

**DELINEAMENTOS ÓTIMOS VISANDO A POSSIBILIDADE DE  
TRANSFORMAÇÃO NA VARIÁVEL RESPOSTA**

**Cássio Pinho dos Reis**

Tese apresentada à Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” para a obtenção do título de Doutor em Biometria.

BOTUCATU  
São Paulo - Brasil  
Fevereiro – 2019

**DELINEAMENTOS ÓTIMOS VISANDO A POSSIBILIDADE DE  
TRANSFORMAÇÃO NA VARIÁVEL RESPOSTA**

**Cássio Pinho dos Reis**

Orientadora: Profa. Dra. **Luzia Aparecida Trinca**

Tese apresentada à Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” para a obtenção do título de Doutor em Biometria.

BOTUCATU  
São Paulo - Brasil  
Fevereiro – 2019

## Ficha Catalográfica

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA SEÇÃO TÉC. AQUIS. TRATAMENTO DA INFORM.  
DIVISÃO TÉCNICA DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - CÂMPUS DE BOTUCATU - UNESP  
BIBLIOTECÁRIA RESPONSÁVEL: ROSANGELA APARECIDA LOBO-CRB 8/7500

Reis, Cássio Pinho dos.

Delineamentos ótimos visando a possibilidade de transformação na variável resposta / Cássio Pinho dos Reis. - Botucatu, 2019

Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Instituto de Biociências de Botucatu

Orientador: Luzia Aparecida Trinca

Capes: 10202072

1. Modelos matemáticos. 2. Análise de variância. 3. Análise fatorial. 4. Modelos não lineares (Estatística). 5. Biometria.

Palavras-chave: Delineamentos Eficientes; Fatorial; Heterocedasticidade; Transformação de Box-Cox.

## **Dedicatória**

Dedico este trabalho a minha esposa Nayara, por sempre estar ao meu lado, independente do momento. Ao meu filho Luca, por sempre me inspirar ao receber um sorriso seu. E a toda minha família que, mesmo de longe, sempre me apoiou nas minhas decisões.

## Agradecimentos

Primeiramente a Deus, por tudo que fez na minha vida.

À Universidade Federal Rural da Amazônia, pela concessão do afastamento para o doutoramento.

À Profa. Dra. Luzia Aparecida Trinca pela excelente orientação, compreensão, incentivos e apoio incondicional, sempre com muita paciência e boa vontade em ajudar.

À toda minha família. Minha mãe Angela Pinho que, sempre me incentivou em todos os momentos, me apoiando em todas as decisões tomadas. Ao meu pai Valter Reis que, sempre na medida possível se fez presente, acreditando em mim durante todo o curso. Aos meus irmãos Sávio, Iago e Geovana pelo companheirismo mesmo estando longe. À toda Família Pinho e Reis, pelo carinho que me tem.

À Universidade Estadual Paulista, campus de Botucatu, pela oportunidade de ingressar no curso de doutorado da pós graduação em Biometria.

A todos professores e funcionários do Departamento de Bioestatística, Unesp, Botucatu.

A todos os alunos de mestrado e doutorado em Biometria, que direta ou indiretamente, contribuíram imensamente para que este trabalho fosse realizado.

A todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

# Sumário

	Página
<b>LISTA DE FIGURAS</b>	<b>vii</b>
<b>LISTA DE TABELAS</b>	<b>ix</b>
<b>RESUMO</b>	<b>xi</b>
<b>SUMMARY</b>	<b>xiii</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivo Geral . . . . .	3
1.2 Objetivos Específicos . . . . .	4
1.3 Esboço da tese . . . . .	4
<b>2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	<b>5</b>
2.1 Matriz de Informação . . . . .	8
2.2 Delineamento Experimental . . . . .	11
2.3 Critérios de Otimalidade . . . . .	13
2.3.1 Critérios com uso de informação pontual . . . . .	14
2.3.2 Critérios Pseudo-Bayesianos . . . . .	17
2.4 Eficiência . . . . .	17
2.5 Algoritmos para busca de delinamentos ótimos . . . . .	18
2.5.1 Troca por ponto ( <i>Point Exchange</i> ) . . . . .	19
<b>3 METODOLOGIA</b>	<b>21</b>

3.1	Propriedade única . . . . .	22
3.2	Critérios Compostos . . . . .	23
3.3	Algoritmos . . . . .	23
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>25</b>
4.1	Delineamentos ótimos sob Critérios Simples . . . . .	25
4.1.1	Exemplo 1 . . . . .	26
4.1.1.1	Delineamentos localmente $D$ -ótimos . . . . .	26
4.1.1.2	Delineamentos pseudo-Bayesianos $D$ -ótimos . . . . .	32
4.1.1.3	Delineamentos localmente $D_S$ -ótimos . . . . .	33
4.1.1.4	Delineamentos localmente $A_S$ -ótimos . . . . .	35
4.1.2	Exemplo 2 . . . . .	40
4.1.2.1	Delineamentos localmente $D$ -ótimos . . . . .	40
4.1.2.2	Delineamentos localmente $D_S$ -ótimos . . . . .	44
4.1.2.3	Delineamentos localmente $A_S$ -ótimos . . . . .	46
4.1.3	Exemplo 3 . . . . .	49
4.1.4	Exemplo 4 . . . . .	53
4.2	Critérios Compostos . . . . .	55
4.2.1	Exemplo 1 . . . . .	55
4.2.2	Exemplo 2 . . . . .	60
<b>5</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>63</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>65</b>

## Lista de Figuras

	Página
1 Elipse de confiança para dois parâmetros, $\beta_1$ e $\beta_2$ do modelo de regressão (Smucker et al., 2018). . . . .	14
2 Delineamentos localmente $D$ -ótimos para o Exemplo 1, com o número de repetições e $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para cada tratamento. . . . .	28
3 Delineamentos pseudo-Bayesianos $D$ -ótimos para o Exemplo 1, com o número de repetições e $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para cada tratamento. . . . .	32
4 Delineamentos localmente $D_S$ -ótimos para o Exemplo 1. Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os da Tabela 2. Os números se referem ao número de repetições e $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para cada tratamento. . . . .	34
5 Delineamentos localmente $A_S$ -ótimos para o Exemplo 1. Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os da Tabela 2. Os números se referem ao número de repetições e $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para cada tratamento. . . . .	37
6 Delineamentos $D$ e $A_S$ -ótimos para os modelos 1 e 3 da Tabela 1, com o número de repetições e valor esperado em parênteses. . . . .	39
7 Delineamentos localmente $D$ -ótimos para os modelos de segunda ordem (Exemplo 2). O tamanho do símbolo dos pontos é proporcional ao número de repetições (1, 2, 3), $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para os tratamentos das bordas e $X$ é o ponto de ótimo. . . . .	41



8	Delineamentos localmente $D_S$ -ótimos para o Exemplo 2. Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os mesmos da Tabela 4. O tamanho do símbolo dos pontos é proporcional ao número de repetições (1, 2, 3), $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para os tratamentos nos cantos ou vértices e $X$ é o ponto de ótimo. . . . .	45
9	Delineamentos localmente $A_S$ -ótimos para os modelos de segunda ordem (Exemplo 2). O tamanho do símbolo dos pontos é proporcional ao número de repetições do tratamento (1, 2, 3, 4, 5), $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para os tratamentos nos vértices e $X$ é o ponto de ótimo. . . . .	48
10	Delineamentos localmente $D$ -ótimos para o Exemplo 3. Tamanho dos símbolos proporcional ao número de repetições do tratamento (1, 2, 3). . . . .	51
11	Delineamentos localmente $D$ , $D_S$ e $DP$ -ótimos para o Exemplo 4. Símbolos pequenos apresentam 1 repetição e símbolos grandes 2 repetições. . . . .	54
12	Delineamentos localmente ótimos sob o critério $\Psi_{AA}$ ( $\alpha = 0,5$ ). Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os mesmos da Tabela 1. Os números se referem ao número de repetições e $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para cada tratamento. . . . .	56
13	Delineamentos localmente ótimos sob o critério $\Psi_{DA}$ para o modelo 5 do Exemplo 1. Os números se referem ao número de repetições e $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para cada tratamento. . . . .	58
14	Delineamentos localmente ótimos sob o critério $\Psi_{DA}$ ( $\alpha = 0,5$ ). Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os mesmos da Tabela 2. Os números se referem ao número de repetições e $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para cada tratamento. . . . .	59
15	Delineamentos localmente ótimos sob o critério $\Psi_{DA}$ para o modelo "a" do Exemplo 2. O tamanho do símbolo dos pontos é proporcional ao número de repetições (1, 2, 3) e $E(Y^{(\lambda)})$ (entre parênteses) para os tratamentos das bordas. . . . .	61

## Lista de Tabelas

	Página
1	Valores dos parâmetros dos modelos considerados para a busca dos delineamentos ótimos (exemplo 1) . . . . . 27
2	Eficiência dos delineamentos localmente $D$ -ótimos apresentados na Figura 2 sob diversos modelos . . . . . 29
3	Eficiências dos delineamentos localmente $D_S$ -ótimos apresentados na Figura 4 sob diversos modelos, todos com $\lambda = 0$ . . . . . 35
4	Eficiências dos delineamentos localmente $A_S$ -ótimos apresentados na Figura 5 sob diversos modelos, todos com $\lambda = 0$ . . . . . 36
5	Eficiências dos delineamentos localmente $D_S$ -ótimos do Exemplo 1 sob o critério $A_S$ , todos com $\lambda = 0$ . . . . . 38
6	Eficiências dos delineamentos localmente $A_S$ -ótimos do Exemplo 1 sob o critério $D_S$ , todos com $\lambda = 0$ . . . . . 38
7	Valores dos parâmetros dos modelos (com os pontos de ótimos) usados no Exemplo 2, todos com $\sigma = 0,01$ . . . . . 40
8	Eficiências dos delineamentos localmente $D$ -ótimos apresentados na Figura 7 sob diversos modelos de segunda ordem (Exemplo 2) . . . . . 43
9	Eficiências do delineamentos localmente $D$ -ótimos apresentados na Figura 7 em relação aos delineamentos obtidos sob os modelos sem os efeitos quadráticos . . . . . 44
10	Eficiências dos delineamentos localmente $D_S$ -ótimos do Exemplo 2, todos com $\lambda = 0$ . . . . . 46

11	Eficiência dos delineamentos localmente $A_S$ -ótimos apresentados Exemplo 2, sob diversos modelos . . . . .	47
12	Eficiências dos delineamentos localmente $D_S$ -ótimos do Exemplo 2 sob o critério $A_S$ . . . . .	49
13	Eficiências dos delineamentos localmente $A_S$ -ótimos do Exemplo 2 sob o critério $D_S$ . . . . .	49
14	Eficiências dos delineamentos localmente $D$ -ótimos para o exemplo 3 apresentados na Figura 10 sob diversos modelos . . . . .	52
15	Eficiência dos delineamentos localmente $D$ -ótimos apresentados na Figura 11 do Exemplo 4 sob diversos modelos . . . . .	55
16	Eficiências dos delineamentos localmente ótimos sob o critério $\Psi_{DA}$ do Exemplo 1 em relação aos delineamentos $D$ -ótimos (Figura 2), usando $\alpha = 0,5$ e $\lambda = 0$ . . . . .	60
17	Eficiências dos delineamentos localmente ótimos sob $\Psi_{DA}$ do Exemplo 2 em relação aos delineamentos $D$ -ótimos, usando $\alpha = 0,5$ e $\lambda = 0$ . . . . .	62

# DELINEAMENTOS ÓTIMOS VISANDO A POSSIBILIDADE DE TRANSFORMAÇÃO NA VARIÁVEL RESPOSTA

Autor: CÁSSIO PINHO DOS REIS

Orientadora: Profa. Dra. LUZIA APARECIDA TRINCA

## RESUMO

Nas mais diversas áreas do conhecimento se procura aumentar a eficiência dos delineamentos experimentais, principalmente, para minimizar os custos das pesquisas. O uso dos delineamentos ótimos, com seus diferentes critérios de otimização, é fundamental para se obter resultados que maximizam a informação em estudos experimentais. A maioria dos métodos pressupõe homogeneidade de variâncias, a qual nem sempre é verificada no conjunto de dados. O objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia para construção de delineamentos ótimos exatos e cientes em situações de variância não homogênea. Assume-se que linearidade e homoscedasticidade são obtidas via o uso de transformações da família Box-Cox e, além de critérios de otimização puros, critérios compostos que combinam duas propriedades são propostos. Resultados para vários exemplos sob os modelos de primeira e segunda ordem são obtidos e discutidos.

**Palavras Chaves:** *Heterocedasticidade, Transformação de Box-Cox, Fatorial, Delineamentos Eficientes..*

# OPTIMAL DESIGNS UNDER RESPONSE VARIABLE TRANSFORMATION

Author: CÁSSIO PINHO DOS REIS

Adviser: Profa. Dra. LUZIA APARECIDA TRINCA

## SUMMARY

In several areas of knowledge we seek to increase the efficiency of experimental designs, mainly in order to minimize the costs of reaserch. The use of optimal design with different optimization criteria is fundamental to obtain results that maximize the information in experimental studies. Most of the methods assume homogeneity of variances, which is not always verified in the data set. The goal of this work is to develop a methodology to construct exact optimal or efficient designs in situations of nonhomogeneous variance. It is assumed that application of a transformation from the Box-Cox family accomplish both linearity and homocedasticity. Pure design criterion as well as compound criteria using two desired properties are used. Results for several examples assuming first and second order models are presented and discussed.

**Keywords:** *Heteroscedasticity, Box-Cox Transformation, Factorial, Efficient Designs.*

# 1 INTRODUÇÃO

Experimentos são realizados em diversas áreas com o intuito de adquirir conhecimento entre a relação de uma variável resposta e várias características que, possivelmente, a influenciam. Para tanto, é necessário construir delineamentos experimentais que forneçam resultados cientificamente válidos. Apesar de tal fato, não é raro se deparar com experimentos que não utilizam metodologias disponíveis e com credibilidade, acarretando em experimentos sem sucesso, além de haver desperdício de recursos e tempo empregados. Assim, o bom planejamento requer uma tomada cautelosa de decisões que contemple todos os fatores circundantes da variável resposta, sendo necessário o controle de fatores que possam influenciar a variável em estudo, mesmo que não seja de interesse investigá-los (Banzatto & Kronka, 2006).

Conforme o número de fatores investigados for aumentando, o número de tratamentos pode se tornar excessivo impedindo a utilização de um delineamento experimental clássico, baseado nos princípios de balanceamento e ortogonalidade.

Nesses casos, na presença de outras restrições ou complexidades, o pesquisador pode utilizar como recurso os delineamentos ótimos, os quais são uma alternativa aos delineamentos clássicos.

Por conta da falta de tecnologia e computação avançada, durante muito tempo, a aplicação da teoria de delineamentos ótimos não teve um grande avanço, já que o problema de delineamento experimental envolvendo muitos fatores era muito difícil de resolver, mesmo para modelos relativamente simples. Com o desenvolvimento computacional, a teoria de delineamentos ótimos começou a ganhar força, e passou a ser aplicada com uma maior frequência nas mais diferentes áreas, como nas ciências biológicas, engenharias, ciências alimentares, farmacêutica, dentre outras.



Um delineamento ótimo é aquele que busca dentre vários possíveis, o conjunto de tratamentos com suas respectivas repetições, dentre todas as combinações possíveis, de forma que alguma propriedade estatística seja otimizada, utilizando método matemático ou computacional. Várias são as propriedades estatísticas que podem ser consideradas na otimização produzindo delineamentos ótimos sob vários aspectos. Combinações dessas propriedades também podem ser utilizadas de forma que os delineamentos tenham maior aplicabilidade e robustez.

Entretanto, apesar de todos os avanços da teoria de delineamentos ótimos, a metodologia ainda apresenta grandes desafios. Um deles é que para certos modelos a construção de um delineamento ótimo necessita do conhecimento dos verdadeiros valores dos parâmetros do modelo que, por motivos claros, são desconhecidos na fase de planejamento. Este desafio pode ser resolvido de algumas maneiras. A primeira, é a utilização de informações já existentes (por meio de estudos prévios) sobre os parâmetros na fase inicial do delineamento, resultando em delineamentos ditos localmente ótimos. A outra é a utilização de distribuições de probabilidade a priori dos parâmetros desconhecidos, por meio de métodos pseudo-Bayesianos para a construção dos delineamento. Ambas as abordagens serão consideradas neste estudo.

O modelo mais simples para estudar a relação entre uma resposta e os fatores experimentais é o linear homocedástico (variâncias homogêneas). Contudo, nem sempre a pressuposição de variâncias homogêneas é satisfeita, o que é frequente nas análises de dados.

O problema de heterocedasticidade em modelos de regressão é muito discutido por vários autores do ponto de vista de delineamento e, de acordo com Atkinson & Cook (1997) e Gaviria & Ríos (2014), são duas as opções para resolver esta problemática. Uma delas é incorporar no modelo uma função para a variância dos erros e a outra é realizar uma transformação da família Box-Cox na variável resposta, ou em ambos os lados do modelo, se este for não linear. Os autores argumentam que o modelo com a transformação de Box-Cox é preferível quando a função determinística (parte fixa do modelo) é linear, enquanto que o modelo com uma estrutura

de variância incorporada no modelo tem sido preferível em modelos não lineares.

Gaviria & Ríos (2014) apontam que o problema de encontrar delineamentos ótimos em modelos com heterocedasticidade é mais complicado do que no caso de homogeneidade de variância, já que a função a ser otimizada, geralmente o determinante da Matriz de Informação de Fisher, depende dos parâmetros de variância, que será visto em mais detalhes nesta tese. Tanto Atkinson & Cook (1997) quanto Gaviria & Ríos (2014) obtiveram delineamentos ótimos contínuos para o modelo linear sob transformação da variável resposta. Nesta tese serão obtidos delineamentos ótimos exatos estendendo os resultados desses autores.

Dessa forma, utilizando a metodologia de delineamentos ótimos, espera-se que seja possível planejar experimentos mais informativos para modelos com heterocedasticidade, utilizando diferentes tipos de critérios, incluindo propostas de critérios compostos que envolvem mais de um objetivo, os quais podem resultar delineamentos mais robustos e apresentar maior aplicabilidade.

Acredita-se que esta pesquisa contribuirá para as áreas experimentais, já que os métodos atualmente disponíveis consideram o problema teórico produzindo delineamentos contínuos, ou seja, para experimentos de tamanho tendendo a infinito e otimização de apenas uma propriedade, o que pode tornar o delineamento pouco atrativo para uso em experimentos reais.

## 1.1 Objetivo Geral

O objetivo geral desta tese é desenvolver uma metodologia de delineamentos ótimos exatos robustos para situações nas quais o pesquisador suspeita de heterogeneidade de variância na variável resposta. O modelo considerado para esta possível correção do problema de heterogeneidade é baseado na transformação de Box-Cox.

## 1.2 Objetivos Específicos

Como objetivos específicos, considera-se estudar a sensibilidade dos delineamentos obtidos em relação aos valores dos parâmetros do modelo por meio das suas eficiências.

Além disso, propor critérios compostos para obtenção de delineamentos ótimos sob o modelo de transformação, sempre utilizando modelos com transformação de Box-Cox para a correção da heterogeneidade, tentando obter delineamentos mais robustos.

## 1.3 Esboço da tese

Além desta introdução (Capítulo 1), este trabalho é constituído por uma fundamentação (Capítulo 2), que detalha todo o referencial teórico sobre os delineamentos, a transformação de Box-Cox, matrizes de informações, critérios de otimalidade e algoritmos de busca.

A metodologia utilizada está no Capítulo 3, no qual é descrito o procedimento para a construção dos delineamentos ótimos exatos, e também são apresentadas as propostas dos critérios compostos.

O Capítulo 4 relata todos os resultados encontrados usando 4 tipos de modelos diferentes. Resultados para modelos com dois ou três fatores e modelos com e sem interação são estudados para diferentes valores paramétricos.

A realização desse estudo se inicia com a extensão dos trabalhos de Atkinson & Cook (1997) e Atkinson et al. (2007) que construíram delineamentos  $D$ -ótimos contínuos, e Gilmour & Trinca (2012), que apresentaram várias configurações experimentais, e critérios de otimalidade.

Por fim, têm-se as considerações finais no Capítulo 5, que resume as principais conclusões encontradas nesta tese.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Um estudo experimental consiste na avaliação de respostas resultantes de alterações deliberadas num sistema. Cada condição experimental de interesse é chamada de tratamento e um determinado tratamento é definido pelo nível de um fator ou uma combinação de níveis de vários fatores experimentais, que são as variáveis sob controle do pesquisador, que possivelmente influenciam as respostas. Neste trabalho será considerado o problema de fatores quantitativos, de forma que haja sentido investigar superfícies contínuas que explicam a relação entre a variável resposta  $Y$  e os fatores  $X_1, X_2, \dots, X_q$ .

Seja  $\mathbf{x}_i = (x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{qi})$  a combinação dos níveis dos  $q$  fatores que definem o tratamento aplicado na unidade experimental  $i$ . Para  $Y$  contínuo, os modelos mais populares assumem

$$Y_i = \eta(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta}) + \epsilon_i \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (1)$$

no qual  $Y_i$  é a variável resposta a ser observada na unidade experimental  $i$ ,  $\boldsymbol{\beta}$  é um vetor de  $p$  parâmetros,  $\eta$  é uma função em  $\mathbf{x}_i$  e  $\boldsymbol{\beta}$  que descreve as formas das relações entre  $Y$  e os  $q$  fatores e  $\epsilon_i$  é o  $i$ -ésimo componente aleatório aditivo.

