DELINEAMENTO EM CÍRCULOS[1]

LAURO BOECHAT BATISTA[2]

RESUMO - Foi apresentado um novo tipo de delineamento, denominado Delineamento em Círculos, que tem por finalidade o ajustamento, aos dados, de um polinômio do segundo grau, com dois fatores. Na formulação deste novo delineamento foram levados em consideração os princípios de maior número de níveis para cada fator, menor número de combinações entre eles e independência na estimação dos coeficientes. Neste novo delineamento, temos dois conjuntos de pontos distanciados do ponto central, sendo que no primeiro a distância é $\sqrt{2}$, enquanto que no segundo conjunto a distância é $a\sqrt{2}$. Com a ortogonalização do Delineamento em Círculos, foram determinadas fórmulas para estimar as variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau. Foi observado que, à medida que o valor de P aumenta, as estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau diminuem, aumentando a precisão das estimativas destes coeficientes. Foram determinadas fórmulas que permitem os cálculos das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com a ortogonalização do Delineamento em Círculos. Foram também obtidas fórmulas que permitem calcular as somas de quadrados para os coeficientes. Quando se deseja instalar no campo este delineamento, recomenda-se o uso de somente um ponto central com r repetições dos 17 tratamentos. Em laboratório ou em estufa, podem-se usar somente repetições do ponto central, não sendo necessário a repetição dos demais pontos.

Termos para indexação: estatística experimental ou superfície de resposta.

INTRODUÇÃO

BOX & WILSON (1951) apresentaram os Delineamentos Compostos Centrais que têm por finalidade o ajustamento de um polinômio do segundo grau aos dados provenientes desses delineamentos.

BOX & HUNTER (1957) propuseram o critério de rotacionalidade nos Delineamentos Compostos Centrais, em que, no caso de dois fatores, os pontos fora do centro ficam em uma circunferência de raio $\sqrt{2}$.

PENTEADO & BATISTA (1971) estudaram a eficiência do Delineamento Composto Central em comparação com os fatoriais completos de dois fatores.

BATISTA (1976) estudou a condição de ortogonalidade no Delineamento 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 o autor usou somente um ponto central.

BATISTA & SILVA (1977) estudaram as condições de ortogonalidade no Delineamento Composto Central com um máximo de quatro fatores, além das determinações das fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, usando P + 1 pontos centrais. Naquele trabalho os autores chegaram à conclusão de que, quando se usam oito pontos centrais, a precisão de estimativa de β_{ii} é praticamente igual à precisão da estimativa de β_i é superior à da estimativa de β_{ij}.

Muitos outros pesquisadores estudaram os Compostos Centrais, sendo que alguns deles propuseram delineamentos próprios, porém com o mesmo objetivo dos Delineamentos Compostos Centrais.

Como é notório, os Fatoriais Completos apresentam grandes vantagens. No entanto, os Delineamentos Compostos Centrais apresentam uma grande vantagem sobre os Fatoriais Completos, pois utilizam menor número de combinações entre os níveis dos fatores, proporcionando menor erro experimental. Dentre os Compostos Centrais, ao nosso ver, o Composto Central Ortogonal é o mais vantajoso, visto que a estimação de cada coeficien-

---

1 Aceito para publicação em 18 de março de 1978.

2 Docente do Departamento de Matemática da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. 23.460 - Seropédica, RJ.

te do polinômio do segundo grau é independente da estimação dos demais. Por outro lado, o Composto Central Ortogonal com dois fatores apresenta somente três níveis diferentes para cada fator, quando se usa somente um ponto central. Usando-se mais de um ponto central, cada fator passa a ter cinco níveis diferentes.

O número de níveis que cada fator deve utilizar é de grande importância, pois proporciona melhor estimação da real equação do polinômio do segundo grau.

Fundamentando-se nos princípios de que um delineamento deve ter maior número de níveis para cada fator, menor número de combinações entre eles e independência na estimação dos coeficientes do polinômio do segundo grau, o autor se propõe a apresentar um novo tipo de delineamento que cubra estes três princípios, no caso do estudo de dois fatores.

MATERIAL E MÉTODOS

Suponhamos que se tenha uma idéia da localização do ponto de máximo (ou de mínimo) da resposta, representada por um polinômio do segundo grau. Na região onde se supõe estar esse ponto, fixamos um ponto de coordenadas (0, 0).

