

BRÁULIA APARECIDA DE ALMEIDA PERÁZIO

**EFEITOS DOS PONTOS AXIAIS E CENTRAIS SOBRE A EFICIÊNCIA DO
DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística Aplicada e Biometria, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS – BRASIL
2010

BRÁULIA APARECIDA DE ALMEIDA PERÁZIO

**EFEITOS DOS PONTOS AXIAIS E CENTRAIS SOBRE A EFICIÊNCIA DO
DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística Aplicada e Biometria, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 24 de fevereiro de 2010.

Prof. Fabyano Fonseca e Silva

Prof. Jaques Silveira Lopes

Prof. Nerilson Terra Santos
(Co-orientador)

Prof. Sebastião Martins Filho
(Co-orientador)

Prof. José Ivo Ribeiro Júnior
(Orientador)

DEDICATÓRIA

A DEUS e às pessoas que mais amo:
minha família e
Mercio.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por estar sempre me indicando o melhor caminho, e me dando força em todos os momentos da vida, muito obrigada Senhor!

Aos meus pais, Maria Aparecida e Geraldo, minhas irmãs, pelo apoio, amizade, união e compreensão em todos os momentos.

Ao meu grande companheiro Mercio, pela paciência e compreensão, obrigada por estar sempre me fazendo feliz e me apoiando em todos os momentos.

Ao professor José Ivo Ribeiro, pela orientação, pela amizade, paciência, confiança e incentivo.

Aos professores do departamento de estatística, pelos ensinamentos, disponibilidade, amizade e carinho.

Aos professores que participaram da banca examinadora, Fabyano Fonseca e Silva, Jaques Silveira Lopes, Nerilson Terra Santos e Sebastião Martins Filho, por terem aceitado o convite e por suas contribuições oportunas, que certamente enriqueceram o trabalho.

À Universidade Federal de Viçosa, pela oportunidade de realização deste curso.

Aos amigos de curso, em especial Adriana, Ana Carolina, André, Alex, Deysiana, Fernanda, Fernando, Flávia, Telma, Thiago e Willerson, pelo convívio agradável durante a realização deste curso.

Aos amigos de outras datas que me apoiaram e me incentivaram em todos os momentos: Deuseni, Flávia, Noêmia, Vanda ...

A Marina, em especial, pelo incentivo, otimismo, amizade e compreensão.

À CAPES pelo apoio financeiro.

Aos secretários do curso de pós-graduação em Estatística Aplicada e Biometria, Altino, Anita, Marise, Joel e Paulinho pelo apoio, dedicação, atenção e amizade.

Por fim a todos que me ensinaram de alguma forma, me apoiaram, me acolheram ...
que fazem parte da minha história, muito obrigada a todos vocês!

SUMÁRIO

RESUMO	vii
ABSTRACT	ix
1. INTRODUÇÃO	1
2. OBJETIVOS	3
2.1. Geral	3
2.2. Específicos	3
3. REFERENCIAL TEÓRICO	4
3.1. Superfície de resposta	4
3.2. Delineamento Composto Central	8
3.2.1. Rotacionalidade	11
3.2.2. Ortogonalidade	12
4. MATERIAL e MÉTODOS	14
4.1. Material	14
4.1.1. Simulação do fatorial completo	14
4.1.2. Simulação do Delineamento Composto Central	17
4.2. Superfície de resposta ajustada	21
4.3. Medidas avaliadas	22
4.4. Delineamento composto central	25
4.5. Comparação entre o delineamento composto central e o fatorial completo	27
5. RESULTADOS e DISCUSSÃO	30
5.1. Superfície de resposta ajustada	30
5.1.1. Superfície de resposta com ponto crítico próximo ao ponto central	35
5.1.2. Superfície de resposta com ponto crítico afastado do ponto central	41

5.2. Intervalos de confiança	44
5.2.1 - Superfície de resposta com pontos críticos próximos ao ponto central.	45
5.2.2 - Superfície de resposta com pontos críticos afastados do ponto central.	48
5.3 - Fatorial completo versus DCC.....	51
6. CONCLUSÕES.....	54
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	55

RESUMO

PERÁZIO, Bráulia Aparecida de Almeida, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2010. **Efeitos dos pontos axiais e centrais sobre a eficiência do delineamento composto central.** Orientador: José Ivo Ribeiro Júnior. Co-orientadores: Nerilson Terra Santos e Sebastião Martins Filho.

Na análise de problemas nos quais a variável resposta de interesse é influenciada por diversos fatores e cujo objetivo é otimizá-la, propõe-se utilizar delineamentos para superfície de resposta. Dentre eles, destaca-se o Delineamento Composto Central (DCC), que é um delineamento de segunda ordem, podendo apresentar características de rotacionalidade e/ou ortogonalidade. Tais delineamentos são simples, econômicos, promissores e bastante flexíveis. Estes são constituídos de pontos fatoriais, axiais e central. Deste modo, o objetivo deste trabalho foi de investigar, por meio da simulação de dados, os efeitos dos pontos axiais e do número de pontos centrais sobre a qualidade dos ajustes das superfícies de resposta obtidas, por meio desse delineamento para dois fatores estudados, quando a região ótima está ou não bem centralizada nos intervalos estudados, buscando assim, indicar estratégias de análises mais adequadas em diferentes casos. Para tanto, utilizou-se como testemunha, o fatorial completo. Para o estudo de dois fatores, foi estabelecido um fatorial completo 9x9 com nove repetições por tratamento, segundo o delineamento inteiramente casualizado, estabeleceu-se também duas superfícies de respostas, uma com ponto crítico próximo ao ponto central e a outra com ponto crítico afastado do ponto central. Definiu-se os valores dos pontos axiais (α) iguais a 1; 1,4142; 2 e 3 e do número de repetições no ponto central iguais a 1, 3, 6 e 9. As observações dos 16 DCCs, foram obtidas a partir da primeira repetição dos respectivos tratamentos (pontos fatoriais, axiais e central) contidos no fatorial completo. Para as diferentes simulações, foi

especificado os coeficientes de variação iguais a 5, 10, 20 e 30%. Realizou-se cinco simulações por coeficiente de variação e por superfície de resposta, totalizando 640 arquivos de dados. Para avaliação do grau de aproximação da superfície de resposta ajustada, em relação à verdadeira, utilizou-se como medida a diferença absoluta entre os valores dos coeficientes verdadeiros e estimados ($\Delta\beta_i$) e a diferença absoluta relacionada aos pontos críticos (a_c e b_c) das superfícies de respostas (Δa_c e Δb_c) em relação aos fatores A e B, e para medir o grau de ajuste de cada superfície de resposta utilizou-se o erro percentual médio absoluto (EPMA) e o coeficiente de correlação linear entre os valores ajustados e verdadeiros de Y ($r_{\hat{y}y_v}$). Contudo, diferentes valores de α proporcionaram melhores estimativas das medidas avaliadas e, como $\alpha = 1,4142$ está mais próxima de todas elas, concluiu-se que esse valor está, provavelmente entre os melhores para o planejamento dos tratamentos. O valor de $\alpha = 1,4142$, que possui a propriedade de rotacionalidade, e o aumento do número de repetições no ponto central proporcionou melhor ajuste da superfície de resposta, porém, o aumento da variância residual prejudicou tais estimativas. Portanto, conclui-se que o DCC rotacional deve ser recomendado para experimentos sob condições mais controladas, e quando comparado com o fatorial completo apresentou-se menos eficiente. Além disso, o DCC apresentou resultados similares para as duas superfícies de respostas simuladas.

ABSTRACT

PERÁZIO, Bráulia Aparecida de Almeida, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2010. **Effects of central and axial points on the efficiency of central composite design.** Advisor: José Ivo Ribeiro Junior. Co-advisors: Nerilson Terra Santos and Sebastião Martins Filho.

In the analysis of problems in which the response variable of interest is influenced by many factors and whose goal is to optimize, it's intended to use designs for the response surface. One of the highlights is the central composite design (CCD), which is a randomized second-order and may have characteristics of rotational and / or orthogonality. These designs are simple, economical, promising and very flexible. These are consisted of factorial points, axial and central. This way, using simulation data, the objective was to investigate, by means of simulation data, the effects of axial points and the number of central points on the quality of fitting of the area response surfaces obtained through this design for two factors studied, when the great is well centered or not in the intervals studied, trying to indicate more appropriated analysis strategies in different cases. For this purpose, the full factorial was used as a witness. For the two factors study, we established a complete 9x9 factorial design with nine replicates per treatment, according to a completely randomized design, it also has been established two responses areas one with a critical point near the midpoint and the other with a critical point away from central. Defined the values of the axial points (α) equal to 1; 1,4142; 2 and 3 and the number of repetitions at the central point equal to 1, 3, 6 and 9. The 16 CCDs observations were obtained from the first repetition of the respective treatments (factorial points, axial and central) contained in the full factorial. For different simulations, it was determined the coefficients of variation equal to 5, 10, 20 and 30%. Five simulations were done by variation coefficient and response surface, totaling 640 data files. To evaluate the of approximation degree of the

response surface adjusted, compared to the real one, was used as a measure, the absolute difference between the values of true and estimated coefficients ($\Delta\beta_i$) and the absolute difference related to critical points (a_c and b_c) from the responses surfaces (Δa_c and Δb_c) in relation to the factors A and B, and to measure the fit degree of each response surface, we used the mean absolute percentage error (EPMA) and the linear correlation coefficient between the fitted values and true Y ($r_{\hat{y}_v}$). However, different values of α provided better estimates of the measures evaluated and, as $\alpha = 1,4142$ is closer to them all, it was concluded that this value is probably among the best for treatment planning. The value of $\alpha = 1,4142$, which has the property rotatability and the increase in number of repetitions at the central point provided the best fit response surface, however, the residual variance increase is not good for this estimates. Therefore, the conclusion is that the rotational CCD must be recommended for experiments under more controlled conditions, and compared with the full factorial had low efficient. In addition, the CCD presented similar results for the two surfaces of simulated responses.

1. INTRODUÇÃO

A metodologia de superfície de resposta (MSR) é composta por um conjunto de métodos matemáticos e estatísticos que são úteis na modelagem e na análise de respostas que são influenciadas por diversos fatores e cujo objetivo é otimizá-las (MONTGOMERY e MYERS, 1995).

O grande impulso na análise de dados experimentais por meio da superfície de resposta, foi dado por Box e Wilson (1951), que desenvolveram métodos de determinação de condições ótimas em pesquisas industriais. Nesse trabalho, os autores introduziram a função polinomial com duas ou mais variáveis independentes (fatores), como sendo uma boa aproximação da função de resposta, além de apresentarem delineamentos de tratamentos com o objetivo de se encontrar um ponto na região experimental de interesse em que a resposta fosse ótima, utilizando para isso, o menor número possível de combinações entre os níveis das variáveis independentes.

Na maioria dos estudos por superfície de resposta, a forma do relacionamento entre as variáveis dependente (resposta) e independentes é desconhecida. Os parâmetros do modelo serão corretamente estimados se forem utilizados planos adequados para a coleta dos dados, denominados de delineamentos para superfície de resposta.

Dentre esses delineamentos, destacam-se os compostos centrais (DCC), que são constituídos por pontos fatoriais, axiais e central. Esses delineamentos são bastante flexíveis e, conseqüentemente, podem ter eficiências dependentes dos critérios de escolhas dos seus pontos. Isso possibilita ao pesquisador, para um número determinado de fatores, escolher entre várias alternativas, a que mais lhe convém. De acordo com a escolha dos pontos axiais ($\pm\alpha$), será possível obter-se ortogonalidade, rotacionalidade ou ambas. A ortogonalidade propicia a estimação independente dos coeficientes do modelo e a

rotacionalidade proporciona variâncias idênticas para pontos situados à mesma distância do centro, em qualquer direção.

Na literatura são muitos os experimentos planejados com o auxílio do DCC. Bravo *et al.* (2000) o utilizaram para a determinação de condições ideais para a produção de poligalacturonase. Medeiros (2001), com o objetivo de modelar respostas de frangos de corte sob diferentes situações térmicas ambientais, conduziu um experimento, sob o DCC rotacional. Rodrigues Júnior (2008), para verificar o efeito da tensão de cisalhamento sobre os parâmetros cinéticos de inativação térmica de *Bacillus atropheus*, também utilizou o DCC rotacional. O mesmo delineamento foi utilizado por Brandão (2007) para a otimização da transesterificação etílica do óleo de mamona.

O DCC apesar de ter sido recomendado para utilização em pesquisas industriais, principalmente as de química, onde normalmente os erros experimentais são pequenos e as condições do experimento são mais facilmente controláveis, tem sido aplicado também em outras áreas da ciência. Mateus *et al.* (2001) mencionam as áreas de: fitopatologia, virologia e entomologia. Conagin (1982) mostrou que esse delineamento pode ser aplicado com sucesso em experimentos como os de adubação, e que o método de partição desses delineamentos em blocos (dois, três ou mais), possibilitou o seu uso na agricultura e em várias áreas da ciência, onde as condições do experimento não são totalmente homogêneas.

Draper e Herzberg (1968), ao se referirem aos muitos delineamentos compostos disponíveis para o estudo de superfícies de respostas, comentam que alguns já eram usados, na prática, enquanto outros tinham ainda apenas interesse teórico; entretanto estes poderiam vir a ser úteis, no futuro, pois eles acreditavam na possibilidade de novas técnicas serem desenvolvidas e, conseqüentemente, de se alcançar um maior controle das condições experimentais, tornando possível, assim, menores estimativas dos efeitos do erro experimental.

Portanto, dada à economia do número de ensaios realizados e à flexibilidade que os DCCs apresentam, torna-se importante verificar a possibilidade de alguma escolha para o seu planejamento que seja viável em ajustar superfícies de respostas para experimentos sob as mais variadas condições.

2. OBJETIVOS

2.1. Geral

Estudar por meio da simulação de dados, os efeitos dos pontos axiais, do número de pontos centrais (número de repetições realizadas no ponto central) e da precisão experimental, sobre a eficiência dos delineamentos compostos centrais para dois fatores em ajustar uma superfície de resposta de segunda ordem, quando a região ótima está ou não bem centralizada nos intervalos estudados. Para realização das simulações, serão utilizados diferentes níveis de precisão baseados em experimentos aplicados às ciências agrárias.

2.2. Específicos

Em função das diferentes escolhas das combinações dos pontos axiais e do número de pontos centrais, para cada nível de precisão experimental medido pelo coeficiente de variação residual, pretende-se verificar:

- O efeito da ausência ou da presença das propriedades de rotacionalidade e ortogonalidade sobre a qualidade de predição da variável resposta;
- A qualidade do ajuste dos delineamentos estudados e a precisão com que os coeficientes de regressão são estimados.

3. REFERENCIAL TEÓRICO

3.1. Superfície de resposta

A literatura sobre Metodologia de Superfície de Resposta (MSR) é extensa, mostrando as aplicações a diferentes campos de pesquisa, bem como o desenvolvimento de delineamentos ótimos para a estimativa da superfície.

A MSR consiste essencialmente em um conjunto de métodos matemáticos e estatísticos utilizados em estudo empírico das relações entre variáveis controladas e uma ou mais respostas mensuráveis, (BOX,1986; MONTGOMERY, 1995). Como exemplo de variáveis controladas pode-se citar tempo, temperatura, pressão e concentração; e como respostas mensuráveis pode-se citar rendimento, viscosidade e desenvolvimento de cor. Carlyle *et al.* (2000), afirmaram que a MSR é a conexão entre o planejamento experimental e otimização de produtos e processos.

Conforme Khuril e Cornel e (1987), a MSR nasceu em trabalhos de J. Wishart, C.P. Winsor, E. Mitscherlin, F. Yates e de outros ainda nos anos 30. Somente em 1951, é que Box & Wilson (1951) a formalizaram e a disseminaram pela comunidade científica. Desde então vem sendo utilizada na etapa de otimização propriamente dita. Sua aplicação permite selecionar a combinação de níveis ótimos para a obtenção da melhor resposta em uma dada situação.

