teórico deste trabalho, várias estruturas podem ser consideradas quando se trata de delineamentos experimentais. A teoria matemática utilizada nos conceitos estatísticos, muitas vezes é deixada de lado. Nesse sentido, para elaboração deste trabalho, uma questão essencial foi a escolha dos materiais de estudo, visto que estes deveriam ter enfoque matemático e estatístico.

Nesse contexto, o primeiro passo para elaboração deste trabalho foi a escolha dos materiais didáticos sobre estatística experimental a serem estudados. As obras de Rosemary Bailey permitem a aproximação entre a matemática e a estatística. Sendo assim, os livros de Bailey (2004, 2008) foram estudados de forma minuciosa. Os artigos de Bailey e Cameron (2009, 2011) também foram utilizados.

Pode-se dizer que este trabalho é a continuidade de Silva (2020), no qual apresentou-se uma abordagem geométrica dos principais delineamentos experimentais e também os diagramas de Hasse. O conceito de subespaços ortogonais foi amplamente utilizado. Entretanto, assim como em Bailey (2008), os esquemas de associação não foram abordados.

Nessa perspectiva, este trabalho abordou a teoria dos esquemas de associação. Teoria que envolve conceitos matemáticos essenciais da teoria dos conjuntos, que muitas vezes não são evidenciadas na prática. Do ponto de vista de delineamentos experimentais, os esquemas de associação são totalmente aplicáveis.

Outro assunto que também foi abordado neste trabalho refere-se a teoria dos grafos. Aspectos combinatórios e matemáticos que os grafos possuem são adequados para modelar a es-

trutura dos delinamentos experimentais. Esta abordagem foi utilizada para estudar delineamentos solúveis e otimalidadede.

Nesse sentido, para elaboração deste texto, estudou-se os livros citados de forma a articular seus conteúdos, com maior enfoque nos esquemas de associação apresentados em Bailey (2004). Os livros exploram propriedades matemáticas, principalmente na construção da álgebra de Bose-Mesner.

No desenvolver dos estudos, aspectos importantes quanto a demonstrações, exemplos e toda a teoria estudada surgiram.

Dessa forma, enfatizamos que no referencial teórico deste trabalho, teoremas e proposições que são apresentados sem suas respectivas demonstrações, as mesmas podem ser encontradas nos textos citados. Já demonstrações que são apresentadas no presente trabalho são desenvolvidas de modo a deixar mais claras demonstrações já existentes e/ou apresentar demonstrações alternativas dos textos citados. A demonstração da seção 2.4.4 é inédita com a abordagem utilizada.

Sobre os exemplos apresentados no referencial teórico deste trabalho, ressaltamos que o objetivo do texto não é apenas replicar exemplos já existentes. Nesse sentido, os exemplos que são citados possuem contribuições como: diagramas de Hasse que não foram apresentados nos textos de origem ou esquemas de análise de variância que também não foram mostradas. Já exemplos que não possuem citação são de autoria própria.

Os estudos realizados nos levam aos resultados deste trabalho, que são apresentados no capítulo 4. Vale destacar que os resultados são apresentados em seções e que estas diferem entre si, uma vez que são apresentadas contribuições referentes a temas que surgem ao longo do referencial teórico.

Enfatizamos que no capítulo 4 existem definições e teoremas utilizados para fundamentar os resultados, construções e exemplos. Contudo, destacamos que as construções e exemplos não citados neste capítulo são contribuições inéditas em relação ao referencial teórico utilizado neste trabalho.

4 RESULTADOS

Apresentam-se neste capítulo os resultados deste trabalho.

4.1 Abordagem geométrica aos esquemas de associação cíclico

Bailey (2004) apresenta a construção dos esquemas de associação cíclicos utilizando teoria dos conjuntos. A construção é abstrata, algébrica e certamente pode representar dificuldade para muitos leitores. Será apresentada uma abordagem geométrica na qual acredita-se ser mais intuitiva. A ideia é utilizar retas geométricas, isto é, gráficos de funções afins em $\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t$.

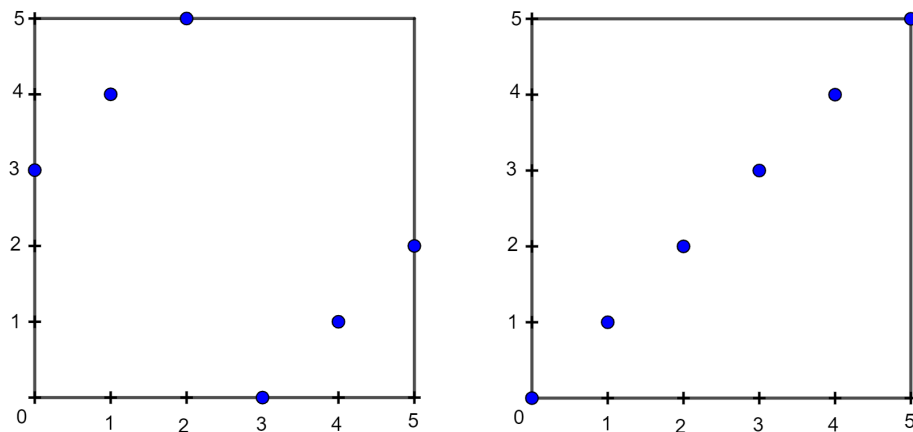
Delineamento cíclico

O gráfico da função afim $l : \mathbb{Z}_t \rightarrow \mathbb{Z}_t$, $\beta = l(\alpha) = \alpha + \omega$ é uma reta com coeficiente angular 1 e termo independente ω . O gráfico de l que denominaremos D_ω é dado por

$$D_\omega = \{(\alpha, \beta), \beta = \alpha + \omega \Rightarrow \omega = \beta - \alpha\}.$$

Por exemplo, sejam $l_1(\alpha) = \alpha + 3$ e $l_2(\alpha) = \alpha$ em $\mathbb{Z}_6 \times \mathbb{Z}_6$, seus gráficos são representados na figura 4.1.

Figura 4.1 – $l_1(\alpha) = \alpha + 3$ (à esquerda) $l_2(\alpha) = \alpha$ (à direita).



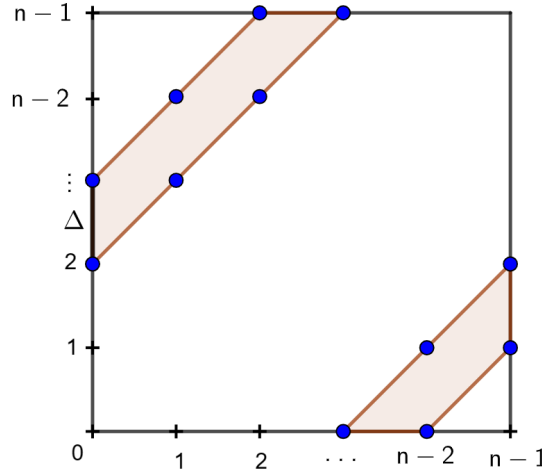
Fonte: Da autora (2024).

Seja $\Delta \subset \mathbb{Z}_t$, vamos definir o subconjunto de $\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t$ dado por

$$D_\Delta = \{(\alpha, \beta), \omega = \beta - \alpha, \omega \in \Delta\}.$$

D_Δ é então formado por um feixe de retas com termos independentes em Δ (figura 4.2).

Figura 4.2 – D_Δ .



Fonte: Da autora (2024).

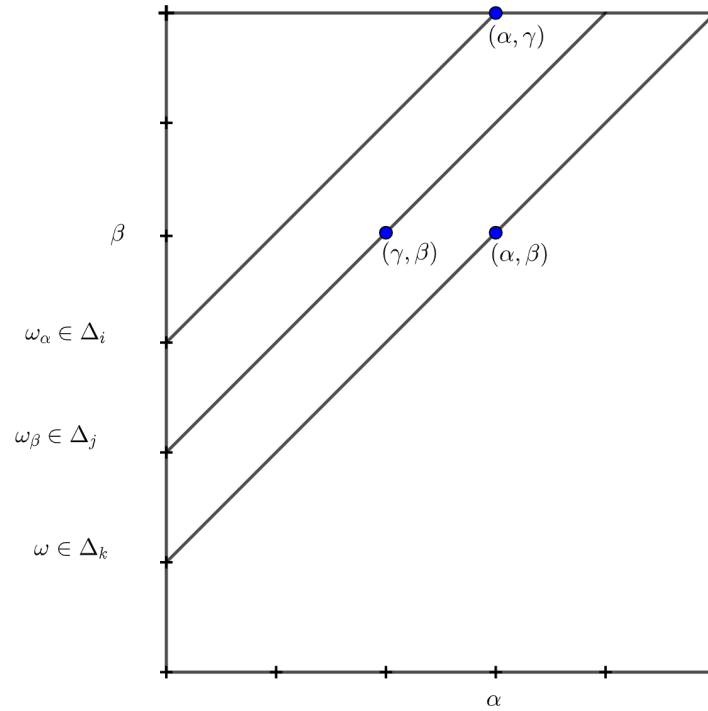
Se $\Delta = -\Delta$, isto é, se $\omega \in \Delta$, então, $-\omega \in \Delta$, temos que D_Δ é um subconjunto simétrico em relação a diagonal de $\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t$. De fato, se $(\alpha, \beta) \in D_\Delta$, temos que $\omega = \beta - \alpha$ com $\omega \in \Delta$. De onde vem que $-\omega = -\beta + \alpha$, e como $-\omega \in \Delta$, segue que $(\alpha, -\beta) \in D_\Delta$.

Se $\Delta_1 \cap \Delta_2 = \emptyset$ então os feixes de retas D_{Δ_1} e D_{Δ_2} também são disjuntos. Considere uma partição $\Delta_0 = \{0\}, \Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_s$ de \mathbb{Z}_t , logo, $D_{\Delta_0} = \text{diag}(\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t), D_{\Delta_1}, D_{\Delta_2}, \dots, D_{\Delta_s}$ é uma partição de $\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t$. Se $\Delta_i = -\Delta_i$, $i = 0, 1, \dots, s$ então D_{Δ_i} é simétrico. Tem-se então a questão: qual a condição sobre a partição $\Delta_0, \Delta_1, \dots, \Delta_s$ de \mathbb{Z}_t para que $D_{\Delta_0}, D_{\Delta_1}, \dots, D_{\Delta_s}$ seja um esquema de associação? Nesse caso D_{Δ_i} seriam as classes associadas \mathfrak{C}_i .

Se temos um esquema de associação, então existem p_{ij}^k tais que para $(\alpha, \beta) \in D_{\Delta_k}$. Então

$$p_{ij}^k = |\{\gamma \in \mathbb{Z}_t, (\alpha, \gamma) \in D_{\Delta_i} \text{ e } (\gamma, \beta) \in D_{\Delta_j}\}|.$$

Isto é, se (α, β) é um ponto sobre uma reta de D_{Δ_k} , então, existem p_{ij}^k pontos sobre as retas de D_{Δ_i} e p_{ij}^k pontos sobre as retas de D_{Δ_j} . Este fato pode ser representado geometricamente, como na figura 4.3.

Figura 4.3 – Pontos p_{ij}^k sobre D_{Δ_i} e D_{Δ_j} .

Fonte: Da autora (2024).

Portanto, existem p_{ij}^k pontos ω_α em Δ_i e p_{ij}^k pontos ω_β em Δ_j obtidos a partir das retas definidas pelos pontos (α, β) , (γ, β) e (α, γ) . Como

$$\omega = \beta - \alpha \Rightarrow \beta = \omega + \alpha,$$

$$\omega_\beta = \beta - \gamma \Rightarrow \beta = \omega_\beta + \gamma,$$

$$\omega_\alpha = \gamma - \alpha \Rightarrow \alpha = -\omega_\alpha + \gamma,$$

tem-se que

$$\omega = \beta - \alpha = (\omega_\beta + \gamma) - (-\omega_\alpha + \gamma) = \omega_\beta + \omega_\alpha$$

$$-\omega_\beta = \omega_\alpha - \omega.$$

Observe que $-\omega_\beta$ é um elemento de Δ_j .

Podemos agora inverter a construção para obter as condições sobre a partição $\Delta_0, \Delta_1, \dots, \Delta_s$. Dado $\omega \in \Delta_k$, tomamos um ponto (α, β) na reta definida por ω e obtemos p_{ij}^k elementos $\tilde{\omega} \in \Delta_i$, tais que $\tilde{\omega} - \omega \in \Delta_j$. É possível mostrar que a construção não depende do ponto (α, β)

da reta definida por ω . Temos então que a partição $\Delta_0, \Delta_1, \dots, \Delta_s$ de \mathbb{Z}_t , dada pelo feixe de retas em $\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t$ e dada por $D_{\Delta_0}, D_{\Delta_1}, \dots, D_{\Delta_s}$, define um esquema de associação.

Definição 4.1.1. (Bailey, 2004, p. 24) A partição de \mathbb{Z}_t em subconjuntos $\Delta_0, \Delta_1, \dots, \Delta_s$ é um blueprint para \mathbb{Z}_t se:

- a) $\Delta_0 = \{0\}$;
- b) para $i = 1, 2, \dots, s$, se $\omega \in \Delta_i$ então $-\omega \in \Delta_i$;
- c) existem inteiros p_{ij}^k tais que se $\beta \in \Delta_k$ então existem exatamente p_{ij}^k elementos α em Δ_i tais que $\beta - \alpha \in \Delta_j$.

O *blueprint* é uma partição em \mathbb{Z}_t , que permite construir uma partição em $\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t$, isto é, um esquema de associação cíclico.

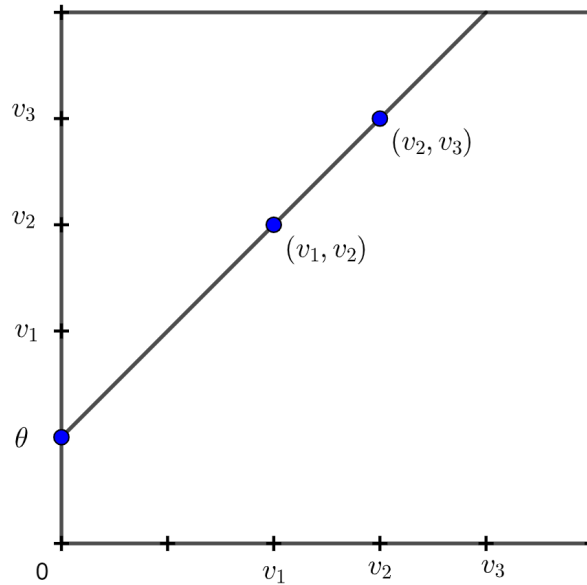
A abordagem de analisar o esquema de associação cíclico como retas em $\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t$ é uma contribuição deste trabalho. Nesse sentido, a abordagem geométrica utilizada na construção dos esquemas de associação cíclicos pode também ser utilizada na construção de delineamentos. A construção a ser desenvolvida se aplica de forma geral a grupos abelianos, mas vamos nos restringir por simplicidade apenas ao grupo \mathbb{Z}_t .