Se  $\eta$  for linear em  $\boldsymbol{\beta}$  o modelo se reduz, em notação matricial, à

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (2)$$

na qual  $\mathbf{Y}_{n \times 1}$  é o vetor de respostas observadas,  $\mathbf{X}_{n \times p}$  é a matriz do modelo,  $\boldsymbol{\beta}_{p \times 1}$  é o vetor de parâmetros de regressão,  $\boldsymbol{\epsilon}_{n \times 1}$  o vetor de erros, com  $E(\boldsymbol{\epsilon}) = 0$ .

Sob os pressupostos usuais de não correlação e homocedasticidade,  $\text{cov}(\boldsymbol{\epsilon}) = \sigma^2 \mathbf{I}$ , e com  $\mathbf{X}$  tendo posto completo, o estimador de mínimos quadrados de  $\boldsymbol{\beta}$  é dado

por

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \quad (3)$$

tal que  $E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{\beta}$  e  $cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ .

Sabe-se também que esse estimador é equivalente ao de Máxima Verossimilhança sob normalidade dos erros ( $\boldsymbol{\epsilon} \sim N(\mathbf{0}; \mathbf{I}\sigma^2)$ ). Esse resultado (Equação 3) indica que, em estudos experimentais, o pesquisador tem a possibilidade de escolher os níveis dos fatores de forma que a precisão de  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  seja otimizada, já que  $Cov(\hat{\boldsymbol{\beta}})$  depende apenas da matriz  $\mathbf{X}$  e da constante  $\sigma^2$ .

Note, portanto, que o delineamento que otimiza  $Cov(\hat{\boldsymbol{\beta}})$  depende do modelo suposto em (1), de forma que para modelos mais complexos, o problema da construção do delineamento também é mais complexo.

Na prática, uma ou mais violações das suposições associadas ao modelo em (1) podem ocorrer. Embora nem sempre todas as violações possam ser corrigidas com uma única transformação (Sakia, 1992), alguns autores como (Atkinson & Cook, 1995), (Atkinson & Cook, 1997) e (Gaviria & Ríos, 2014), argumentam que o seu uso é promissor para estabilizar as variâncias quando essas aumentam com  $E(Y)$ .

Uma família de transformações do tipo potência foi apresentada por Box & Cox (1964), dada por

$$Y^{(\lambda)} = \begin{cases} \frac{(Y^{\lambda}-1)}{\lambda} & \lambda \neq 0 \\ \log(Y) & \lambda = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Como se pode observar, quando  $\lambda = 0$ , a transformação indicada ou requerida é a logarítmica, enquanto que para  $\lambda \neq 0$ , é uma potência. Caso o valor de  $\lambda$  seja 0,5, a transformação necessária é a raiz quadrada, e quando  $\lambda = 1$ , nenhuma transformação é necessária. De acordo com Atkinson (2003b), valores de  $\lambda$  iguais a 0, 0,5 ou 1, são os três valores mais encontrados nas publicações com a transformação de Box-Cox, talvez por serem valores que correspondem a funções mais conhecidas pelos pesquisadores.

Em geral, a própria natureza da resposta pode indicar a transformação que corrige o problema, como é o caso da raiz cúbica para resposta de volume e da raiz

quadrada para áreas ou contagens, conforme discutido em Atkinson (1985) e Cook & Weisberg (1982). Já a transformação logarítmica é frequentemente usada quando a variável resposta assume valores com diferentes ordens de grandeza. Outros valores de  $\lambda$  podem ser usados dependendo da natureza do problema estudado, como mostram Atkinson (2003a) que encontrou  $\lambda = 0,35$  e  $0,1$  ao analisar dados farmacocinéticos e Lischer (1999), que encontrou valores de  $\lambda$  próximos de  $0,14$  ao analisar dados de incerteza de medição em laboratórios de química analítica e ambiental.

Na literatura, pode-se verificar diversos casos em que se houve problema de heterocedasticidade, como em Nascimento et al. (2006) por exemplo, os quais após realizarem um experimento em produção de serapilheira, verificaram que por problemas de heterocedasticidade, necessitou-se utilizar uma transformação de Box-Cox. Outro exemplo pode ser visto em Fazeli et al. (2012), em que uma transformação de Box-Cox também se fez necessária num experimento com o objetivo de descrever o rendimento da cor de um tecido 100% algodão tingido com uma combinação de seis corantes distintos.

Em qualquer que seja o caso, na prática, não se deve criar resistência para o uso de transformação na resposta se a mesma conduzir a análises mais simples e modelos com as pressuposições usuais.

Atkinson (2005) argumenta que a transformação potência da resposta em modelos de regressão é muito utilizada quando a variância de  $Y$  obedece a relação

$$Var(Y) \propto \{E(Y)\}^{2(1-\lambda)}, \quad (5)$$

e, por expansão em série de Taylor, é possível mostrar que a família Box-Cox de transformações é capaz de estabilizar a variância. Note que para  $\lambda < 1$ , a variância aumenta com  $E(Y)$ .

Outras famílias de transformações similares à Box-Cox foram propostas por outros autores e são descritas em detalhes em Cook & Weisberg (1982), Carroll & Ruppert (1984), Atkinson (1985) e Hinkley (1985). Nas relações mais simples, após a transformação, é assumido um modelo linear na escala transformada com

$\epsilon_i \sim N(0, 1)$ , dado por

$$Y_i^{(\lambda)} = f^T(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\beta} + \sigma \epsilon_i, \quad (6)$$

no qual  $f(\mathbf{x}_i)_{p \times 1}$  é uma função aplicada ao vetor  $\mathbf{x}_i$  de forma a acomodar os efeitos em  $\boldsymbol{\beta}$ , com  $i = 1, 2, \dots, n$ . Esse modelo, além dos parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$  e  $\sigma$ , tem o parâmetro adicional  $\lambda$ . Assim, denota-se o vetor de parâmetros desconhecidos por  $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\beta}, \lambda, \sigma^2)$  que passa a ter dimensão  $p^\dagger = p + 2$ , lembrando que  $p$  é o número de elementos no vetor  $\boldsymbol{\beta}$ . Esse modelo compartilha dos problemas de estimação dos modelos não lineares já que o parâmetro  $\lambda$  aparece não linearmente na expressão.

Para o estudo de delineamento no contexto do Modelo (6) é necessário obter a matriz de informação para  $\boldsymbol{\beta}$ , baseada na função densidade de  $Y$ . Para a observação  $i$ , essa densidade é dada por (Cook & Weisberg, 1982)

$$k\left(y_i^{(\lambda)} | (\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)\right) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \left\| \frac{dy_i^{(\lambda)}}{dy_i} \right\| \exp \left\{ -\frac{\left[ y_i^{(\lambda)} - f^T(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\beta} \right]^2}{2\sigma^2} \right\}. \quad (7)$$

A estimação de  $\boldsymbol{\theta}$  é usualmente via o método da máxima verossimilhança e a precisão dos estimadores aproximada pela inversa da Matriz de Informação de Fisher, cujos detalhes serão apresentados na seção 2.1.

## 2.1 Matriz de Informação

A matriz de informação de Fisher depende do modelo assumido. Para modelos lineares homocedásticos ou modelos como em (1) com  $\lambda$  conhecido, a matriz de informação, considerando as  $n$  observações, é  $\mathbf{M}(\xi) = \frac{(\mathbf{X}^T \mathbf{X})}{\sigma^{-2}}$  em que  $\mathbf{X}$  é a matriz do modelo, com cada linha dada por  $f^T(\mathbf{x}_i)$ . Porém, na presença de não linearidade, como o caso do modelo (6) para  $\lambda$  desconhecido, a expressão da matriz de informação se torna mais complexa. Por definição (Casella & Berger, 2001), para cada observação  $i$ , a informação de Fisher é dada por

$$\mathbf{M}_\lambda^i(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i) = -E \left\{ \frac{\partial^2 \log \left[ k\left(y_i^{(\lambda)} | (\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)\right) \right]}{\partial \boldsymbol{\theta}^2} \right\}. \quad (8)$$

Substituindo (7) em (8), Atkinson et al. (2007) mostram que a matriz de informação pode ser escrita de forma geral por

$$\mathbf{M}_\lambda^i(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i) = \begin{pmatrix} \frac{f(\mathbf{x}_i)f^T(\mathbf{x}_i)}{\sigma^2} & 0 & -\frac{f(\mathbf{x}_i)E(\dot{y}_i^{(\lambda)})}{\sigma^2} \\ 0 & \frac{1}{2\sigma^4} & -\frac{E(\epsilon\dot{y}_i^{(\lambda)})}{\sigma^4} \\ -\frac{E(\dot{y}_i^{(\lambda)})f(\mathbf{x}_i)}{\sigma^2} & -\frac{E(\epsilon\dot{y}_i^{(\lambda)})}{\sigma^4} & \frac{E(\epsilon\ddot{y}_i^{(\lambda)}) + E([\dot{y}_i^{(\lambda)}]^2)}{\sigma^2} \end{pmatrix}_{(p+2) \times (p+2)} \quad (9)$$

na qual  $\epsilon = y_i^{(\lambda)} - f(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta}$ , e  $\dot{y}_i^{(\lambda)}$  e  $\ddot{y}_i^{(\lambda)}$  indicam a primeira e segunda derivada de  $y_i^{(\lambda)}$  em relação a  $\lambda$  dadas por

$$\dot{y}_i^{(\lambda)} = \frac{y_i^{(\lambda)}\log(y_i^{(\lambda)}) - y_i^{(\lambda)} + 1}{\lambda^2} \quad (10)$$

e

$$\ddot{y}_i^{(\lambda)} = \frac{y_i^{(\lambda)}\log(y_i^{(\lambda)} - 1)^2 + y_i^{(\lambda)} - 2}{\lambda^3}. \quad (11)$$

Por conta que as esperanças em (9) não apresentam soluções analíticas, é necessário empregar aproximações para a obtenção da matriz  $\mathbf{M}_\lambda^i(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)$ . Utilizando-se expansão em série de Taylor, obtêm-se

$$\frac{E(\epsilon\dot{y}_i^{(\lambda)})}{\sigma^4} \approx \frac{\log(\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i))}{\lambda\sigma^2}, \quad (12)$$

e

$$\frac{E(\epsilon\ddot{y}_i^{(\lambda)})}{\sigma^2} \approx \frac{\log^2(\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i))}{\lambda^2}, \quad (13)$$

nas quais

$$\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i) = E(y_i^{(\lambda)}) = \lambda f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta} + 1, \quad (14)$$

e

$$E(\dot{y}_i^{(\lambda)}) \approx \frac{\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)\log(\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)) - \mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i) + 1}{\lambda^2}. \quad (15)$$

Substituindo (12), (13), (14) e escrevendo um vetor de parâmetros  $c_\theta = (\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)\log(\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)) - \mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i) + 1)/\lambda^2$  em (9), Atkinson et al. (2007) mostram que,



para a observação  $i$ , a matriz de informação pode ser aproximada por,

$$\mathbf{M}_\lambda^i(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i) = \begin{pmatrix} \frac{f(\mathbf{x}_i)f^T(\mathbf{x}_i)}{\sigma^2} & 0 & -\frac{f(\mathbf{x}_i)c_\theta(\mathbf{x}_i)}{\sigma^2} \\ 0 & \frac{1}{2\sigma^4} & -\frac{\log \mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)}{\lambda\sigma^2} \\ -\frac{c_\theta(\mathbf{x}_i)f^T(\mathbf{x}_i)}{\sigma^2} & -\frac{\log \mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)}{\lambda\sigma^2} & 2\frac{\log^2 \mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)}{\lambda^2} + \frac{(c_\theta(\mathbf{x}_i))^2}{\sigma^2} \end{pmatrix}_{(p+2) \times (p+2)} \quad (16)$$

para  $\lambda \neq 0$ .

Para  $\lambda = 0$ , a aproximação em (16) se reduz a

$$\mathbf{M}_\lambda^i(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i) = \begin{pmatrix} \frac{f(\mathbf{x}_i)f^T(\mathbf{x}_i)}{\sigma^2} & 0 & -\frac{f(\mathbf{x}_i)(f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta})^2}{2\sigma^2} \\ 0 & \frac{1}{2\sigma^4} & -\frac{f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta}}{\sigma^2} \\ -\frac{(f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta})^2 f^T(\mathbf{x}_i)}{2\sigma^2} & -\left[\frac{f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta}}{\sigma^2}\right]^T & 2(f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta})^2 + \frac{(f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta})^4}{4\sigma^2} \end{pmatrix}_{(p+2) \times (p+2)} \quad (17)$$

Para as  $n$  observações a matriz de informação total aproximada é  $\mathbf{M}_\lambda(\boldsymbol{\theta}, \xi) = \sum_{i=1}^n \mathbf{M}_\lambda^i(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)$ , na qual  $\xi$  representa o delineamento (definição na Equação (23), da Seção 2.2. Note que nas Equações 16 e 17, a primeira linha e coluna da matriz possui informações apenas dos parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$ . Na segunda linha e coluna informações de  $\sigma$ , enquanto que na última linha e coluna, informações tanto de  $\boldsymbol{\beta}$ ,  $\boldsymbol{\beta}$  e  $\lambda$ . Atkinson & Cook (1997) mostram que a matriz de informação aproximada (17) é a mesma quando se parte do modelo construído levando em conta a heterocedasticidade (*constructed model*) dado por

$$y_i^{(\lambda_0)} = f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta} + c_0(\mathbf{x}_i)\alpha + |1 + \alpha\lambda_0^{-1}\log(\mu(\mathbf{x}_i|\boldsymbol{\theta}_0))|\sigma\epsilon, \quad (18)$$

fixado  $\lambda = \lambda_0 \neq 0$  e

$$\log(y) = f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta} + 2^{-1} \{f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta}_0\}^2 \alpha + |1 + f^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta}_0\alpha|\sigma\epsilon \quad (19)$$

se  $\lambda_0 = 0$ , nos quais  $\alpha = \lambda - \lambda_0$ , e  $c_0(\mathbf{x}_i)$  é o componente  $c_\theta(\mathbf{x}_i)$  avaliado nos valores alvo  $\boldsymbol{\beta}_\theta = \boldsymbol{\beta}_0$ . A equivalência se dá quando avalia-se a informação de (18) e (19) nos pontos  $\boldsymbol{\beta}_0$ ,  $\sigma_0^2$  e  $\alpha = 0$ . Tal informação também pode ser expressa como a soma das matrizes de posto 1, a saber

$$\mathbf{M}_{\lambda_i}^i(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i) = \mathbf{z}_1\mathbf{z}_1^T + \mathbf{z}_2\mathbf{z}_2^T. \quad (20)$$

tais que

$$\mathbf{z}_1(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) = \sigma^{-1} \begin{pmatrix} f(\mathbf{x}_i) \\ 0 \\ c_\theta(\mathbf{x}_i) \end{pmatrix}, \quad (21)$$

e

$$\mathbf{z}_2(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \sigma^{-2} \\ -\lambda^{-1} \log(\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i)) \end{pmatrix}. \quad (22)$$

A formulação em termos de modelo construído levando em conta a heterocedasticidade é importante para mostrar que a informação para  $\lambda$  é obtida tanto pela função de regressão quanto pela função de variância. A função de regressão contribui através da variável  $c_0(\mathbf{x}_i)$  enquanto que a função de variância contribui através da função  $\log(\mu(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_i))$ . Esses resultados ajudam na interpretação dos comportamentos dos delineamentos construídos sob o modelo de transformação.

## 2.2 Delineamento Experimental

Basicamente, pode-se dizer que o delineamento é determinado pelo tamanho do experimento, quantas repetições de cada tratamento serão realizadas, como as unidades experimentais se relacionam, quais tratamentos serão testados, e como os mesmos serão atribuídos às unidades experimentais. Nesta pesquisa, concentrou-se nos delineamentos inteiramente aleatorizados, ou seja, submetidos a situações controladas, de forma que o sorteio dos tratamentos é do tipo simples, sem restrições. Nesse caso, os tratamentos e respectivos números de repetições podem ser representados, resumidamente, como uma matriz com duas linhas, a primeira indicando os tratamentos distintos e a segunda indicando o número de repetições ou pesos. A representação em (23) é comumente usada, na qual o delineamento é denotado por  $\xi$ , em que

$$\xi = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \dots & \mathbf{x}_t \\ w_1 & w_2 & \dots & w_t \end{bmatrix}. \quad (23)$$

onde  $t$  é o número de tratamentos distintos.

Um delineamento ótimo é aquele que busca a lista de tratamentos e respectivos pesos, de forma que alguma propriedade estatística da estimação dos parâmetros do modelo de interesse seja otimizada, usando algum método matemático ou computacional. Essa representação permite que, no processo de otimização, o pesquisador não fixe o tamanho do experimento ( $n$ ), mas busque a lista de tratamentos e os valores de  $w_k$  no intervalo de  $[0, 1]$  sob a restrição  $\sum_{k=1}^t w_k = 1$ . Os espaço dos fatores  $x_1, x_2, \dots, x_q$  também pode ser considerado contínuo. O delineamento obtido seguindo esse processo é chamado de contínuo ou aproximado, ou ainda, teórico, já que é ótimo para  $n \rightarrow \infty$ .

Para que o experimento seja efetivamente realizado, seu delineamento deve ser discreto ou exato, ou seja, cada  $w_k$  deve ser um número racional dado por  $r_k/n$  tal que  $\sum_{k=1}^t r_k = n$ , e o delineamento representado por

$$\xi = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \dots & \mathbf{x}_t \\ \frac{r_1}{n} & \frac{r_2}{n} & \dots & \frac{r_t}{n} \end{bmatrix}. \quad (24)$$

onde  $r_i$  é o número de repetições no tratamento  $i$ .

Embora, matematicamente, a busca por um delineamento ótimo contínuo seja mais fácil, na prática, todo delineamento é exato. É possível, por meio de um delineamento contínuo, obter o delineamento exato, fixando  $n$  e aproximando cada  $r_i \sim w_k \times n$  para o valor inteiro mais próximo, sujeito a  $\sum r_k = n$ . Esse processo, no entanto, não garante a obtenção do ótimo exato. Assim, o desenvolvimento de métodos específicos para a busca de delineamentos ótimos exatos é justificado, sendo o foco deste trabalho.

Atkinson et al. (2007) apresentam os conceitos e métodos para a construção tanto de delineamentos contínuos quanto exatos. Em ambas as versões, é necessária a escolha da(s) propriedade(s) que se deseja otimizar, referidas como critérios de otimalidade de delineamentos. Os critérios mais populares são resumidamente apresentados na Seção 2.3.

## 2.3 Critérios de Otimalidade

Diversos critérios podem ser utilizados para a otimização do delineamento, sendo que para muitos autores o cuidado na escolha do critério é fundamental para o sucesso do experimento. Espera-se que o critério escolhido reflita os objetivos principais do experimento, mas também introduza alguma robustez quanto a incertezas envolvidas já que, raramente, o pesquisador conhece o modelo correto ao planejar o experimento.

Uma lista extensa de possíveis critérios é apresentada por Atkinson et al. (2007), sendo que a maioria deles é uma função da matriz de informação dos parâmetros do modelo que se deseja estimar. Alguns critérios podem ser baseados na parte da informação de um subconjunto de parâmetros de interesse quando os demais parâmetros são considerados perturbadores (*nuisance*).

Por exemplo, para os modelos lineares homocedásticos, a informação relevante para  $\beta$  do modelo em (2) é proporcional a  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ . Tem-se então que a matriz de informação depende apenas do delineamento. Assim, pode-se escrever  $\mathbf{M}(\xi) = \mathbf{X}^T \mathbf{X}$ .

Já para o modelo linear na escala transformada (6), a matriz de informação depende dos valores dos parâmetros, como mostram as Equações (16) e (17), visando transformação da variável resposta. Nesse caso, a matriz de informação é denotada por  $\mathbf{M}_\lambda(\xi, \theta)$ , onde  $\theta = (\beta, \lambda, \sigma^2)$ . Quando a matriz de informação é função dos verdadeiros valores dos parâmetros que se deseja estimar, a construção do delineamento ótimo é mais complexa e o problema é aproximadamente resolvido com a incorporação de informação *a priori*. Essa informação pode ser pontual para o vetor de parâmetros ou em termos de distribuição de probabilidades *a priori* para os parâmetros. O uso de informação pontual leva à obtenção de um delineamento localmente ótimo, ou seja, ótimo para aquele conjunto de valores específicos. O uso de informação pontual leva à obtenção de um delineamento localmente ótimo, ou seja, ótimo para aquele conjunto de valores específicos. O uso de distribuições de probabilidades leva a delineamentos referidos como Bayesianos ou pseudo-Bayesianos, de acordo com a escolha utilizada para a matriz de variâncias e covariâncias para a

realização de inferências, *a posteriori* ou frequentista assintótica, respectivamente.

Como nessa pesquisa, o modelo de interesse leva à informação que é função dos parâmetros, a apresentação dos critérios mais usuais se restringe à matriz  $\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})$ .