Em planejamento de experimentos, onde o principal objetivo é caracterizar a relação entre uma ou mais variáveis resposta e um conjunto de fatores de interesse, procura-se construir um modelo que descreva a variável resposta em função dos intervalos estudados desses fatores. Então por meio da MSR, é possível aproximar um modelo

empírico a uma relação (inicialmente desconhecida ou conhecida) entre os fatores e as respostas do processo.

Quando dois fatores A e B apresentam-se com níveis quantitativos, a resposta Y é representada por um gráfico de superfície em um espaço tridimensional ou por um gráfico de contorno em um espaço bidimensional, oriundos de um modelo de primeira ou de segunda ordens com ou sem a interação dupla entre eles.

Desse modo, o modelo completo mais comumente utilizado baseado em n observações de Y, medidas em diferentes combinações entre os níveis dos fatores de A e B, é dado por:

$$y_{ij} = \beta_0 + \beta_1 a_i + \beta_2 a_i^2 + \beta_3 b_j + \beta_4 b_j^2 + \beta_5 a_i b_j + e_{ij}$$

Em termos matriciais, o modelo linear completo $Y=X\beta+\varepsilon$ para n (ab) observações de Y é dado por:

$$\begin{bmatrix} y_{11} \\ y_{12} \\ \dots \\ y_{21} \\ \dots \\ y_{ab} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & a_1 & a_1^2 & b_1 & b_1^2 & a_1 b_1 \\ 1 & a_1 & a_1^2 & b_2 & b_2^2 & a_1 b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & a_2 & a_2^2 & b_1 & b_1^2 & a_2 b_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & a_a & a_a^2 & b_b & b_b^2 & a_a b_b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \\ \beta_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{12} \\ \dots \\ e_{21} \\ \dots \\ e_{ab} \end{bmatrix}, \text{ em que:}$$

Y é o vetor nx1 dos valores observados da variável resposta Y;

X é a matriz nx6 de incidência, sendo a primeira coluna composta pela constante um e, as demais, pelos valores dos fatores de interesse A e B;

β é o vetor 6x1 de parâmetros desconhecidos;

ε é o vetor nx1 de erros aleatórios com distribuição normal média $\mu_\varepsilon = 0$ e variância σ_ε^2 .

Em função dos efeitos significativos que serão utilizados para o ajuste de Y em função dos fatores A e B, diferentes configurações podem ser apresentadas.

Certos tipos de problemas envolvendo a expressão de uma variável resposta, tal como o rendimento de um produto, como uma função empírica de um ou mais fatores quantitativos, tais como a temperatura de reação e a pressão, pode-se utilizar uma superfície de resposta para modelar esta relação (MONTGOMERY e MYERS, 1995).

A abordagem geral da MSR foi desenvolvida no início da década de 50, tendo sido aplicada inicialmente na indústria química com considerável sucesso. Nos últimos vinte anos, a MSR vem tendo extensa aplicação em uma ampla variedade de contextos industriais, muito além de suas origens em processos químicos, inclusive na fabricação de semicondutores e de artigos eletrônicos, cortes de metais e processos de junção, além de outros (MONTGOMERY e MYERS, 1995).

Nesse método são realizados planejamentos fatoriais para cujos resultados são ajustados modelos matemáticos. Essas etapas são conhecidas como etapas de deslocamento e modelagem. A modelagem normalmente é feita ajustando-se modelos simples (em geral lineares ou quadráticos); o deslocamento se dá sempre ao longo do caminho de máxima inclinação de um determinado modelo, que é a trajetória na qual a resposta varia de forma mais pronunciada. Ambas etapas podem ser repetidas quantas vezes forem necessárias, mapeando superfícies de resposta obtidas na direção da região do ponto de ótimo desejado.

Conforme Montgomery (1995), na maioria dos problemas, a forma do relacionamento entre as variáveis dependente e independentes é desconhecida. Assim o primeiro passo para a modelagem seria encontrar uma aproximação aceitável para a real relação entre as variáveis independentes e a resposta, onde usualmente se aplica um polinômio de baixa ordem. Se a resposta é bem modelada por uma função linear, tem-se portanto um modelo de primeira ordem. Se o sistema apresentar curvatura, então deve-se partir para um polinômio com maior número de termos, de ordem maior, tendo assim um modelo de segunda ordem.

Hill e Hunter, citados por Myers *et al.* (1989), indicam as seguintes etapas para o procedimento de uma análise de superfície de resposta padrão:

- Planejamentos fatoriais;
- Estimativa dos coeficientes da equação de superfície de resposta;
- Verificação da adequação do modelo ajustado;
- Estudo da superfície de resposta na região de interesse.

Para Khuri e Conlon (1981), os métodos de superfície de resposta são empregados nas fases de delineamento e análise dos dados. A fase do delineamento é importante

porque define as combinações entre os níveis dos diversos fatores estudados, de forma mais econômica possível, e permite estimar a superfície de resposta com qualidade. Tal superfície deve conter apenas a influência dos fatores significativos. Na análise dos dados, o objetivo é fornecer explicações plausíveis da evidência experimental. Assim, o delineamento experimental e a análise dos dados em conjunto, ajudam o pesquisador a descobrir quais fatores são importantes, qual a função que cada um representa no sistema e porque eles são importantes ou não.

São muitas as classes de delineamentos experimentais existentes na literatura e muitos os critérios sobre os quais os delineamentos experimentais são baseados. No entanto, um conjunto de propriedades devem ser observadas ao escolher um delineamento para ajustar uma superfície resposta. Algumas das características importantes, de acordo com Montgomery e Myers (1995), são:

- Resultar em um bom ajuste do modelo aos dados;
- Dar a informação suficiente para permitir um teste para a falta de ajustamento;
- Permitir que modelos de ordem crescente sejam construídos sequencialmente;
- Fornecer uma estimativa de erro "puro" experimental;
- Ser robusto a erros;
- Ser rentável, menor custo;
- Permitir experimentos em blocos;
- Providenciar a verificação da hipótese de variâncias homogêneas;
- Proporcionar uma boa distribuição da variância dos valores preditos da resposta;
- Não requerer muitos níveis para as variáveis independentes;
- Implicar cálculos simples para a estimativa dos parâmetros.

Barror, Montgomery e Myers (2002), citados por Verona (2004), afirmam que a MSR se presta ao delineamento de produtos ou processos que podem apresentar fatores não controláveis ou ruídos. Como exemplo, têm-se variáveis como temperatura, umidade e propriedades de matérias primas, que podem afetar de forma significativa o desempenho de um processo. Assim é importante considerar as variáveis de ruído na etapa de delineamento do processo. O desenvolvimento do modelo considerando as variáveis de ruído e as variáveis controláveis torna o sistema robusto. Myers (1971), afirma que, em um processo, não se deve considerar apenas os fatores controláveis, mas também os não controláveis e os de ruído, que eventualmente podem causar variação na resposta.

Dentre as vantagens da MSR, a principal é que seus resultados são resistentes aos impactos de condições não ideais, como erros aleatórios e pontos influentes, porque a metodologia é robusta. Outra vantagem é a simplicidade analítica obtida, pois a metodologia gera polinômios. Em geral, polinômios de duas ou mais variáveis são funções contínuas. Assim, torna-se absolutamente fácil o uso de métodos tradicionais de otimização em processos ou sistemas modelados por superfícies de resposta. Principalmente quando o sistema possui muitas variáveis independentes influenciando a resposta (SILVA *et al.*, 2005).

Para Barros *et al.* (2007), uma das vantagens da MSR consiste na economia de recursos financeiros e tempo, proporcionada pelo delineamento gerando curvas "iso-resposta", o que possibilita a obtenção do mesmo resultado sob diferentes combinações dos níveis das variáveis independentes e sem necessidade de repetir exaustivamente os ensaios experimentais.

3.2. Delineamento Composto Central

Planejar experimentos é sem dúvida uma das fases mais importantes da investigação científica. Quando bem executado, o planejamento cria uma estrutura bem definida para o experimento, seja em termos dos fatores em estudo, seja das unidades, justificando a definição de um modelo estatístico. Desta forma os dados obtidos poderão ser analisados e interpretados de forma mais simples.

Em experimentos fatoriais estudam-se simultaneamente mais de um fator, cada um deles com dois ou mais níveis, sendo desta forma, o número de tratamentos geralmente elevado, pois envolvem as combinações entre os níveis dos dois ou mais fatores. Os fatores referem-se às variáveis de entrada de um experimento que podem ser controladas pelo pesquisador, e os níveis dos fatores são os valores específicos atribuídos a eles. Se todas as possíveis combinações, entre todos os níveis de cada fator, estão presentes, o fatorial é dito completo. Caso contrário, tem-se o fatorial incompleto. Certos tipos de fatoriais incompletos, constituídos de frações bem determinadas dos fatoriais completos são utilizados com frequência na seleção dos níveis e/ou dos fatores em estudo em várias áreas da ciência.

O uso de apenas uma parte dos tratamentos de um fatorial completo, devido à disponibilidade de material experimental, à economia, à disponibilidade de equipamentos e

de tempo, torna-se viável; mas apresenta a desvantagem de que os efeitos principais e os das interações podem estar confundidos, isto é, não podem ser estimados separadamente. Porém, muitas vezes, esse problema é de pouco interesse dos pesquisadores nas interações de ordens elevadas devido ao fato de serem quase sempre irrelevantes e/ou de difíceis interpretações práticas (LIMA, 2009). Portanto, a busca por métodos científicos que diminuam o número de ensaios e aumentam a precisão dos resultados tem sido cada vez maior.

O delineamento composto central (DCC), conhecido também como planejamento em estrela, é sem dúvida um dos mais populares delineamentos de modelos de segunda ordem. Foi introduzido por Box e Wilson (1951) no estudo de superfícies de resposta, como uma evolução do planejamento 3^k (k = número de fatores), que necessitava de muitos experimentos para um pequeno número de fatores. Grande parte da motivação do DCC evoluiu a partir do seu uso em experimentação sequencial (MONTGOMERY e MYERS, 1995).

O estudo da metodologia de superfície de resposta por meio do DCC, pode ser exemplificado pela modelagem da influência de três variáveis operacionais sobre o desempenho e concentração do minério cromita, a partir de um estudo realizado por Aslan (1998). Nesse trabalho o autor apresentou um modo econômico de se obter a máxima quantidade de informações em um curto período de tempo e com o menor número de ensaios.

Ao escolher um delineamento para ajustar a superfície de resposta é importante que ele satisfaça algumas das propriedades desejáveis dos delineamentos, tais como: fornecer estimativa do erro experimental, sensibilidade à presença de *outliers* (dados discrepantes), descrever adequadamente as superfícies de resposta na região estudada de forma mais econômica e proporcionar estabilidade da distribuição da variância em toda região do delineamento experimental.

Os DCCs pertencem a uma classe de delineamentos eficientes, os quais requerem poucos ensaios para a sua realização e possuem características interessantes e desejáveis, para a busca do ponto que dê a resposta ótima, a saber:

- Estimação dos efeitos globais de erro experimental;
- Utilização de um menor número de combinações em relação aos fatoriais completos;

- Flexibilidade e disponibilidade de diversas variedades de DCCs que permitem sua utilização em diferentes regiões de interesse experimental e da região de operação;
- Por serem formados de três partes distintas, podem ser construídos sequencialmente conforme a necessidade.

Em geral, um DCC para k fatores, devidamente codificados como x_1, \dots, x_k é constituído de n_{fat} pontos fatoriais (cúbicos) codificados em $x_i = -1$ ou $x_i = +1$ para todo $i=1, \dots, k$. Por pontos axiais ($\pm\alpha$) e central (n_c), onde $x_1 = \dots = x_k = 0$ (KHURI e CORNELL, 1996).

Os pontos fatoriais são os únicos pontos que contribuem para a estimativa da interação dos fatores.

Os pontos axiais são situados nos eixos do sistema de coordenadas com distância $\pm \alpha$ da origem, formando assim o planejamento em estrela. Tais pontos contribuem para as estimativas dos termos quadráticos, mas não para a estimativa da interação entre os fatores. São diretamente responsáveis pela curvatura da função e, conseqüentemente, pela localização do ponto ótimo, caso ele ocorra na região estudada. Há várias possibilidades para a escolha de α (RODRIGUES e IEMMA, 2005). Essa escolha depende, em grande medida, da região de operacionalidade e da região de interesse. Segundo Barros *et al.* (2007), o valor de α costuma ficar entre 1 e \sqrt{k} ; pois à medida que k aumenta, os pontos axiais ficam cada vez mais distantes do ponto central, o que pode deixar a região intermediária sem ser investigada.

É o valor de α que particulariza os DCCs, pois ele pode ser escolhido para tornar os coeficientes de regressão ortogonais, para minimizar o desvio da superfície ajustada à sua forma verdadeira da superfície de resposta, se esta não for quadrática, ou para dar ao delineamento a propriedade de ser rotacional (MATEUS, 2001).

O número de pontos centrais (n_c), tem impacto sobre a distribuição da variância da predição da resposta na região de interesse, tem por finalidade fornecer uma medida do erro puro e de contribuir para as estimativas dos termos quadráticos. Conforme Haaland (1989), embora haja flexibilidade quanto ao número de pontos centrais, é necessário pelo menos um. Multiplicar este ponto é fortemente recomendado nos três delineamentos sugeridos por ele (delineamento composto central, cubo de face centrada e Box-Behnken). Ainda, de acordo com este autor, os pontos centrais melhoram as estimativas dos efeitos quadráticos e possibilitam graus de liberdade adicionais para os erros. Além disso, eles

permitem informação extra quanto ao centro da região experimental, onde os melhores valores-respostas frequentemente estão localizados.

Diamond (1989) afirmou que qualquer valor pode ser adotado para α e n_c , porém um DCC com dois fatores, apresenta propriedades especiais quando α é igual a 1,4142 e n_c igual a cinco. Nesse caso, o planejamento assume propriedades de rotacionalidade e ortogonalidade, o que facilita o tratamento estatístico dos resultados.

Portanto, para um determinado número de fatores e dependendo dos valores assumidos por α e n_c , o DCC possibilita ao pesquisador, escolher entre os tipos ortogonais e/ou rotacionais e, ainda, a sua divisão ortogonalmente em blocos, bem como trabalhar com um menor número de combinações entre os níveis dos diversos fatores estudados em relação aos fatoriais completos.

3.2.1. Rotacionalidade

Box e Hunter (1957) propuseram o conceito de rotacionalidade como critério para escolha do valor de α . Um delineamento composto central é considerado rotacional, quando as variâncias das predições da resposta dependerem apenas da distância em relação ao ponto central, isto é, quando a precisão da resposta prevista for a mesma em todos os pontos situados numa dada (hiper) esfera com o centro no próprio centro do planejamento (BARROS *et al.*, 2007). Em outras palavras quando a variância for uma constante em esferas ou, simplesmente, quando todos os pontos forem equidistantes do ponto central. O DCC possuirá propriedade de rotacionalidade quando:

$$\pm \alpha = \pm \sqrt[4]{2^k}$$

O DCC rotacional pode ser utilizado para planejar tratamentos oriundos de dois a nove fatores, representados por níveis codificados dos pontos da parte cúbica (± 1), axiais para testar o modelo de segunda ordem ($\pm \alpha$) e por ensaios que são geralmente repetidos no ponto central (n_c). No entanto, podem ser planejados tratamentos com observações individuais ou com duas ou mais repetições.

Segundo Barros *et al.* (2007), ao escolher $\pm \alpha = \pm \sqrt[4]{2^k}$, os pontos em estrela (pontos axiais) estarão localizados cada vez mais distantes do ponto central, à medida que o

número de fatores aumenta. Portanto essa escolha deve ser feita com muito cuidado, porque existe o risco de deixar a região intermediária de ser investigada.

Deve ser claramente entendido que o pesquisador não conhece de início, a região que o ótimo pode estar situado. Assim, uma razoável estabilidade da variância fornecerá seguramente que a qualidade de $\hat{y}(x)$ como um valor de resposta previsto, seja aproximadamente a mesma em toda a região de interesse.

A estabilidade proporcionada pela rotacionalidade se refere à homogeneidade de variâncias, mas não garante a mesma precisão experimental em todos os intervalos dos fatores estudados. Para viabilizá-la deve-se portanto fazer as repetições no ponto central.