Deste ponto, traçamos uma circunferência de raio $\sqrt{2}$ e dividimos esta circunferência em oito partes iguais, começando do ponto $(\sqrt{2}, 0)$. Do mesmo ponto central, traçamos uma outra circunferência com raio $a\sqrt{2}$, de modo que alfa seja menor do que um, e dividimos esta circunferência em oito partes iguais, começando do ponto $(a\sqrt{2}, 0)$. Assim, passamos a ter um novo delineamento, que doravante será denominado Delineamento em Círculos (Fig. 1).

Este novo delineamento apresenta nove níveis para cada fator e 16 + P combinações entre eles, enquanto que o Fatorial Completo com nove níveis e dois fatores apresenta um total de 81 combinações. Portanto, podemos verificar que o nov delineamento apresenta esta vantagem em relação ao Fatorial Completo 9 x 9, quando se deseja ajustar aos dados um polinômio do segundo grau.

O valor de a poderá ser escolhido de modo a ortogonalizar o Delineamento em Círculos. Para tanto é necessário que a matriz X'X obtida do modelo matemático seja diagonal. Assim, ajustando

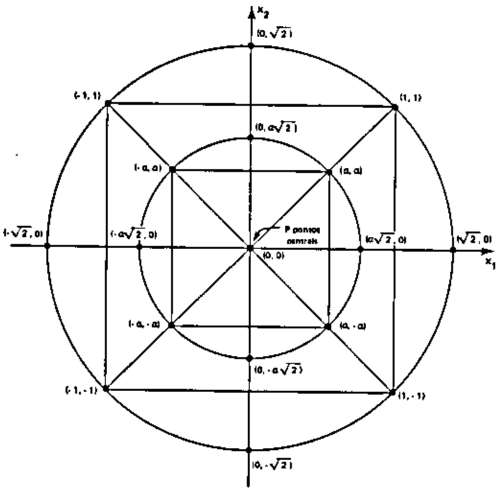

FIG. 1. Delineamento em Círculos.

aos dados provenientes deste delineamento um polinômio do segundo grau dois fatores dado pelo modelo matemático:

$$Y_u - \bar{Y} = \beta_1 X_{1u} + \beta_2 X_{2u} + \beta_{11} (X_{1u}^2 - \overline{X_{1u}^2}) + \beta_{22} (X_{2u}^2 - \overline{X_{2u}^2}) + \beta_{12} X_{1u} X_{2u} + e_u ,$$

teremos a matriz X (Tabela 1).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para que a estimação dos coeficientes seja independente, a matriz X'X tem de ser diagonal (Tabela 2). Portanto, igualando E a zero (E = 0), teremos uma matriz diagonal, e, conseqüentemente, as estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau tornam-se independentes. Assim,

$$4 + 4a^4 - \frac{(8 + 8a^2)^2}{16 + P} = 0$$

TABELA 1. Matriz X

x_{1u}	x_{2u}	$(x_{1u}^2 - \overline{x_{1u}^2})$	$(x_{2u}^2 - \overline{x_{2u}^2})$	$x_{1u}\,x_{2u}$	
1	1	1 - A	1 - A	1	
-1	-1	1 - A	1 - A	1	
-1	1	1 - A	1 - A	-1	
1	-1	1 - A	1 - A	-1	
0	$\sqrt{2}$	0 - A	2 - A	0	
0	$-\sqrt{2}$	0 - A	2 - A	0	
$\sqrt{2}$	0	2 - A	0 - A	0	
$-\sqrt{2}$	0	2 - A	0 - A	0	
a	a	a^2 - A	a^2 - A	a^2	
$-a$	$-a$	a^2 - A	a^2 - A	a^2	
$-a$	a	a^2 - A	a^2 - A	$-a^2$	
a	$-a$	a^2 - A	a^2 - A	$-a^2$	
0	$a\sqrt{2}$	0 - A	$2a^2$ - A	0	
0	$-a\sqrt{2}$	0 - A	$2a^2$ - A	0	
$a\sqrt{2}$	0	$2a^2$ - A	0 - A	0	
$-a\sqrt{2}$	0	$2a^2$ - A	0 - A	0	
0	0	0 - A	0 - A	0	P
0	0	0 - A	0 - A	0	pontos
		...			
0	0	0 - A	0 - A	0	centrais

onde $\overline{x_{1u}^2} = \overline{x_{2u}^2} = \dfrac{8\,(1 + a^2)}{16 + P} = A$