### 2.3.1 Critérios com uso de informação pontual

O critério mais antigo e o mais utilizado dentre todos é o  $D$ , que tem por finalidade maximizar o determinante da matriz de informação dos parâmetros, ou maximizar a função

$$\phi(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})) = |\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})|^{1/p}. \quad (25)$$

ou equivalentemente, minimizar

$$\phi(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})) = -\log |\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})|. \quad (26)$$

em que  $\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})$  é a matriz de informação dos parâmetros ( $\boldsymbol{\theta}$ ) do modelo para o delineamento. A razão para a introdução do logaritmo é que esta função transforma a função que é côncava num espaço de busca compacto e convexo, assim, qualquer ótimo encontrado será global, ao invés de local, no caso de busca de delineamentos contínuos. A transformação log também é indicada para delineamentos discretos a fim de evitar problemas numéricos (valores muito altos).

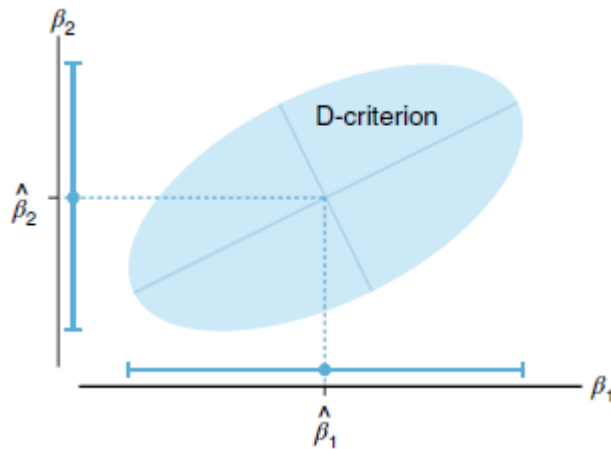


Figura 1: Elipse de confiança para dois parâmetros,  $\beta_1$  e  $\beta_2$  do modelo de regressão (Smucker et al., 2018).

A motivação para o critério  $D$  é que ele minimiza o volume da região de confiança dos parâmetros  $\boldsymbol{\theta}$ , já que este é proporcional a  $|\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})|^{-1/2}$ , como se pode ver na Figura 1 (Smucker et al., 2018).

Quando o interesse é na estimação de apenas alguns parâmetros do modelo, pode-se usar o critério  $D_S$ . Similarmente ao critério  $D$ , este critério tem como objetivo minimizar o volume da região de confiança, só que agora de um subconjunto dos parâmetros do modelo. Exemplificando, para o modelo em (6), a matriz de informação pode ser escrita, simplificada, por

$$\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{11}(\xi, \boldsymbol{\theta}) & \mathbf{M}_{12}(\xi, \boldsymbol{\theta}) \\ \mathbf{M}_{12}^T(\xi, \boldsymbol{\theta}) & \mathbf{M}_{22}(\xi, \boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix}. \quad (27)$$

tal que  $\mathbf{M}_{11}$  se refere a parte concernente a  $\boldsymbol{\beta}$  e  $\mathbf{M}_{22}$  a  $(\sigma^2, \lambda)$ . Caso estes dois parâmetros sejam considerados os de perturbação, o critério  $D_S$  consiste em minimizar o determinante de  $\mathbf{M}_{11}$ , o que se torna equivalente a maximizar a função

$$\phi(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})) = \frac{|\mathbf{M}_{11}(\xi)|}{|\mathbf{M}_{22}(\xi)|}. \quad (28)$$

Observe que este critério não ignora totalmente os parâmetros que não são de interesse, já que usa a informação em  $\boldsymbol{\beta}$  uma vez que  $\sigma$  e  $\lambda$  estão no modelo, porém o foco está na parte com os parâmetros de interesse.

O delineamento  $D$ -ótimo contínuo é equivalente ao  $G$ -ótimo, como Atkinson et al. (2014) mostram, com base em resultados de Kiefer (1959). O critério  $G$  tem como objetivo minimizar o máximo da variância de predição na região experimental, ou seja, o foco está na função  $\text{Var}(\hat{Y})$ .

O critério  $L$ , tem como objetivo minimizar a soma das variâncias dos estimadores dos parâmetros ou de combinações lineares desses, ou seja, minimiza

$$\phi(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})) = \text{traço}(\mathbf{W}\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})^{-1}), \quad (29)$$

no qual  $\mathbf{W}$  é uma matriz de pesos para  $\boldsymbol{\theta}$ . Se essa matriz for diagonal com todos elementos iguais, tem-se o critério  $A$ . Através de  $\mathbf{W}$  pode-se incorporar pesos de

prioridade aos parâmetros, ou ainda, corrigir problemas de escalas presentes em parâmetros de naturezas distintas.

Da mesma forma que o Critério  $D$ , pode-se definir o critério  $A_S$  quando o interesse é na estimação de apenas alguns parâmetros do modelo. Neste caso, usa-se peso 0 para os parâmetros perturbadores.

Outros critérios são apresentados em Atkinson et al. (2007), como é o caso do  $D_A$ , também chamado de  $D$  Generalizado, utilizado quando o interesse não é em todos os parâmetros do modelo e, sim, em  $s$  combinações lineares de  $\beta$  dadas por  $\mathbf{A}^T\beta$ , onde  $\mathbf{A}$  é uma matriz  $p \times s$  com rank  $s < p$ . A matriz de covariância para essas combinações lineares é dada por

$$\mathbf{A}^T \mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})^{-1} \mathbf{A}, \quad (30)$$

e, portanto, para encontrar o delineamento ótimo, segundo o critério  $D$  generalizado, basta minimizar

$$\log |\mathbf{A}^T \mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})^{-1} \mathbf{A}|. \quad (31)$$

Existem outros critérios, como por exemplo, o  $C$ ,  $V$ , entre outros, cuja escolha deve depender dos objetivos do experimento a ser realizado. Esses critérios otimizam uma única propriedade do delineamento, o que na prática pode não ser o ideal, já que um delineamento bom para uma propriedade pode ser pobre em relação a outra. Como, em geral, um experimento deve responder diversos objetivos, uma função de otimização que incorpora várias propriedades é bastante promissora. Tal função define a classe de critérios compostos discutidos em Atkinson et al. (2007) e Gilmour & Trinca (2012), que podem resultar em delineamentos mais robustos, ou seja, menos dependentes do modelo assumido. Neste caso, todos os interesses podem estar incluídos, com pesos apropriados, para cada uma das propriedades desejadas.

Os critérios compostos são definidos como uma combinação de critérios, de acordo com os objetivos do pesquisador. Assim, o critério composto pode ser escrito como

$$\prod_{i=1}^h \{\phi_i(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta}))\}^{\alpha_i} \quad (32)$$

no qual  $h$  é o número de propriedades e  $\alpha_i$  é o peso referente ao critério  $\phi_i$ , com  $\sum_{i=1}^h \alpha_i = 1$ . Nesta tese são propostos alguns critérios compostos no contexto do modelo (6) que serão apresentados na Seção (3.2).

### 2.3.2 Critérios Pseudo-Bayesianos

Seja  $p(\boldsymbol{\theta})$  a informação *a priori* de  $\boldsymbol{\theta}$  em termos de distribuição de probabilidades. Uma das definições do critério pseudo-Bayesiano é a esperança da função  $\phi(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta}))$  com respeito a distribuição de  $\boldsymbol{\theta}$  proposta, ou seja,  $\Phi(\xi) = E_{\boldsymbol{\theta}}(\phi(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})))$ . Por exemplo, no caso particular do critério  $D$  tem-se

$$\Phi(\xi) = E_{\boldsymbol{\theta}} \log |\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})| = \int_{\boldsymbol{\theta}} \log |\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})| p(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}. \quad (33)$$

Esse tipo de critério é chamado de pseudo-bayesiano porque a função não considera a matriz da informação *a posteriori*. Em geral, para se obter a matriz de informação *a posteriori*, são necessários os resultados experimentais, o que na fase de delineamento implica no uso de simulações ou de informação de um experimento piloto. Outros exemplos de critérios pseudo-bayesiano podem ser vistos em detalhes em Chaloner & Verdinelli (1995).

## 2.4 Eficiência

Como o delineamento ótimo pode variar com o modelo, com o critério e com os valores *a priori* dos parâmetros, recomenda-se um estudo de robustez dos delineamentos ótimos encontrados através do cálculo da eficiência, ou seja,

$$\text{Eff} = \left( \frac{\phi(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta}))}{\phi(\mathbf{M}_\lambda(\xi^*, \boldsymbol{\theta}))} \right). \quad (34)$$

Se o valor da eficiência for menor que 1, significa que o delineamento  $\xi$  é menos eficiente que o delineamento  $\xi^*$ , de acordo com o critério utilizado. Para o critério  $D$ , em particular, a eficiência é medida por

$$\text{Eff} = \left( \frac{|\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})|}{|\mathbf{M}_\lambda(\xi^*, \boldsymbol{\theta})|} \right)^{1/p^\dagger}, \quad (35)$$

na qual  $p^\dagger$  é o número de parâmetros do modelo.



## 2.5 Algoritmos para busca de delineamentos ótimos

É possível usar uma variedade de métodos computacionais para encontrar o delineamento ótimo exato. De acordo com Nguyen & Miller (1992), na maioria dessas metodologias seleciona-se  $t$  pontos ou tratamentos de um total de  $N$  pontos possíveis (pontos candidatos), a serem incluídos no delineamento. Dependendo do número de fatores do experimento, o número total de pontos possíveis pode ser muito grande. A melhor combinação possível desses  $t$  pontos, de acordo com algum critério pré-estabelecido, definem o delineamento ótimo.

Como foi visto, todos os critérios de otimalidade minimizam ou maximizam alguma função especial da matriz de informação e, para tal, é necessário algum algoritmo de alta performance, de modo que o delineamento ótimo seja encontrado dentre todos os delineamentos possíveis. Essa quantidade de delineamentos possíveis aumenta de maneira extremamente rápida dependendo do aumento da quantidade de fatores e/ou níveis que se pode ter. Apenas em situações relativamente simples (poucos fatores e modelo bem simples), é possível encontrar o delineamento ótimo de forma analítica.

Segundo Ferreira (2010), por conta desta dificuldade em encontrar a solução ótima, alguns pesquisadores demoraram para utilizar esta metodologia, embora tenha sido proposta em 1959 por Kiefer. Alguns autores argumentam que não se faz necessário obter o melhor delineamento absoluto, apenas um que seja bom o suficiente, justificando a utilidade dos algoritmos de aproximação. O método para encontrar esse melhor delineamento é tão importante que Zhang (2006) diz que "procurar o melhor de todos os valores possíveis da função é o coração de toda rotina de otimização". O objetivo da maioria dos algoritmos do tipo *exchange* é encontrar uma solução ótima seguindo os seguintes passos:

1. Escolher uma solução inicial.
2. Modificar de alguma maneira esta solução.
3. Repetir (2) até encontrar a solução ótima.

Os algoritmos modificam a solução atual de forma que, ou essa mudança é aceita, ou ela é rejeitada por meio de algum critério. Todavia, a maioria dos algoritmos não garante a otimalidade dos resultados, mas resulta em delineamentos ótimos ou muito próximos do ótimo com grande probabilidade. Na literatura de delineamentos ótimos, pode-se identificar diversos algoritmos, desde Nelder & Mead (1965), como em Fedorov (1972), Wynn (1972), Chaloner & Larntz (1989), Mitchell (2002), Zhang (2006), Chang & Lin (2007), Harman & Pronzato (2007) e Pronzato (2008). Porém, neste trabalho foi implementado somente o algoritmo *Point Exchange*, que é considerado um método computacional heurístico.

### 2.5.1 Troca por ponto (*Point Exchange*)

Dentre os diversos algoritmos de otimização, pode-se destacar o algoritmo *exchange* (Fedorov, 1972). Este algoritmo é um método heurístico que busca a solução ótima por meio de trocas, sendo que a cada iteração a solução corrente é melhorada. De acordo com Woods et al. (2006), o algoritmo *exchange* é uma das técnicas mais comuns e mais utilizada para a busca de delineamentos ótimos exatos, cujo sucesso ou fracasso depende do delineamento inicial e do caminho que ele irá percorrer.

Para, por exemplo, o critério de  $D$ , cujo objetivo é maximizar o determinante da matriz de dispersão  $\mathbf{M}_\lambda(\xi)$ , este algoritmo inicia-se com o sorteio de um delineamento inicial ( $\xi_1$ ) de tamanho  $n$  a partir do conjunto de todos os tratamentos ou pontos possíveis. Seja  $\mathbf{X}_1$  a matriz do modelo no preditor linear, cuja  $i$ -ésima linha é dada por  $f^T(\mathbf{x}_i)$ . Calcula-se o determinante  $|\mathbf{M}_\lambda(\xi_1)|$ . A seguir, faz-se uma troca de uma linha de  $\mathbf{X}_1$  por um ponto do conjunto de candidatos formando o delineamento  $\xi_2$  e verifica-se qual o maior determinante. Se  $|\mathbf{M}_\lambda(\xi_1)| \geq |\mathbf{M}_\lambda(\xi_2)|$ , então rejeita-se a troca. Caso contrário  $\xi_2$  se torna o delineamento corrente e o processo de trocas para todas as linhas continua sequencialmente até a convergência do processo. Para outros critérios, a única mudança é a forma de obtenção do critério (função  $\phi$ ), como visto na Sessão 2.3.1.

Esse algoritmo não garante que o delineamento final é o verdadeiro ótimo. Para

aumentar a probabilidade de se chegar ao ótimo, todo o processo é repetido para um número de delineamentos iniciais diferentes, uma vez que ótimos locais podem ser encontrados como resultado.

### 3 METODOLOGIA

Este capítulo propõe um procedimento para a construção de delineamentos ótimos exatos para estimar os parâmetros de efeitos de tratamentos ( $\beta$ ) assim como o parâmetro de transformação da variável resposta ( $\lambda$ ). Para investigar a sensibilidade do delineamento aos valores dos parâmetros supostos *a priori*, várias configurações experimentais, modelos e critérios de otimalidade foram considerados.

As configurações estudadas abordaram experimentos com dois ou três fatores ( $k = 2, 3$ ), sob modelos incluindo:

1. Efeitos principais lineares.
2. Efeitos principais lineares mais interações entre dois fatores.
3. Efeitos principais lineares e quadráticos.
4. Modelo de segunda ordem completo.

Para cada valor de  $k$  foram variados os valores dos elementos de  $\beta$ , o valor de  $\lambda$  e de  $\sigma^2$ . Para a escolha dos valores dos parâmetros utilizou-se, em parte, os valores já estudados por Atkinson & Cook (1997) na construção de delineamentos contínuos. Segundo Atkinson & Cook (1997), estes valores estão sujeitos a restrições, por exemplo, para  $\lambda > 0$  tem-se que  $E(Y^{(\lambda)})$  deve ser maior que  $-\frac{1}{\lambda}$ .

Foram construídos delineamentos ótimos para diversos tipos de critérios: primeiramente envolvendo uma única propriedade e informação pontual, em seguida com uma única propriedade e informação em termos de distribuição de probabilidades e finalizando com critérios compostos. Na sequência são descritos os detalhes envolvidos nesses critérios.

O tamanho do experimento foi escolhido para permitir a comparação com outros delineamentos, em alguns casos  $n = 20$  e outros  $n = 16$ .

### 3.1 Propriedade única

Para os critérios simples, foram utilizados:  $D$  (matriz de informação completa),  $D_S$  e  $A_S$  (matriz de informação apenas para  $\beta$ ), todos com informação pontual para cada parâmetro. O critério  $A_S$  foi definido como a média aritmética das variâncias para os modelos sem efeitos quadráticos e a média ponderada das variâncias para os modelos com efeitos quadráticos. Os pesos foram inseridos através da matriz diagonal  $\mathbf{W}$  conforme descrito na seção 2.3.1. Assim, inicialmente, os parâmetros  $\beta_0$ ,  $\lambda$  e  $\sigma$  receberam peso 0, os lineares e interações peso 1 e os quadráticos peso  $1/4$ , conforme sugerido por Gilmour & Trinca (2012). Esse padrão de pesos sugerido tem como objetivo corrigir as escalas diferentes dos efeitos lineares/interações e quadráticos. Especificados os pesos iniciais estes foram re-escalados tal que  $\sum_{i=1}^p W_{ii} = 1$ . Outra forma de atribuir pesos aos parâmetros em escalas diferentes é encontrar o delineamento localmente  $D_S$  ótimo para cada um dos parâmetros e usar o inverso da variância como peso. Uma exploração preliminar desta alternativa indicou, para os parâmetros  $\beta$ , pesos muito similares à sugestão de Gilmour & Trinca (2012). Desta forma optou-se por utilizar essa versão simplificada.

O critério Bayesiano foi investigado apenas para o  $D$  no qual, aos elementos de  $\beta$ , foram incorporadas distribuições *a priori* Normal  $(2, 2)$ , independentes. Para os parâmetros  $\lambda$  e  $\sigma^2$  considerou-se apenas informação pontual. Assim, a busca do delineamento pseudo-Bayesiano maximizou a função

$$\Phi(\xi) = E_{\theta} \log |\mathbf{M}_{\lambda}(\xi, \boldsymbol{\theta})| = \int_{\boldsymbol{\theta}} \log |\mathbf{M}_{\lambda}(\xi, \boldsymbol{\theta})| p(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}. \quad (36)$$

Essa integral não tem solução analítica e foi aproximada numericamente pelo método de quadratura Gauss-Hermitiana.

### 3.2 Critérios Compostos

Os estudos preliminares utilizando o critério  $A_S$  resultaram em delineamentos com pontos bastantes concentrados numa pequena parte da região experimental. Isso levou à sugestão de construção de delineamentos talvez mais robustos considerando dois componentes no critério de otimização. Um dos componentes considera a informação para o modelo linear homocedástico e o outro a informação do modelo heterocedástico, ou seja, com possibilidade estimação do parâmetro de transformação. Assim, a expressão da primeira proposta de critério composto é

$$\Psi_{AA}(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})) = [\text{tr} [\mathbf{W}_1 \mathbf{M}(\xi)^{-1}]]^\alpha \times [\text{tr} [\mathbf{W}_2 \mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})^{-1}]]^{1-\alpha} \quad (37)$$

na qual  $\mathbf{W}_1$  é a matriz de pesos para os parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$  do modelo usual (homocedástico), e  $\mathbf{W}_2$  é a matriz de pesos para os parâmetros do modelo considerando transformação.  $\alpha$  é o outro peso que reflete a prioridade da propriedade. Quanto maior o seu valor, maior o peso para a parte homocedástica do critério. Note que esse critério composto denotado por  $\Psi_{AA}$  significa que ambas propriedades são referentes ao critério A.

Uma outra combinação possível pode ser com parte usando o critério  $D$  para a informação sob o modelo de transformação e parte usando o critério  $A$  sob o modelo clássico. Ou seja

$$\Psi_{DA}(\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta}), \alpha) = |\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})|^\alpha \times [\text{tr} [\mathbf{W}_1 \mathbf{M}(\xi)^{-1}]]^{1-\alpha}. \quad (38)$$

A vantagem prática deste critério é que na primeira parte, que usa uma matriz de dimensão maior, não é necessário obter a inversa.

### 3.3 Algoritmos

Para a otimização do delineamento utilizou-se o algoritmo *exchange* que parte de um delineamento inicial gerado aleatoriamente. Esse delineamento vai sofrendo alterações sequenciais de acordo com a otimização do critério escolhido, conforme descrito na Seção 2.3.1. Como conjunto de pontos candidatos utilizou-se os fatoriais

$21^k$  ( $k = 2, 3$ ), que, numa escala codificada no intervalo  $[-1; +1]$  implica em pontos equidistantes com espaçamento de 0,1 para cada fator.

O procedimento de busca do delineamento ótimo foi implementado computacionalmente no programa R (R Core Team, 2018). No caso do critério Bayesiano foi necessário o cálculo da integral múltipla em (36).

Os passos para a obtenção do delineamento ótimo são:

1. Entre com a lista de todos os parâmetros de entrada do seu programa.
2. Gere um delineamento inicial aleatório.
3. Calcule o valor do critério.
4. Altere o delineamento e recalcule o critério.
5. Se o novo critério for melhor que o anterior, descarte o delineamento anterior.
6. Repita (4) até encontrar o delineamento ótimo.

## 4 RESULTADOS

Encontram-se os resultados organizados nas seções 4.1 e 4.2 encontram-se os resultados para os critérios simples e compostos, respectivamente. A seção 4.1 engloba quatro sub-seções separadas segundo a complexidade do modelo de regressão, sendo 4.1.1 para o modelo com dois fatores, sem e com interação (Exemplo 1), 4.1.2 para o modelo de segunda ordem com dois fatores (Exemplo 2), 4.1.3 para o modelo com três fatores, sem e com interação (Exemplo 3) e 4.1.4 para o modelo de segunda ordem com três fatores (Exemplo 4). A seção 4.2 contém duas sub-seções que ilustram os critérios compostos, retomando o Exemplo 1 em 4.2.1 e o Exemplo 2 em 4.2.2.

### 4.1 Delineamentos ótimos sob Critérios Simples

Essa sub-seção expande o estudo feito por Atkinson & Cook (1997), em delineamentos contínuos localmente ótimos ampliando a faixa de valores dos parâmetros para encontrar delineamentos ótimos exatos. Expandiu-se o estudo para o critério  $A_S$  local e para o critério  $D$  pseudo-Bayesiano.

Para tentar identificar a influência dos valores dos parâmetros nos delineamentos, foram propostos diversos modelos, tomando como base alguns casos particulares encontrados nos trabalhos de Atkinson & Cook (1997), Atkinson et al. (2007) e Gilmore & Trinca (2012), modificando alguns valores de parâmetros com o objetivo de estudar delineamentos resultantes.