Se $\Gamma \subset \mathbb{Z}_t$, uma translação de Γ é um subconjunto de \mathbb{Z}_t definido por:

$$\Gamma + \theta = \{v + \theta, v \in \Gamma\}.$$

Diremos que duas translações $\Gamma + \theta_1$ e $\Gamma + \theta_2$ são distintas se, como conjuntos são diferentes. Vamos definir o número de translações distintas de Γ por l . Tem-se que l é o menor inteiro tal que $\Gamma, \Gamma + 1, \Gamma + 2, \dots, \Gamma + l - 1$ sejam conjuntos distintos e $\Gamma + l = \Gamma$. Como $\Gamma + l + 1 = \Gamma + 1$, então $\Gamma + l, \Gamma + l + 1, \dots, \Gamma + l + l - 1$ são disjuntos e $\Gamma + 2l = \Gamma$. Segue desse fato que l necessariamente divide t . l é denominado índice de Γ em \mathbb{Z}_t .

Vamos considerar a interseção da reta definida por $\theta \in \mathbb{Z}_t$, $\beta = \alpha + \theta$, e o conjunto $\Gamma \times \Gamma$. Se $(v_1, v_2) \in \Gamma \times \Gamma$ e está na reta, então $v_2 = v_1 + \theta \Rightarrow v_2 - v_1 = \theta$ e vice-versa. Se $v_2 - v_1 = \theta \Rightarrow v_2 = v_1 + \theta$ e (v_1, v_2) está na reta (figura 4.4).

Figura 4.4 – Pontos da reta $\theta \in \mathbb{Z}_t$.

Fonte: Da autora (2024).

Portanto, a interseção do gráfico da reta $\beta = \alpha + \theta$ e $\Gamma \times \Gamma$ é dada por

$$\mathcal{H}_\theta = \{(v_1, v_2) \in \Gamma \times \Gamma, \theta = v_2 - v_1\},$$

$$m_\theta(\Gamma) = |\{(v_1, v_2) \in \Gamma \times \Gamma, \theta = v_2 - v_1\}|,$$

em que $m_\theta(\Gamma)$ é o número de elementos em \mathcal{H}_θ .

Definição 4.1.2. (Bailey, 2004, p. 235) Um delineamento em blocos incompletos com o conjunto de tratamentos \mathbb{Z}_t é um delineamento em blocos grupo fino (thin group block-design) se existe Γ em \mathbb{Z}_t tal que os blocos são todas as translações distintas de Γ .

Trabalhando com retas, tem-se a adaptação do teorema apresentada a seguir (consideramos uma adaptação pois a operação utiliza retas em $\mathbb{Z}_t \times \mathbb{Z}_t$, ou seja, para (α, β) tem-se $\theta = \beta - \alpha$).

Teorema 4.1.1. Adaptado de (Bailey, 2004, p. 235) Em um delineamento em blocos grupo fino definido por Γ , de índice l , a matriz de concorrência Λ é dada por

$$\Lambda(0, \theta) = m_\theta(\Gamma) \frac{l}{t}$$

$$\Lambda(\alpha, \beta) = \Lambda(0, \beta - \alpha).$$

Demonstração. Cada par de pontos $(v_1, v_2) \in \Gamma \times \Gamma$, com $\theta = v_2 - v_1$, define um bloco $\Gamma - v_1$, que contém simultaneamente os tratamentos 0 e θ . Queremos contar em quantos blocos os tratamentos 0 e θ ocorrem juntos, isto é, qual o valor da entrada da matriz $\Lambda(0, \theta)$.

Se o índice de Γ em \mathbb{Z}_t é $l = t$, então, $\Gamma, \Gamma + 1, \dots, \Gamma + t - 1$ são blocos distintos. Vamos tomar dois pontos (v_1, v_2) e (w_1, w_2) em \mathcal{H} . Esses pontos definem blocos $\Gamma - v_1$ e $\Gamma - w_1$ que são distintos. Logo, cada par (v_1, v_2) em \mathcal{H} define um bloco diferente e, portanto, o número de blocos que contém simultaneamente 0 e θ é $m_\theta(\Gamma)$.

Se o índice de Γ em \mathbb{Z}_t é $l < t$, temos então os blocos $\Gamma, \Gamma + 1, \dots, \Gamma + l - 1$. Vamos tomar o ponto (v_1, v_2) em \mathcal{H} . Esse ponto define o bloco $\Gamma - v_1$ que contém o tratamento 0. Como $\Gamma - v_1 = \Gamma - v_1 + l$, esse bloco contém o tratamento 0, isto implica que $v_1 - l$ pertence a Γ e, portanto, os pontos $(v_1, v_2 = v_1 - \theta)$ e $(v_1 - l, v_1 - l + \theta)$ pertencem a \mathcal{H} e definem o mesmo bloco. O mesmo ocorre para $(v_1 - 2l, v_1 - 2l + \theta), (v_1 - 3l, v_1 - 3l + \theta), \dots, (v_1 - (\frac{t}{l} - 1)l, v_1 - (\frac{t}{l} - 1)l + \theta)$, (observando que l divide t). Segue então que para cada ponto $(v_1, v_2) \in \mathcal{H}$ outros $(\frac{t}{l} - 1)$ definem o mesmo bloco. Logo, o conjunto \mathcal{H} é dividido em $\frac{t}{l}$ conjuntos de pontos em que cada conjunto define o mesmo bloco. Segue que o número de blocos que contém 0 e θ é

$$\frac{m_\theta(\Gamma)}{\frac{t}{l}} = \frac{l}{t} m_\theta(\Gamma).$$

Observe que os tratamentos 0 e θ ocorrem em $\Gamma + v_1$ se, e somente se, β e $\beta + \theta$ ocorrem em $\Gamma + \beta + v_1$, logo,

$$\Lambda(\beta, \beta + \theta) = \Lambda(0, \theta).$$

Em outras palavras,

$$\Lambda(\alpha, \beta) = \Lambda(0, \beta - \alpha),$$

para $\beta = \alpha + \theta$ o que implica que $\theta = \beta - \alpha$. \square

Um procedimento prático para a identificação de um delineamento parcialmente balanceado é fazer a tabela de diferenças de Γ . Veja o exemplo a seguir.

Exemplo 4.1.1. $\Gamma = \{0, 1, 3, 7\}$ em \mathbb{Z}_9 , temos a tabela 4.1 de diferenças.

Tabela 4.1 – Tabela de diferenças.

	0	1	3	7
0	0	1	3	7
1	8	0	2	6
3	6	7	0	4
7	2	3	5	0

Fonte: Da autora (2024).

As entradas da tabela 4.1 contém exatamente o valor $m_\theta(\Gamma)$, para $\theta \neq 0$. Por exemplo, $m_3(\Gamma) = 2$, pois $3 - 0 = 3$ e $1 - 7 = -6 = 3$, que ocorre na tabela duas vezes; $m_5(\Gamma) = 1$, pois $3 - 7 = -4 = 5$, que ocorre na tabela uma vez.

Observe que $l = t$ e temos portanto oito translações distintas e estas definem o delineamento (tabela 4.2).

Tabela 4.2 – Delineamento usando as translações.

	1	2	3	4	5	6	7	8
0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	2	3	4	5	6	7	8	0
3	4	5	6	7	8	0	1	2
7	8	0	1	2	3	4	5	6

Fonte: Da autora (2024).

Tem-se a matriz de concorrência

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 0 & 2 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 2 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Observe que no exemplo 4.1.1 todos os elementos de \mathbb{Z}_9 ocorrem.

Quando a tabela de diferenças de Γ em \mathbb{Z}_t contém todos os elementos de \mathbb{Z}_t com igual frequência, isto é, $m_\theta(\Gamma) = \lambda$, para todo $\theta \in \mathbb{Z}_t$, a tabela de diferenças é dita perfeita. Temos

então um resultado imediato: um delineamento em blocos grupo fino é balanceado se, somente se, sua tabela de diferenças é perfeita.

4.2 Álgebra de Bose-Mesner como uma álgebra de matrizes diagonais

O fato apresentado na seção 2.2.1 que existe uma matriz ortogonal H que diagonaliza simultaneamente as matrizes da álgebra \mathfrak{A} não foi observado em Bailey (2004). Vamos utilizar esta propriedade para simplificar e dar uma intuição geométrica para os resultados relativos a álgebra \mathfrak{A} .

Primeiramente vamos relacionar uma matriz $M \in \mathfrak{A}$ com projetores ortogonais. Como para M é diagonalizável, isto é, admite autovalores distintos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ com $m \leq n$ (os autovalores podem ter multiplicidade e assumir valor zero). Vamos considerar V_1, V_2, \dots, V_m os autoespaços correspondentes. Tem-se $V_i \perp V_j$ para $i \neq j$ e $\mathbb{R}^n = V_1 \oplus V_2 \oplus \dots \oplus V_m$.

O polinômio $p(x) = \prod_{j=1}^m (x - \lambda_j)$ é tal que $p(M) \equiv 0$ $p(x)$ é o polinômio minimal. O projetor ortogonal P_i em V_i é dado por:

$$P_i = \frac{\prod_{j \neq i} (M - \lambda_j I_{\Omega})}{\prod_{j \neq i} (\lambda_i - \lambda_j)}.$$

De fato, pois se $v \in V_i$, temos que

$$\begin{aligned} P_i v &= \frac{\prod_{j \neq i} (M - \lambda_j I_{\Omega}) v}{\prod_{j \neq i} (\lambda_i - \lambda_j)} \\ &= \frac{\prod_{j \neq i} (Mv - \lambda_j v)}{\prod_{j \neq i} (\lambda_i - \lambda_j)} \\ &= \frac{\prod_{j \neq i} (\lambda_i v - \lambda_j v)}{\prod_{j \neq i} (\lambda_i - \lambda_j)} \\ &= \left(\frac{\prod_{j \neq i} (\lambda_i - \lambda_j)}{\prod_{j \neq i} (\lambda_i - \lambda_j)} \right) v \\ &= v. \end{aligned}$$

Se $v \in V_j$ então $(M - \lambda_j I_{\Omega})v = Mv - \lambda_j v = \lambda_j v - \lambda_j v = 0$ e, portanto, $P_i v = 0$.

Como os projetores em V_i são produtos envolvendo a matriz M e como \mathfrak{A} é uma álgebra, esses produtos pertencem a álgebra e, portanto, os projetores P_i são também elementos de \mathfrak{A} .

Pode-se expressar a matriz M em termos dos projetores P_i e dos autovalores correspondentes λ_i . De fato,

$$M = \sum_{i=1}^m \lambda_i P_i,$$

pois se $v \in V_j$, $j = 1, \dots, m$,

$$Mv = \sum_{i=1}^m \lambda_i P_i v = \lambda_j v.$$

Além disso, se M é inversível, isto é, $\lambda_i \neq 0$ para todo i , então

$$M^{-1} = \sum_{i=1}^m \frac{1}{\lambda_i} P_i,$$

pois,

$$MM^{-1} = \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i P_i \right) \left(\sum_{j=1}^m \frac{1}{\lambda_j} P_j \right) = \sum_{i,j} \lambda_i \frac{1}{\lambda_j} P_i P_j = \sum_i P_i^2 = \sum_i P_i = I_\Omega.$$

Como os P_i pertencem a álgebra \mathfrak{A} , M^{-1} também pertence. Pode ocorrer que alguns dos autovalores sejam zeros sendo conveniente utilizar a inversa generalizada de Moore-Penrose de M , M^- , que é dada por:

$$M^- = \sum_{\substack{i=1 \\ \lambda_i \neq 0}}^m \frac{1}{\lambda_i} P_i.$$

A inversa generalizada de uma matriz M satisfaz as seguintes condições:

- a) $MM^-M = M$;
- b) $M^-MM^- = M^-$;
- c) $MM^- = (MM^-)'$;
- d) $M^-M = (M^-M)'$.

É fácil comprovar que $MM^{-1}M = M$, para $M^{-1} = \sum_{\substack{i=1 \\ \lambda_i \neq 0}}^m \frac{1}{\lambda_i} P_i$, pois

$$\begin{aligned} MM^{-1}M &= \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i P_i \right) \left(\sum_{\substack{j=1 \\ \lambda_j \neq 0}}^m \frac{1}{\lambda_j} P_j \right) \left(\sum_{s=1}^m \lambda_s P_s \right) = \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i P_i \right) \left(\sum_{\substack{j=1 \\ \lambda_j \neq 0}}^m \frac{1}{\lambda_j} \lambda_s P_j P_s \right) \\ &= \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i P_i \right) \left(\sum_{\substack{j=1 \\ \lambda_j \neq 0}}^m P_j^2 \right) = \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i P_i \right) \left(\sum_{\substack{j=1 \\ \lambda_j \neq 0}}^m P_j \right) \\ &= \sum_{\substack{i=1 \\ j=1 \\ \lambda_j \neq 0}}^m \lambda_i P_i P_j = \sum_{\substack{i=1 \\ \lambda_j \neq 0}}^m \lambda_j P_j = \sum_{j=1}^m \lambda_j P_j = M. \end{aligned}$$

As outras relações seguem de forma análoga. Mais detalhes podem ser vistos em Guimarães (2010).

Note que M^{-1} também pertence à álgebra \mathfrak{A} . Sabemos então o comportamento de uma matriz M em \mathfrak{A} . Queremos agora ver o comportamento coletivo de todas as matrizes em \mathfrak{A} . Vamos utilizar a abordagem da álgebra \mathfrak{A} como um conjunto de matrizes diagonais para propor um algoritmo para o cálculo dos autoespaços comuns a todas elas. Para tanto, vamos utilizar a base A_0, A_1, \dots, A_s de \mathfrak{A} . Para listar os autovalores distintos dessas matrizes, utilizaremos os índices

$$A_i \rightarrow \begin{cases} \text{autovalores } \lambda_1^i, \lambda_2^i, \dots, \lambda_{m_i}^i \\ \text{autoespaços } V_1^i, V_2^i, \dots, V_{m_i}^i, \end{cases}$$

com $\dim(V_j^i) = d_j^i =$ multiplicidade de λ_j^i , para $j \in \{1, 2, \dots, m_i\}$.

Tem-se que $V_1^i \oplus V_2^i \oplus \dots \oplus V_{m_i}^i = \mathbb{R}^n$ para todo i . O que queremos agora é obter subespaços W_j tal que $W_0 \oplus W_1 \oplus \dots \oplus W_s = \mathbb{R}^n$ de forma que cada W_j esteja contido em um autoespaço de A_i , para todo i . Isto é, queremos que se $v \in W_i$ então $A_i v = \lambda_{l(i)}^i v$, para todo i , em que $l(i)$ é um elemento de $\{1, 2, \dots, m_i\}$.

Tal decomposição é bastante simplificadora, no sentido que todas as matrizes A_i se comportam como um múltiplo da identidade em cada W_j . O subespaço W_j é denominado stratum e a decomposição $\{W_0, W_1, \dots, W_s\}$ strata do esquema de associação.

