DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL COM TRÊS ESTRELAS[1]

ARMANDO CONAGIN[2] e JOASSY DE PAULA NEVES JORGE[3]

RESUMO - O tipo de delineamento da família do composto central, aqui considerado, designado por "composto central com três estrelas", apresenta pontos fatoriais nos níveis ± 1, três estrelas nos níveis $\pm \alpha$, $\pm \gamma \alpha$, $\pm \tau \alpha$, e pontos centrais. Na pesquisa com fertilizantes, as respostas podem variar de ano a ano, devido à variabilidade de solo e clima. Se for utilizada uma amplitude apropriada de dosagens, nos anos de condições climáticas favoráveis as superfícies de resposta obtidas são crescentes até as dosagens mais altas; em anos desfavoráveis, ou quando as quantidades utilizadas se tornam excessivas, elas podem apresentar uma área em platô, ou mesmo incrementos decrescentes, a partir de determinado nível. Os delineamentos propostos se adaptam a essas peculiaridades devido à sua estrutura e número de níveis; a eliminação de pontos com respostas decrescentes ou na área de platô permite a determinação de estimativas não-enviesadas para os coeficientes do modelo, possibilitando decisões econômicas mais adequadas. São apresentadas três tabelas para números de fatores entre dois e sete, com delineamentos ortogonais casualizados e com delineamentos ortogonais ou quase-ortogonais divisíveis ortogonalmente em blocos.

Termos para indexação: superfície de resposta, ortogonalidade, colocação em blocos.

CENTRAL COMPOSITE DESIGN WITH THREE STARS

ABSTRACT - The central composite designs, here considered, present factorial points at levels ± 1, three stars at levels $\pm \alpha$, $\pm \gamma \alpha$, $\pm \tau \alpha$, and central points. In fertilizer research, the responses may vary from year to year due to climatic and soil variability. If a proper range of dosages is utilized, in normal or good years the obtained response surfaces increase up to the high dosages; in unfavourable years, they may present a plateau area or even decrescent response beyond a certain level. The proposed designs fit these peculiarities well because of their structure and number of levels; the elimination of points in the decrescent or in the plateau area allows the determination of unbiased estimates for the model coefficients, thus furnishing more realistic economical decisions. Orthogonal, completely randomized, and orthogonal or quasi-orthogonal, orthogonally blocked designs are presented in three tables.

Index terms: response surface, orthogonality, blocking.

INTRODUÇÃO

Os delineamentos conhecidos como compostos centrais foram desenvolvidos por Box & Wilson (1951), Box & Hunter (1957) e outros. Têm sido bastante utilizados não só na pesquisa científica, como na tecnologia e na indústria. Constam basicamente de uma parte fatorial (ou fração de um fatorial), de pontos axiais nos níveis $-\alpha$ e $+\alpha$ de cada fator para nível médio (zero) dos demais fatores, e de pontos localizados no centro do delineamento. São bastante flexíveis, possibilitando ao pesquisador a escolha, para um número determinado de fatores, entre os tipos não-ortogonais, ortogonais, rotacionais (Davies 1954, Myers 1971); podem, ainda, em certas circunstâncias, ser subdivididos ortogonalmente em blocos sem perder as demais características (Conagin 1982a).

A extensão desses delineamentos para explorar maior número de níveis, pela adição de mais uma estrela, criou o chamado composto central com duas estrelas (Conagin 1982).

A adição de uma terceira estrela possibilita um novo tipo, a que se propõe o nome de composto central com três estrelas. O primeiro delineamento desse tipo, para aplicação a ensaios de adubação, é o chamado delineamento Guadalupe (Páez & Silva 1975); consta de um fatorial 2^{k-g} nos níveis -3 e $+3$, k estrelas nos níveis ± 1, ± 2 e ± 3 e c pontos centrais, no nível zero; é um tipo não-ortogonal. Foi efetuado um estudo de suas propriedades a partir da adaptação de uma superfície de resposta com modelo de regressão linear polinomial quadrática, conseguida a ortogonalização do delineamento e estudada sua eficiência, para três

[1] Aceito para publicação em 8 de julho de 1983.

[2] Engº Agrº, Consultor de Métodos Quantitativos da EMBRAPA - Convênio IICA/EMBRAPA.

[3] Lic. Matemática, Mestre em Est. e Exp. Agr., Instituto Agronômico de Campinas, Caixa Postal 28, CEP 13100 - Campinas, SP.

fatores (Jorge 1980). Posteriormente, foi dada fórmula do valor de α que ortogonaliza o delineamento para k fatores (Jorge s.n.t.).