TABELA 2. Matriz X'X

$8 + 8a^2$	0	0	0	0
0	$8 + 8a^2$	0	0	0
0	0	D	E	0
0	0	E	D	0
0	0	0	0	$4 + 4a^4$

Onde $D = 12 + 12a^4 - \dfrac{(8 + 8a^2)^2}{16 + P}$

$E = 4 + 4a^4 - \dfrac{(8 + 8a^2)^2}{16 + P}$

Desenvolvendo, fica:

$$P\,a^4 - 32\,a^2 + P = 0$$

Fazendo $a^2 = F$, teremos:
$P\,F^2 - 32\,F + P = 0$

Resolvendo a equação e considerando que o valor de a deve ser menor do que um, vem:

$$F = \frac{16 - \sqrt{256 - P^2}}{P}$$

Mas $a^2 = F$. Portanto, o valor de a em valor absoluto será:

$$a = \left[\frac{16 - (256 - P^2)^{1/2}}{P}\right]^{1/2}$$

Atribuindo valores a P de um a dez, obtemos uma tabela que torna ortogonal o Delineamento em Círculos com P pontos centraais (Tabela 3).

Através da fórmula de a, que torna ortogonal o Delineamento em Círculos, podemos verificar que quando P = 16, o valor de a é igual a um.

TABELA 3. Valor de a que torna ortogonal o Delineamento em Círculos

Valor de P	Valor de a
1	0,176863
2	0,250492
3	0,307553
4	0,356394
5	0,400329
6	0,441135
7	0,479956
8	0,517638
9	0,554902
10	0,592453

Quando E = 0, a matriz X'X torna-se diagonal e é bem simples a inversão dela. Porém, os cálculos foram efetuados para uma repetição. Se fizermos para r repetições, os elementos da matriz X'X ficarão multiplicados por r. Podemos assim notar que os elementos correspondentes aos coeficientes $\hat{\beta}_i$, $\hat{\beta}_{12}$ e $\hat{\beta}_{ii}$ são, respectivamente, na matrix X'X:

$$r\,(8 + 8\,a^2)\,,\ r\,(4 + 4\,a^4)\ \text{e}\ r\,[12 + 12\,a^4 - \frac{(8 + 8\,a^2)^2}{16 + P}]$$

Porém, a inversa da matriz X'X é a matriz de dispersão dividida por σ^2. Portanto, as estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau serão dadas pelos elementos correspondentes de X'X, multiplicados por $\hat{\sigma}^2$. Então,

$$\hat{V}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(8 + 8\,a^2)}\,.\,\hat{\sigma}^2,\ \hat{V}(\hat{\beta}_{12}) = \frac{1}{r(4 + 4\,a^4)}\,.\,\hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r}\,.\,[12\,(1 + a^4) - \frac{(8 + 8\,a^2)^2}{16 + P}\,]^{-1}.\,\hat{\sigma}^2$$

Atribuindo valores a P de um a dez, temos a tabela das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com dois fatores, em delineamento em círculos (Tabela 4).

TABELA 4. Estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, com dois fatores, no Delineamento em Círculos Ortogonal

Valor de P	Estimativas das Variâncias		
	$\hat{\beta}_i$	$\hat{\beta}_{12}$	$\hat{\beta}_{ii}$
1	0,121209	0,249756	0,124878
2	0,117620	0,249020	0,124510
3	0,114198	0,247783	0,123892
4	0,110912	0,246031	0,123015
5	0,107734	0,243740	0,121870
6	0,104638	0,240878	0,120439
7	0,101596	0,237402	0,118701
8	0,098584	0,233253	0,116627
9	0,095572	0,228350	0,114175
10	0,092524	0,222578	0,111289

Nota: Os valores desta tabela devem-se multiplicar pela fração $\frac{\hat{\sigma}^2}{r}$.

Pode-se notar, pela Tabela 4, que a precisão da estimativa da variância da estimativa de β_{ii} é praticamente igual à precisão da estimativa da variância da estimativa de β_i e bem superior à precisão da estimativa da variância da estimativa de β_{12}, quando se usa somente um ponto central. Pode-se ainda notar, pela Tabela 2, que há um pequeno incremento de precisão nas estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau, quando se aumenta o valor de P.