Para o caso de apenas um único fator, pode ser visto em Atkinson & Cook (1997) que, para o modelo linear, se a média não se alterar de forma abrupta sobre a região do delineamento ou se a variância não for um valor incomum, o delineamento



$D$ -ótimo terá somente três pontos, todos com peso  $(\frac{1}{3})$ , sendo dois nos extremos e um ponto interior, porém, a localização deste ponto no interior dependerá do valor de  $\lambda$ , podendo ser positivo ou negativo.

#### 4.1.1 Exemplo 1

Considerando  $k = 2$  fatores e os modelos sem interação ( $E(Y^{(\lambda)}) = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2$ ) e com interação ( $E(Y^{(\lambda)}) = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_1x_2$ ), Atkinson & Cook (1997) obtiveram delineamentos  $D$ -ótimos contínuos para algumas combinações de valores de parâmetros. Nesse estudo foram construídos um grande número de delineamentos exatos para  $n = 20$ , ampliando-se o conjunto de combinações de valores dos parâmetros, a fim de investigar mais detalhadamente a influência exercida sobre os resultados. Estudou-se também os critérios pseudo-Bayesianos,  $D_S$  e  $A_S$ .

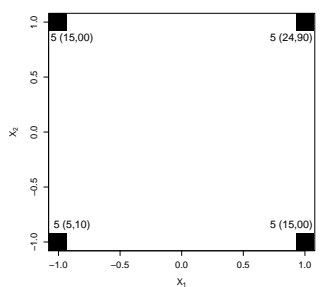
##### 4.1.1.1 Delineamentos localmente $D$ -ótimos

Foi construído um grande número de delineamentos para  $n = 20$ , mas apenas alguns deles serão apresentados, já que resumem bem o comportamento quanto ao critério  $D$ . A Tabela 1 apresenta os modelos, em termos de  $\beta'$ s e  $\sigma$ , utilizados para a construção dos delineamentos  $D$ -ótimos assumindo  $\lambda = 0, 0,5$  e  $1$ . No caso do critério  $D$ , os resultados mostraram que o valor de  $\lambda$  pouco influencia no delineamento.

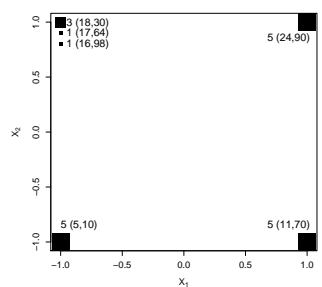
Tabela 1: Valores dos parâmetros dos modelos considerados para a busca dos delineamentos ótimos (exemplo 1)

Modelo	$\beta_0$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_{12}$	$\sigma$	$\lambda$
1	15	4,95	4,95	0	0,1	0,0
2	15	3,30	6,60	0	0,1	0,5
3	15	4,95	4,95	0	3,0	0,0
4	15	3,30	6,60	0	3,0	0,5
5	15	4,95	4,95	4,95	0,1	0,0
6	15	3,30	6,60	4,95	0,1	0,0
7	15	4,95	4,95	4,95	3,0	0,0
8	15	3,30	6,60	4,95	3,0	0,0
9	15	-4,95	4,95	4,95	3,0	0,0

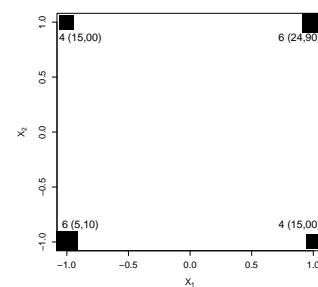
A Figura 2 apresenta os nove delineamentos  $D$ -ótimos cujas eficiências estão apresentadas na Tabela 2. Os delineamentos de 1 a 4 são  $D$ -ótimos para modelos sem interação, enquanto que os de 5 a 9 para modelos com interação. O delineamento 1 é  $D$ -ótimo para o modelo com  $\beta_1 = \beta_2$ , sem interação, qualquer valor de  $\lambda$  (ou seja, não se altera na mudança de seu valor) e variância muito pequena. Sua configuração é a mesma de um fatorial  $2^2$  balanceado com 5 repetições (Figura 2 (a)).



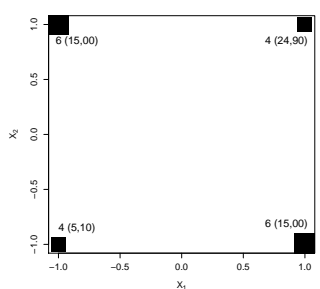
(a) Delineamento 1



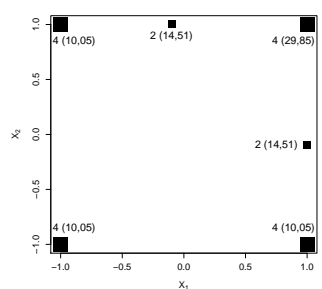
(b) Delineamento 2



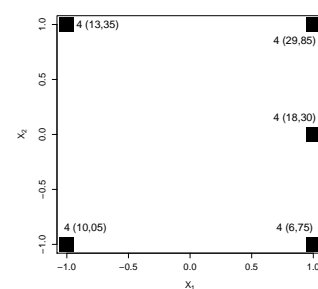
(c) Delineamento 3



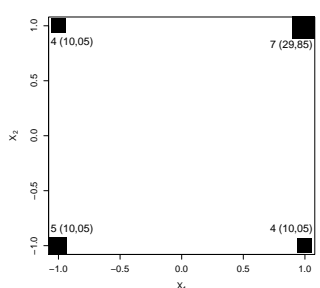
(d) Delineamento 4



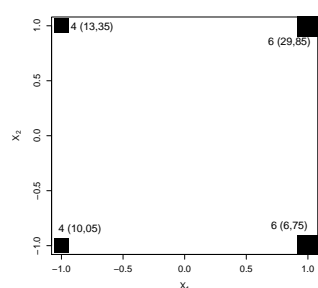
(e) Delineamento 5



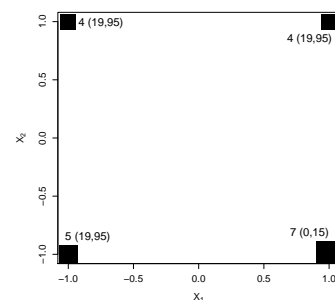
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 2: Delineamentos localmente  $D$ -ótimos para o Exemplo 1, com o número de repetições e  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para cada tratamento.

Tabela 2: Eficiência dos delineamentos localmente  $D$ -ótimos apresentados na Figura 2 sob diversos modelos

Modelo	$\lambda$	Delineamento								
		Modelos sem interação				Modelos com interação				
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	0,00	100,00	99,38	98,39	98,38	92,55	91,46	97,84	98,38	97,83
	0,50	100,00	99,51	98,39	95,25	92,10	91,12	97,83	98,38	96,05
	1,00	100,00	99,51	98,39	98,37	92,08	91,11	97,83	98,38	97,83
2	0,00	100,00	99,95	98,39	98,37	93,57	93,55	97,84	98,38	97,83
	0,50	99,97	100,00	98,36	98,34	92,84	92,52	97,81	98,35	97,80
	1,00	99,97	100,00	98,39	98,34	92,79	92,45	97,80	98,34	97,79
3	0,00	98,87	98,30	100,00	95,14	91,66	91,02	97,37	97,50	96,43
	0,50	98,80	98,23	100,00	98,37	91,63	91,00	98,81	96,70	97,83
	1,00	98,79	98,22	100,00	95,12	91,61	90,99	98,77	96,63	96,45
4	0,00	99,01	98,48	100,00	95,71	92,22	91,23	98,38	97,84	96,20
	0,50	95,80	97,75	95,14	100,00	91,87	90,68	94,73	98,22	98,93
	1,00	98,79	97,76	95,12	100,00	91,84	90,63	94,71	98,27	99,00
5	0,00	43,31	42,90	43,54	41,61	100,00	92,32	43,92	43,54	41,42
	0,50	43,63	43,22	43,87	41,92	100,00	92,92	44,25	43,87	41,73
	1,00	43,68	43,27	43,92	41,97	100,00	92,95	44,30	43,97	41,77
6	0,00	40,36	40,03	40,44	38,96	94,75	100,00	40,77	40,81	39,06
	0,50	40,53	40,22	40,36	39,42	94,10	100,00	40,66	41,08	39,59
	1,00	40,60	40,29	40,40	39,52	94,05	100,00	40,70	41,16	39,69
7	0,00	98,62	97,62	99,14	94,75	92,93	92,32	100,00	99,14	94,30
	0,50	98,62	97,62	99,14	94,75	93,51	92,92	100,00	99,14	94,30
	1,00	98,62	97,62	99,14	94,75	93,53	92,95	100,00	99,14	94,30
8	0,00	98,52	97,60	97,50	98,72	93,31	94,15	99,51	100,00	95,35
	0,50	98,67	97,73	97,52	98,24	93,76	94,57	98,98	100,00	96,37
	1,00	98,66	97,71	97,49	98,17	93,73	94,52	98,89	100,00	96,43
9	0,00	98,62	97,68	94,75	99,14	91,87	92,32	94,30	99,14	100,00
	0,50	98,62	97,68	94,75	99,14	90,49	90,37	94,30	99,14	100,00
	1,00	98,62	97,68	94,75	99,14	90,20	89,95	94,30	99,14	100,00
	Mínimo	40,36	40,03	40,36	38,96	90,20	89,95	40,66	40,81	39,06
	Média	87,54	87,01	86,75	86,08	93,31	92,77	86,57	87,18	85,82
	Máximo*	99,97	99,95	99,14	99,14	94,75	94,57	98,98	99,62	99,90

\*Máximo excluindo a situação na qual o delineamento em questão é o ótimo.

Note que o balanceamento se perde quando o valor da variância aumenta, como no delineamento 3 (Figura 2 (c)), porém a perda de eficiência deste delineamento

em relação ao balanceado é pequena (menos de 2%). No caso de desbalanceamentos, os resultados mostram que mais repetições são alocadas para os tratamentos que resultam em maior dispersão de  $E(Y^{(\lambda)})$  em relação ao valor médio. Note a inversão da diagonal com maior número de repetições nos delineamentos 3 e 4.

Caso um dos efeitos seja reduzido pela metade, como por exemplo  $\beta_1 = 3,3$  e  $\beta_2 = 6,6$  (modelo 2), o delineamento localmente  $D$ -ótimo fica muito parecido aos discutidos anteriormente. Por exemplo, para  $\sigma = 0,1$  e  $\lambda = 0$ , o delineamento 1 se mantém como  $D$ -ótimo. E quando se aumenta o valor de  $\lambda$  para 0,5 ou 1, por exemplo, o delineamento 2 é o  $D$ -ótimo que, embora não seja um fatorial completo  $2^2$ , está muito próximo disto.

O efeito da alteração dos valores de  $\beta_1$  e  $\beta_2$  se perde um pouco no caso de variância grande ( $\sigma = 3$ ), sendo o delineamento 3 (Figura 2 (c)) o  $D$ -ótimo quando os dois efeitos lineares tem o mesmo sinal, não importando a magnitude. Alteração ocorre quando os efeitos apresentam sinais opostos, como é o caso do delineamento 4 (Figura 2 (d)). Assim, para modelos sem interação, verifica-se grande influência do valor de  $\sigma$  sobre o delineamento  $D$ -ótimo. Há também certa influência dos valores de  $\beta$ , porém, erro nesses valores acarreta perda razoável de eficiência ( $\simeq 5\%$ ) apenas na presença de grande variabilidade aleatória.

A inclusão do termo de interação no modelo tem efeito importante na construção do delineamento  $D$ -ótimo, principalmente quando  $\sigma$  é pequeno. O delineamento 5 (Figura 2 (e)), construído sob o modelo com todos os efeitos com o mesmo valor apresenta pontos em dois lados do quadrado, além dos vértices, sendo as posições simétricas em relação à diagonal crescente da região experimental. Esse comportamento foi também verificado em Atkinson & Cook (1997) nos delineamentos contínuos. As posições dos dois pontos internos podem variar levemente de acordo com o valor de  $\lambda$  (delineamentos não apresentados), mas não ocorre grande perda de eficiência. O peso desses pontos é a metade do peso dos pontos nos vértices.

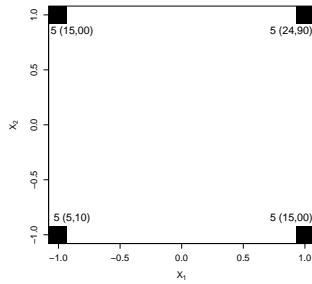
Quando os valores de  $\beta_1$  e  $\beta_2$  são diferentes, mas com mesmo sinal, e  $\sigma = 0,1$ , apenas o ponto da lateral do fator com maior efeito se mantém (delineamento

6, Figura 2 (*f*)). A perda de eficiência entre esses dois delineamentos é de aproximadamente de 6% a 8%, sendo preferível o uso do delineamento com mais pontos (delineamento 5). Estudos sobre outros valores para o efeito de interação, resultam em delineamentos intermediários (não apresentados) entre o delineamento 5 e o delineamento 1, com as posições dos pontos internos migrando para os vértices, conforme o valor da interação diminui.

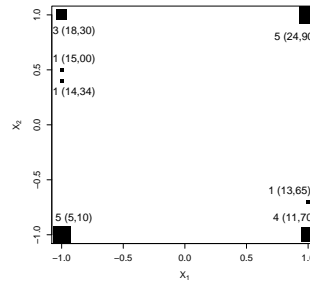
Analisando o valor das eficiências, identifica-se que ao se utilizar o delineamento balanceado quando existe interação, perde-se mais eficiência ( $\approx 40\%$ ) quando comparado ao se utilizar o delineamento com pontos internos sem interação ( $\approx 91-92\%$ ). Em virtude deste fato, é importante considerar o modelo com uma possível interação na fase de delineamento, a fim de não se perder eficiência.

Para modelos com interação e alta variabilidade ( $\sigma = 3$ ), os delineamentos *D*-ótimos (Figura 2 (*g, h, i*)) voltam a apresentar apenas 4 pontos ( $2^2$ ), porém, desbalanceados. As eficiências destes delineamentos são muito baixas quando avaliados sob modelos com interação e  $\sigma$  pequeno, indicando que, na fase de planejamento, é importante considerar o modelo com interação e  $\sigma$  pequeno. Note que de todos os delineamentos apresentados na Tabela 2, os mais robustos (alta eficiência para qualquer modelo) são os delineamentos 5 e 6 (Figura 2 (*e, f*)) que apresentam os pontos extras, além do  $2^2$ . A menor eficiência do delineamento 5 é 90,20% e do delineamento 6 é 89,95%. Outra vantagem do delineamento 5 é a possibilidade de verificação de falta de ajuste do modelo com efeitos lineares e interação, já que ela fornece 5 graus de liberdade para o modelo. Note também que o delineamento 1 ( $2^2$  balanceado) não apresenta bom desempenho frente aos modelos com interação, indicando a importância de se considerar a estimação do parâmetro de transformação, embora o seu valor não seja importante.

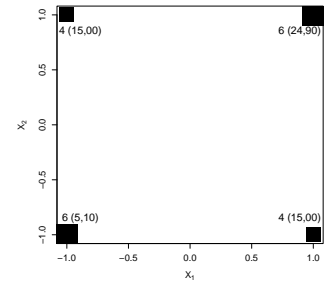
### 4.1.1.2 Delineamentos pseudo-Bayesianos $D$ -ótimos



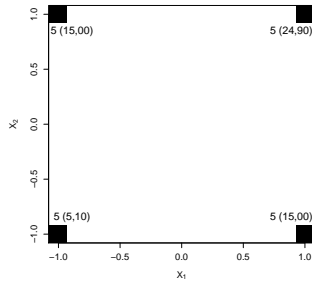
(a) Delineamento 1



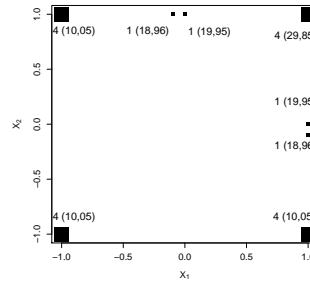
(b) Delineamento 2



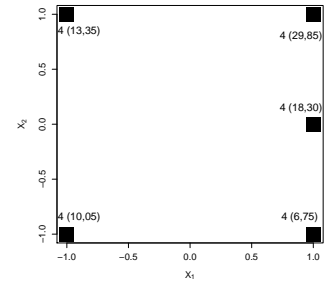
(c) Delineamento 3



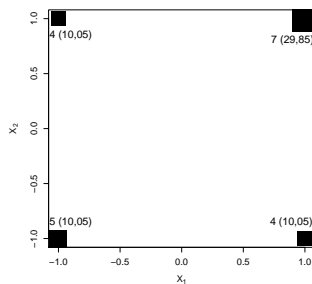
(d) Delineamento 4



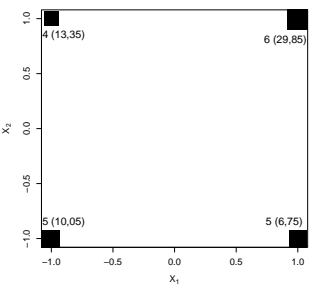
(e) Delineamento 5



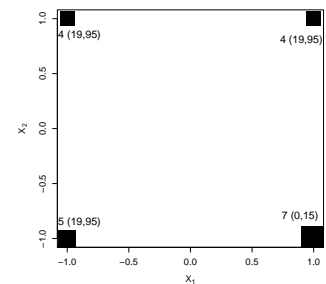
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 3: Delineamentos pseudo-Bayesianos  $D$ -ótimos para o Exemplo 1, com o número de repetições e  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para cada tratamento.

A fim de se obter delineamentos mais robustos para os valores de  $\beta$ , assumindo os mesmos tipos de modelos para  $Y^{(\lambda)}$ , delineamentos pseudo-Bayesianos  $D$ -ótimos foram construídos. A informação *a priori* usada foi pontual para  $\lambda$  e  $\sigma^2$ . Distribuição

Normal para os valores de  $\beta$  foram assumidas, cujas médias seguem as da Tabela 1 e desvios padrões todos iguais a 2,0. Similarmente aos delineamentos localmente  $D$ -ótimos, não houve influência do valor do parâmetro  $\lambda$  nos delineamentos pseudo-Bayesianos.

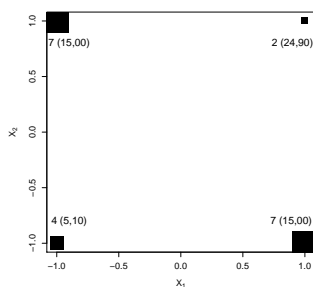
São apresentados na Figura 3, na qual é possível verificar muita similaridade aos delineamentos localmente  $D$ -ótimos da Figura 2. Foi realizada uma avaliação dos delineamentos localmente  $D$ -ótimos em relação aos pseudo-Bayesianos, o que mostrou que a perda de eficiência é muito pequena e pode ser desconsiderada em se usar prioris pontuais. Portanto, para dois fatores e os tipos de modelos considerados, não se observa ganho no uso do critério  $D$  pseudo-Bayesiano.

#### 4.1.1.3 Delineamentos localmente $D_S$ -ótimos

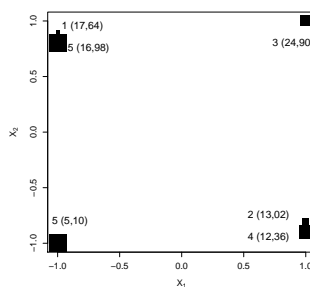
Do ponto de vista prático, os parâmetros de interesse inferencial são os coeficientes de regressão, justificando então o uso do critério  $D_S$ . Assim, delineamentos obtidos por diferentes critérios, delineamentos localmente  $D_S$ -ótimos foram construídos para os modelos da Tabela 1, considerando a informação para o sub conjunto de parâmetros  $\beta's$  (exceto o intercepto). Pode-se perceber, pela Figura 4, que os delineamentos encontrados são um pouco mais desbalanceados que os delineamentos  $D$ -ótimos vistos na Figura 2. As eficiências são apresentadas na Tabela 3.

Percebe-se que os delineamentos que previram estimação da interação podem ser considerados mais robustos, já que possuem alta eficiência para todos os modelos em relação ao delineamentos sem interação. E, assim como no critério  $D$ , os delineamentos que possuem mais pontos como os 5,6 e 8 podem ser considerados mais robustos.

