

DETERMINAÇÕES DE FÓRMULAS NO DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL ORTOGONAL (BOX)¹

LAURO BOECHAT BATISTA² e SUELI COSTA e SILVA²

RESUMO - No presente trabalho foi feito um estudo teórico visando as determinações da fórmula α que torna ortogonal o delineamento composto central (Box) e das fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes de um polinômio do segundo grau, quando ajustamos o polinômio aos dados provenientes de um delineamento composto central ortogonal, com $P + 1$ pontos centrais e com um máximo de quatro fatores, como também o estudo da precisão das estimativas dos coeficientes. Verificou-se que a fórmula de α que torna ortogonal o delineamento composto central, com $P + 1$ pontos centrais e para um máximo de quatro fatores, é dada pela expressão:

$$\alpha = [-2^{k-1} + [2^{2k-2} + 2^{k-2} (2k + 1 + P)] \frac{1}{2}] \frac{1}{2}$$

Foi também verificado que as fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, quando ajustamos esse polinômio a dados provenientes do delineamento composto central ortogonal, com $P + 1$ pontos centrais e um máximo de quatro fatores, são dadas pelas expressões:

$$\hat{V}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(2^k + 2\alpha^2)} \cdot \hat{\sigma}^2 \qquad \hat{V}(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{r2^k} \cdot \hat{\sigma}^2$$
$$\hat{V}(\hat{\beta}_{11}) = \frac{1}{r} \cdot [2^k + 2\alpha^4 - \frac{(2^k + 2\alpha^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P}]^{-1} \cdot \hat{\sigma}^2$$

Verificou-se, ainda, que, quando são usados oito pontos centrais, isto é, quando $P = 7$, a estimativa de β_{ij} é tão precisa quanto a estimativa de β_i e mais eficiente do que a estimativa de β_{ij} .

Termos para indexação: Estatística Experimental ou Superfície de Resposta.

INTRODUÇÃO

Nos experimentos fatoriais de grande número de tratamentos, fica difícil a eliminação de diferenças de fertilidade dentro de uma mesma repetição e, conseqüentemente, o erro padrão por parcela tende a ser alto em comparação com experimentos que envolvam poucos tratamentos. Uma das maneiras de se reduzir o tamanho do bloco sem diminuir o número de tratamentos é o confundimento (YATES 1937).

BOX & WILSON (1951) apresentaram os ensaios compostos centrais que tiveram por finalidade

de ajustar aos dados experimentais um polinômio do segundo grau.

PENTEADO & BATISTA (1971) estudaram a eficiência do composto central em comparação com os fatoriais completos de dois fatores, e uma das suas conclusões foi que o composto central é menos eficiente do que os fatoriais 5×5 e 3×3 grande, e mais eficiente do que o pequeno fatorial 3×3 . Mas, os fatoriais 3×3 grande e pequeno estudados por eles, no caso de dois fatores, são o composto central ortogonal com um ponto central, sendo que no grande fatorial 3×3 as doses eram mais espaçadas. No entanto, o composto central não ortogonal, estudado por PENTEADO & BATISTA (1971), apresentou inconveniência quanto à dependência dos coeficientes quadráticos do polinômio do segundo grau. Porém o composto central ortogonal não apresentou esta dependência.

GOMES & CAMPOS (1972) estudaram a eficiência do composto central rotativo, com um ponto central, em relação ao fatorial 3^3 .

¹ Aceito para publicação em 28 de Outubro de 1977

² Docentes do Departamento de Matemática da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Km-47 da Antiga Rodovia Rio-São Paulo, 23.460 - Seropédica, RJ.

BATISTA (1976) determinou a fórmula de α que torna ortogonal o composto central com um máximo de quatro fatores, e, após, determinou também as fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau. Naquele trabalho, Batista usou somente um ponto central e chegou a uma tabela de valores de α , que tornam ortogonal o composto central, mais precisa do que a que foi apresentada por DAVIES (1954).

COCHRAN & COX (1957) relataram a possibilidade de repetições do ponto central no delineamento composto central. Segundo eles, essas repetições do ponto central proporcionam maior número de graus de liberdade para o erro experimental e determinam a precisão de \bar{Y} perto do centro.

O valor de α é um parâmetro do delineamento composto central que pode ser escolhido para tornar os coeficientes de regressão do polinômio do segundo grau ortogonais uns aos outros ou para minimizar o erro que é criado se a verdadeira forma da superfície de resposta não é quadrática ou para dar ao delineamento a propriedade de ser rotacional (COCHRAN & COX 1957).