Pela teoria dos quadrados mínimos, sabemos que $\hat{\beta}_i$, $\hat{\beta}_{ii}$ e $\hat{\beta}_{12}$ são determinados matricialmente por:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}\,(X'Y)$$

Assim, podemos facilmente determinar as fórmulas que permitem os cálculos das estimativas dos coeficientes, no presente delineamento. Portanto, teremos:

$$\hat{\beta}_i = \frac{\Sigma\,X_{iu}\,Y_u}{r\,(8 + 8\,a^2)}$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \frac{\Sigma\,X_{iu}^2\,Y_u - \dfrac{(8 + 8\,a^2)\,\Sigma\,Y_u}{16 + P}}{r\,[12 + 12\,a^4 - \dfrac{(8 + 8\,a^2)^2}{16 + P}\,]}$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{\Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u}{r(4 + 4\alpha^4)}$$

onde X_{iu}, X_{iu}^2 e $X_{1u} X_{2u}$ são os valores encontrados nas colunas da matriz X (Tabela 1).

Do modelo matemático, podemos verificar que a expressão que possibilita a determinação de $\hat{\beta}_0$ é dada pela expressão:

$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \frac{(8 + 8\alpha^2)}{16 + P} (\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{22})$$

As somas dos quadrados referentes aos coeficientes são dadas pelas expressões:

$$SQ(\hat{\beta}_i) = \hat{\beta}_i \Sigma X_{iu} Y_u$$

$$SQ(\hat{\beta}_{ii}) = \hat{\beta}_{ii} [\Sigma X_{iu}^2 Y_u - \frac{(8 + 8\alpha^2)(\Sigma Y_u)}{16 + P}]$$

$$SQ(\hat{\beta}_{12}) = \hat{\beta}_{12} \Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u$$

Devemos levar em consideração onde o experimento será instalado. Assim, podemos ter 2 casos:

Caso 1 - No campo

Caso 2 - Em laboratório ou em estufa.

No caso 1, recomenda-se o uso de somente um ponto central, isto é, P = 1 e os 17 tratamentos deverão ser repetidos r vezes. A escolha de P = 1 com r repetições dos 17 tratamentos, quando o experimento é instalado no campo, tem como objetivo principal facilitar a determinação da tabela de análise de variância, como podemos notar (Tabela 5).

No caso 2, pode-se usar somente um conjunto de combinações, isto é, 16 + P tratamentos, procurando um valor de P de tal maneira que o erro experimental seja melhor estimado. Um bom valor de P poderia ser dez, pois assim a estimativa da variância do erro seria determinada com nove graus de liberdade, perto dos dez graus de liberdade que são recomendados pela técnica experimental. Neste segundo caso, teremos outra tabela de análise de variância (Tabela 6).

Após ajustada a equação do polinômio do segundo grau aos dados obtidos, pode-se aplicar a técnica de congruência de matrizes para verificar se a função tem máximo ou mínimo ou ponto de sela (PIMENTEL GOMES 1969).

TABELA 5. Análise de variância, com P = 1 e r repetições

Fontes de Variação	G.L.	S.Q.
Total	17 r - 1	(a) Da maneira usual
Repetições	r - 1	(b) Da maneira usual
$\hat{\beta}_1$	1	(c) Pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_2$	1	(d) Pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{11}$	1	(e) Pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{22}$	1	(f) Pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{12}$	1	(g) Pela fórmula apresentada
Falta de ajuste	11	(h) SQ tratamentos - (c + d + e + f + g)
Erro	16 (r - 1)	(i) a - (b + c + d + e + f + g + h)

TABELA 6. Análise de variância, com 16 + P tratamentos e r = 1

Fontes de Variação	G.L.	S.Q.
Total	16 + P - 1	(a) Da maneira usual
$\hat{\beta}_1$	1	(b) Pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_2$	1	(c) Pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{11}$	1	(d) Pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{22}$	1	(e) Pela fórmula apresentada
$\hat{\beta}_{12}$	1	(f) Pela fórmula apresentada
Falta de ajuste	11	(g) a - (b + c + d + e + f + h)
Erro	P - 1	(h) $\Sigma (Y_p - \overline{Y}_p)^2$

