

LAYANNE ANDRADE MENDONÇA

**DESEMPENHO DO DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL EM
EXPERIMENTOS COM ALTO COEFICIENTE DE VARIAÇÃO**

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
2012

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e
Classificação da Biblioteca Central da UFV**

T

M539d
2012

Mendonça, Layanne Andrade, 1987-

Desempenho do delineamento composto central em experimentos com alto coeficiente de variação / Layanne Andrade Mendonça. – Viçosa, MG, 2012. x, 68f. : il. ; 29cm.

Orientador: José Ivo Ribeiro Júnior.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 66-68

1. Planejamento experimental. 2. Estatística. 3. Análise de variância. I. Universidade Federal de Viçosa. II. Título.

CDD 22.ed. 519.57

LAYANNE ANDRADE MENDONÇA

**DESEMPENHO DO DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL EM
EXPERIMENTOS COM ALTO COEFICIENTE DE VARIAÇÃO**

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: 17 de fevereiro de 2012.

Luiz Alexandre Peternelli

Lucy Tiemi Takahashi

José Ivo Ribeiro Júnior
(Orientador)

Dedico
A Deus e às pessoas que me deram suporte:
Família, Carla de Castro e Fernanda Godoy.

*“Para aqueles que acreditam, nenhuma prova é necessária, para os que não creem, nenhuma prova é possível.”
(Stuart Chase)*

AGRADECIMENTOS

Sobretudo, agradeço ao meu Pai, que me dá forças e sustento a cada dia, que com seu santo espírito me conforta nos momentos mais difíceis e pela manhã traz júbilo ao meu coração.

Ao meu professor orientador, José Ivo Ribeiro Júnior, que com sua paciência e grande sabedoria me orientou de maneira exemplar e me fez aprender que o sucesso vem com a perseverança.

À CAPES pelo apoio financeiro.

Aos membros da banca, Luiz Alexandre Peternelli e Lucy Tiemi Takahashi pelas contribuições.

Aos professores do DET pelo aprendizado e amizade, em especial ao professor Carlos Henrique Osório Silva e professor Fabyano pelos incentivos acadêmicos.

Aos meus queridos amigos de curso, principalmente aos que estiveram comigo desde o início dessa labuda: Alyne, Anderson, Danielle, Evandro, Mariane, Rafael e Valéria. Apreendi muito com vocês.

Aos secretários do curso de pós-graduação em Estatística Aplicada e Biometria, principalmente à Anita e ao Joel pela dedicação, atenção e amizade.

À Carla de Castro por me apoiar, por me suportar, me sustentar, por confiar em meu potencial e pela paciência durante esses anos. Foi e sempre será um privilégio tê-la ao meu lado.

Às amigas de república, que foram minha família. Fernanda Godoy, Marjorie Sartorelli Angeline e Lívid Reis, por terem escutado todas as minhas apresentações de seminários, corrigido meus textos, orientado meus trabalhos, o meu muito obrigada. Vocês foram de extrema importância para aumentar a minha confiança nessa pesquisa, além de terem sido para mim, excelentes companhias.

Aos meus amigos Alexandre Arruda, Flávia Chagas e Gabi Nunes pelo apoio durante todos esses anos de amizade e por terem lutado a meu favor quando precisei, contribuindo, assim, indiretamente para o meu sucesso nesse trabalho.

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 Fatorial.....	8
3.3. Delineamento Composto Central.....	10
3.4. Coeficiente de Variação	13
3.5. Intervalo de confiança.....	16
4. MATERIAL E MÉTODOS.....	17
4.1. Delineamentos de Tratamentos	17
4.2. Superfície de Resposta verdadeira.....	17
4.3. Simulação dos Dados.....	18
4.4. Ajuste da Superfície de Resposta	21
4.5. Medidas avaliadas.....	23
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	26
5.1. Superfícies de Resposta	26
5.2. Avaliação do ajuste.....	30
5.2.1. Ajuste médio	32
5.2.1.1 Coeficiente de determinação	32
5.2.1.2- Erro quadrático médio	33
5.2.1.3- Distância entre o ponto crítico estimado e o verdadeiro.....	36
5.2.2. Variabilidade do ajuste	39
5.2.2.1- Amplitude do coeficiente de determinação.....	39
5.2.2.2 – Amplitude do erro quadrático médio	40
5.2.2.3- Amplitude da distância do ponto crítico	42
5.3. Porcentagens de acerto.....	45
5.3.1. Porcentagem de acerto do β_0	47
5.3.2. Porcentagem de acerto do β_1	48
5.3.3. Porcentagem de acerto do β_2	51
5.3.4. Porcentagem de acerto do β_3	52
5.3.5. Porcentagem de acerto do β_4	53

5.3.6.	Porcentagem de acerto da superfície	55
5.4.	Estimativas dos parâmetros	56
5.4.1.	Intervalo de confiança do β_0	57
5.4.2.	Intervalo de confiança do β_1	58
5.4.3.	Intervalo de confiança do β_2	59
5.4.4.	Intervalo de confiança do β_3	60
5.4.5.	Intervalo de confiança do β_4	61
5.5.	Coeficiente de variação	63
6.	CONCLUSÕES	65
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	66

RESUMO

MENDONÇA, Layanne Andrade, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2012, **Desempenho do delineamento composto central em experimentos com alto coeficiente de variação**. Orientador: José Ivo Ribeiro Júnior. Coorientador: Nerilson Terra Santos.

Esse trabalho teve como objetivo avaliar o desempenho do delineamento composto central rotacional (DCCR) em relação às estimativas dos parâmetros da superfície de resposta estimada, sob condições de erros experimentais simulados que proporcionam altos coeficientes de variação. O grande impulso da metodologia de resposta foi dado por Box e Wilson (1951), que desenvolveram métodos de otimização de processos em pesquisas industriais. Dentre esses métodos, pode-se citar o DCCR como um delineamento econômico para a superfície de resposta, devido ao número reduzido de combinações entre os níveis dos fatores estudados, quando comparado ao fatorial completo. No entanto, sabe-se que estes delineamentos são eficientes onde normalmente os erros experimentais são pequenos e as condições do experimento são mais facilmente controláveis. Portanto, dada a economia do número de ensaios pelo DCCR, tornou-se importante verificar o seu potencial em delinear tratamentos visando o ajuste de superfícies de respostas para experimentos ligados às ciências agrárias, que apresentam, naturalmente, maiores erros aleatórios. Para tanto, os delineamentos de tratamentos, fatorial completo e composto central rotacional foram utilizados para planejar as combinações entre os níveis codificados de dois fatores (A e B). Foi estabelecido um modelo de segunda ordem para dois fatores A e B sem interação entre eles, denominada de superfície de resposta verdadeira. Foi estabelecido um fatorial completo 5x5, com as combinações entre os níveis codificados dos fatores A e B e com 40 repetições por tratamento. No total, foram constituídas 1000 unidades experimentais. Posteriormente, foram feitas 100 simulações para os erros experimentais (ε) presentes no experimento sob distribuição normal com média zero e variância σ_ε^2 . O parâmetro σ_ε foi especificado em 32, 48, 64 e

80, para fornecer os coeficientes de variação residuais (CV) iguais a 25, 37, 50 e 62 %. A escolha de tais coeficientes de variação foi feita de modo a abranger as classificações criadas por Ferreira (1991), citado por Silva *et al.* (2011), e Pimentel Gomes (1985) para as áreas agrárias. Os valores observados de Y foram obtidos a partir da soma dos valores verdadeiros de Y (y_{i_v}) obtidos a partir da superfície de resposta verdadeira, com os resíduos (e_i), gerados pela simulação. Em cada tipo de delineamento (DCCR e fatorial completo), foram estabelecidas três, seis, nove e doze repetições por tratamento. De acordo com as combinações entre os tipos de delineamentos, coeficientes de variação e número de repetições por tratamento, foram realizados 100 ajustes da superfície de resposta dos quais foram obtidas as médias do coeficiente de determinação, EQM, a distância média entre o ponto crítico verdadeiro e o estimado (DPC) e a diferença média entre os coeficientes de variação estimados e simulados (DCV), além da porcentagem de acerto e intervalo de confiança de cada parâmetro e a porcentagem de acerto da superfície de resposta. Posteriormente foi feita uma regressão dessas medidas avaliadas em função do delineamento, coeficiente de variação e número de repetições por tratamento. A superioridade do desempenho do fatorial completo em relação DCCR aumentou em função do aumento do CV e da diminuição do número de repetições por tratamento. Recomendou-se o DCCR sob condições experimentais mais bem controladas, por ser um delineamento de tratamento mais econômico. No entanto, sabendo do difícil controle do erro aleatório em experimentos das áreas agrárias, em experimentos dessa natureza recomendou-se o fatorial completo ou o DCCR com um número maior de repetições por tratamento. Conclui-se também que o aumento do CV prejudica a qualidade de ajuste do fatorial completo e principalmente a do DCCR e esse prejuízo pode ser compensado com o aumento do número de repetições por tratamento. Percebeu-se que a qualidade de ajuste proporcionada pelo delineamento de tratamento não depende só da quantidade dos mesmos, mas principalmente da quantidade de unidades experimentais suficientes para proporcionar estimativas adequadas dos efeitos dos fatores conhecidos e desconhecidos.

ABSTRACT

MENDONÇA, Layanne Andrade, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2012, **Performance of the Rotacional Central Composite Design in experiments with high coefficients of variation**. Adviser: José Ivo Ribeiro Júnior. Co-Adviser: Nerilson Terra Santos.

The present work had the purpose of evaluating the performance of the rotational central composite design (RCCD) in relation to the estimated response surface parameters, under conditions of simulated experimental errors that provide high coefficients of variation. The big impulse of the response methodology was given by Box and Wilson (1951), who developed methods of process optimization in industrial researches. Within these methods, the RCCD may be mentioned as an economic design for the response surface, due to the reduced number of level combinations in the studied factors, when compared to the full factorial. However, it is known that these designs are efficient where experimental mistakes are usually small and the conditions of the experiment are easily controlled. However, given the reduced number of tests by the RCCD, it has become important to verify its potential in designing treatments to adjust response surfaces on experiments related to agrarian sciences, that present, naturally, larger random error. For such, the treatment designs, full factorial and rotational central composite have been used to plan the combinations between the coded levels of two factors (A and B). A second-order model has been established for two factors A and B without interaction among them, named true response surface. A full 5x5 factorial has been established, with the combinations between the coded levels of factors A and B and 40 repetitions per treatment. In total, 1000 experimental units have been built. Afterwards, 100 simulations have been made for the experimental errors (ε) present in the experiment under normal conditions with average zero and variations σ_{ε}^2 . The parameter σ_{ε} has been specified in 32, 48, 64 and 80, to provide the residual coefficients of variation (CV) equal to 25, 37, 50 and 60 %. The choice of these coefficients of variation has been made in order to include the

classifications created by Ferreira (1991), quoted by Silva *et al.* (2011), and Pimentel Gomes (1985) for the agrarian areas. The observed values of Y have been obtained from the sum of the true values of Y (y_{i_v}) obtained from the true response surface, with residuals (e_i), generated by the simulation. In each type of design (RCCD and full factorial), three, six, nine and twelve repetitions per treatment have been established. According to the combinations between the types of treatment, coefficients of variation and number of repetitions per treatment, 100 adjustments of the response surface have been realized, from which the averages of the coefficient of determination, the average distances between the true and the estimated critical point (CPD) and between the coefficients of variation estimated and simulated (CVD), besides the success percentage and confidence interval of each parameter and the percentage of success from the response surface. Afterwards, a regression of these measures as been made, evaluated based on the design, coefficient of variation and number of repetitions per treatment. The superiority of performance of the full factorial in relation to the RCCD increase in relation to the increase of the CV and the reducing of the number of repetitions per treatment. The RCCD has been recommended under more controlled experimental conditions, for being a more economic treatment design. However, knowing the difficulty of controlling the random error on experiments for the agrarian areas, in experiments of this nature the full factorial or the RCCD were recommended with a larger number of repetitions per treatment. It has also been concluded that the increase of the CV prejudices the adjustment quality of the full factorial and mainly of the RCCD and this prejudice can be compensated with the increase in the number of repetitions per treatment. It has been seen that the adjustment quality provided by the treatment design does not depend only of their quantity, but mostly on the sufficient amount of experimental units to provide proper estimates of the effects of the known and unknown factors.

1. INTRODUÇÃO

A metodologia de superfície de resposta tem sido bastante utilizada para modelar pesquisas sobre otimização de processos em nível experimental (MYERS e MONTGOMERY, 1995). Além disso, esta metodologia possui diferentes delineamentos que possibilitam planejar os tratamentos de forma mais econômica.

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 ser encontrado 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 dos fatores.

Na maioria dos estudos por superfície de resposta, a forma do relacionamento entre a variável resposta e os fatores é desconhecida. A qualidade das estimativas dos parâmetros depende, principalmente do método de estimação utilizado (método dos mínimos quadrados ou método da máxima verossimilhança) e da utilização de planos adequados para a coleta de dados. Esses planos são denominados delineamentos para superfície de resposta. Dentre os delineamentos mais econômicos, destacam-se os compostos centrais (DCC).

Entretanto, sabe-se que esses delineamentos são eficientes em experimentos realizados em laboratório, onde normalmente os erros experimentais são menores e suas condições são mais facilmente controláveis.

Draper e Herzberg (1968), ao se referirem aos muitos delineamentos compostos disponíveis para o estudo de superfícies de respostas, comentaram que alguns já eram usados, na prática, enquanto outros tinham ainda apenas interesses teóricos; entretanto, estes poderiam vir a ser úteis,

no futuro, pois eles acreditavam na possibilidade de novas técnicas a serem desenvolvidas e, conseqüentemente, de se alcançar um maior controle das condições experimentais, tornando possível assim menores estimativas dos erros experimentais.

Portanto, dada à economia do número de combinações planejadas pelo DCC e pela expectativa promissora desse delineamento, torna-se importante verificar o seu potencial em delinear tratamentos visando os ajustes de superfícies de respostas para experimentos ligados às ciências agrárias, sob condições de campo, que apresentam naturalmente maiores efeitos aleatórios.

Além disso, caso a economia experimental não venha a prejudicar a qualidade das estimativas dos parâmetros da superfície de resposta, mais fatores poderão ser estudados com o mesmo custo imposto por outros delineamentos, quando estabelecem tratamentos de um menor número de fatores.

2. OBJETIVOS

2.1. Geral

Avaliar o desempenho do DCC em relação às estimativas dos parâmetros da superfície de resposta estimada, sob condições de erros experimentais simulados que proporcionam altos coeficientes de variação.

2.2. Específicos

- Comparar o desempenho do DCC com o do fatorial completo;
- Verificar a viabilidade da utilização do DCC em experimentos que sofrem maiores influências dos erros experimentais;
- Verificar a viabilidade da utilização do DCC em experimentos com diferentes números de repetições por tratamento;
- Verificar a possibilidade de recomendar o DCC para experimentos de campo das ciências agrárias.

3. REFERENCIAL TEÓRICO

3.1. Superfície de Resposta

A literatura sobre a metodologia de superfície de resposta (MSR) é extensa, além de mostrar as aplicações em diferentes campos de pesquisa contribuiu para o desenvolvimento de delineamentos ótimos para a estimativa da superfície.

A MSR consiste essencialmente de um conjunto de métodos matemáticos e estatísticos utilizados no estudo empírico das relações entre variáveis controladas (fatores) e uma ou mais respostas mensuráveis (BOX e DRAPER, 1987; MYERS e MONTGOMERY, 1995).

A abordagem geral da MSR foi desenvolvida no início da década de 1950, tendo sido aplicada inicialmente na indústria química com considerável sucesso (BARROS NETO *et al.*, 1995). Nos últimos trinta anos, a MSR vem sendo extensamente aplicada em uma variedade de contextos industriais, muito além das suas origens em processos químicos, inclusive na fabricação de semicondutores e de artigos eletrônicos, cortes de metais e processos de junção, além de outros (MYERS e MONTGOMERY, 1995).

Ainda hoje, a metodologia de superfície de resposta é bastante utilizada. Barthus *et al.* (2011) utilizaram a metodologia de superfície de resposta em busca da otimização das condições de extração de saponinas em *Ampelozizyphus amazonicus*. Carvalho *et al.* (2011) avaliaram o efeito da combinação de pectina, gelatina e alginato de sódio nas características do gel de fruta estruturada a partir de “mix” de polpa de cajá e mamão. Seus estudos também foram feitos via metodologia de superfície de resposta.

Conforme Khuril e Cornel (1987), a MSR nasceu nos trabalhos de J. Wishart, C.P. Winsor, E. Mitscherlin, F. Yates e de outros ainda na década de 1930. Somente em 1951, é que Box e Wilson (1951) a formalizaram e a disseminaram para a comunidade científica. Desde então tem sido 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.

No 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 a resposta do processo. Essa função que relaciona tais variáveis é chamada de superfície de resposta.

As variáveis estudadas dependem da área de aplicação específica. Como exemplos de variáveis resposta em experimentos agrônomicos, podem-se citar a produção e o crescimento da muda da planta em estudo, como fator que pode influenciar essas respostas, tem-se as doses de adubação.