Mateus *et al.* (2001), verificaram através de um estudo de simulação para três fatores em experimentos com coeficientes de variação iguais a 3; 6; 10; 15 e 21%, gerados por DCCs com uma repetição no ponto central ($n_c=1$) e com valores de α iguais a 1; 1,216 (DCC ortogonal) e 1,682 (DCC rotacional), que o DCC rotacional apresentou os melhores resultados.

Em um estudo conduzido por Herrera e Fermín (2000), na comparação entre o fatorial 3^3 e o DCC rotacional, verificaram que o DCC rotacional estimou com maior precisão os efeitos lineares, quadráticos e de interação.

3.2.2. Ortogonalidade

O termo delineamento ortogonal recebeu especial atenção entre os anos de 1950 e 1960. Um DCC ortogonal minimiza a variância dos coeficientes de regressão, ou seja propicia a estimação do efeito principal e das interações de forma independente. Nele, a matriz $X'X$ é uma matriz diagonal, isto é, os elementos fora da sua diagonal são todos iguais a zero. Isto implica que a soma do produto cruzado das colunas da matriz X é zero, ou seja, as suas colunas são mutuamente ortogonais (MONTGOMERY e MYERS, 1995).

O DCC possuirá propriedade de ortogonalidade quando:

$\alpha = (Q * F/4)^{1/4}$; sendo:

$$Q = (\sqrt{F + T}) - \sqrt{F} \quad ;$$

F = número de pontos fatoriais ou cúbicos, e

$$T = 2k + n_c.$$

Segundo Box e Hunter (1957), é possível construir delineamentos que sejam ao mesmo tempo, ortogonais e rotacionais. Contudo, segundo estes autores era impossível manter as duas propriedades, simultaneamente, para os delineamentos de segunda ordem.

Para Conagin (1999), dentre os DCCs, os compostos centrais ortogonais são mais eficientes que os demais e a estimação dos coeficientes do modelo é facilmente obtida. E ainda, dentre os DCCs ortogonais, os compostos centrais ortogonais e rotacionais apresentam algumas vantagens adicionais. Neste estudo, o autor procurou determinar soluções que possibilitassem a obtenção de delineamentos que fossem simultaneamente, ortogonais, rotacionais e subdivisíveis em blocos. Em alguns casos, obteve soluções exatas; em outros, as soluções foram aproximadas, pois obteve delineamentos compostos centrais ortogonais quase rotacionais e divisíveis em blocos, de forma praticamente ortogonal.

4. MATERIAL e MÉTODOS

4.1. Material

Nesse estudo foram simulados dados de experimentos planejados segundo o fatorial completo e o delineamento composto central (DCC), para estudar uma variável resposta Y modelada por uma superfície de resposta de segunda ordem com dois fatores A e B sem interação.

Em todas as análises estatísticas realizadas nos software MINITAB14 e Microsoft Excel, utilizou-se o nível de significância de 0,05.

4.1.1. Simulação do fatorial completo

Para o estudo dos dois fatores A e B , foi estabelecido um fatorial completo 9×9 , segundo o delineamento inteiramente casualizado (DIC), com nove repetições por tratamento, sendo os níveis dos dois fatores iguais a: -12; -8,48528; -6; -4; 0; 4; 6; 8,48528 e 12.

Estabeleceram-se também duas superfícies de respostas de segunda ordem sem interação $A \times B$ e denominadas de verdadeiras (y_V) e representadas por y_{V1} (Figura 1(A)) e y_{V2} (Figura 1 (B)), como seguem:

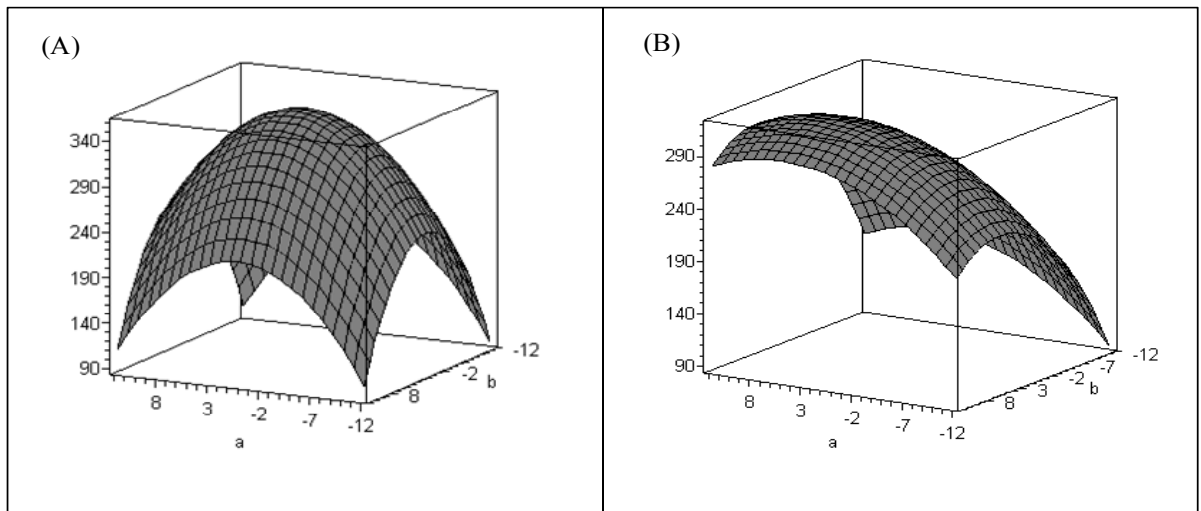


Figura 1. Gráficos de superfície de resposta de y_{v1} e y_{v2} .

Sendo:

$$y_{v1ij} = 360 + 0,4a_i - 0,8a_i^2 + 0,5b_j - 1b_j^2, \text{ para } -12 \leq a_i \leq 12 \text{ e } -12 \leq b_j \leq 12;$$

$$y_{v2ij} = 300 + 3a_i - 0,3a_i^2 + 5b_j - 0,5b_j^2, \text{ para } -12 \leq a_i \leq 12 \text{ e } -12 \leq b_j \leq 12, \text{ em que:}$$

y_{v1ij} é a superfície de resposta verdadeira com ponto crítico próximo ao ponto central nos níveis a_i e b_j ;

y_{v2ij} é a superfície de resposta verdadeira com ponto crítico afastado do ponto central nos níveis a_i e b_j ;

a_i é o valor do nível do fator A, (-12; -8,48528; -6; -4; 0; 4; 6; -8,48528 e 12);

a_i^2 é o valor do nível i do fator A, elevado ao quadrado;

b_j é o valor do nível do fator B, (-12; -8,48528; -6; -4; 0; 4; 6; -8,48528 e 12);

b_j^2 é o valor do nível j do fator B, elevado ao quadrado.

A superfície de resposta y_{v1} contém um ponto de máximo situado em (0,25; 0,25) e denotaremos suas coordenadas por $a_{CV1} = 0,25$ e $b_{CV1} = 0,25$, próximo ao ponto central ($a_i = b_j = 0$).

Já a superfície de resposta y_{v2} contém um ponto de máximo situado em (5, 5) e denotaremos suas coordenadas por $a_{CV2} = 5$ e $b_{CV2} = 5$ afastado do ponto central ($a_i = b_j = 0$).

Foram simulados (Microsoft Excel) os efeitos do erro experimental do fatorial completo 9x9 com nove repetições por tratamento, sob distribuição normal com média zero e variância σ_ε^2 , ou seja, $\varepsilon \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$. Para as diferentes simulações, σ_ε foi especificado para fornecer coeficientes de variação residuais (CV) iguais a 5, 10, 20 e 30% aproximadamente, conforme a expressão:

$$CV = 100 \frac{S_\varepsilon}{\bar{Y}_{obs}}, \text{ em que:}$$

S_ε é o estimador do desvio-padrão dos erros simulados;

\bar{Y}_{obs} é a média amostral dos valores observados da variável resposta Y.

Os valores observados de Y (y_{obs}) foram obtidos a partir da soma dos valores verdadeiros de Y (y_v), obtidos a partir das superfícies de respostas verdadeiras (y_{v1} e y_{v2}), com os erros como seguem:

$$y_{obs} = y_v + \varepsilon.$$

Para cada fatorial completo foram realizadas cinco repetições por CV e por superfície de resposta. Além do fatorial completo 9x9 com nove repetições por tratamento, foi obtido outro constituído apenas pela primeira repetição de cada combinação do fatorial.

4.1.2. Simulação do Delineamento Composto Central

Como visto anteriormente, o DCC é constituído de uma parte fatorial (cúbica) com dois níveis que permite estimar todos os efeitos de primeiro grau e os efeitos das interações, de pontos axiais ou estrelas nos níveis $-\alpha$ e $+\alpha$ de cada fator combinados com o nível médio dos demais fatores que partem de um ponto ou mais pontos localizados no centro do delineamento, mais n_c pontos centrais.

Para $k = 2$ fatores, e X_i igual a -1 e $+1$, o número de combinações entre os níveis codificados na parte fatorial, é igual a $2^k = 4$ pontos constituídos por: $(-1,1)$, $(-1,-1)$, $(1,-1)$ e $(1,1)$. Adicionou-se a estes $2k = 4$ pontos axiais: $(-\alpha, 0)$; $(\alpha, 0)$; $(0, -\alpha)$ $(0, \alpha)$, para $\alpha = 1$; $1,4142$; 2 e 3 . Já as repetições no ponto central foram iguais a: 1 , 3 , 6 e 9 . Portanto, foram formulados 16 DCCs oriundos das combinações dos quatro pontos axiais pelas quatro diferentes repetições no ponto central. Tais DCCs foram obtidos a partir da primeira repetição dos respectivos tratamentos (pontos fatoriais, axiais e central), contidos no fatorial completo. Os valores de α foram definidos para se localizarem na porção cúbica ($|\alpha| = 1$) e fora desta porção cúbica ($|\alpha| > 1$), com o objetivo de amostrar diferentes regiões em relação ao ponto central, ou seja, regiões próximas, intermediárias e distantes do ponto central. E para obtenção de um delineamento com a propriedade de rotacionalidade foi definido $\alpha = 1,4142$, conforme Box e Hunter (1957). Para o estudo da propriedade de ortogonalidade foi definido $\alpha = 1$ e $n_c = 1$, visto que esta propriedade depende do valor do ponto axial e do número de pontos centrais.

Para os 16 DCCs, foram realizadas cinco simulações por CV (5, 10, 20 e 30%) e por superfície de resposta (ponto de máximo próximo e afastado do ponto central). Desse modo, foram obtidos $16 \times 5 \times 4 \times 2 = 640$ arquivos de dados.

Os valores de α não codificados, ou seja, nas escalas dos níveis dos fatores A e B, são obtidos, respectivamente, pelos valores dos seus limites inferiores ($LI_A = LI_B = -12$) e superiores ($LS_A = LS_B = 12$). Portanto, os quatro pontos axiais dos 16 DCCs foram constituídos por: $(-12,0)$, $(12,0)$, $(0,-12)$ e $(0,12)$, sendo que o primeiro nível decodificado se refere ao fator A e , o segundo , ao B.

A combinação do ponto central $(0,0)$, foi obtida por:

$$PC_A = \frac{LI_A + LS_A}{2};$$

$$PC_B = \frac{LI_B + LS_B}{2}.$$

Por fim os quatro pontos cúbicos decodificados de cada DCC, foram obtidos por:

$$a_i = \frac{\alpha_{\text{cod}_i} (PC_A - LI_A)}{\alpha} + PC_A;$$

$$b_j = \frac{b_{\text{cod}_j} (PC_B - LI_B)}{\alpha} + PC_B, \text{ em que:}$$

a_i = valor do i -ésimo nível do fator A;

PC_A = valor do ponto central do intervalo estudado do fator A;

LI_A = valor do limite inferior do intervalo estudado do fator A;

LS_A = valor do limite superior do intervalo estudado do fator A;

b_j = valor do j -ésimo nível do fator B;

PC_B = valor do ponto central do intervalo estudado do fator B;

LI_B = valor do limite inferior do intervalo estudado do fator B;

LSB = valor do limite superior do intervalo estudado do fator B;

α = valor do ponto axial.

Nas Tabelas 1, 2, 3 e 4, são apresentadas as combinações dos níveis dos fatores A e B de forma codificada e não codificada, para os valores de α iguais a 1; 1,4142; 2 e 3, respectivamente. Para os respectivos DCCs, o número de pontos centrais foi igual a 1, 3, 6 e 9.

Tabela 1 - Combinações dos níveis codificados e descodificados dos fatores A e B para $\pm\alpha = \pm 1$.

	A codificado	B codificado	A	B
Pontos fatoriais	-1	-1	-12	-12
	1	-1	12	-12
	-1	1	-12	12
	1	1	12	12
Pontos axiais	-1	0	-12	0
	1	0	12	0
	0	-1	0	-12
	0	1	0	12
Ponto central	0	0	0	0

Tabela 2 - Combinações dos níveis codificados e descodificados dos fatores A e B para $\pm\alpha = \pm 1,4142$

	A codificado	B codificado	A	B
Pontos fatoriais	-1	-1	-8,48528137	-8,48528137
	1	-1	8,48528137	-8,48528137
	-1	1	-8,48528137	8,48528137
	1	1	8,48528137	8,48528137
Pontos axiais	-1,4142	0	-12	0
	1,4142	0	12	0
	0	-1,4142	0	-12
	0	1,4142	0	12
Ponto central	0	0	0	0

Tabela 3 - Combinações dos níveis codificados e descodificados dos fatores A e B para $\pm\alpha = \pm 2$.

	A _{codificado}	B _{codificado}	A	B
Pontos Fatoriais	-1	-1	-6	-6
	1	-1	6	-6
	-1	1	-6	6
	1	1	6	6
Pontos axiais	-2	0	-12	0
	2	0	12	0
	0	-2	0	-12
	0	2	0	12
Ponto central	0	0	0	0

Tabela 4 - Combinações dos níveis codificados e descodificados dos fatores A e B para $\pm\alpha = \pm 3$.

	A _{codificado}	B _{codificado}	A	B
Pontos fatoriais	-1	-1	-4	-4
	1	-1	4	-4
	-1	1	-4	4
	1	1	4	4
Pontos axiais	-3	0	-12	0
	3	0	12	0
	0	-3	0	-12
	0	3	0	12
Ponto Central	0	0	0	0

4.2. Superfície de resposta ajustada

Foram realizadas análises de regressão a partir dos valores observados de Y (y_{obs}) nos experimentos planejados pelo DCC e pelo fatorial completo, para cada superfície de resposta (y_{v1} e y_{v2}) e CV (5, 10, 20 e 30%), separadamente, de acordo com o seguinte modelo estimado de segunda ordem:

$$\hat{y}_{ij} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 a_i + \hat{\beta}_2 a_i^2 + \hat{\beta}_3 b_j + \hat{\beta}_4 b_j^2, \text{ para } -12 \leq a_i \leq 12 \text{ e } -12 \leq b_j \leq 12, \text{ em que:}$$

$\hat{\beta}_0$ estimativa da constante β_0 ;

$\hat{\beta}_1$ estimativa do coeficiente de regressão β_1 ;

$\hat{\beta}_2$ estimativa do coeficiente de regressão β_2 ;

$\hat{\beta}_3$ estimativa do coeficiente de regressão β_3 ;

$\hat{\beta}_4$ estimativa do coeficiente de regressão β_4 .

No total, foram ajustadas 640 superfícies de respostas, já que foram realizadas cinco repetições para cada delineamento.

Para cada superfície de resposta foi realizada a análise de variância da regressão com o teste para falta de ajustamento, tanto para o fatorial completo quanto para o DCC, segundo o delineamento inteiramente casualizado (DIC), conforme apresentadas nas Tabelas 5 e 6.

Tabela 5 - Análise de variância da regressão para o fatorial completo.

FV	GL	SQ	QM	F
(Tratamentos)	(81-1)	SQTrat	—	—
Regressão	p = 4	SQReg	SQReg/p	QMReg/QMRes
Falta de ajustamento	81-1-p	SQFA	SQFA/(81-1-p)	QMFA/QMRes

Resíduo puro	81r - 81	SQRes	SQRes/(81r - 81)
Total	81r - 1	SQTotal	

p = número de parâmetros da superfície de resposta ajustada (não inclui o β_0);

r = número de repetições por tratamento (1 e 9);

Tabela 6 - Análise de variância da regressão para o DCC.