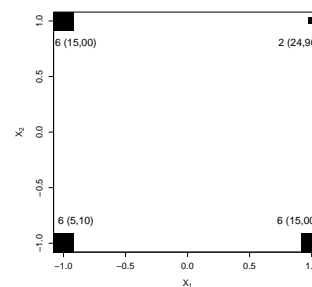




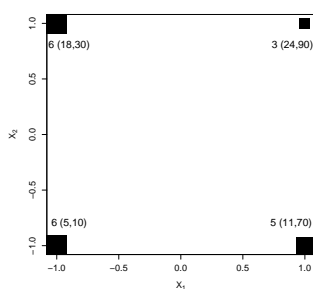
(a) Delineamento 1



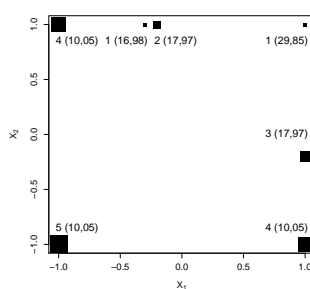
(b) Delineamento 2



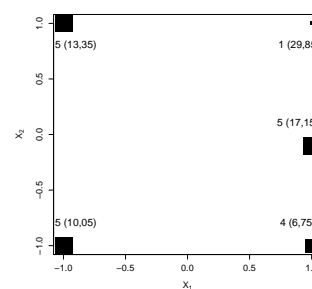
(c) Delineamento 3



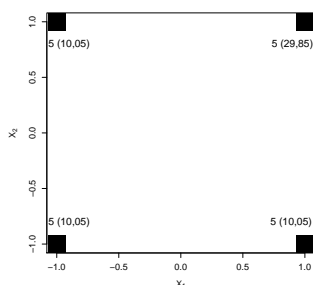
(d) Delineamento 4



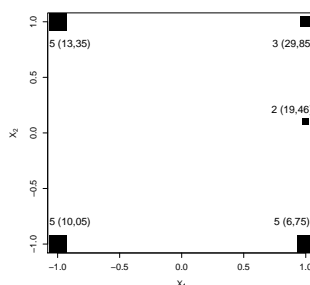
(e) Delineamento 5



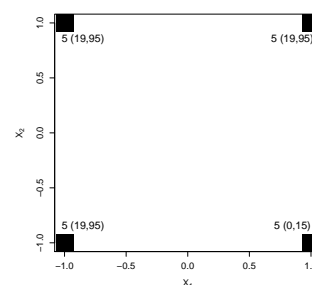
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 4: Delineamentos localmente  $D_S$ -ótimos para o Exemplo 1. Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os da Tabela 2. Os números se referem ao número de repetições e  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para cada tratamento.

Tabela 3: Eficiências dos delineamentos localmente  $D_S$ -ótimos apresentados na Figura 4 sob diversos modelos, todos com  $\lambda = 0$

Modelo	Delineamento								
	Modelos sem interação				Modelos com interação				
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	100,00	93,13	98,57	97,21	81,40	81,63	93,09	92,31	93,09
2	96,18	100,00	96,44	97,09	80,52	84,71	94,64	95,10	94,64
3	98,37	93,98	100,00	99,42	90,71	90,36	96,92	95,86	96,92
4	96,62	96,94	99,13	100,00	90,70	93,00	98,58	97,77	98,58
5	22,43	35,71	22,98	24,30	100,00	95,08	25,20	86,40	25,20
6	20,52	35,91	20,91	21,84	91,45	100,00	22,54	88,86	22,54
7	88,99	88,63	91,18	96,41	91,88	91,31	100,00	99,03	100,00
8	89,15	86,66	90,88	94,97	91,41	95,55	98,02	100,00	98,02
9	88,99	86,57	91,18	96,41	77,88	78,99	100,00	95,43	100,00
Mínimo	20,52	35,71	20,91	21,84	77,88	78,99	22,54	86,40	22,54
Média	77,92	79,73	79,03	80,85	88,44	90,07	81,00	94,53	81,00
Máximo*	98,37	96,94	99,13	99,42	91,88	95,55	98,58	99,03	98,58

#### 4.1.1.4 Delineamentos localmente $A_S$ -ótimos

Para estender um pouco mais o estudo, foram construídos nove delineamentos localmente  $A_S$ -ótimos, considerando a variância do estimador do mesmo subconjunto de parâmetros usado para os  $D_S$ . Eles são apresentados na Figura 5, que mostra desenhos mais discrepantes do fatorial  $2^2$  com maiores desbalanceamentos. A tendência dos pontos com resposta média mais discrepantes serem mais representados, observada no caso do critério  $D$ , também não é mais tão clara. No caso de  $\sigma = 0, 1$ , os delineamentos são bastante surpreendentes, principalmente o 5, que apresenta um único tratamento com quase metade das repetições. Comportamento este considerado não desejável.

A Tabela 4 apresenta as  $A_S$ -eficiências comparando os 9 delineamentos da Figura 5. Nota-se que, em geral, a perda de eficiência quando o modelo considerado não é aquele que gerou o delineamento é bem maior do aquelas obtidas para o critério  $D$  ou  $D_S$ . A perda de eficiência com o uso de um delineamento obtido sob modelos sem interação (delineamentos de 1 a 4) nos modelos com interação pode chegar a

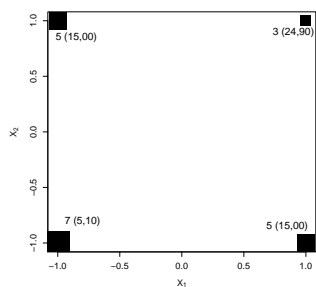
quase 90%. No geral, os delineamentos obtidos com modelos com interação apresentam mais pontos, e, portanto, têm melhores desempenhos. Nota-se, no entanto, que todos os delineamentos que possuem aproximadamente 4 pontos exibem uma baixa eficiência em dois modelos. Mesmo caso observado na Tabela 3. Nesse caso, o delineamento mais robusto é o 8, que foi obtido com  $\sigma = 3$ , contradizendo o resultado atingido quando do uso do critério  $D$ .

Tabela 4: Eficiências dos delineamentos localmente  $A_S$ -ótimos apresentados na Figura 5 sob diversos modelos, todos com  $\lambda = 0$

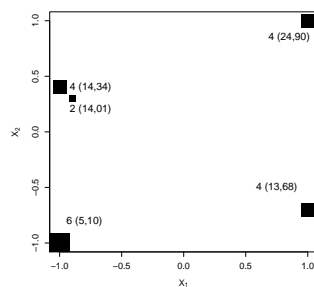
Modelo	Delineamento								
	Modelos sem interação				Modelos com interação				
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	100,00	83,56	88,38	87,07	56,83	50,44	69,24	62,02	87,16
2	75,41	100,00	70,98	70,30	50,05	45,79	61,34	55,07	70,78
3	95,00	82,43	100,00	87,65	50,47	50,56	74,34	68,95	78,72
4	92,26	51,63	72,63	100,00	55,74	64,96	70,24	75,05	94,82
5	18,49	60,59	27,18	27,18	100,00	89,41	35,95	60,19	23,20
6	12,99	29,04	17,73	19,93	76,20	100,00	26,49	68,30	17,36
7	55,91	59,08	78,44	78,82	78,28	82,75	100,00	96,72	68,57
8	48,61	37,60	59,37	73,16	74,20	95,97	78,60	100,00	66,33
9	86,15	45,88	65,75	96,90	59,08	70,77	66,63	80,52	100,00
Mínimo	12,99	29,04	17,73	19,93	50,05	45,79	26,49	55,07	17,36
Média	64,98	61,09	64,50	71,22	66,76	72,29	64,76	74,09	67,44
Máximo*	95,00	83,56	88,38	96,90	78,28	95,97	78,60	96,72	94,82

Em alguns casos, observa-se uma certa semelhança dos delineamentos da Figura 5 em relação aos  $D_S$  da Figura 4, embora estes tendem a ser mais balanceados. Essa semelhança entre os delineamentos  $A_S$  e  $D_S$  deve-se ao fato do uso das informações na matriz de informação de Fisher. Em ambos os critérios, o foco foi na estimação dos  $\beta$ 's. Na prática também é de interesse avaliar o desempenho de um dado delineamento segundo outras propriedades não consideradas para sua construção. Nesse sentido, na Tabela 5, os delineamentos localmente  $D_S$ -ótimos são avaliados sob o critério  $A_S$  e, na Tabela 6, os delineamentos localmente  $A_S$ -ótimos são avaliados sob o critério  $D_S$ . De maneira geral, os delineamentos  $D_S$  perdem menos eficiência em relação ao critério  $A_S$  do que os delineamentos  $A_S$  sob o critério  $D_S$ , embora quando

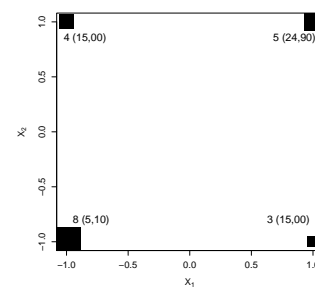
os modelos não contém o termo da interação, os desempenhos são similares. Em particular, os delineamentos  $A_S$ -ótimos 5 e 6, já destacados como um tanto anômalos, contribuíram para as baixas eficiências na Tabela 6.



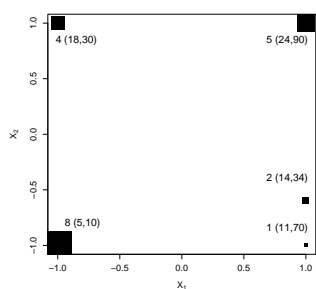
(a) Delineamento 1



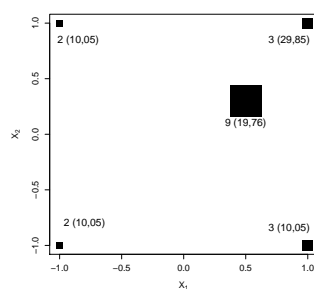
(b) Delineamento 2



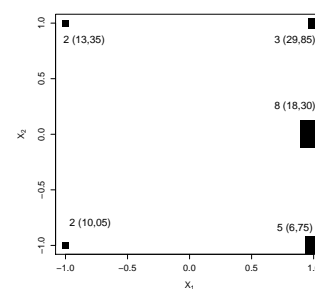
(c) Delineamento 3



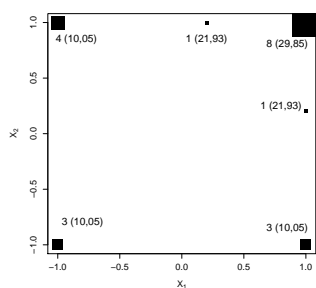
(d) Delineamento 4



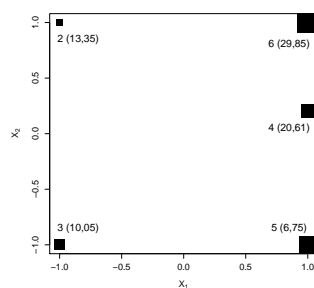
(e) Delineamento 5



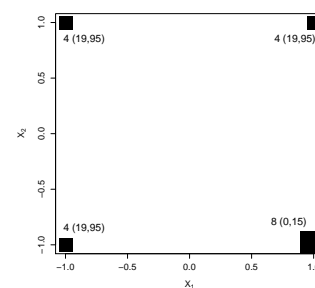
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 5: Delineamentos localmente  $A_S$ -ótimos para o Exemplo 1. Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os da Tabela 2. Os números se referem ao número de repetições e  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para cada tratamento.

Tabela 5: Eficiências dos delineamentos localmente  $D_S$ -ótimos do Exemplo 1 sob o critério  $A_S$ , todos com  $\lambda = 0$

Modelo	Delineamento								
	Modelos sem interação				Modelos com interação				
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	94,66	95,06	98,35	99,10	24,13	21,69	95,74	94,31	95,73
2	72,91	86,69	78,10	83,94	24,36	20,19	73,82	70,98	69,94
3	80,89	83,17	90,62	93,16	23,59	20,93	93,61	91,07	93,61
4	76,67	82,44	87,28	90,94	52,02	53,35	88,09	85,51	84,86
5	62,00	66,32	63,03	65,09	76,16	70,04	69,07	68,61	64,58
6	65,25	70,67	68,78	71,41	79,96	81,42	75,71	78,43	70,83
7	75,18	79,15	81,69	84,75	70,65	64,94	88,77	86,62	87,20
8	70,04	74,14	77,11	79,67	76,81	78,04	84,17	85,25	82,49
9	93,50	92,98	94,90	94,94	23,98	21,72	95,14	94,39	95,14
Mínimo	62,00	66,32	63,03	65,09	23,59	20,19	69,07	68,61	64,58
Média	76,79	81,18	82,21	84,78	50,18	48,04	84,90	83,91	82,71
Máximo	94,66	95,06	98,35	99,10	79,96	81,42	95,74	94,39	95,73

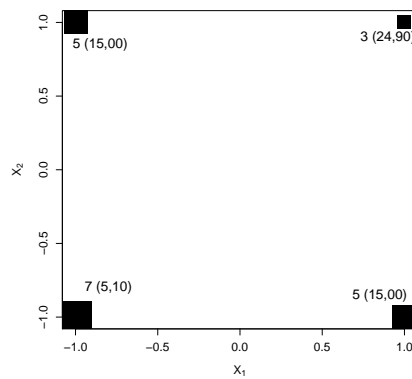
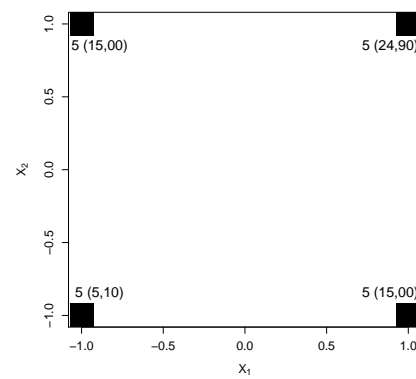
Tabela 6: Eficiências dos delineamentos localmente  $A_S$ -ótimos do Exemplo 1 sob o critério  $D_S$ , todos com  $\lambda = 0$

Modelo	Delineamento								
	Modelos sem interação				Modelos com interação				
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	85,98	72,60	71,76	72,14	0,13	0,10	40,08	41,04	90,09
2	94,73	93,07	83,44	82,87	1,14	1,23	52,78	47,42	76,08
3	95,15	79,26	85,76	83,65	0,13	0,10	40,18	40,22	87,50
4	99,38	85,07	90,97	89,80	0,18	0,13	55,97	52,22	86,50
5	63,49	54,11	74,95	74,43	65,31	51,26	57,69	58,62	72,72
6	65,30	55,64	75,30	71,80	54,03	64,72	56,65	62,36	74,36
7	95,35	82,90	91,34	90,13	0,27	0,19	79,71	72,67	89,01
8	90,36	80,36	86,34	84,70	35,43	41,36	73,83	74,57	90,37
9	95,35	82,90	91,34	90,13	0,27	0,19	79,71	72,67	89,01
Mínimo	63,49	54,11	71,76	71,80	0,13	0,10	40,08	40,22	72,72
Média	87,23	76,21	83,47	82,18	17,43	17,70	59,62	57,98	83,96
Máximo	99,38	93,07	91,34	90,13	65,31	64,72	79,71	74,57	90,37

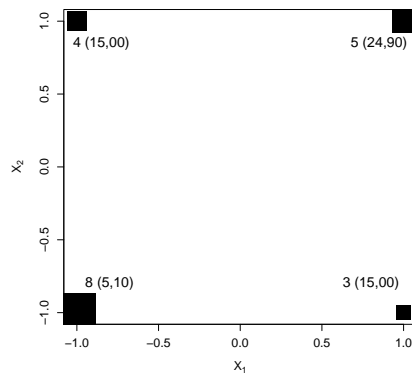
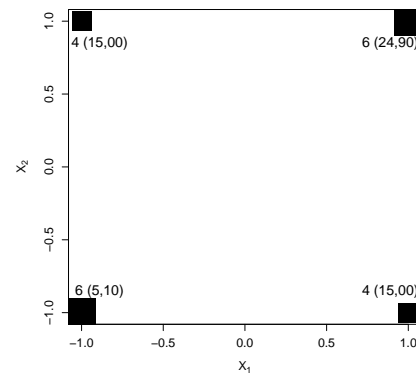
O delineamento  $D$ -ótimo balanceado de um fatorial  $2^2$  que se tinha para o modelo sem interação e com variabilidade baixa do delineamento 1 ( $E(Y^{(\lambda)}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$ ), é perdido para o critério  $A_S$ , pois, embora o deli-

neamento continue sendo um fatorial  $2^2$ , torna-se desbalanceado com os maiores números de repetições alterados nos pontos  $(1; 1$  e  $-1; -1)$ , que são os tratamentos com valores esperados mais distantes do valor esperado médio  $(24,90$  e  $5,10$ , respectivamente).

Com uma variabilidade mais alta (modelo 3), a distorção é maior ainda, pois o delineamento agora é desbalanceado em mais pontos, como se pode ver melhor pela Figura 6, que apresenta os delineamentos  $D$  e  $A_S$  para os modelos 1 e 3 da Tabela 1. Essa mesma característica ocorre também se  $\beta_1 < \beta_2$  para o modelo sem interação (modelo 2 e 4).

(a) Delineamento  $A_S$  1

(b) Delineamento D 1

(c) Delineamento  $A_S$  3

(d) Delineamento D 3

Figura 6: Delineamentos  $D$  e  $A_S$ -ótimos para os modelos 1 e 3 da Tabela 1, com o número de repetições e valor esperado em parênteses.

### 4.1.2 Exemplo 2

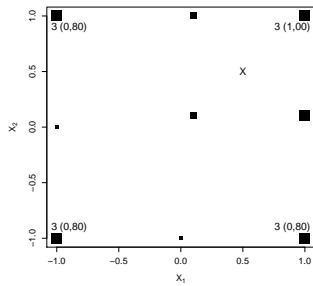
Esse exemplo é uma extensão do Exemplo 1 para modelos de segunda ordem, também considerado por Atkinson & Cook (1997) no caso contínuo. Os valores de  $\beta$  utilizados refletem situações nas quais as combinações dos níveis dos fatores que maximizam a resposta estão localizadas no interior da região experimental. Foram considerados valores de parâmetros que resultam desde leve curvatura da superfície de resposta até curvaturas bem acentuadas. A Tabela 7 apresenta os modelos usados para a construção dos delineamentos localmente  $D_S$  e  $A_S$ -ótimos.

Tabela 7: Valores dos parâmetros dos modelos (com os pontos de ótimos) usados no Exemplo 2, todos com  $\sigma = 0,01$

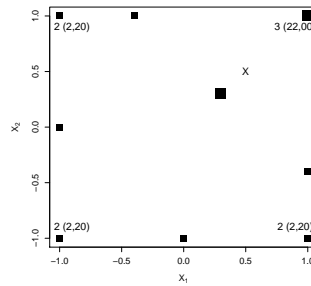
Modelo	$\beta_0$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_{11}$	$\beta_{22}$	$\beta_{12}$	$x(opt)$
a	1,00	0,05	0,05	-0,075	-0,075	0,05	(0,5;0,5)
b	22,00	4,95	4,95	-7,425	-7,425	4,95	(0,5;0,5)
c	60,00	4,95	4,95	-49,50	-2,720	4,95	(0,1;1,0)
d	23,00	1,10	8,80	-3,025	-6,873	4,95	(1,0;1,0)
e	15,00	0,50	0,50	-6,000	-6,000	-0,75	(0,0;0,0)

#### 4.1.2.1 Delineamentos localmente $D$ -ótimos

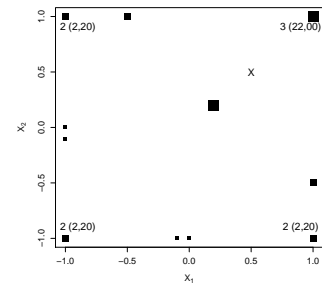
Os delineamentos  $D$ -ótimos estão apresentados na Figura 7 e suas eficiências na Tabela 8. No geral, nota-se uma leve influência do valor de  $\lambda$  sob o delineamento, porém, em termos práticos, desprezível. Para o modelo "a", o delineamento  $D$ -ótimo não se altera com o valor de  $\lambda$  e é uma distorção de um fatorial  $3^2$ , mas desbalanceado  $7(a)$ . Este delineamento é similar ao delineamento contínuo, porém com peso menor no ponto central.



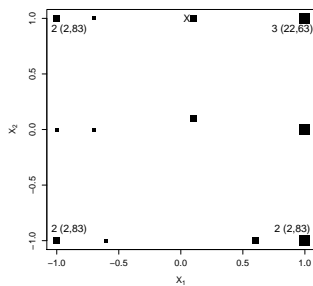
(a) Delineamento 1



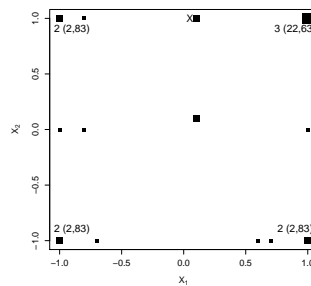
(b) Delineamento 2



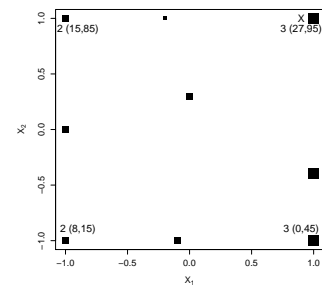
(c) Delineamento 3



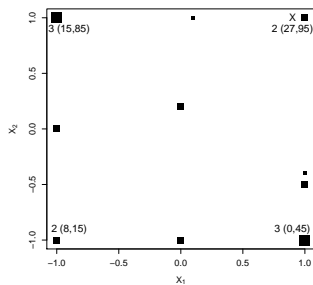
(d) Delineamento 4



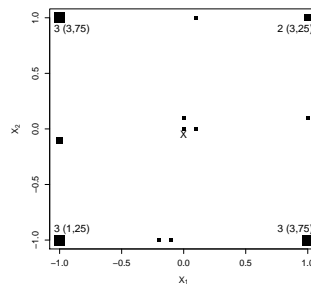
(e) Delineamento 5



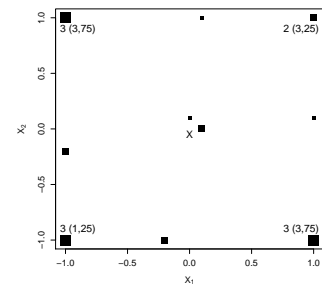
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 7: Delineamentos localmente  $D$ -ótimos para os modelos de segunda ordem (Exemplo 2). O tamanho do símbolo dos pontos é proporcional ao número de repetições (1, 2, 3),  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para os tratamentos das bordas e  $X$  é o ponto de ótimo.