No presente artigo é oferecida maior opção aos pesquisadores; são apresentadas, em tabelas, para dois a sete fatores, soluções para delineamentos, com três estrelas, ortogonais completamente casualizados, e ortogonais, ou quase-ortogonais, subdivisíveis ortogonalmente em blocos. Foram tomados iguais a $\pm$ 1 os níveis dos pontos fatoriais e de um dos axiais, para, em caso de respostas em platô, ser possível analisar a parte central do delineamento como um composto central do tipo quase D-ótimo (Lucas 1974).

O DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL COM TRÊS ESTRELAS: DESENVOLVIMENTO TEÓRICO E ILUSTRAÇÃO

Generalidades

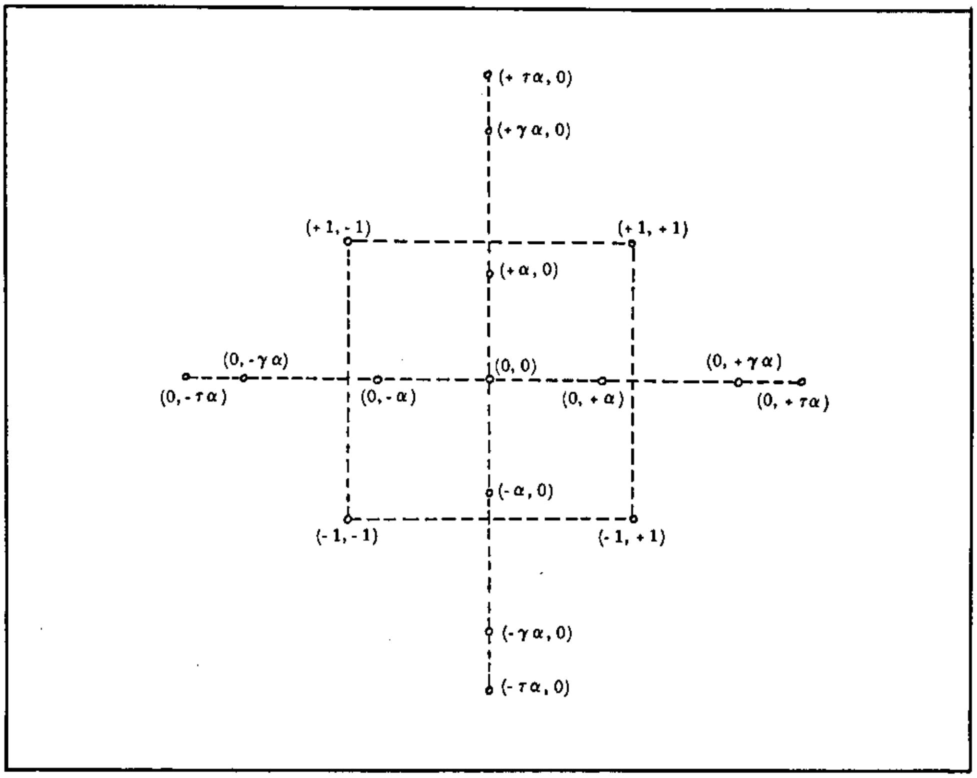
Um delineamento composto central com v estrelas tem um total $N = 2^{k-g} + v(2k) + n$ de pontos; destes, $F = 2^{k-g}$ representam a parte fatorial (onde k é o número de fatores, g o índice de fracionamento), v(2k) constitui o número de pontos axiais nas v estrelas e n representa o número de pontos centrais. Tem-se $N = F + T$, com $T = v(2k) + n$.

O modelo polinomial de segundo grau para o delineamento completamente casualizado contendo k fatores e que inclui as interações simples, é o que se segue:

$$Y_u = \beta_0' + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} (x_{iu}^2 - c) + \sum_{i<}^{k} \sum_{j}^{k} \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + \epsilon_u \qquad (1)$$

onde x_i são variáveis reduzidas e u = 1, 2, . . . , N.

A seguir é apresentada a configuração desse delineamento para o caso em que k = 2, os níveis do fatorial são $\pm$ 1, os das v = 3 estrelas são $\pm\, \alpha$, $\pm\, \gamma\alpha$ e $\pm\, \tau\alpha$, e existe só um ponto central no nível zero.