FV	GL	SQ	QM	F
(Tratamentos)	(9-1)	SQTrat	—	—
Regressão	p = 4	SQReg	SQRg/p	QMReg/QMRes
Falta de ajustamento	9-1-p	SQFA	SQFA/(9-1-p)	QMFA/QMRes
Resíduo puro	$n_c - 1$	SQRes	SQRes/($n_c - 1$)	
Total	9 + $n_c - 2$	SQTotal		

p = número de parâmetros da superfície de resposta ajustada (não inclui o β_0);

n_c = número de repetições no ponto central (1, 3, 6 e 9).

Para $r = 1$ e $n_c = 1$ não houve o teste para a falta de ajustamento. Nesse caso, a regressão foi testada contra ela, que passou a ser a fonte de variação residual do modelo ajustado.

4.3. Medidas avaliadas

Para avaliar o grau de aproximação da superfície de resposta ajustada em cada um dos 640 arquivos de dados, em relação à verdadeira, foram estabelecidas medidas referentes aos coeficientes das equações e aos valores de Y estimados.

Para os coeficientes de regressão, foram obtidas as diferenças absolutas das estimativas em relação aos verdadeiros parâmetros ($\Delta\beta_0, \Delta\beta_1, \Delta\beta_2, \Delta\beta_3$ e $\Delta\beta_4$), de acordo com as superfícies de repostas y_{v1} e y_{v2} , sendo:

$\Delta\beta_i = |\beta_i - \hat{\beta}_i|$ é a diferença absoluta entre os valores dos coeficientes verdadeiro e estimado, para $i = 0, 1, 2, 3$ e 4.

Do mesmo modo, foram obtidas as diferenças absolutas relacionadas aos valores críticos das duas superfícies de respostas, sendo:

$\Delta a_c = |a_c - \hat{a}_c|$ é a diferença absoluta entre os valores críticos verdadeiro e estimado, para o fator A;

$\Delta b_c = |b_c - \hat{b}_c|$ é a diferença absoluta entre os valores críticos verdadeiro e estimado, para o fator B.

E para medir o grau de ajuste de cada superfície de resposta, foram calculadas as seguintes medidas:

$$EPMA = \frac{1}{n} \sum_i^n \left| \frac{y_v - \hat{y}}{y_v} \right| \times 100 \text{ é o erro percentual médio absoluto;}$$

$$r_{\hat{y}y_v} = \frac{C\hat{O}V(\hat{y}, y_v)}{\sqrt{\hat{V}(\hat{y}) \cdot \hat{V}(y_v)}} \text{ é o coeficiente de correlação linear entre os valores da}$$

superfície de resposta ajustada e os valores da superfície de resposta verdadeira, em que:

y_v é o valor da superfície de resposta verdadeira;

\hat{y} são os valores da superfície de resposta ajustada;

$C\hat{O}V(\hat{y}, y_v)$ é a covariância entre os valores da superfície de resposta verdadeira e da superfície de resposta ajustada;

$\hat{V}(\hat{y})$ é a variância dos valores estimados pela superfície de resposta ajustada;

$\hat{V}(y_v)$ é a variância dos valores da superfície de resposta verdadeira;

4.4. Delineamento composto central

Foram realizadas análises de variância da regressão (MINITAB14) das estimativas das medidas avaliadas das superfícies de respostas ajustadas nos experimentos planejados no DCC em função dos pontos axiais (α) e do número de pontos centrais (n_c), para cada superfície de resposta verdadeira (y_{v1} e y_{v2}) e CV (5, 10, 20 e 30%), separadamente, de acordo com o seguinte modelo completo:

$$m_{obs} = \beta_0 + \beta_1\alpha + \beta_2\alpha^2 + \beta_3n_c + \beta_4\alpha n_c + \varepsilon, \text{ para } 1 \leq \alpha \leq 3 \text{ e } 1 \leq n_c \leq 9, \text{ em que:}$$

m_{obs} é a estimativa da medida avaliada m ;

$m = \Delta\beta_i, \Delta a_c, \Delta b_c, EPMA$ e r_{jyv} ;

ε é o erro aleatório.

A análise de variância da regressão para o DCC foi realizada conforme apresentada na Tabela 7.

Tabela 7 - Análise de variância da regressão para o DCC.

FV	GL	SQ	QM	F
(Tratamentos)	(16-1)	SQTrat	—	—
Regressão	p	SQReg	SQRg/p	QMReg/QMRes
Falta de ajustamento	16-1-p	SQFA	SQFA/(16-1-p)	QMFA/QMRes
Resíduo puro	16r-16	SQRes	SQRes/(16r-16)	
Total	16r-1	SQTotal		

p = número de parâmetros da superfície de resposta ajustada (não inclui o β_0 ; ≤ 4);

r = número de simulações realizadas para cada um dos 16 DCCs planejados ($r = 5$).

Para obtenção da melhor equação de regressão foi retirado do modelo completo um coeficiente não significativo de cada vez, começando pelo de maior grau de dificuldades de interpretação, de acordo com o teste t.

A fim de verificar se os erros aleatórios seguem distribuição normal e apresentam variâncias homogêneas, foram realizados os testes de Kolmogorov-Sminorv e de Cochran, respectivamente.

Nesse caso, foi realizado um estudo fatorial 4x4 referente aos fatores: pontos axiais (α) e número de pontos centrais (n_c). O delineamento foi o inteiramente casualizado com cinco repetições para cada combinação entre os níveis dos dois fatores. Conseqüentemente, foi realizada uma análise de variância com o teste para a falta de ajustamento.

Para todas as equações de regressões ajustadas, foram estimadas os coeficientes de determinação e de variação residual, como seguem:

$$R_{\text{Total}}^2 = \frac{\text{SQReg}}{\text{SQTotal}}$$

é o coeficiente de determinação que mede a proporção da variação dos valores observados de Y que é explicada pela regressão;

$$R_{\text{Trat}}^2 = \frac{\text{SQReg}}{\text{SQTrat}}$$

é o coeficiente de determinação que mede a proporção da variação das médias de tratamentos de Y que é explicada pela regressão;

$$CV_{\varepsilon} (\%) = 100 \frac{\sqrt{\text{QMRes}}}{\bar{m}_{\text{obs}}}$$

é o coeficiente de variação residual, em percentual, em que:

SQReg é a soma de quadrados da regressão;

SQTotal é a soma de quadrados total;

SQTrat é a soma de quadrados de tratamentos, e

QMRes é o quadrado médio do resíduo.

Posteriormente, foram construídos os intervalos com 100(1-0,05)% de confiança para todas as medidas avaliadas ($\Delta\beta_i$, Δa_c , Δb_c , EPMA e r_{jyv}) a partir das cinco repetições

simuladas por CV e por superfície de resposta, para a combinação entre o melhor valor de α e n_c como seguem:

$$IC(m)_{1-\alpha} : \left[\bar{m}_{obs} - t_{\alpha/2, (r-1)} \frac{S_{\hat{m}}}{\sqrt{r}} \leq m \leq \bar{m}_{obs} + t_{\alpha/2, (r-1)} \frac{S_{\hat{m}}}{\sqrt{r}} \right], \text{ em que:}$$

m é o parâmetro da média da medida avaliada ($\Delta\beta_i, \Delta a_c, \Delta b_c, EPMA$ e $r_{\hat{y}_v}$);

\bar{m}_{obs} é o estimador da média das estimativas da medida avaliada;

$S_{\hat{m}}$ é o estimador do desvio-padrão das estimativas da medida avaliada;

r é o número de repetições ($r = 5$);

$t_{\alpha/2}$ é o valor tabelado de t que deixa uma probabilidade de $\alpha/2$ no lado direito da distribuição ($\alpha = 0,05$).

4.5. Comparação entre o delineamento composto central e o fatorial completo.

Para tal comparação, foi estabelecido um fatorial 2^2 para estudar as medidas avaliadas, por meio dos efeitos principais e da interação entre os fatores definidos por: C (tipo de delineamento) e D (número de repetições). Os quatro tratamentos constituídos pelas combinações entre os níveis baixo (-) e alto (+) dos dois fatores, estão apresentados na Tabela 8.

Tabela 8 - Tratamentos formados pelas combinações dos níveis dos fatores C e D.

Fator C	Fator D	
	d.	d ₊
c.	Fatorial completo sem repetição	Fatorial completo com nove repetições
c ₊	DCC sem repetição no ponto central	DCC com nove repetições no ponto central

As estimativas destes efeitos foram efetuados a partir dos contrastes entre as médias de tratamentos ($\hat{m}_1, \hat{m}_2, \hat{m}_3$ e \hat{m}_4), conforme Tabela 9, como seguem:

$$\hat{e}_C = \frac{\hat{C}_C}{2}; \quad \hat{e}_D = \frac{\hat{C}_D}{2} \quad e \quad \hat{e}_{CD} = \frac{\hat{C}_{CD}}{2}, \text{ sendo:}$$

$$\hat{C}_C = -\hat{m}_1 - \hat{m}_2 + \hat{m}_3 + \hat{m}_4 ;$$

$$\hat{C}_D = -\hat{m}_1 + \hat{m}_2 - \hat{m}_3 + \hat{m}_4 ;$$

$$\hat{C}_{CD} = +\hat{m}_1 - \hat{m}_2 + \hat{m}_3 + \hat{m}_4 .$$

Tabela 9 - Dados para as estimativas dos contrastes entre as médias dos tratamentos do fatorial 2².

Tratamento	I	C	D	CD	Médias
c.d.	+	-	-	+	\hat{m}_1
c.d ₊	+	-	+	-	\hat{m}_2
c ₊ .d.	+	+	-	-	\hat{m}_3
c ₊ .d ₊	+	+	+	+	\hat{m}_4

Em seguida, foi realizado o teste F da análise de variância para a verificação da significância dos efeitos. Do mesmo modo, foram testadas as pressuposições de normalidade e de homogeneidade de variâncias dos efeitos do erro experimental, pelos testes de Kolmogorov - Smirnov e de Cochran, respectivamente.

5. RESULTADOS e DISCUSSÃO

5.1. Superfície de resposta ajustada

Nesta seção apresentamos as tabelas referentes às estimativas dos coeficientes das superfícies de respostas ajustadas a partir da superfície de resposta verdadeira y_{v1} e y_{v2} , com base nas médias das cinco simulações, CV igual a 5, 10, 20 e 30%.

Tabela 10 - Estimativas dos coeficientes das superfícies de respostas ajustadas a partir da superfície de resposta verdadeira y_{v1} , com base nas médias das cinco simulações, CV = 5% e CV = 10%, considerando o modelo $y_{v1} = 360 + 0,4a_i - 0,8a_i^2 + 0,5 b_j - 1b_j^2$.

Delineamento Composto		CV = 5%					CV = 10%				
Central		β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4
α	n_c										
1	1	356,19	0,45	-0,77	0,46	-1,00	347,27	0,43	-0,66	0,65	-1,05
1,4142	1	362,60	0,41	-0,82	0,53	-1,05	337,22	0,02	-0,56	0,80	-0,95
2	1	361,35	0,77	-0,83	0,59	-1,06	348,07	0,05	-0,61	0,20	-1,00
3	1	361,37	0,64	-0,83	0,87	-1,06	347,90	0,36	-0,62	0,35	-1,01
1	3	360,55	0,45	-0,79	0,46	-1,02	362,42	0,43	-0,72	0,65	-1,11
1,4142	3	363,85	0,41	-0,83	0,53	-1,06	363,11	0,02	-0,74	0,80	-1,13
2	3	362,99	0,77	-0,85	0,59	-1,08	362,80	0,05	-0,73	0,20	-1,12
3	3	362,54	0,64	-0,84	0,87	-1,07	358,51	0,36	-0,71	0,35	-1,10
1	6	361,97	0,45	-0,80	0,46	-1,03	359,91	0,43	-0,71	0,65	-1,10
1,4142	6	363,80	0,41	-0,83	0,53	-1,06	359,93	0,02	-0,72	0,80	-1,11
2	6	363,33	0,77	-0,85	0,59	-1,08	360,13	0,05	-0,71	0,20	-1,10
3	6	362,98	0,64	-0,84	0,87	-1,07	357,87	0,36	-0,70	0,35	-1,10
1	9	361,02	0,45	-0,79	0,46	-1,02	360,20	0,43	-0,71	0,65	-1,10
1,4142	9	362,16	0,41	-0,82	0,53	-1,05	360,23	0,02	-0,72	0,80	-1,11
2	9	361,97	0,77	-0,84	0,59	-1,07	360,35	0,05	-0,71	0,20	-1,10
3	9	361,89	0,64	-0,84	0,87	-1,06	358,66	0,36	-0,71	0,35	-1,10
Fatorial completo											
Número de repetições = 1		359,65	0,46	-0,79	0,56	-1,01	358,38	0,50	-0,76	0,66	-1,01
Número de repetições = 9		359,86	0,46	-0,80	0,51	-1,00	360,76	0,48	-0,80	0,54	-1,01

Tabela 11 - Estimativas dos coeficientes das superfícies de respostas ajustadas a partir da superfície de resposta verdadeira y_{v1} , com base nas médias das cinco simulações, CV = 20% e CV = 30%, considerando o modelo $y_{v1} = 360 + 0,4a_i - 0,8a_i^2 + 0,5 b_j - 1b_j^2$.

Delineamento Composto		CV = 20%					CV = 30%				
Central		β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4
α	n_c										
1	1	330,99	-0,53	-0,59	0,85	-1,06	313,76	-0,80	-0,60	-0,85	-0,94
1,4142	1	307,77	-1,24	-0,30	1,53	-0,77	285,64	1,47	-0,25	0,47	-0,59
2	1	341,88	-0,75	-0,53	0,41	-1,00	338,47	-0,66	-0,59	-3,21	-0,92
3	1	328,65	-0,78	-0,48	0,16	-0,96	323,86	0,85	-0,56	-2,17	-0,89
1	3	347,79	-0,53	-0,66	0,85	-1,13	340,44	-0,80	-0,71	-0,85	-1,05
1,4142	3	344,53	-1,24	-0,56	1,53	-1,03	338,18	1,47	-0,62	0,47	-0,95
2	3	352,95	-0,75	-0,62	0,41	-1,09	352,14	-0,66	-0,70	-3,21	-1,04
3	3	341,57	-0,78	-0,59	0,16	-1,06	339,16	0,85	-0,68	-2,17	-1,02
1	6	352,03	-0,53	-0,68	0,85	-1,15	351,42	-0,80	-0,76	-0,85	-1,10
1,4142	6	350,96	-1,24	-0,60	1,53	-1,07	351,75	1,47	-0,71	0,47	-1,05
2	6	354,91	-0,75	-0,64	0,41	-1,11	357,96	-0,66	-0,75	-3,21	-1,08
3	6	347,28	-0,78	-0,64	0,16	-1,11	348,61	0,85	-0,76	-2,17	-1,09
1	9	356,14	-0,53	-0,70	0,85	-1,17	357,71	-0,80	-0,79	-0,85	-1,12
1,4142	9	355,79	-1,24	-0,64	1,53	-1,11	358,50	1,47	-0,76	0,47	-1,09
2	9	358,14	-0,75	-0,66	0,41	-1,14	362,25	-0,66	-0,78	-3,21	-1,12
3	9	352,10	-0,78	-0,67	0,16	-1,15	354,81	0,85	-0,81	-2,17	-1,14
Fatorial completo											
Número de repetições = 1		355,93	0,324	-0,76	0,90	-1,03	361,79	0,35	-0,75	0,76	-1,09
Número de repetições = 9		359,5	0,584	-0,79	0,53	-1,02	358,80	0,62	-0,79	0,59	-1,01

Tabela 12 - Estimativas dos coeficientes das superfícies de respostas ajustadas a partir da superfície de resposta verdadeira y_{v2} , com base nas médias das cinco simulações, CV = 5% e CV = 10%, considerando o modelo $y_{v2} = 300 + 3a_i - 0,3a_i^2 + 5 b_j - 0,5b_j^2$.

