

DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL COM DUAS ESTRELAS¹

ARMANDO CONAGIN²

RESUMO - Trata-se de um delineamento simétrico, da "Família do Composto Central", caracterizado, pela presença de duas estrelas. É composto por um fatorial ao nível de $\pm W$, duas estrelas aos níveis $\pm \alpha$ e $\pm \gamma \alpha$ para cada fator (a nível zero dos fatores remanescentes) e pontos centrais, apresentando, cinco ou sete níveis para cada fator. Na Agricultura, os experimentos, diversamente dos tecnológicos, principalmente em pesquisas de fertilizantes, em face do solo e da variabilidade do clima, devem ser montados com todos os tratamentos do delineamento colocados no campo, de uma só vez. No caso de experimentos de adubação do tipo NPK, as respostas podem ser mais amplas nos anos bons e menos amplas nos anos ruins. Esse delineamento possibilita, a avaliação da resposta sobre toda a amplitude pesquisada, nos anos bons; nos anos ruins, com "resposta em platô", pode-se, pela eliminação da estrela exterior, analisa-lo como um composto central. Obtêm-se estimativas, "não-enviesadas" para os coeficientes do modelo, possibilitando fazer a análise estatística, e também a econômica. Apresentam-se seis Tabelas; em três delas se encontram os delineamentos ortogonais, casualizados para número de fatores variando de dois a sete; as outras três apresentam delineamentos não ortogonais, mais também divisíveis em blocos.

CENTRAL COMPOSITE DESIGN WITH TWO STARS

ABSTRACT - This paper deals with the type of design known as "Central Composite, with Two Stars", a symmetric type, composed of a factorial (or fractional factorial) at the level $\pm W$, two stars at levels $\pm \alpha$ and $\pm \gamma \alpha$ for each factor (at zero level of the remaining factors) and central points, presenting, normally, five or seven levels for each factor. In Agriculture, differently from technological experiments, principally in fertilizer research, due to soil and climatic variability, the experiments should be performed with all treatments allocated at the same time. In experiments with NPK, the responses obtained may be higher and enlarged in the good years smaller in the unfavourable years. These designs fit better these situations, because if the year was good, the complete design takes care of the situation; if the year was bad and the surface response presents a "plateau area", the elimination of the external star allows the determination of "unbiased estimate" of the coefficients of the model on the crescent part of the response surface. This article presents six Tables, Three of them present the orthogonal designs randomized for factors varying from two to seven; the last three tables present designs that are not only orthogonal, but divisible in blocks.

Index terms: symmetric type, central point, plateau and surface response, unbiased estimate.

INTRODUÇÃO

Os delineamentos compostos centrais têm sido bastante utilizados nas pesquisas científica, tecnológica e industrial. Eles têm-se constituído em um competidor dos delineamentos fatoriais e dos fato-

riais fracionados. Constam, basicamente, de uma parte fatorial (ou fração de um fatorial), de pontos axiais nos níveis $-\alpha$ e $+\alpha$ de cada fator para a dose média dos demais fatores e de pontos localizados no centro do delineamento. A teoria sobre esses delineamentos e o desenvolvimento dos vários tipos é devida a Box & Wilson (1951), Box & Hunter (1957) e a outros.

Esses delineamentos são bastante flexíveis; possibilitam ao pesquisador, para um número determinado de fatores, escolher entre os tipos não-orto-

¹ Aceito para publicação em 22 de abril de 1982.

Apresentado na Reunião Anual da Região Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria, Abril 1981.

² Ex-Diretor da Divisão de Plantas Alimentícias Básicas do IAC. Aposentado.

gonais, ortogonais, rotacionais, e ortogonais e rotacionais (Box & Hunter 1957, Myers 1971). Podem, ainda, em certas circunstâncias, ser subdivididos em blocos, ortogonalmente, sem perder certas características como a ortogonalidade e a rotacionalidade (Conagin, prelo; a). Em experimentos industriais e ainda em áreas onde o controle experimental é bastante bom, com coeficiente de variação baixo e onde os resultados são repetíveis de uma determinação a outra, é de toda conveniência montar o experimento de forma que se possa caminhar no sentido da otimização do sistema; isso é feito executando-se uma parte do experimento, avaliando-se os resultados e aplicando-se a técnica do caminhamento ascendente ótimo (steepest ascent) (Myers 1971), no sentido de se chegar à área de platô ou de pouco progresso, quando, então, se coloca a parte mais importante do delineamento para a avaliação da parte curvilínea aí existente; assim é possível se chegar à solução ótima, que maximiza os resultados do sistema (Cochran & Cox 1957).

MATERIAL E MÉTODOS

O delineamento composto central, descrito a seguir, é do tipo simétrico; consta de uma parte fatorial ou de um fatorial fracionado, de uma parte axial nos níveis $\pm \alpha$ e $\pm \gamma\alpha$ para cada um dos fatores para o nível zero dos demais fatores, e, ainda, de um ou mais pontos centrais.

Na sua forma geral, para k fatores, o delineamento é constituído de $N = 2^{k-f} + 2k + 2k + n$, em que 2^{k-f} representa a parte fatorial (sendo k o número de fatores e f o índice de fracionamento); $2k + 2k$ constitui o número de pontos axiais das duas estrelas, e n o número de pontos centrais. Si $f = 0$, o delineamento inclui um fatorial completo; se $f = 1$, trata-se de um fatorial fracionado que utiliza a metade de um fatorial completo; se $f = 2$, a parte fatorial inclui somente a quarta parte de um fatorial completo, e assim por diante.