A metodologia de superfície de resposta é constituída de duas etapas distintas: modelagem e deslocamento, que são repetidas tantas vezes quanto forem necessárias, com o objetivo de atingir uma região ótima da superfície investigada (BARROS NETO *et al.*, 1995).

Conforme Myers e Montgomery (1995), na maioria dos problemas, a forma do relacionamento entre a variável resposta e os fatores é desconhecida. Assim, o primeiro passo na modelagem é encontrar uma aproximação aceitável para a real relação entre os fatores e a variável resposta, onde usualmente se aplica um polinômio de baixa ordem. Se a resposta for bem modelada por uma função linear, tem-se, portanto, um modelo de primeira ordem, o qual pode apresentar ou não interações entre os fatores. Em seguida, tem-se a etapa do deslocamento, que se dá sempre ao longo do caminho de máxima inclinação de um determinado modelo, que é a trajetória na qual a variável resposta varia de forma mais pronunciada. No entanto, se o sistema apresentar curvatura, então, deve-se partir para um polinômio de ordem maior, com adição de termos quadráticos, tendo assim um modelo de segunda ordem.

Hill e Hunter (1966), citados por Myers *et al.* (1989), indicam as seguintes etapas para o procedimento de uma análise de superfície de resposta:

- planejar as combinações entre os níveis dos fatores estudados na região de interesse;
- estimar os coeficientes da superfície de resposta;
- verificar a adequação da superfície de resposta;

Quando dois fatores A e B apresentam-se com níveis quantitativos, a resposta Y é representada por um gráfico de contorno em um espaço bidimensional ou por um gráfico de superfície em um espaço tridimensional, oriundos de um modelo de primeira ou de segunda ordem, 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 A e B, é representado por:

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

Em que,

a_i é o valor do nível i do fator A;

b_j é o valor do nível j do fator B;

β_k é o parâmetro do modelo, com $k= 0, 1, \dots, 5$.

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 com níveis quantitativos, tais como a temperatura de reação e a pressão, pode-se utilizar de uma superfície de resposta para modelar esta relação (MYERS e MONTGOMERY, 1995).

Como outro exemplo, Medeiros *et al.* (2005) estudaram através da MSR, os efeitos da temperatura, umidade relativa e velocidade do ar sobre o desempenho zootécnico, mortalidade, respostas fisiológicas e comportamento animal em frangos de corte.

Segundo Khuri e Conlon (1981), citados por Perázio (2010), 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, que 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 é 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 eles são baseados. No entanto, existe um conjunto de propriedades que deve ser observado ao escolher um delineamento para ajustar uma superfície resposta.

De acordo com Myers e Montgomery (1995), pode-se ressaltar que o delineamento deve resultar em um bom ajuste do modelo aos dados, ou seja, as estimativas dos parâmetros devem ser semelhantes aos seus verdadeiros valores, sendo assim um modelo que se aproxima da realidade. Além disso, ele deve fornecer uma estimativa do erro “puro” experimental, ou seja, permitir que haja repetições de tratamentos. Dessa maneira, o delineamento dará informações suficientes para permitir um teste para a falta de ajustamento. Desse modo, tem-se uma boa opção para verificar a adequação do modelo.

Como a MSR é constituída de duas etapas, modelagem e deslocamento, que podem ser repetidas inúmeras vezes até mapear a superfície da região do ótimo, é fácil concluir que o delineamento utilizado para ajustar as superfícies de respostas não requeira muitos níveis para os fatores, visando assim à rentabilidade da pesquisa. Além disso, na etapa de modelagem, ajustam-se modelos de primeira e de segunda ordem, geralmente nessa sequência. Portanto, outra propriedade a ser observada quanto à escolha de um delineamento é que este permita que modelos de ordem crescente sejam construídos sequencialmente.

Quanto ao que diz respeito à variância dos valores preditos da resposta, Box e Draper (1987) e Myers e Montgomery (1995) afirmaram que os delineamentos devem proporcionar uma boa distribuição desta variância. Apesar do pesquisador não saber em que parte da região se encontra o ponto de ótimo em ajustes de modelos de segunda ordem, é importante que o delineamento tenha uma estabilidade razoável da distribuição da variância dos valores preditos da resposta. A estabilidade desta distribuição proporciona a mesma precisão das estimativas da resposta ao longo da região de interesse.

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 (PERÁZIO, 2010). Também pode-se citar 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 repostas, até mesmo quando o sistema possui muitos fatores que influenciam a resposta estudada.

Segundo Barros Neto *et al.* (1995) citados por Perázio (2010), uma das vantagens da MSR consiste na economia de recursos financeiros e tempo, proporcionando curvas "iso-resposta", o que possibilita a obtenção do mesmo resultado sob diferentes combinações entre os níveis das variáveis independentes e sem a necessidade de repetir exaustivamente os ensaios experimentais.

3.2. Delineamento Fatorial

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 ou das suas unidades e, conseqüentemente, a

definição de um modelo estatístico. Desta forma, os dados obtidos poderão ser analisados e interpretados de forma mais simples (BARROS NETO *et al.*, 1995).

O delineamento fatorial é um procedimento experimental e de análise das observações quando se têm dois ou mais fatores que podem influenciar o resultado da variável resposta. Nos experimentos fatoriais completos o número de tratamentos é geralmente elevado, pois envolvem todas as combinações possíveis entre os níveis dos fatores investigados.

Os fatores referem-se às variáveis independentes de um experimento que podem ser controladas pelo pesquisador e, os seus níveis são os valores específicos atribuídos a eles. Se todas as possíveis combinações entre todos os níveis de cada fator estiverem 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, principalmente, dos fatores em estudo em várias áreas da ciência (PERÁZIO, 2000).

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 quando há interesses e expectativas definidas a priori. Esses delineamentos são utilizados principalmente na parte exploratória da pesquisa, quando não se sabe muito sobre o sistema e o modelo ainda está por ser identificado. Sua importância na metodologia de superfície de resposta se dá pela sua economia do número de ensaios, sendo bastante adequado na etapa de modelagem, visto que essa pode ser repetida várias vezes. Porém, esses tipos de delineamentos apresentam a desvantagem de que os efeitos principais e os das interações podem estar confundidos, isto é, não podem ser estimados separadamente. No entanto, tais confundimentos podem ser minimizados pela fração do fatorial completo a ser utilizada.

3.3. Delineamento Composto Central

O delineamento composto central (DCC) é um dos mais populares delineamentos para o ajuste de modelos de até segunda ordem (MYERS e MONTGOMERY, 1995). Este delineamento foi introduzido por Box e Wilson (1951), no estudo de superfícies de respostas, como uma evolução do planejamento 3^k (k = número de fatores).

O estudo da MSR 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 (2008). 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.

Outro exemplo de trabalho utilizando o estudo da MSR por meio do DCC foi o de Fonseca *et al.* (2011), no qual o objetivo foi avaliar a influência da temperatura e do tempo de imersão da etapa de encharcamento sobre a cor dos grãos de dois cultivares de arroz parboilizados.

O DCC é constituído por três partes: cúbica (fatorial), axial (α) e central. Em geral, um DCC para k fatores, cujos níveis codificados serão combinados, é dado pelo conjunto constituído pelos seguintes tratamentos com níveis codificados:

$(1,1,\dots,1)$; $(-1,1,\dots,1)$; ...; $(-1, -1,\dots, -1)$ referentes à parte cúbica, totalizando 2^k combinações;

$(-\alpha, 0, \dots, 0)$; $(\alpha, 0, \dots, 0)$; $(0, -\alpha, \dots, 0)$; $(0, \alpha, \dots, 0)$; ...; $(0, 0, \dots, -\alpha)$; $(0, 0, \dots, \alpha)$ referentes à parte axial, totalizando $2k$ combinações e

$(0, 0, \dots, 0)$ referente ao ponto central.

No total, são $k^2 + 2k + 1$ combinações entre os níveis dos k fatores estudados.

Portanto, o DCC para dois fatores A e B com níveis codificados sem repetição no ponto central, gera nove tratamentos ($2^2 + 2 \times 2 + 1$), conforme apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Combinações entre os níveis codificados dos fatores A e B

		A codificado	B codificado	Tratamento
Pontos cúbicos		-1	-1	1
		1	-1	2
		-1	1	3
		1	1	4
Pontos axiais		$-\alpha$	0	5
		α	0	6
		0	$-\alpha$	7
		0	α	8
Ponto central	0	0	9	

Os pontos axiais são situados nos eixos do sistema de coordenadas com distância $\pm \alpha$ da origem. Segundo Myers e Montgomery (1995), são esses pontos que contribuem de grande modo na estimativa dos termos quadráticos do modelo de segunda ordem, não contribuindo assim para a estimativa dos efeitos das interações. Os responsáveis por isso são os pontos cúbicos, que são as combinações geralmente utilizadas em ajustes de modelos de primeira ordem com ou sem interações duplas entre os fatores. O ponto central, além de ser responsável também pela estimativa dos efeitos quadráticos, possibilita a estimativa do erro puro, quando ele é repetido.

Por satisfazer grande parte do conjunto de propriedades desejáveis dos delineamentos, conforme citados por Box e Draper (1987) e Myers e Montgomery (1995), os DCCs pertencem a uma classe de delineamentos eficientes.

Grande parte da motivação do uso do DCC evoluiu a partir da sua utilização em experimentação sequencial (MYERS e MONTGOMERY, 1995). A natureza sequencial desse delineamento é claramente observada. Os pontos fatoriais contribuem para estimativa dos termos lineares e interações entre os fatores e os pontos centrais informam sobre a existência

de curvatura no sistema. Caso a curvatura seja encontrada, a adição dos pontos axiais permite de forma eficiente uma estimativa dos termos quadráticos.

Uma vantagem do DCC é a flexibilidade e disponibilidade de diversas variações, que permitem sua utilização em diferentes regiões de interesse experimental e da região de operação. Essas variações se dão pelas várias possibilidades de escolha do α , que depende, em grande medida, das regiões de operacionalidade e de interesse. Segundo Barros Neto *et al.* (1995), o valor de α é frequentemente utilizado 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.

Conforme observado por Myers e Montgomery (1995), é importante que um delineamento tenha uma estabilidade razoável da distribuição da variância dos valores preditos da resposta. Com o objetivo de obter tal distribuição, Box e Hunter (1957), citados por Perázio (2010), 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 dependem apenas da distância em relação ao ponto central. O DCC será chamado delineamento composto central rotacional (DCCR) quando:

$$\pm \alpha = \pm \sqrt[4]{2^k} \quad (k = \text{número de fatores})$$

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

Diamond (1989), citado por Perázio (2010), afirmou que qualquer valor pode ser adotado para α e para o número de repetições do ponto central. Porém, um DCC com dois fatores apresenta propriedades especiais quando α é igual a 1,4142 e o número de pontos centrais é 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 pelo número de repetições do ponto central, 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.

Quando comparado com o fatorial completo, o DCC apresenta uma vantagem por possuir um menor número de combinações entre os níveis dos fatores, assumindo assim outra propriedade importante dentre as definidas por Myers e Montgomery (1995), a rentabilidade do delineamento. A rentabilidade está associada ao menor custo e à maior qualidade no ajuste da superfície de resposta. No entanto, Mateus (2001) afirma que o DCC só é viável em situações onde há um bom controle dos fatores que possam influenciar a resposta e quando o coeficiente de variação (CV) experimental for inferior a 6 %. Caso contrário, torna-se necessário usar repetições para todos os tratamentos, o que pode tornar o experimento inviável em termos de tempo e economia.

3.4. Coeficiente de Variação

A qualidade dos experimentos é uma grande e constante preocupação dos pesquisadores de qualquer área da ciência. Na avaliação e interpretação dos resultados estatísticos obtidos através da experimentação, é recomendável a exploração de todas as informações disponíveis para que o pesquisador, ao tomar suas conclusões, esteja o mais seguro e correto possível. Uma das maneiras de se avaliar a qualidade de um experimento é por meio da quantificação da magnitude do erro experimental, que indica o controle da variabilidade casual e a precisão experimental.

Para quantificá-la, pode-se utilizar o coeficiente de variação (CV) residual, definido como o desvio-padrão expresso em porcentagem da média e calculado da seguinte maneira:

$$CV(\%) = 100 \frac{\sqrt{QMRes}}{\bar{Y}}$$

Em que,

$QMRes$ é o quadrado médio do resíduo da análise de variância;

\bar{Y} é a média geral da variável resposta Y obtida no experimento.

Garcia (1989), citado por Judice (2000), afirma que o CV permite comparações entre variáveis de naturezas distintas, no que diz respeito à precisão dos dados. Quanto menor o CV, mais homogêneos são os dados obtidos sob as mesmas condições e menor é a variação do acaso. No entanto, segundo Steel e Torrie (1980), citados também por Judice (2000), para estudar o CV de uma mesma característica avaliada em experimentos distintos, é preciso que haja experiência do pesquisador com a variável abordada na pesquisa.

Couto et al (2010) corrobora a afirmação de Steel e Torrie (1980). Em seus estudos sobre a classificação dos coeficientes de variação para a cultura da cana-de-açúcar, concluíram que a magnitude e a faixa de classificação dos coeficientes de variação obtidos variam de acordo com a natureza das variáveis estudadas. Portanto, a utilização do CV para avaliar e comparar a precisão experimental deve ser feita com cautela, pois deve-se considerar que os resultados obtidos podem ser oriundos de condições experimentais, características da variável em estudo, detalhes de planejamento, delineamentos, tratamentos e tamanhos de parcelas distintos, influenciando assim os resultados obtidos. Tal fato caracteriza a necessidade de haver referenciais diferenciados no tocante à análise da precisão de experimentos conforme a natureza dos dados, seja pelas variáveis, seja pela espécie ou ramo da ciência em estudo (AMARAL et al., 1997).

Com o objetivo de estudar a faixa de classificação do CV em experimentos zootécnicos, Judice (2000) estudou 180 valores de CV para a variável ganho de peso em bovinos de corte e 38 valores de CV para a variável peso final em frangos de corte. O autor afirmou, como um resultado de seu trabalho, que tal classificação não pode ser padronizada para todos os experimentos zootécnicos, fazendo-se necessário criar uma faixa de classificação para cada variável resposta estudada dentro de cada espécie animal.

Já Silva *et al.* (2011), buscaram uma avaliação do CV para as variáveis relacionadas a experimentos das ciências agrárias. Os autores constataram que as classificações dos coeficientes de variação das variáveis morfológicas de pimenteiras dependem da variável resposta estudada. No entanto, as classificações dos CV de algumas variáveis se aproximaram das propostas por Pimentel Gomes (1985).

Apesar das considerações a serem feitas quanto à avaliação e classificação dos coeficientes de variação, Ferreira (1991) citado por Silva *et al.* (2011), propôs classificá-los da seguinte forma em relação à precisão experimental:

- Ótima: $CV \leq 10 \%$;
- Boa: $10 < CV \leq 15 \%$;
- Regular: $15 < CV \leq 20 \%$;
- Ruim: $20 < CV \leq 30 \%$;
- Péssima: $CV > 30 \%$.

Por outro lado, Pimentel Gomes (1985), estudando os coeficientes de variação obtidos nos ensaios agrícolas, classifica-os da seguinte forma:

- Baixos: $CV \leq 10 \%$;
- Médios: $10 < CV \leq 20 \%$;
- Altos: $20 < CV \leq 30 \%$;
- Muito Altos: $CV > 30 \%$.

3.5. Intervalo de confiança

Além de uma estimativa pontual de um parâmetro é, em muitas situações, importante dispor de um intervalo que indique a confiança que se pode depositar na estimativa pontual (PIRES, 2000).

Um intervalo de confiança (IC) é uma estatística intervalar de um parâmetro. Em vez de estimá-lo por um único valor, é dado um intervalo de estimativas. Um IC para um parâmetro desconhecido β , baseado na hipótese de que este segue uma distribuição *t de Student*, é do tipo:

$$IC(\beta_j)_{(1-\alpha)} = \hat{\beta}_j \pm t_{\left(\frac{\alpha}{2}, n\right)} S(\hat{\beta}_j)$$

Em que,

$\hat{\beta}_j$ é o estimador pontual de β_j ;

$t_{\left(\frac{\alpha}{2}, n\right)}$ é o valor da distribuição *t de Student* que deixa uma probabilidade $\frac{\alpha}{2}$ na extremidade da cauda à direita, com n graus de liberdade; e

$S(\hat{\beta}_j)$ é o estimador do desvio padrão de $\hat{\beta}_j$.

Intervalos de confiança podem ser usados para indicar a confiabilidade de uma estimativa. Por exemplo, um IC pode ser usado para descrever quão confiáveis são os resultados de uma pesquisa. Sendo todas as outras coisas iguais, uma pesquisa que resulte num IC pequeno é mais confiável do que uma que resulte num IC maior. Pois, um IC maior traz probabilidades de valores muito discrepantes para o parâmetro em estudo.

O intervalo de confiança é altamente influenciado pelo desvio-padrão residual. Em um experimento onde há uma forte presença do erro aleatório possivelmente esse erro provocará um afastamento da estimativa do parâmetro em relação ao seu verdadeiro valor.

Portanto, em experimentos com altos valores do coeficiente de variação devido a uma grande expressão do erro experimental, haverá um aumento do intervalo de confiança para qualquer parâmetro em estudo.

