

PONTO DE SELA E NÍVEIS ÓTIMOS DE NUTRIENTES EM EXPERIMENTOS DE ADUBAÇÃO¹

ADHEMAR SANCHES², IZAIAS RANGEL NOGUEIRA³ e DILERMANDO PERECIN⁴

RESUMO - Quando a superfície de resposta tem um ponto de sela ao invés de um ponto de máximo, é de grande importância, do ponto de vista prático, obter soluções alternativas para os níveis ótimos, i.e., a combinação de doses de nutrientes que dá a produção máxima. Três soluções alternativas foram estudadas por simulação: o ponto de máximo absoluto (ponto de máximo fronteira) na região experimental, o ponto de máximo experimental e o ponto de sela. Com exceção do ponto de sela, as soluções apresentaram boas propriedades como substitutas dos níveis ótimos. Utilizando o critério da frequência de máximos, também foi feita uma comparação entre nove delineamentos de tratamentos com três fatores e 3, 5, 7 e 9 níveis. O melhor delineamento de tratamentos foi o fatorial 3³ com níveis igualmente espaçados.

Termos para indexação: superfície de resposta, experimentos de adubação, produção máxima, níveis ótimos.

SADDLE POINT AND OPTIMUM LEVELS OF NUTRIENTS IN FERTILIZER TRIALS

ABSTRACT - When the response surface has a saddle point instead of a point of maximum, it is of great importance, from the practical viewpoint, to obtain alternative solutions for the optimum levels, i.e., the combination of dosis that gives the maximum yield. Three alternative solutions were studied by simulation: the point of absolute maximum (frontier point of maximum) in the experimental region, the experimental point of maximum, and the saddle point. Except the saddle point, the solutions presented good properties as the substitutes of the optimum levels. By using the criterion of frequency of maxima, a comparison was also made among nine treatment designs with three factors and 3, 5, 7 and 9 levels. The best treatment design was the 3³ factorial with equally spaced levels.

Index terms: response surface, fertilizer experiments, maximum yield, optimum levels.

INTRODUÇÃO

Em um experimento de adubação, quando se quer representar a produção η (em kg/ha, por exemplo) de uma certa cultura em função dos níveis X_i , $i = 1, 2, \dots, k$, de k nutrientes, tem sido bastante utilizada a função polinomial quadrática em k variáveis, principalmente após o trabalho de Box & Wilson (1951). Assim, por exemplo, para $k = 3$ e para a u -ésima combinação de níveis (tratamento),

$$X_u = (X_{1u}, X_{2u}, X_{3u})', \quad u = 1, 2, \dots, N$$

o modelo matemático de regressão para a produção observada Y_u é representado por

$$Y_u = \beta_0 + \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_3 X_{3u} + \beta_{11} X_{1u}^2 + \beta_{22} X_{2u}^2 + \beta_{33} X_{3u}^2 + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + \beta_{13} X_{1u} X_{3u} + \beta_{23} X_{2u} X_{3u} + e_u,$$

onde e_u é o erro aleatório correspondente a Y_u , com as suposições habituais de que e_u , $u = 1, 2, \dots, N$ são não correlacionados e de mesma variância σ^2 . Na notação matricial, tem-se

$$Y = X\beta + e$$

onde: $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N)'$

$$\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}, \beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{23})'$$

$$e = (e_1, e_2, \dots, e_N)'$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{21} & X_{31} & X_{11}^2 & X_{21}^2 & X_{31}^2 & X_{11}X_{21} & X_{11}X_{31} & X_{21}X_{31} \\ 1 & X_{12} & X_{22} & X_{32} & X_{12}^2 & X_{22}^2 & X_{32}^2 & X_{12}X_{22} & X_{12}X_{32} & X_{22}X_{32} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & X_{1N} & X_{2N} & X_{3N} & X_{1N}^2 & X_{2N}^2 & X_{3N}^2 & X_{1N}X_{2N} & X_{1N}X_{3N} & X_{2N}X_{3N} \end{bmatrix}$$

¹ Aceito para publicação em 20 de setembro de 1988.

² Matemático, Dr., Prof. - Assistente, Dep. de Ciências Exatas da FCAV/UNESP, CEP 14870 Jaboticabal, SP.

³ Eng. - Agr., Dr., Prof. - Titular aposentado, Dep. de Matemática e Estatística da ESALQ/USP, CEP 13400 Piracicaba, SP.

⁴ Eng. - Agr., Dr., Prof. - Titular, Dep. de Ciências Exatas da FCAV/UNESP, CEP 14870 Jaboticabal, SP.

Um problema de interesse é a determinação dos níveis ótimos, i.e., a combinação de níveis $X = (X_1, X_2, X_3)$, para a qual a produção η é máxima. Na prática, contudo, pode ocorrer que a função estimada $\hat{\eta} = X\hat{\beta}$ tenha um ponto de sela (Campos 1967, Vieira 1970, Conagin 1978, Jorge & Conagin 1977, Malheiros & Perecin 1983 e Depizolatti 1983), ao invés de um ponto de máximo e, então, os níveis ótimos não são encontrados.

Em vista disso, torna-se importante a procura de soluções alternativas para esses níveis ótimos não encontrados, bem como de procedimentos que possam minimizar a ocorrência de pontos de sela. Um estudo dessa natureza é feito aqui, a partir de dados experimentais simulados num computador eletrônico, tendo, então, o presente trabalho, os seguintes objetivos:

1. Analisar as possibilidades de se utilizar como substitutos do ponto de máximo não encontrado, os seguintes pontos: a) o próprio ponto de sela; b) o ponto de máximo absoluto de η na região experimental A, que será chamado o ponto de máximo fronteira por estar situado na fronteira de A; c) o ponto correspondente à combinação de níveis utilizada onde se observou a maior resposta, e que será chamado o ponto de máximo experimental.