O modelo de segundo grau para este delineamento, do tipo completamente casualizado, contendo k fatores, levando em consideração a existência de interações simples, é o que se segue:

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

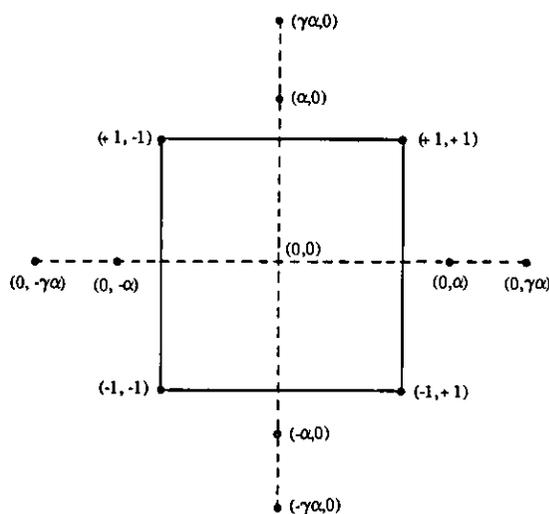
onde $u = 1, 2, 3, \dots, N$

Se, por exemplo, os valores α e $\gamma\alpha$ da parte axial forem escolhidos como 1 e 2, respectivamente, se o nível do fatorial completo for ± 1 e se k for igual a dois, havendo só um ponto central, teremos $N = 2^2 + 4(2) + 1$, ou seja, 13 pontos.

Nesse caso, o delineamento será um composto central com duas estrelas, não ortogonal, pois haverá covariância entre os termos quadráticos puros.

Os demais termos do modelo permanecem independentes.

Abaixo é transcrita a configuração deste delineamento para o caso em que o nível do fatorial é ± 1 , as estrelas são $\pm \alpha$ e $\pm \gamma\alpha$, havendo só um ponto central (0,0).



A matriz das coordenadas, representada por X, e o vetor coluna Y, das observações, são transcritos a seguir.

$$X = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & x_2 & (x_1^2 - c) & (x_2^2 - c) & x_1 x_2 \\ 1 & -1 & -1 & 1-c & 1-c & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1-c & 1-c & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1-c & 1-c & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1-c & 1-c & 1 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 - c & -c & 0 \\ 1 & -\gamma\alpha & 0 & \gamma^2\alpha^2 - c & -c & 0 \\ 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 - c & -c & 0 \\ 1 & \gamma\alpha & 0 & \gamma^2\alpha^2 - c & -c & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & -c & \alpha^2 - c & 0 \\ 1 & 0 & -\gamma\alpha & -c & \gamma^2\alpha^2 - c & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & -c & \alpha^2 - c & 0 \\ 1 & 0 & \gamma\alpha & -c & \gamma^2\alpha^2 - c & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -c & -c & 0 \end{bmatrix} \quad Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \\ Y_5 \\ Y_6 \\ Y_7 \\ Y_8 \\ Y_9 \\ Y_{10} \\ Y_{11} \\ Y_{12} \\ Y_{13} \end{bmatrix}$$

A matriz $A = X'X$, correspondente à matriz X, acima, é representada a seguir:

$$A = X'X = \begin{bmatrix} N & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p & q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h \end{bmatrix} \quad \text{onde:} \quad A_2 = \begin{bmatrix} p & q \\ q & p \end{bmatrix}$$

Nessa matriz:

$$\begin{aligned} N &= F' + 2k + 2k + n = 4 + 4 + 4 + 1 = 13 \\ d &= F' + 2\alpha^2 (1 + \gamma^2) = 4 + 2\alpha^2 (1 + \gamma^2) \\ p &= F' (1 - c)^2 + 2 (\alpha^2 - c)^2 + 2 (\gamma^2 \alpha^2 - c)^2 + (T - 4) c^2 \\ q &= F' (1 - c)^2 - 4c (\alpha^2 - c) - 4c (\gamma^2 \alpha^2 - c) + (T - 8) c^2 \\ h &= F' = 4 \\ T &= 2k + 2k + n = 2(2) + 2(2) + 1 = 9 \\ c &= d \div N \\ F' &= 2^2 = 4 \end{aligned}$$

No caso geral, com k fatores, haverá se adotado o modelo ⁽¹⁾, t termos a serem estimados, sendo $t = 1 + k + k + k(k - 1) \div 2$, havendo o termo correspondente a β_0 , k termos β_i (i = 1, 2, ..., k), k termos β_{ii} (i = 1, 2, ..., k) e C_k^2 termos, correspondentes às interações simples. A matriz $A = X'X$ terá, na diagonal, o elemento N; existem k elementos d, a matriz A_k , (correspondente a A_2), composta de k linhas e k colunas, que contém só valores p na diagonal principal e valores q fora dela e, ainda, C_k^2 termos h (correspondentes às interações simples), na diagonal principal; os demais termos da matriz A são todos nulos.

Como pode ser visto, a forma da matriz A e a de sua inversa, A^{-1} , são, ambas, de tipo semelhante às do delineamento composto central com uma estrela.