Delineamento Composto		CV = 5%					CV = 10%				
Central		β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4
α	nc										
1	1	296,19	3,05	-0,27	4,96	-0,50	287,27	3,03	-0,16	5,15	-0,55
1,4142	1	302,60	3,01	-0,32	5,03	-0,55	277,22	2,62	-0,06	5,30	-0,45
2	1	301,35	3,37	-0,33	5,09	-0,56	288,07	2,65	-0,11	4,70	-0,50
3	1	301,37	3,24	-0,33	5,37	-0,56	287,90	2,96	-0,12	4,85	-0,51
1	3	300,55	3,05	-0,29	4,96	-0,52	302,42	3,03	-0,22	5,15	-0,61
1,4142	3	303,85	3,01	-0,33	5,03	-0,56	303,11	2,62	-0,24	5,30	-0,63
2	3	302,99	3,37	-0,35	5,09	-0,58	302,80	2,65	-0,23	4,70	-0,62
3	3	302,54	3,24	-0,34	5,37	-0,57	298,51	2,96	-0,21	4,85	-0,60
1	6	301,97	3,05	-0,30	4,96	-0,53	299,91	3,03	-0,21	5,15	-0,60
1,4142	6	303,80	3,01	-0,33	5,03	-0,56	299,93	2,62	-0,22	5,30	-0,61
2	6	303,33	3,37	-0,35	5,09	-0,58	300,13	2,65	-0,21	4,70	-0,60
3	6	302,98	3,24	-0,34	5,37	-0,57	297,87	2,96	-0,20	4,85	-0,60
1	9	301,02	3,05	-0,29	4,96	-0,52	300,20	3,03	-0,21	5,15	-0,60
1,4142	9	302,16	3,01	-0,32	5,03	-0,55	300,23	2,62	-0,22	5,30	-0,61
2	9	301,97	3,37	-0,34	5,09	-0,57	300,35	2,65	-0,21	4,70	-0,60
3	9	301,89	3,24	-0,34	5,37	-0,56	298,66	2,96	-0,21	4,85	-0,60
Fatorial completo											
Número de repetições = 1		299,65	3,06	-0,29	5,06	-0,51	298,38	3,10	-0,26	5,16	-0,51
Número de repetições = 9		299,86	3,06	-0,30	5,01	-0,50	300,76	3,08	-0,30	5,04	-0,51

Tabela 13 - Estimativas dos coeficientes das superfícies de respostas ajustadas a partir da superfície de resposta verdadeira y_{v2} , com base nas médias das cinco simulações, CV = 20% e CV = 30%, considerando o modelo $y_{v2} = 300 + 3a_i - 0,3a_i^2 + 5b_j - 0,5b_j^2$.

Delineamento Composto		CV = 20%					CV = 30%				
Central		β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4
α	nc										
1	1	270,99	2,07	-0,09	5,35	-0,56	253,76	1,80	-0,10	3,65	-0,44
1,4142	1	247,77	1,36	0,19	6,03	-0,27	225,64	4,07	0,25	4,97	-0,09
2	1	281,88	1,85	-0,03	4,91	-0,50	278,47	1,94	-0,09	1,29	-0,42
3	1	268,65	1,82	0,02	4,66	-0,46	263,86	3,45	-0,06	2,33	-0,39
1	3	287,79	2,07	-0,16	5,35	-0,63	280,44	1,80	-0,21	3,65	-0,55
1,4142	3	284,53	1,36	-0,06	6,03	-0,53	278,18	4,07	-0,12	4,97	-0,45
2	3	292,95	1,85	-0,12	4,91	-0,59	292,14	1,94	-0,20	1,29	-0,54
3	3	281,57	1,82	-0,09	4,66	-0,56	279,16	3,45	-0,18	2,33	-0,52
1	6	292,03	2,07	-0,18	5,35	-0,65	291,42	1,80	-0,26	3,65	-0,60
1,4142	6	290,96	1,36	-0,10	6,03	-0,57	291,75	4,07	-0,21	4,97	-0,55
2	6	294,91	1,85	-0,14	4,91	-0,61	297,96	1,94	-0,25	1,29	-0,58
3	6	287,28	1,82	-0,14	4,66	-0,61	288,61	3,45	-0,26	2,33	-0,59
1	9	296,14	2,07	-0,20	5,35	-0,67	297,71	1,80	-0,29	3,65	-0,62
1,4142	9	295,79	1,36	-0,14	6,03	-0,61	298,50	4,07	-0,26	4,97	-0,59
2	9	298,14	1,85	-0,16	4,91	-0,64	302,25	1,94	-0,28	1,29	-0,62
3	9	292,10	1,82	-0,17	4,66	-0,65	294,81	3,45	-0,31	2,33	-0,64
Fatorial completo											
Número de repetições = 1		295,93	2,92	-0,26	5,40	-0,53	301,79	2,95	-0,25	5,26	-0,59
Número de repetições = 9		299,50	3,18	-0,29	5,03	-0,52	298,80	3,22	-0,29	5,09	-0,51

A partir das superfícies de resposta ajustadas apresentadas nas Tabelas 10 e 11 para y_{v1} e Tabelas 12 e 13 para y_{v2} , pode-se verificar que as estimativas dos coeficientes das superfícies de respostas foram próximas, tanto no DCC quanto no fatorial completo, às dos verdadeiros parâmetros, para os CVs menores (CV = 5 e 10%).

5.1.1. Superfície de resposta com ponto crítico próximo ao ponto central

Estão apresentadas na Tabela 14 as equações de regressão ajustadas a partir dos dados gerados pela superfície de resposta verdadeira y_{v1} , com base nas cinco simulações realizadas, para os casos em que foram satisfeitas as pressuposições de normalidade e de homogeneidade de variâncias dos erros aleatórios.

Tabela 14 - Equações de regressão ajustadas das medidas avaliadas em função de α e n_c , de acordo com a superfície de resposta y_{v1} .

Medida	CV	Constante	α	α^2	n_c	R^2_{Total}	R^2_{Trat}	CV _e
	(%)							(%)
$\Delta\beta_0$	5	-7,4057	18,2254*	-4,5668*	-0,3821*	0,22	0,81	75
	10	16,6740	—	—	-1,428*	0,27	0,78	77
	20	43,0713	—	—	-8,6323*	0,36	0,71	59
$\Delta\beta_1$	5	-0,0170	0,2972*	—	—	0,37	0,96	60
	10	1,1857	—	—	—	—	—	80
	20	1,7110	—	—	—	—	—	88
	30	1,9870	—	—	—	—	—	75
$\Delta\beta_2$	5	0,0906	0,1438*	—	—	0,15	0,92	55
	10	0,4439	0,3913*	—	—	0,11	0,93	75
	20	1,1144	0,8780*	—	—	0,16	0,84	56
	30	1,7120	1,080*	—	—	0,10	0,77	65
$\Delta\beta_3$	10	0,2003	—	—	-0,0470*	0,20	0,62	60
	20	0,3124	—	—	-0,0163*	0,10	0,40	67
$\Delta\beta_4$	5	0,0418	0,0156*	—	—	0,06	0,57	70
	10	0,0981	—	—	—	—	—	73
	20	0,1912	—	—	—	—	—	78
	30	-0,2826	0,6043*	-0,1366*	—	0,10	0,52	69

Continua.

Continuação Tabela 14.

Medida	CV					R^2_{Total}	R^2_{Trat}	CV_e (%)
	(%)	Constante	α	α^2	n_c			
Δa_c	5	0,0054	0,1698*	—	—	0,38	0,96	70
	10	-0,6466	1,5659*	-0,3399*	—	0,10	0,84	75
	20	1,8830	—	—	—	—	—	75
Δb_c	5	0,0680	0,5270*	—	—	0,12	0,82	70
	10	0,1907	0,1905*	—	—	0,11	0,90	75
	20	0,4077	0,4739*	—	—	0,20	0,80	60
	30	0,9866	0,5840*	—	—	0,10	0,70	75
$r_{\hat{y}y_v}$	5	1,0080	-0,0175*	0,0037*	0,0007*	0,45	0,82	04
	10	1,0547	-0,1468*	0,0332*	0,0054*	0,50	0,82	03
	20	1,1886	-0,4058*	0,0923*	0,0161*	0,46	0,78	09
EPMA	5	3,7514	-0,2395*	—	-0,1198*	0,24	0,84	27
	10	16,9943	-8,7278*	1,7916*	-0,4156*	0,48	0,87	33
	20	37,2137	-20,7602*	4,3146*	-0,8004*	0,49	0,84	33

*Significativo pelo teste t ($p < 0,05$).

Para todas as superfícies ajustadas não houve falta de ajustamento ($p > 0,05$), indicando que os modelos adotados se ajustaram bem aos dados em todos os casos estudados. Isso implica que as interpretações baseadas no modelo obtido são satisfatórias.

De acordo com as estimativas do CV_e (%), conclui-se que os efeitos aleatórios foram altos, para as medidas $\Delta\beta_0$, $\Delta\beta_1$, $\Delta\beta_2$, Δa_c , Δb_c , em todos os CVs estudados. Além disso, o R^2_{Total} foi baixo, variando entre 0,06 e 0,50. Porém, o R^2_{Trat} mostrou que, em média, as equações possuem bom poder de explicação para a maioria desses. Isso implica que as superfícies ajustadas para as mesmas medidas, mencionadas anteriormente, são de pouca importância para explicar as suas relações em função de α e n_c . Em função da análise dos β 's, houve uma tendência em escolher os menores valores de α e os maiores de n_c , para que esses deltas se aproximem de zero, de acordo com as superfícies de respostas ajustadas (Tabela 14).

Já as medidas avaliadas $r_{\hat{y}y_v}$ e EPMA apresentaram relações mais bem definidas para os diferentes CVs estudados. Nas Figuras 2 e 3 são apresentados gráficos de superfícies de resposta e de contorno para $r_{\hat{y}y_v}$ e EPMA, respectivamente.

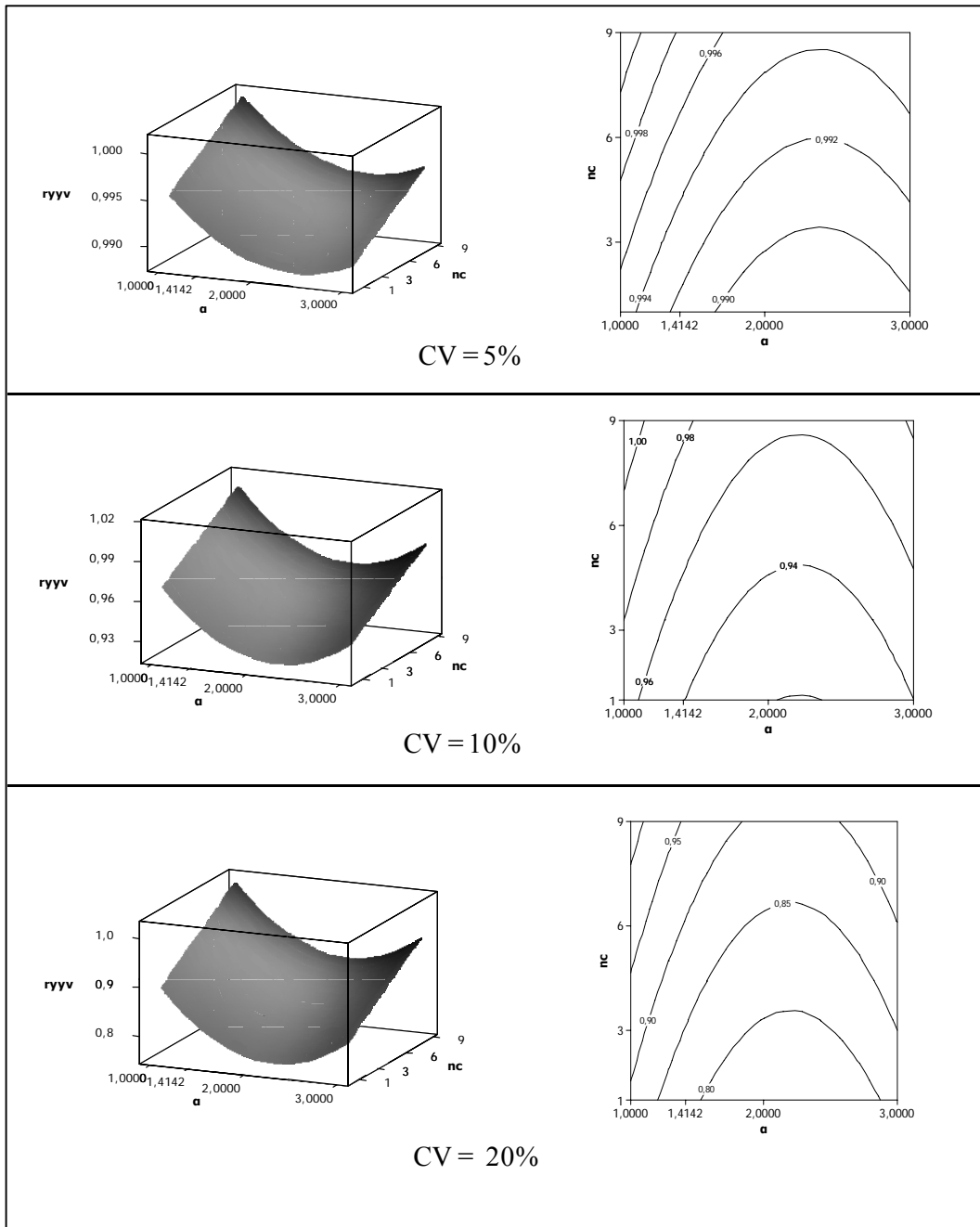


Figura 2 - Estimativas de $r_{\hat{y}y_v}$ em função de α e n_c para a superfície de resposta y_{v1} .

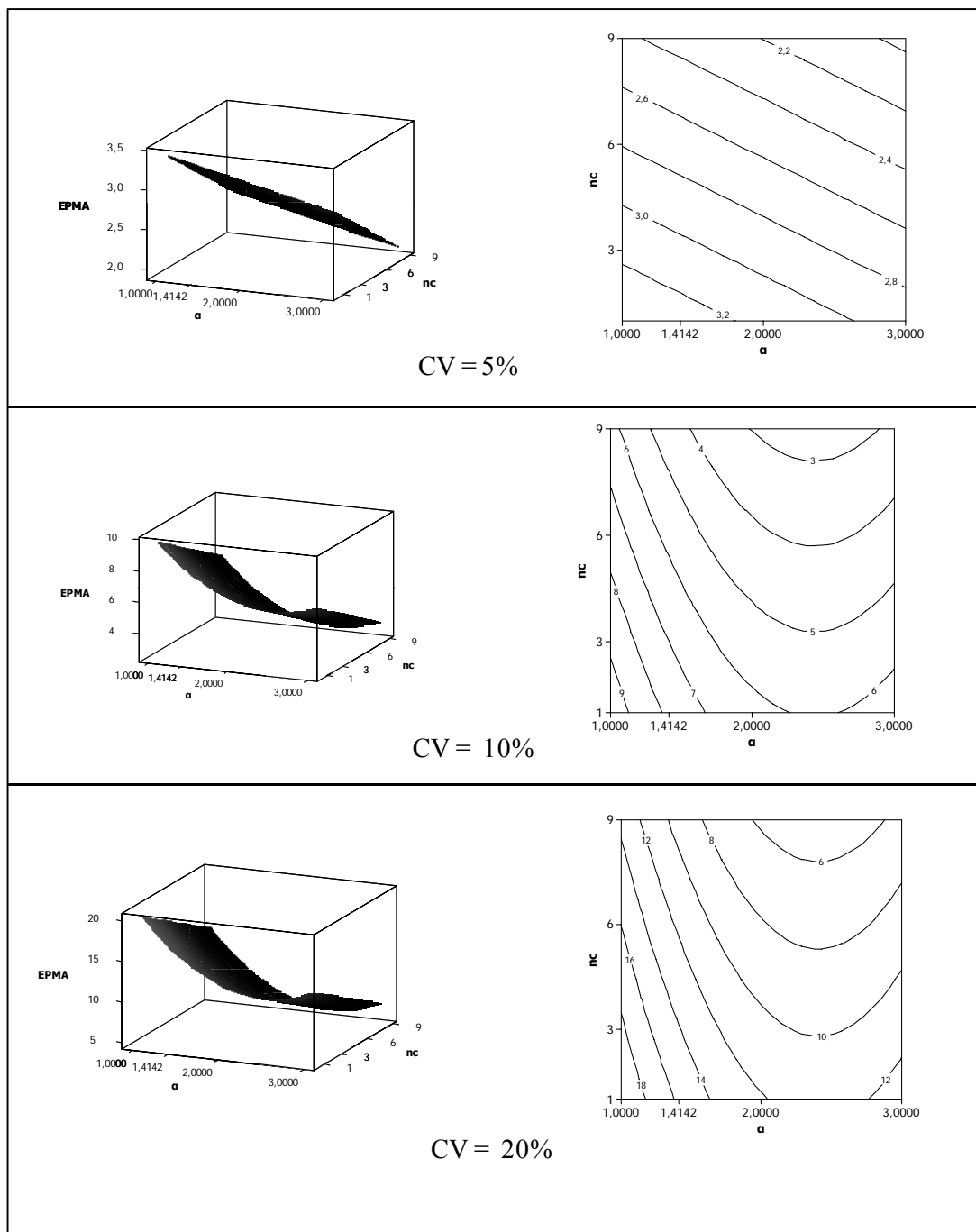


Figura 3 - Estimativas de EPMA em função de α e n_c para a superfície de resposta y_{v1} .