2. Investigar o aumento do número de níveis de cada fator como uma forma possível de se aumentar a eficiência na obtenção de pontos de máximo.

3. Indicar delineamentos mais apropriados para se obter maior eficiência na obtenção de pontos de máximo, dentre os delineamentos de tratamentos utilizados.

As hipóteses básicas neste trabalho são as seguintes:

a. É conhecida a região experimental A, isto é, para cada fator é conhecido o intervalo de variação dos níveis.

b. As coordenadas do ponto de máximo real (máximo fixado nos modelos para simulação) estão situadas numa posição 80% à direita do extremo inferior do intervalo de variação dos níveis.

c. A função polinomial quadrática em três variáveis X_1, X_2 e X_3 é utilizada como modelo, tanto para a simulação dos dados quanto para a estimação da função de resposta.

MATERIAL E MÉTODOS

O ponto de máximo fronteira

A região experimental A é um subconjunto de R^3 definido por

$$A = \{(X_1, X_2, X_3) \in R^3; a_i \leq X_i \leq b_i, a_i \text{ e } b_i \text{ reais, } i = 1, 2, 3\}$$

cuja representação gráfica no espaço R^3 para $a_i = 0$ e $b_i = b$, $i = 1, 2, 3$, é dada pela Fig. 1.

A fronteira de A é a reunião das seis faces

$$F_1 = \{(a_1, X_2, X_3); a_2 \leq X_2 \leq b_2 \text{ e } a_3 \leq X_3 \leq b_3\}$$

$$F_2 = \{(b_1, X_2, X_3); a_2 \leq X_2 \leq b_2 \text{ e } a_3 \leq X_3 \leq b_3\}$$

$$F_3 = \{(X_1, a_2, X_3); a_1 \leq X_1 \leq b_1 \text{ e } a_3 \leq X_3 \leq b_3\}$$

$$F_4 = \{(X_1, b_2, X_3); a_1 \leq X_1 \leq b_1 \text{ e } a_3 \leq X_3 \leq b_3\}$$

$$F_5 = \{(X_1, X_2, a_3); a_1 \leq X_1 \leq b_1 \text{ e } a_2 \leq X_2 \leq b_2\}$$

$$F_6 = \{(X_1, X_2, b_3); a_1 \leq X_1 \leq b_1 \text{ e } a_2 \leq X_2 \leq b_2\}$$

Denominando-se por M_s o maior valor de η na face F_s , isto é,

$$M_s = \max_{F_s} \hat{\eta}, s = 1, 2, 3, 4, 5, 6,$$

o valor máximo \hat{Y}_{MF} de $\hat{\eta}$ na fronteira de A será, então,

$$\hat{Y}_{MF} = \max \{M_1, M_2, M_3, M_4, M_5, M_6\}.$$

O ponto $X = (X_1, X_2, X_3)$ em A, onde $\hat{\eta} = \hat{Y}_{MF}$, é o ponto de máximo fronteira.

O método de cálculo desse ponto foi descrito por Sanches (1986).

Os delineamentos de tratamentos utilizados

Os dados experimentais foram obtidos por simulação num computador eletrônico, para nove delineamentos de tratamentos com três fatores em 3, 5, 7 e 9 níveis, que são agora descritos de modo resumido.

Os intervalos para os níveis X_i dos fatores foram tomados de modo que $0 \leq X_i \leq 5$, $i = 1, 2, 3$, com os níveis mais baixo e mais alto correspondendo aos valores 0 e 5, respectivamente.

1. Delineamento fatorial 3^3

Denominando 0 = nível mais baixo, 1 = nível intermediário e 2 = nível mais alto, este delineamento é composto dos 27 tratamentos seguintes:

(0,0,0)	(0,1,0)	(0,2,0)	(1,0,0)	(1,1,0)	(1,2,0)	(2,0,0)
(2,1,0)	(2,2,0)	(0,0,1)	(0,1,1)	(0,2,1)	(1,0,1)	(1,1,1)
(1,2,1)	(2,0,1)	(2,1,1)	(2,2,1)	(0,0,2)	(0,1,2)	(0,2,2)
(1,0,2)	(1,1,2)	(1,2,2)	(2,0,2)	(2,1,2)	(2,2,2)	

Foram utilizados dois delineamentos fatoriais 3^3 , sendo um com níveis igualmente espaçados e o outro com níveis do tipo 0, q e 3q com $q = \frac{5}{3}$.

2. Delineamento de Box com 15 pontos

Denominando os níveis do fatorial 2^3 de -1 = nível mais baixo e 1 = nível mais alto, os 15 tratamentos são os seguintes:

(-1,-1,-1)	(-1, 1, 1)	(1,1,-1)	(0,0,0)	(-α, 0,0)	(0,α, 0)
(-1,-1, 1)	(1,-1,-1)	(1,1, 1)		(α, 0,0)	(0,0,-α)
(-1, 1,-1)	(1,-1, 1)			(0,-α,0)	(0,0, α)

Foram utilizados dois delineamentos de Box com 15 pontos, sendo um com $\alpha = 2$ e o outro com $\alpha = 1,21541169$.