A matriz X, das coordenadas, e o vetor coluna $\underline{Y}$, das observações, são transcritos a seguir:

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cccccc} x_0 & x_1 & x_2 & (x_1^2 - c) & (x_2^2 - c) & x_1 x_2 \end{array} \\
X = & \begin{bmatrix}
1 & -1 & -1 & 1-c & 1-c & 1 \\
1 & 1 & -1 & 1-c & 1-c & -1 \\
1 & -1 & 1 & 1-c & 1-c & -1 \\
1 & 1 & 1 & 1-c & 1-c & +1 \\
1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 - c & -c & 0 \\
1 & -\gamma\alpha & 0 & \gamma^2\alpha^2 - c & -c & 0 \\
1 & -\tau\alpha & 0 & \tau^2\alpha^2 - c & -c & 0 \\
1 & \alpha & 0 & \alpha^2 - c & -c & 0 \\
1 & \gamma\alpha & 0 & \gamma^2\alpha^2 - c & -c & 0 \\
1 & \tau\alpha & 0 & \tau^2\alpha^2 - c & -c & 0 \\
1 & 0 & -\alpha & -c & \alpha^2 - c & 0 \\
1 & 0 & -\gamma\alpha & -c & \gamma^2\alpha^2 - c & 0 \\
1 & 0 & -\tau\alpha & -c & \tau^2\alpha^2 - c & 0 \\
1 & 0 & \alpha & -c & \alpha^2 - c & 0 \\
1 & 0 & \gamma\alpha & -c & \gamma^2\alpha^2 - c & 0 \\
1 & 0 & \tau\alpha & -c & \tau^2\alpha^2 - c & 0 \\
1 & 0 & 0 & -c & -c & 0
\end{bmatrix}
\end{array}
\quad ; \quad
\underline{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \\ Y_5 \\ Y_6 \\ Y_7 \\ Y_8 \\ Y_9 \\ Y_{10} \\ Y_{11} \\ Y_{12} \\ Y_{13} \\ Y_{14} \\ Y_{15} \\ Y_{16} \\ Y_{17} \end{bmatrix}
$$

A matriz S = X'X é a que se segue:

$$
S = X'X = \begin{bmatrix}
N & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & d & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & d & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & p & q & 0 \\
0 & 0 & 0 & q & p & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h
\end{bmatrix}, \text{ onde } S_2 = \begin{bmatrix} p & q \\ q & p \end{bmatrix}
$$

Na matriz S,

$$N = 4 + 3\,(2 \times 2) + 1 = 17; \quad d = 4 + 2\alpha^2\,(1 + \gamma^2 + \tau^2); \quad c = d \div N$$

$$p = 4\,(1-c)^2 + 2\,(\alpha^2 - c)^2 + 2\,(\alpha^2\gamma^2 - c)^2 + 2\,(\alpha^2\tau^2 - c)^2 + (T-6)\,c^2$$

$$q = 4\,(1-c)^2 - 4c\,(\alpha^2 - c) - 4c\,(\alpha^2\gamma^2 - c) - 4c\,(\alpha^2\tau^2 - c) + (T-12)\,c^2$$

$$h = 4; \quad T = 3\,(2 \times 2) + 1 = 13; \quad F = 2^2 = 4; \quad N = F + T = 17$$

No caso geral com k fatores, haverá, se adotado o modelo (1), $t = 1 + k + k + [\,k\,(k-1) \div 2\,]$ termos a serem estimados; o primeiro corresponde ao componente $\hat{\beta}_0$; k termos correspondem aos β_i (i = 1, 2, . . ., k); k termos aos β_{ii} (i = 1, 2, . . ., k) e C_k^2 termos correspondem às interações simples. A matriz S = X'X terá, na diagonal principal, o termo N, seguido de k termos com o valor d; aparece a matriz quadrada S_k, semelhante à S_2 do exemplo, com valores p correspondentes aos coeficientes dos componentes quadráticos puros β_{ii} e os termos q às covariâncias β_{iijj}, entre eles; existem, ainda,

C_k^2 termos de valor h na diagonal principal, correspondentes às interações simples. Os demais termos de S, não citados, são todos nulos.