Conforme os resultados apresentados na Tabela 14 e Figura 2, conclui-se que as combinações realizadas nos extremos dos intervalos de α e n_c são as melhores, pois proporcionam maiores valores de r_{yy_v} , dada à superfície ajustada apresentar ponto de mínimo. Verificou-se, ainda, que a melhor combinação dos extremos se dá com o maior

número de repetições no ponto central ($n_c = 9$) e menor valor de α . No entanto, o prejuízo provocado em r_{yyv} , quando se passa de $\alpha = 1$ para $\alpha = 1,4142$ é relativamente pequeno, de aproximadamente: 0,0004; 0,0276 e 0,1589 para CV de 5, 10 e 20%, respectivamente. Já as piores combinações se referem aos valores críticos de α , aproximadamente iguais a: 2,3649; 2,2108; e 2,1983 para CV de 5, 10 e 20%, respectivamente, com o menor número de repetições no ponto central ($n_c = 1$).

Baseados nos resultados da Tabela 14 e Figura 3, à medida que se aumenta o valor de α e o do número de repetições no ponto central, diminui o valor do EPMA, o que é desejável no estudo desta medida, para CV igual 5%, sendo portanto a melhor combinação $\alpha = 3$ e $n_c = 9$. Para CV igual a 10%, a melhor combinação é o valor crítico de α , aproximadamente igual a 2,4358, e $n_c = 9$. E para CV igual a 20%, a melhor combinação é de $\alpha = 2,4058$ e $n_c = 9$. Já a pior combinação em todos os três CVs é $\alpha = n_c = 1$.

Portanto, como diferentes valores de α ocasionaram melhores estimativas das medidas avaliadas e, como o valor de 1,4142 que proporciona a característica de rotacionalidade ao DCC está mais próxima de todas elas, conclui-se de forma geral, que esse valor está, provavelmente, entre os melhores a serem utilizados para o planejamento dos tratamentos. Além disso, o DCC rotacional possibilita estudar ambos os lados dos intervalos dos fatores A e B em relação ao ponto central com a mesma precisão. Nas figuras 1a, 1b, 1c e 1d, são apresentadas as configurações dos nove tratamentos dos DCCs para os valores codificados dos fatores A e B, com valores de α iguais a 1; 1,4142; 2 e 3, respectivamente.

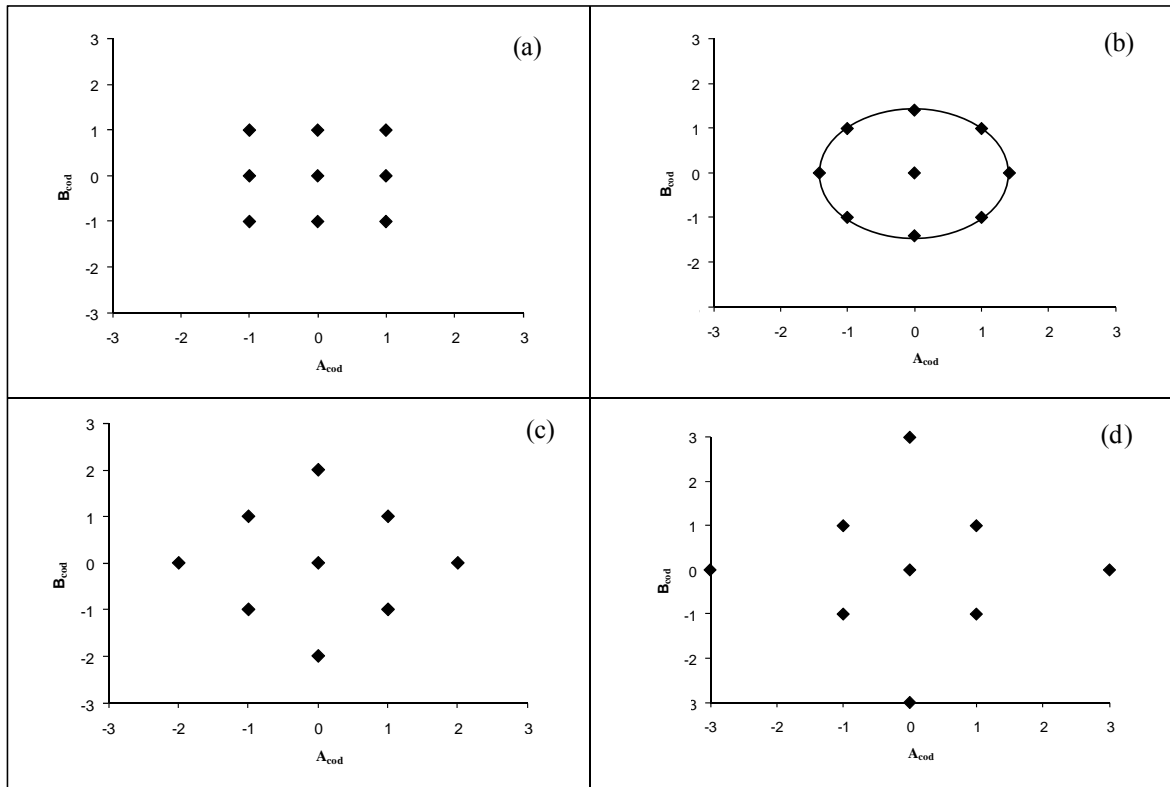


Figura 4 - Representação das nove combinações dos níveis dos fatores A e B planejados por quatro diferentes DCCs.

De acordo com Montgomery e Myers (1995), visto que o pesquisador não conhece de início, a região em que o ótimo pode estar situado, é desejável que todos os pontos de uma dada distância (r) do ponto central em qualquer direção, tenha a mesma magnitude do erro de previsão. Assim, uma estabilidade da variância fornecerá seguramente que a qualidade de estimação da variável dependente, será aproximadamente a mesma em toda a região de interesse.

Com relação ao n_c , ficou claro que quanto maior o seu valor, melhor será a qualidade do DCC, no estudo tem-se $n_c = 9$.

Já a propriedade de ortogonalidade ($\alpha = n_c = 1$), que de acordo com Khuri e Cornell (1996) minimiza a variância dos coeficientes de regressão, propiciando desta forma a estimação do efeito principal e das interações de forma independente, não apresentou-se importante para a qualidade do ajuste da superfície de resposta.

5.1.2. Superfície de resposta com ponto crítico afastado do ponto central

Estão apresentadas na Tabela 15 as equações de regressão ajustadas a partir dos dados gerados pela superfície de resposta verdadeira y_{v2} , com base nas cinco simulações realizadas, para os casos em que foram satisfeitas as pressuposições de normalidade e de homogeneidade de variâncias dos erros aleatórios.

Tabela 15. Equações de regressão ajustadas das medidas avaliadas em função de α e n_c .

Medida	CV (%)	Constante	α	α^2	n_c	R^2_{Total}	R^2_{Trat}	CV_ε (%)
$\Delta\beta_0$	05	-7,4057	18,2254*	-4,5668*	-0,3821*	0,22	0,81	75
	10	16,6740	—	—	-1,428*	0,27	0,78	77
	20	43,0713	—	—	-8,6323*	0,36	0,71	59
$\Delta\beta_1$	05	-0,0170	0,2972*	—	—	0,37	0,96	60
	10	1,1857	—	—	—	—	—	80
	20	1,7110	—	—	—	—	—	88
	30	1,9870	—	—	—	—	—	75
$\Delta\beta_2$	05	0,0906	0,1438*	—	—	0,15	0,92	55
	10	0,4439	0,3913*	—	—	0,11	0,93	75
	20	1,1144	0,8780*	—	—	0,16	0,84	56
	30	1,7120	1,080*	—	—	0,10	0,77	65
$\Delta\beta_3$	10	0,2003	—	—	-0,0470*	0,20	0,62	60
	20	0,3124	—	—	-0,0163*	0,10	0,40	67
	30	0,3619	—	—	-0,0207*	0,10	0,36	75
$\Delta\beta_4$	05	0,0418	0,0156*	—	—	0,06	0,57	70
	10	0,0981	—	—	—	—	—	73
	20	0,1912	—	—	—	—	—	78
	30	-0,2826	0,6043*	-0,1366*	—	0,10	0,52	69
Δb_c	05	-0,3406	1,0479*	-0,2622*	—	0,10	0,54	60
	10	0,5476	0,4712*	—	—	0,13	0,97	68
$r_{\hat{y}y_v}$	05	1,0149	-0,2447*	0,0051*	—	0,23	0,83	01
	10	1,0894	-0,1327*	0,0268*	—	0,33	0,87	03
EPMA	05	1,3013	2,1885*	-0,5234*	-0,1055*	0,22	0,91	29
	10	8,5784	-0,5971*	—	-0,3790*	0,30	0,92	38
	20	17,2810	-1,2833*	—	-0,7141*	0,30	0,86	36

* Significativo pelo teste t ($p < 0,05$).

Os erros aleatórios usados na simulação dos dados para as superfícies de respostas verdadeiras (y_{v1} e y_{v2}) foram os mesmos e, conseqüentemente, os desvios dos β s apresentaram-se iguais. Nota-se ainda que, a medida avaliada Δa_c , não aparece na Tabela 15, isso deve-se ao fato de que para todos os CVs estudados as pressuposições de normalidade e de homogeneidade de variâncias dos erros aleatórios não foram satisfeitas para esta medida.

Para todas as superfícies ajustadas não houve falta de ajustamento ($p > 0,05$), indicando que os modelos adotados se ajustaram bem aos dados em todos os casos estudados. Isso implica que as interpretações baseadas no modelo obtido são satisfatórias.

Os resultados para y_{v2} apresentaram-se similares a y_{v1} , os efeitos aleatórios foram altos, para as medidas $\Delta\beta_0$, $\Delta\beta_1$, $\Delta\beta_2$, Δb_c , em todos os CVs estudados. Além disso, o R^2_{Total} foi baixo, variando entre 0,06 e 0,37. Porém, o R^2_{Trat} mostrou que, em média, as equações possuem bom poder de explicação para a maioria desses. Isso implica que, assim como ocorreu em y_{v1} , as superfícies ajustadas para as medidas mencionados anteriormente, são de pouca importância para explicar as suas relações em função de α e n_c . Em função da análise dos β 's, houve uma tendência em escolher os menores valores de α e os maiores de n_c , para que esses deltas se aproximem de zero, de acordo com as superfícies de respostas ajustadas (Tabela 15).

Da mesma forma, as medidas avaliadas $r_{\hat{y}_v}$ e EPMA apresentaram relações mais bem definidas para os diferentes CVs estudados. Na Figura 5 são apresentados gráficos das estimativas de $r_{\hat{y}_v}$, e na Figura 6 são apresentados gráficos de superfícies de resposta e de contorno para EPMA.

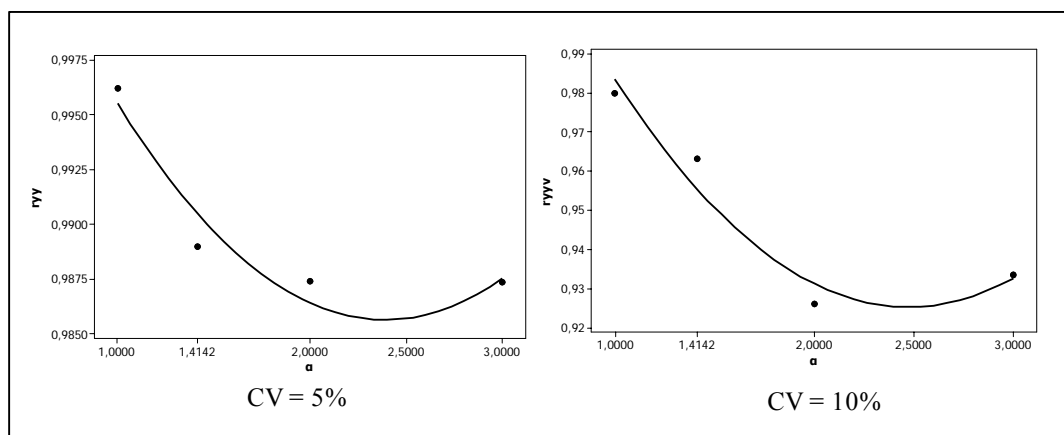


Figura 5 - Estimativas da medida de r_{yy_v} em função de α , para y_{v2} .

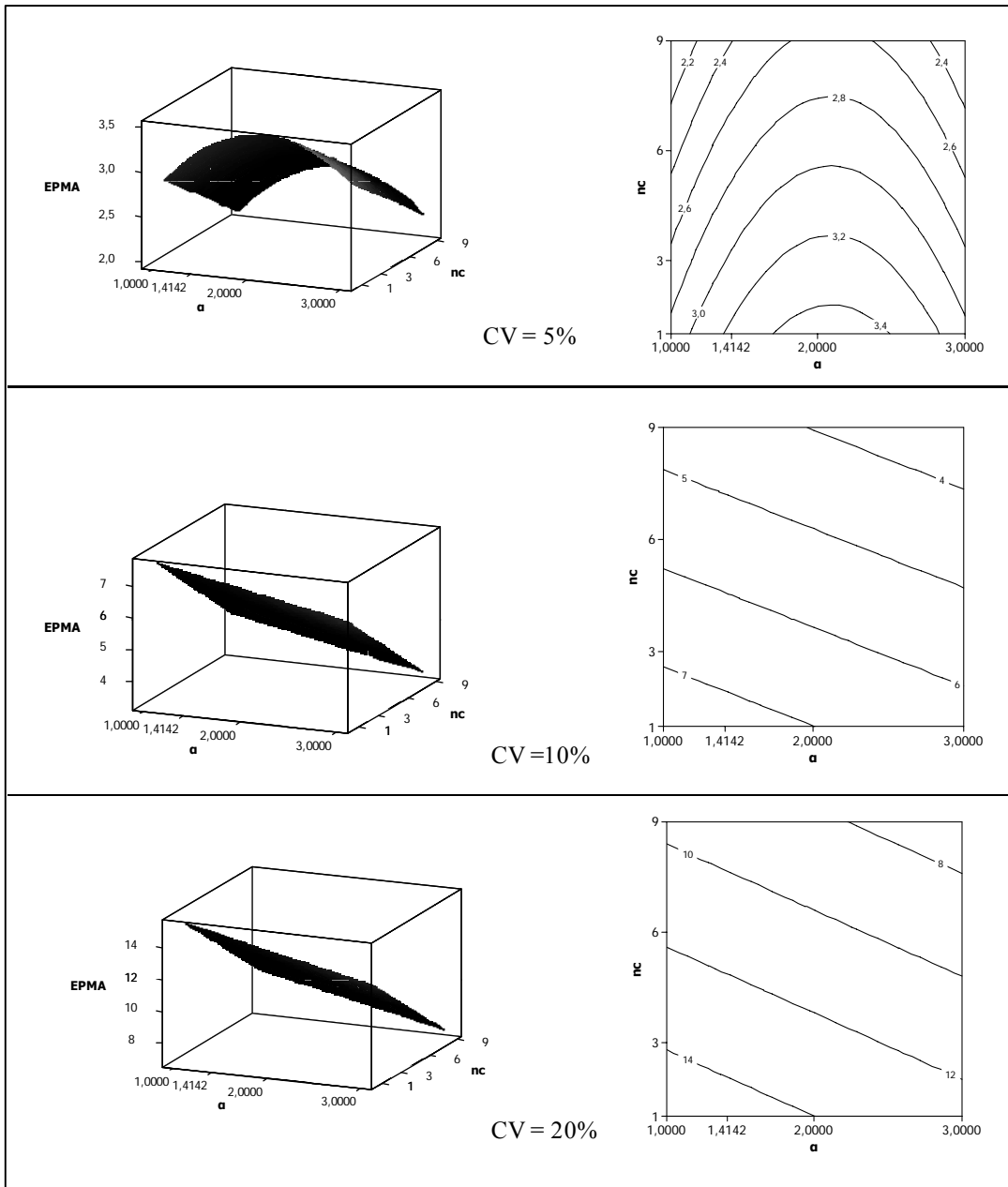


Figura 6 - Estimativas de EPMA em função de α e nc , para a superfície de resposta y_{v2} .