3. Delineamento $(1/5)^3$

Foram utilizados dois delineamentos $(1/5)^3$, sendo que, em ambos, os níveis foram denominados por 0 = nível mais baixo, 4 = nível mais alto e por 1, 2 e 3 os níveis igualmente espaçados intermediários. Um dos delineamentos é o $(1/5)^3$ tipo I, III, IV que foi assim denominado por Conagin & Jorge (1977) e denominado de tipo Y por Perecin et al. (1982). É constituído dos seguintes 25 tratamentos:

(0,0,0)	(1,3,4)	(2,1,3)	(3,4,2)	(4,2,1)
(1,1,1)	(2,4,0)	(3,2,4)	(4,0,3)	(0,3,2)
(2,2,2)	(3,0,1)	(4,3,0)	(0,1,4)	(1,4,3)
(3,3,3)	(4,1,2)	(0,4,1)	(1,2,0)	(2,0,4)
(4,4,4)	(0,2,3)	(1,0,2)	(2,3,1)	(3,1,0)

O outro delineamento é o $(1/5)^3$ tipo W, que foi assim denominado por Perecin et al. (1982). É constituído dos seguintes 25 tratamentos:

(0,0,0)	(1,0,2)	(2,0,4)	(3,0,1)	(4,0,3)
(0,1,2)	(1,1,4)	(2,1,1)	(3,1,3)	(4,1,0)
(0,2,4)	(1,2,1)	(2,2,3)	(3,2,0)	(4,2,2)
(0,3,1)	(1,3,3)	(2,3,0)	(3,3,2)	(4,3,4)
(0,4,3)	(1,4,0)	(2,4,2)	(3,4,4)	(4,4,4)

4. Delineamento composto central com duas estrelas

Este delineamento foi proposto por Conagin (1982) e consta dos seguintes 21 tratamentos:

(-1,-1,-1)	(-α 0, 0)	(-2α, 0, 0)	(0,0,0)
(-1,-1, 1)	(α, 0, 0)	(2α, 0, 0)	
(-1, 1,-1)	(0,-α, 0)	(0,-2α, 0)	
(-1, 1, 1)	(0, α, 0)	(0, 2α, 0)	
(1,-1,-1)	(0, 0,-α)	(0, 0,-2α)	
(1,-1, 1)	(0, 0, α)	(0, 0, 2α)	
(1, 1,-1)			
(1, 1, 1)			

com $\alpha = 0,704377838$. Os 8 primeiros pontos são do fatorial 2^3 , os 12 seguintes são os pontos axiais situados nos eixos coordenados dos fatores nas distâncias $\pm \alpha$ e $\pm 2\alpha$ do centro do delineamento, e o último é o ponto central.

5. Delineamento duplo central composto com 29 pontos

Este delineamento foi proposto por Conagin et al. (1969) e compõe-se de 8 pontos do fatorial 2^3 com níveis -1 e 1,

mais 8 pontos do fatorial 2^3 com níveis -2 e 2, mais um ponto central, mais 12 pontos axiais, sendo 6 nas distâncias $\pm \alpha$ e 6 nas distâncias $\pm 2\alpha$ do centro do delineamento. Os 29 tratamentos são:

(-1,-1,-1)	(-2,-2,-2)	(0, 0, 0)	(-2α, 0, 0)
(-1,-1, 1)	(-2,-2, 2)	(-α, 0, 0)	(2α, 0, 0)
(-1, 1,-1)	(-2, 2,-2)	(α, 0, 0)	(0,-2α, 0)
(-1, 1, 1)	(-2, 2, 2)	(0,-α, 0)	(0, 2α, 0)
(1,-1,-1)	(2,-2,-2)	(0, α, 0)	(0, 0,-2α)
(1,-1, 1)	(2,-2, 2)	(0, 0,-α)	(0, 0, 2α)
(1, 1,-1)	(2, 2,-2)	(0, 0, α)	
(1, 1, 1)	(2, 2, 2)		

Foram utilizados dois delineamentos duplos centrais compostos, sendo um com $\alpha = 1,51$ e o outro com $\alpha = 1$.

Funções de resposta utilizadas na simulação

Na simulação dos dados experimentais para os nove delineamentos descritos, foram utilizadas 21 funções de resposta do tipo

$$\eta : \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3$$

todas com máximo $\eta = 4100$ no ponto $\bar{X} = (4,4,4)$. Os coeficientes do vetor β das 21 funções estão na Tabela 1 e foram determinados de modo a produzir diferentes situações de interesse. A técnica de construção desses modelos está desenvolvida no trabalho de Sanches (1986). Esses modelos foram classificados em três classes quanto à soma dos coeficientes dos termos quadráticos: modelos de média curvatura (modelos 1 a 7), modelos de pequena curvatura (modelos 8 a 14) e modelos de grande curvatura (modelos 15 a 21).

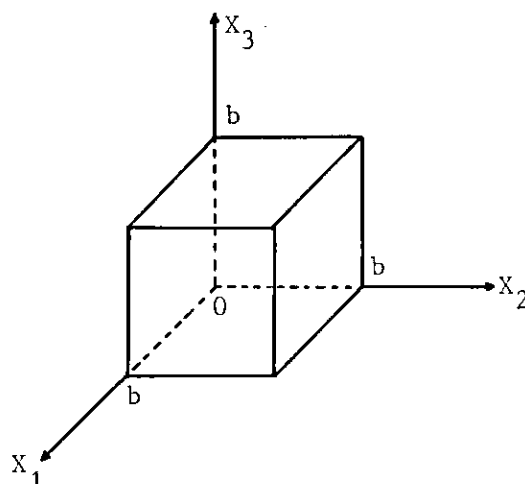


FIG. 1. Representação gráfica da região experimental.

TABELA 1. Coeficientes dos 21 modelos de resposta.