A forma da matriz S e de sua inversa S^{-1} é semelhante às obtidas no composto central original e no composto central com duas estrelas (Conagin 1982, Davies 1954, Myers 1971); seus elementos para k fatores, v estrelas, níveis axiais em $\pm\alpha$, $\pm\gamma\alpha$, $\pm\tau\alpha$, . . . , níveis fatoriais em $\pm W$, com n pontos centrais e sendo g o grau de fracionamento do fatorial, são os seguintes:

Quando o delineamento com v estrelas, completamente casualizado, não é ortogonal, existem, de forma semelhante ao composto original e ao com duas estrelas, covariâncias entre os coeficientes quadráticos puros; na análise da variância, a contribuição devida a esses coeficientes do modelo tem que ser testada englobadamente, ou se pode usar o método do resíduo condicionado para testá-los individualmente (Conagin & Jorge 1982b).

$$N = F + v(2k) + n$$

$$d = FW^2 + 2\alpha^2(1 + \gamma^2 + \tau^2 + \ldots); \quad c = d \div N$$

$$p = F(W^2 - c)^2 + 2(\alpha^2 - c)^2 + 2(\gamma^2\alpha^2 - c)^2 + 2(\tau^2\alpha^2 - c)^2 + \ldots + (T - 2v)c^2$$

$$q = F(W^2 - c)^2 - 4c(\alpha^2 - c) - 4c(\gamma^2\alpha^2 - c) - 4c(\tau^2\alpha^2 - c) - \ldots + (T - 4v)c^2$$

$$h = FW^4,$$

onde $F = 2^{k-g}$; $T = v(2k) + n$;

É fácil ver que

$$p = q + 2\alpha^4(1 + \gamma^4 + \tau^4 + \ldots)$$

Cálculo dos coeficientes do modelo

Os coeficientes do modelo são estimados por $\underline{\hat{\beta}} = S^{-1}X'\underline{Y}$; no caso do exemplo, com k = 2 e v = 3, vem:

$$S^{-1} = \begin{bmatrix} 1/17 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e & f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h \end{bmatrix} ; \quad S_2^{-1} = \begin{bmatrix} e & f \\ f & e \end{bmatrix} ; \quad \underline{Y} = \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ E \\ F \end{bmatrix}$$

$$e = \frac{p}{p^2 - q^2} \quad ; \quad f = \frac{-q}{p^2 - q^2}$$

$$\underline{\hat{\beta}} = S^{-1}X'\underline{Y} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0' \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \hat{\beta}_{11} \\ \hat{\beta}_{22} \\ \hat{\beta}_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1/17)A \\ (1/d)B \\ (1/d)C \\ (eD + fE) \\ (fD + eE) \\ (1/h)F \end{bmatrix}$$

onde $A = \Sigma Y_u = Y_1 + Y_2 + \ldots + Y_{17}$

$B = -1(Y_1 + Y_3) + 1(Y_2 + Y_4) + \alpha(Y_8 - Y_5) + \gamma\alpha(Y_9 - Y_6) + \tau\alpha(Y_{10} - Y_7)$

$C = -1(Y_1 + Y_2) + 1(Y_3 + Y_4) + \alpha(Y_{14} - Y_{11}) + \gamma\alpha(Y_{15} - Y_{12}) + \tau\alpha(Y_{16} - Y_{13})$

$$D = (1-c)\left[Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4\right] + (\alpha^2 - c)(Y_5 + Y_8) + (\gamma^2 \alpha^2 \; c)(Y_6 + Y_9) + (\tau^2 \alpha^2 - c)(Y_7 + Y_{10}) - c(Y_{11} + Y_{12} + \ldots + Y_{17})$$

$$E = (1-c)\left[Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4\right] + (\alpha^2 - c)(Y_{11} + Y_{14}) + (\gamma^2 \alpha^2 - c)(Y_{12} + Y_{15}) + (\tau^2 \alpha^2 - c)(Y_{13} + Y_{16}) - c(Y_5 + Y_6 + \ldots + Y_{10} + Y_{17})$$

$$F = -1(Y_2 + Y_3) + 1(Y_1 + Y_4)$$

A soma de quadrados devida aos coeficientes do modelo é dada por:

$$\text{SQ regressão} = \underline{\hat{\beta}}'X'\underline{Y} = \beta'_0 A + \hat{\beta}_1 B + \hat{\beta}_2 C + (\hat{\beta}_{11} D + \hat{\beta}_{22} E) + \hat{\beta}_{12} F$$

A soma referente aos componentes quadráticos puros, entre parênteses, é calculada englobadamente, e tem dois graus de liberdade.

A análise da variância e o teste de significância dos coeficientes do modelo podem ser efetuados facilmente.