4. MATERIAL E MÉTODOS

4.1. Delineamentos de Tratamentos

Os delineamentos de tratamentos, fatorial completo e composto central rotacional, foram utilizados para planejar as combinações entre os níveis codificados de dois fatores (A e B). Para ambos, as casualizações das combinações e suas respectivas repetições foram utilizadas sob o delineamento inteiramente casualizado (DIC). Posteriormente, com os ajustes das superfícies de respostas, os coeficientes foram devidamente testados pelo teste *t de Student* a 5 % de significância, realizado no software MINITAB 16® a partir do modelo de segunda ordem sem interação.

4.2. Superfície de Resposta verdadeira

Foi estabelecido um modelo de segunda ordem para dois fatores A e B sem interação entre eles, denominada de superfície de resposta verdadeira y_{i_v} (Figura 4.1), de modo a obter o ponto de máximo da superfície em $a = 0$ e $b = 0$ e que os efeitos dos fatores A e B fossem significativos, como segue:

$$y_{i_v} = 400 - 0a_i - 0b_i - 100a_i^2 - 100b_i^2, \text{ para } -1,4142 \leq a_i \leq 1,4142 \text{ e } -1,4142 \leq b_i \leq 1,4142$$

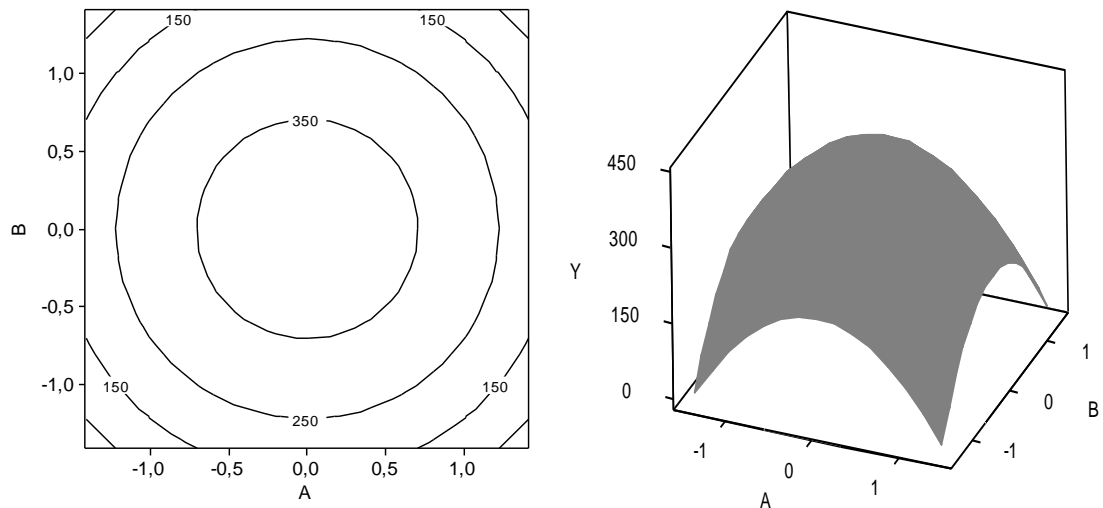


Figura 4.1 – Gráficos de contorno, à esquerda, e tridimensional, à direita, da superfície de resposta verdadeira.

O ponto crítico da superfície de resposta verdadeira se dá onde as derivadas parciais de y_{i_v} em função dos níveis de A e B são iguais a zero:

$$\frac{\delta y_{i_v}}{\delta a_i} = -200a \Rightarrow a_c = 0$$

$$\frac{\delta y_{i_v}}{\delta b_i} = -200b \Rightarrow b_c = 0$$

Portanto, o ponto de máximo da superfície de resposta verdadeira é em $a_i = 0$ e $b_i = 0$.

4.3. Simulação dos Dados

Foi estabelecido um fatorial completo 5x5, com as combinações entre os níveis codificados dos fatores A e B e com 40 repetições por tratamento (Tabela 4.1). No total, foram constituídas 1000 unidades experimentais.

Tabela 4.1 – Valores de y_{i_v} dos tratamentos avaliados no delineamento fatorial completo 5x5

<i>Tratamentos</i>	$A_{codificado}$	$B_{codificado}$	y_{i_v}
1	-1,4142	-1,4142	0
2	-1,4142	-1	100
3	-1,4142	0	200
4	-1,4142	1	100
5	-1,4142	1,4142	0
6	-1	-1,4142	100
7	-1	-1	200
8	-1	0	300
9	-1	1	200
10	-1	1,4142	100
11	0	-1,4142	200
12	0	-1	300
13	0	0	400
14	0	1	300
15	0	1,4142	200
16	1	-1,4142	100
17	1	-1	200
18	1	0	300
19	1	1	200
20	1	1,4142	100
21	1,4142	-1,4142	0
22	1,4142	-1	100
23	1,4142	0	200
24	1,4142	1	100
25	1,4142	1,4142	0

$\bar{y}_v = 160$

Posteriormente, foram feitas 100 simulações para os erros experimentais (ε) presentes no experimento sob distribuição normal com

média zero e variância σ_ε^2 , ou seja, $\varepsilon \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$. Para tanto, o parâmetro σ_ε foi especificado em 40, 60, 80 e 100, para fornecer os coeficientes de variação residuais (CV) iguais a 25, 37, 50 e 62 % aproximadamente, conforme a seguinte expressão:

$$CV(\%) = 100 \frac{\sqrt{\sigma_\varepsilon^2}}{\bar{y}_v} = 100 \frac{\sqrt{\sigma_\varepsilon^2}}{160} = \frac{5}{8} \sigma_\varepsilon.$$

A escolha de tais coeficientes de variação foi feita de modo a abranger as classificações criadas por Ferreira (1991), citado por Silva *et al.* (2011) e Pimentel Gomes (1985) para as áreas agrárias.

Feito isso, foram obtidos os valores observados de Y ($y_{i_{obs}}$), a partir da soma dos valores verdadeiros de Y (y_{i_v}), obtidos a partir da superfície de resposta verdadeira com os resíduos (e_i), gerados pela simulação, como seguem:

$$y_{i_{obs}} = y_{i_v} + e_i.$$

Para cada um dos quatro coeficientes de variação (25, 37, 50 e 63 %), foram estudados dois tipos de delineamentos experimentais, o fatorial completo (Tabela 4.1) e o composto central rotacional ($\alpha = 1,4142$) (Tabela 4.2).

Tabela 4.2 – Valores de y_{i_v} dos tratamentos avaliados no Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR)

<i>Tratamentos</i>	<i>A_{codificado}</i>	<i>B_{codificado}</i>	<i>y_{i_v}</i>
1	-1	-1	200
2	1	-1	200
3	-1	1	200
4	1	1	200
5	-1,4142	0	200
6	1,4142	0	200
7	0	-1,4142	200
8	0	1,4142	200
9	0	0	400

Em cada tipo de delineamento, foram estabelecidas três, seis, nove e doze repetições por tratamento. No fatorial completo, foram 25 tratamentos e, no composto central rotacional, nove.

Para a análise dos dados em cada um dos oito delineamentos, foram utilizados os valores observados de Y ($y_{i_{obs}}$) referentes às primeiras três, seis, nove e doze repetições, respectivamente. Para visualizá-los, foram construídos *Box-plots* em função das 100 simulações, para cada cenário estudado.

4.4. Ajuste da Superfície de Resposta

De acordo com as combinações entre os tipos de delineamentos, coeficientes de variação e número de repetições por tratamento, foram obtidos 32 cenários (Tabela 4.3). Para cada cenário foram realizados 100 ajustes da superfície de resposta.

Tabela 4.3 – Diferentes cenários estudados

Delineamentos	Coeficientes de variação (%)	Números de repetições
Fatorial Completo	20	3-6-9-12
	30	3-6-9-12
	40	3-6-9-12
	50	3-6-9-12
DCCR	20	3-6-9-12
	30	3-6-9-12
	40	3-6-9-12
	50	3-6-9-12

Foram realizadas 100 análises de regressão por cenário, a partir dos valores observados de Y ($y_{i_{obs}}$) nos experimentos planejados pelo fatorial completo e pelo DCCR, de acordo com o número de repetições (3, 6, 9 e 12) e CV (25, 37, 50 e 63 %), separadamente, cujo modelo ajustado foi o de

segunda ordem, de acordo com o modelo da superfície de resposta verdadeira estipulado:

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 a_i + \hat{\beta}_2 b_i + \hat{\beta}_3 a_i^2 + \hat{\beta}_4 b_i^2$$

Em que,

$\hat{\beta}_j$ é a estimativa do parâmetro β_j , com $j = 0, 1, 2, 3$ e 4 ;

a_i é o nível i do fator A, com $-1,4142 \leq a_i \leq 1,4142$ e

b_i é o nível i do fator B $-1,4142 \leq b_i \leq 1,4142$.

No total, foram ajustadas 3200 superfícies de respostas e, para cada uma delas, foram estimados o erro quadrático médio (EQM), o coeficiente de determinação (R^{2*}) e a distância entre o ponto crítico estimado e o verdadeiro (DPC), o coeficiente de variação e os intervalos com $100(1 - 0,05)\%$ de confiança para os parâmetros $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ e β_4 e o CV, dados, respectivamente, por:

$$\widehat{EQM} = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_{i_v})^2}{n}, \quad n = \text{número de observações}$$

$$\widehat{R^{2*}} = (r_{y_v, \hat{y}})^2$$

Em que,

$r_{y_v, \hat{y}}$ é o coeficiente de correlação linear entre y_v e \hat{y} .

$$\widehat{DPC} = \sqrt{(\hat{a}_c - 0)^2 + (\hat{b}_c - 0)^2}$$

Em que,

\hat{a}_c e \hat{b}_c são valores de a_i e b_i , respectivamente, que maximizam a superfície de resposta estimada.

$$\widehat{CV} = \frac{S_\varepsilon}{\bar{y}_{obs}}$$

Em que,

$$S_\varepsilon = \sqrt{QMRes}$$

\bar{y}_{obs} é a média dos valores observados de $y_{i_{obs}}$.

$$\widehat{IC}_{(1-\alpha)}(\beta_j) = \hat{\beta}_j \pm t_{\frac{\alpha}{2}} S(\hat{\beta}_j)$$

Em que,

$\hat{\beta}_j$ é o estimador pontual de β_j , com $j = 0, 1, 2, 3, 4$;

$t_{(\frac{\alpha}{2}, n)}$ é o valor da distribuição *t de Student* que deixa uma probabilidade $\frac{\alpha}{2}$ na extremidade da cauda à direita, com n graus de liberdade;

$S(\hat{\beta}_j)$ é o estimador do desvio padrão de $\hat{\beta}_j$; e

$\alpha = 0,05$.

4.5. Medidas avaliadas

Para avaliar o desempenho do fatorial completo e do DCCR nos cenários estabelecidos, foi feita uma avaliação do grau de aproximação da superfície de resposta em cada um dos 32 arquivos de dados gerados, em relação à verdadeira. Para tanto, foram estabelecidas medidas referentes às superfícies de resposta ajustadas, a saber:

- Porcentagem de acerto da superfície de resposta;
- Porcentagem de acerto de cada β ;
- Média do erro quadrático médio;
- Média das distâncias entre o ponto que maximiza a superfície de resposta estimada e o que maximiza a verdadeira;
- Diferença média entre os coeficientes de variação estimados e simulado;
- O intervalo de confiança de cada β e
- Amplitudes do coeficiente de determinação; do erro quadrático médio e das distâncias entre o ponto crítico estimado e verdadeiro, calculadas pela diferença entre o valor máximo e mínimo dessas medidas.

Com o objetivo de avaliar e comparar em termos quantitativos os delineamentos, foi utilizada a porcentagem de acerto da superfície de resposta e de cada β .

A porcentagem de acerto de cada β foi obtida a partir da frequência em que o seu respectivo parâmetro estabelecido na superfície de resposta verdadeira se encontrava dentro do intervalo de confiança estimado a partir da estimativa $\hat{\beta}$ em cada cenário.

A porcentagem de acerto da superfície de resposta foi obtida a partir da frequência em que todos os parâmetros se encontravam dentro dos seus respectivos intervalos de confiança em cada cenário.

Como medida de avaliação da qualidade dos delineamentos, foi utilizada a média do coeficiente de determinação, do erro quadrático médio, da distância entre ponto crítico verdadeiro e estimado e da diferença entre os coeficientes de variação. Tais medidas foram obtidas pela média aritmética dos 100 valores encontrados, para cada cenário.

Com o objetivo de avaliar a variabilidade das medidas estudadas, foram utilizados os intervalos de confiança estimados de cada β e também as amplitudes do coeficiente de determinação, do erro quadrático médio e da distância entre o ponto crítico verdadeiro, calculadas pela diferença entre o valor máximo e mínimo dessas medidas.

Posteriormente, foram realizadas análises de regressão, nas quais as variáveis resposta foram as medidas avaliadas e as amplitudes dessas e, os fatores, os delineamentos (DCCR e fatorial completo) transformados em variáveis binárias (0 e 1), os coeficientes de variação (25, 37, 50 e 62 %) e o número de repetições (3, 6, 9 e 12).

Portanto, para cada variável resposta, supondo a dependência linear entre os fatores e a variável resposta, o modelo adotado foi dado por:

$$y_{ijk} = \beta_0 + \beta_1 Del_i + \beta_2 CV_j + \beta_3 Rep_k + \beta_4 Del_i CV_j + \beta_5 Del_i Rep_k + \beta_6 CV_j Rep_k + \varepsilon_{ijk}$$

Em que,

$i = 0, 1;$

$j = 0, 1, 2, 3, 4;$

$k = 0, 1, 2, 3, 4;$

Em função do modelo, os coeficientes não significativos ($p > 0,05$) foram retirados, um de cada vez, em função dos que apresentavam maior p-valor, de acordo com o teste *t de Student* a 5 % de probabilidade. O modelo utilizado para a interpretação dos efeitos dos três fatores estudados foi composto pelos termos significativos.

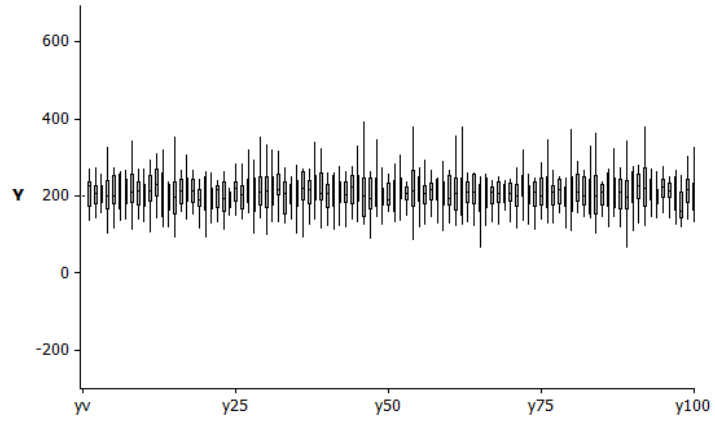
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1. Superfícies de Resposta

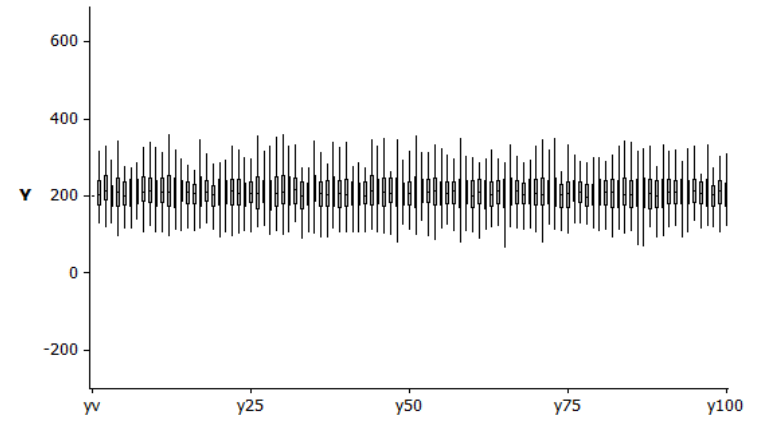
Para o ajuste da superfície de resposta da variável Y em função dos fatores A e B em cada combinação entre tipo de delineamento, coeficiente de variação e número de repetições por tratamento, foram utilizados os valores observados constituídos pela soma dos valores verdadeiros e dos resíduos simulados.