Modelo	Coeficientes									
	β_0	β_1	β_2	β_3	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
1	1700,00	400,00	400,00	400,00	-50,00	-50,00	-50,00	0	0	0
2	1700,00	912,00	144,00	144,00	-114,00	-18,00	-18,00	0	0	0
3	3160,16	30,00	268,32	171,60	-60,67	-68,82	-20,51	93,14	20,70	-22,58
4	1700,00	528,00	528,00	144,00	-68,00	-66,00	-18,00	0	0	0
5	3197,92	88,32	208,00	154,72	-44,67	-54,70	-50,63	31,04	36,22	26,36
6	1700,00	656,00	400,00	144,00	-82,00	-50,00	-18,00	0	0	0
7	3185,12	68,88	228,16	160,40	-50,00	-59,41	-40,59	51,74	31,04	10,04
8	2660,00	240,00	240,00	240,00	-30,00	-30,00	-30,00	0	0	0
9	2660,00	432,00	144,00	144,00	-54,00	-18,00	-18,00	0	0	0
10	3207,20	101,28	190,72	154,40	-34,00	-37,06	-18,94	34,92	7,76	-8,48
11	2660,00	288,00	288,00	144,00	-36,00	-36,00	-18,00	0	0	0
12	3221,60	123,12	168,00	148,08	-28,00	-31,76	-30,24	11,64	13,58	9,88
13	2660,00	336,00	240,00	144,00	-42,00	-30,00	-18,00	0	0	0
14	3216,80	115,84	175,60	150,16	-30,00	-33,53	-26,47	19,40	11,64	3,76
15	20,00	680,00	680,00	680,00	-85,00	-85,00	-85,00	0	0	0
16	20,00	1752,00	144,00	144,00	-219,00	-18,00	-18,00	0	0	0
17	3076,64	-94,72	404,48	201,92	-107,33	-124,41	-23,26	195,00	43,34	-47,30
18	20,00	948,00	948,00	144,00	-118,50	-118,50	-18,00	0	0	0
19	3156,64	27,28	278,08	166,32	-73,83	-94,86	-86,31	65,00	75,84	55,20
20	20,00	1216,00	680,00	144,00	-152,00	-85,00	-18,00	0	0	0
21	3129,76	-13,36	320,24	178,24	-85,00	-104,71	-65,29	108,34	65,00	21,02

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para cada um dos 21 modelos de resposta e para cada delineamento d com N_d tratamentos, $d = 1, 2, \dots, 9$, foram simulados 1.000 ensaios do tipo inteiramente casualizado de N_d tratamentos com $\sigma = 300$. Em cada ensaio, de cada conjunto de 1.000, foi estudada a natureza do ponto crítico de $\hat{\eta}$, e a seguir, classificado num dos três tipos: ponto de máximo, de mínimo e de sela.

Em cada conjunto de 1.000 ensaios foram calculadas as percentagens de pontos de máximo, de mínimo e de sela. As percentagens obtidas de pontos de máximo e de sela estão nas Tabelas 2 e 3, respectivamente, onde os delineamentos foram designados pelas seguintes siglas:

FIE: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados

FN: fatorial 3^3 com níveis do tipo 0, q e $3q$

BO: Box com 15 pontos e $\alpha = 1,21541169$

BN: Box com 15 pontos e $\alpha = 2$

Y: $(1/5)5^3$ tipo I, III, IV ou tipo Y

W: $(1/5)5^3$ tipo W

CC: composto central com duas estrelas

DCO: duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1,51$

DCN: duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1$

As percentagens de pontos de mínimo foram pequenas, conforme se pode deduzir pelas diferenças

entre os 100 por cento e as somas dos totais de percentagens das Tabelas 2 e 3 para cada modelo e delineamento. O delineamento que mais produziu pontos de mínimo, ainda que poucos, foi o delineamento de Box com 15 pontos e $\alpha = 2$.

Na comparação dos delineamentos quanto à capacidade de produzir pontos de máximo quando a situação real é de máximo, observa-se, pela Tabela 2, uma nítida vantagem dos dois delineamentos fatoriais 3^3 sobre os demais. Merece destaque a vantagem desses dois delineamentos com 3 níveis sobre os delineamentos CC e DCO com 7 e 9 níveis, respectivamente, o que permite afirmar que o aumento do número de níveis dos três fatores pouco resolve, se isso não resultar em uma distribuição adequada de pontos na região experimental A.

Nas Tabelas 4 e 5 são apresentadas as percentagens relativas de pontos $(X_1, X_2, X_3, \hat{\eta})$ de máximo e de sela, respectivamente, da superfície de resposta $\hat{\eta}$, tais que $|X_i - 4| \leq 0,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{\eta} - 4100| \leq 0,5\sigma$, onde $\hat{\eta} = \hat{Y}_M =$ máximo de $\hat{\eta}$, na Tabela 4 e $\hat{\eta} = \hat{Y}_S =$ valor de $\hat{\eta}$ no ponto de sela. (X_1, X_2, X_3) , na Tabela 5. As percentagens das Tabelas 4 e 5 são relativas aos totais correspondentes das Tabelas 2 e 3, respectivamente.

Conforme se nota, as percentagens relativas da Tabela 5 são bem pequenas, mostrando que o ponto de sela não é muito próximo do ponto de máximo real (4, 4, 4, 4100). Até mesmo o ponto de máximo estimado também não se mostrou muito próximo do

ponto de máximo real, como se pode ver pelas percentagens da Tabela 4, embora estas sejam, no geral, proporcionalmente muito maiores que as da Tabela 5.

As condições impostas para a elaboração das Tabelas 4 e 5 podem ter sido muito restritivas, levando à obtenção dessas percentagens muito pequenas que tornam difíceis as conclusões por comparação. Por essa razão, foram consideradas, em seguida, novas condições menos restritivas $|X_i - 4| \leq 1,5, i = 1, 2, 3$ e $|\hat{\eta} - 4100| \leq 1,5\sigma$ e repetiu-se o mesmo processo de simulação anterior, somente para os três modelos de resposta de números 6, 14 e 18. Esses

modelos foram escolhidos dentre os demais porque representam as três classes de modelos quanto à curvatura e, portanto, correspondem a três situações bem diferentes de resposta. Além disso, são três modelos para os quais se tem uma quantidade nem muito grande e nem muito pequena de pontos de máximo e de sela, dentre todos os 21 modelos considerados.