As variâncias das estimativas dos coeficientes do modelo são:

$$V(\hat{\beta}'_0) = \sigma^2/N \; ; \quad V(\hat{\beta}_1) = V(\hat{\beta}_2) = \sigma^2/d \; ;$$

$$V(\hat{\beta}_{12}) = \sigma^2/h$$

$$V(\hat{\beta}_{11}) = V(\hat{\beta}_{22}) = e\,\sigma^2 \; ; \quad \text{Cov}(\hat{\beta}_{11}\, \hat{\beta}_{22}) = f\sigma^2$$

A variância da estimativa de Y_u é dada por:

$$V(\hat{Y}_u) = \sigma^2 \left[1/N + \sum_{i=1}^{k} (x_{iu}^2 \div d) + \sum_{i=1}^{k} (x_{iu}^2 - c)^2\, e + \sum_{i<j}^{k} (x_{iu}^2\, x_{ju}^2 \div h) + 2 \sum_{i<j}^{k} (x_{iu}^2 - c)(x_{ju}^2 - c)\, f \right]$$

Ortogonalização do delineamento

Para ortogonalizar a matriz S, deve-se impor a condição $q = 0$. Substituindo o valor de c na expressão de q, tem-se:

$$Nq = W^4 FT - 4\, W^2 F\, \alpha^2 (1 + \gamma^2 + \tau^2 + \ldots) - 4\left[\alpha^2 (1 + \gamma^2 + \tau^2 + \ldots)\right]^2$$

Com as coordenadas de definição do composto central com v estrelas, a expressão de α que ortogonaliza o delineamento é dada por:

$$\alpha = W \left[\frac{-F + \sqrt{FN}}{2(1 + \gamma^2 + \tau^2 + \ldots)} \right]^{1/2} \qquad (2)$$

Ortogonalização e partição ortogonal em blocos

O modelo polinomial de segundo grau com partição do delineamento em blocos, para k fatores e incluindo suas interações simples, é o que se segue:

$$Y_u = \beta'_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} (x_{iu}^2 - c) + \sum_{i<j}^{k}\sum^{k} \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + \sum_{m=1}^{b} \delta_m (z_{mu} - \bar{z}_m) + \epsilon_u \qquad (3)$$

Para conseguir partição ortogonal em blocos, deve-se impor ao modelo uma série de condições, como tratam detalhadamente Box & Wilson (1951), Myers (1971) e Conagin & Jorge (1979).

Na partição em blocos dos compostos centrais, os pontos axiais e os pontos fatoriais são colocados em blocos diferentes; serão chamados de a_0 e b_0 os números de pontos centrais a serem colocados junto às partes axial e fatorial, respectivamente, com $a_0 + b_0 = n$.

A condições, resumidas, são: a) em cada bloco, considerado como um delineamento de primeiro grau, a soma dos coeficientes das unidades experimentais deve ser nula; b) para o caso do composto central com v estrelas, deve-se verificar a expressão:

$$\left[2\alpha^2 (1 + \gamma^2 + \tau^2 + \ldots) \right] \div \left[FW^2 + 2\alpha^2 (1 + \gamma^2 + \tau^2 + \ldots) \right] = n_a \div N \qquad (4)$$

A expressão (4) indica: a soma de quadrados dos pontos do bloco dos axiais, em relação à soma de quadrados de todos os pontos do delineamento, guarda a mesma proporção que existe entre o número de pontos do bloco dos axiais [$n_a = v\,(2k) + a_0$] e o número total de pontos do delineamento.

Impondo a relação (4) no valor de c e substituindo, na expressão inicial de q, c em função de W, α, γ, τ, . . . , e depois W em função de α, γ, τ, . . . , chega-se à expressão:

$$q = 4\,\alpha^4\,(1 + \gamma^2 + \tau^2 + \dots)^2 \left\{ \frac{(N - n_a)^2 - NF}{n_a^2\,F} \right\}$$

Fazendo q = 0, a condição para ortogonalidade e partição ortogonal em blocos é dada por $n_a = N - \sqrt{NF}$, com a restrição de n_a ser um número inteiro e maior ou igual a v (2k).

Encontrado o número n_a, fazendo W = 1 e escolhendo-se dois dentre os três valores α, γ e τ, determina-se o terceiro deles na expressão (4).

Na partição ortogonal em blocos, os coeficientes a eles correspondentes, sendo independentes dos outros do modelo, possibilitam que a soma de quadrados para blocos seja calculada na maneira tradicional.