CONCLUSÕES

Do novo delineamento apresentado, Delineamento em Círculos, podemos tirar as seguintes conclusões:

1. A fórmula de α, que torna ortogonal o delineamento em círculos, é dada pela expressão:

$$\alpha = \left[\frac{16 - (256 - P^2)^{1/2}}{P}\right]^{1/2}$$

2. As fórmulas das estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau do delineamento em círculos ortogonal, são dadas pelas expressões:

$$\hat{V}(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{r(8 + 8\alpha^2)} \cdot \hat{\sigma}^2, \; \hat{V}(\hat{\beta}_{12}) = $$

$$= \frac{1}{r(4 + 4\alpha^4)} \cdot \hat{\sigma}^2$$

$$\hat{V}(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{1}{r} \cdot \left[12(1 + \alpha^4) - \frac{(8 + 8\alpha^2)^2}{16 + P}\right]^{-1} \cdot \hat{\sigma}^2$$

3. Podemos notar, pela Tabela 4, que, à medida que o valor de P aumenta, as estimativas das variâncias das estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau diminuem, aumentando a precisão das estimativas destes coeficientes.

4. As estimativas dos coeficientes do polinômio do segundo grau são dadas pelas expressões:

$$\hat{\beta}_i = \frac{\Sigma X_{iu} Y_u}{r(8 + 8\alpha^2)}$$

$$\hat{\beta}_{ii} = \frac{\Sigma X_{iu}^2 Y_u - \dfrac{(8 + 8\alpha^2)\Sigma Y_u}{16 + P}}{r\left[12 + 12\alpha^4 - \dfrac{(8 + 8\alpha^2)^2}{16 + P}\right]}$$

onde Y_p são os valores de Y_u referentes ao ponto (0, 0).

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{\Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u}{r(4 + 4\alpha^4)}$$

$$SQ(\hat{\beta}_{12}) = \hat{\beta}_{12} \Sigma X_{1u} X_{2u} Y_u$$

$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \frac{(8 + 8\alpha^2)}{16 + P} (\hat{\beta}_{11} + \hat{\beta}_{22})$$

5. As somas dos quadrados referentes aos coeficientes são dadas pelas expressões:

$$SQ(\hat{\beta}_i) = \hat{\beta}_i \Sigma X_{iu} Y_u$$

$$SQ(\hat{\beta}_{ii}) = \hat{\beta}_{ii}\left[\Sigma X_{iu}^2 Y_u - \frac{(8 + 8\alpha^2)(\Sigma Y_u)}{16 + P}\right]$$

6. Quando se deseja instalar este novo tipo de delineamento em campo, deve-se utilizar somente um ponto central, repetindo os 17 tratamentos.

7. Em laboratório ou em estufa, podem-se usar somente repetições do ponto central, neste novo tipo de delineamento apresentado.

REFERÊNCIAS

BATISTA, L.B. Determinação de α para tornar ortogonal o delineamento composto central (Box). Piracicaba, ESALQ. 1976. Tese.

————. & SILVA, S.C. Determinações de fórmulas no delineamento composto central ortogonal (Box). Pesq. agropec. bras., Brasília, 13 (Nº 2):39-47, 1978.

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

————. & WILSON, K.B. On the experimental attainment of optimum conditions. Journal of the Royal Statistical Society, série B, 13(1):1-45, 1951.

PENTEADO, A.L. & 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.

PIMENTEL, G.F. Novos aspectos de estudo econômico de ensaio de adubação Fertilité, (34):3-9, 1969.

ABSTRACT - CIRCLES DESIGN

A new design was developed specifically for fitting to data a second degree polynomial with two variables. The criterion in constructing the design was to make it orthogonal when two parameters are involved. What interests is the value of a, which makes the design orthogonal and which is given by a proper expression in this study. The formulas which estimate the variances of the polynomial regression coefficients, in the case of the Orthogonal Circles Design with P center points, were also calculated. It was verified that these estimates of variances are better (lower variance) when the value of P becomes larger; also the formulas which estimate the polynomial equation coefficients, as well as the sums of squares of the polynomial equation coefficients were calculated. In field experiments, it is recommended to use only one center point and then replicate it, as well as the other 16 treatment combinations, in randomized blocks. Finally, it is recommended that in the green-house or laboratory it may be necessary to replicate only the center point.

Index terms: experimental design or response surface.