Para fixar o raciocínio, vamos considerar apenas A_1 e A_2 . Tem-se que para $v \in V_j^1$, $A_1v = \lambda_j^1v$ e para $w \in V_k^2$, $A_2w = \lambda_k^2w$. Logo, se tomarmos $v \in V_j^1 \cap V_k^2$, $A_1v = \lambda_j^1v$ e $A_2v = \lambda_k^2v$ e, portanto, o subespaço $V_j^1 \cap V_k^2$ é simultaneamente autoespaço de A_1 e A_2 .

Temos que o subespaço unidimensional gerado pelo vetor $\vec{1} = (1, 1, \dots, 1)$ é o autoespaço para todo A_i , pois A_i tem soma linha constante.

A seguir apresenta-se o novo algoritmo para obter os subespaços W_j .

Seja $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ uma base do \mathbb{R}^n em relação a qual todas as matrizes A_i são diagonais e que $v_1 = \vec{1}$. Vamos construir uma tabela $n \times (s + 1)$ em que as linhas são os autovetores e as colunas os autovalores de A_i , sendo a primeira linha relativa ao autovetor v_1 e a última linha relativa ao autovetor v_n . As linhas são construídas levando-se em conta a multiplicidade dos autovalores.

Tabela 4.3 – Autovetores e autovalores.

	A_0	A_1	A_2	\dots	A_s
v_1	1	λ_1^1	λ_1^2	\dots	λ_1^s
\dots	1	\dots	\dots	\dots	\dots
v_n	1	$\lambda_{m_1}^1$	$\lambda_{m_2}^2$	\dots	$\lambda_{m_s}^s$

Fonte: Da autora (2024).

Os subespaços W_j são definidos da seguinte forma:

- W_0 é o subespaço unidimensional gerado por v_1 ;
- coleta-se todas as linhas iguais a segunda linha, os autovetores correspondentes definem o autoespaço W_1 ;
- toma-se outra linha diferente da linha anterior e coleta-se todas as linhas iguais a ela, os autovetores correspondentes definem o autoespaço W_2 ;
- o procedimento é repetido definindo-se W_3, W_4, \dots, W_s .

Temos então a decomposição do espaço \mathbb{R}^n em soma direta de subespaços ortogonais, ou seja, $\mathbb{R}^n = W_0 \oplus W_1 \oplus \dots \oplus W_s$, os quais são simultaneamente autoespaços das matrizes A_0, A_1, \dots, A_s .

É importante deixar o mais claro possível a relação entre as duas decomposições

$$\mathbb{R}^n = V_1^i \oplus V_2^i \oplus \dots \oplus V_{m_i}^i \text{ e}$$

$$\mathbb{R}^n = W_0 \oplus W_1 \oplus \dots \oplus W_s,$$

para $i = 1, \dots, s$.

Cada subespaço W_j está contido em algum dos subespaços V_l^i . Portanto, cada V_l^i é soma direta de alguns W_j . Por exemplo, pode ocorrer que $V_2^i = W_1 \oplus W_4 \oplus W_6$. Este fato vai se traduzir na relação entre projetores $P_1^i, P_2^i, \dots, P_{m_i}^i$ (projeções ortogonais nos subespaços V_j^i) e os projetores S_0, S_1, \dots, S_s (projeções ortogonais nos subespaços W_j).

Tem-se então que

$$A_i = \sum_{j=1}^{m_i} \lambda_j^i P_j^i.$$

Como cada autoespaço W_e é também autoespaço de A_i , utilizando a notação de Bailey (2004, p. 37), denominaremos o autovalor de A_i em W_e por $C(i, e)$ e, portanto

$$A_i = \sum_{e=0}^m C(i, e) S_e.$$

Observe que temos duas bases: uma formada pelas matrizes $\{A_0, A_1, \dots, A_s\}$ e outra formada pelas matrizes projetores ortogonais em W_e que são $\{S_0, S_1, \dots, S_s\}$, da álgebra \mathfrak{A} . Utilizar a base $\{A_0, A_1, \dots, A_s\}$ facilita a soma. Já a base $\{S_0, S_1, \dots, S_s\}$ facilita o produto, pois, $S_e S_f = 0$, se $e \neq f$, e $S_e^2 = S_e$.

É vantajoso saber passar da base $\{A_0, A_1, \dots, A_s\}$ para a base $\{S_0, S_1, \dots, S_s\}$ e vice-versa.

4.2.1 Exemplo de aplicação do algoritmo

Para um esquema de associação particular, a obtenção do strata e da matriz C exige uma série de procedimentos de álgebra linear esboçados em Bailey (2004, p. 43). A proposta de tratar as matrizes de adjacência simultaneamente como matrizes diagonais, como descrito anteriormente, pode facilitar tal abordagem. Veja a seguir um exemplo.

Exemplo 4.2.1. Da autora (2024) Seja um esquema de associação com duas classes ($s = 2$). Temos as matrizes $A_0 = I_\Omega$, A_1 e A_2 . Existe então uma transformação ortogonal H tal que $A_0 = I_\Omega$, $HA_1H' = D_1$ e $HA_2H' = D_2$, com D_1 e D_2 diagonais. As entradas diagonais de D_1 e D_2 são os autovalores com suas respectivas multiplicidades. Para simplificar, vamos nos referir às matrizes A_1 e A_2 , tanto na forma diagonal quanto na forma não diagonal. Vejamos o caso de um bloco com 12 parcelas e 3 blocos de tamanho 4. Nesse caso temos o esquema de associação

grupo divisível $GD(3,4)$. Enumerando as parcelas de forma conveniente temos

$$A_0 = I_{(12 \times 12)} \text{ e } A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Como $I_\Omega + A_1 + A_2 = J_\Omega$, segue que $A_2 = J_\Omega - I_\Omega - A_1 = J_\Omega - (I_\Omega + A_1)$, assim temos

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Vale destacar que a matriz $B = I_\Omega + A_1$ é denominada matriz de relação para os blocos (veja seção 2.4.1).

Utilizando técnicas de álgebra linear obtemos uma base $\{e_1 = \vec{1}, e_2, \dots, e_{12}\}$ de autovetores para ambas as matrizes A_1 e A_2 . Em relação a base canônica estes autovetores são:

$$\begin{aligned} e'_0 &= (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \\ e'_1 &= (1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \\ e'_2 &= (1, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \\ e'_3 &= (1, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \\ e'_4 &= (0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \\ e'_5 &= (0, 0, 0, 0, 1, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0) \\ e'_6 &= (0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0) \\ e'_7 &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0) \\ e'_8 &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, -1, 0) \\ e'_9 &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, -1) \\ e'_{10} &= (1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1, 0, 0, 0, 0) \\ e'_{11} &= (1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, -1, -1, -1, -1). \end{aligned}$$

Agora tem-se que:

$$A_1 e_0 = 3e_0$$

$$A_2 e_0 = 8e_0$$

$$A_1 e_i = -e_i, \quad i = 1, 2, \dots, 9$$

$$A_2 e_i = \vec{0}, \quad i = 1, 2, \dots, 9$$

$$A_1 e_i = 3e_i, \quad i = 10, 11$$

$$A_2 e_i = -4e_i, \quad i = 10, 11.$$

Portanto, as matrizes diagonais A_1 e A_2 são:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} e$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 \end{pmatrix} .$$

Coletando as linhas para as quais os autovalores não se alteram, para as duas matrizes temos o strata

$$W_0 = \text{span}\{e_0\},$$

$$W_1 = \text{span}\{e_1, e_2, \dots, e_9\},$$

$$W_2 = \text{span}\{e_{10}, e_{11}\}.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} I_{\Omega} = S_0 + S_1 + S_2 \\ A_1 = 3S_0 - S_1 + 3S_2 \\ A_2 = 8S_0 - 4S_2. \end{array} \right. \quad (4.1)$$

Nesse sistema as matrizes A_1 e A_2 são diagonais, mas a relação vale para o caso das coordenadas originais, pois, multiplicando as igualdades em ambos os lados pela matriz ortogonal H temos

$$\begin{aligned} I_{\Omega} &= H' S_0 H + H' S_1 H + H' S_2 H, \\ H' A_1 H &= 3H' S_0 H - 9H' S_1 H + 6H' S_2 H, \\ H' A_2 H &= 8H' S_0 H + 2H' S_2 H'. \end{aligned}$$

Observe que HA_iH' é igual a A_i nas coordenadas originais e $H' S_i H$ é a projeção em W_i também em relação as coordenadas originais.

Resolvendo o sistema 4.1 nas coordenadas originais, nas quais A_1 e A_2 não são diagonais obtemos

$$\begin{aligned} S_0 &= \frac{1}{12} J_{\Omega}, \\ S_1 &= I_{\Omega} - \frac{1}{4} B, \\ S_2 &= \frac{1}{4} B - \frac{1}{12} J_{\Omega}. \end{aligned}$$

Logo, se considerarmos o espaço de blocos $V_B = W_0 \oplus W_B$, então $W_2 = W_B$ e $W_1 = V_B^{\perp}$. Portanto, o strata do esquema de associação $G(3,4)$ para um delineamento com 12 parcelas em 3 blocos, é dado por $\mathbb{R}^n = W_0 \oplus W_B \oplus V_B^{\perp} = V_B \oplus V_B^{\perp}$.

Outras relações também são obtidas mais facilmente trabalhando-se com as matrizes na forma diagonal. Por exemplo,

$$\begin{aligned}
 A_1 A_2 &= p_{12}^0 A_0 + p_{12}^1 A_1 + p_{12}^2 A_2 \Rightarrow \\
 &= \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}_{(12 \times 12)} \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -4 \end{pmatrix}_{(12 \times 12)} \\
 &= p_{12}^0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + p_{12}^1 \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \\
 &\quad + p_{12}^2 \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -4 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Resolvendo o sistema tem-se que $p_{12}^0 = p_{12}^1 = 0$ e $p_{12}^2 = 3$.

4.3 Discussões sobre a definição de delineamentos ortogonais

O conceito de delineamentos ortogonais é provavelmente um dos conceitos mais importantes em ambos os livros básicos sobre os quais este trabalho disserta. Em Bailey (2008, p. 198) afirma-se que todos os delineamentos apresentados, e esses são inúmeros, são delineamentos ortogonais. No entanto, a definição de ortogonalidade de delineamentos entre os dois textos diferem e a equivalência entre eles não é apresentada de forma clara. De fato, pode-se fazer uma crítica: em ambos os textos o conceito deveria ser mais detalhado. Vamos aqui discutir as duas definições.

No texto de Bailey (2004, p. 196) a definição diz que dada uma estrutura ortogonal em blocos no conjunto das parcelas Ω , uma função de delineamento $\psi : \Omega \rightarrow \Theta$, que define a partição

T em Ω , cujas classes são dadas por $\psi^{-1}(\theta) = \{\alpha \in \Omega, \psi(\alpha) = \theta\}$, então, por definição, o delineamento é ortogonal se T é ortogonal a todo $F \in \mathfrak{F}$.

A definição e o lema a seguir já foram apresentados neste texto. Entretanto, são apresentados novamente.

Definição 4.3.1. (Bailey, 2004, p. 196) Para F fator em \mathfrak{F} e T fator em \mathfrak{G} , um delineamento é ortogonal se $P_{V_F}P_{V_T} = P_{V_T}P_{V_F}$, para todo F em \mathfrak{F} .

Lema 4.3.1. (Bailey, 2004, p. 196) Seja X a matriz de delineamento de um delineamento com replicação r e seja $L = X'QX$, em que Q é qualquer projetor ortogonal em $\mathbb{R}^{\Omega \times \Omega}$. Então, XX' comuta com Q se, e somente se, todos os autovalores de $\frac{1}{r}L$ são $\{0, 1\}$.

Primeiramente deve-se observar que se $Q = Q_F$, o projetor no stratum definido por $F \in \mathfrak{F}$, tem-se que $L = L_F$. Como já foi demonstrado $\frac{1}{r}XX'$ é o projetor de \mathbb{R}^{Ω} em $\text{Im}(X)$, então $\frac{1}{r}XX' = P_{V_T}$. Logo, pelo lema 4.3.1, um delineamento é ortogonal se as matrizes de informação L_F , $F \in \mathfrak{F}$, possuem autovalores em $\{0, 1\}$. Como também já foi demonstrado, este fato implica que os efeitos de um tratamento são estimados em apenas um stratum W_i^{Ω} e que fatores de eficiência canônicos são iguais a 0 ou 1.

Vejamos agora como é abordada a definição de ortogonalidade em nossa outra referência. Em Bailey (2008) a definição de delineamentos ortogonais é bem elaborada.

Definição 4.3.2. (Bailey, 2008, p. 198) Um delineamento cuja estrutura de parcelas consiste em um conjunto de fatores \mathfrak{F} em Ω , cuja estrutura de tratamento consiste em um conjunto de fatores \mathfrak{G} em Θ e cujos tratamentos são alocados às parcelas de acordo com uma função de delineamento ψ é um delineamento ortogonal se:

- a) \mathfrak{F} é uma estrutura ortogonal nas parcelas;
- b) \mathfrak{G} é uma estrutura ortogonal nos tratamentos;
- c) a função ψ é tal que:
 - cada par de fatores de tratamento em \mathfrak{G} permanece ortogonal entre si em Ω ;
 - se $F \in \mathfrak{F}$ e $G \in \mathfrak{G}$, então F é ortogonal a G ;
 - se $F \in \mathfrak{F}$ e $G \in \mathfrak{G}$, então $F \vee G \in \mathfrak{G}$.

Não é claro que um fator de tratamento $G \in \mathfrak{G}$, quando considerado fator nas parcelas é dado pela partição $\psi^{-1}(G)$. Aqui temos outra questão: F é um fator em Ω , como considerar F um fator em Θ para que se tenha $F \vee G$? O texto não deixa clara a resposta dessa questão. Uma

resposta razoável seria tomar a partição mais fina \tilde{F} de Θ tal que $F \preceq \psi^{-1}(\tilde{F})$. Dessa forma, as classes de \tilde{F} são subconjuntos de tratamentos que foram aplicados em coleções de classes (blocos) de F .

Note que T é um fator em Ω e quando considerado como fator em Θ é simplesmente a partição elementar E , em que as classes são formadas por um tratamento apenas. Portanto, $\tilde{T} = E$.

Teorema 4.3.1. (Bailey, 2008, p. 198) Se \mathfrak{F} é uma estrutura ortogonal nas parcelas Ω e o fator de tratamento T é ortogonal a F para todo F em \mathfrak{F} , então $(\mathfrak{F}, \mathfrak{G}, T)$ é um delineamento ortogonal, em que $\mathfrak{G} = \{T \vee F; F \in \mathfrak{F}\}$.