No entanto, para amenizar o erro devido à oscilação aleatória, foram realizados 100 ajustes para cada cenário, para alguns dos quais, foram apresentados os seus valores observados (Figura 5.1)

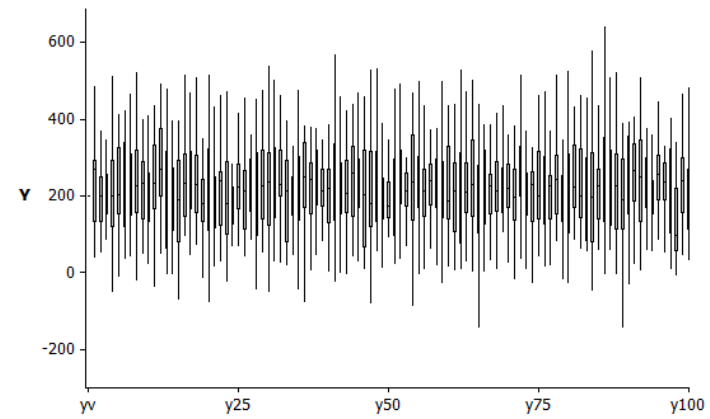
DCCR, CV=25% e Rep=3



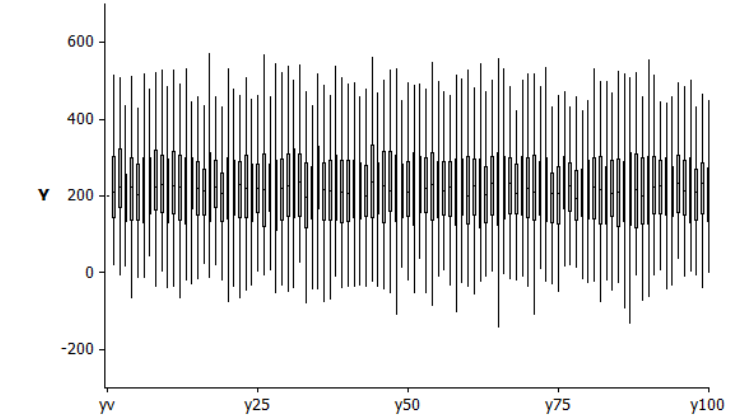
DCCR, CV=25% e Rep=12



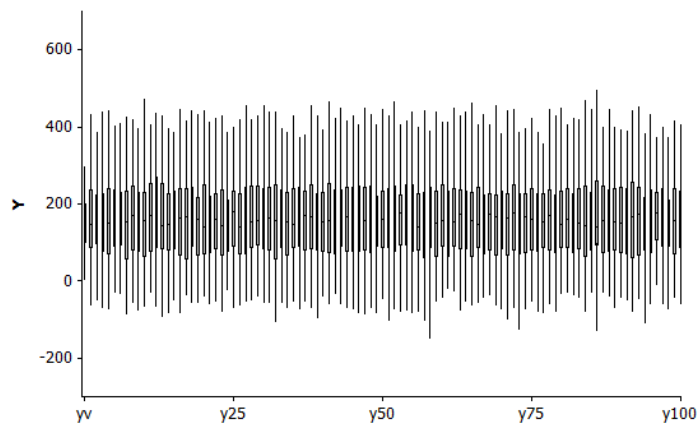
DCCR, CV=62% e Rep=3



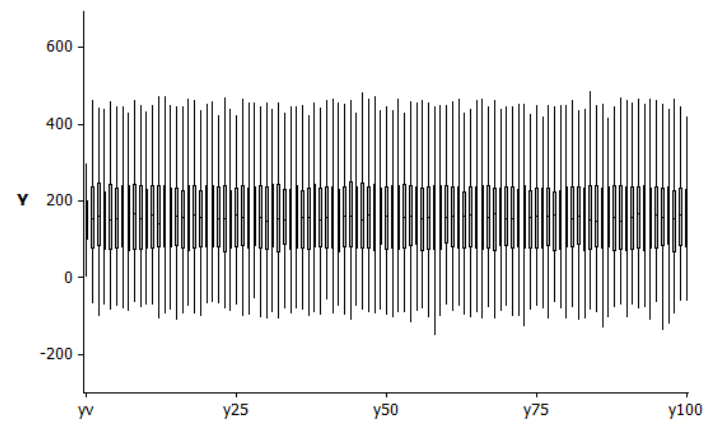
DCCR, CV=62% e Rep=12



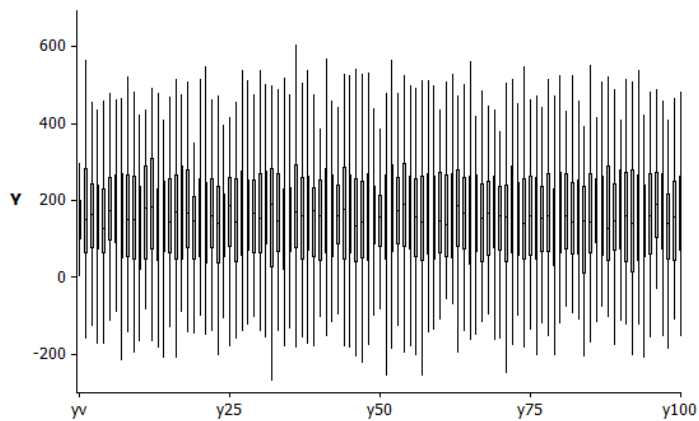
Fatorial completo, CV=25% e Rep=3



Fatorial completo, CV=25% e Rep=12



Fatorial completo, CV=62% e Rep=3



Fatorial completo, CV=62% e Rep=12

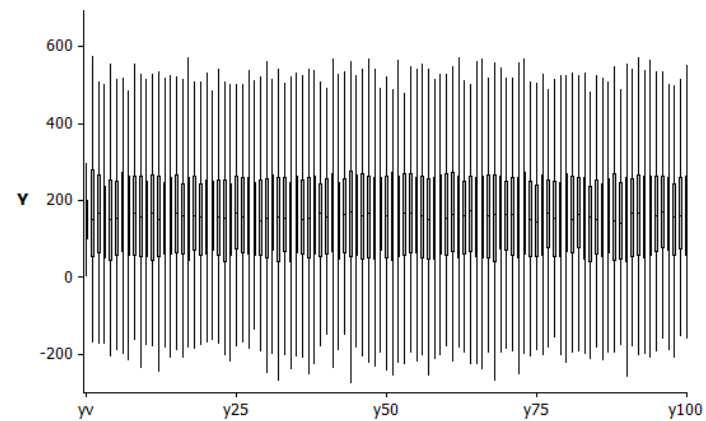


Figura 5.1- Box-plots dos valores observados de Y dos respectivos tratamentos após as 100 simulações.

Quando avaliados os dados referentes aos tratamentos obtidos pelos DCCR e fatorial completo, percebeu-se que ambos os delineamentos apresentaram diferenças ao longo das simulações. Isso implica que o efeito aleatório está presente nos dois delineamentos. No entanto, as médias dos dados permaneceram próximas da média verdadeira ($\bar{y}_{i_v} = 160$) (Figura 5.1).

A diferença entre os dados aumentou em função do aumento do CV em ambos os delineamentos, sendo maior quando utilizado o DCCR. Esse resultado era esperado, pois experimentos mais controlados apresentam dados mais parecidos com a realidade. Foi observado no estudo de Miranda (1976), que os fatores não controlados alteraram os dados observados e isso afetou os resultados gerando ajustes de equações não condizentes com a realidade. Devido ao fato do delineamento fatorial completo gerar um maior número de observações, não obstante à qualidade destas, este delineamento apresenta dados mais próximos do real (Pimentel Gomes, 1985), quando comparado com o DCCR.

Com o aumento do número de repetições por tratamento, observou-se uma tendência em diminuir a variação dos dados, para ambos os delineamentos analisados (Figura 5.1). Esse resultado reafirma o princípio básico da experimentação que diz respeito à repetição dos tratamentos. A repetição proporciona a estimativa dos erros experimentais e, portanto, em experimentos expostos às condições menos controladas e assim, sujeitos à maiores erros, mais repetições são necessárias. A correta estimativa dos erros evita que os efeitos de fatores externos não controlados sejam confundidos com os efeitos dos fatores em estudo (Pimentel Gomes, 1985).

Um delineamento pode ser julgado pela precisão com que os parâmetros da equação são estimados ou pela grandeza da tendenciosidade das suas estimativas. No entanto, concluiu-se também que a quantidade de unidades experimentais, ou seja, a amostragem que se faz, deve ser suficiente para captar os efeitos dos fatores conhecidos e desconhecidos. Desse modo, à medida que se aumenta o número de tratamentos e o grau de manifestação do erro experimental, deve-se aumentar o número de unidades experimentais.

Portanto, para CV menores estimados sob condições experimentais mais homogêneas, pode-se recomendar o DCCR com mais repetições por tratamento. Por outro lado, para CV altos provocados por grandes efeitos dos erros experimentais, deve-se recomendar o fatorial completo com mais repetições por tratamento.

5.2. Avaliação do ajuste

Após o ajuste das 100 superfícies de resposta de Y em função de A e B, em cada combinação entre o tipo de delineamento, coeficiente de variação e número de repetições por tratamento, foram obtidos os valores ajustados de Y (\hat{Y}). Por meio desses, foram estimadas as medidas utilizadas para avaliar a qualidade do ajuste, em função do planejamento experimental, como seguem:

$$R^{2*} = (r_{y_v, \hat{y}})^2;$$

$$EQM = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_{i_v})^2}{n};$$

$$DPC = \sqrt{(\hat{a}_c - 0)^2 + (\hat{b}_c - 0)^2}.$$

A partir das 100 análises por combinação entre tipo de delineamento, coeficiente de variação e número de repetição, foram obtidas as médias e as amplitudes totais, que foram calculadas pela diferença entre os valores máximos e mínimos, das três medidas apresentadas anteriormente (Tabela 5.1).

Tabela 5.1-Médias e amplitudes de 100 observações das medidas avaliadas dos 32 cenários estudados

Del	CV(%)	Rep	R^2^*		EQM		DPC	
			Média	Amplitude	Média	Amplitude	Média	Amplitude
0	25	3	0,95	0,14	317	1410,16	0,05	0,10
		6	0,97	0,06	151	345,38	0,03	0,08
		9	0,98	0,07	102	307,83	0,03	0,07
		12	0,98	0,05	71	201,29	0,02	0,06
	37	3	0,90	0,34	713	3172,80	0,07	0,17
		6	0,94	0,13	341	777,10	0,05	0,12
		9	0,96	0,16	229	692,60	0,04	0,12
		12	0,97	0,10	161	452,91	0,04	0,10
	50	3	0,83	0,58	1268	5640,69	0,11	0,32
		6	0,90	0,24	607	1381,52	0,07	0,18
		9	0,93	0,32	408	1231,29	0,06	0,16
		12	0,95	0,17	287	805,16	0,05	0,14
62	3	0,75	0,86	1982	8813,56	0,15	0,48	
	6	0,86	0,39	949	2158,65	0,09	0,26	
	9	0,90	0,49	637	1923,89	0,07	0,22	
	12	0,92	0,30	449	1258,08	0,06	0,18	
1	25	3	0,99	0,03	119	376,91	0,02	0,07
		6	0,99	0,01	56	134,36	0,02	0,03
		9	0,99	0,01	35	115,66	0,01	0,04
		12	0,87	0,04	26	71,14	0,01	0,03
	37	3	0,98	0,06	269	848,06	0,04	0,10
		6	0,99	0,03	126	302,30	0,03	0,05
		9	0,99	0,02	79	260,22	0,02	0,07
		12	0,99	0,01	59	160,07	0,02	0,05
	50	3	0,97	0,09	478	1507,64	0,05	0,14
		6	0,98	0,18	225	537,43	0,04	0,07
		9	0,99	0,04	142	462,61	0,03	0,09
		12	0,99	0,02	106	284,57	0,02	0,07
62	3	0,95	0,14	747	2355,70	0,06	0,19	
	6	0,97	0,06	352	839,74	0,05	0,10	
	9	0,98	0,06	222	722,82	0,04	0,11	
	12	0,99	0,04	166	444,64	0,03	0,08	

5.2.1. Ajuste médio

O estudo do ajuste médio foi realizado através das equações de regressão das médias das três medidas avaliadas que são apresentadas na tabela 5.2.

Tabela 5.2- Coeficientes das equações de regressão das médias do R^{2*} , EQM, DPC em função do delineamento, coeficiente de variação e número de repetições e respectivos coeficientes de determinação (R^2 %).

Medida	Constante	Del	CV	Rep	Del x CV	R^2 (%)
$\widehat{R^{2*}}$	1,00957	-0,04635	-0,003058	0,00623	0,00256	82,1
\widehat{EQM}	13,77	279,57	22,68	-61,04	-14,28	77,2
\widehat{DPC}	0,022375	0,006747	0,001715	-0,004035	-0,000896	88,7

5.2.1.1 Coeficiente de determinação

Em média, o coeficiente de determinação R^{2*} foi influenciado ($p < 0,05$) pelo delineamento, pelo coeficiente de variação e pelo número de repetições, assim como pela interação delineamento x coeficiente de variação (Tabela 5.2).

Devido tal interação ter sido significativa, foi necessário o seu desdobramento, gerando uma equação de regressão para cada delineamento, apresentadas a seguir:

$$\widehat{R^{2*}} = 1,0095 - 0,0030CV + 0,0062 Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR);}$$

$$\widehat{R^{2*}} = 0,9631 - 0,0004CV + 0,0062 Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo).}$$

Mantidas as outras variáveis fixas, o R^{2*} diminui ($p < 0,05$) em função do aumento do CV e aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do número

de repetições por tratamento. Ele é maior ($p < 0,05$) para o fatorial completo em relação ao DCCR e a sua queda em relação ao aumento do CV é mais acentuada no DCCR do que no fatorial completo (Figura 5.2).

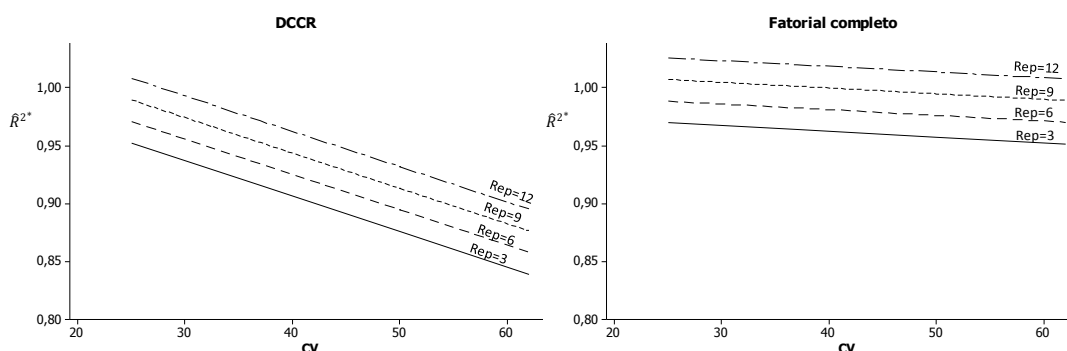


Figura 5.2 – Estimativas do R^2^* em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições, por tratamento.

Consequentemente, para que a qualidade de ajuste da superfície de resposta não diminua, naturalmente, em função do CV, deve-se aumentar o número de repetições por tratamento, principalmente no DCCR.

Esses resultados corroboram os estudos de Pimentel Gomes e Campos (1972), Miranda (1976), Mateus (2001) e Perázio (2010) que constataram que quanto maior as dificuldades de controle de um experimento, menor é a eficiência do DCCR.

Portanto, o DCCR pode ser indicado para delinear tratamentos em experimentos mais controlados. No entanto, também podem ser recomendados para experimentos com CV maiores, desde que sejam realizadas mais repetições por tratamento.

5.2.1.2- Erro quadrático médio

O erro quadrático médio foi influenciado ($p < 0,05$) pelo delineamento, pelo coeficiente de variação e pelo número de repetições, assim como pela interação delineamento x coeficiente de variação (Tabela 5.2). Devido tal

interação ter sido significativa, de modo análogo ao estudo do R^{2*} , foi necessário o seu desdobramento, gerando uma equação de regressão para cada delineamento, apresentadas a seguir:

$$\widehat{EQM} = 13,77 + 22,68 CV - 61,04 Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)}$$

$$\widehat{EQM} = 293,34 + 8,4 CV - 61,04 Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}$$

O EQM aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do CV e diminui ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições por tratamento.

O aumento do EQM em relação ao aumento do CV é mais acentuado no DCCR do que no fatorial completo, indicando que em meio a altos CV ($CV > 25\%$), fixado o número de repetições, o delineamento fatorial foi mais eficiente e deve ser preferido por fornecer um EQM menor que o obtido pelo uso do DCCR (Figura 5.3).

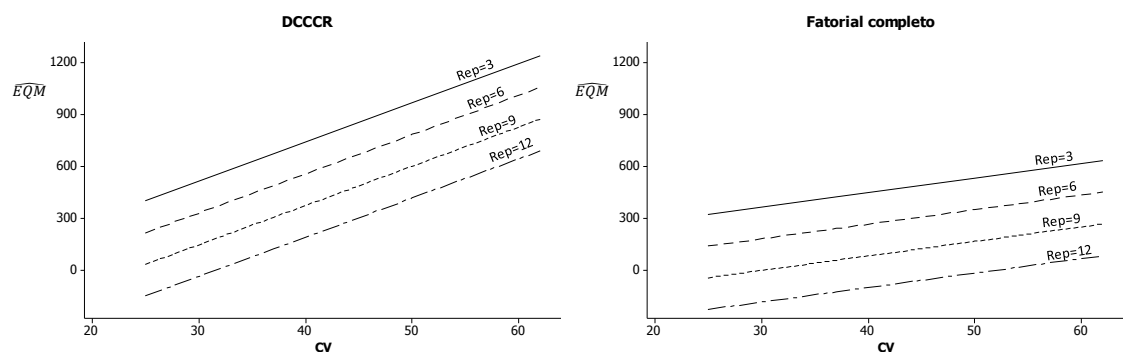


Figura 5.3- Estimativas do EQM em função do CV , para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

A variação sofrida pelo EQM em função do delineamento, CV e número de repetições, foi coerente com a do R^{2*} . Tais resultados levaram às mesmas conclusões, indicando que o DCCR é menos eficiente que o fatorial completo, à medida que o CV aumenta.