A variância da estimativa de Y_u, no delineamento ortogonal, é dada por:

$$V(\hat{Y}_u) = \sigma^2 \left[1/N + \sum_{i=1}^{k} (x^2_{iu} \div d) + \sum_{i=1}^{k} [(x^2_{iu} - c)^2 \div p] + \sum_{i<j}^{k} (x^2_{iu}\, x^2_{ju} \div h) \right]$$

TABELAS DE DELINEAMENTOS CENTRAIS COM TRÊS ESTRELAS

Compostos centrais com três estrelas, ortogonais

Embora as fórmulas sejam válidas para v estrelas, os resultados apresentados se restringem a v = 3. Colocando os pontos fatoriais nos níveis W = ± 1 e um único ponto central, para obter delineamentos com o menor número possível de pontos, e tomando-duas relações diferentes para os valores de α, $\gamma\,\alpha$ e $\tau\alpha$, foram construídos, com base em (2), delineamentos compostos centrais com três estrelas, ortogonais, cujas características são dadas nas Tabelas 1 e 2.

As características da Tabela 1 foram obtidas para níveis $\pm\,\alpha$, $\pm\,2\,\alpha$, $\pm\,3\,\alpha$; as da Tabela 2, para níveis $\pm\,\alpha$, $\pm\,\alpha\sqrt{2}$, $\pm\,\alpha\sqrt{3}$, considerados capazes de atender às diferentes respostas ecológicas.

Para k = 2 e para k > 5, o desbalanço entre o número de pontos axiais e de pontos fatoriais é bastante sério, o que conduz à obtenção de uma amplitude demasiadamente compacta (k = 2) ou excessiva (k ⩾ 6), para os níveis do delineamento. Por isso, os delineamentos dessas tabelas se prestam mais para experimentos com três, quatro ou cinco fatores. Podem ser preferidos nos casos em que não haja suspeita de existência de gradiente

TABELA 1. Delineamentos compostos centrais com três estrelas, ortogonais, com um único ponto central; apresentam nove níveis: pontos axiais em $\pm\,3\alpha$; $\pm\,2\alpha$; $\pm\,\alpha$; pontos fatoriais em $\pm$ W = 1 e ponto central em zero. Características: k (fatores); N (pontos do delineamento); F (pontos do fatorial); n (pontos centrais); $c = d \div N$; $d = F + 28\alpha^2$; $p = 196\alpha^4$; h = F.

Características	k = 2	k = 3	k = 4	k = 5	k = 5	k = 6	k = 7
N	17	27	41	47	63	69	107
F	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}	2^5	2^{6-1}	2^{7-1}
n	1	1	1	1	1	1	1
α	0,3894	0,4891	0,5859	0,6387	0,6788	0,7317	0,8184
2α	0,7787	0,9782	1,1718	1,2774	1,3575	1,4633	1,6368
3α	1,1682	1,4673	1,7577	1,9161	2,0364	2,1951	2,4552
W	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
c	0,4850	0,5444	0,6247	0,5835	0,7127	0,6810	0,7734
d	8,2448	14,6976	25,6124	27,4240	44,8996	46,9884	82,7544
p	4,5080	11,2112	23,0996	32,6269	41,5999	56,1630	87,9319
h	4,0000	8,0000	16,0000	16,0000	32,0000	32,0000	64,0000

TABELA 2. Delineamentos compostos centrais com três estrelas, ortogonais, com um único ponto central; apresentam nove níveis: pontos axiais em $\pm \alpha\sqrt{3}$; $\pm\alpha\sqrt{2}$; $\pm\alpha$; pontos fatoriais em $\pm W = 1$ e ponto central em zero. Características: k (número de fatores); N (pontos do delineamento); F (pontos do fatorial); n (pontos centrais); $c = d \div N$; $d = F + 12\alpha^2$; $p = 28\alpha^4$; $h = F$.

Características	k = 2	k = 3	k = 4	k = 5	k = 5	k = 6	k = 7
N	17	27	41	47	63	69	107
F	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}	2^5	2^{6-1}	2^{7-1}
n	1	1	1	1	1	1	1
α	0,5948	0,7471	0,8950	0,9756	1,0368	1,1176	1,2501
$\alpha\sqrt{2}$	0,8412	1,0565	1,2657	1,3797	1,4663	1,5806	1,7679
$\alpha\sqrt{3}$	1,0302	1,2940	1,5502	1,6898	1,7958	1,9358	2,1653
W	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
c	0,4850	0,5443	0,6247	0,5835	0,7127	0,6810	0,7734
d	8,2456	14,6972	25,6120	27,4228	44,9000	46,9892	82,7524
p	3,5049	8,7213	17,9648	25,3712	32,3575	43,6870	68,3769
h	4,0000	8,0000	16,0000	16,0000	32,0000	32,0000	64,0000

de fertilidade na experimentação de campo, ou o mesmo seja irrelevante, como em pesquisas industriais ou tecnológicas, ou, na área agronômica, em pesquisas de nutrição, feitas com vasos em casas de vegetação, com coeficientes de variação normalmente bem menores que na experimentação de campo e onde o gradiente praticamente não existe.