Demonstração. A demonstração deste teorema segue dos fatos:

- a) $T \vee F$ significa na notação utilizada $\tilde{T} \vee \tilde{F}$ e como $\tilde{T} = E$, então $\tilde{T} \vee \tilde{F} = F$;
- b) se F é um fator em Ω e G é um fator qualquer em Θ então $T \preceq \psi^{-1}(G) \preceq \tilde{F} \vee G$. Logo, $\tilde{F} \vee G$ é uma partição de Θ que pode ou não ter significado físico em relação ao experimento e nesse caso tem-se um pseudo-fator;
- c) é possível tomar todas as partições $\tilde{F} \vee G$ com $F \in \mathfrak{F}$ e $G \in \mathfrak{G}$ e incluí-las em \mathfrak{G} ;
- d) no processo de inclusão de fatores $\tilde{F} \vee G$ não é necessário repetir o processo, pois, se F_1 e F_2 pertencem a \mathfrak{F} então $\tilde{F}_1 \vee (\tilde{F}_2 \vee G) = (\tilde{F}_1 \vee \tilde{F}_2) \vee G = \tilde{F}_3 \vee G$ em que $(\tilde{F}_1 \vee G_1) \vee (\tilde{F}_2 \vee G_2) = (\tilde{F}_1 \vee \tilde{F}_2) \vee (G_1 \vee G_2)$;
- e) se todo fator F em Ω é ortogonal a $\psi^{-1}(G)$ para todo fator em \mathfrak{G} (hipótese para que o delineamento seja ortogonal), a inclusão dos fatores de tratamento $\tilde{F} \vee G$ não altera esta propriedade, isto é, todo fator em Ω continuará ortogonal a todo fator em Θ ;
- f) os novos fatores de tratamento continuam ortogonais aos anteriores, isto é, $\tilde{F}_1 \vee G_1$ é ortogonal a \tilde{F}_2 e a G_2 , então, $\tilde{F}_1 \vee G_1$ é ortogonal a $\tilde{F}_2 \vee G_2$. \square

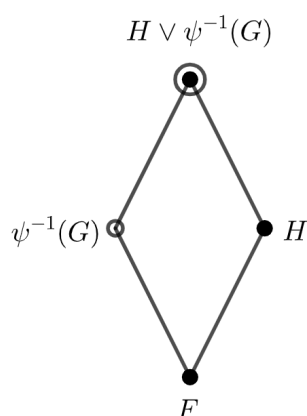
Portanto, a definição 4.3.1 implica em um caso particular da definição 4.3.2, uma vez que, dado um delineamento ortogonal em relação a definição 4.3.1 acrescentando-se fatores e pseudo-fatores de tratamento, o delineamento também será ortogonal em relação a definição 4.3.2.

Vale destacar também que da definição 4.3.2, item c) ii), o que se deseja é que dado um fator de tratamento G , o subespaço $W_{\psi^{-1}(G)}^{\Theta}$ esteja contido em um único stratum. De fato, pelo teorema a seguir tem-se essa propriedade.

Teorema 4.3.2. (Bailey, 2008, p. 198) Seja G um fator de tratamento em um delineamento ortogonal. Então existe um único fator F nas parcelas mais fino ou equivalente a $\psi^{-1}(G)$ que é maximal, no sentido que qualquer outro fator de parcela que seja mais fino ou equivalente a $\psi^{-1}(G)$ é também mais fino ou equivalente a F . Além disso, $W_{\psi^{-1}(G)}^{\Theta} \subseteq W_F^{\Theta}$.

A demonstração é baseada no fato de que o diagrama de Hasse combinado só pode ser da forma da figura 4.5.

Figura 4.5 – Definição de ortogonalidade.



Fonte: Adaptado de Bailey (2008).

O resultado do teorema 4.3.2 é o mesmo obtido do teorema 2.7.1, visto que um contraste simples é estimado em apenas um stratum.

4.4 Aplicações de grafos em delineamentos solúveis

Um delineamento em blocos incompletos é dito solúvel se os blocos podem ser reunidos em "superblocos", tais que esses "superblocos" contenham todos os tratamentos. Os delineamentos solúveis, que são também balanceados, satisfazem a desigualdade de Bose (1942), na qual tem-se que $b \geq t + r - 1$ (veja a demonstração desse fato no apêndice C).

Utilizando teoria dos grafos, vejamos algumas relações entre grafos e delineamentos. Primeiramente vamos observar que um delineamento em blocos incompletos é:

- a) balanceado, se existe um inteiro λ tal que, para quaisquer pares de tratamentos i e j existem λ blocos que os contêm conjuntamente. Tal fato significa que seu grafo de concorrência é completo e todo par de tratamentos é ligado por λ arestas;

b) solúvel, se os blocos podem ser agrupados em superblocos completos, ou seja, blocos que contenham todos os tratamentos, significando que o conjunto das arestas admite uma partição em que cada classe dessa partição contém todos os vértices (tratamentos).

Note que delineamentos balanceados e parcialmente balanceados podem ser solúveis.

Nesta seção apresentamos como resultado o fato de que para blocos de tamanho dois é possível obter delineamentos solúveis. Para tanto, utilizamos particularmente grafos completos e regulares e casos específicos de delineamentos balanceados e parcialmente balanceados.

4.4.1 Delineamentos solúveis para grafos completos

Utilizando o fato de que para $k = 2$ (blocos de tamanho 2) o delineamento pode ser recuperado de seu grafo de concorrência, vamos analisar a existência de delineamentos balanceados solúveis com $\lambda = 1$. O grafo de concorrência para esses delineamentos com t tratamentos é um grafo completo com apenas uma aresta entre os vértices e o grau de cada vértice é $t - 1$. Logo, a replicação é $r = t - 1$, pois cada aresta que sai de i representa um bloco diferente e estamos considerando apenas delineamentos binários, isto é, sem repetição nos blocos.

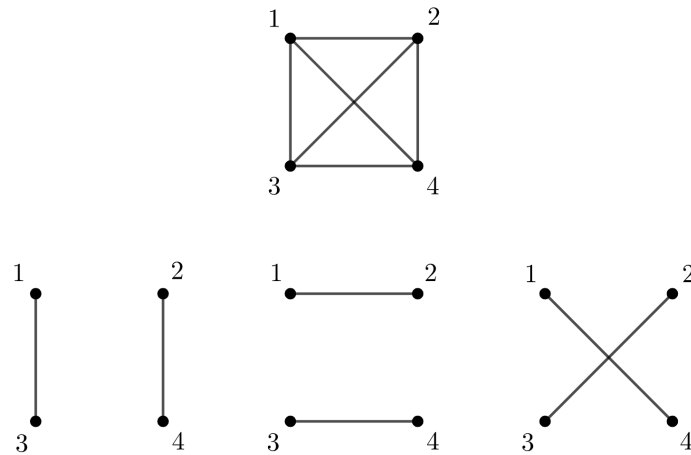
A união dos blocos que formará um superbloco é dada pela disjunção do conjunto de arestas, de tal modo que essas arestas não têm um vértice em comum. Para exemplificar, considere um grafo completo com $t = 4$ e $k = 2$, que possui seis blocos, como na tabela 4.4. Um delineamento solúvel neste caso possui três superblocos, como apresentado na figura 4.6 e na tabela 4.5.

Tabela 4.4 – Blocos incompletos para $t = 4$ e $k = 2$.

B_1	B_2	B_3	B_4	B_4	B_6
1	1	2	2	3	1
2	3	3	4	4	4

Fonte: Da autora (2024).

Figura 4.6 – Grafo completo e superblocos para $t = 4$ e $k = 2$.



Fonte: Da autora (2024).

Tabela 4.5 – Superblocos da figura 4.6.

B_1	B_2	B_3
1	1	1
3	2	4
2	3	2
4	4	3

Fonte: Da autora (2024).

Em um grafo completo, a quantidade de arestas é

$$C_t^2 = \frac{t(t-1)(t-2)!}{2(t-2)!} = \frac{t(t-1)}{2}.$$

Para o caso balanceado com $\lambda = 1$, o grau de cada vértice é $t - 1$ e como cada aresta que sai de i é um bloco que contém i temos que $r = t - 1$. Pela desigualdade de Bose

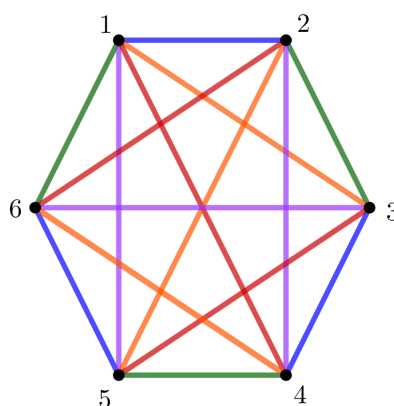
$$\begin{aligned} b &\geq t + r - 1 \\ \frac{t(t-1)}{2} &\geq t + t - 1 - 1 \\ t^2 - t &\geq 4t - 4 \\ t^2 - 5t + 4 &\geq 0, \end{aligned}$$

cujas raízes são $t_1 = 1$ e $t_2 = 4$. Logo, a condição é satisfeita para $t \geq 4$. Como cada superbloco é formado por blocos de tamanho dois e deve conter todos os tratamentos, então t deve ser um

número par, como condição necessária para que o delineamento balanceado com $\lambda = 1$ e $k = 2$ seja solúvel.

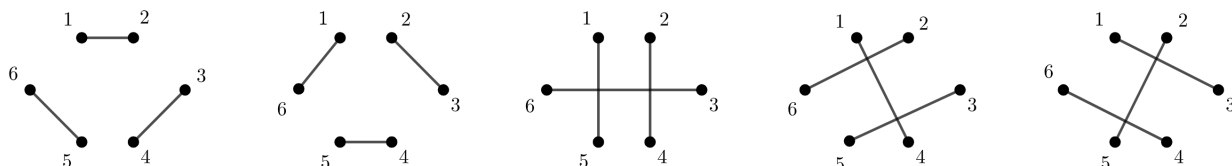
Vejam os casos de um grafo completo com $t = 6$. Nesse caso, $C_t^2 = 15$, logo, tem-se 15 blocos de tamanho dois, totalizando 30 parcelas. Cada 3 blocos contém os 6 tratamentos e teremos 5 superblocos (figuras 4.7 e 4.8).

Figura 4.7 – Grafo completo para $t = 6$.



Fonte: Da autora (2024).

Figura 4.8 – Superblocos da figura 4.7.



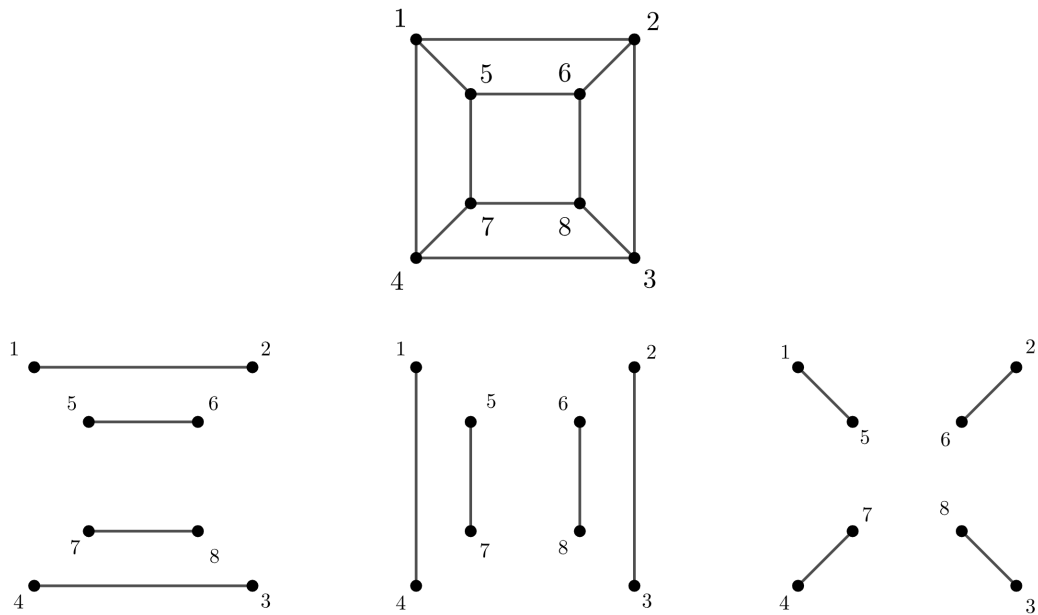
Fonte: Da autora (2024).

4.4.2 Delineamentos solúveis para grafos regulares

Vejam agora o exemplo de um delineamento parcialmente balanceado com $\lambda = 1$ e $\lambda = 0$, solúvel.

Considere um delineamento com 8 tratamentos e 12 blocos de tamanho 2. Como sabemos, $tr = bk$, logo, temos $r = 3$. De modo que de cada vértice saem 3 arestas. Um grafo regular com essas propriedades define um delineamento solúvel, que está apresentado na figura 4.9.

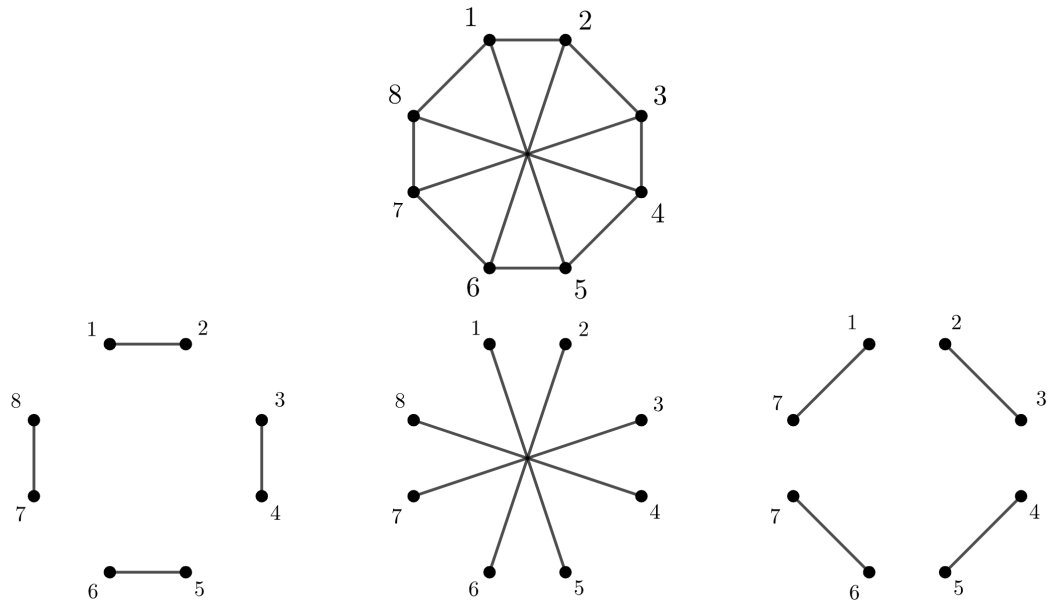
Figura 4.9 – Grafo regular e superblocos para $t = 8$.



Fonte: Da autora (2024).

Dadas as mesmas configurações anteriores é possível obter um grafo regular diferente, com superblocos também diferentes, conforme apresentado na figura 4.10.