Para compensar tal afirmativa obteve-se uma correlação alta e negativa ($r = -0,92$) entre o EQM e o R^{2*} .

Campos (1967), Penteado e Batista (1971) e Mateus (2001) também indicaram o delineamento fatorial por apresentar melhor desempenho quando comparado com o DCCR em situação similar.

Miranda (1976), pensando na economia na utilização do DCCR e na perda de qualidade em meio a experimentos de campo, aumentou o número de repetição por tratamento em seu experimento. Desse modo, teria um delineamento com duas repetições, gerando aproximadamente o mesmo número de unidades experimentais caso tivesse utilizado o fatorial completo sem repetição

Seguindo o raciocínio de Miranda (1976), para compensar a perda de qualidade do delineamento composto central em delinear tratamentos em meio a coeficientes de variação maiores que 25%, uma alternativa é o aumento do número de repetições do experimento.

No intuito de avaliar a viabilidade econômica do DCCR, foi feito um estudo da quantidade de repetições necessária para que o mesmo forneça um EQM menor ou igual ao fornecido pelo fatorial completo com três repetições (Tabela 5.4).

Tabela 5.4- Número de unidades experimentais (UE) geradas a partir do número de repetições necessário para o DCCR fornecer um EQM menor ou igual ao fornecido pelo fatorial completo com três repetições por tratamento

CV(%)	Fatorial Completo		DCCR	
	Repetição	UE	Repetição	UE
25	3	75	5	45
30	3	75	6	54
37	3	75	7	63
40	3	75	8	72
45	3	75	8	72
50	3	75	10	90
62	3	75	12	108

O DCCR proporcionou uma economia do número de tratamentos sem perda de qualidade, em meio a coeficientes de variação menores ou iguais a 45%, utilizando de cinco a oito repetições por tratamento (Tabela 5.4).

5.2.1.3- Distância entre o ponto crítico estimado e o verdadeiro

A distância entre os pontos críticos estimados e verdadeiro (DPC) foi influenciada ($p < 0,05$), pelo tipo de delineamento, pelo coeficiente de variação, pelo número de repetições, assim como pela interação delineamento x coeficiente de variação (Tabela 5.2). O desdobramento do estudo gerou as seguintes equações para cada delineamento:

$$\widehat{DPC} = 0,0223 + 0,0017 CV - 0,0040 Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR);}$$

$$\widehat{DPC} = 0,0291 + 0,0008 CV - 0,0040Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo).}$$

Em média, as qualidades de ajuste proporcionadas pelos dois delineamentos foram satisfatórias. Ambos proporcionaram pequenas distâncias entre os pontos críticos estimados e o ponto crítico verdadeiro (Tabela 5.1). A distância ente os pontos críticos aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do CV e diminui ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições por tratamento.

O aumento do EQM em relação ao aumento do CV é mais acentuado no DCCR do que no fatorial completo indicando que em meio a altos CV ($CV \geq 25\%$), fixado o número de repetições, o delineamento fatorial foi mais eficiente, e deve ser preferido por fornecer uma DPC menor que o DCCR (Figura 5.4).

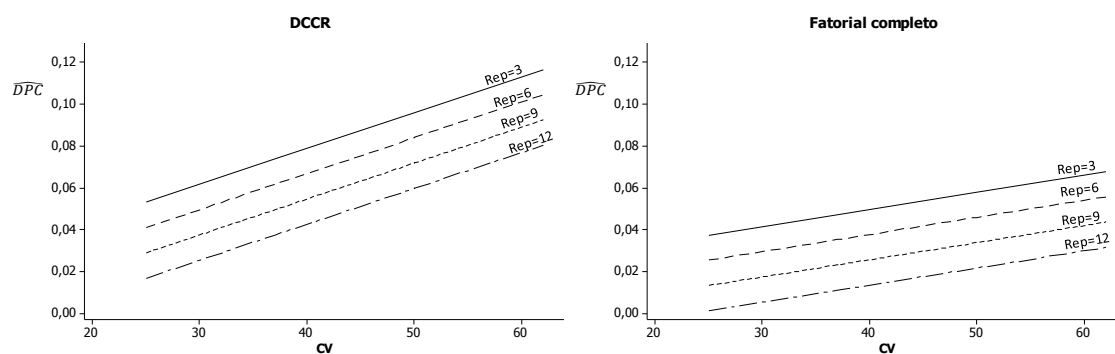


Figura 5.4 - Estimativas da DPC em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

Para compensar a perda de qualidade do composto central rotacional em delinear tratamentos em meio a altos coeficientes de variação, uma alternativa foi aumentar as repetições do experimento.

A comparação do número de unidades experimentais geradas pelo DCC com o número mínimo de repetições necessárias para fornecer uma DPC igual ou menor que o fornecido pelo fatorial com 3 repetições está apresentado na Tabela 5.5.

Tabela 5.5- Número de unidades experimentais (UE) geradas a partir do número de repetições necessário para o DCCR fornecer uma DPC menor, ou igual, ao fornecido pelo fatorial completo com três repetições

CV(%)	Fatorial completo		DCCR	
	Repetição	UE	Repetição	UE
25	3	75	7	63
30	3	75	8	72
37	3	75	10	90
50	3	75	>12	>108
62	3	75	>12	>108

O DCCR proporcionou uma economia do número de tratamentos sem perda de qualidade em meio a coeficientes de variação menores, ou iguais, a 30%, utilizando de sete a oito repetições por tratamento (Tabela 5.5).

Nas três medidas avaliadas (R^{2*} , EQM e DPC), o fatorial completo foi melhor, porém os dois delineamentos perdem eficiência quando o CV aumenta. Para suprir essa deficiência deve-se aumentar o número de repetições por tratamento. Desse modo, aumenta-se, conseqüentemente o grau de liberdades do resíduo.

O número de combinações entre os níveis dos fatores não é o maior problema. O que prejudica a qualidade de ajuste é a quantidade de UE que acarretam menos graus de liberdade do resíduo, resultando, um menor R^{2*} e um maior EQM, indicando conseqüentemente, um pior ajuste avaliando essas medidas.

Já que o problema não é o número de tratamentos, o DCCR pode ser recomendado para condições experimentais mais homogêneas, dado que não há tanto efeito aleatório para confundir o efeito de tratamento.

Portanto, o DCCR é um delineamento de tratamentos viável, desde que o número de repetições seja compatível com o grau de manifestação do erro experimental.

Apesar da superioridade do fatorial completo sobre o DCCR, ela ocorreu principalmente quando avaliado o EQM. Dado que as estimativas do R^{2*} e da DPC foram satisfatórias, variando de 84 a 100% e de 0,0011 a 0,1157, respectivamente. Já as estimativas do EQM variaram de -229,13 a 1227,81.

Nóbrega *et al* (2010) em seu estudo da influência da poda do pseudocaule e das doses de boro e nitrogênio na produção e crescimento de mudas de bananeira utilizou o DCCR como delineamento de tratamentos para a combinação dos níveis dos fatores boro e nitrogênio. O delineamento de tratamento utilizado foi satisfatório para o ajuste da regressão e o modelo ajustado descreveu como o esperado a relação entre os fatores e a variável resposta, apresentando na maioria das vezes, estimativas altas do R^2 .

Portanto, o DCCR é um delineamento que pode ser indicado para experimentos menos controlados por fornecer boas estimativas quando avaliadas as medidas de ajustes e o modelo ajustado.

Silva e Monteiro (2010) também obtiveram sucesso ao utilizar o DCCR para o ajuste de superfície de resposta, em seus estudos agrários em que avaliavam a relação entre o nitrogênio e o enxofre na adubação e em folhas diagnósticas e nas raízes do *capim-braquiária* em degradação.

5.2.2. Variabilidade do ajuste

O estudo da variabilidade do ajuste foi realizado através das equações de regressão das amplitudes das três medidas avaliadas, apresentadas na Tabela 5.6.

Tabela 5.6- Coeficientes das equações de regressão da amplitude do R^2 , EQM, DPC em função do delineamento, coeficiente de variação e repetição e respectivos coeficientes de determinação

Medida	Constante	Del	CV	Rep	Del X CV	R^2 (%)
$\hat{\alpha}_{R^2^*}$	-0,088	0,206	0,011	-0,018	-0,009	80,7
$\hat{\alpha}_{EQM}$	376,64	1081,96	79,88	-258,76	-55,26	60,8
$\hat{\alpha}_{DPC}$	0,00963	0,06163	0,00560	-0,01079	-0,00352	81,5

5.2.2.1- Amplitude do coeficiente de determinação

A amplitude do R^2^* foi influenciada ($p < 0,05$) pelo delineamento, coeficiente de variação, número de repetições e interação delineamento x coeficiente de variação (Tabela 5.6). As equações para cada tipo de delineamento são dadas por:

$$\hat{a}_{R^2*} = -0,088 + 0,011CV - 0,018Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)};$$

$$\hat{a}_{R^2*} = -0,118 + 0,002CV - 0,018Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}.$$

A amplitude do R^{2*} aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do CV e diminui ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições. No DCCR, a amplitude foi mais influenciada pelo CV do que no fatorial completo, indicando que em meio a altos CV ($CV \geq 25$), deve ser preferido o fatorial completo (Figura 5.5).

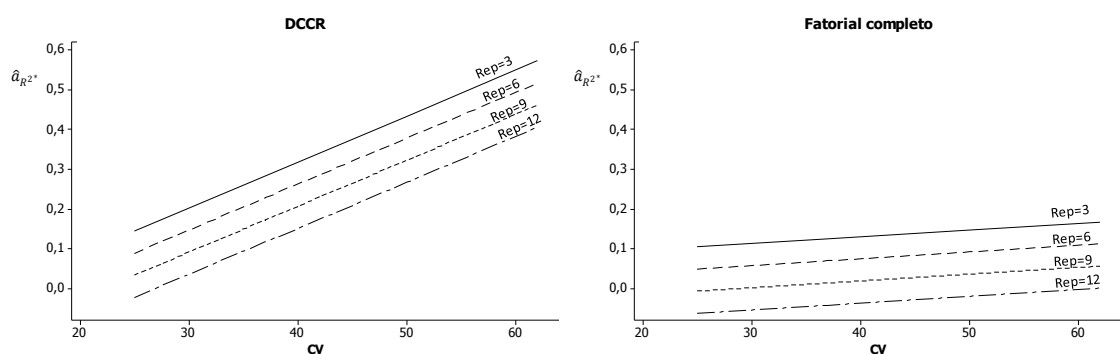


Figura 5.5 – Amplitudes do R^{2*} em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições.

A amplitude do R^{2*} se deveu, basicamente, à amostragem dos efeitos aleatórios. Portanto, quanto menos representativa ela for, maiores serão as diferenças entre as estimativas em relação ao mesmo parâmetro. Isso implica que um experimento pode acarretar estimativas boas ou ruins, sem que o pesquisador saiba qual delas ele tem em mãos. Portanto, isso impede a recomendação do DCCR para experimentos com altos CV, com poucas repetições por tratamentos.

5.2.2.2 – Amplitude do erro quadrático médio

A amplitude do EQM foi influenciada ($p < 0,05$) pelo delineamento, coeficiente de variação, número de repetições e interação delineamento x

coeficiente de variação (Tabela 5.6). As equações para cada tipo de delineamento são dadas por:

$$\hat{\alpha}_{EQM} = 376,64 + 79,88 CV - 258,76 Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR);}$$

$$\hat{\alpha}_{EQM} = 1460,8 + 324,62 CV - 258,76 Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo).}$$

Em função do aumento do CV, a amplitude do EQM aumenta ($p < 0,05$), diminuindo ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições. No delineamento composto central rotacional, a amplitude foi mais influenciada pelo CV do que no fatorial completo (Figura 5.6). Com o objetivo de diminuir essa amplitude, é recomendado migrar para o fatorial completo com maior número de repetições por tratamento.

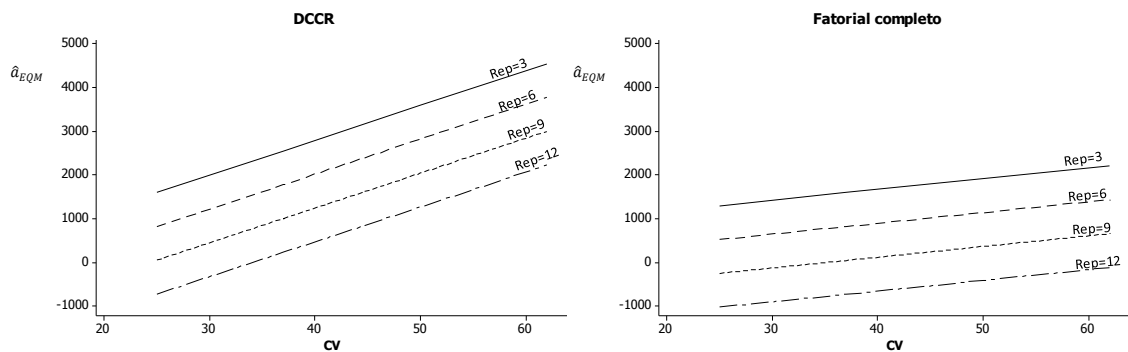


Figura 5.6 - Amplitudes do *EQM* em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições.

A maior amplitude do EQM no DCCR também foi devida à maior dificuldade deste delineamento em representar a realidade do fenômeno estudado. Tal dificuldade não se deve ao planejamento dos tratamentos, mas ao número de unidades experimentais necessárias para representar a distribuição de probabilidades do erro experimental.

5.2.2.3- Amplitude da distância do ponto crítico

A amplitude da *DPC* foi influenciada ($p < 0,05$) pelo delineamento, coeficiente de variação, número de repetições e interação delineamento x coeficiente de variação (Tabela 5.6). As equações para cada tipo delineamento são dadas por:

$$\hat{\alpha}_{DPC} = 0,0096 + 0,0056CV - 0,0107Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR);}$$

$$\hat{\alpha}_{DPC} = 0,0765 + 0,0020CV - 0,0107Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo).}$$

Em função do aumento do CV, a amplitude da DPC aumenta ($p < 0,05$) e diminui ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições. No delineamento composto central rotacional, o aumento da amplitude da DPC sofreu maiores influências do aumento do CV do que no fatorial completo (Figura 5.7).

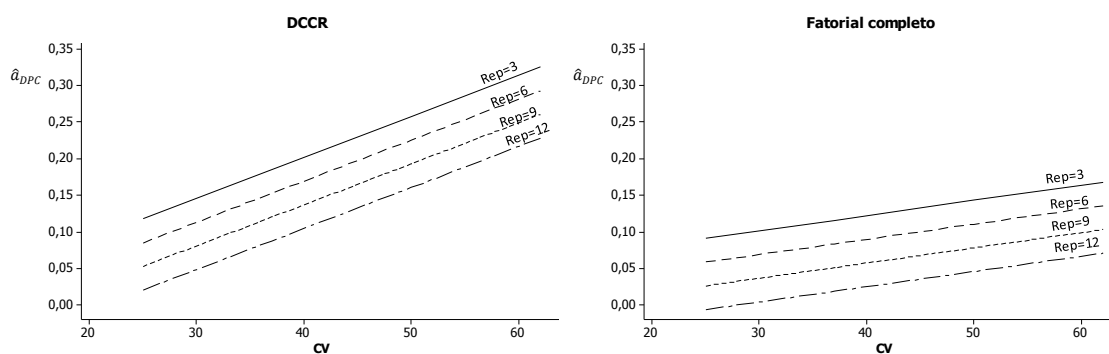


Figura 5.7- Amplitudes da *DPC* em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições.

O fatorial completo se apresentou melhor que o DCCR quando avaliadas as amplitudes das medidas em estudo, elas aumentaram em função do CV e diminuíram em função do aumento do número de repetições por tratamento.

Como naturalmente o CV prejudicou a qualidade do ajuste e como o DCCR é menos eficiente que o fatorial completo por apresentar menor

quantidade de UE, ele deve ser planejado com mais repetições por tratamento do que o fatorial completo.

A variabilidade encontrada no R^{2*} , EQM e DPC ao longo das 100 simulações por cenário mostra o erro de amostragem que pode ocorrer em um experimento mal planejado.

Dada esta situação, o ajuste da superfície de resposta fica comprometido independentemente da qualidade do delineamento de tratamento utilizado.

Portanto, a amplitude das medidas estudadas sugere que seja realizado um número apropriado de repetições por tratamento de acordo com o delineamento utilizado.

Nas áreas agrárias, em que normalmente os experimentos de campo fornecem estimativas altas dos CV, observou-se pela simulação dos dados que para um mesmo experimento, diferentes superfícies de respostas podem ser ajustadas. Isto implica necessariamente em planejar um experimento que minimize esta tendência.