As características do modelo com k fatores em que $\pm W$ representa os níveis da parte fatorial, $\pm \alpha$ e $\pm \gamma \alpha$ os níveis da parte axial, e considerando n pontos centrais, são:

$$\begin{aligned} N &= F' + 2(k) + 2(k) + n, \quad T = 2(2k) + n, \\ d &= F'W^2 + 2\alpha^2 (1 + \gamma^2), \quad c = d \div N, \\ p &= F' (W^2 - c)^2 + 2 (\alpha^2 - c)^2 + 2 (\gamma^2 \alpha^2 - c)^2 + (T - 4)c^2, \\ q &= F' (W^2 - c)^2 - 4c (\alpha^2 - c) - 4c (\gamma^2 \alpha^2 - c) + (T - 8) c^2, \\ h &= F' W^4 \quad c \quad F' = 2^{k-f} \end{aligned} \quad (2)$$

Demonstra-se que:

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

O delineamento completamente casualizado, não-ortogonal, apresenta o inconveniente de exibir covariâncias entre os coeficientes quadráticos puros, de modo que, na análise da variância, esses coeficientes só podem ser testados englobadamente.

Ortogonalização do delineamento

Se se impuser a condição de que $q = 0$ (Myers 1971), a matriz A ficará ortogonal, isto é, com termos só na diagonal principal. Na análise da variância é possível, por isso, pôr em prova a significância de todos os coeficientes do modelo, um a um, deixando para o estudo das propriedades da superfície de resposta, ou para a análise econômica de experimentos de adubação, só aqueles termos que forem significativos (a um nível $\alpha\%$, adequado, pré-escolhido, do erro do tipo I). (Conagin & Jorge, prelo).

Partindo-se da equação geral em que W é o nível do fatorial e fazendo $q = 0$, substituindo c pelo seu valor, em função de α e $\gamma \alpha$, chega-se à expressão:

$$\begin{aligned} -\frac{N}{4} q &= \alpha^4 (1 + \gamma^2)^2 + W^2 F' \alpha^2 (1 + \gamma^2) - W^4 \frac{F'}{4} (N - F') = \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Dependendo dos valores escolhidos para W e γ , do número de fatores k, estudados para casos em que o fatorial é completo (f = 0), metade de um fatorial (f = 1), ou só a quarta parte (f = 2), e considerando-se a inclusão de um só ponto central (n = 1), obtiveram-se alguns tipos, que são, a seguir, considerados:

Tipo 1

Para $W = 1, k = 2, 3, 4, 5, 6$ e $7, f = 0, 1, 2, n = 1$ e $\gamma = \sqrt{2}$ foram determinados os valores de α que possibilitam tornar $q = 0$, em (3); as características dos delineamentos completamente casualizados obtidos são as que constam da Tabela 1.

Os delineamentos obtidos são altamente satisfatórios para $k = 4, 5, 6$ e 7 , proporcionando valores de $\gamma \alpha$ não inferiores a 1,4 e não superiores a 2, proporcionando a alocação da segunda estrela a uma distância conveniente (Myers 1971).

Tipo 2

Para $W = 1, k = 2, 3, 4, 5, 6$ e $7, f = 0, 1, 2, n = 1$ e $\gamma = 2$, foram determinados os valores de α que tornam $q = 0$; as características dos delineamentos obtidos constam da Tabela 2.

Os resultados são altamente satisfatórios para $k = 3, 4, 5$ e 6 , pois para esses valores de k, foram obtidos valores de $\gamma \alpha$ compreendidos entre 1,4 e 2,0.

Tipo 3

Para $W = 1, \alpha = 1$, para $k = 2, 3, 4, 5, 6$ e $7, f = 0, 1$ e 2 , e para $n = 1$, calculou-se o valor de γ , que torna $q = 0$, em (3); os delineamentos e suas características constam da Tabela 3.

Os resultados obtidos são altamente satisfatórios para $k = 4, 5$ e 6 , pois proporcionam níveis bastante convenientes para a segunda estrela. Neste caso, os delineamentos

TABELA 1. Composto central com duas estrelas - delineamentos ortogonais, utilizando o menor número possível de pontos centrais. Níveis $\pm \alpha\sqrt{2}$; $\pm \alpha$; ± 1 e zero.

	k=2	k=3	k=4	k=5	k=5	k=6	k=7
N	13	21	33	37	53	57	93
repetição	completa	completa	completa	metade	completa	metade	metade
n	1	1	1	1	1	1	1
α	0,7316	0,9093	1,0784	1,1784	1,2371	1,3359	1,4804
$\alpha\sqrt{2}$	1,0346	1,2859	1,5251	1,6664	1,7495	1,8893	2,0936
W	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
c	0,5547	0,6172	0,6963	0,6576	0,7770	0,7493	0,8296
d	7,2112	12,9616	22,9786	24,3310	41,1824	42,7082	77,1490
p	2,8644	6,8376	13,5280	19,2793	23,4212	31,8515	48,0267
h	4,0000	8,0000	16,0000	16,0000	32,0000	32,0000	64,0000
$\sum x_{iu}^4 \div \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2$	1,7161	1,8547	1,8455	2,2050	1,7319	1,9954	1,7504

TABELA 2. Composto central com duas estrelas - delineamentos ortogonais, utilizando o menor número possível de pontos centrais. Níveis $\pm 2\alpha$; $\pm \alpha$; ± 1 e zero.