Figura 4.10 – Grafo regular e superblocos para $t = 8$ (outra configuração).



Fonte: Da autora (2024).

4.5 Grafos como circuitos elétricos aplicados a problemas de otimalidade de delineamentos

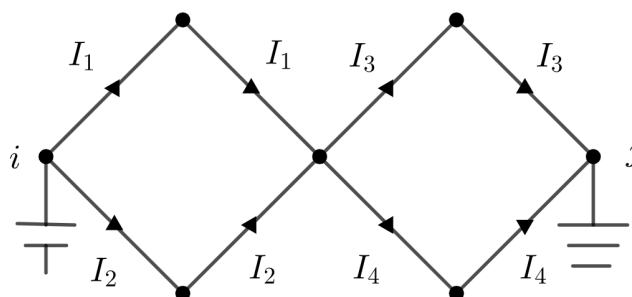
Esta seção está baseada nos artigos de Bailey e Cameron (2009, 2011). O que apresentamos como contribuição é a utilização de grafos como redes elétricas no estudo de otimalidade de alguns delineamentos e também no estudo de grafos unicíclicos.

É possível relacionar um grafo a um circuito elétrico, supondo que cada aresta seja uma resistência de 1-ohm. Aplica-se uma tensão em dois vértices e estuda-se o fluxo de corrente através das arestas. Aplicando as leis de Kirchoff para circuitos elétricos é possível obter várias propriedades dos grafos. Veja as leis de Kirchoff em Bailey e Cameron (2011, p. 16).

Por exemplo, dados dois vértices i e j , aplicando uma tensão V em i e 0 em j , uma corrente I flui de i para j (figura 4.11). É possível então definir a resistência efetiva R_{ij} como

$$R_{ij} = \frac{V}{I}.$$

Figura 4.11 – $I = I_1 + I_2 = I_3 + I_4$.



Fonte: Da autora (2024).

A resistência efetiva R_{ij} está relacionada com a variância do contraste entre os tratamentos i e j . Tem-se que se $L(G)$ é a Laplaceana do grafo e $L^-(G)$ sua inversa generalizada

$$R_{ij} = L^-(G)_{ii} + L^-(G)_{jj} - L^-(G)_{ij} - L^-(G)_{ji},$$

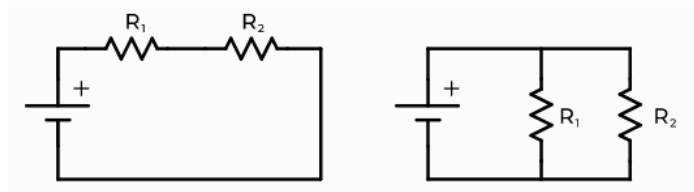
de onde segue que $V_{ij} = kR_{ij}\sigma^2$. Este teorema pode ser encontrado em em Bailey e Cameron (2011, p.17).

As leis que regem o comportamento de R_{ij} seguem o comportamento de uma ligação em série ou em paralelo (figura 4.12). As ligações em série e paralelo possuem resistências equivalentes dadas respectivamente por

$$R = R_1 + R_2$$

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}.$$

Figura 4.12 – Associação em série e paralelo.



Fonte: Da autora (2024).

Tem-se então um processo simples para calcular a variância de contrastes entre dois tratamentos. Basta simplificar o circuito para resistências em série e paralelo.

Se x é um vetor de contraste simples entre i e j , então

$$x' L^{-}(G) x = R_{ij} = L^{-}(G)_{ii} + L^{-}(G)_{jj} - L^{-}(G)_{ij} - L^{-}(G)_{ji}.$$

Portanto,

$$\frac{x' L^{-}(G) x}{x' x} = \frac{x' L^{-}(G) x}{2} = \frac{R_{ij}}{2} \Rightarrow \frac{2}{x' L^{-}(G) x} = \frac{2}{R_{ij}},$$

de onde segue que

$$\mu_1 = \min \frac{x' L(G) x}{\|x\|^2} = \min \frac{\|x\|^2}{x' L^{-}(G) x} \leq \frac{2}{R_{ij}},$$

para todo i e j . Temos então uma informação sobre o menor autovalor da Laplaceana do grafo, a partir de suas resistências equivalentes. Essa é uma das razões que nos permitem utilizar redes elétricas também para afirmações sobre a otimalidade de delineamentos.

O critério de A-otimalidade pode ser enunciado em termos de circuitos elétricos. "Um delineamento é A-ótimo se, e somente se, seu grafo de concorrência, considerado como uma

rede elétrica, minimiza a soma das resistências efetivas entre todos os pares de vértices" (Bailey; Cameron, 2011, p. 17).

Exemplo 4.5.1. (Bailey; Cameron, 2009, p. 5) Considere um delineamento em blocos com cinco tratamentos, enumerados como 1, 2, 3, 4, 5 e 21 parcelas divididas em 7 blocos de tamanho 3. Seja \mathcal{D}_1 o delineamento dado pela figura 4.13 e seja \mathcal{D}_2 o delineamento obtido de \mathcal{D}_1 , substituindo o bloco (1, 1, 2) por (1, 2, 3), como na figura 4.13.

Figura 4.13 – Delineamentos \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2 .

1	1	1	1	2	2	2
1	3	3	4	3	3	4
2	4	5	5	4	5	5

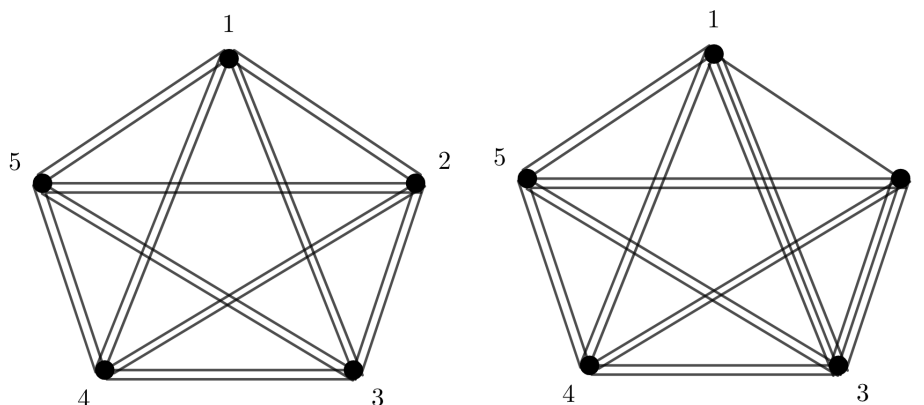
1	1	1	1	2	2	2
2	3	3	4	3	3	4
3	4	5	5	4	5	5

Fonte: Da autora (2024).

No artigo de Bailey e Cameron (2009, p. 15), a otimalidade entre estes delineamentos é obtida utilizando os autovalores da matriz de informação ou da matriz Laplaceana. Os autovalores de \mathcal{D}_1 , usando a matriz de informação L , são: $0, \frac{10}{3}, \frac{10}{3}, \frac{10}{3}$ e $\frac{10}{3}$. Já os autovalores de \mathcal{D}_2 são $0, 3, \frac{10}{3}, \frac{10}{3}$ e $\frac{13}{3}$. Comparando os menores autovalores tem-se que $3 < \frac{10}{3}$. Logo, \mathcal{D}_1 é melhor que \mathcal{D}_2 pelo critério E-ótimo.

Vamos agora fazer a mesma análise utilizando circuitos elétricos. Para tanto, vamos fazer o grafo de concorrência dos delineamentos \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2 (figura 4.14).

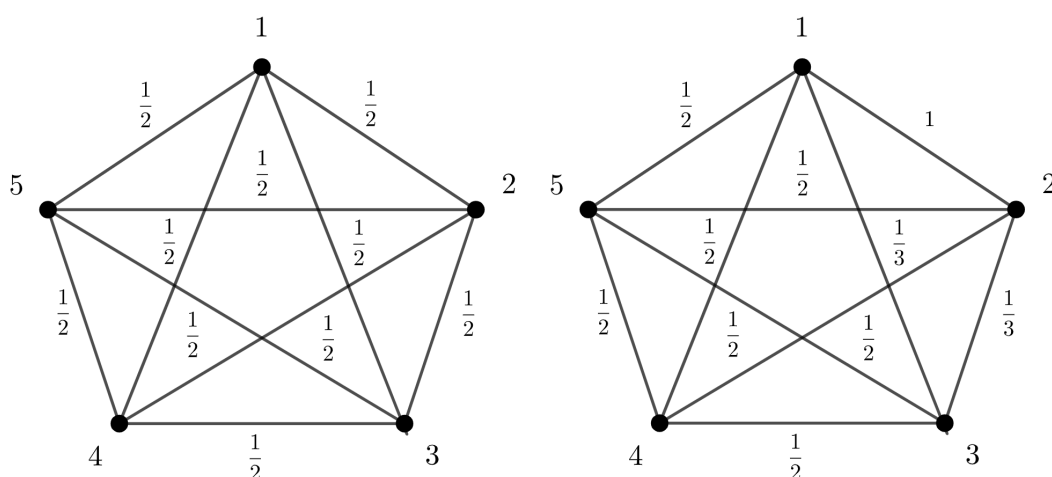
Figura 4.14 – Grafos \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2 .



Fonte: Da autora (2024).

Em circuitos elétricos, para resistências em paralelo tem-se que $\frac{1}{R} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$. Assim, no grafo de concorrência para dois vértices ligados por duas arestas, se $R = 1$, a resistência resultante de cada aresta vale $\frac{1}{2}$. Logo, é possível simplificar os circuitos definidos pelos delineamentos \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2 , como na figura 4.15.

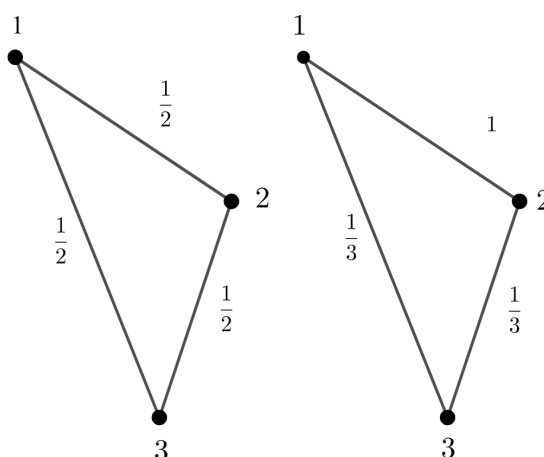
Figura 4.15 – Resistências \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2 .



Fonte: Da autora (2024).

Considere agora apenas os triângulos relativos aos tratamentos 1 e 2 (figura 4.16). Isto porque de \mathcal{D}_1 para \mathcal{D}_2 , os tratamentos são diferentes apenas no primeiro bloco.

Figura 4.16 – Triângulos \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2 .



Fonte: Da autora (2024).

A variância relativa a algum contraste entre tratamentos é proporcional à resistência equivalente de um circuito elétrico. Desse modo, a variância relativa entre o contraste dos tratamentos 1 e 2, considerando os valores das arestas como valores das resistências em \mathcal{D}_1 , é

dada por:

$$\frac{1}{R_{1,2}} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2 + R_3} = \frac{1}{\frac{1}{2}} + \frac{1}{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}} = 3 \Rightarrow V_{1,2} \simeq R_{1,2} = \frac{1}{3}.$$

Note que para \mathcal{D}_1 tem-se $V_{1,2} = V_{1,3} = V_{2,3}$, pois os valores das resistências são todos iguais.

Agora para o delineamento \mathcal{D}_2

$$\begin{aligned} \frac{1}{R_{1,2}} &= \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2 + R_3} = \frac{1}{1} + \frac{1}{\frac{1}{3} + \frac{1}{3}} = \frac{5}{2} \Rightarrow V_{1,2} \simeq R_{1,2} = \frac{2}{5} \\ \frac{1}{R_{1,3}} &= \frac{1}{R_1 + R_2} + \frac{1}{R_3} = \frac{1}{1 + \frac{1}{3}} + \frac{1}{\frac{1}{3}} = \frac{4}{15} \Rightarrow V_{1,3} \simeq R_{1,3} = \frac{15}{4} \\ \frac{1}{R_{2,3}} &= \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_1 + R_3} = \frac{1}{\frac{1}{3}} + \frac{1}{1 + \frac{1}{3}} = \frac{4}{15} \Rightarrow V_{2,3} \simeq R_{2,3} = \frac{15}{4}. \end{aligned}$$

Assim, a variância média de \mathcal{D}_1 é proporcional a

$$\frac{\frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3}}{3} = \frac{1}{3} \approx 0,33.$$

Já a variância média de \mathcal{D}_2 é proporcional a

$$\frac{\frac{2}{5} + \frac{15}{4} + \frac{15}{4}}{3} = \frac{12}{45} \approx 2,63.$$

Portanto, \mathcal{D}_1 é melhor que \mathcal{D}_2 também pelo critério A-ótimo.

Vejam agora como são as matrizes de informação para os delineamentos \mathfrak{D}_1 e \mathfrak{D}_2 , dadas por L_1 e L_2 . Tem-se que

$$L_1 = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 8 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ -2 & 8 & -2 & -2 & -2 \\ -2 & -2 & 8 & -2 & -2 \\ -2 & -2 & -2 & 8 & -2 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 8 \end{pmatrix} = -\frac{1}{3}(10I_{\Theta} - 2J_{\Theta})$$

$$L_2 = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 8 & -1 & -3 & -2 & -2 \\ -1 & 8 & -3 & -2 & -2 \\ -3 & -3 & 10 & -2 & -2 \\ -2 & -2 & -2 & 8 & -2 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 8 \end{pmatrix}.$$

Note que L_1 é completamente simétrica e, portanto, o delineamento é VB, como apresentado na seção 2.8.4.

Em Bailey e Cameron (2009, p. 9) a inversa de Moore-Penrose de L é dada por

$$L^- = \sum_{i \neq 0} \frac{1}{c_i} S_i,$$

em que c_i são autovalores distintos e S_i são projetores.

Para o delineamento \mathfrak{D}_1 , pela regularidade de seu grafo, os projetores S_i são simétricos e os autovalores c_i , como visto anteriormente, são todos iguais. Desse modo, L_1^- é completamente simétrica. Logo, é possível afirmar que a relação entre a variância relativa a um contraste simples e a resistência equivalente V_{ij} deve ser constante para todo i e j , pois

$$V_{ij} = (L_{ii}^- - L_{ij}^- - L_{ij}^- + L_{jj}^-) \sigma^2.$$

Antes de apresentar o próximo exemplo vale destacar que um grafo é uma árvore se não possui caminhos fechados. Lembre-se que um caminho é uma sequência de vértices não adjacentes. Note que todo grafo estrela é uma árvore.

Como uma árvore não possui caminhos fechados a resistência efetiva entre dois vértices, R_{ij} , é dada pelo número de arestas entre i e j , isto é, pelo comprimento do caminho, que é único,

entre i e j . Dessa forma, o critério A-ótimo, que minimiza a soma das resistências efetivas entre todos os pares de vértices, se torna minimizar a soma das distâncias entre eles.