Através dos resultados apresentados na Tabela 15 e Figura 5, conclui-se, assim como em y_{v1} , $\alpha = 1$ sendo a melhor escolha entre os demais valores de α , e que o prejuízo em r_{yy_v} quando se passa de $\alpha = 1$ para $\alpha = 1,4142$ é relativamente pequeno, de aproximadamente: 0,0963 e 0,0282 para CV de 5 e 10%, respectivamente. Conclui-se também que à medida que o CV aumenta, diminui o valor de r_{yy_v} . Já as piores escolhas são

para os valores de α aproximadamente iguais a: 2,4 e 2,5 para CV de 5 e 10% respectivamente, por ter proporcionado os menores valores de r_{yyv} .

Conforme resultados da Tabela 15 e Figura 6, ao contrário do que ocorreu em y_{v1} , conclui-se que as combinações realizadas nos extremos dos intervalos de α e n_c são as melhores, pois proporcionam menores valores de EPMA dada a superfície ajustada apresentar ponto de máximo. Verificou-se, ainda, que a melhor combinação dos extremos se dá com o maior número de repetições no ponto central ($n_c = 9$) e menor valor de α , para CV igual a 5%. No entanto, o prejuízo provocado em EPMA, quando se passa de $\alpha = 1$ para $\alpha = 1,4142$ é relativamente pequeno, de aproximadamente 0,3830. Já a pior combinação se refere ao valor crítico de α , aproximadamente igual a 2,0907, com o menor número de repetições no ponto central ($n_c = 1$).

Para CVs iguais a 10 e 20%, à medida que se aumenta o valor de α e o do número de repetições no ponto central, diminui o valor do EPMA, sendo desta forma a melhor combinação $\alpha = 3$ e $n_c = 9$. Já a pior combinação, nestes casos é $\alpha = n_c = 1$.

Pode-se observar, portanto que diferentes valores de α ocasionaram melhores estimativas das medidas avaliadas e, assim como em y_{v1} , conclui-se de forma geral que α igual a 1,4142, que proporciona a característica de rotacionalidade ao DCC, provavelmente, está entre os melhores a serem utilizados para o planejamento dos tratamentos. Com relação ao n_c , quanto maior o seu valor, melhor será a qualidade do DCC.

Novamente a propriedade de ortogonalidade ($\alpha = n_c = 1$) não foi importante para a qualidade do ajuste da superfície de resposta.

5.2. Intervalos de confiança

Diante dos resultados apresentados, que apontaram, tanto para y_{v1} e y_{v2} , combinações com maior número de repetições no ponto central ($n_c = 9$) e, para α o valor de 1,4142, que possui a propriedade de rotacionalidade, (Box e Hunter, 1957), visando desta forma à estabilidade em toda região do delineamento, conforme estudado por Mateus *et al.* (2001), são apresentados a seguir os intervalos de confiança para o melhor valor de α (1,4142) e, cujos planejamentos do DCC ocorreram para $n_c = 9$. Foram construídos também os intervalos de confiança para $\alpha = 1,4142$ com $n_c = 1$ com a finalidade de

comparação entre o menor e maior número de repetições no ponto central, ou seja $n_c = 1$ e $n_c = 9$.

5.2.1 - Superfície de resposta com pontos críticos próximos ao ponto central

Os intervalos com 100(1-0,05)% de confiança para média das medidas avaliadas estão apresentados na Tabela 16, construídos com base nos dados da superfície de resposta com pontos críticos próximos ao ponto central.

Tabela 16. Intervalos a com 100(1-0,05)% de confiança para média das medidas avaliadas.

Medida	CV(%)	$n_c=1$		$n_c=9$	
		Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo
$\Delta\beta_0$	5	3,55	16,74	-0,71	10,31
	10	10,63	34,9354	-0,48	8,63
	20	33,21	71,24	2,61	21,90
	30	26,76	121,95	1,66	39,33
$\Delta\beta_1$	5	-0,05	0,82	-0,05	0,82
	10	0,08	2,09	0,08	2,09
	20	0,10	3,99	0,10	3,99
	30	-0,03	4,87	-0,03	4,87
$\Delta\beta_2$	5	0,08	0,58	0,08	0,58
	10	0,17	2,09	0,17	2,09
	20	0,52	4,18	0,52	4,18
	30	1,39	6,19	1,39	6,19
$\Delta\beta_3$	5	0,04	0,18	0,05	0,12
	10	0,18	0,29	0,04	0,15
	20	0,38	0,62	0,06	0,33
	30	0,25	0,99	0,11	0,35
$\Delta\beta_4$	5	0,02	0,11	0,00	0,13
	10	0,00	0,12	0,01	0,21
	20	-0,08	0,54	0,09	0,43
	30	-0,09	0,93	0,13	0,66
Δa_c	5	0,00	0,48	-0,01	0,49
	10	0,24	1,74	0,07	1,51
	20	1,17	5,67	0,00	3,54
	30	-20,88	54,66	0,36	2,83

Continua.

Continuação Tabela 16.

Medida	CV (%)	n _c =1		n _c =9	
		Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo
Δb_c	5	0,03	0,31	0,06	0,26
	10	0,07	1,09	0,06	0,92
	20	0,28	2,36	0,23	1,70
	30	0,86	6,08	0,19	3,33
$r_{\hat{y}y_v}$	5	0,97	0,99	0,99	0,99
	10	0,85	0,96	0,97	0,99
	20	0,58	0,75	0,89	0,99
	30	0,04	0,69	0,85	0,95
EPMA	5	2,08	3,90	1,12	3,13
	10	4,75	8,96	2,22	5,49
	20	9,35	17,90	5,11	11,22
	30	15,85	23,57	7,99	16,48

Os gráficos dos intervalos para as medidas que apresentaram relações mais bem definidas ($r_{\hat{y}y_v}$ e EPMA) são apresentados na Figura 7.

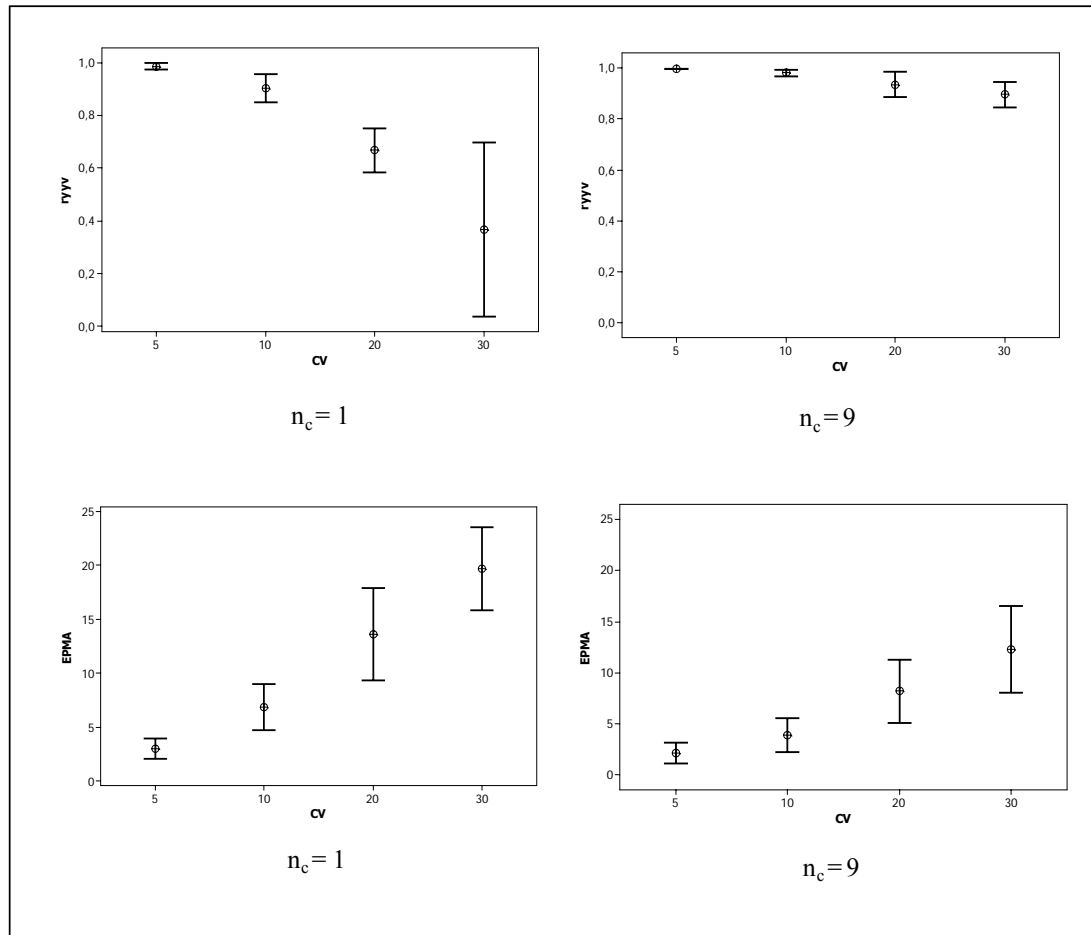


Figura 7 - Intervalos com 100(1-0,005)% de confiança para média das medidas $r_{\hat{y}y_v}$ e EPMA, a partir da superfície de resposta y_{v1} .

Com base na Tabela 16 e Figura 7, verificou-se que para as medidas que apresentaram relações mais bem definidas ($r_{\hat{y}y_v}$ e EPMA), à medida que aumenta o valor de CV, aumenta também a variabilidade em torno da média, para $n_c = 9$. O mesmo ocorreu para $n_c=1$, com exceção da medida EPMA que apresentou maior variabilidade para CV 20%. Portanto, menores coeficientes de variação, apresentaram intervalos mais curtos, ou seja há mais informação sobre o verdadeiro valor da média, das medidas avaliadas. Portanto, o DCC rotacional apresentou resultados mais próximos do real quando aplicados

em ambientes onde há um bom controle dos fatores que possam influenciar o experimento. Estudos similares realizados por Pimentel Gomes e Campos (1972), Miranda (1976) e Mateus *et al.* (2001), também mostraram que quanto maior as dificuldades de controle de um experimento, menor é a eficiência do DCC.

Verificou-se também, para as mesmas medidas em discussão, que quando $n_c = 9$ os intervalos de confiança apresentaram-se com menor amplitude, em relação a $n_c=1$ com exceção da medida EPMA para CV de 5 e 30%.

5.2.2 - Superfície de resposta com pontos críticos afastados do ponto central

Os intervalos com 100(1-0,05)% de confiança para média das medidas avaliadas estão apresentados na Tabela 17, construído com base nos dados da superfície de resposta com pontos críticos afastados do ponto central.

Tabela 17. Intervalos com 100(1-0,05)% de confiança para média das medidas avaliadas.

Medida	CV(%)	$n_c=1$		$n_c=9$	
		Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo
$\Delta\beta_0$	5	3,55	16,74	-0,71	10,31
	10	10,63	34,94	-0,48	8,63
	20	33,21	71,24	2,61	21,90
	30	26,76	121,95	1,66	39,33
$\Delta\beta_1$	5	-0,05	0,82	-0,71	10,31
	10	0,08	2,09	0,08	2,09
	20	0,10	3,99	0,10	3,99
	30	-0,03	4,87	-0,03	4,87
$\Delta\beta_2$	5	0,08	0,58	0,08	0,58
	10	0,17	2,09	0,17	2,09
	20	0,52	4,18	0,52	4,18
	30	1,39	6,19	1,38	6,19
$\Delta\beta_3$	5	0,04	0,18	0,06	0,12
	10	0,18	0,29	0,04	0,15
	20	0,38	0,62	0,06	0,33
	30	0,25	0,99	0,11	0,35
$\Delta\beta_4$	5	0,02	0,11	0,00	0,13
	10	0,00	0,12	0,01	0,21
	20	-0,08	0,54	0,09	0,43

Continua.

Continuação Tabela 17.

Medida	CV(%)	n _c =1		n _c =9	
		Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo
Δa_c	30	-0,09	0,93	0,13	0,66
	5	-0,77	6,34	0,00	3,76
	10	-16,32	64,63	-1,56	9,08
	20	0,00	17,68	0,41	11,73
	30	2,37	14,71	-10,66	42,09
Δb_c	5	0,32	1,34	-0,08	1,18
	10	-0,22	2,29	0,19	1,89
	20	-2,41	16,68	1,09	4,78
	30	2,84	9,09	-0,88	11,64
$r_{\dot{y}y_v}$	5	0,98	0,99	0,98	0,99
	10	0,92	0,98	0,95	0,99
	20	0,75	0,88	0,81	0,96
	30	0,35	0,94	0,63	0,99
EPMA	5	1,97	4,12	1,18	3,34
	10	4,26	9,59	1,87	6,01
	20	9,19	19,16	4,85	12,44
	30	15,47	25,27	7,54	18,35

Os gráficos de intervalos para as medidas que apresentaram relações mais bem definidas (r_{yy_v} e EPMA) são apresentados na Figura 8.

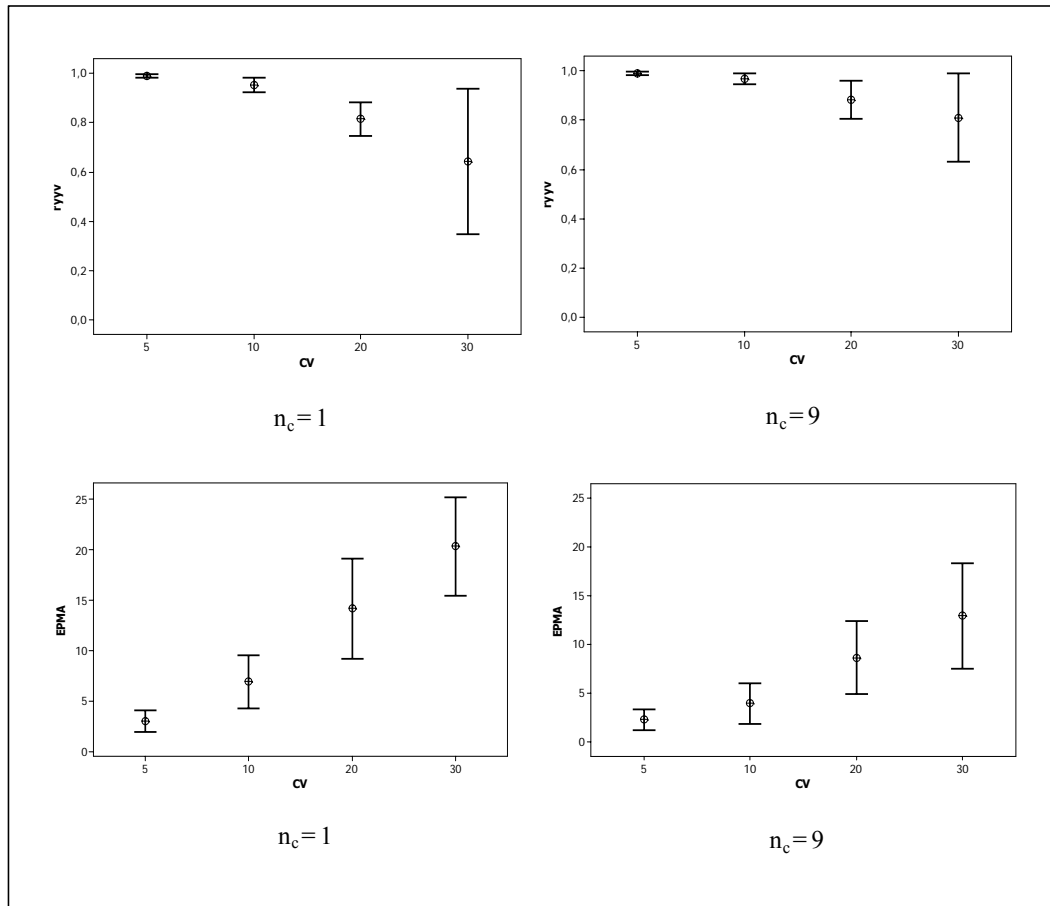


Figura 8 - Intervalos com 100(1-0,005)% de confiança para média das medidas r_{yy_v} e EPMA, a partir da superfície de resposta y_{v2} .