	k=2	k=3	k=4	k=5	k=5	k=6	k=7
N	13	21	33	37	53	57	93
repetição	completa	completa	completa	metade	completa	metade	metade
n	1	1	1	1	1	1	1
α	0,5667	0,7044	0,8558	0,9127	0,9583	1,0348	1,1467
2α	1,1333	1,4088	1,7116	1,8254	1,9166	2,0648	2,2934
W	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
c	0,5547	0,6172	0,7068	0,6576	0,7770	0,7493	0,8296
d	7,2110	12,9610	23,3240	24,3310	41,1830	42,7080	77,1490
p	3,5056	8,3679	18,2379	23,5979	28,6713	38,9848	58,7847
h	4,0000	8,0000	16,0000	16,0000	32,0000	32,0000	64,0000
$\sum x_{iu}^4 \div \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2$	1,8764	2,0460	2,1399	2,4749	1,8960	2,2183	1,9185

TABELA 3. Composto central com duas estrelas - delineamentos ortogonais, com o menor número possível de pontos. Níveis ± 1 , ± 1 , $\pm \gamma$ e zero.

	k=2	k=3	k=4	k=5	k=5	k=6	k=7
N	13	21	33	37	53	57	93
repetição	completa	completa	completa	metade	completa	metade	metade
n	1	1	1	1	1	1	1
α	1	1	1	1	1	1	1
$\gamma\alpha$	0,7782	1,2169	1,5777	1,7792	1,8983	2,0867	2,3611
W	1	1	1	1	1	1	1
c	0,5548	0,6172	0,6963	0,6576	0,7775	0,7493	0,8317
d	7,2118	12,9614	22,9782	24,3310	41,2068	42,7084	77,3492
p	2,7335	6,3849	14,3912	22,0408	27,9690	39,9181	64,1523
h	4,0000	8,0000	16,0000	16,0000	32,0000	32,0000	64,0000
$\sum x_{iu}^4 \div \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2$	1,6834	1,7981	1,8995	2,3776	1,8740	2,2474	2,0024

obtidos apresentam, todos, cinco níveis, em vez dos sete níveis dos delineamentos das Tabelas 1 e 2.

Ortogonalização e partição em blocos

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

A combinação das condições consideradas determina que cada bloco, considerado como um delineamento de primeiro grau, seja, ele mesmo, ortogonal, isto é, que se tenha $\sum x_{u(m)} = 0$ (a soma dos coeficientes das unidades, dentro do bloco m, é nula). Ainda, prevalece a relação:

$$[2\alpha^2 (1 + \gamma^2)] \div [F'W^2 + 2\alpha^2 (1 + \gamma^2)] = n_0 \div N \tag{4}, \text{ onde:}$$

$n_0 = 2(2k) + a_0$, em que a_0 representa o número de pontos centrais da parte axial do delineamento $n = a_0 + b_0$; b_0 representa o número de pontos centrais que pertencem à parte fatorial do delineamento.

Impondo a relação (4) e lembrando que $c = f(W, \alpha, \gamma)$ e que $W = \varphi(\alpha, \gamma)$, obtém-se $c = f(\varphi(\alpha, \gamma), \alpha, \gamma)$.

Substituindo-se esses valores em q, definido da forma geral, como em (3), chega-se à relação:

$$q \ n_0^2 \frac{F'}{4} = \alpha^4 (1 + \gamma^2)^2 \left\{ (N - n_0)^2 - NF' \right\} = 0. \tag{5}$$

A condição necessária para a existência de ortogonalização e partição em blocos é, portanto, que $n_0 = N - \sqrt{NF'}$, devendo n_0 ser um número inteiro e maior ou igual a $2k + 2k$.

Obtido o valor n_0 (inteiro), para valores determinados de k, F' e N e para a relação obtida $n_0 \div N = \Omega$, uma vez impostos os valores α e γ , obtém-se o valor de W (nível do fatorial), que satisfaz a relação $n_0 \div N$. Desse tipo de delineamento, foram obtidos vários tipos:

Tipo 4

Para valores de $k = 2, 3, 4, 5, 6$ e 7 , para $f = 0, 1, 2$ e, para os valores estipulados para F' e N, e ainda, fazendo-se $\alpha = 1$ e $\gamma = 1$, 4142, obtiveram-se os resultados da Tabela 4. Pode ser visto que há necessidade de um número bem maior de pontos centrais; esse fato, se por um lado aumenta o número de pontos do delineamento como um todo, encarecendo o seu custo, possibilita, por outro lado, uma estimação do verdadeiro valor do erro e um teste de adequação do modelo. Nota-se que, à medida que k cresce, o valor de W diminui, ficando W bem menor que 1, para valores altos de k. Por isso, consideramos como delineamentos mais desejáveis os que constam da Tabela 4, quando $k = 2, k = 3$ e $k = 4$.

Tipo 5

Fazendo-se $\alpha = 1$ e $\gamma = 2$, nas mesmas condições estipuladas anteriormente, obtiveram-se os resultados que constam da Tabela 5. Nesse caso, os valores de W estão mais próximos de 1, principalmente para $k = 3, 4$ e 5 , o que é bastante desejável (Lucas 1974). Os resultados da Tabela 5 proporcionam, na opinião do autor, níveis de W e α mais desejáveis, com vistas à exploração de uma superfície de resposta que os correspondentes da Tabela 4.