Exemplo 4.5.2. (Bailey; Cameron, 2009, p. 37) Para o grafo estrela, apresentado na figura 2.50, a soma das resistências efetivas para todos os pares de vértices é simples de se calcular. Se i e j não são adjacentes, $R_{ij} = 2$. Logo, a soma das resistências efetivas para os $t - 1$ pares de vértices adjacentes é $t - 1$, e para os

$$C_{t-1}^2 = \frac{(t-1)(t-2)}{2}$$

pares de vértices não adjacentes é

$$2 \frac{(t-1)(t-2)}{2} = (t-1)(t-2).$$

Portanto, o total é

$$(t-1) + (t-1)(t-2) = (t-1)^2.$$

Como o grafo estrela minimiza a distância entre os os vértices ele possui a menor soma de resistências efetivas. Assim, tem-se um delineamento A-ótimo entre todas as árvores com o mesmo número de vértices. Veremos a seguir que ele é também E-ótimo.

A matriz Laplaceana do grafo estrela é dada por

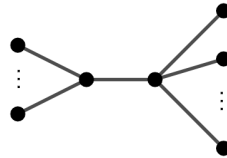
$$L(G) = D - A(G) = \begin{pmatrix} t-1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Pela proposição 2.8.10 os autovalores de $L(G)$ são obtidos facilmente, sendo 1 com multiplicidade $t - 2$ e t com multiplicidade 1.

Vamos mostrar que qualquer outra árvore que não seja uma estrela possui $\mu_1 \leq 1$ e, portanto, o grafo estrela é E-ótimo em relação às árvores. O que significa que o grafo estrela para t tratamentos em $t - 1$ blocos de tamanho 2 é o melhor delineamento para comparar $t - 1$ tratamentos com um tratamento fixo.

Em uma árvore, que não seja uma estrela, com $t > 4$ vértices, separando esta árvore em duas componentes em que uma delas tem pelo menos 2 vértices e a outra tem pelo menos 3, tem-se a figura 4.17.

Figura 4.17 – Árvore com $t > 4$.



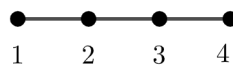
Fonte: Da autora (2024).

Pela proposição 2.8.8 tem-se que

$$\mu_1 \leq \frac{1}{m} + \frac{1}{n} \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{3} = \frac{5}{6}.$$

Para $t = 4$, a única árvore possível é dada na figura 4.18.

Figura 4.18 – Árvore com $t = 4$.



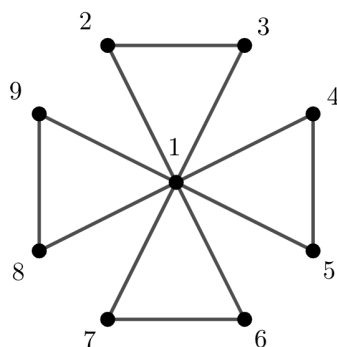
Fonte: Da autora (2024).

Neste caso a Laplaceana é dada por

$$L(G) = D - A(G) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

que possui como menor autovalor $\mu_1 = 2 - \sqrt{2} < 1$. Portanto, fica demonstrado o fato afirmado em Bailey e Cameron (2009, p. 37) que: "a melhor escolha de um delineamento com t tratamentos, $t - 1$ blocos de tamanho 2 é comparar todos os outros tratamentos com um tratamento de fixo".

Exemplo 4.5.3. Da autora (2024) No exemplo 2.8.2 apresentou-se o delineamento queen-bee com 15 tratamentos. Considere agora o mesmo delineamento com 9 tratamentos (figura 4.19).

Figura 4.19 – Queen-bee com $t = 9$.

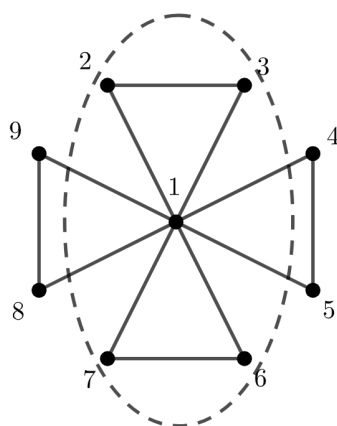
Fonte: Da autora (2024).

Vamos calcular a soma das resistências efetivas R_{ij} para todos os pares de tratamentos. Para tanto, utilizamos o fato de que em um circuito elétrico com caminho fechado, sem bateria ou aterramento, a corrente não circula. Em outras palavras, a resistência efetiva entre os vértices 2 e 6, por exemplo, não é afetada pelas arestas que ligam 1 a 4, 4 a 5, 5 a 1, 1 a 9, 9 a 8, 8 a 1 e assim por diante. Para os 5 tratamentos destacados na figura 4.20 tem-se

$$C_5^2 = \frac{5 \cdot 4}{2} = 10$$

pares de tratamentos.

Figura 4.20 – Pares de tratamentos para queen-bee.



Fonte: Da autora (2024).

Assim, $R_{1,2} = R_{2,3} = R_{3,1} = R_{1,7} = R_{7,6} = R_{1,6}$. Para o cálculo de $R_{1,2}$ têm-se resistências em paralelo. Então,

$$\frac{1}{R_{1,2}} = \frac{1}{1} + \frac{1}{1+1} = \frac{3}{2} \Rightarrow R_{1,2} = \frac{2}{3}.$$

Além disso, $R_{2,6} = R_{3,7} = R_{2,7} = R_{3,6}$. Para o cálculo de $R_{2,6}$ têm-se resistências em série, e como $R_{1,2} = \frac{2}{3}$, então

$$R_{2,6} = \frac{2}{3} + \frac{2}{3} = \frac{4}{3}.$$

Portanto,

$$\sum_{ij} R_{ij} = 6 \cdot \frac{2}{3} + 4 \cdot \frac{4}{3} = \frac{28}{3}.$$

Note que temos no grafo 4 triângulos, logo, temos que tomar todas as combinações destes, ou seja,

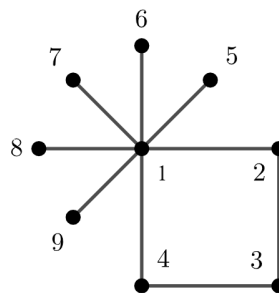
$$\binom{4}{2} = \frac{4 \cdot 3}{2} = 6.$$

Como cada combinação tem soma $\frac{28}{3}$, segue que

$$\sum_{ij} R_{ij} = 6 \cdot \frac{28}{3} = 56.$$

Vamos agora comparar este delineamento com o grafo dado na figura 4.21.

Figura 4.21 – Comparação para queen-bee.



Fonte: Da autora (2024).

A quantidade de pares de vértices para o grafo da figura 4.21 é dada por

$$\binom{9}{2} = \frac{9 \cdot 8}{2} = 36.$$

Utilizando o mesmo raciocínio do exemplo anterior, tem-se as resistências efetivas

$$R_{9,5} = R_{9,6} = R_{9,7} = R_{9,8} = R_{8,5} = R_{8,6} = R_{8,7} = R_{7,5} = R_{7,6} = R_{6,5} = 2$$

$$R_{1,2} = R_{2,3} = R_{3,4} = R_{4,1} = \frac{4}{3}$$

$$R_{1,3} = R_{2,4} = 1$$

$$R_{9,2} = R_{8,2} = R_{7,2} = R_{6,2} = R_{5,2} = R_{9,4} = R_{8,4} = R_{7,4} = R_{6,4} = R_{5,4} = 1 + \frac{3}{4} = \frac{7}{4}$$

$$R_{9,3} = R_{8,3} = R_{7,3} = R_{6,3} = R_{5,3} = 1 + 1 = 2$$

$$R_{9,1} = R_{8,1} = R_{7,1} = R_{6,1} = R_{5,1} = 1.$$

Logo,

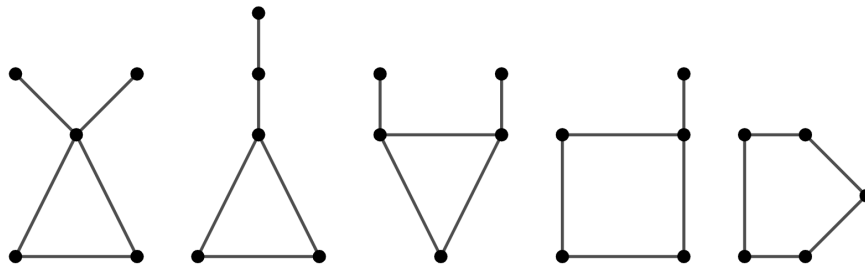
$$\sum_{ij} R_{ij} = 10 \cdot 2 + 4 \cdot \frac{4}{3} + 2 \cdot 1 + 10 \cdot \frac{7}{4} + 5 \cdot 2 + 5 \cdot 1 = 59,83$$

e pelo critério A-ótimo o delineamento queen-bee com 9 tratamentos é melhor pois ele minimiza a soma das resistências efetivas entre os pares de tratamentos.

4.5.1 Grafos unicíclicos

Um grafo é dito unicíclico se possui apenas um ciclo, isto é, apenas um caminho fechado de arestas, conforme exemplos apresentados na figura 4.22. As demais arestas são árvores que saem de algum vértice do ciclo do grafo.

Figura 4.22 – Grafos unicíclicos com $t = 5$.

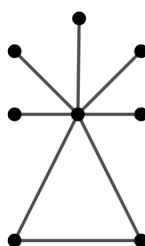


Fonte: Da autora (2024).

Os grafos unicíclicos estão relacionados aos delineamentos experimentais. É possível estudar para quais conjuntos de grafos unicíclicos em t tratamentos são ótimos nos critérios A e E. Estudaremos alguns aspectos desta questão.

Em um grafo unicíclico podemos ter folhas saindo dos vértices do ciclo, figura 4.22. Para o conjunto de grafos unicíclicos, com número de vértices iguais e tamanho do ciclo também iguais, o grafo A-ótimo é aquele em que todos os vértices não pertencentes ao ciclo são adjacentes a um único vértice do ciclo, figura 4.23. Tal fato segue ao calcular as resistências equivalentes.

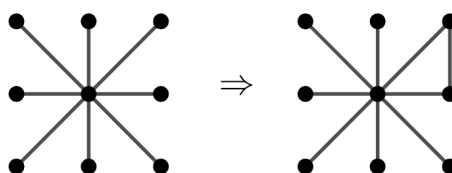
Figura 4.23 – Grafo unicíclico com árvore em algum vértice.



Fonte: Da autora (2024).

Observe que no grafo estrela, se uma aresta é adicionada tem-se um grafo unicíclico, como na figura 4.24, obtendo então um grafo A-ótimo.

Figura 4.24 – Grafos unicíclicos com uma aresta adicionada ao grafo estrela.



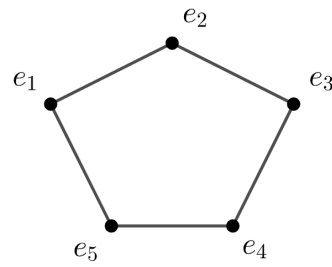
Fonte: Da autora (2024).

No entanto, quando se permite que o número de vértices no ciclo varie, tem-se uma maior complexidade, como expresso no teorema a seguir.

Teorema 4.5.1. (Bailey, Cameron, 2009, p. 39) Seja $t \geq 3$, entre os grafos unicíclicos com t vértices, o grafo A-ótimo é:

- o ciclo, se $t \leq 8$;
- um 4-ciclo com $t - 4$ arestas ligadas a um vértice, se $9 \leq t \leq 11$;
- um triângulo com $t - 3$ arestas ligadas a um vértice, se $t \geq 13$;
- qualquer um dos dois últimos se $t = 12$.

Exemplo 4.5.4. Da autora (2024) Vejamos o grafo formado por um ciclo. Para simplificar, considere o caso com cinco vértices, como mostrado na figura 4.25.

Figura 4.25 – Grafo com um ciclo e $t = 5$.

Fonte: Da autora (2024).

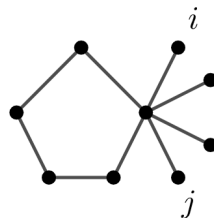
A matriz Laplaceana é dada por

$$L(G) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} = 2I + C, \text{ com } C = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

em que as linhas de C são obtidas a partir da primeira linha, por rotação no sentido horário. Essas matrizes são denominadas matrizes circulares e possuem uma teoria particular interessante. Os autovalores dessas matrizes são conhecidos e para o caso de um ciclo com t vértices, o menor autovalor de $L(G)$ é $2(1 - \cos(\frac{2\pi}{t}))$, que é maior que 1 se $t \leq 5$, igual a 1 se $t = 6$ e menor que 1 se $t \geq 7$.

Para o caso em que os vértices não pertencentes ao ciclo são adjacentes a um único vértice do ciclo temos o caso da figura 4.26.

Figura 4.26 – Vértices adjacentes a um único vértice do ciclo.



Fonte: Da autora (2024).

A Laplaceana desses grafos, coletando primeiro os vértices do ciclo e em seguida da árvore e aplicando esta Laplaceana a um contraste simples entre vértices não pertencentes ao

ciclo é

$$L(G)x = \begin{pmatrix} d & -1 & -1 & \dots & 0 & -1 & -1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & -1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

e, portanto, possui autovalor igual a 1.

4.5.2 Uma aplicação do teorema de Foster

Em Foster (1949), tem-se um resultado que diz que para uma grafo simples, considerado como um circuito elétrico, a soma de todas as resistências efetivas entre pares de vértices adjacentes (unidos por uma mesma arestas) de um grafo com t vértices é igual a

$$\sum_{i \sim j} R_{ij} = t - 1. \quad (4.2)$$

Posteriormente, Foster obteve uma equação semelhante. A soma de todas as resistências efetivas entre pares de vértices i e j que estão a uma distância 2 é

$$\sum_{i \sim h \sim j} \frac{R_{ij}}{d(h)} = t - 2, \quad (4.3)$$

em que $d(h)$ é o grau de h e a soma considera todos os caminhos de comprimento 2 entre i e j , ou seja, existe um vértice h que separa i e j .

Para grafos que são árvores, a fórmula 4.2 pode ser demonstrada de forma trivial. De fato, em uma árvore para vértices adjacentes i e j , como só existe um caminho ligando-os a

resistência efetiva $R_{ij} = 1$ e, portanto,

$$\sum_{i \sim j} R_{ij} = \sum_{i \sim j} 1 = t - 1.$$

Para o grafo completo, com t vértices, o cálculo da resistência efetiva R_{ij} parece mais complexo pois têm-se vários caminhos entre i e j . Entretanto, pela simetria do grafo completo, R_{ij} deve ser constante para todo par não ordenado de vértices. Como existem

$$C_t^2 = \frac{t(t-1)}{2}$$

pares de vértices, segue da fórmula 4.2 de Foster que

$$t - 1 = \sum_{i \sim j} R_{ij} = \sum_{i \sim j} R_{i_0 j_0} = \frac{t(t-1)}{2} R_{i_0 j_0}$$

e, portanto, $R_{i_0 j_0} = \frac{2}{t}$.