As percentagens de pontos de máximo e de sela para esses três modelos de resposta estão nas Tabelas 6 e 7, respectivamente, e as percentagens relativas de pontos de máximo e de sela, nas novas condições menos restritivas, estão nas Tabelas 8 e 9, respecti-

TABELA 2. Percentagens de pontos de máximo de superfície polinomial quadrática, ocorridos em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento (Percentagem de pontos de máximo)									
1	FIE(97,90)	FN(94,40)	W(92,70)	Y(88,80)	DCN(84,90)	BO(71,40)	CC(64,20)	DCO(61,90)	BN(39,80)	
2	FIE(60,10)	FN(56,90)	W(49,80)	Y(47,80)	DCN(44,00)	BO(41,80)	CC(39,50)	DCO(34,40)	BN(28,40)	
3	FIE(61,20)	FN(56,20)	W(52,20)	Y(49,40)	DCN(43,10)	BO(40,50)	CC(33,30)	DCO(33,00)	BN(29,70)	
4	FIE(81,10)	FN(76,00)	DCN(70,90)	W(70,70)	Y(69,20)	BO(59,00)	CC(55,30)	DCO(51,40)	BN(38,20)	
5	FIE(80,70)	FN(78,90)	W(69,70)	Y(68,30)	DCN(67,00)	BO(54,30)	CC(51,80)	DCO(49,80)	BN(36,50)	
6	FIE(77,70)	FN(75,10)	W(69,20)	Y(67,80)	DCN(66,10)	BO(55,80)	CC(51,50)	DCO(46,20)	BN(37,20)	
7	FIE(81,20)	FN(78,90)	W(68,90)	Y(64,00)	DCN(60,80)	BO(56,40)	CC(51,80)	DCO(49,80)	BN(34,80)	
8	FIE(75,10)	FN(68,20)	W(60,10)	Y(56,00)	DCN(48,50)	BO(42,20)	CC(34,30)	DCO(31,20)	BN(28,50)	
9	FIE(57,30)	FN(55,10)	W(47,10)	Y(43,70)	DCN(39,00)	BO(32,30)	CC(30,40)	DCO(27,40)	BN(27,00)	
10	FIE(58,80)	FN(56,20)	Y(45,00)	W(44,20)	DCN(36,50)	BO(31,90)	CC(28,70)	DCO(27,00)	BN(26,00)	
11	FIE(69,00)	FN(65,90)	W(53,00)	Y(51,70)	DCN(44,10)	BO(37,00)	CC(32,70)	DCO(30,50)	BN(25,10)	
12	FIE(68,80)	FN(61,90)	W(50,40)	Y(48,50)	DCN(44,30)	BO(34,50)	CC(32,70)	DCO(29,80)	BN(26,90)	
13	FIE(69,60)	FN(64,00)	W(54,40)	Y(53,30)	DCN(44,60)	BO(36,70)	CC(33,80)	DCO(28,60)	BN(27,90)	
14	FIE(66,30)	FN(58,70)	W(54,00)	Y(50,10)	DCN(42,00)	BO(37,30)	CC(32,50)	BN(29,20)	DCO(26,90)	
15	FIE(100,00)	FN(99,90)	W(99,90)	DCN(99,80)	Y(99,70)	CC(97,60)	DCO(95,30)	BN(66,50)		
16	FIE(61,30)	FN(57,20)	W(52,80)	Y(49,80)	DCN(45,10)	BO(39,90)	CC(36,90)	DCO(35,00)	BN(31,00)	
17	FIE(65,30)	FN(62,50)	Y(52,20)	W(49,40)	DCN(48,90)	BO(43,40)	CC(36,90)	DCO(36,80)	BN(34,30)	
18	FIE(79,90)	FN(78,60)	W(76,30)	Y(71,80)	DCN(69,60)	BO(66,90)	CC(63,20)	DCO(60,40)	BN(49,10)	
19	FIE(84,40)	FN(82,40)	Y(81,50)	DCN(79,80)	W(79,10)	BO(66,90)	CC(61,60)	DCO(60,70)	BN(51,70)	
20	FIE(80,00)	FN(78,70)	Y(75,30)	W(73,90)	DCN(68,50)	BO(66,10)	CC(64,20)	DCO(58,20)	BN(44,80)	
21	FIE(85,00)	FN(81,40)	W(78,70)	DCN(78,00)	Y(77,50)	BO(65,00)	CC(60,10)	DCO(58,50)	BN(48,80)	