Para um modelo com alta curvatura "b", mas ainda simétrico ( $\beta = (22,00; 4,95; 4,95; -7,425; -7,425; 4,95)$ ), com  $\lambda = 0$ , o resultado é o delineamento 2 (Figura 7(b)), que é similar ao delineamento 1, porém com três pontos na linha de  $x_1 + x_2 =$



0,6 e sem o ponto central. Percebe-se uma pequena mudança quando se altera o valor do  $\lambda$  para 0,5 ou 1 (delineamento 3 da Figura 7(c)), principalmente, próximos dos pontos (0 ; -1) e (-1 ; 0). Contudo, identifica-se que apesar de necessitar mais pontos, a estrutura é bem parecida ao delineamento 2, com uma perda bem pequena de eficiência ( $\sim 0,1\%$ ), conforme pode ser conferido na Tabela 8.

Até então foram discutidos modelos simétricos para os parâmetros  $\beta$ . Perturbando-se inicialmente os parâmetros quadráticos, ou seja, utilizando  $\beta = (60,00; 4,95; 4,95; -49,5; -2,72; 4,95)$  (modelo "c"), cujo máximo esperado está no ponto (0,1;1,0), novamente obtêm-se delineamentos diferentes para  $\lambda = 0$  ou  $\lambda = 0,5$  ou 1, que são os delineamentos 4 (Figura 7(d)) e 5 (Figura 7(e)), respectivamente. Ambos delineamentos incluem mais pontos do que os anteriores.

Para simular uma situação bem drástica, usou-se  $\beta = (23,00; 1,10; 8,00; -3,025; -6,873; 4,95)$  (modelo "d"). Os delineamentos resultantes são apresentados na Figura 7. Novamente, assim como no exemplo anterior, os delineamentos são muito parecidos com perda de eficiência para os diferentes valores de  $\lambda$  abaixo de 1%.

Por fim, voltando ao modelo simétrico, todavia agora de forma que o valor máximo esperado seja no ponto central (0;0), foram utilizados os parâmetros  $\beta = (15,00; 0,50; 0,50; -6,0; -6,0; -0,75)$ . Para  $\lambda = 0$ , o delineamento 8 (Figura 7(h)) e  $\lambda = 0,5$  ou 1 para o delineamento 9 (Figura 7(i)) são os ótimos. Estes delineamentos são bem próximos do fatorial  $3^2$  com três pontos próximos do centro.

No geral, as eficiências da Tabela 8 mostram que a pior situação para se delinear é quando a posição do ótimo da resposta está localizado na fronteira ao longo de um dos lados da região experimental. Todos os delineamentos construídos perdem eficiência acentuadamente em pelo menos uma situação e, talvez, do ponto de vista prático seja aconselhável planejar sob modelos como nos delineamentos 3, 4 e 5, que apresentam eficiências acima de 90% em todas as situações, exceto quando o ótimo está na borda.

Tabela 8: Eficiências dos delineamentos localmente  $D$ -ótimos apresentados na Figura 7 sob diversos modelos de segunda ordem (Exemplo 2)

Modelo	$\lambda$	Delineamento								
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
a	0,0	100,00	94,10	93,88	93,35	93,79	93,63	93,06	97,58	97,33
	0,5	100,00	94,04	93,82	93,32	93,76	93,63	93,07	97,58	97,33
	1,0	100,00	94,01	93,80	93,31	93,74	93,64	93,08	97,57	97,32
b	0,0	89,82	100,00	99,70	90,39	89,50	94,66	93,44	92,61	92,23
	0,5	90,81	99,52	100,00	92,07	91,45	94,93	94,29	94,42	94,04
	1,0	90,90	99,46	100,00	92,25	91,67	94,94	94,34	94,56	94,18
c	0,0	85,17	81,35	84,98	100,00	99,37	82,25	83,89	87,31	87,60
	0,5	84,12	83,08	85,61	99,25	100,00	82,86	83,70	86,55	86,76
	1,0	84,10	83,26	85,74	99,19	100,00	82,97	83,77	86,56	86,77
d	0,0	88,98	96,53	96,00	84,40	83,97	100,00	99,35	86,65	85,76
	0,5	89,01	96,19	96,58	85,15	84,65	99,80	100,00	86,93	86,01
	1,0	89,05	96,11	96,57	85,40	84,91	99,71	100,00	86,97	86,05
e	0,0	96,60	93,25	95,90	92,94	92,98	94,37	95,01	100,00	99,95
	0,5	95,29	93,26	95,70	92,65	92,68	94,16	94,42	99,77	100,00
	1,0	95,07	93,22	95,64	92,61	92,65	94,10	94,30	99,73	100,00
	Mínimo	84,10	81,35	84,98	84,40	83,97	82,25	83,70	86,55	85,76
	Média	91,93	93,16	94,26	92,42	92,34	93,04	93,05	92,99	92,76
	Máximo*	96,60	99,52	99,70	99,25	99,37	99,80	99,35	99,77	99,95

\*Máximo excluindo a situação na qual o delineamento em questão é o ótimo.

Na prática, é possível que o pesquisador assuma um modelo mais complexo na fase de delineamento, porém na análise de dados tem a oportunidade de simplificar este modelo. Assim, é de interesse verificar a perda de eficiência dos delineamentos  $D$ -ótimos obtidos sob os modelos de 2ª ordem apresentados na Figura 7, em relação aos delineamentos obtidos sob modelos mais simples. Para este fim, comparou-se os delineamentos da Figura 7 àquelas da Figura 2 que foram obtidos sob modelos sem efeitos quadráticos. As eficiências são apresentados na Tabela 9. Em geral, a perda varia de  $\sim 9$  a 26% de eficiência ao utilizar os delineamentos planejados sob modelos com mais parâmetros, sendo o delineamento 8 o que apresenta menor perda.

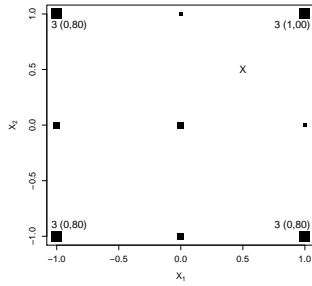
Com base nesses resultados, como a perda não é exagerada na presença de incerteza sob a ordem do modelo, é preferível arriscar perder alguma informação utilizando o delineamento obtido sob modelos mais complexos, já que uma vez delineado para modelos mais simples, pode ser impossível ajustar um modelo mais complexo, devido a singularidade da matriz de informação. Note que os tratamentos são próximos do fatorial  $3^2$  desbalanceados, com maior número de repetições nos vértices e centro.

Tabela 9: Eficiências do delineamentos localmente  $D$ -ótimos apresentados na Figura 7 em relação aos delineamentos obtidos sob os modelos sem os efeitos quadráticos

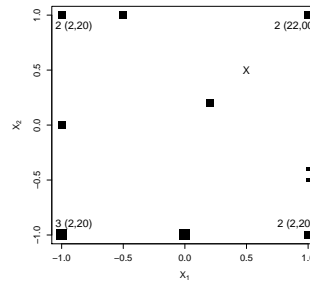
Modelo	Delineamentos com efeitos quadráticos								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	82,87	85,14	82,78	83,68	91,55	86,83	82,43	83,11	81,37
2	77,68	80,43	77,36	78,49	85,14	80,16	75,69	76,21	74,60
3	78,45	81,12	77,61	78,73	83,74	78,85	75,56	76,09	75,40
4	79,58	81,72	79,27	80,58	85,55	79,53	77,91	78,44	76,42
5	80,59	82,78	80,21	81,42	86,65	80,61	79,06	79,55	77,61
6	79,09	82,51	78,67	79,85	85,42	81,62	77,02	78,18	78,57
7	76,92	80,22	75,93	77,33	83,16	79,20	74,02	75,18	78,23
8	78,70	81,25	78,32	79,41	83,67	79,17	75,44	76,16	77,85
9	78,65	81,07	78,57	79,59	83,97	79,53	75,61	76,35	77,92
Mínimo	76,92	80,22	75,93	77,33	83,16	78,85	74,02	75,18	74,60
Média	79,17	81,81	78,75	79,90	85,43	80,61	76,97	77,70	77,55
Máximo	82,87	85,14	82,78	83,68	91,55	86,83	82,43	83,11	81,37

#### 4.1.2.2 Delineamentos localmente $D_S$ -ótimos

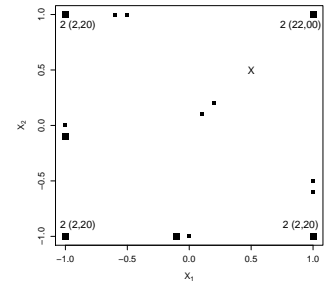
Utilizando-se o critério  $D_S$  para os parâmetros  $\beta^t$ s (exceto o intercepto), os delineamentos encontrados são apresentados na Figura mais desbalanceados do que os  $D$ -ótimos. Na Figura 8. Nota-se que, na maioria dos casos os pontos dos delineamentos se concentram, mais ou menos, na mesma região de concentração de pontos dos delineamentos  $D$ -ótimos 7. As eficiências encontram-se na Tabela 10.



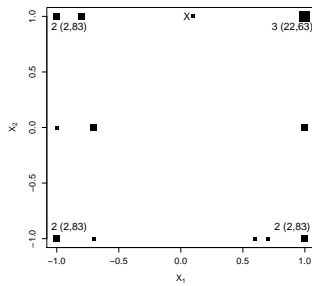
(a) Delineamento 1



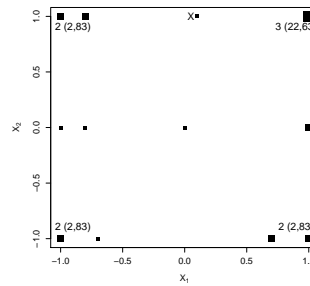
(b) Delineamento 2



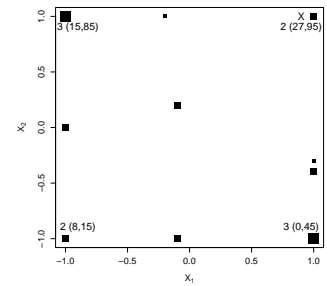
(c) Delineamento 3



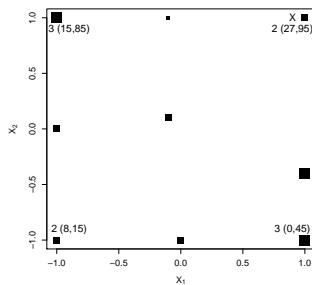
(d) Delineamento 4



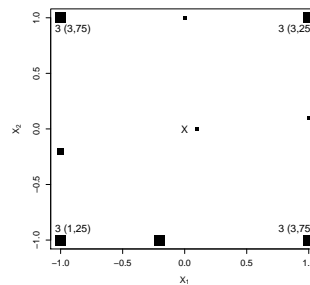
(e) Delineamento 5



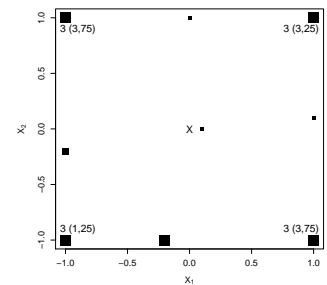
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 8: Delineamentos localmente  $D_S$ -ótimos para o Exemplo 2. Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os mesmos da Tabela 4. O tamanho do símbolo dos pontos é proporcional ao número de repetições (1, 2, 3),  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para os tratamentos nos cantos ou vértices e X é o ponto de ótimo.

Tabela 10: Eficiências dos delineamentos localmente  $D_S$ -ótimos do Exemplo 2, todos com  $\lambda = 0$

Modelo	Delineamentos $D_S$								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	100,00	94,74	93,55	87,97	91,05	95,60	95,71	97,29	95,99
2	90,20	100,00	99,31	68,50	80,02	93,99	93,50	86,29	85,06
3	91,00	99,63	100,00	73,33	82,63	93,02	92,84	87,46	86,27
4	77,32	75,98	76,95	100,00	98,84	70,90	71,21	80,66	82,98
5	75,86	75,07	75,88	98,10	100,00	71,09	70,98	77,97	79,93
6	84,66	94,15	92,54	77,00	78,35	100,00	99,78	77,83	78,69
7	85,15	94,75	94,25	76,99	78,16	99,65	100,00	78,94	79,35
8	97,07	94,08	94,61	74,79	88,62	93,73	93,68	100,00	99,68
9	96,40	93,62	94,92	76,35	88,21	93,15	92,85	99,54	100,00
Mínimo	75,86	75,07	75,88	68,50	78,16	70,90	70,98	77,83	78,69
Média	88,63	91,34	91,33	81,45	87,32	90,13	90,06	87,33	87,55
Máximo	97,07	99,63	99,31	98,1	98,84	99,65	99,78	99,54	99,68

#### 4.1.2.3 Delineamentos localmente $A_S$ -ótimos

Foram construídos nove delineamentos  $A_S$ -ótimo sob os modelos da Tabela 7. Na Figura 9 têm-se as configurações dos delineamentos e na Tabela 11 têm-se as suas eficiências. Percebe-se que os delineamentos  $A_S$ -ótimos vistos na Figura 9 são bem diferentes dos  $D$ -ótimos e, da mesma maneira que no Exemplo 1, apresentam regiões de pontos com alto número de repetições.

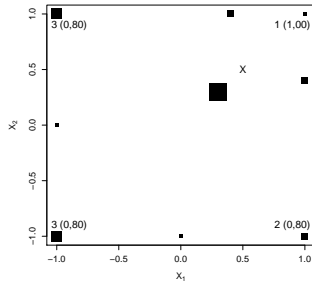
As eficiências apresentadas na Tabela 11 mostram a maior sensibilidade do critério  $A_S$  aos valores dos parâmetros. Em relação a  $\lambda$ , a perda varia de  $\sim 4$  a  $13\%$ , mas maior sensibilidade é verificada em relação aos  $\beta$ 's, com perdas que podem chegar a  $90\%$ . Dentre os casos estudados não foi possível encontrar um modelo que gerasse um delineamento mais robusto, pois o melhor deles apresenta perda de  $\sim 76\%$ , que, similarmente ao encontrado na Seção 4.2.1.1. é o delineamento sob o modelo com ponto de ótimo no perímetro da região experimental.

Tabela 11: Eficiência dos delineamentos localmente  $A_S$ -ótimos apresentados Exemplo 2, sob diversos modelos

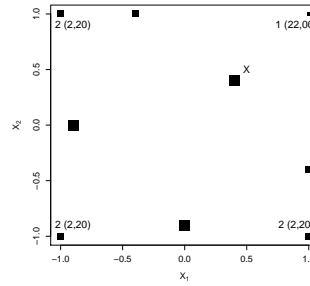
Modelo	$\lambda$	Delineamento								
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
a	0,00	100,00	67,66	65,15	60,75	63,28	58,24	57,24	59,86	67,55
b	0,00	37,69	100,00	94,54	46,71	34,29	77,54	69,10	60,64	58,83
b	0,50	37,08	91,46	100,00	46,72	38,73	63,48	61,87	59,98	63,04
c	0,00	12,08	22,47	20,74	100,00	87,52	19,39	21,14	52,78	55,65
c	0,50	12,21	24,99	21,09	89,42	100,00	16,00	18,39	46,05	52,68
d	0,00	16,59	66,93	77,79	29,37	24,52	100,00	92,48	18,83	13,98
d	0,50	13,66	58,00	78,39	23,71	21,81	91,04	100,00	12,75	9,48
e	0,00	48,02	43,37	40,06	43,11	32,55	49,88	38,76	100,00	96,06
e	0,50	40,10	31,03	28,92	37,26	28,74	35,88	28,23	93,85	100,00
	Mínimo	12,08	22,47	20,74	23,71	21,81	16,00	18,39	12,75	9,48
	Média	35,27	56,21	58,52	53,01	47,94	56,83	54,13	56,08	57,47
	Máximo*	48,02	91,46	94,54	89,42	87,52	91,04	92,48	93,85	96,06

\*Máximo excluindo a situação na qual o delineamento em questão é o ótimo.

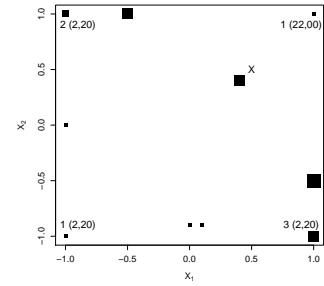
Comparando os delineamentos  $D_S$  e  $A_S$ -ótimos nas Tabelas 12 e 13, é possível verificar que as perdas de eficiências para este exemplo, são maiores daqueles vistos no Exemplo 1. E, assim como foi visto no Exemplo 1, os delineamentos  $D_S$  perdem menos eficiência comparados aos  $A_S$ -ótimos do que vice versa.



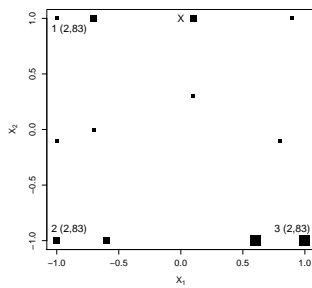
(a) Delineamento 1



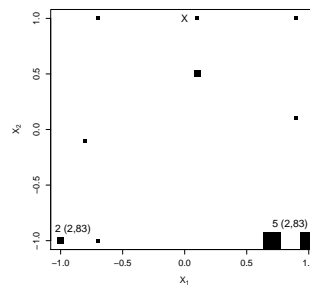
(b) Delineamento 2



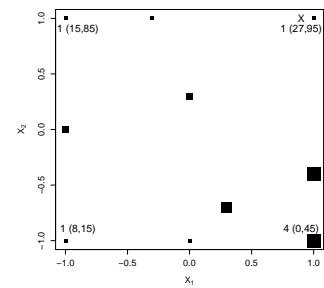
(c) Delineamento 3



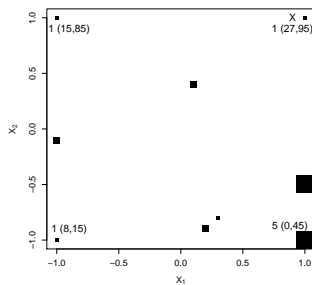
(d) Delineamento 4



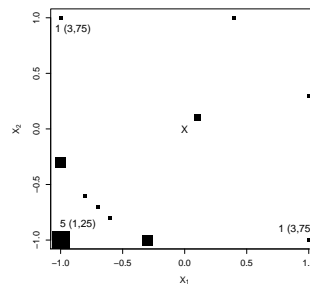
(e) Delineamento 5



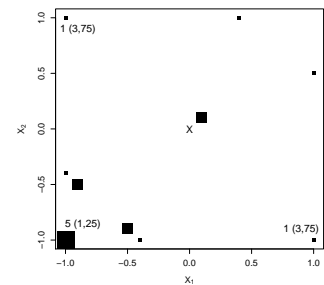
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 9: Delineamentos localmente  $A_S$ -ótimos para os modelos de segunda ordem (Exemplo 2). O tamanho do símbolo dos pontos é proporcional ao número de repetições do tratamento (1, 2, 3, 4, 5),  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para os tratamentos nos vértices e X é o ponto de ótimo.

Tabela 12: Eficiências dos delineamentos localmente  $D_S$ -ótimos do Exemplo 2 sob o critério  $A_S$

Modelo	$\lambda$	Delineamentos $D_S$								
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
a	0,00	87,51	74,06	74,37	62,36	62,51	66,20	67,59	79,00	79,17
b	0,00	84,48	90,88	89,48	67,84	69,51	87,78	87,44	77,45	76,55
b	0,50	77,02	84,58	84,00	61,38	61,81	83,02	82,90	71,30	70,61
c	0,00	78,72	73,80	75,15	85,28	83,30	67,69	67,37	76,04	77,11
c	0,50	61,76	55,59	56,78	67,35	67,50	50,84	50,87	56,89	57,61
d	0,00	76,31	80,42	78,31	58,87	57,52	85,73	84,19	71,71	70,75
d	0,50	70,26	72,60	71,63	56,63	55,70	79,35	79,27	64,36	63,85
e	0,00	63,49	62,07	63,16	59,21	58,14	53,09	52,54	68,58	69,34
e	0,50	61,88	59,58	61,00	58,19	57,88	48,20	47,95	65,22	66,84
Mínimo		61,76	55,59	56,78	56,63	55,70	48,20	47,95	56,89	57,61
Média		73,49	72,62	72,65	64,12	63,76	69,10	68,90	70,06	70,20
Máximo		87,51	90,88	89,48	85,28	83,30	87,78	87,44	79,00	79,17

Tabela 13: Eficiências dos delineamentos localmente  $A_S$ -ótimos do Exemplo 2 sob o critério  $D_S$

Modelo	$\lambda$	Delineamentos $A_S$								
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
a	0,00	82,27	49,66	45,59	17,21	14,74	33,05	24,68	63,25	48,67
b	0,00	67,71	87,98	83,59	22,40	19,84	61,55	52,83	65,35	51,10
b	0,50	62,32	85,88	84,55	25,32	22,18	56,83	51,53	69,06	55,91
c	0,00	67,16	25,17	26,20	74,07	65,68	34,46	26,87	18,40	15,83
c	0,50	71,84	39,63	40,96	70,14	75,09	33,60	25,09	44,60	35,02
d	0,00	70,92	66,34	56,47	13,28	12,81	78,07	67,43	62,66	47,89
d	0,50	70,58	64,01	55,09	13,79	12,87	78,16	68,64	62,98	47,37
e	0,00	76,68	46,72	41,75	23,62	18,69	25,88	19,10	65,08	50,60
e	0,50	75,29	45,36	40,94	28,59	22,33	29,85	21,22	66,20	54,07
Mínimo		62,32	25,17	26,20	13,28	12,81	25,88	19,10	18,40	15,83
Méd		71,64	56,75	52,79	32,05	29,36	47,94	39,71	57,51	45,16
Máximo		82,27	87,98	84,55	74,07	75,09	78,16	68,64	69,06	55,91

### 4.1.3 Exemplo 3

A exploração do comportamento dos delineamentos ótimos para mais fatores, será baseada nos dados de um experimento na área têxtil, para os quais Box & Cox (1964) e Atkinson et al. (2007) recomendaram transformação. O experimento

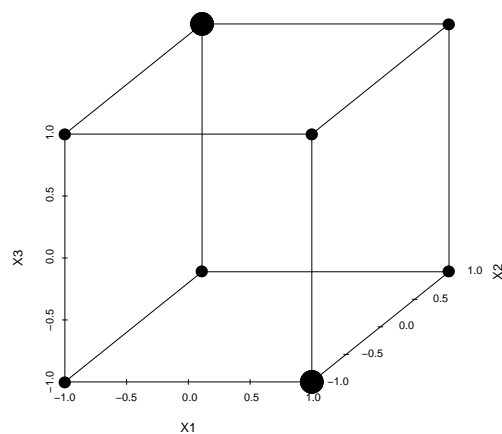


utilizou o fatorial  $3^3$  com  $n = 20$ . Os fatores foram:  $X_1$  o comprimento (cm) da amostra de fio (25; 30; 35),  $X_2$  a amplitude (mm) de ciclo de carregamento (8; 9; 10) e  $X_3$  a carga (g) (40; 45; 50). O objetivo foi estimar o número de ciclos à falha de um fio de lã (penteado) sob ciclos de carregamento repetido.