Compostos centrais com três estrelas, ortogonais ou quase-ortogonais, com partição ortogonal em blocos

Alguns dos resultados obtidos encontram-se na Tabela 3; todos eles proporcionam partição ortogonal em blocos, com soluções ortogonais ou quase-ortogonais para os componentes do modelo (3); além do nível do fatorial, também um dos níveis axiais foi mantido sempre igual a 1. Na escolha entre soluções próximas, foram levados em conta e distribüição equilibrada entre os níveis e o valor mais próximo de 3 para a relação $\Sigma x_{iu}^4 \div \Sigma x_{iu}^2 x_{ju}^2$, que é a verificada quando os pontos eqüidistantes do centro têm variâncias iguais (Box & Hunter 1957).

A alocação dos tratamentos da parte fatorial, nos blocos, deve ser feita de acordo com o confundimento adotado, caso sejam utilizados mais de dois blocos; tanto o assunto confundimento como o fracionamento, quando não se usar o fatorial completo, são muito bem abordados em Davies (1954), Hartley (1959) e Myers (1971).

Como a soma de quadrados para blocos pode ser calculada diretamente, de maneira usual, se, por exemplo, o delineamento apresentar três blocos B_a (dos tratamentos axiais), B_1 e B_2 (com partes do fatorial), então:

$$\text{S.Q. blocos} = (B_a^2 \div n_a) + (B_1^2 \div n_1) + (B_2^2 \div n_2) - (\Sigma Y_u)^2 \div N$$

onde $n_a = v(2k) + a_0$; $n_1 = n_2 = (F + b_0) \div 2$.

Considerando o delineamento para $k = 3$, ortogonal, com fatorial completo, $a_0 = 12$, $b_0 = 12$, colocado em três blocos, a análise da variância teria a configuração dada a seguir:

F.V.	S.Q.	G.L.	Q.M.
Total	ΣY_u^2	50	
Regressão	$\underline{\hat{\beta}}'X'\underline{Y}$	10	Q.M. regressão
Blocos	$\Sigma B_i^2 \div n_i - (\Sigma Y_u)^2 \div N$	2	Q.M. blocos
Desvios de regressão	DR	17	$\hat{\sigma}^2 + f(\Delta)$
Erro verdadeiro	EV	21	$\hat{\sigma}^2$

TABELA 3. Composto central com três estrelas. Delineamentos ortogonais ou quase perfeitamente ortogonais (*) com número de pontos centrais que proporciona partição ortogonal em blocos. Características: k (fatores); N (pontos do delineamento); F (pontos do fatorial); a_0 = pontos centrais no bloco dos axiais; b_0 = pontos centrais no bloco dos fatoriais; c = d ÷ N; d, p, q, h são elementos da matriz S.

Características	k = 2	k = 3*	k = 3	k = 4	k = 4*	k = 4	k = 5	k = 6	k = 7
N	25	36	50	50	56	64	64	98	98
F	2^2	2^3	2^3	2^{4-1}	2^4	2^4	2^{5-1}	2^{6-1}	2^{7-2}
a_0	3	1	12	6	2	8	2	6	0
b_0	6	9	12	12	14	16	16	24	24
Nº blocos	2, 3	2	2, 3	2, 3	2, 3	2,3,5	2,3,5	2,3,5	2,3,5
α	0,5000	0,8000	1,7321	1,7321	1,4708	2,0000	2,0000	2,0000	2,0000
$\gamma\alpha$	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$\tau\alpha$	1,3229	1,6824	1,4142	1,4142	1,9416	1,7321	1,7321	2,6457	2,6457
W	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
c	0,4000	0,4706	0,4000	0,4000	0,5333	0,5000	0,5000	0,5714	0,5714
d	10,0000	16,9411	20,0000	20,0000	29,8662	32,0000	32,0000	56,0000	56,0000
q	0,0000	0,0277	0,0000	0,0000	0,0711	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
p	8,2500	18,8707	28,0000	28,0000	39,8537	52,0000	52,0000	132,0000	132,0000
h	4,0000	8,0000	8,0000	8,0000	16,0000	16,0000	16,0000	32,0000	32,0000
$\Sigma x_{iu}^4 \div \Sigma x_{iu}^2 x_{ju}^2$	3,0625	3,3588	4,5003	4,5003	3,4909	4,2500	4,2500	5,1250	5,1250