TABELA 3. Percentagens de pontos de sela de superfície polinomial quadrática, ocorridos em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento (Percentagem de pontos de sela)									
1	BN(58,20)	DCO(38,10)	CC(35,80)	BO(28,60)	DCN(15,10)	Y(11,20)	W(7,30)	FN(5,60)	FIE(2,10)	
2	BN(71,00)	DCO(65,60)	CC(60,50)	BO(58,20)	DCN(56,00)	W(52,20)	Y(50,20)	FN(43,10)	FIE(39,90)	
3	BN(69,40)	DCO(67,00)	CC(66,70)	BO(59,50)	DCN(56,90)	Y(50,60)	W(47,80)	FN(43,80)	FIE(38,80)	
4	BN(60,60)	DCO(48,60)	CC(44,70)	BO(41,00)	Y(30,80)	W(29,30)	DCN(29,10)	FN(24,00)	FIE(18,90)	
5	BN(61,80)	DCO(50,20)	CC(48,20)	BO(45,70)	DCN(33,00)	Y(31,70)	W(30,30)	FN(21,10)	FIE(19,30)	
6	BN(61,80)	DCO(53,80)	CC(48,50)	BO(44,20)	DCN(33,90)	Y(32,20)	W(30,80)	FN(24,90)	FIE(22,30)	
7	BN(63,40)	DCO(50,20)	CC(48,20)	BO(43,60)	DCN(39,20)	Y(35,20)	W(31,10)	FN(21,10)	FIE(18,80)	
8	DCO(68,80)	BN(66,00)	CC(65,70)	BO(57,70)	DCN(51,50)	Y(44,00)	W(39,90)	FN(31,80)	FIE(24,90)	
9	DCO(72,60)	CC(69,40)	BN(68,90)	BO(67,40)	DCN(61,00)	Y(56,20)	W(52,90)	FN(44,90)	FIE(42,70)	
10	DCO(72,90)	CC(71,30)	BN(69,50)	BO(68,10)	DCN(63,50)	W(55,80)	Y(55,00)	FN(43,80)	FIE(41,20)	
11	BN(70,00)	DCO(68,50)	CC(67,20)	BO(63,00)	DCN(55,90)	Y(48,30)	W(46,90)	FN(34,10)	FIE(31,00)	
12	DCO(70,10)	BN(68,10)	CC(67,30)	BO(65,40)	DCN(55,70)	Y(51,50)	W(49,60)	FN(38,00)	FIE(31,20)	
13	DCO(71,40)	BN(67,20)	CC(66,00)	BO(63,20)	DCN(55,40)	Y(46,70)	W(45,50)	FN(36,00)	FIE(30,30)	
14	DCO(73,00)	BN(66,70)	CC(66,40)	BO(62,60)	DCN(58,00)	Y(49,90)	W(46,00)	FN(41,30)	FIE(33,70)	
15	BN(33,40)	DCO(4,70)	BO(2,40)	CC(2,30)	Y(0,30)	DCN(0,20)	W(0,10)	FN(0,10)	FIE(0,00)	
16	BN(69,00)	DCO(65,00)	CC(63,10)	BO(60,10)	DCN(54,90)	Y(50,20)	W(47,20)	FN(42,80)	FIE(38,70)	
17	BN(65,70)	DCO(63,20)	CC(63,10)	BO(56,60)	DCN(51,10)	W(50,60)	Y(47,80)	FN(37,50)	FIE(34,70)	
18	BN(50,70)	DCO(39,60)	CC(36,80)	BO(33,10)	DCN(30,40)	Y(28,20)	W(23,70)	FN(21,40)	FIE(20,10)	
19	BN(48,20)	DCO(39,30)	CC(38,40)	BO(33,10)	W(20,90)	DCN(20,20)	Y(18,50)	FN(17,60)	FIE(15,60)	
20	CC(55,80)	BN(55,00)	DCO(41,80)	BO(33,90)	DCN(31,50)	W(26,10)	Y(24,70)	FN(21,30)	FIE(20,00)	
21	BN(51,20)	DCO(41,50)	CC(39,90)	BO(35,00)	Y(22,50)	DCN(22,00)	W(21,30)	FN(18,60)	FIE(15,00)	

vamente. Para os ensaios onde se obteve ponto de sela, foram calculados o ponto de máximo fronteira e o ponto de máximo experimental em A. Nas Tabelas 10 e 11 estão as percentagens relativas desses pontos, respectivamente, nas novas condições, onde \hat{Y}_{MF} é como definido anteriormente e \hat{Y}_{ME} indica a máxima resposta experimental. As percentagens das Tabelas 10 e 11 são relativas aos totais de pontos de sela correspondentes da Tabela 7.

Pelas comparações das Tabelas 9, 10 e 11 com a Tabela 8, pode-se avaliar a possibilidade de se utilizar os outros pontos de A como substitutos do ponto de máximo não encontrado, conforme foi estabelecido no primeiro objetivo deste trabalho. Assim, como um critério razoável, cada um desses três pontos poderá ser considerado como substituto se exibirem, num delineamento, percentagens relativas praticamente iguais ou maiores que as percentagens correspondentes da Tabela 8. Isso seria dizer que o ponto substituto teria propriedades idênticas ou melhores que o ponto de máximo estimado (nos casos onde é encontrado), em termos de proximidade com o ponto de máximo real.

Conforme se nota para todos os delineamentos, as percentagens da Tabela 9 são bem menores que as percentagens correspondentes da Tabela 8. Isso mostra que o ponto de sela não é um substituto recomendável para o ponto de máximo não encontrado.

Os resultados da Tabela 10, quando comparados com os resultados correspondentes da Tabela 8, evidenciam que o ponto de máximo fronteira pode ser utilizado como substituto do ponto de máximo não encontrado, para os delineamentos FIE, Y, W e DCN nas três situações representadas pelos três modelos de resposta. A mesma evidência se observa para o delineamento FN, nos modelos 14 e 18 e para o delineamento BO, nos modelos 6 e 18. Para os delineamentos CC e DCO, a mesma evidência é observada somente na situação classificada como de grande curvatura, que é a do modelo 18.

A análise dos resultados da Tabela 11, em comparação com os resultados correspondentes da Tabela 8, mostra que o ponto de máximo experimental pode ser utilizado como substituto do ponto de má-

TABELA 4. Percentagens relativas de pontos de máximo (X_1^* , X_2^* , X_3^* , \hat{Y}_{MF}), tais que $|X_1^* - 4| \leq 0,5$, $l = 1, 2, 3$ e $|Y_M - 4100| \leq 0,5\sigma$, $\sigma = 300$, ocorridos em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
1	9,60	8,36	2,24	1,25	5,06	5,28	2,02	3,23	5,41
2	4,65	2,63	0,47	0,00	1,20	5,23	1,51	1,16	2,50
3	2,77	4,44	1,23	0,67	2,42	3,83	1,50	2,42	3,48
4	7,27	5,39	9,83	0,78	4,62	6,08	2,53	3,69	3,94
5	7,31	5,19	2,02	0,54	3,51	4,16	1,15	2,00	5,07
6	8,62	5,85	2,68	0,26	2,80	3,03	2,52	1,73	4,08
7	8,25	4,18	1,24	0,57	3,24	4,78	2,50	2,00	3,94
8	3,06	2,78	0,94	0,00	1,60	2,99	0,29	1,92	1,64
9	2,61	1,45	0,30	0,37	2,28	2,12	0,32	0,72	1,02
10	1,53	2,66	0,62	0,38	1,11	1,13	1,39	1,48	2,73
11	3,18	2,27	0,54	0,00	1,16	1,13	1,83	0,32	1,13
12	3,34	3,06	0,57	0,37	0,61	1,78	1,52	0,00	3,61
13	2,87	2,18	1,36	0,71	1,31	2,38	0,88	2,09	1,79
14	2,26	3,23	0,26	1,02	1,19	1,85	0,00	0,74	1,90
15	32,90	26,90	9,50	2,70	18,70	21,00	8,00	8,60	20,00
16	4,73	3,67	0,75	0,32	4,01	3,03	0,81	2,00	2,21
17	5,66	3,68	1,61	0,29	3,06	3,84	1,89	1,35	3,47
18	13,76	13,35	4,48	1,83	9,33	10,48	5,06	5,29	10,63
19	13,98	11,16	5,08	1,35	10,67	11,37	5,35	3,62	11,40
20	14,50	10,16	4,23	1,78	8,10	8,79	4,98	4,29	7,88
21	13,05	12,40	4,76	0,61	8,38	10,67	5,49	4,61	10,64