Vamos agora calcular a variância de um contraste simples em um BIBD. O grafo de concorrência para este delineamento é um grafo completo em que dois vértices estão ligados por λ arestas. Considere as λ arestas como resistências de valor 1, em um circuito paralelo. A resistência equivalente neste caso é

$$\frac{1}{R} = 1 + \dots + 1 \Rightarrow \frac{1}{R} = \lambda \Rightarrow R = \frac{1}{\lambda}.$$

A fórmula 4.2 de Foster resulta em

$$\sum_{i \sim j} R_{ij} = \frac{t(t-1)}{2} R_{i_0 j_0} = \frac{1}{\lambda} (t-1).$$

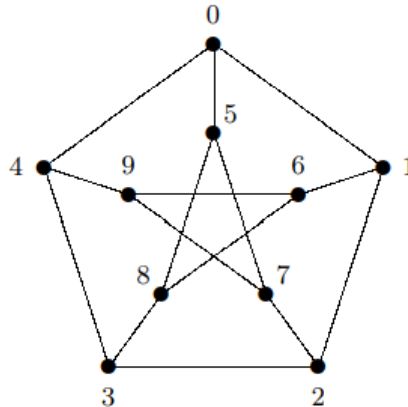
Portanto, pelo resultado anterior, a resistência efetiva é $R_{i_0 j_0} = \frac{2}{\lambda t}$. Utilizando o teorema que relaciona resistência efetiva e variância Bailey e Cameron (2011, p. 17) segue que a variância do contraste é dada por

$$V_{ij} = R_{i_0 j_0} k \sigma^2 = \frac{2}{\lambda t} k \sigma^2,$$

em que k é o tamanho do bloco. O resultado acima exhibe a variância de um contraste simples para um BIBD, esse resultado também encontra-se em Bailey (2004, p. 114).

As fórmulas 4.2 e 4.3 de Foster são úteis quando aplicadas a grafos fortemente regulares. Lembre-se que a definição de grafo fortemente regular foi dada em 2.8.2.

Exemplo 4.5.5. O grafo de Petersen, apresentado no exemplo 2.7.1, possui 10 vértices com grau 3 e diâmetro 2 (dois vértices quaisquer são ligados por caminhos com uma ou duas arestas), não possui triângulos e dois vértices não adjacentes possuem apenas um vértice em comum.



Como não existem triângulos os termos da fórmula 4.3 de Foster são todos os pares de vértices não adjacentes, uma vez que a distância entre eles é 2, ou seja,

$$(t-2) = \sum_{i \sim h \sim j} \frac{R_{ij}}{d(h)} \implies 8 = \frac{1}{3} \sum_{i \sim h \sim j} R_{ij} \implies \sum_{i \sim h \sim j} R_{ij} = 24.$$

A soma de todos os pares de vértices adjacentes, pela fórmula 4.2 é

$$\sum_{i \sim j} R_{ij} = 9.$$

Como todos os pares de vértices estão à distâncias 1 ou 2, todos os pares de vértices ocorrem em uma das somas, portanto

$$\sum_{\text{arestas}} R_{ij} = 24 + 9 = 33.$$

Observe também que pela simetria do grafo de Petersen, os termos nas duas somas são constantes, isto é, se i_0 e j_0 são vértices adjacentes existem 15 arestas e

$$\sum_{i \sim j} R_{ij} = 9 \implies \sum_{i \sim j} R_{i_0 j_0} = 9 \implies 15R_{i_0 j_0} = 9 \implies R_{i_0 j_0} = \frac{9}{15}.$$

Agora para vértices i_0 e j_0 não adjacentes, como existem 10 vértices, o número de pares de vértices é $\binom{10}{2} = 45$. Como o número de arestas adjacentes é 15, tem-se $45 - 15 = 30$ pares de vértices não adjacentes. Segue então que

$$\sum_{i \sim h \sim j} R_{ij} = 24 \Rightarrow \sum_{i \sim h \sim j} R_{i_0 j_0} = 24 \Rightarrow 30R_{i_0 j_0} = 24 \Rightarrow R_{i_0 j_0} = \frac{4}{5}.$$

Observe a dificuldade de calcular a resistência efetiva entre dois vértices, pois, existem inúmeros caminhos em série e paralelo que os ligam.

5 CONCLUSÃO

Apesar da natureza algébrica dos esquemas de associação, a abordagem geométrica é esclarecedora no sentido de unir a teoria matemática e estatística. Tratar a álgebra de Bose-Mesner como uma álgebra de matrizes diagonais é uma simplificação expressiva e permite a obtenção de um algoritmo simples para o cálculo do strata do esquema de associação.

A ortogonalidade é um aspecto fundamental na teoria dos delineamentos experimentais. As discussões sobre seus variados significados ajuda a entender os diversos delineamentos experimentais existentes.

As propriedades de delineamentos solúveis foram obtidas de maneira simples, a partir da teoria dos grafos. A apresentação dos grafos modelados como circuitos elétricos mostrou-se uma ferramenta efetiva no estudo das propriedades dos delineamentos experimentais.

REFERÊNCIAS

- BAILEY, R. A. **Association schemes: Designed experiments, algebra and combinatorics**. Cambridge University Press, 2004.
- BAILEY, R. A. **Design of comparative experiments**. Cambridge University Press, 2008.
- BAILEY, R. A.; CAMERON, P. J. Combinatorics of optimal designs. **Surveys in combinatorics**, v. 365, n. 19-73, p. 3, 2009.
- BAILEY, R. A.; CAMERON, P. J. Using graphs to find the best block designs. **arXiv preprint arXiv:1111.3768**, 2011.
- BOLDRINI, J. L. *et al.* **Álgebra linear**. 3. ed. Harper e Row, 1980.
- BOSE, R. C. A note on the resolvability of balanced incomplete block designs. **Sankhyā: The Indian Journal of Statistics**, p. 105-110, 1942.
- FERREIRA, D. F. **Estatística multivariada**. Lavras: Editora Ufla, 2008.
- FOSTER, R. M. **The average impedance of an electrical network**. Contributions to Applied Mechanics (Reissner Anniversary Volume), v. 333, 1949.
- GUIMARÃES, P. H. S. **Uma abordagem geométrica da Teoria de Inversas Generalizadas**. 2010. 67 p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2010.
- LINT, J. H. van; WILSON, R. M.; WILSON, R. M. **A course in combinatorics**. Cambridge university press, 2001.
- LIPSCHUTZ, S. **Teoria dos conjuntos**. Tradução do Engenheiro Fernando Vilain Heuri da Silva. Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico S.A., 1968. (Coleção SCHAUM).
- SANTOS, R. J. **Álgebra linear e aplicações**. Belo Horizonte: Imprensa Universitária da UFMG, 2006.
- SILVA, J. G. **Abordagem geométrica dos principais delineamentos experimentais e diagramas de Hasse**. 2020. 144 p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária)-Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2020.
- SPURI, J.; CHAVES, L. M. Uma demonstração do teorema da amizade utilizando grafos com uma aplicação em delineamentos experimentais. **Brazilian Journal of Biometrics**, v. 40, n. 3, 2022.

APÊNDICE A – Glossário

Autoespaços: vetores que correspondem ao mesmo autovalor.

Im(X): espaço gerado pelos vetores coluna de X .

Ker(X): conjunto de todos o vetores x , tais que para uma matriz X , tem-se $Xx = \vec{0}$.

span(X): conjunto de todos os vetores geradores de um autoespaço.

posto(X): número de linhas não nulas de X .

APÊNDICE B – Matrizes utilizadas em delineamentos

Este apêndice apresenta uma síntese das principais matrizes utilizadas no texto, no que se refere aos delineamentos experimentais. Apresenta-se também o resultado para diagonalização de matrizes simétricas.

Matriz de delineamento

$$X_{n \times t} = (x_{ij}), x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se a parcela } i \text{ recebeu o tratamento } j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

$$X'X = (a_{ij}), a_{ij} = \sum_{s=1}^n x_{si}x_{sj} = \begin{cases} r_i, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

$$X'X = R = \begin{pmatrix} r_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & r_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & r_t \end{pmatrix}$$

Com r_1, r_2, \dots, r_t , repetições dos tratamentos $1, 2, \dots, t$. Se $r_1 = r_2 = \dots = r_t$ tem-se o delineamento equireplicado.

Matriz de blocos

$$Z_{n \times b} = (z_{ij}), z_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se a parcela } i \text{ está no bloco } j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se os blocos possuem o mesmo número de parcelas tem-se:

$$Z'Z = (b_{ij}), b_{ij} = \sum_{s=1}^b z_{si}z_{sj}$$

$$b_{ij} = \begin{cases} k, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$$

pois a parcela s não pode receber os tratamentos i e j ao mesmo tempo. Assim, $z_{si}z_{sj} = 1$ se $i = j$ e $z_{si}z_{sj} = 0$ se $i \neq j$, de onde vem que, $b_{ii} = k$ e $b_{ij} = 0$. Logo, $Z'Z = kI$.

Como consequência temos que $\frac{1}{k}ZZ'$ é um projetor ortogonal pois é simétrico, e

$$\left(\frac{1}{k}ZZ'\right)\left(\frac{1}{k}ZZ'\right) = \frac{1}{k^2}B(Z'Z)Z' = \frac{1}{k^2}Z(kI)Z' = \frac{1}{k}ZZ'.$$

Vamos verificar onde encontra-se essa projeção. Note que

$$ZZ' = (b_{ij}), \quad b_{ij} = \sum_{s=1}^b z_{is}z_{js}$$

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i \text{ e } j \text{ estão no mesmo bloco,} \\ 0, & \text{se } i \text{ e } j \text{ não estão no mesmo bloco,} \end{cases}$$

pois e $z_{is}z_{js} = 0$ para todo s , exceto para o bloco que contém as parcelas i e j .

Para visualizar o projetor $\frac{1}{k}ZZ'$, vamos ordenar as parcelas de forma que as k parcelas do primeiro bloco fiquem juntas, as k parcelas do segundo bloco fiquem juntas e assim sucessivamente. Dessa maneira tem-se a matriz

$$\frac{1}{k}ZZ' = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} J & 0 & \dots & 0 \\ 0 & J & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & J \end{pmatrix},$$

em que

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$

Logo, a matriz $\frac{1}{k}ZZ'$ é a projeção no subespaço de bloco V_B . Portanto, $Q = I - \frac{1}{k}ZZ'$ é a projeção em V_B^\perp .

Matriz de incidência tratamento-bloco

$$N_{t \times b} = X'Z = (n_{ij}), \quad n_{ij} = \sum_{s=1}^t x_{si}z_{sj}$$

$$n_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se a parcela } s \text{ recebeu o tratamento } i \text{ e está no bloco } j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Logo, n_{ij} conta quantas vezes o tratamento i ocorreu no bloco j . A matriz de incidência N caracteriza um delineamento binário e não binário. Um delineamento é dito binário se todo tratamento aparece no máximo uma vez em cada bloco, isto é, $n_{ij} = 0$ ou 1 , para todo, $i \in \{1, 2, \dots, t\}$ e $j \in \{1, 2, \dots, b\}$. Para o caso não binário $n_{is}n_{js}$ é uma contagem com repetição e ocorrem valores diferentes de 0 ou 1.

Matriz de concorrência

$$\Lambda_{t \times t} = NN' = (\lambda_{ij}), \quad \lambda_{ij} = \sum_{s=1}^b n_{is}n_{js}.$$

Note que $n_{is}n_{js} = 1$ se os tratamentos i e j ocorrem conjuntamente no bloco s ou $n_{is}n_{js} = 0$ se os tratamentos i e j não ocorrem conjuntamente no bloco s . Logo, $\lambda_{ij} = \sum_{s=1}^b n_{is}n_{js}$ é o número de vezes em que o par de tratamentos i e j ocorrem juntos no mesmo bloco. Observe que $n_{is}n_{si} = r_i$ se i ocorre no bloco s e, portanto, $\lambda_{ii} = r_i$.

Matriz de informação

$$L_{t \times t} = R - \frac{1}{k}\Lambda = (l_{ij}),$$

em que R é a matriz diagonal com as repetições dos tratamentos. Para a matriz L vale a relação:

$$\begin{aligned} L_{t \times t} &= R - \frac{1}{k}\Lambda = R - \frac{1}{k}NN' = R - \frac{1}{k}(X'Z)(X'Z)' = R - \frac{1}{k}X'ZZ'X \\ &= X'X - \frac{1}{k}X'(ZZ')X = X' \left(I - \frac{1}{k}ZZ' \right) X = X'QX. \end{aligned}$$

Matriz de relação

Dada uma partição qualquer tem-se que:

$$R_{n \times n} = (r_{ij}), r_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se as parcelas } i \text{ e } j \text{ estão na mesma classe da partição,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Matriz de adjacência

Dado um esquema de associação com classes $\mathfrak{C} = \{\mathfrak{C}_0, \mathfrak{C}_1, \dots, \mathfrak{C}_s\}$, tem-se

$$A_{n \times n} = (a_{ij}), a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i \text{ e } j \text{ estão na classe } \mathfrak{C}_i, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Definição .0.1. Uma matriz quadrada é dita completamente simétrica se sua diagonal possui valores todos iguais entre si e se fora da diagonal seus valores também são iguais entre si.

Uma matriz completamente simétrica A sempre é combinação linear de I e J , pois

$$A = \alpha I + \beta(J - I) = (\alpha - \beta)I + \beta J.$$

Delineamentos que apresentam matrizes de informação L completamente simétricas são denominados delineamentos com variância balanceada (VB). Como

$$L = R - \frac{1}{k}\Lambda \Rightarrow$$

$$l_{ii} = r_i - \frac{1}{k} \sum_{s=1}^b n_{is}^2 = r_i - \frac{1}{k} \sum_{s=1}^n n_{is} = r_i - \frac{1}{k} r_i = \left(\frac{k-1}{k} \right) r_i,$$

observe que $n_{is}^2 = n_{is}$ pois $n_{is} = 0$ ou 1 para delineamentos binários. O fato de L ser completamente simétrica implica que o delineamento é equireplicado com $l_{ii} = r$ e $l_{ij} = \lambda$, para todo $i \neq j$.

Diagonalização de matrizes simétricas

A diagonalização de matrizes simétricas é um resultado básico de álgebra linear. Para toda matriz simétrica A existe uma matriz ortogonal H (sua transposta é igual sua inversa $H' = H^{-1}$)

tal que $HAH' = D$, em que D é uma matriz diagonal,

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

com $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ autovalores de A . Note que

$$HAH' = D \Rightarrow A = H'DH \Rightarrow De_i = \lambda_i e_i \Rightarrow v = H'e_i \Rightarrow e_i = Hv$$

Assim

$$Av = H'DHv = H'DHH'e_i = H'De_i = H'(\lambda_i e_i) = \lambda_i H'e_i = \lambda_i v.$$

Outra propriedade, um pouco menos conhecida, é que se A e B são matrizes simétricas que comutam, $AB = BA$, então A e B podem ser simultaneamente diagonalizadas por uma mesma matriz ortogonal H .