Ambos os delineamentos avaliados foram eficientes no ajuste de superfície de resposta e proporcionaram, em média, estimativas não tendenciosas. Contudo, a qualidade dos ajustes diminui com o aumento do coeficiente de variação, independentemente do delineamento utilizado.

Perázio (2010) também observou que tanto o delineamento fatorial completo quanto o DCCR proporcionam equações com bom poder de explicação dos fatores em estudo. Segundo a autora, para todas as superfícies ajustadas não houve falta de ajustamento ($p > 0,05$), indicando que os modelos adotados se ajustaram bem aos dados, tanto no caso em que foi utilizado o DCCR quanto o fatorial completo. Isso implica que as interpretações baseadas no modelo obtido são satisfatórias.

Esses resultados corroboram os estudos de Mason (1956), Tejeda (1966), Campos (1967) e Miranda (1976) que observaram que quanto menor o controle dos experimentos, menor é a qualidade das estimativas.

No entanto, o delineamento composto central rotacional sofreu uma maior influência do coeficiente de variação do que o fatorial completo na

avaliação das três medidas estudadas, indicando assim que em meio a altos CV ($CV > 25\%$) deve-se planejar o fatorial completo. Além disso, a amplitude dessas medidas foi maior no DCCR do que no fatorial completo, diminuindo com o aumento do número de repetições por tratamento e aumentando com o aumento do CV, principalmente no DCCR.

Em seus estudos, Pimentel Gomes e Campos (1972), Miranda (1976), Mateus (2001) e Perázio (2010) também mostraram que a eficiência do DCCR é menor, quanto maiores forem as dificuldades de controle de um experimento. Além disso, Penteado e Batista (1971) também indicaram a utilização do fatorial completo 5×5 , quando compararam com a eficiência do DCCR. Campos (1967), ao comparar o fatorial 3^3 com o DCCR, concluiu que o fatorial foi mais preciso por apresentar menores estimativas da variância dos parâmetros da superfície de resposta. De modo análogo, Perázio (2010) indicou a utilização do fatorial completo 9×9 quando comparado com a eficiência do DCCR em delinear tratamentos para o ajuste de superfície de resposta em meio a altos coeficientes de variação. Em seu estudo, Perázio (2010) indicou o fatorial completo por fornecer melhores resultados em todas as medidas avaliadas de qualidade de ajuste. Isso deve-se ao fato do delineamento fatorial completo ter uma maior representatividade da amostra, ao gerar um maior número de tratamentos quando comparado com o DCCR.

De uma maneira geral, quanto maior o número de unidades experimentais, mais precisas são as estimativas do experimento, embora experimentos com menor número de dados possam fornecer estimativas mais próximas dos valores verdadeiros do que outros com maior número, dependendo da qualidade destes (PIMENTEL GOMES, 1985). Já, Zagatto e Pimentel Gomes, citados por Campos (1972), indicam grupos de ensaios numerosos ou ensaios isolados com diversas repetições e boa precisão para aumentar a qualidade do experimento.

Perázio (2010) observou que o aumento do número de repetições do ponto central aumenta a qualidade das estimativas fornecidas pelo DCCR e ressaltou que possivelmente essa qualidade também aumenta com o aumento do número de repetições de todos os tratamentos. De acordo com os resultados obtidos, percebeu-se que para aumentar a eficiência do DCCR

em delinear tratamentos para o ajuste da superfície de resposta em meio a altos CVs, foi necessário um aumento do número de repetições por tratamento, corroborando o estudo de Zagatto e Pimentel Gomes citados por Campos (1972), Miranda (1976) e Perázio (2010).

Portanto, em meio a $CV \geq 30\%$, deve-se planejar o fatorial completo com, no mínimo, três repetições por tratamento. Já o DCCR deve apresentar-se com mais de dez repetições. Nessa situação é menos vantajoso o investimento no aumento do número de repetições para suprir essa perda de informação, do que na combinação entre os níveis dos fatores.

Já para $CV \leq 30\%$, o DCCR se mostrou tão eficiente quanto o fatorial completo quando utilizado um maior número de repetições. Deve-se, então, planejar o fatorial completo com no mínimo três repetições ou o DCCR com sete a oito repetições.

5.3. Porcentagens de acerto

Após o ajuste de cada superfície de resposta de Y em função de A e B, em cada combinação entre o tipo de delineamento, coeficiente de variação e número de repetições por tratamento, foram obtidas as estimativas dos parâmetros ($\hat{\beta}_j$). Por meio desses foram estimados os intervalos de confiança em função do planejamento experimental, como segue:

$$IC_{(1-\alpha)}(\beta_j) = \hat{\beta}_j \pm t_{\frac{\alpha}{2}} S(\hat{\beta}_j)$$

A partir das 100 análises por combinação entre tipo de delineamento, coeficiente de variação e número de repetições, foram estimadas as porcentagens de acerto de cada parâmetro que foram as medidas utilizadas para avaliar quantitativamente o ajuste (Tabela 5.7).

Tabela 5.7- Porcentagem de acerto de cada parâmetro e da superfície de resposta dos 32 cenários estudados

Del	CV(%)	Rep	$p\beta_0$	$p\beta_1$	$p\beta_2$	$p\beta_3$	$p\beta_4$	$p_{superfície}$
0	25	3	92	95	94	94	86	72
		6	93	97	93	93	92	71
		9	96	95	90	96	94	74
		12	95	97	93	97	97	82
	37	3	92	95	94	94	86	72
		6	93	97	93	93	92	71
		9	96	95	90	96	94	74
		12	95	97	93	97	97	82
	50	3	92	95	94	94	86	72
		6	93	97	93	93	92	71
		9	96	95	90	96	94	74
		12	95	97	93	97	97	82
62	3	92	95	94	94	86	72	
	6	93	97	93	93	92	71	
	9	96	95	90	96	94	74	
	12	95	97	93	97	97	82	
1	25	3	91	94	94	94	93	75
		6	95	96	95	96	96	82
		9	95	96	95	95	95	81
		12	96	98	96	96	96	84
	37	3	91	94	94	94	93	75
		6	95	96	95	96	96	82
		9	95	96	95	95	95	81
		12	96	98	96	96	96	84
	50	3	91	94	94	94	93	75
		6	95	96	95	96	96	82
		9	95	96	95	95	95	81
		12	96	98	96	96	96	84
62	3	91	94	94	94	93	75	
	6	95	96	95	96	96	82	
	9	95	96	95	95	95	81	
	12	96	98	96	96	96	84	

Os estudos foram feitos a partir dos ajustes da regressão para as medidas porcentagem de acerto para cada parâmetro e da superfície que estão descritos na Tabela 5.8.

Tabela 5.8- Coeficientes das equações de regressão ajustadas para a porcentagem de acerto e seus respectivos coeficientes de determinação

Medida	Constante	Del	Rep	Del X Rep	R^2 (%)
$\widehat{p\beta}_0$	90,75	-	0,45	-	73,3
$\widehat{p\beta}_1$	93,00	2,00	0,40	-0,26	66,7
$\widehat{p\beta}_2$	93,5	5,0	0,2	-0,4	68,5
$\widehat{p\beta}_3$	94,00	-2,25	0,16	0,25	70,0
$\widehat{p\beta}_4$	93,0	- 9,5	0,2	0,9	92,7
$\hat{p}_{superficie}$	73,12	-5,75	0,98	-	82,4

5.3.1. Porcentagem de acerto do β_0

O β_0 é o termo independente da superfície de resposta e representa a média do experimento. A porcentagem de acerto do β_0 aumenta ($p < 0,05$) com o aumento do número de repetições por tratamento, independentemente do delineamento e do CV (Tabela 5.7).

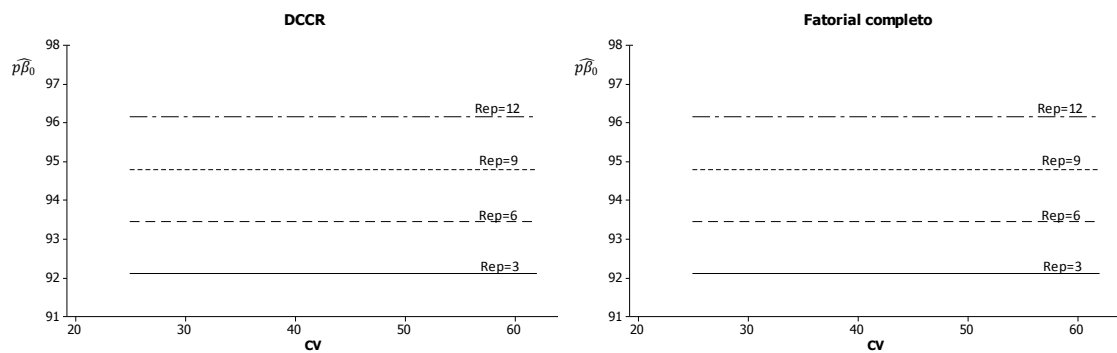


Figura 5.8- Porcentagem de acerto do β_0 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo, com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

De modo geral, as porcentagens de acerto do β_0 , proporcionadas pelos dois delineamentos foram bastante satisfatórias, pois proporcionaram $p\hat{\beta}_0 > 91\%$ (Figura 5.8). Portanto, ambos os delineamentos forneceram estimativas das médias próximas à média verdadeira ($\bar{y}_v = 160$), o que corrobora com os resultados obtidos e discutidos no item 5.1.

Como o aumento do número de repetições aumenta a precisão da estimativa da média geral de Y, tal fato contribui para aumentar a porcentagem de acerto do β_0 .

5.3.2. Porcentagem de acerto do β_1

A porcentagem de acerto do β_1 foi influenciada ($p < 0,05$) pelo tipo de delineamento, pelo número de repetições, assim como pela interação delineamento x repetição (Tabela 5.7). O seu desdobramento gerou as seguintes equações para cada delineamento:

$$p\hat{\beta}_1 = 93 + 0,4 \text{ Rep}, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)}$$

$$p\hat{\beta}_1 = 95 + 0,13 \text{ Rep}, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}$$

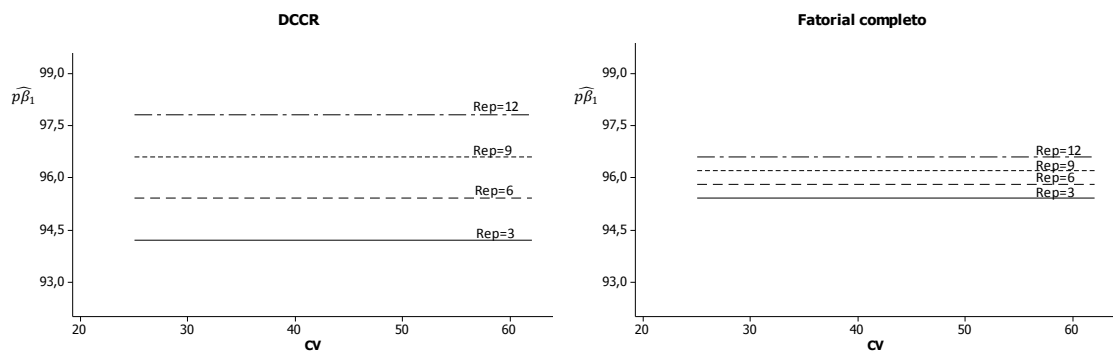


Figura 5.9- Porcentagem de acerto do β_1 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

De modo geral, as quantidades de acerto do β_1 proporcionadas pelos dois delineamentos foram satisfatórias. Ambos proporcionaram $p\beta_1 > 94\%$.

A porcentagem de acerto do β_1 aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições por tratamento e esse aumento foi maior no DCCR do que no fatorial completo (Figura 5.9). Isso indica que o delineamento composto central rotacional apresentou-se mais eficiente que o fatorial completo, apresentando uma maior porcentagem de acerto de β_1 , quando utilizado no mínimo oito repetições por tratamento (Tabela 5.9).

Tabela 5.9- Porcentagem de acerto do parâmetro β_1 para cada número de repetições, segundo o DCCR e fatorial completo

Número de repetições	Porcentagem de acerto de β_1	
	DCCR	Fatorial completo
3	94,2	95,3
4	94,6	95,5
5	95,0	95,6
6	95,4	95,7
7	95,8	95,9
8	96,2	96,0
9	96,6	96,1
10	97,0	96,3
11	97,4	96,4
12	97,8	96,5

Quando se tem $3 \leq \text{Rep} \leq 8$, o fatorial completo proporcionou maior $p\beta_1$. Já para $8 \leq \text{Rep} \leq 12$, foi o DCCR. Apesar da pequena diferença em ambas as situações, conclui-se que o DCCR é mais dependente do número de repetições do que o fatorial completo.

Para avaliar a economia associada à qualidade do DCCR, estudou-se o número de unidades experimentais geradas a partir do número mínimo de repetições necessárias para que o DCCR forneça uma porcentagem de acerto do β_1 maior ou igual ao fornecido pelo fatorial completo com menos de oito repetições (Tabela 5.10).

Tabela 5.10- Número de unidades experimentais (UE) geradas a partir do número mínimo de repetições necessárias para que o DCCR forneça uma porcentagem de acerto de β_1 maior ou igual ao fornecido pelo fatorial completo com menos de oito repetições

Fatorial completo		DCCR	
Repetição	UE	Repetição	UE
3	75	6	54
4	100	7	63
5	125	7	63
6	150	7	63
7	175	8	72
8	200	8	72

O DCCR mostrou-se economicamente viável quando aumentado o número de repetições, pois gerou um menor número de unidades experimentais com uma porcentagem de acerto maior ou igual ao fornecido pelo fatorial completo (Tabela 5.10).

5.3.3. Porcentagem de acerto do β_2

A porcentagem de acerto do β_2 foi influenciada pelo tipo de delineamento, pelo número de repetições, assim como pela interação delineamento x repetição (Tabela 5.7). O desdobramento do estudo gerou as seguintes equações para cada delineamento:

$$\widehat{p\beta_2} = 93,5 + 0,2Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)}$$

$$\widehat{p\beta_2} = 94 - 0,2Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}$$

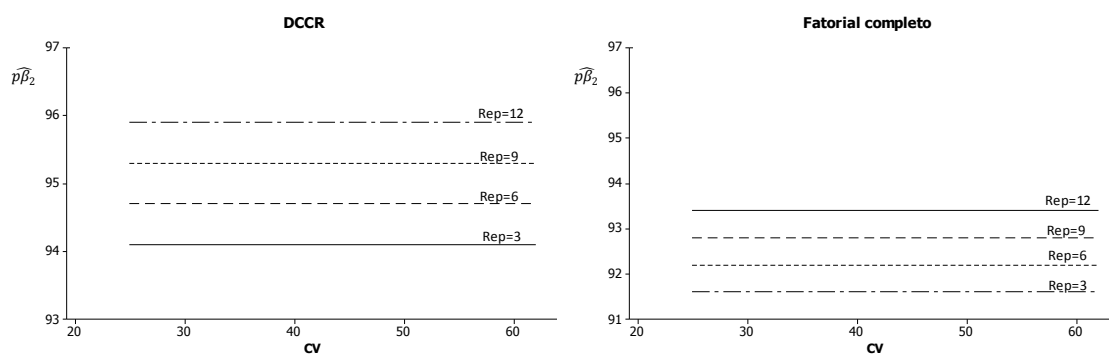


Figura 5.10- Porcentagem de acerto do β_2 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

De modo geral, as quantidades de acerto do β_2 proporcionadas pelos dois delineamentos foram satisfatórias. Ambos proporcionaram $p\beta_2 > 93\%$.

A porcentagem de acerto do β_2 aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições por tratamento e esse aumento foi maior no DCCR do que no fatorial completo (Figura 5.10). Isso indica que o delineamento composto central rotacional apresentou-se mais eficiente do que o fatorial completo, apresentando uma maior porcentagem de acerto de β_2 , quando utilizado no mínimo três repetições por tratamento.

5.3.4. Porcentagem de acerto do β_3

A porcentagem de acerto do β_3 foi influenciada pelo tipo de delineamento, pelo número de repetições e pela interação delineamento x repetição (Tabela 5.7). O desdobramento do estudo gerou as seguintes equações para cada delineamento:

$$\widehat{p\beta_3} = 94 + 0,17Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR);}$$

$$\widehat{p\beta_3} = 91,75 + 0,42Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo).}$$

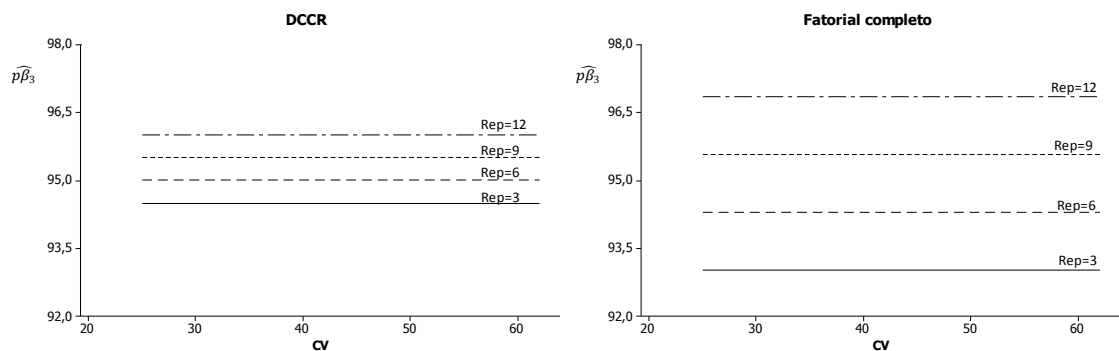


Figura 5.11- Porcentagem de acerto do β_3 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

De modo geral, as quantidades de acerto do β_3 proporcionadas pelos dois delineamentos foram satisfatórias. Ambos proporcionaram $p\beta_3 > 93\%$.