ximo não encontrado, para os delineamentos FIE, BO, BN, Y, W, CC e DCN. Para o delineamento FN, os resultados obtidos não recomendam o ponto de máximo experimental como substituto. Para o delineamento DCO, a utilização dessa solução alternativa é recomendada nas situações dos modelos 6 e 18, isto é, situações de curvaturas média e grande.

Um fato evidenciado pelos resultados, que é importante ressaltar, é que sempre que se tiverem maiores curvaturas, maior será o número de delineamentos nos quais o ponto de máximo experimental pode ser utilizado como substituto do ponto de máximo não encontrado. Fato semelhante também ocorre no caso do ponto de máximo fronteira.

TABELA 5. Percentagens relativas de pontos de sela (X_1^* , X_2^* , X_3^* , \hat{Y}_S), tais que $|X_i^* - 4| \leq 0,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_S - 410| \leq 0,5\sigma$, $\sigma = 300$, ocorridos em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
1	0,00	0,00	0,34	0,17	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
2	0,00	0,23	0,68	0,28	0,19	0,38	1,15	0,30	0,53
3	0,25	0,00	0,00	0,28	0,59	0,41	0,29	0,44	0,00
4	0,52	0,83	0,48	0,16	0,00	0,00	0,44	0,41	0,34
5	0,00	0,00	0,00	0,32	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
6	0,00	0,00	0,45	0,16	0,00	0,64	1,23	0,00	0,58
7	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,41	0,00	0,00
8	0,00	0,00	0,17	0,15	0,00	0,25	0,00	0,58	0,00
9	0,00	0,22	0,29	0,29	0,00	0,18	0,43	0,82	0,00
10	0,00	0,22	0,00	0,00	0,18	0,00	0,56	0,41	0,15
11	0,32	0,00	0,15	0,00	0,20	0,00	0,44	0,43	0,00
12	0,00	0,26	0,00	0,00	0,00	0,00	0,29	0,00	0,00
13	0,00	0,27	0,00	0,14	0,00	0,65	0,00	0,42	0,36
14	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14	0,27	0,00
15	*	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
16	0,51	0,46	0,83	0,86	0,19	0,21	1,10	1,07	0,54
17	0,00	0,00	0,00	0,30	0,00	0,59	0,00	0,79	0,19
18	0,49	0,00	1,51	0,98	0,35	1,26	1,63	1,26	0,98
19	0,00	0,00	0,00	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
20	0,50	0,93	0,58	0,36	0,80	1,91	1,67	2,39	0,63
21	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

* Percentagem relativa não definida porque não ocorreu ponto de sela.

TABELA 6. Percentagens de pontos de máximo de superfície polinomial quadrática, ocorridos em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	79,10	75,60	54,80	35,70	66,70	71,20	52,50	49,60	64,00
14	68,80	62,60	36,00	27,70	47,50	53,70	30,70	30,40	43,00
18	81,20	80,40	65,50	49,80	72,90	74,30	64,40	66,00	72,80

TABELA 7. Percentagens de pontos de sela de superfície polinomial quadrática, ocorridos em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	20,90	24,40	45,20	63,30	33,30	28,80	47,50	50,40	36,00
14	31,20	37,40	64,00	68,80	52,50	46,30	69,10	69,40	57,00
18	18,80	19,60	34,50	50,10	27,10	25,70	35,60	34,00	27,20

TABELA 8. Percentagens relativas de pontos de máximo (X_1^* , X_2^* , X_3^* , \hat{Y}_M), tais que $|X_i - 4| \leq 1,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_M - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$, ocorridos em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	61,94	75,60	41,78	42,01	50,07	49,71	40,76	39,91	46,25
14	54,94	53,51	39,44	32,85	47,57	45,06	37,45	42,76	39,06
18	68,10	72,26	54,19	37,75	61,04	61,37	44,40	44,69	63,46

TABELA 9. Percentagens relativas de pontos de sela (X_1^* , X_2^* , X_3^* , \hat{Y}_S), tais que $|X_i - 4| \leq 1,5$, $i = 1, 2, 3$ e $|\hat{Y}_S - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$, ocorridos em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	4,78	11,06	9,29	10,26	7,80	6,59	12,00	14,48	10,83
14	2,56	1,87	5,62	8,13	2,47	2,59	2,02	7,20	2,28
18	9,57	15,30	18,55	15,96	8,11	9,72	17,97	17,94	9,55

TABELA 10. Percentagens relativas de pontos de máximo fronteira (X_1 , X_2 , X_3 , \hat{Y}_{MF}), tais que $|X_i - 4| \leq 1,5$ e $|\hat{Y}_{MF} - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$, determinados nos casos onde ocorreram pontos de sela em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	81,81	70,49	46,23	7,58	64,86	64,93	31,57	30,35	71,66
14	61,53	61,22	35,31	4,65	51,04	54,85	23,87	16,85	66,14
18	86,17	80,61	59,13	12,37	85,60	82,49	50,84	45,58	84,55

TABELA 11. Percentagens relativas de pontos de máximo experimentais ($X_1, X_2, X_3, \hat{Y}_{ME}$), tais que $|X_1 - 4| \leq 1,5$ e $|\hat{Y}_{ME} - 4100| \leq 1,5\sigma$, $\sigma = 300$, determinados nos casos onde ocorreram pontos de sela em 1.000 ensaios gerados a partir de cada modelo e delineamento.