Os autores do presente trabalho procuraram determinar a fórmula de α que torna ortogonal o composto central, como também determinar fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, quando se usa mais de um ponto central, com um máximo de quatro fatores no delineamento composto central ortogonal, além de estudar a precisão das estimativas.

MATERIAL E MÉTODOS

O método a ser empregado será o utilizado por BATISTA (1976), na determinação da fórmula de α para tornar ortogonal o delineamento composto central, com um ponto central.

Os ensaios compostos centrais são construídos pela adição de $(2k + 1)$ combinações de níveis de fatores a um fatorial completo 2^k , como descreveram COCHRAN & COX (1957). No entanto, nesses delineamentos há somente um ponto central. Se adicionarmos P pontos centrais, teremos portanto $P + 1$ pontos centrais. Assim, deveremos adi-

cionar $(2k + 1 + P)$ combinações de níveis de fatores a um fatorial completo 2^k .

Partindo de um fatorial completo 2^k no qual estão codificados os níveis em -1 e $+1$ e adicionando as $(2k + 1 + P)$ combinações anteriormente mencionadas, teremos o composto central com $(P + 1)$ pontos centrais. Portanto, o composto central será constituído por $(2^k + 2k + 1 + P)$ combinações.

Ajustando aos dados um polinômio do segundo grau, dado pelo modelo matemático:

$$Y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_{iu} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_{iu}^2 + \sum_{i < j=2}^k \beta_{ij} X_{iu} X_{ju} + \epsilon_u,$$

teremos as matrizes $X'X = S$ (Tabelas 1, 2 e 3).

Fazendo-se a correção dos quadrados e dos produtos dos elementos das matrizes S pelo método descrito por LI (1964), teremos submatrizes corrigidas (S_c) nas quais todos os elementos fora da diagonal principal são iguais a zero, exceto os representados pela letra A (Tabelas 4, 5 e 6).

Para que a estimação dos coeficientes do polinômio do segundo grau seja independente, isto é, para que o composto central seja ortogonal, é necessário que os elementos fora da diagonal principal sejam nulos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Verificamos que nas submatrizes corrigidas todos os elementos fora da diagonal principal são nulos, exceto os representados pela letra A . Portanto, para que as submatrizes se tornem diagonais, é necessário que os elementos representados por A sejam igualados a zero. Assim, quando as submatrizes passam a ser diagonais, as estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau ficam independentes e teremos, consequentemente, o composto central ortogonal. Então, para que o composto central seja ortogonal, temos de ter $A = 0$, isto é,

TABELA 1. Matriz $X'X = S$ para $k = 2$.

$S =$	$2^k + 2k + 1 + P$	0	0	$2^k + 2a^2$	$2^k + 2a^2$	0
	0	$2^k + 2a^2$	0	0	0	0
	0	0	$2^k + 2a^2$	0	0	0
	$2^k + 2a^2$	0	0	$2^k + 2a^4$	2^k	0
	$2^k + 2a^2$	0	0	2^k	$2^k + 2a^4$	0
	0	0	0	0	0	2^k

TABELA 2. Matriz $X'X = S$ para $k = 3$.

$S =$	$2^k + 2k + 1 + P$	0	0	0	$2^k + 2a^2$	$2^k + 2a^2$	$2^k + 2a^2$	0	0	0
	0	$2^k + 2a^2$	0	0	0	0	0	0	0	0
	0	0	$2^k + 2a^2$	0	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	$2^k + 2a^2$	0	0	0	0	0	0
	$2^k + 2a^2$	0	0	0	$2^k + 2a^4$	2^k	2^k	0	0	0
	$2^k + 2a^2$	0	0	0	2^k	$2^k + 2a^4$	2^k	0	0	0
	$2^k + 2a^2$	0	0	0	2^k	2^k	$2^k + 2a^4$	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	2^k	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	2^k	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2^k

$$2^k \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P} = 0$$

Desenvolvendo, fica:

$$2^k (2^k + 2k + 1 + P) = (2^k + 2a^2)^2$$

$$4a^4 + 2^k + 2a^2 - 2^k(2k + 1 + P) = 0$$

Fazendo $a^2 = D$, vem

$$4D^2 + 2^k + 2D - 2^k(2k + 1 + P) = 0$$

logo,

$$D = \frac{-2^k + 2}{8} \pm$$

$$\pm \frac{\sqrt{(2^k + 2)^2 + 16 \cdot 2^k (2k + 1 + P)}}{8}$$

$$D = \frac{-2^k + 2}{2^3} \pm$$

$$\pm \frac{\sqrt{2^{2k+4} + 16 \cdot 2^k (2k + 1 + P)}}{64}$$

$$D = -2^{k-1} \pm$$

$$\pm \sqrt{2^{2k-2} + 2^{k-2} (2k + 1 + P)}$$

como D não pode ser negativo, temos:

$$\hat{V}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(2^k + 2a^2)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{r2^k} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r} \left[2^k + 2a^4 - \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P} \right]^{-1} \cdot \hat{\sigma}^2$$