Tipo 6

Fazendo-se $W = \alpha = 1$, para os mesmos n_0 e N utilizadas nas Tabelas 4 e 5, pode-se calcular γ de forma a se obter delineamentos com os níveis $\pm \gamma, \pm 1$ e zero, isto é, com cinco níveis para cada fator em vez dos sete níveis dos existentes nas Tabelas 4 e 5. Os resultados constam da Tabela 6, sendo de destacar como promissores os casos para $k = 3$ (completa), $k = 4$ (metade), $k = 4$ (completa) e $k = 5$ (metade).

Para se obter o melhor confundimento para a parte fatorial (ou fatorial fracionado), visando uma participação adequada, em blocos, devem-se escolher para confundimento as interações de nível elevado que sejam de pouca ou nenhuma importância e cujos "alias" não envolvam interações de dois fatores e ou efeitos principais, se possível. Já existem soluções bem estabelecidas em Davies (1954) e em Hartley (1959).

Cálculo dos coeficientes do modelo

Para estimar os coeficientes β do modelo (1), partimos do sistema de equações normais

$$A\beta = X'Y,$$

onde obtemos:

$$\hat{\beta} = A^{-1} X'Y$$

No caso do exemplo considerado, em que $k = 2, N = 13$ e em que foi imposta a condição de que $q = 0$ (delineamento ortogonal), X é uma matriz 13×6 , X' uma matriz 6×13 , a matriz A^{-1} vai ser uma matriz 6×6 , Y um vetor coluna do tipo 13×1 e $\hat{\beta}$ um vetor coluna do tipo 6×1 , como se segue:

$$X'Y = \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ E \\ F \end{bmatrix}, A^{-1} = \begin{bmatrix} 1/13 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h \end{bmatrix}$$

onde:

TABELA 4. Composto central com duas estrelas, ortogonal e divisível em blocos, para valores escolhidos de $\alpha = 1$ e $\gamma\alpha = 1,4142$.

	k=2	k=3	k=4	k=4	k=5	k=6	k=7
N	16	32	32	49	49	72	121
repetição	completa	completa	metade	completa	metade	metade	metade
α_0	0	4	0	5	1	0	5
b_0	4	8	8	12	12	16	24
n^o blocos	2	2,3	2,3	2,3,5	2,3,5	2,3,5	2,3,5
$n_0 \div N$	0,5000	0,5000	0,5000	0,4286	0,4286	0,3333	0,2727
α	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$\gamma\alpha$	1,4142	1,4142	1,4142	1,4142	1,4142	1,4142	1,4142
W	1,2247	0,8660	0,8660	0,7071	0,7071	0,6124	0,5000
c	0,7500	0,3750	0,3750	0,2857	0,2857	0,2500	0,1818
d	12,0000	12,0000	12,0000	14,0000	14,0000	18,0000	22,0000
p	10,0000	10,0000	10,0000	10,0000	10,0000	10,0000	10,0000
h	9,0000	4,5000	4,5000	4,0000	4,0000	4,5000	4,0000
$\sum x_{iu}^4 \div \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2$	2,1111	2,3333	2,3333	3,5000	3,5000	3,2222	3,5000

TABELA 5. Composto central com duas estrelas, ortogonal e divisível em blocos, para valores escolhidos de $\alpha = 1,0000$ e $\gamma\alpha = 2,0000$.

	k=2	k=3	k=4	k=4	k=5	k=6	k=7
N	16	32	32	49	49	72	121
repetição	completa	completa	metade	completa	metade	metade	metade
α_0	0	4	0	5	1	0	5
b_0	4	8	8	12	12	16	24
n^o blocos	2	2,3	2,3	2,3,5	2,3,5	2,3,5	2,3,5
$n_0 \div N$	0,5000	0,5000	0,5000	0,4286	0,4286	0,3333	0,2727
α	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$\gamma\alpha$	2,0000	2,0000	2,0000	2,0000	2,0000	2,0000	2,0000
W	1,5811	1,1180	1,1180	0,9129	0,9129	0,7906	0,6455
c	1,2500	0,6250	0,6250	0,4762	0,4762	0,4167	0,3030
d	20,0000	20,0000	20,0000	23,3338	23,3338	30,0000	36,6688
p	34,0000	34,0000	34,0000	34,0000	34,0000	34,0000	34,0000
h	25,0000	12,5000	12,5000	11,1102	11,1102	12,5000	11,1129
$\sum x_{iu}^4 \div \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2$	2,3600	3,7200	3,7200	4,0603	4,0603	3,7200	4,0595

TABELA 6. Composto central com duas estrelas, ortogonal, divisível ortogonalmente em blocos, para $\alpha = W = 1$, $k = 2, 3, 4, 5, 6$ e 7 e valores de γ variáveis.