Modelo	Delineamento								
	FIE	FN	BO	BN	Y	W	CC	DCO	DCN
6	77,99	37,70	73,00	58,60	61,86	64,58	66,31	56,34	61,38
14	70,83	32,62	67,81	41,71	49,71	54,85	54,70	36,02	45,08
18	78,72	47,44	69,85	60,07	78,22	79,76	66,29	56,76	64,70

CONCLUSÕES

1. O ponto de sela não é um bom substituto para o ponto de máximo não encontrado, pois em todas as situações estudadas mostrou-se sempre bem afastado do ponto de máximo real.

2. Para os delineamentos fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, $(1/5) 5^3$ tipo Y, $(1/5) 5^3$ tipo W e duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1$, o ponto de máximo fronteira pode ser utilizado como substituto do ponto de máximo não encontrado. Para esses delineamentos, esse ponto mostrou-se, no geral, mais próximo do ponto de máximo real do que o próprio ponto de máximo estimado (nos casos onde é encontrado).

3. O ponto de máximo experimental pode também ser utilizado como substituto do ponto de máximo não encontrado para seis dos delineamentos utilizados, quais sejam: fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, Box com 15 pontos e $\alpha = 1,215$, Box com 15 pontos e $\alpha = 2$, $(1/5) 5^3$ tipo Y, $(1/5) 5^3$ tipo W e composto central com duas estrelas. Para esses delineamentos, os resultados indicaram que o ponto de máximo experimental é ligeiramente mais próximo do ponto de máximo real do que o ponto de máximo estimado (nos casos onde é encontrado).

4. O aumento do número de níveis não é causa que por si só pode determinar maior eficiência na obtenção de pontos de máximo. Por exemplo, o delineamento 3^3 com níveis igualmente espaçados é melhor que vários delineamentos de maior número de níveis, especialmente aqueles com 7 e 9 níveis, que são o composto central com duas estrelas e o duplo central composto com 29 pontos e $\alpha = 1,51$.

5. Num ensaio de adubação com três fatores, onde: (a) a produção será estudada pela função polinomial quadrática; (b) os intervalos das doses estão fi-

xados nas doses mínima e máxima; (c) o ponto de máximo real está próximo das maiores doses e (d) quer-se as doses ótimas, então entre os nove delineamentos estudados deve-se escolher o delineamento fatorial 3^3 com níveis igualmente espaçados, pelas seguintes razões: (i) é o delineamento para o qual se tem maior probabilidade de se obter um ponto de máximo para η ; (ii) é um dos dois melhores quanto à proximidade do ponto de máximo estimado do ponto de máximo real e (iii) se ocorrer ponto de sela para $\hat{\eta}$, este delineamento tem os pontos de máximo fronteira e de máximo experimental em melhores condições do que nos outros delineamentos, em termos de maior proximidade com o ponto de máximo real, na maioria das situações estudadas.

REFERÊNCIAS

- BOX, G.E.P. & WILSON, K.B. On the experimental attainment of optimum conditions. *J. R. Stat. Soc., B*, 13:1-45, 1951.
- CAMPOS, H. Aspectos da aplicação das superfícies de resposta a ensaios fatoriais 3^3 de adubação. Piracicaba, ESALQ-USP, 1967. 82p. Tese Livre-Docência.
- CONAGIN, A. Delineamentos de ensaios de adubação. Campinas, Instituto Agronômico, 1978. 39p. (Circular, 101)
- CONAGIN, A. Delineamento composto central com duas estrelas. *Pesq. agropec. bras.*, Brasília, 17(9):1261-69, 1982.
- CONAGIN, A. & JORGE, J.P.N. Delineamentos $(1/5) 5^3$. *Bragantia*, 36:23-58, 1977.
- CONAGIN, A.; JORGE, J.P.N.; VENTURINI, W.R. Delineamentos experimentais utilizáveis na experimentação de campo. In: REYNAERT, E.E. *La investigación de fertilidad de suelos para la producción agrícola en la zona templada*. Montevideo, IICA, Zona Sur, 1969, p.183-201.

- DEPIZZOLATTI, A.L.W. **Pontos críticos de superfície de resposta com raiz quadrada em função das doses de nutrientes usadas nos experimentos de adubação.** Piracicaba, ESALQ-USP, 1983. 110p. Tese Doutorado.
- JORGE, J.P.N. & CONAGIN, A. Estudos em um grupo especial de delineamentos (1/5) 5^3 . *Bragantia*, 36:59-88, 1977.
- MALHEIROS, E.B. & PERECIN, D. Posição das doses de nutrientes na análise de uma superfície de resposta à adubação. *R. Mat. Est.*, 1:69-78, 1983.
- PERECIN, D.; MALHEIROS, E.B.; BANZATTO, D.A. Tipos de delineamento (1/5) 5^3 e superfície de respostas. *Científica*, 10:193-201, 1982.
- SANCHES, A. **Superfície de resposta em experimentos de adubação: o problema dos pontos de sela.** Piracicaba, ESALQ-USP, 1986. 91p. Tese Doutorado.
- VIEIRA, S. **Aspectos das funções de produção ajustadas aos ensaios fatoriais 3^3 de adubação.** Piracicaba, ESALQ-USP, 1970. 160p. Tese Doutorado.