Demonstração: Seja H uma matriz ortogonal que diagonaliza A , ou seja, $HAH' = D$. Tem-se que

$$\begin{aligned} AB = BA &\Rightarrow \\ HAH'HBH' &= HBH'HAH' \Rightarrow \\ DHBH' &= HBH'D. \end{aligned}$$

Portanto, a matriz HBH' comuta com uma matriz diagonal. Se todas as entradas da matriz D são diferentes então, HBH' é necessariamente uma matriz diagonal. Este fato segue diretamente da inspeção, como ilustrado para o caso 2×2

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 a & \lambda_2 b \\ \lambda_1 b & \lambda_2 c \end{pmatrix} \Rightarrow \\ \lambda_1 b = \lambda_2 b \Rightarrow b = 0, \text{ pois, } \lambda_1 \neq \lambda_2. \end{aligned}$$

Para o caso em que um dos autovalores de D são iguais, isto é, o subespaço correspondente tem dimensão maior que um, a construção é mais elaborada. Se

$$Dw = \lambda_i w \Rightarrow \\ DHBH'w = HBH'Dw = HBH'(\lambda_i w) = \lambda_i HBH'w$$

e, portanto, $HBH'w$ pertence ao autoespaço relativo a λ_i . Logo, esse autoespaço é invariante por HBH' . A ideia é obter outra transformação ortogonal que preserve esse autoespaço e que diagonaliza HBH' . Tal fato encontra-se na seção 4.2

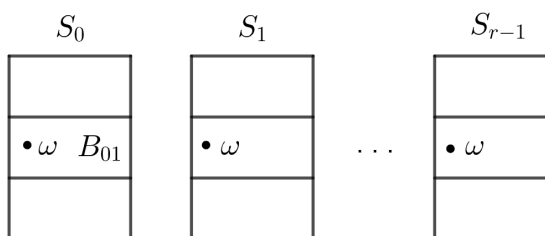
APÊNDICE C – O teorema de Bose para delineamentos balanceados solúveis

Considere um delineamento em bloco incompleto balanceado (BIBD) com parâmetros, t , b , k , r e λ . Um BIBD é dito solúvel se seus blocos podem ser agrupados de modo que possam formar "superblocos" completos. Observe que a replicação r é igual ao número de superblocos. Para os BIBD's tem-se que $bk = rt$ e $\lambda(t - 1) = r(k - 1)$. Para o caso solúvel tem-se $bk = rnk$ o que implica que $b = rn$, em que n é igual ao número de blocos em um superbloco.

Vamos enumerar esses superblocos da forma $i = 1, 2, \dots, r - 1$, pois existem r superblocos. Como cada superbloco contém n blocos, vamos enumerá-los de forma que o i -ésimo superbloco seja S_i e seus blocos $B_{i1}, B_{i2}, \dots, B_{in}$. Para um bloco qualquer, B_{ij}, B_{01} , seja $|B_{01} \cap B_{ij}| = l_{ij}$. Temos $n(r - 1)$ valores l_{ij} , pois $i = 1, 2, \dots, r - 1$ e $j = 1, 2, \dots, n$.

Sejam μ e σ^2 a média e a variância do conjunto de números $\{l_{ij}\}$. Cada uma das parcelas em B_{01} é replicada r vezes, mas não ocorrem em nenhum bloco do superbloco S_0 . Logo, uma parcela particular ocorre nos $r - 1$ blocos situados em superblocos distintos, conforme os superblocos da figura 1.

Figura 1 – Superblocos.



Fonte: Da autora (2024).

Assim,

$$\sum_{\substack{j=1 \\ i=1}}^{r-1} l_{ij} = k(r - 1).$$

Cada um dos $\frac{k(k-1)}{2}$ pares de parcelas de B_{01} aparecem juntos em $\lambda - 1$ blocos de B_{ij} , $i \neq 0$, em que o par só ocorre uma vez em um superbloco. Para parcelas em $B_{01} \cap B_{ij}$ temos

$\frac{1}{2}l_{ij}(l_{ij} - 1)$ pares, cada um deles ocorrendo em $\lambda - 1$ vezes juntos. Logo,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{j=1}^n l_{ij} \frac{1}{2}(l_{ij} - 1) &= \frac{1}{2}(\lambda - 1)k(k - 1) \\ \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{j=1}^n l_{ij}^2 - \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{j=1}^n l_{ij} &= (\lambda - 1)k(k - 1) \\ \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{j=1}^n l_{ij}^2 - k(r - 1) &= (\lambda - 1)k(k - 1) \\ \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{j=1}^n l_{ij}^2 &= k((\lambda - 1)(k - 1) + (r - 1)). \end{aligned}$$

Como $\lambda(v - 1) = r(k - 1)$, $t = nk$ e $b = nr$, temos que

$$\lambda = \frac{r(k - 1)}{t - 1} = \frac{r(k - 1)}{nk - 1}.$$

Substituindo em $\sum l_{ij}^2$ obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{j=1}^n l_{ij}^2 &= k \left(\left(\frac{r(k - 1)}{nk - 1} - 1 \right) (k - 1) + (r - 1) \right) \\ &= k \left(\left(\frac{(r(k - 1) - nk + 1)(k - 1)}{nk - 1} \right) + (r - 1) \right) \\ &= k \left(\frac{(r(k - 1) - nk + 1)(k - 1) + (nk - 1)(r - 1)}{nk - 1} \right) \\ &= k \left(\frac{r(k - 1)^2 + (-nk + 1)(k - 1) + (nk - 1)(r - 1)}{nk - 1} \right) \\ &= k \left(\frac{r(k - 1)^2 - (nk - 1)(k - 1) + (nk - 1)r - (nk - 1)}{nk - 1} \right) \\ &= k \left(\frac{r(k - 1)^2 - (nk - 1)((k - 1) - 1) + (nk - 1)r}{nk - 1} \right) \\ &= k \left(\frac{r(k - 1)^2 - (nk - 1)k + (nk - 1)r}{nk - 1} \right) \\ &= k \left(\frac{r(k - 1)^2 + (nk - 1)(r - k)}{nk - 1} \right). \end{aligned}$$

Vimos que $\sum l_{ij} = k(r-1)$ e como $i = 1, 2, \dots, r-1$ e $j = 1, 2, \dots, n$, temos então $n(r-1)$ termos. Desse modo, a média dos valores de l_{ij} é dada por:

$$\frac{1}{n(r-1)} \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{j=1}^n l_{ij} = \frac{k(r-1)}{n(r-1)} = \frac{k}{n}.$$

Portanto, a variância é

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \frac{1}{n(r-1)} \left(\sum_{i=1}^{r-1} \sum_{j=1}^n (l_{ij} - \mu)^2 \right) \\ &= \frac{1}{n(r-1)} \sum_{i=1}^{r-1} l_{ij}^2 - \mu^2 \\ &= \frac{1}{n(r-1)} \left(k \left(\frac{r(k-1)^2 + (nk-1)(r-k)}{nk-1} \right) \right) - \frac{k^2}{n^2} \\ &= k \left(\frac{r(k-1)^2 + (nk-1)(r-k)}{n(r-1)(nk-1)} \right) - \frac{k^2}{n^2} \\ &= \frac{nk(r(k-1)^2 + (nk-1)(r-k)) - (r-1)(nk-1)k^2}{n^2(r-1)(nk-1)} \\ &= \frac{k^2(r-1)(r(n-1) - (nk-1))}{n^2(r-1)(nk-1)}. \end{aligned}$$

Utilizando o fato que $t = nk$ e $b = nr$, temos que

$$\sigma^2 = \frac{k(t-k)(b-t-r+1)}{n^2(r-1)(t-1)},$$

e, portanto,

$$b-t-r+1 \geq 0 \Rightarrow b \geq t+r-1.$$

Segue então que para um BIBD solúvel a desigualdade de Fisher $b \geq t$ é generalizada para $b \geq t+r-1$.

O caso da igualdade $b = t+r-1$ tem propriedades interessantes. Neste caso, como $\sigma^2 = 0$, os números l_{ij} são iguais. Portanto, blocos em superblocos diferentes possuem sempre o mesmo número de tratamentos em comum. Vale também a recíproca, pois, se l_{ij} são constantes, σ^2 é nulo e portanto $b = t+r-1$.

Como $l_{ij} = \frac{k}{n}$ é o número de tratamentos em comum para os blocos B_{0i} e B_{ij} , segue que $\frac{k}{n}$ é um inteiro e $\frac{k}{n} = \frac{k^2}{nk} = \frac{k^2}{t}$. Tem-se então uma condição necessária para um delineamento em que $b = t + r - 1$ seja solúvel, ou seja, deve-se ter $\frac{k^2}{t}$ inteiro. Por exemplo, o delineamento definido pelo grafo de Petersen (exemplo 2.7.1), que é um grafo regular, com $t = 10$, $k = 3$, $\lambda = 0$ e $\mu = 0$, tem-se que $\frac{k^2}{t} = \frac{3^2}{10}$. Logo, o delineamento não é solúvel.

A demonstração apresentada neste apêndice é a mesma do artigo original de Bose (1942), porém, um pouco mais detalhada.

APÊNDICE D – Demonstração do teorema 2.7.3

Demonstração. Primeiramente devemos observar que \mathbb{Z}_p , para p primo, é um corpo. Deste fato podemos utilizar muitos resultados da álgebra linear de espaços vetoriais sobre os reais. Sendo assim, um caracter $\phi : \mathbb{Z}_p^n \rightarrow \mathbb{Z}_p$ é um funcional linear. Seu kernel, $\phi^{-1}(0)$ é um subespaço vetorial de dimensão um, e portanto existe um único vetor $v \in \mathbb{Z}_p^n$ tal que $\psi(w) = \langle v, w \rangle$, em que $\langle v, w \rangle$ é o produto interno usual e v é ortogonal ao subespaço $\psi^{-1}(0)$. Feitas essas observações, segue a demonstração do teorema:

- a) segue de imediato do exposto antes do enunciado do teorema;
- b) Vejamos os itens:

- se existe $k \in \mathbb{Z}_p$ tal que

$$F = \sum_{i=1}^n f_i F_i \text{ e } G = \sum_{i=1}^n g_i G_i = \sum_{i=1}^n k f_i F_i,$$

então $F \equiv G$. Considere a função

$$\begin{aligned} \tilde{k} : \mathbb{Z}_p^n &\rightarrow \mathbb{Z}_p^n \\ (x_1, \dots, x_n) &\rightarrow (kx_1, \dots, kx_n) \end{aligned}$$

com

$$G(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n k f_i F_i(x_1, \dots, x_n) = k \sum_{i=1}^n f_i F_i(x_1, \dots, x_n) = kF(x_1, \dots, x_n).$$

É imediato que a função \tilde{k} é uma permutação entre as classes $\{F^{-1}(a), a \in \mathbb{Z}_p^n\}$ e $\{G^{-1}(a), a \in \mathbb{Z}_p^n\}$. Portanto, dado um caracter F , tem-se $p - 1$ caracteres $G = kF$, $k \neq 0 \in \mathbb{Z}_p^n$, isto é, $p - 1$ caracteres aninhados com F , $F \equiv G$.

Vamos agora demonstrar o fato, não enuciado no teorema, que diz que se $F \equiv G$ existe k tal que $G = kF$.

Primeiramente deve-se observar que $F^{-1}(0)$ é um grupo em relação a adição, pois, se $a, b \in F^{-1}(0)$ então $F(a + b) = F(a) + F(b) = 0$. Portanto, $F^{-1}(0)$, além de ser um subespaço vetorial, é também um grupo. As outras pré-imagens de F são subespaços afins, isto é, da forma $b + F^{-1}(0)$, $b \in \mathbb{Z}_p^n$ e portanto não são subgrupos. Ora, $G^{-1}(0)$ também é um subgrupo e, portanto, só pode ser igual a

$f^{-1}(0)$. Como observado, existem v e w ortogonais a $F^{-1}(0)$ tais que

$$F(x) = \langle w, x \rangle \text{ e } G(x) = \langle v, x \rangle$$

Como o subespaço ortogonal a $F^{-1}(0)$ é unidimensional, existe $k \in \mathbb{Z}_p^n$ tal que $w = kv$ e, portanto,

$$G(x) = \langle w, x \rangle = \langle kv, x \rangle = k \langle v, x \rangle = kF(x);$$

- se $F \neq G$ então F e G são ortogonais. Como vimos as classes de F são subespaços afins de dimensão um, todos paralelos ao subespaço $F^{-1}(0)$. O mesmo ocorre para G . Como os subespaços $F^{-1}(0)$ e $G^{-1}(0)$ não são iguais pela dimensionalidade todos os subespaços afins definidos por F e G se interceptam 2 a 2 e todas essas interseções possuem o mesmo número de elementos, $|F^{-1}(0) \cap G^{-1}(0)|$. Segue do teorema 2.6.2 que os fatores F e G são ortogonais. Vejamos agora que $F \vee G = \mathbb{Z}_p^n$. Como F define uma partição uniforme com p classes e \mathbb{Z}_p^n possui p^n elementos, cada classe possui $\frac{p^n}{p} = p^{n-1}$ elementos. Uma classe de $F \vee G$ é formada por classes de F (e de G). Suponha que se tenham m classes e portanto mp^{n-1} elementos. Assim, mp^{n-1} deve dividir p^n . Logo,

$$\frac{p^n}{mp^{n-1}} = \frac{p}{m},$$

que é um inteiro. Portanto $m = p$ é a classe de $F \vee G$ que contém todos os elementos de \mathbb{Z}_p^n . O que implica que $F \vee G = \mathbb{Z}_p^n$;

- c) supondo $G = \sum_{i=1}^n g_i F_i$, tal que G não seja aninhado a nenhum F_i . Neste caso, tem-se então pelo menos dois valores g_i e g_j não nulos. Vamos supor, sem perda de generalidade, que

$$G = \sum_{s=1}^l g_s F_s.$$

Do item b) tem-se que G é estritamente ortogonal a F_s para todo s , o que implica que $G \vee F_i = U$ e

$$\begin{aligned} V_G \cap (V_{G \vee F_s})^\perp &\perp V_{F_s} \cap (V_{G \vee F_s})^\perp \Rightarrow \\ V_G \cap (V_U)^\perp &\perp V_{F_s} \cap (V_U)^\perp \Rightarrow \\ V_G \cap V_0 &\perp V_{F_s} \cap V_0 \Rightarrow \\ W_G &\perp W_{F_s}. \end{aligned}$$

Logo, $W_G \perp V_{F_s}$ para todo s . Assim, $W_G \subseteq V_{F_s}^\perp$ para todo s e, portanto,

$$W_G \subseteq \left(\bigoplus_s V_{F_s} \right)^\perp$$

e segue que W_G está contido no espaço de interaçãodos fatores F_1, F_2, \dots, F_s . \square