	k=2	k=3	k=4	k=4	k=5	k=5	k=6	k=7
N	16	32	32	49	49	72	72	121
repetição	completa	completa	metade	completa	metade	completa	metade	metade
a_0	0	4	0	5	1	4	0	5
b_0	4	8	8	12	12	16	16	24
n^o blocos	2	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3,5	2,3,5	2,3,5
$n_0 \div N$	0,5000	0,5000	0,5000	0,4286	0,4286	0,3333	0,3333	0,2727
α	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$\gamma\alpha$	1,0000	1,7321	1,7321	2,2361	2,2361	2,6458	2,6458	3,3166
W	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
c	0,5000	0,5000	0,5000	0,5714	0,5714	0,6667	0,6667	0,7273
d	8,0000	16,0000	16,0000	28,0000	28,0000	48,0000	48,0000	88,0000
p	4,0000	20,0000	20,0000	52,0000	52,0000	100,0000	100,0000	244,0000
h	4,0000	8,0000	8,0000	16,0000	16,0000	32,0000	32,0000	64,0000
$\sum x_{iu}^4 \div \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2$	2,0000	3,5000	3,5000	4,2500	4,2500	4,1250	4,1250	4,8125

$$\begin{aligned}
 A &= \sum Y_u = Y_1 + Y_2 + Y_3 + \dots + Y_{12} + Y_{13} \\
 B &= (Y_2 + Y_4) - (Y_1 + Y_3) + \alpha(Y_7 - Y_5) + \gamma\alpha(Y_8 - Y_6) \\
 C &= (Y_3 + Y_4) - (Y_1 + Y_2) + \alpha(Y_{11} - Y_9) + \gamma\alpha(Y_{12} - Y_{10}) \\
 D &= (1 - c) [Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4] + (\alpha^2 - c) [Y_5 + Y_7] + \\
 &\quad + (\gamma^2 \alpha^2 - c) [Y_6 + Y_8] - c [Y_9 + Y_{10} + Y_{11} + Y_{12} + Y_{13}] \\
 E &= (1 - c) [Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4] + (\alpha^2 - c) [Y_9 + Y_{11}] + \\
 &\quad + (\gamma^2 \alpha^2 - c) [Y_{10} + Y_{12}] - c [Y_5 + Y_6 + Y_7 + Y_8 + Y_{13}] \\
 F &= [Y_1 + Y_4] - [Y_2 + Y_3]
 \end{aligned}$$

No caso de $k = 3$, o modelo seria composto de dez termos, e ter-se-ia que calcular A, B, C, D, E, F, G, H, I e J, por um processo semelhante ao descrito por Conagin & Jorge (1979).

No caso $k = 2$, considerado, tem-se mais:

$$\hat{\beta}_0 = \frac{1}{N} A = \frac{1}{13} \sum Y_u$$

$$\hat{\beta}_1 = \frac{1}{d} B, \hat{\beta}_2 = \frac{1}{d} C$$

$$\hat{\beta}_{11} = \frac{1}{p} D, \hat{\beta}_{22} = \frac{1}{p} E \text{ e } \hat{\beta}_{12} = \frac{1}{h} F$$

A soma de quadrados devida aos componentes do modelo é dada por $\hat{\beta}'X'Y$, ou seja:

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

Análise da variância

Como cada um dos termos do modelo (no caso $k = 2$), é estimado independentemente (não há covariância entre eles), a análise da variância é feita de forma simples, como a que se segue: (Conagin & Jorge 1979).

F. Variação	S.Q.	G.L.	Q.M.	F
Total	$\sum Y_u^2$	13		
Média	$\hat{\beta}_0'A$	1	G	
Efeito linear (fator 1)	$\hat{\beta}_1'B$	1	L_1	$L_1 \div R$
Efeito linear (fator 2)	$\hat{\beta}_2'C$	1	L_2	$L_2 \div R$
Efeito Quad. (fator 1)	$\hat{\beta}_{11}D$	1	Q_1	$Q_1 \div R$
Efeito Quad. (fator 2)	$\hat{\beta}_{22}E$	1	Q_2	$Q_2 \div R$
Interação	$\hat{\beta}_{12}F$	1	I	$I \div R$
Resíduo	$\sum Y_u^2 - \text{Outros}$	7	$R = \hat{\sigma}^2$	

O resíduo será: $\sum Y_u^2 - \hat{\beta}_0'A - \hat{\beta}_1'B - \dots - \hat{\beta}_{12}F$.

Os valores de F que forem significativos ao nível predeterminado $\alpha\%$ (erro tipo I adotado), serão mantidos no modelo (Conagin & Jorge, prelo).

Nos casos de subdivisão do delineamento em blocos, como os mesmos são ortogonais aos coeficientes do modelo (covariância β_{ij} , nula), seu efeito pode ser calculado diretamente, da maneira tradicional.

Quando $k = 2$, geralmente não se deseja sacrificar a interação do modelo e então o delineamento deverá constar, somente, de dois blocos; um deles será constituído da parte axial com alguns pontos centrais (supor a_0 pontos) e o outro constar da parte fatorial, complementado ou não por b_0 pontos centrais. Nesse caso o cálculo do efeito de blocos é feito como:

$$\begin{aligned}
 \text{S.Q. Blocos} &= \frac{B_0^2}{n_0} + \frac{B_1^2}{n_1} - G \text{ onde } G = (\sum B_i)^2 \div N = \\
 &= (\sum Y_u)^2 \div N
 \end{aligned}$$

Para esclarecer um pouco mais, se $k = 3$ e a parte fatorial tiver sido dividida em 2 blocos (interação dos três fatores confundida com blocos), ter-se-ão três blocos e o cálculo será:

$$\begin{aligned}
 \text{S.Q. Blocos} &= \frac{B_0^2}{n_0} + \frac{B_1^2}{n_1} + \frac{B_2^2}{n_2} - G \text{ onde } n_1 = n_2 = \\
 &= \frac{1}{2} (N - n_0)
 \end{aligned}$$