De acordo com Tabela 17 e Figura 8 para as medidas r_{yy_v} e EPMA, assim com em y_{v1} , à medida que aumenta o valor do CV, aumenta também a variabilidade em torno da média, para $n_c = 9$. O mesmo ocorreu para $n_c=1$, com exceção da medida EPMA que apresentou maior variabilidade para o CV de 20%. Conclui-se para y_{v2} , também, que os menores coeficientes de variação apresentaram intervalos com mais informação sobre o verdadeiro valor da média. Portanto, mesmo quando afastado do ponto central, o DCC rotacional apresentou resultados mais próximos do real quando aplicados em ambientes onde há um bom controle dos fatores que possam influenciar o experimento.

Observou-se ainda, que para $n_c = 9$ os intervalos de confiança apresentaram-se mais curtos, em relação a $n_c=1$, com exceção das medidas r_{yy_v} para CV de 5 e 20%, e EPMA CV de 5 e 20%.

5.3 - Fatorial completo versus DCC

Estão apresentados na Tabela 18 os valores dos efeitos principais dos fatores C e D e também o efeito da interação entre eles, a fim de comparar o DCC rotacional ($\alpha = 1,4142$) com o fatorial completo sem e com nove repetições.

Tabela 18. Estimativas dos efeitos principais e das interações entre os fatores C (tipo de delineamento) e D (número de repetições), para as superfícies de respostas verdadeiras (y_{v1} e y_{v2}).

Medida	CV(%)	y_{v1}			y_{v2}		
		e_C	e_D	e_{CD}	e_C	e_D	e_{CD}
$\Delta\beta_0$	5	6,99*	-2,71	-2,64	6,99*	-2,71	-2,64
	10	11,59*	-9,97*	-8,74*	11,59*	-9,97*	-8,74*
	20	26,68*	-22,24*	-17,73*	26,68*	-22,24*	-17,73*
	30	38,93*	-32,04*	-21,83*	38,93*	-32,04*	-21,83
$\Delta\beta_1$	5	0,23*	-0,09	0,09	0,23*	-0,09	0,09
	10	0,93*	-0,03	0,03	0,93*	-0,03	0,03
	20	1,76*	-0,08	0,08	1,76*	-0,08	0,08
	30	1,77*	-0,39	0,39	1,77*	-0,39	0,39
$\Delta\beta_2$	5	0,22*	-0,07	0,07	0,22*	-0,07	0,07
	10	0,99*	-0,07	0,07	0,99*	-0,07	0,07
	20	2,02*	-0,15	0,15	2,02*	-0,15	0,15
	30	3,46*	-0,20	0,20	3,46*	-0,20	0,20
$\Delta\beta_3$	5	0,09*	-0,02	0,00	0,09*	-0,02	0,00
	10	0,13*	-0,10*	0,04*	0,13*	-0,10*	-0,04*
	20	0,28*	-0,19*	-0,11*	0,28*	-0,19*	-0,10*
	30	0,33*	-0,26*	-0,14	0,33*	-0,26*	-0,14
$\Delta\beta_4$	5	0,05*	0,00	0,00	0,05*	0,00	0,00
	10	0,06*	0,02	0,04	0,06*	0,02	0,04
	20	0,18*	0,00	0,03	0,18*	0,00	0,03
	30	0,33*	0,06	0,03	0,33*	-0,06	0,03

Continua.

Continuação Tabela 18.

Medida	CV(%)	Yv1			Yv2		
		e _C	e _D	e _{CD}	e _C	e _D	e _{CD}
Δa_c	5	0,14*	-0,06	0,06	1,97*	-0,65	-0,25
	10	0,79*	-0,12	-0,08	12,93*	-10,83	-9,57
	20	2,39*	-0,89	-0,76	5,19*	-2,83	0,06
	30	8,74	-7,96	-7,33	4,62	-2,61	9,79
Δb_c	5	0,11*	-0,04	0,03	0,52*	-0,22	-0,06
	10	0,47*	-0,08	-0,01	0,81*	-0,10	0,10
	20	0,98*	-0,26	-0,09	4,49*	-2,39	-1,80
	30	2,47*	-0,93	-0,77	5,17*	-0,47	-0,12
$r_{\hat{y}y_v}$	5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	10	-0,06*	0,04*	0,04*	-0,04*	0,00	0,00
	20	-0,19*	0,14*	0,13*	-0,14*	0,04	0,03
	30	-0,36*	0,27*	0,26*	-0,26*	0,09	0,07
EPMA	5	1,77*	-0,94*	0,07	1,91*	-0,87*	0,09
	10	3,74*	-2,34*	-0,66	3,94*	-2,24*	-0,75
	20	7,98*	-4,14*	-1,33	8,64*	-4,10*	-1,42
	30	11,86*	-6,21*	-1,27	12,80*	-6,05*	-1,38

*Significativo pelo teste F ($p < 0,05$).

Para as medidas relacionados aos deltas, verifica-se para a maioria dos casos, efeitos positivos ($p < 0,05$) para o fator C e negativos ($p < 0,05$) para o D. Isso indica que os menores valores dos deltas estão associados ao fatorial completo com $r = 9$. Portanto, pode-se concluir que o DCC apresentou qualidade inferior nas suas estimativas. Essa conclusão é reforçada pela interação CxD negativa, quando significativa, que confere menores valores dos deltas para a combinação dos sinais contrários dos dois fatores, ou seja, de C. (fatorial) com D₊ (nove repetições). De modo geral, as estimativas dos efeitos principais de C e D aumentam, em módulo, em função do aumento do CV. Portanto, as diferenças entre as estimativas proporcionadas pelos dois delineamentos e pelos dois números de repetições também aumentam. Consequentemente, quanto maior o CV residual do experimento, pior a qualidade de ajuste proporcionada pelos tratamentos planejados pelo DCC, principalmente com baixo número de repetições no ponto central.

Para $r_{\hat{y}y_v}$, todos os efeitos testados influenciaram ($p < 0,05$) os seus valores. Os efeitos principais de C foram negativos. Já os efeitos de D e CxD foram positivos.

Portanto, para se obter maiores valores de r_{yy} , é indicada a seguinte combinação para todos os CVs: c.d+. Novamente o fatorial completo com $r = 9$ foi o melhor delineamento. Para maiores CVs, as estimativas dos efeitos, em módulo, foram maiores. Nesses casos, deve-se obrigatoriamente indicar o fatorial, ao invés do DCC. Observamos que Penteadó e Batista (1971) obtiveram resultados similares ao que encontramos, quando estudaram a eficiência do DCC em comparação com o fatorial completo 5×5 . Além disso, Campos (1967) ao comparar o fatorial 3^3 e o DCC rotacional, concluiu que o fatorial 3^3 foi mais preciso, baseando-se nas estimativas das variâncias dos parâmetros da superfície de resposta.

Analisando ainda a Tabela 18, nota-se que para EPMA, apenas os efeitos principais de C (positivos) e D (negativos) foram significativos, para todos os CVs estudados. Portanto, para menores estimativas do mesmo, deve-se recomendar c.d+, ou seja, o fatorial com $r = 9$, principalmente, para os maiores valores de CV.

Como as magnitudes, em módulos, do fator C (delineamento) foram mais altos do que as do fator D (repetições), então pode-se concluir que a mudança do fatorial para o DCC rotacional é mais prejudicial às estimativas dos parâmetros da superfície de resposta do que a diminuição do número de repetições.

Ressalta-se que, a diferença entre o fatorial (9×9) e o DCC rotacional foi muito grande em termos de número de tratamentos. Possivelmente, se essa diferença for menor, ou se houver mais repetições de todos os tratamentos do DCC e não somente no ponto central, a diferença entre os delineamentos também será.

Portanto, parece que o DCC rotacional é mais promissor que os resultados do presente trabalho apontaram, isso implica que vale a pena estudar mais sobre este tipo de delineamento, principalmente pela economia de ensaios que este proporciona ao experimento.

6. CONCLUSÕES

- Os pontos axiais e o número de pontos centrais ocasionaram diferentes efeitos nos ajustes das superfícies de respostas.
- Recomenda-se utilizar para o planejamento dos tratamentos pelo delineamento composto central o valor do ponto axial 1,4142, que proporciona a propriedade de rotacionalidade.
- Quanto maior o número de pontos centrais melhor o ajuste da superfície de resposta pelo delineamento composto central.
- A propriedade de ortogonalidade não influenciou na qualidade de ajuste da superfície de resposta.
- O delineamento composto central rotacional apresentou melhores resultados quando aplicado em experimentos onde há uma melhor possibilidade de minimizar os fatores aleatórios.
- O delineamento composto central rotacional apresentou resultados similares quando aplicados a intervalos que contém pontos críticos próximos ou afastados do ponto central.
- O fatorial completo foi mais eficiente do que o delineamento composto central rotacional em possibilitar a estimativa da superfície de resposta. Porém, essa

superioridade diminui para experimentos com baixos valores do coeficiente de variação residual, ou mais precisamente, quando menores ou iguais a 5%.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ASLAN, N. **Application of response surface methodology and central composite rotatable design for modeling and optimization of a multi-gravity separator for chromite concentration.** Powder Technology, v.185, p.80–86, 2008.
- BARROS, N.B.; SCARMINIO, S.I.; BRUNS, R.E. **Como fazer experimentos: pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria**, 3a ed., Ed. Unicamp: Campinas, p. 339-344, 2007.
- BOX, G.E.P.; DRAPER, N.R. **Empirical model building and response surfaces.** New York: John Wiley (Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics), p. 40-48, 1986.
- BOX, G.E.P. & HUNTER, J.S. **Multifactor experimental designs for exploring response surfaces.** Annals of Mathematical Statistics, p. 195-241, 1957.
- BOX & WILSON, K.B. **On the experimental attainment of optimum conditions.** Journal of the Royal Statistical Society. V.13, p.1-45, 1951.
- BRANDÃO, K.S.R. **Otimização do Processo de Produção de Biodiesel Metílico e Etilico do Óleo de Mamona (Ricinus Communis L.) Aplicando um Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR).** Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Maranhão - Química, v. 1, 127p., 2007.

- BRAVO, C.E.C.; CARVALHO, E.P.; SCHWAN, R.F.; GÓMEZ R. J.H.C.; PILON L. **Determinação de condições ideais para a produção de poligalacturonase por *Kluyveromyces marxianus*¹**. Revista Ciência e Agrotecnologia, Lavras, v. 24 , edição especial, p. 137-152, dez 2000.
- CARLYLE, W.; MONTGOMERY, D.; RUNGER, G. **Optimization problems and methods in quality control and improvement**. Journal of Quality Technology. Wisconsin, v. 32, n.1, p. 1-15, 2000.
- CAMPOS, H. **Aspectos da aplicação das superfícies de resposta a ensaios fatoriais 3³ de adubação**. Piracicaba, 82p. (tese doutorado) - ESALQ/USP, 1967.
- CONAGIN, A. **Delineamento (1/5) (5x5x5) em blocos**. Instituto Agrônomo de Campinas, Campinas, v.41, n. 16, p. 155-168, 1999.
- CONAGIN, A. **Delineamentos compostos centrais ortogonais, rotacionais e divisíveis em blocos**. Instituto Agrônomo de Campinas, Campinas, V. 41, n. 1, p. 49-56, 1982.
- DIAMOND, W. **Practical Experiment Designs**. 2ed. New York: Van Nostrand Reinholds, 1989.
- DRAPER, N.R.; HERZBERG, A.M. **Futher second order rotatable designs**. Annual Mathematics statistical, n.39, p.1995-2001, 1968.
- HAALAND, P.D. **Experimental design in Biotechnology**. New York: Marcel Dekker, 1987.
- HERRERA R. & FERMÍN W. **Comparación teórica y práctica del diseño factorial 3³ con el diseño de superficie de respuesta compuesto central rotatable**. Saber, Universidade de Oriente, Venezuela, v. 12, n.01, p. 60-65, 2000.

- KHURI, A.I. & CONLON, M. **Simultaneous optimization of multiple responses represented by polynomial regression functions.** Technometrics, v. 23, n. 4, p. 363-375, 1981.
- KHURI, A.I. & CORNELL, J.A. **Response Surfaces.** 2nd ed. Dekker, New York, p.71 - 211, 1987.
- LIMA, C.N. **Escolha de tratamentos e blocagem otimizados na construção de fatoriais fracionários.** Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, 147p., 2009.
- MATEUS, N.B.; BARBIN D.; CONAGIN A. **O delineamento composto central e sua viabilidade de uso em algumas áreas de pesquisa.** Revista Acta Scientiarum, Maringá, v. 23, n. 6, p. 1537-1546, 2001.
- MATEUS, N.B. **O delineamento composto central e sua viabilidade de uso em algumas áreas de pesquisa.** Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, v. 1, 105p., 2001.
- MEDEIROS, C.M. **Ajuste de modelos e determinação de índice térmico ambiental de produtividade para frangos de corte.** Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 115p., 2001.
- MIRANDA, L. E. C. de. **Avaliação do efeito residual de fertilizantes através de coeficientes da superfície de resposta ajustada a ensaios de adubação de milho.** Dissertação (mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 1976.
- MONTGOMERY, D.C.; MYERS, R.H. **Response surface methodology: Process and product optimization using designed experiments.** New York: John Wiley, p. 279-350, 1995.
- MYERS, R.H. **Response surface methodology.** Boston, Allyn and Bacon, p. 125-213, 1971.

- MYERS, R.H.; KHURI, A.; CARTER Jr., W. **Response Surface Methodology: 1966-1988**. Technometrics, Virginia, v. 31, n. 2, p. 137-157, maio 1989.
- PENTEADO, A.F.; BATISTA, L.B. **Eficiência do ensaio composto central (Box) em comparação com os fatoriais completos de dois fatores**. In: Congresso Brasileiro de ciências do solo, Vitória, 13v, 1971.
- PIMENTEL GOMES, F.; CAMPOS, H. **The efficiency of factorial 3^3 designs as compared to a central composite rotatable design**. Potash Rev., Basel, v.72, p.1-3, 1972.
- RODRIGUES JÚNIOR, S. **Desenvolvimento, construção e validação de rator para determinação do efeito da tensão de cisalhamento na resistência térmica de microrganismos**. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas - Ciência de alimentos, Campinas, v. 1., 157p., 2008.
- RODRIGUES, M.I.; IEMMA, A.F. **Planejamento de Experimentos e Otimização de Processos: uma estratégia seqüencial de planejamentos**. Campinas - SP, Casa do Pão Editora, 2005.
- SILVA, C.C.M.; SILVA, M.V.L. e SANTOS, J.R. **Estudo das características físico-químicas de ésteres etílicos obtidos a partir do óleo de mamona, Ricinus communis L.** 28ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química. Poços de Calda-MG, 2005.
- VERONA, C.C. **Estudo do impacto da variabilidade de resinas alquílicas nas propriedades de tintas**. Dissertação (mestrado) - Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.