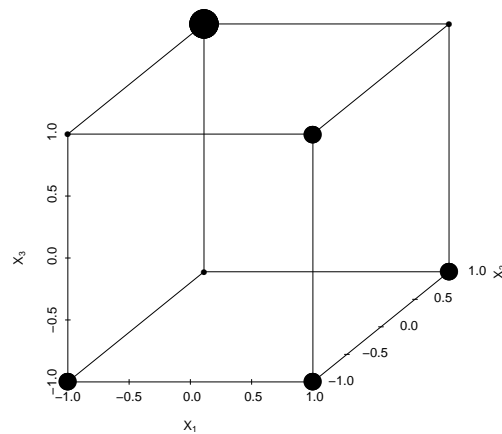
De acordo com Atkinson et al. (2007), um modelo de primeira ordem ( $E(Y^{(\lambda)}) = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3$ ) é adequado, com as seguintes estimativas dos parâmetros:  $\hat{\beta} = (6,335; 0,832; -0,631; -0,392)$ ,  $\lambda = 0$  e  $\hat{\sigma} = 0,1856$ . Encontrou-se delineamentos localmente  $D$ -ótimos assumindo os valores dos parâmetros iguais as estimativas e também para o modelo incluindo os três termos de interação dupla, assim como dois valores para  $\sigma$ .

Os delineamentos são apresentados na Figura 10 e suas eficiências na Tabela 14. Como para o caso de 2 fatores, o valor de  $\lambda$  não afeta o delineamento. Para os modelos sem interação, desbalanceamento maior é obtido para o caso de maior variância. O conjunto de pontos de ambos os delineamentos é o fatorial  $2^3$ .

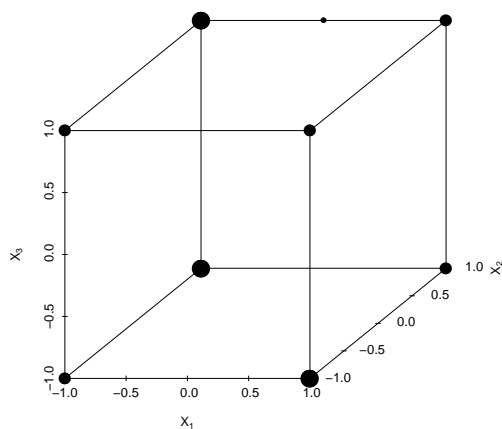
Para o delineamento 1 (Figura 10 (a)), os números maiores de repetições (2/10) estão localizadas justamente nos tratamentos que possuem o maior e menor valor esperado (4,48 para o tratamento  $(-1; 1; 1)$  e 8,19 para o tratamento  $(1; -1; -1)$ ), enquanto que as menores repetições (1/10) estão nos tratamentos com valores esperados intermediários.



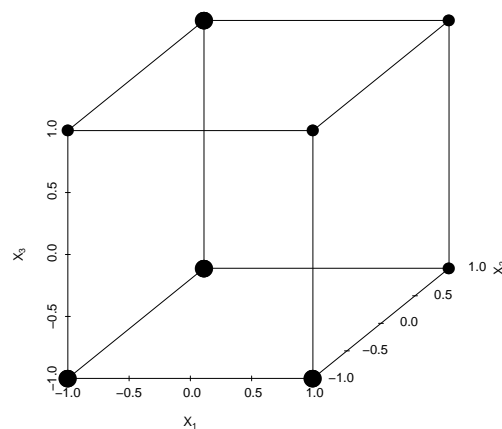
(a) Delineamento 1



(b) Delineamento 2



(c) Delineamento 3



(d) Delineamento 4

Figura 10: Delineamentos localmente  $D$ -ótimos para o Exemplo 3. Tamanho dos símbolos proporcional ao número de repetições do tratamento (1, 2, 3).

Caso a variabilidade aumente para um valor 5 vezes maior ( $\sigma = 0,928$ ), os números de repetições são bastante alterados, embora continue o fatorial  $2^3$ , como se pode ver no delineamento 2 (Figura 10 (b)). Isso ocorre para todos os valores de  $\lambda$ , exceto  $\lambda = 0$ , embora, em termos de eficiência, pode-se verificar que a perda é, em geral, muito pequena.

Os delineamentos 3 e 4 foram obtidos sob o modelo com as interações de segunda ordem, totalizando 7 parâmetros de regressão, ou seja,  $E(Y^{(\lambda)}) = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3 + \beta_4x_1x_2 + \beta_5x_1x_3 + \beta_6x_2x_3$ . Similarmente ao caso de 2 fatores, quando a variabilidade é pequena, um ponto extra é incluído no  $2^3$ . Este ponto interno  $(0; 1; 1)$  possui um peso inferior aos demais. Para variabilidade maior, volta o delineamento  $2^3$  desbalanceado.

Tabela 14: Eficiências dos delineamentos localmente  $D$ -ótimos para o exemplo 3 apresentados na Figura 10 sob diversos modelos

$\sigma$	$\lambda$	Delineamento			
		1	2	3	4
Sem interação					
0,1856	0,0	100,00	98,59	97,52	98,91
	0,5	100,00	98,51	97,54	98,86
	1,0	100,00	98,50	97,55	98,86
0,9280	0,0	100,00	99,74	97,58	98,23
	0,5	99,80	100,00	97,32	98,00
	1,0	99,73	100,00	97,24	97,93
com interação					
0,1856	0,0	97,77	90,95	100,00	98,66
	0,5	97,62	91,03	100,00	98,46
	1,0	97,61	91,05	100,00	98,43
0,9280	0,0	99,14	92,28	97,99	100,00
	0,5	99,23	92,64	97,98	100,00
	1,0	99,25	92,69	97,98	100,00
	Mínimo	97,61	90,95	97,24	97,93
	Média	99,10	95,22	98,29	98,86
	Máximo*	99,80	99,74	97,99	98,81

\*Máximo excluindo a situação na qual o delineamento em questão é o ótimo.

Assim como nos Exemplos 1 e 2, os valores das eficiências indicam que é me-

lhor delinear sob o modelo com interação, pois ao se avaliar os delineamentos 3 ou 4, sob modelos sem interação, perde-se menos eficiência do que avaliando-se os delineamentos 1 e 2 sob modelos com interação.

Como o aumento do número de fatores (aumento da complexidade do modelo) não parece trazer novidades aos resultados, aumentando apenas o esforço computacional, a investigação nesse exemplo fica restrita ao critério  $D$ .

#### 4.1.4 Exemplo 4

Os resultados nos exemplos anteriores mostram que os delineamentos obtidos sempre apresentaram pelo menos um tratamento com repetição. Isso serviu de motivação para a comparação desses delineamentos com o delineamento ( $DP$ )-ótimo que modifica o critério  $D$  de forma que o delineamento apresente graus de liberdade para estimar o erro puro. Para este fim, será utilizado o mesmo exemplo de Gilmour & Trinca (2012), que usaram  $n = 16$ ,  $k = 3$  e o modelo de 2º ordem. Os autores apresentaram o delineamento  $D_S$ -ótimo e verificaram que este inclui poucos pontos próximos ao centro da região e tratamentos não replicados. Assim, não é possível a estimação do erro puro. Este delineamento é apresentado na Figura 11 (*c*). Por sua vez, o delineamento ( $DP_S$ )-ótimo (Figura 11 (*d*)) apresenta 6 graus de liberdade para o erro puro.

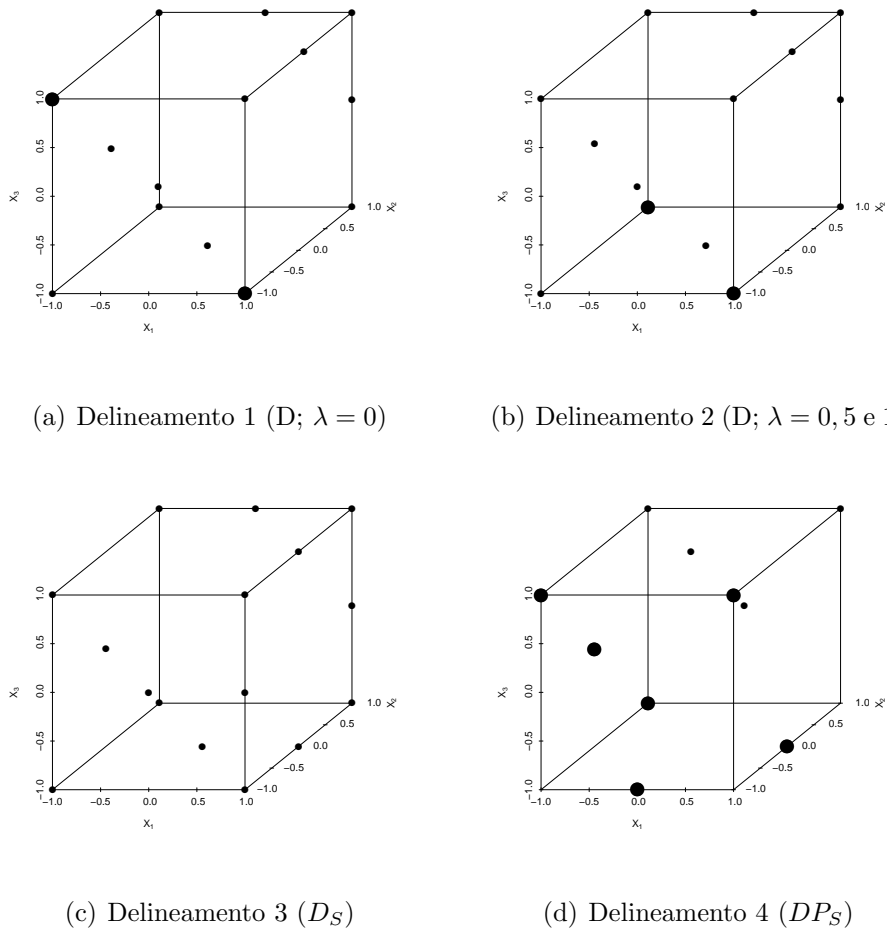


Figura 11: Delineamentos localmente  $D$ ,  $D_S$  e  $DP$ -ótimos para o Exemplo 4. Símbolos pequenos apresentam 1 repetição e símbolos grandes 2 repetições.

Note, porém que, esses delineamentos não foram construídos visando a transformação de  $y$ . Já considerando o modelo de transformação, foram construídos 3 delineamentos  $D$ -ótimos para  $\lambda = 0, 0,5$  e  $1$ ,  $\beta$  foram  $(1; 0,05; 0,05; 0,05; -0,075; -0,075; -0,075; 0,05; 0,05; 0,05)$  e  $\sigma = 0,01$ .

No entanto, os delineamentos, em termos de eficiência, não sofreram influência de  $\lambda$  e um deles é apresentado na Figura 11 (a). Dois dos tratamentos desse delineamento é repetido duas vezes e os demais apenas uma. A Tabela 15 mostra que em termos de eficiência, os três delineamentos são equivalentes. O delineamento  $D_S$ -ótimo usual perde apenas  $\sim 1,5\%$  de eficiência frente aos construídos visando a

transformação de Box-Cox. Já o  $(DP)_S$ -ótimo mostra grande perda, mais de 15%, indicando que para a transformação, as repetições, se existirem, devem estar em pontos específicos. Note, porém, que o delineamento 1 apresenta apenas 1 grau de liberdade para erro puro.

Tabela 15: Eficiência dos delineamentos localmente  $D$ -ótimos apresentados na Figura 11 do Exemplo 4 sob diversos modelos

$\lambda$	Com transformação	$D_S$	$(DP)_S$
$\lambda = 0$	100,00	98,47	84,16
$\lambda = 0,5$	100,00	98,43	84,17
$\lambda = 1$	100,00	98,41	84,18

## 4.2 Critérios Compostos

O uso do critério  $A_S$  nas seções 4.1.1.4 e 4.1.2.3 resultou em delineamentos com altíssimos desbalanceamentos, não sendo de uso muito encorajador na prática. O uso de um critério composto pode corrigir esse problema, que é investigado nesta seção. Para isso, os modelos dos exemplos 1 e 2 serão considerados.

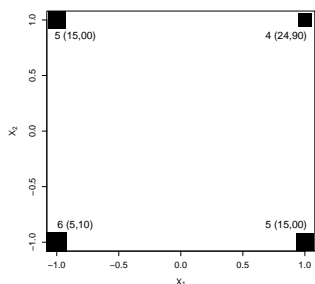
### 4.2.1 Exemplo 1

Uma combinação de dois critérios pode ser feita com critérios compostos, com o objetivo de incorporar ao delineamento, a possibilidade de ajuste de um modelo tanto homocedástico quanto o que considera transformação. A primeira opção investigada usa uma composição de traços de inversas de duas matrizes de informação, a primeira referente ao modelo sem transformação e a segunda com transformação. Assim o critério utilizado foi

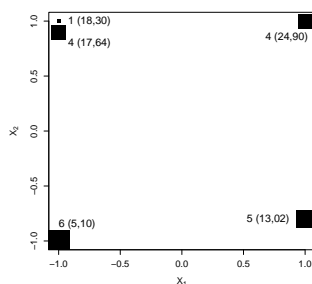
$$\Psi_{AA} = [\text{tr} [\mathbf{W}_1 \mathbf{M}(\xi)^{-1}]]^\alpha \times [\text{tr} [\mathbf{W}_2 \mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})^{-1}]]^{1-\alpha} \quad (39)$$

no qual  $\mathbf{W}_1$  e  $\mathbf{W}_2$  são matrizes de pesos aos parâmetros dos modelos sem e com transformação, respectivamente. Esse critério, denotado por  $\Psi_{AA}$ , indica o uso do

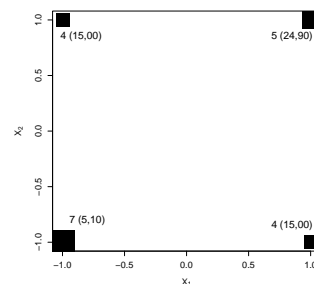
traço em ambos os componentes do critério. Quanto maior o valor de  $\alpha$ , maior o peso para a parte homocedástica do critério.



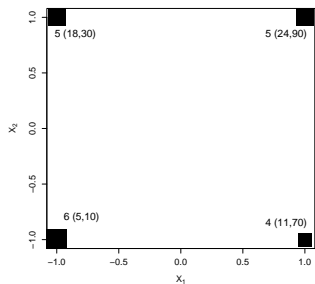
(a) Delineamento 1



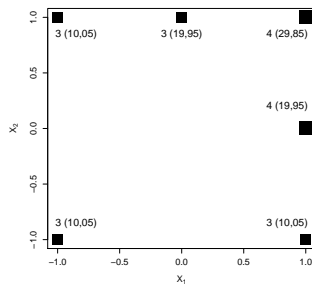
(b) Delineamento 2



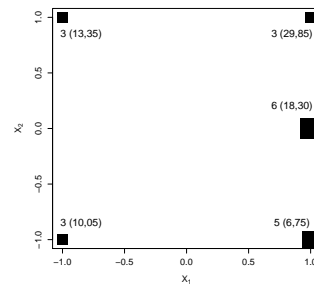
(c) Delineamento 3



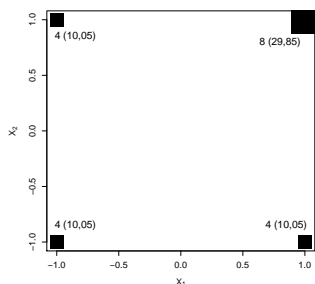
(d) Delineamento 4



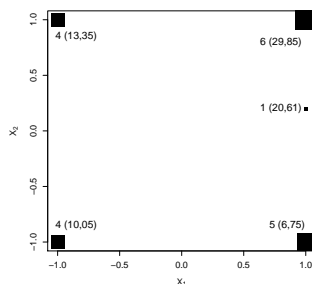
(e) Delineamento 5



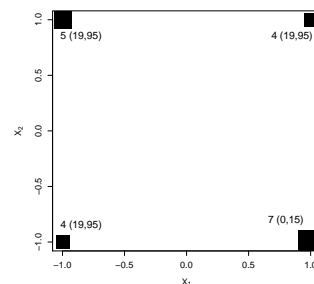
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 12: Delineamentos localmente ótimos sob o critério  $\Psi_{AA}$  ( $\alpha = 0,5$ ). Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os mesmos da Tabela 1. Os números se referem ao número de repetições e  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para cada tratamento.

Com  $\alpha = 0,5$ , obteve-se os 9 delineamentos sob os modelos da Tabela 1, que são

apresentados na Figura 12. Os delineamentos resultantes apresentam padrões mais similares aos delineamentos  $D$  e  $D_S$ -ótimos (Figuras 2 e 4), porém com repetições distintas. O problema do desbalanceamento acentuado dos delineamentos  $A_S$ -ótimos (Figura 5) não aparece mais. Para os modelos com interação, os delineamentos apresentam mais pontos (como o que ocorre com o critério  $D$ ). Além disso, é visível que quando se aumenta o valor da variabilidade, o delineamento tende se tornar o fatorial  $2^2$ , porém continua sendo desbalanceado. Para os modelos sem interação, o delineamento tende a se tornar um fatorial  $2^2$  mais balanceado.

Critérios baseados no traço apresentam custo computacional alto devido a obtenção das inversas das matrizes. Assim, outro tipo composto com o uso do traço em apenas um dos componentes pode ser interessante. Propõe-se, então, o critério composto  $\Psi_{DA}$  que usa informação do critério  $D$  na parte do modelo com a transformação de Box-Cox, e do critério  $A$  na parte do modelo homocedástico, dado por

$$\Psi_{DA} = |\mathbf{M}_\lambda(\xi, \boldsymbol{\theta})|^\alpha \times [\text{tr} [\mathbf{W}_2 \mathbf{M}(\xi)^{-1}]]^{1-\alpha} \quad (40)$$

no qual  $\mathbf{W}_2$  é a matriz de pesos aos parâmetros de regressão.

Na Figura 13 são apresentados os delineamentos obtidos para os valores de  $\alpha = 0,00, 0,25, 0,50, 0,75, 1,00$ , fixando-se o modelo 5 da Tabela 1. Para os outros modelos, o comportamento é similar, ou seja, quanto menor o valor do peso  $\alpha$  (maior o peso para o  $A$  clássico), o delineamento tende a se tornar mais balanceado e se aproximar para o fatorial  $2^2$ .