Se n_e representar o número de graus de liberdade do resíduo (antes de tirar o efeito de blocos), o resíduo R, uma vez tirado o efeito de blocos, passará a ser R' , assim definido:

$$\begin{aligned}
 R' &= \sum Y_u^2 - \hat{\beta}_0'A - \hat{\beta}_1'B - \dots - \hat{\beta}_{12}F - (\text{S.Q. Blocos}) \text{ com} \\
 n'_e &= n_e - (b - 1) \text{ graus de liberdade, sendo } b \text{ o número de} \\
 &\text{ blocos em que o delineamento foi partido.}
 \end{aligned}$$

No exemplo, com $k = 2$ e $N = 13$, se o delineamento tivesse sido dividido em 2 blocos (para não sacrificar a interação dos dois fatores), ter-se-ia que $b = 2$ e então:

$$n'_e = n_e - (2 - 1) = (7 - 1) = 6$$

Variância dos coeficientes do modelo e variância das observações

A variância dos coeficientes do modelo são, à semelhança do composto central simples:

$$\hat{V}\hat{\beta}_0 = \hat{\sigma}^2 / N ; \hat{V}\hat{\beta}_1 = \hat{\sigma}^2 / d \quad i = 1, 2$$

$$\hat{V}_{\hat{\beta}_{11}} = \hat{\sigma}^2 / p \text{ e } \hat{V}_{\hat{\beta}_{12}} = \hat{\sigma}^2 / h \text{ onde } \hat{\sigma}^2 = R = s^2$$

No exemplo com $k = 2$ a estimativa $\hat{\sigma}^2$ teria sete graus de liberdade se o delineamento fosse completamente casualizado, ou seis graus de liberdade se fosse subdividido em dois blocos.

A variância esperada para os termos \hat{Y}_u correspondentes às observações do delineamento do exemplo considerado seria calculada da seguinte forma:

$$\hat{V}_{\hat{Y}_u} = \hat{\sigma}^2 \left[\frac{1}{13} + \frac{x_{1u}^2}{d} + \frac{x_{2u}^2}{d} + \frac{(x_{1u}-c)^2}{p} + \frac{(x_{2u}-c)^2}{p} + \frac{x_{1u}^2 x_{2u}^2}{h} \right]$$

No caso geral em que existem k fatores, N observações, ter-se-ia:

$$\hat{V}_{\hat{Y}} = \hat{\sigma}^2 \left[\frac{1}{N} + \sum_i^k \frac{x_{iu}^2}{d} + \sum_i^k \frac{(x_{iu}^2 - c)^2}{p} + \sum_{i < j}^k \sum_j^k \frac{x_{iu}^2 x_{ju}^2}{h} \right]$$

onde a somatória das variâncias dos coeficientes das interações representaria a soma de C_k^2 termos.

Caso a análise efetuada representasse um experimento com fertilizantes a análise econômica poderia ser feita de forma semelhante à que foi feita nos trabalhos de Conagin & Jorge (1976 e 1979).

Vantagens dos delineamentos compostos centrais com duas estrelas

A pesquisa, em certas áreas, como, por exemplo, em tecnologia industrial, química, física, face à repetibilidade dos resultados e ao erro experimental reduzido, pode ser executada de forma seqüencial; se a pesquisa visa determinar a solução que leva à otimização de um sistema em que variam k fatores, é possível começar por uma fração do fatorial, explorar a área de ascensão máxima, até se chegar a uma área de pouco ou nenhum progresso, onde se instala um experimento mais completo para determinar o ponto extremo, e chegar à solução ótima ou quase-ótima do sistema (Myers 1971).

Já na pesquisa agrônômica, na experimentação de campo, pela variação ecológica normalmente existente, há necessidade de utilização dos delineamentos subdivisíveis em blocos, devendo-se colocar o experimento todo de uma vez; nos ensaios com fertilizantes, é essencial que se faça a escolha de uma amplitude adequada para as dosagens de cada fertilizante; as respostas obtidas poderão ser acentuadas e positivas para as dosagens mais altas de ferti-

lizantes nos anos favoráveis, ser intermediárias nos anos normais e exibir respostas de menor amplitude e/ou em platô, nos anos ruins. Neste último caso, a avaliação dos coeficientes quadráticos puros pode ser "enviesada". Dispondo o delineamento considerado, na parte axial, de cinco níveis para cada fator, se se verificar resposta "em platô", pode-se analisar o delineamento como um composto central de uma estrela, eliminando-se a estrela exterior, estimando-se, então, os coeficientes quadráticos de forma "não enviesada", o que possibilitará avaliar a dosagem mais econômica para cada fertilizante, com maior exatidão.

Nesse sentido, e à semelhança dos delineamentos compostos centrais duplos, já apresentados pelo autor (Conagin, prelo; b), este tipo de delineamento, para a mesma amplitude pesquisada apresenta maior flexibilidade para o estudo de três fertilizantes N, P e K, por exemplo, do que o composto central com uma estrela e do que o delineamento $3 \times 3 \times 3$, por exemplo.

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Os delineamentos compostos centrais com duas estrelas são, pois, mais flexíveis do que os compostos centrais de uma estrela, correspondentes, e também mais flexíveis do que os fatoriais, como, por exemplo, o $3 \times 3 \times 3$, possibilitando o estudo de vários níveis de cada fator (cinco ou sete níveis).