A estimativa do erro verdadeiro, $\hat{\sigma}^2$, é calculada a partir da soma dos desvios, ao quadrado, entre os doze pontos centrais do bloco axial e sua respectiva média (com 11 graus de liberdade), mais os desvios, ao quadrado, dos seis pontos centrais de cada um dos dois blocos do fatorial, em relação à respectiva média; a soma de quadrados EV tem, em correspondência, 11 + 5 + 5 graus de liberdade. A estimativa dos desvios da regressão, DR, é obtida por diferença entre o total geral e os demais itens calculados. No quadrado médio de DR, f (Δ) representa a contribuição devida a outros termos de ordem mais elevada não incluídos no modelo polinomial de segundo grau.

O composto central com três estrelas permite uma redução para duas estrelas ou mesmo para uma, possibilitando determinação mais correta dos coeficientes do modelo e análise econômica sobre a parte racional da área de decisão econômica; se ele for subdivisível em blocos, os tratamentos deverão ser ajustados para as diferenças entre blocos, se necessário, para só depois se efetuar uma análise com o delineamento reduzido.

Os delineamentos quase-ortogonais exigem normalmente menor número de pontos centrais que os ortogonais; nestes, esse número é excessivo para dois e três fatores.

CONCLUSÕES

Para ensaios na área agronômica, os delineamentos compostos centrais com três estrelas, para k fatores, são mais flexíveis que os compostos centrais originais, os com duas estrelas e certos fatoriais, como os 3^k, uma vez que, se pesquisados na mesma amplitude, poderiam vir a fornecer estimativas não-enviesadas, nos anos desfavoráveis, com possibilidade de análise adequada na parte racional da área de decisão econômica.

Os delineamentos apresentados nas Tabelas 1 e 2, ortogonais, são sugeridos para três, quatro ou cinco fatores, em casos de não-existência ou irrelevância de gradiente, como sucede em pesquisas industriais ou tecnológicas, ou, na área agronômica, em pesquisas em casas de vegetação.

Os delineamentos da Tabela 3 são ortogonais ou quase-ortogonais, divisíveis em blocos; uma amplitude adequada entre os níveis foi conseguida para três, quatro e cinco fatores; com três fatores, o número de pontos centrais necessários para obter ortogonalização completa é muito grande, sendo, por isso, preferível a solução com N = 36. Com quatro fatores a solução com 56 pontos parece a mais indicada, pela amplitude dos níveis dos axiais, número de pontos centrais e valor mais próximo ao da relação para rotacionalidade.

REFERÊNCIAS

BOX, G.E.P. & HUNTER, J.S. Multifactor experimental designs for exploring response surfaces. Ann. Math. Stat., 28:195-241, 1957.

BOX, G.E.P. & WILSON, K.B. On the experimental attainment of optimum conditions. J.R. Stat. Soc. B., 13:1-45, 1951.

CONAGIN, A. Delineamentos compostos centrais ortogonais, rotacionais e divisíveis em blocos. Bragantia, Campinas, 41(5):49-56, Mar., 1982a.

CONAGIN, A. Delineamento composto central com duas estrelas. Pesq. agropec. bras., Brasília, 17(9):1261-9, set. 1982.

CONAGIN, A. & JORGE, J. de P.N. Delineamento duplo central composto com 29 pontos. Bragantia, Campinas, 38:215-35, 1979.

CONAGIN, A. & JORGE, J. de P.N. Delineamentos (1/5) (5 x 5 x 5) em blocos. Bragantia, Campinas, 41(16): 155-68, set., 1982b.

DAVIES, O.L. Design and analysis of industrial experiments. New York, Hafner, 1954. 637p.

HARTLEY, H.P. Smallest composite designs for quadratic response surface. Biometrics, 15:611-24, 1959.

JORGE, J. de P.N. Delineamento Guadalupe para três fatores, analisado através de modelo de regressão polinomial quadrática. Piracicaba, ESALQ, 1980. 56p. Tese Mestrado.

JORGE, J. de P.N. Variações a partir do delineamento Guadalupe. s.n.t.

LUCAS, J.M. Optimum composite designs. Technometrics, 16:561-7, 1974.

MYERS, R.H. Response surface methodology. Boston, Allyn & Bacon, 1971. 243p.

PÁEZ, G. & SILVA, T. Delineamentos de experimentos de adubação. Brasília, EMBRAPA-DMQ/B/7, 1975. 55p.