O valor de a é obtido em função de k e P , como podemos notar na Tabela 7. Dando valores à esses parâmetros nas fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, obtemos uma tabela das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau (Tabela 8).

Podemos notar, pela Tabela 2, que para um mesmo valor de k , a estimativa da variância da estimativa de β_{ij} permanece constante para qualquer valor de P , enquanto que as estimativas das variâncias das estimativas de β_i e β_{ii} diminuem à medida que aumenta o valor de P , proporcionando maior precisão para estimativa de β_i e β_{ii} .

Quando se usa somente um ponto central, isto é, quando $P = 0$, a precisão da estimativa de β_{ii} é baixa em relação às demais. No entanto, a precisão da estimativa de β_{ii} é praticamente a mesma da estimativa de β_i quando se usa um valor de P igual a sete, isto é, com oito pontos centrais, e superior à precisão da estimativa de β_{ij} para esse mesmo valor de P (Tabela 2).

TABELA 4. Submatriz corrigida para $k = 2$.

	$2^k + 2a^2$	0	0	0	0
	0	$2^k + 2a^2$	0	0	0
$S_c =$	0	0	B	A	0
	0	0	A	B	0
	0	0	0	0	2^k

Nota: $A = 2^k - \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P}$ e

$B = 2^k + 2a^4 - \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P}$

CONCLUSÕES

Do presente trabalho, podemos tirar as seguintes conclusões:

1. A fórmula de a que torna ortogonal o delineamento composto central, com $P + 1$ pontos centrais, é dada pela expressão:

$$a = \left[-2^{k-1} + \left[2^{2k-2} + 2^{k-2} (2k + 1 + P) \right]^{1/2} \right]^{1/2}$$

2. As fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, ajustado a dados provenientes do composto central ortogonal com $P + 1$ pontos centrais, são dadas pelas expressões:

$$\hat{V}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(2^k + 2a^2)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{r2^k} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r} \left[2^k + 2a^4 - \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P} \right]^{-1} \cdot \hat{\sigma}^2$$

3. Para um mesmo valor de k , a estimativa da variância da estimativa de β_{ij} independe de P , enquanto que as estimativas das variâncias das estimativas de β_i e β_{ii} diminuem à medida que o valor de P é aumentado, proporcionando maior precisão de estimativa destes dois parâmetros.

TABELA 5. Submatriz corrigida para k = 3.

$$S_c = \begin{matrix} & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ S_c = & 0 & 0 & 0 & 0 & B & A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & A & B & A & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & A & A & B & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k \end{matrix}$$

Nota: $A = 2^k - \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P}$ e $B = 2^k + 2a^4 - \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P}$

TABELA 6. Submatriz corrigida para k = 4.

$$S_c = \begin{matrix} & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k + 2a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ S_c = & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B & A & A & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A & B & A & A & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A & A & B & A & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A & A & A & B & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^k \end{matrix}$$

Nota: $A = 2^k - \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P}$ e $B = 2^k + 2a^4 - \frac{(2^k + 2a^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P}$

TABELA 7. Valores de α que tornam ortogonal o composto central com P + 1 pontos centrais.

Valor de P	Valor de K		
	2	3	4
0	1,000000	1,215412	1,414214
1	1,078090	1,287189	1,482579
2	1,147443	1,353127	1,546708
3	1,210001	1,414214	1,607173
4	1,267103	1,471195	1,664431
5	1,319719	1,524649	1,718852
6	1,368570	1,575037	1,770742
7	1,414214	1,622729	1,820359
8	1,457088	1,668032	1,867920
9	1,497545	1,711199	1,913610
10	1,535871	1,752446	1,957590

TABELA 8. Estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, no composto central ortogonal.