Os delineamentos constantes das Tabelas 1 e 2 são ortogonais, completamente casualizados, apresentando o nível do fatorial, $W = 1$, nível α para a primeira estrela e o nível $\alpha\sqrt{2}$ na Tabela 1 e 2α na Tabela 2. Os valores da Tabela 2 proporcionam uma amplitude maior da área pesquisada do que os correspondentes, da Tabela 1. Assim, para o estudo de um certo número de fatores, o pesquisador, para um mesmo N , poderá escolher entre as duas Tabelas, a combinação mais adequada para o seu caso particular.

Os delineamentos constantes da Tabela 3 são, também, do tipo completamente casualizado e foram calculados com o objetivo de se obter um tipo com $W = 1$ (nível do fatorial) e $\alpha = 1$, calculando-se o valor de γ que proporciona a ortogonalização do delineamento. Esses delineamentos se prestam bem para serem usados naqueles casos em que há, como nos experimentos com fertilizantes, possibilidade de obter respostas com curvatura variável em função do ano agrícola e até respostas "em platô"

para as dosagens representadas pelos níveis mais altos, utilizados. Nesse caso, é possível descartar a estrela exterior do delineamento e efetuar a análise econômica na parte remanescente, o delineamento passando a ser, então, um composto central de uma estrela nas distâncias ± 1 para a parte fatorial e para a axial, delineamento esse, segundo Lucas (1974), do tipo D-ótimo.

Os delineamentos constantes das Tabelas 4, 5 e 6 possibilitam a ortogonalização, a partição em blocos, a avaliação do erro verdadeiro e um teste da adequação do modelo. Normalmente, necessitam de um número maior de pontos centrais; deverão ser preferidos naqueles casos em que se considera importante a subdivisão em blocos, como na experimentação de campo.

Nas tabelas respectivas, encontram-se os delineamentos com $\alpha = 1$ e $\gamma = \sqrt{2}$ (Tabela 4) e $\alpha = 1$ e $\gamma = 2$, (Tabela 5); os valores W obtidos (nível do fatorial) são compatíveis com a ortogonalização e a subdivisão em blocos. Os delineamentos da Tabela 5 oferecem, particularmente, boas soluções para $k = 3$, $k = 4$ e $k = 5$, em que os valores de W são próximos de 1, possibilitando, no caso de respostas "em platô", obtidas de experimentos de fertilizantes, a análise como um delineamento composto central de uma estrela do tipo completamente casualizado, desde que ajustado, previamente, para o efeito de blocos.

A Tabela 6 apresenta delineamentos com as características $\alpha = 1$ e $W = 1$, para γ variável. Soluções bastante interessantes são as representadas pelos casos $k = 3$, $k = 4$ e $k = 5$ (este com metade do fatorial), sendo as soluções para $k = 2$, $k = 5$ (completa), $k = 6$ (metade) e $k = 7$ (quarta parte), menos desejáveis, por faltar um balanço adequado entre as dosagens representadas por α e $\gamma\alpha$.

Os delineamentos desta Tabela podem, também, - nos casos de resposta "em platô", obtida de experimentos de fertilizantes, à semelhança daqueles das Tabelas 4 e 5 -, ser analisados como um delineamento completamente casualizado, não ortogonal, pelo abandono ou não de alguns pontos centrais e dos pontos da estrela exterior, devendo ser,

antes, corrigido para o efeito de blocos. Dessa forma, o delineamento passa a ser um composto central simples, com os pontos externos inseridos em um cubo de lado 2 (distâncias entre -1 e +1), de tipo quase D-ótimo.

Com relação ao espaço amostral a ser utilizado na pesquisa, este deve ser escolhido de tal forma que, mesmo para os anos favoráveis, os intervalos das dosagens em estudo tenham grande probabilidade de incluir o ponto crítico (máximo ou mínimo) dentro da área em estudo.

O pesquisador especialista da cultura, o fertilólogo e o estatístico, em função dos conhecimentos advindos de pesquisas já efetuadas, podem demarcar com certa confiança esse intervalo, assegurando, dessa forma, a validade do programa de pesquisa para os anos bons, regulares e ruins.

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.
- COCHRAN, W.C. & COX, G.M. *Experimental designs*. New York, John Wiley, 1957. 611p.
- CONAGIN, A. Delineamentos "Compostos Centrais Duplos". *Bragantia*. Prelo, b.
- CONAGIN, A. Delineamentos "Compostos Centrais Ortogonais, Rotacionais e Divisíveis em Blocos". *Bragantia*. Prelo, a.
- CONAGIN, A. & JORGE, J.P.N. Delineamento "Duplo Central Composto com 29 pontos". *Bragantia*, 38: 215-35, 1979.
- CONAGIN, A. & JORGE, J.P.N. Delineamentos "(1/5) (5³)". *Bragantia*, 36:23-58, 1976.
- CONAGIN, A. & JORGE, J.P.N. Delineamento (1/5) (5 x 5 x 5) em blocos. *Bragantia*. Prelo.
- 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.
- LUCAS, J.M. Optimum composite designs. *Technometrics*, 16:561-7, 1974.
- MYERS, R.H. *Response surface methodology*. Boston, Allyn and Bacon, 1971. 243p.