A porcentagem de acerto do β_3 aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições por tratamento e esse aumento foi maior no fatorial do que DCCR (Figura 5.11). Isso indica que ao utilizar um menor número de repetições ($Rep \leq 9$) a porcentagem de acerto de β_3 é maior para esse último delineamento (DCCR).

Para avaliar viabilidade do DCCR estudou-se o número de unidades experimentais geradas a partir do número mínimo de repetições necessárias para que o DCCR fornecesse uma porcentagem de acerto de β_3 maior ou

igual ao fornecido pelo fatorial completo com mais de nove repetições (Tabela 5.11).

Tabela 5.11- Número de unidades experimentais (UE) geradas a partir do número mínimo de repetições necessárias para que o DCC forneça uma porcentagem de acerto de β_3 maior ou igual ao fornecido pelo fatorial completo com mais de nove repetições

Fatorial completo		DCCR	
Repetição	Número de UE	Repetição	Número de UE
10	250	11	99
11	275	>12	>108
12	300	>12	>108

O DCCR se mostrou eficiente em delinear tratamentos, sendo utilizado um maior número de repetições, pois gerou um menor número de unidades experimentais com mesma qualidade do fatorial completo.

5.3.5. Porcentagem de acerto do β_4

A porcentagem de acerto do β_4 foi influenciada pelo tipo de delineamento, pelo número de repetições, assim como pela interação delineamento x repetição (Tabela 5.7). O desdobramento do estudo gerou as seguintes equações para cada delineamento:

$$\widehat{p\beta_4} = 93 + 0,27 \text{ Rep}, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)};$$

$$\widehat{p\beta_4} = 83,5 + 1,17 \text{ Rep}, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}.$$

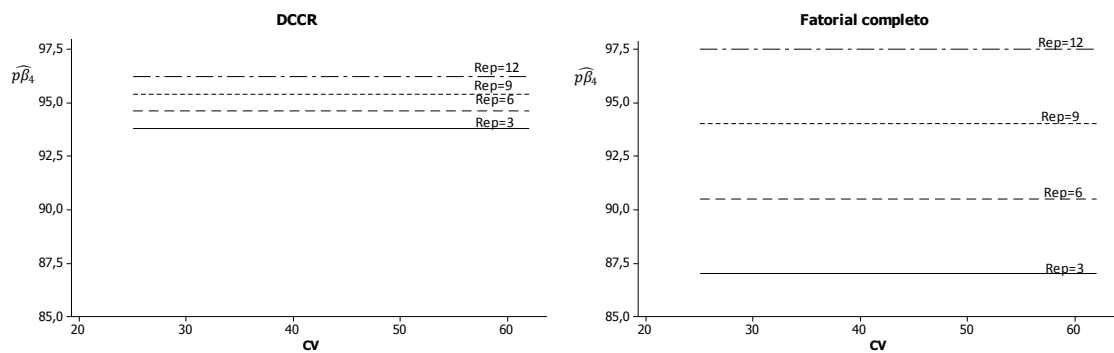


Figura 5.12- Porcentagem de acerto do β_4 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

De modo geral, as quantidades de acerto do β_4 proporcionadas pelos dois delineamentos foram satisfatórias. Ambos proporcionaram $p\hat{\beta}_4 > 87\%$.

A porcentagem de acerto do β_4 aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições por tratamento e esse aumento foi maior no fatorial do que DCCR. Isso indica que ao utilizar um menor número de repetições (dez ou menos repetições) a porcentagem de acerto do β_4 é maior para esse último delineamento (DCCR).

Para avaliar viabilidade do DCCR estudou-se o número de unidades experimentais geradas a partir do número mínimo de repetições necessárias para que o DCC forneça uma porcentagem de acerto de β_4 maior ou igual ao fornecido pelo fatorial completo com mais de nove repetições (Tabela 5.12).

Tabela 5.12- Número de unidades experimentais geradas (UE) a partir do número mínimo de repetições necessárias para que o DCC forneça uma porcentagem de acerto de β_4 maior ou igual ao fornecido pelo fatorial completo com mais de dez repetições.

Fatorial completo		DCCR	
Repetição	Número de UE	Repetição	Número de UE
11	275	>12	>108
12	300	>12	>108

O delineamento composto central se mostrou eficiente em delinear tratamentos, sendo utilizado um maior número de repetições, pois gerou um

menor número de unidades experimentais com mesma qualidade do fatorial completo.

5.3.6. Porcentagem de acerto da superfície

A porcentagem de acerto da superfície aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições e é maior ($p < 0,05$) para o DCCR em relação ao fatorial completo (Figura 5.12). No entanto, tanto o DCCR quanto o fatorial completo proporcionaram uma porcentagem de acerto da superfície satisfatória. Na ordem de $p_{superfície} > 70\%$.

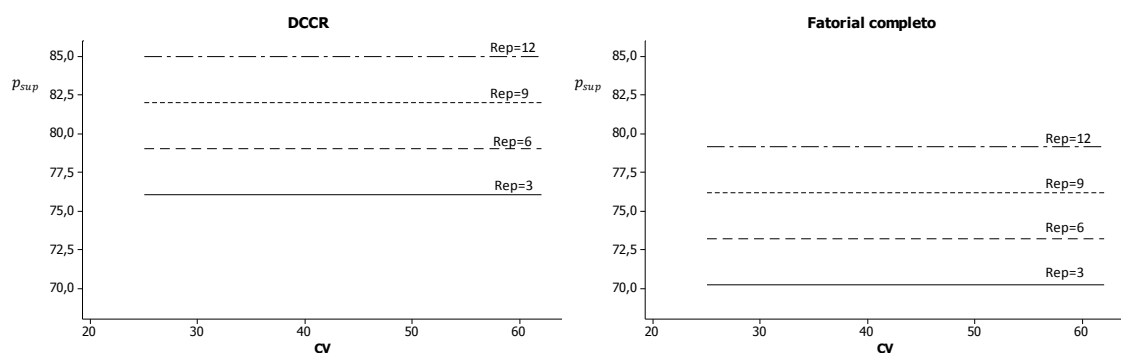


Figura 5.12- Porcentagem de acerto da superfície em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

O percentual de acerto mínimo para os coeficientes da superfície de resposta foi de 87%. O DCCR foi melhor nos termos quadráticos, o que refletiu em um acerto maior da $p_{superfície}$ como um todo.

Contudo, a quantidade de acerto depende do número de repetições por tratamento. Desse modo, um simples fato de indicar um delineamento não significa ter planejado um bom experimento. Para alcançá-lo, tem que se determinar o número de repetições adequado para os tratamentos ensaiados.

O CV não influenciou na porcentagem de acerto, pois, está relacionado com o tamanho do intervalo de confiança.

5.4. Estimativas dos parâmetros

A partir das 100 análises por combinação entre tipo de delineamento, coeficiente de variação e número de repetições, foram estimados os intervalos de confiança médio de cada parâmetro da equação (Tabela 5.13).

Tabela 5.13- Amplitude dos intervalos de confiança de cada parâmetro dos 32 cenários estudados

Del	CV(%)	Rep	$IC(\beta_0)_{0,95}$	$IC(\beta_1)_{0,95}$	$IC(\beta_2)_{0,95}$	$IC(\beta_3)_{0,95}$	$IC(\beta_4)_{0,95}$
0	25	3	45,71	16,83	16,83	24,64	24,64
		6	31,88	11,74	11,74	17,19	17,19
		9	26,04	9,59	9,59	14,04	14,04
		12	22,56	8,31	8,31	12,16	12,16
	37	3	68,56	25,25	25,25	36,96	36,96
		6	47,82	17,61	17,61	25,78	25,78
		9	39,06	14,38	14,38	21,06	21,06
		12	33,84	12,46	12,46	18,24	18,24
	50	3	91,42	33,67	33,67	49,29	49,29
		6	63,77	23,48	23,48	34,38	34,38
		9	52,08	19,18	19,18	28,08	28,08
		12	45,12	16,62	16,62	24,32	24,32
62	3	114,27	42,09	42,09	61,61	61,61	
	6	79,71	29,36	29,36	42,97	42,97	
	9	65,10	23,98	23,98	35,10	35,10	
	12	56,40	20,77	20,77	30,41	30,41	
1	25	3	94,76	33,50	33,50	55,56	55,56
		6	65,45	23,14	23,14	38,37	38,37
		9	52,97	18,72	18,72	31,05	31,05
		12	45,53	16,10	16,10	26,69	26,69
	37	3	142,15	50,25	50,25	83,34	83,34
		6	98,18	34,71	34,71	57,56	57,56
		9	79,45	28,09	28,09	46,58	46,58
		12	68,30	24,15	24,15	40,04	40,04
	50	3	189,53	67,01	67,01	111,12	111,12
		6	130,91	46,28	46,28	76,75	76,75
		9	105,93	37,45	37,45	62,11	62,11
		12	91,07	32,20	32,20	53,39	53,39
62	3	236,91	83,76	83,76	138,90	138,90	
	6	163,64	57,85	57,85	95,94	95,94	
	9	132,42	46,81	46,81	77,64	77,64	
	12	113,84	40,25	40,25	66,74	66,74	

Os estudos foram feitos a partir dos ajustes da regressão para o IC de cada parâmetro que estão descritos na Tabela 5.14. O IC avaliou a precisão com que os parâmetros da equação foram estimados.

Tabela 5.14- Coeficientes das equações de regressão ajustadas para o intervalo de confiança e seus respectivos coeficientes de determinação

Medida	Constante	Del	CV	Rep	Del x CV	Del x Rep	$R^2(\%)$
$IC(\beta_0)_{0,95}$	51,27	0,12	2,60	-6,86	-1,33	-	91,8
$IC(\beta_1)_{0,95}$	24,68	-12,60	0,92	-3,30	-0,45	1,68	94,5
$IC(\beta_2)_{0,95}$	24,68	-12,60	0,92	-3,30	-0,45	1,68	94,5
$IC(\beta_3)_{0,95}$	41,94	-23,25	1,52	-5,47	-0,84	3,11	95,0
$IC(\beta_4)_{0,95}$	41,94	-23,25	1,52	-5,47	-0,84	3,11	95,0

5.4.1. Intervalo de confiança do β_0

O intervalo de confiança do β_0 foi influenciado ($p < 0,05$) pelo delineamento, coeficiente de variação, número de repetições e pela interação delineamento x coeficiente de variação (Tabela 5.7). As equações para cada tipo de delineamento estão apresentadas na Figura 5.13 e são dadas por:

$$\widehat{IC(\beta_0)}_{0,95} = 51,27 + 2,60 CV - 6,86 Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR);}$$

$$\widehat{IC(\beta_0)}_{0,95} = 51,40 + 1,27 CV - 6,86 Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo).}$$

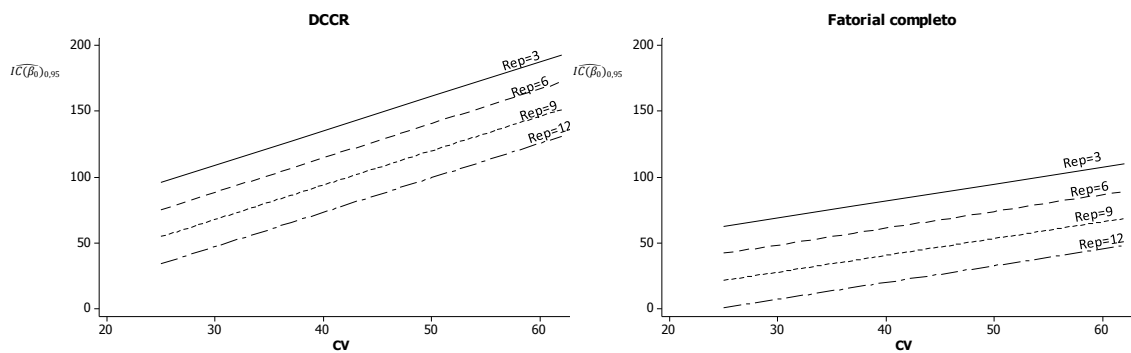


Figura 5.13- Estimativas do intervalo de confiança do β_0 em função do CV para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

Em função do aumento do CV, o intervalo de confiança do β_0 aumentou ($p < 0,05$), diminuindo ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetições por tratamento. No delineamento composto central rotacional, o $IC(\beta_0)$ foi mais influenciado pelo CV do que no fatorial completo, indicando que em meio a altos CV ($CV > 25\%$) deve ser preferido este último delineamento.

Tal aumento do $IC(\beta_0)$ em função do aumento do CV, foi o responsável para que a $p\beta_0$ não sofresse efeito do delineamento. Isso sugere que o acerto do β_0 pelo DCCR se deu a partir de um intervalo maior e, conseqüentemente, com menor precisão.

5.4.2. Intervalo de confiança do β_1

O intervalo de confiança do β_1 foi influenciado ($p < 0,05$) pelo delineamento, número de repetição, coeficiente de variação e pelas interações delineamento x coeficiente de variação e delineamento x repetição (Tabela 5.7). As equações para cada tipo delineamento estão apresentadas da figura 5.14 e são dadas por:

$$IC(\hat{\beta}_1)_{0,95} = 24,68 + 0,92CV - 3,30Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)};$$

$$IC(\hat{\beta}_1)_{0,95} = 12,08 + 0,47CV - 1,62Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}.$$

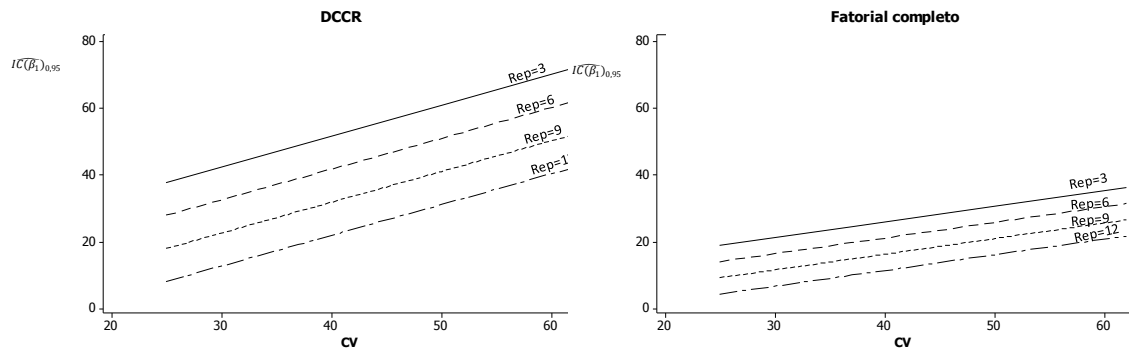


Figura 5.14- Estimativas do intervalo de confiança do β_1 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

O intervalo de confiança do β_1 aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do CV e diminui ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetição. No delineamento composto central rotacional, a amplitude do intervalo de confiança foi mais influenciada pelo CV e pelo número de repetições por tratamento, do que no fatorial completo. No entanto, o aumento provocado pelo CV no DCCR só é compensado para um número de repetições muito alto ($Rep > 12$), indicando que em meio a altos CV ($CV > 25\%$) deve ser preferido o delineamento fatorial completo.