Valor de K	Valor de P	Estimativas das Variâncias		
		$\hat{\beta}_I$	$\hat{\beta}_{ij}$	$\hat{\beta}_{II}$
2	0	0,166667	0,25	0,5
	1	0,158114	0,25	0,370126
	2	0,150756	0,25	0,288434
	3	0,144338	0,25	0,233253
	4	0,138675	0,25	0,193964
	5	0,133631	0,25	0,164833
	6	0,129099	0,25	0,142529
	7	0,125000	0,25	0,125000
	8	0,121268	0,25	0,110924
	9	0,117851	0,25	0,099415
	10	0,114708	0,25	0,089857
3	0	0,091287	0,125	0,229127
	1	0,088388	0,125	0,182138
	2	0,085749	0,125	0,149147
	3	0,083333	0,125	0,125000
	4	0,081111	0,125	0,106731
	5	0,079057	0,125	0,092532
	6	0,077152	0,125	0,081247
	7	0,075378	0,125	0,072108
	8	0,073721	0,125	0,064588
	9	0,072169	0,125	0,058313
	10	0,070111	0,125	0,053014

TABELA 8. Continuação.

Valor de K	Valor de P	Estimativas das Variâncias		
		β_i	β_{ij}	β_{ii}
4	0	0,050000	0,0625	0,125000
	1	0,049029	0,0625	0,103490
	2	0,048113	0,0625	0,087365
	3	0,047246	0,0625	0,074941
	4	0,046424	0,0625	0,065149
	5	0,045644	0,0625	0,057282
	6	0,044901	0,0625	0,050857
	7	0,044194	0,0625	0,045535
	8	0,043519	0,0625	0,041071
	9	0,042875	0,0625	0,037287
	10	0,042258	0,0625	0,034047

Nota: Os valores desta tabela devem ser multiplicados por $\frac{\sigma^2}{r}$.

4. No caso de se usar somente um ponto central, isto é, quando $P = 0$, a precisão da estimativa de β_{ii} é muito baixa quando comparada com as demais.

5. Quando são usados oito pontos centrais ($P = 7$), a precisão da estimativa de β_{ii} é praticamente igual à precisão da estimativa de β_i e superior a da estimativa de β_{ij} .

REFERÊNCIAS

- BATISTA, L.B. Determinação de α para tornar ortogonal o delineamento composto central (Box). Piracicaba, ESALQ, 1976. Tese.
- BOX, G.E.P. & WILSON, K.B. On the experimental attainment of optimum conditions. Journal of the Royal Statistical Society, series B., 13(1):1-45, 1951.
- COCHRAN, W.G. & COX, G.M. Experimental designs. 2.ed. New York, John Wiley & Sons Inc., 1957.
- DAVIES, O.L. Design and analysis of industrial experiments. Edimburg, Oliver & Boyd, 1954.
- GOMES, F.P. & CAMPOS, H. The efficiency of factorial 3^3 designs as compared to a central composite rotatable design. Potash Review, fev. 1972.
- LI, J.C.R. Statistical inference II. Edwards Brothers, 1964. p. 169-71.
- PENTEADO, A.F. & BATISTA, L.B. Eficiência do ensaio composto central (Box) em comparação com os fatoriais completos de dois fatores. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE CIÊNCIA DO SOLO. 13., Vitória, E.S., 1971.
- YATES, F. The design and analysis of factorial experiments. Tech. Commun. Bur. Soil Sci., Harpenden, 35:77, 1937.

ABSTRACT.- DETERMINATION OF FORMULAS ON THE ORTHOGONAL CENTRAL COMPOSITE DESIGN (BOX)

A theoretical study was devised to determine the formula of α which makes orthogonal the central composite design (Box), with $P + 1$ central points and maximum of four factors. The following expressions of α was obtained:

$$\alpha = [-2^{k-1} + [2^{2k-2} + 2^{k-2} (2k + 1 + P)]^{1/2}]^{1/2}$$

It was equally verified that in the case of the orthogonal central composite design, with $P + 1$ central points, the formulas which estimated the variances of the estimates of the polynomial equation coefficients, could be calculated through the following expressions:

$$\hat{V}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(2^k + 2\alpha^2)} \cdot \sigma^2 \quad \hat{V}(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{r 2^k} \cdot \sigma^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r} [2^k + 2\alpha^4 - \frac{(2^k + 2\alpha^2)^2}{2^k + 2k + 1 + P}] \cdot \sigma^2$$

Finally, it was verified that when the orthogonal central composite design has eight central points, the coefficients $\hat{\beta}_{ii}$ of the squared terms are estimated as precise as the coefficients $\hat{\beta}_i$ and more precise than the coefficients $\hat{\beta}_{ij}$.

Index terms: Experimental Design or Response Surface.