5.4.3. Intervalo de confiança do β_2

Os parâmetros β_1 e β_2 são referentes aos termos lineares da regressão dos fatores A e B, respectivamente. Portanto, as estimativas do desvio de padrão de $\hat{\beta}_3$ e $\hat{\beta}_4$ são as mesmas e conseqüentemente possuem as mesmas amplitudes dos intervalos de confiança (Tabela 5.13). Por isso, os resultados e as recomendações da amplitude do intervalo de confiança

para o β_2 foram os mesmos do item 5.4.2 para o β_1 . As equações para cada tipo delineamento estão apresentadas na Figura 5.15 e são dadas por:

$$IC(\widehat{\beta_2})_{0,95} = 24,68 + 0,92CV - 3,30Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)};$$

$$IC(\widehat{\beta_2})_{0,95} = 12,08 + 0,47CV - 1,62Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}.$$

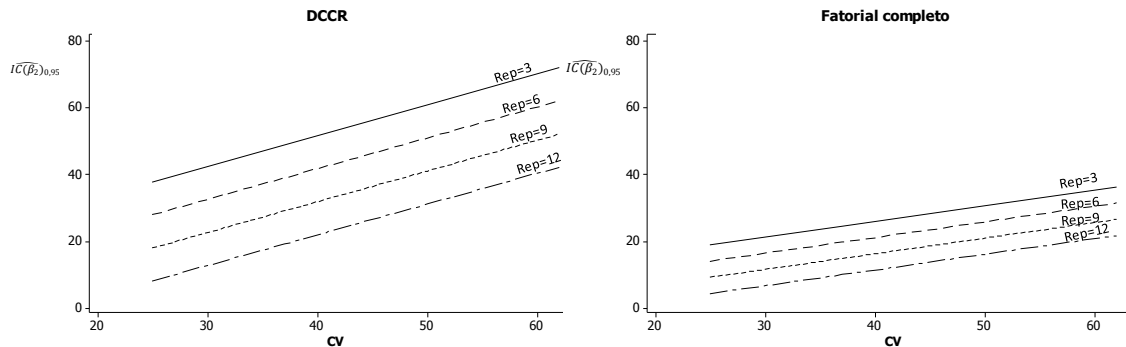


Figura 5.15- Estimativas do intervalo de confiança do β_2 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

5.4.4. Intervalo de confiança do β_3

O intervalo de confiança do β_3 foi influenciado ($p < 0,05$) pelo delineamento, número de repetições, coeficiente de variação e pelas interações delineamento x coeficiente de variação e delineamento x repetição (Tabela 5.7). As equações para cada tipo delineamento estão apresentadas na Figura 5.16 e são dadas por:

$$IC(\widehat{\beta_3})_{0,95} = 40,94 + 1,52CV - 5,47Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)};$$

$$IC(\widehat{\beta_3})_{0,95} = 17,69 + 0,68CV - 2,36Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}.$$

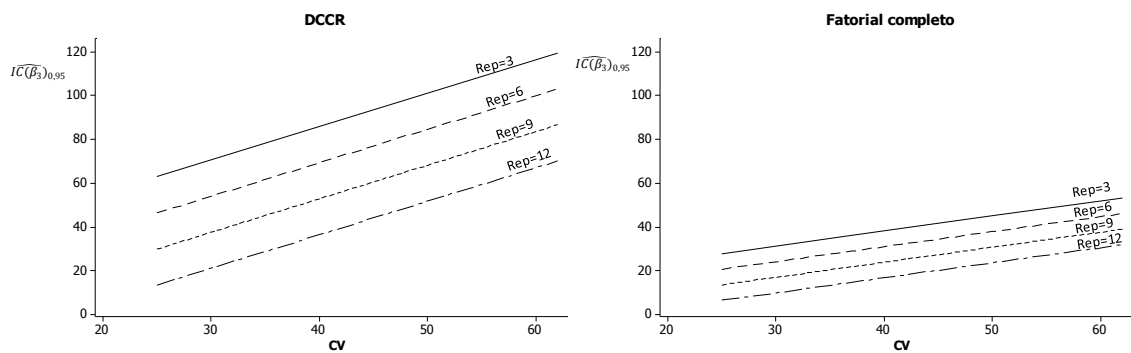


Figura 5.16- Estimativas do intervalo de confiança do β_3 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

O intervalo de confiança do β_3 aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do CV e diminui ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetição. No delineamento composto central, a amplitude do intervalo de confiança foi mais influenciada pelo CV e pelo número de repetições por tratamento do que no fatorial completo. No entanto, o aumento provocado pelo CV no DCCR, só é compensado com um número de repetições muito alto ($Rep > 12$), indicando que em meio a altos CV ($CV > 25\%$) deve ser preferido o delineamento fatorial completo.

5.4.5. Intervalo de confiança do β_4

Os parâmetros β_3 e β_4 são referentes aos termos quadráticos da regressão dos fatores A e B, respectivamente. Portanto, as estimativas do desvio de padrão de $\hat{\beta}_3$ e $\hat{\beta}_4$ são as mesmas e conseqüentemente possuem as mesmas amplitudes dos intervalos de confiança (Tabela 5.13). Por isso, os resultados e as recomendações da amplitude do intervalo de confiança para o β_4 foram os mesmos do item 5.4.4 para o β_3 . As equações para cada tipo delineamento estão apresentadas na Figura 5.17 e são dadas por:

$$IC(\hat{\beta}_4)_{0,95} = 40,94 + 1,52CV - 5,47Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR);}$$

$$IC(\hat{\beta}_4)_{0,95} = 17,69 + 0,68CV - 2,36Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo).}$$

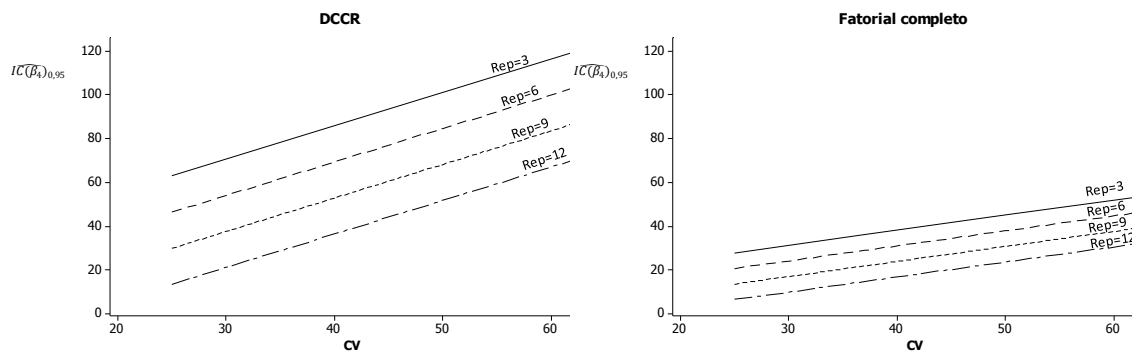


Figura 5.17- Estimativas do intervalo de confiança do β_4 em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

Comparativamente em todos os cenários estudados, o DCCR apresentou maior IC dos coeficientes das superfícies de resposta, do que o fatorial completo. Porém, como seu potencial de acerto foi em alguns casos, superior, tal fato se deveu ao seu menor tamanho experimental, que prejudicou na representatividade dos efeitos aleatórios.

Portanto, para atingir um IC que dê a mesma precisão do fatorial completo, deve-se trabalhar com mais repetições por tratamento.

Como um todo, tanto o fatorial completo quanto o DCCR foram eficientes em delinear tratamentos para o ajuste de superfície de resposta. Todas as porcentagens de acertos dos parâmetros foram maiores que 87%, indicando, como no item 5.2, que ambos os delineamentos proporcionam estimativas não tendenciosas para os parâmetros.

Para os parâmetros referentes aos termos lineares da superfície de resposta (β_1 e β_2) o delineamento fatorial completo se mostrou mais eficiente nas estimativas de seus parâmetros. Já o DCCR se mostrou mais eficiente quando avaliadas as porcentagens de acerto dos parâmetros referentes aos termos quadráticos da equação (β_3 e β_4). Isso deve-se ao fato do DCCR ser um delineamento introduzido por Box e Wilson (1951) para ajustes de superfícies de resposta de segunda ordem e seus pontos axiais contribuírem para as estimativas dos termos quadráticos (CAMPOS, 1967).

No entanto, as porcentagens de acerto dos parâmetros são influenciadas pelos intervalos de confiança. Quanto maior o intervalo de confiança, maior foi a probabilidade de se conter o parâmetro.

Foi observado que, para todos os parâmetros, os intervalos de confiança obtidos aumentaram de amplitude com o aumento do CV. Isto mostra a grande variação a que estão sujeitos em meio a altos CV ($CV > 25\%$) (CAMPOS, 1967). Esse aumento foi acentuado no DCCR, o que leva conseqüentemente às estimativas da superfície de reposta menos confiáveis nesse delineamento. Nessa situação é indicado o uso do fatorial completo, como recomendado por Penteado e Batista (1971), Campos (1967), Mateus (2001) e Perázio (2010) ou o DCCR com um aumento do número de repetições por tratamento, como também observado por Zagatto e Pimentel Gomes apud Campos (1972), Miranda (1976) e Perázio (2010) em seus estudos.

5.5. Coeficiente de variação

A equação de regressão ajustada para a diferença absoluta entre o coeficiente de variação estimado e verdadeiro em função das combinações entre delineamento, coeficiente de variação e número de repetições por tratamento é dada por:

$$\widehat{DCV} = 0,00173 - 0,00191Del + 0,00293CV - 0,00027Rep - 0,00288Del \times CV + 0,00028 Del \times Rep. (R^2 = 99,8\%)$$

Devido às interações delineamento x coeficiente de variação e delineamento x número de repetições terem sido significativas ($p < 0,05$), as equações de regressão para cada delineamento estão apresentadas na figura 5.18 e são dadas por:

$$\widehat{DCV} = 0,00173 + 0,00293CV - 0,00027Rep, \text{ para } Del = 0 \text{ (DCCR)}$$

$$\widehat{DCV} = -0,0018 + 0,00005CV - 0,000006Rep, \text{ para } Del = 1 \text{ (Fatorial completo)}$$

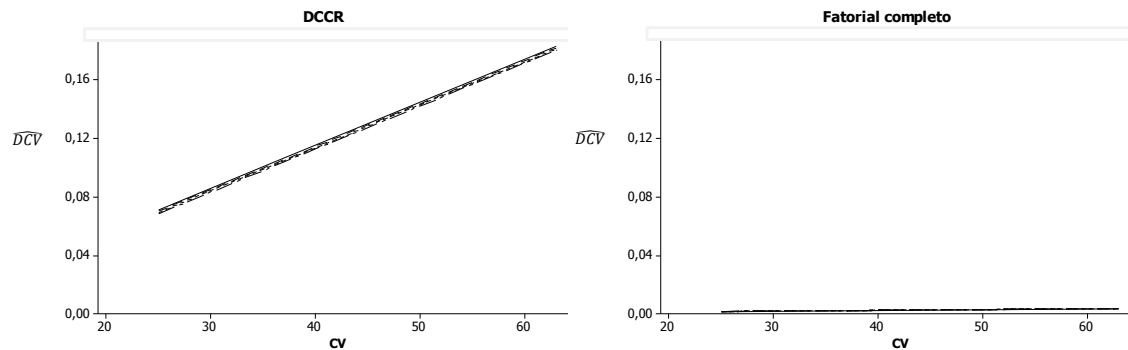


Figura 5.18- Estimativas da DCV em função do CV, para os delineamentos DCCR e fatorial completo com 3, 6, 9 e 12 repetições por tratamento.

A distância entre o coeficiente de variação estimado e o verdadeiro aumenta ($p < 0,05$) em função do aumento do CV e diminui ($p < 0,05$) em função do aumento do número de repetição. No delineamento composto central, a DCV foi mais influenciada pelo CV e pelo número de repetições por tratamento do que no fatorial completo. No entanto, o aumento da DCV provocado pelo CV no DCCR, só é compensado com um número de repetições muito alto, ($Rep > 12$), indicando que em meio a altos CV ($CV > 25\%$) deve ser preferido o delineamento fatorial completo.

No entanto, ambos os delineamentos forneceram boas estimativas do CV, isto é, estimativas próximas a realidade, a menor diferença entre o CV estimado e o CV simulado foi de 0,0015403 e a maior foi de 0,182466.

Cabe ressaltar que a existência de um coeficiente que estime a precisão experimental é de muita importância, visto que trabalhos científicos são realizados e comparados por meio desses. Trabalhos que proporcionam menores CV fornecem estimativas mais confiáveis.

Portanto, o uso do fatorial completo, devido ao maior número de unidades experimentais geradas, proporcionou estimativas mais adequadas dos efeitos dos fatores conhecidos e desconhecidos.

6. CONCLUSÕES

- O desempenho do fatorial completo em relação DCCR aumenta em função do aumento do CV e da diminuição do número de repetições por tratamento.
- Sob condições experimentais mais bem controladas recomenda-se o DCCR por ser um delineamento de tratamento mais econômico.
- Sob condições experimentais menos controladas, recomenda-se o fatorial completo e recomenda-se o DCCR com um número maior de repetições por tratamento.
- O aumento do CV prejudica a qualidade de ajuste do fatorial completo e principalmente a do DCCR.
- O aumento do número de repetições melhora a qualidade de ajuste do fatorial completo e do DCCR.
- A qualidade de ajuste proporcionada pelo delineamento de tratamento não depende só da quantidade dos mesmos, mas principalmente da quantidade de unidades experimentais suficientes para proporcionar estimativas adequadas dos efeitos dos fatores conhecidos e desconhecidos.
- Nas ciências agrárias o DCCR pode ser recomendado aumentando o número de repetições por tratamento, por fornecer estimativas tão confiáveis quanto às fornecidas pelo fatorial completo com um menor número de repetições, utilizando um menor número de combinação entre os níveis dos fatores.

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.

AMARAL, A. M *et al.* **Avaliação do coeficiente de variação como medida da precisão na experimentação com citros.** Pesq. Agropec. Bras., v.32, p.1221-1225,1997

CARVALHO, A.V *et al.* **Avaliação do efeito da combinação de pectina, gelatina e alginato de sódio sobre as características de gel de fruta estruturada a partir de “mix” de polpa de cajá e mamão, por meio da metodologia de superfície de resposta.** Acta Amazonica. Vol 41(2), p. 267 – 274, 2011.

BARTHUS, R.C. *et al.* **Otimização das condições de extração de saponinas em ampelozizyphus amazonicus usando planejamento experimental e metodologia de superfície de resposta.** Quim. Nova, Vol. 34, No. 9, p.1629-1633, 2011.

COUTO, M.F **Classificação da qualidade de experimentos com cana de açúcar.** Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, 63 p., 2010.

BARROS NETO, B *et al.* **Planejamento e otimização de experimentos.** Campinas, SP: UNICAMP, 1995.

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, 1987.

BOX, G.E.P.; WILSON, K.B. **On the experimental attainment of optimum conditions.** Journal of the Royal Statistical Society. V.13, p.1-45, 1951.

CAMPOS, H. de. **Aspectos da aplicação das superfícies de resposta a ensaios fatoriais 3³ de adubação.** Piracicaba, 82p. (tese doutorado)-ESALQ/USP, 1967.

DRAPER, N.R.; HERZBERG, A.M. **Futher second order rotatable designs.** Annual Mathematics statistical, n.39, p.1995-2001, 1968.

FONSECA, F.A. da, *et al.* **Efeito da temperatura e do tempo de imersão da etapa de encharcamento sobre a cor dos grãos de arroz parboilizado de cultivares de terras altas.** Semina: Ciências Agrárias, Londrina, v. 32, n. 1, p. 221-234, jan./mar. 2011.

JUDICE, M.G. **Avaliação do coeficiente de variação em experimentos zootécnicos**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG, 40p., 2000.

KHURI, A.I.; CORNELL, J.A. **Response Surfaces**. 2nd ed. Dekker, New York, p.71 -211, 1987.

MASON, D.D. **Funcional Models and Experimental Designs for Characterizing Response Curve and Surfaces**. 1956

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. *et al.* **Efeito da temperatura, umidade relativa e velocidade do ar em frangos de corte**. Revista Engenharia na Agricultura, Viçosa, MG, v.13. n.4, 277-286, Out./Dez., 2005

MIRANDA, L. E. C. de. **Avaliação do efeito residual de fertilizantes através de coeficientes da superfície de resposta ajustada ensaios de adubação de milho (zea mays L.)**. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 1976.

MYERS, R.H *et al.* **Response Surface Methodology: 1966-1988**. Technometrics, Virginia, v. 31, n. 2, p. 137-157, maio 1989.

MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C. **Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments**. New York: John Wiley & Sons, 700 p., 1995.

NÓBREGA, J.P.R. *et al.* **Poda do pseudocaule e doses de nitrogênio e boro na produção de mudas de bananeira ‘Pacovan’**. Semina: Ciências Agrárias, Londrina, v. 31, suplemento 1, p. 1205-1218, 2010.

PERÁZIO, B. A. A. **Efeitos dos pontos axiais e centrais sobre a eficiência do delineamento composto central**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, 2010.

PENTEADO, A.F.; BATSITA, LB. **Eficiência do ensaio composto central (Box) em comparação com os fatoriais completos de dois fatores**. In: Congresso Brasileiro de Ciências do solo,13., 1971.

PIMENTEL GOMES, F. **Curso de estatística experimental**. São Paulo: USP/ESALQ, 467p. 1985.

PIMENTEL GOMES, F; CAMPOS, H. **The efficiency of factorial 33 designs as compared to a central composite rotatable design.** Potash Rev., Basel, v.72, p. 1-3, 1972.

PIRES, A. **Estimação por intervalos.** Departamento de Matemática-Instituto Superior Técnico, Lisboa, 2000.

SILVA, A.R. da *et al.* **Avaliação do coeficiente de variação experimental para caracteres de frutos de pimenteiras.** Revista Ceres, Viçosa, v58, n.2, p.168-171, mar/abr, 2011.

SILVA, E.M.B; MONTEIRO, F.A. **Nitrogênio e enxofre na adubação e em folhas diagnósticas e raízes do capim braquiária em degradação.** Revista Brasileira de Zootecnia., v.39, n.8, p.1641-1649, 2010.

TEJEDA, H. **Evaluación de algunos aspectos de la metodología para determinar funciones de respuesta a la fertilización e su utilización económica.** Seminário internacional sobre investigación econômica y experimentación agrícola. Santiago, Chile, 1996.

ZAGATTO, A.G., PIMENTEL GOMES, F. **Aspectos econômicos da adubação.** Em MALAVOLTA, E. M. Manual de Química Agrícola – Adubos e Adubação, 2^aed. São Paulo, 1967.