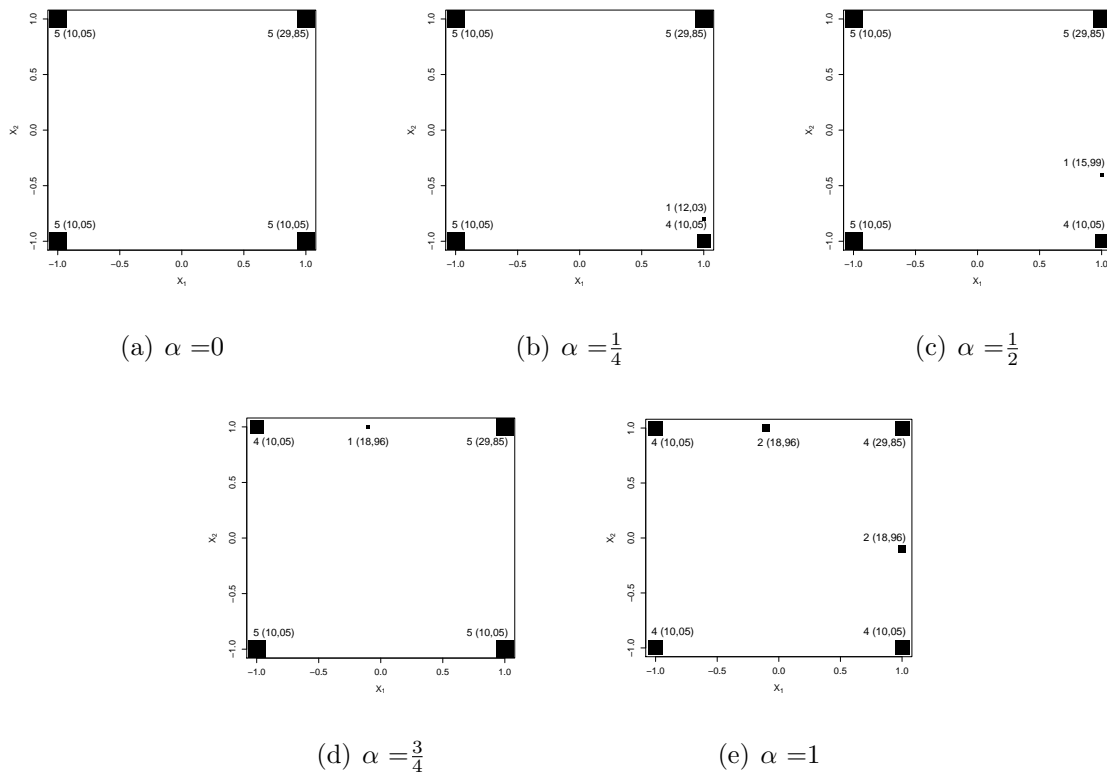
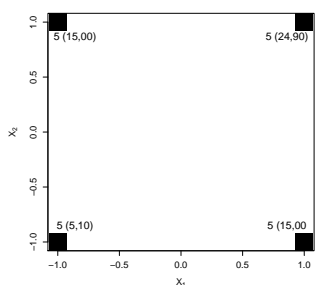
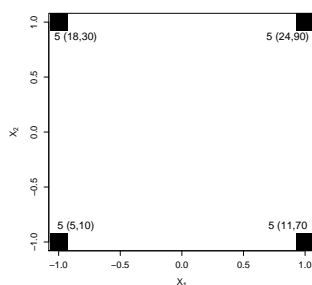


Figura 13: Delineamentos localmente ótimos sob o critério  $\Psi_{DA}$  para o modelo 5 do Exemplo 1. Os números se referem ao número de repetições e  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para cada tratamento.

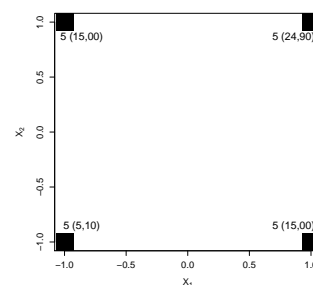
Ao observar na Figura 14, os 9 delineamentos sob os modelos da Tabela 1 usando o critério  $\Psi_{DA}$  e  $\alpha = 0,5$ , pode-se perceber que eles pouco se alteram na mudança dos parâmetros  $\beta$ 's, sendo que a maioria destes são um fatorial completo  $2^2$ . Esse comportamento só não é observado nos delineamentos sob modelos com interação 5 e 6.



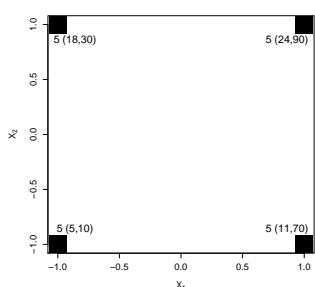
(a) Delineamento 1



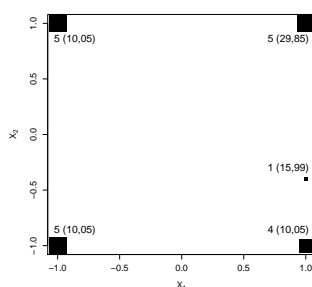
(b) Delineamento 2



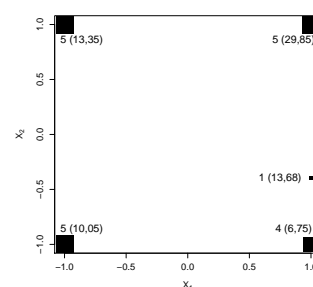
(c) Delineamento 3



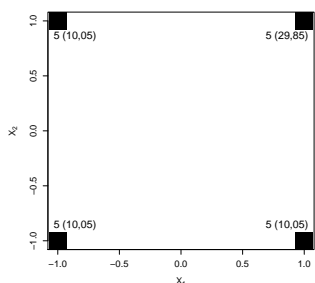
(d) Delineamento 4



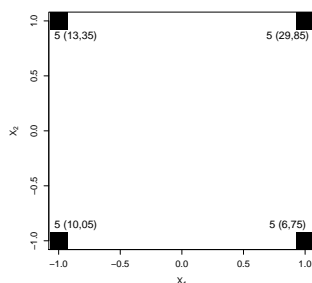
(e) Delineamento 5



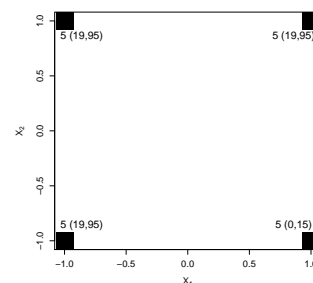
(f) Delineamento 6



(g) Delineamento 7



(h) Delineamento 8



(i) Delineamento 9

Figura 14: Delineamentos localmente ótimos sob o critério  $\Psi_{DA}$  ( $\alpha = 0,5$ ). Os modelos sob os quais cada delineamento foi obtido são os mesmos da Tabela 2. Os números se referem ao número de repetições e  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para cada tratamento.

Por outro lado, observando-se a Tabela 16 e analisando as eficiências dos delineamentos  $\Psi_{DA}$ -ótimos sob o critério  $D$ , fica evidente que estes são mais robustos, pois a perda de eficiência é bem pequena. Assim, o uso deste critério composto pode

ser considerado satisfatório.

Tabela 16: Eficiências dos delineamentos localmente ótimos sob o critério  $\Psi_{DA}$  do Exemplo 1 em relação aos delineamentos  $D$ -ótimos (Figura 2), usando  $\alpha = 0,5$  e  $\lambda = 0$

Modelo	Delineamentos $\Psi_{DA}$								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	100,00	99,25	97,90	97,90	94,07	92,99	97,54	98,89	98,29
2	100,00	99,28	97,90	97,90	94,12	93,10	97,54	98,89	98,28
3	100,00	99,11	98,31	98,31	92,29	91,09	97,80	98,57	97,55
4	100,00	99,13	98,27	98,27	92,42	91,11	97,76	98,62	97,55
5	97,91	96,90	95,97	95,97	95,24	94,44	95,47	95,97	95,13
6	97,43	96,43	95,48	95,48	94,85	94,43	94,98	95,53	94,74
7	100,00	98,71	98,15	98,15	90,88	90,01	97,87	98,15	95,98
8	100,00	98,71	98,04	98,04	91,05	90,66	97,74	98,34	96,37
9	100,00	98,71	96,68	96,68	90,52	90,01	95,97	98,15	97,87
Mínimo	97,43	96,43	95,48	95,48	90,52	90,01	94,98	95,53	94,74
Média	99,48	98,47	97,41	97,41	92,83	91,98	96,96	97,90	96,86
Máximo	100,00	99,28	98,31	98,31	95,24	94,44	97,87	98,89	98,29

#### 4.2.2 Exemplo 2

Nos modelos descritos na Tabela 7, utilizou-se também o critério composto  $\Psi_{DA}$  (parte usando informação do critério  $D$  com a transformação de Box-Cox e parte do critério  $A$  clássico), podendo-se notar que quanto menor o peso para a parte do  $D$  com a transformação de Box-Cox, o delineamento se distancia daquele observado anteriormente (Figura 7). Por exemplo, para o modelo simétrico  $a$  da Tabela 7, que apresenta uma baixa curvatura, foi visto que o delineamento  $D$ -ótimo é uma distorção de um fatorial  $3^2$ . Este é exatamente o mesmo quando se usa o valor 1 para  $\alpha$ , como se pode ver na Figura 15 ( $e$ ). Na medida que este peso diminui, ou seja, diminui o peso referente ao critério  $D$  com uso da transformação de Box-Cox, o delineamento tende a não ter mais o ponto central, e somente nas extremidades. Este mesmo cenário pode ser percebido também para os outros modelos.

Os delineamentos  $A_S$ -ótimos obtidos para o modelo com efeitos quadráticos no Exemplo 2 (Figura 9) apresentaram um alto grau de desbalanceamento. Contudo,

para os delineamentos sob o critério  $\Psi_{DA}$ , foram realizadas as correções da heterogeneidade de variância por meio da transformação de Box-Cox. Como no critério  $\Psi_{DA}$ , é utilizado o traço da matriz sem o uso da transformação, este pode ser o motivo de um maior balanceamento dos delineamentos utilizando o critério composto.

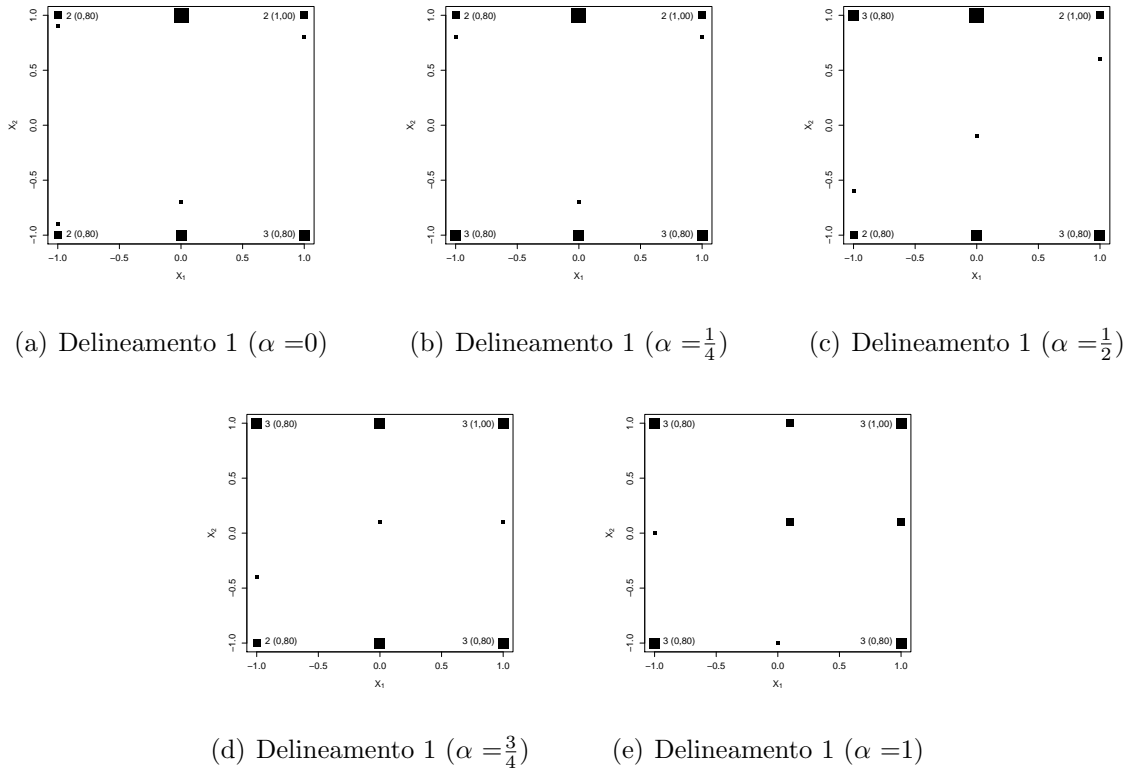


Figura 15: Delineamentos localmente ótimos sob o critério  $\Psi_{DA}$  para o modelo "a" do Exemplo 2. O tamanho do símbolo dos pontos é proporcional ao número de repetições (1, 2, 3) e  $E(Y^{(\lambda)})$  (entre parênteses) para os tratamentos das bordas.

Os 5 delineamentos sob o critério composto  $\Psi_{DA}$  visto na Tabela 17 foram construídos sob cada modelo da Tabela 7, usando  $\lambda = 0$  e  $\alpha = 0,5$ . Por meio das eficiências dos delineamentos localmente sob o critério composto  $\Psi_{DA}$  em relação ao critério  $D$ , pode ser visto que para os delineamentos com  $\lambda = 0$  e com um valor de  $\alpha = 0,5$  houve uma perda maior de eficiência ( $\sim 15\%$ ) do que os vistos na Tabela 16, que foi utilizado modelos mais simples (exemplo 1). Assim, diferente do exemplo 1, os resultados mostram que o uso do critério composto  $\Psi_{DA}$  proporciona delineamentos

um pouco mais eficientes.

Tabela 17: Eficiências dos delineamentos localmente ótimos sob  $\Psi_{DA}$  do Exemplo 2 em relação aos delineamentos  $D$ -ótimos, usando  $\alpha = 0,5$  e  $\lambda = 0$

Modelo	$\lambda$	Delineamentos $\Psi_{DA}$				
		1	2	3	4	5
Modelo <i>a</i>	0,0	88,82	87,71	87,49	87,64	89,08
Modelo <i>b</i>	0,0	92,21	95,09	90,82	95,19	92,79
Modelo <i>b</i>	0,5	92,06	95,59	90,81	95,61	92,74
Modelo <i>c</i>	0,0	81,86	82,30	81,43	82,15	82,83
Modelo <i>c</i>	0,5	80,23	81,05	79,90	80,90	81,30
Modelo <i>d</i>	0,0	73,40	85,09	74,95	85,90	75,18
Modelo <i>d</i>	0,5	76,96	86,73	77,47	86,82	78,35
Modelo <i>e</i>	0,0	84,63	82,37	83,38	82,14	86,61
Modelo <i>e</i>	0,5	85,56	82,44	84,54	82,09	87,29
Mínimo		73,40	81,05	74,95	80,90	75,18
Média		83,97	86,49	83,42	86,50	85,13
Máximo		92,21	95,59	90,82	95,61	92,79

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo deste trabalho foi encontrar delineamentos ótimos exatos com tratamentos fatoriais, assumindo um modelo linear, mas com suspeita de heterocedasticidade e estudar a robustez ou sensibilidade dos delineamentos aos valores assumidos aos parâmetros do modelo sob diversos critérios.

Os resultados indicam pouca sensibilidade do critério  $D$  às alterações dos valores de  $\lambda$ , embora em alguns casos, o delineamento tenha sofrido modificações, principalmente em relação ao parâmetro  $\sigma$  (onde houve uma sensibilidade). Contudo, é clara a tendência do delineamento ótimo colocar mais repetições nos tratamentos cujas médias são as mais discrepantes, priorizando as partes da região experimental que espera-se produzir respostas com variância muito pequena e/ou aquelas com variância muito grande. Além disso, outra característica que pode ser observada é que os delineamentos ótimos construídos sob modelos que não possuem interação perdem menos eficiência quando os valores dos parâmetros mudam do que os delineamentos construídos sob modelos que possuem interação, embora os delineamentos sob modelos com interação sejam mais robustos na maior parte dos exemplos.

Em relação aos delineamentos pseudos-Bayesianos  $D$  encontrados, é nítido que são muitos similares aos delineamentos localmente  $D$  ótimos, levando a pequena perda de eficiência. Não se nota ganho no uso desse critério, já que ele demanda maior tempo.

Observou-se que há uma sensibilidade maior para o critério  $A_S$ , uma vez que usando como critério a minimização da variância ponderada de  $\hat{\beta}'_S$  (excluindo  $\hat{\beta}_0$ ), os delineamentos foram mais discrepantes e desbalanceados do que o fatorial completo balanceado.

Os delineamentos de segunda ordem quando comparados ao de primeira ordem perdem eficiência, conforme o esperado. Na prática, essa perda de eficiência observada pode valer a pena, pois a partir do modelo mais simples na fase inicial de delineamento, não será possível ajustar o modelo mais complicado, caso seja necessário. Uma outra observação que pode ser citada é que os delineamentos  $D_S$  perdem menos eficiência sob o  $A_S$  do que os delineamentos  $A_S$  avaliados sob o  $D_S$ .

Em relação aos delineamentos sob critério composto, verificou-se que o critério  $\Psi_{AA}$  resulta em delineamentos muito próximos do  $D$  e do  $D_S$ . Quanto ao critério  $\Psi_{DA}$ , percebeu-se que quando o valor do peso  $\alpha$  diminui, o delineamento tende a se tornar mais balanceado e se aproximar para o fatorial  $2^2$ . Além do mais, modificando os valores de  $\beta$ 's, os delineamentos pouco se alteram.

Além disso, notou-se que os delineamentos sob o critério  $\Psi_{DA}$ , apresentam resultados mais satisfatórios do que o  $\Psi_{AA}$ , talvez pelo motivo de ter como justificativa, a colocação de uma prioridade no critério  $D$ .

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ATKINSON, A. C. **Plots, transformations, and regression: an introduction to graphical methods of diagnostic regression**. Oxford: Oxford University Press, 1985. 282p.

ATKINSON, A. C. Horwitz's rule, transforming both sides and the design of experiments for mechanistic models. **Applies Statistics**, v.52, p.261–278, 2003a.

ATKINSON, A. C. Non-constant variance and the design of experiments for chemical kinetic models. **Computer Aided Chemical Engineering**, v.16, p.141–158, 2003b.

ATKINSON, A. C. Efficiencies for optimum designs when transforming the response in nonlinear models with nonconstant variance. **Metrika**, v.62, p.127–138, 2005.

ATKINSON, A. C.; COOK, R. D. D-optimum designs for heteroscedastic linear models. **Journal of the American Statistical Association**, v.90, p.204–212, 1995.

ATKINSON, A. C.; COOK, R. D. Designing for a response transformation parameter. **Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B**, v.59, n.1, p.111–124, 1997.

ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N.; TOBIAS, R. D. **Optimum experimental designs, with SAS**. Oxford: Oxford University Press, 2007. 511p.

ATKINSON, A. C.; FEDOROV, V. V.; HERZBERG, A. M.; ZHANG, R. Elemental information matrices and optimal experimental design for generalized regression models. **Jornal of Statistical Planning and Inference**, v.144, p.81–91, 2014.



- BANZATTO, D. A.; KRONKA, S. N. **Experimentação agrícola**. Jaboticabal: FUNEP, 2006. 237p.
- BOX, G. E. P.; COX, D. R. An analysis of transformations (with discussion). **Journal of the Royal Statistical Society. Series B**, v.26, p.211–246, 1964.
- CARROLL, R. J.; RUPPERT, D. Transformation and weighting in regression. **Journal of the American Statistical Association**, v.79, p.321–1328, 1984.
- CASELLA, G.; BERGER, R. **Statistical Inference**. Boston: Cengage Learning, 2001. 660p.
- CHALONER, K.; LARNTZ, K. Optimal Bayesian design applied to logistic regression experiments. **Journal of Statistical Planning and Inference**, v.59, p.191–208, 1989.
- CHALONER, K.; VERDINELLI, I. Bayesian experimental design: a review. **Statistical Science**, v.10, p.273–304, 1995.
- CHANG, F.; LIN, H. On minimally-supported D-optimal designs for polynomial regression with log-concave weight function. **Metrika**, v.65, p.227–233, 2007.
- COOK, R. D.; WEISBERG, S. **Residuals and influence in regression**. London: Chapman and Hall, 1982. 62p.
- FAZELI, F.; TAVANAI, H.; HAMADANI, A. Z. Application of Taguchi and full factorial experimental design to model the color yield of cotton fabric dyed with six selected direct dyes. **Journal of Engineered Fibers and Fabrics**, v.7, n.3, p.34–42, 2012.
- FEDOROV, V. V. **Theory of optimal experiments**. Nova Iorque: Academic Press, 1972. 306p.

FERREIRA, I. E. P. Delineamentos  $D$ -ótimos para os modelos de Michaelis-Menten e de Hill. Botucatu, 2010. 100p. Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual Paulista.

GAVIRIA, J. A.; RÍOS, V. I. L. Locally  $D$ -optimal designs with heteroscedasticity: a comparison between two methodologies. **Revista Colombiana de Estadística**, v.37, n.1, p.95–110, 2014.

GILMOUR, S. G.; TRINCA, L. A. Optimum design of experiments for statistical inference (with discussion). **Journal of the Royal Statistical Society**, v.61, p.345–401, 2012.

HARMAN, R.; PRONZATO, L. Improvements on removing non-optimal support points in  $D$ -optimum design algorithms. **Statistics & Probability Letters**, v.77, p.90–94, 2007.

HINKLEY, D. V. Transformation diagnostics for linear models. **Biometrika**, v.72, p.487–496, 1985.

KIEFER, J. C. Optimal experimental designs (with discussion). **Journal of the Royal Statistical Society. Series B**, v.21, p.272–319, 1959.

LISCHER, P. Good statistical practice in analytical chemistry. In B. Grigelionis (Ed.). **Probability Theory and Mathematical Statistics**, p.1–12, 1999.

MITCHELL, T. J. Steepest descent algorithm in a space of measures. **Statistics and Computing**, v.12, p.115–123, 2002.

NASCIMENTO, R. E. S. A.; MEHLIG, U.; ABREU, M. M. O.; MENEZES, M. P. M. Produção de serapilheira em um fragmento de bosque de terra firme e um manguezal vizinhos na península de Ajuruteua, Bragança, Pará. **Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi. Ciências Naturais**, v.1, n.3, p.71–76, 2006.

NELDER, J.; MEAD, R. A simplex method for function minimization. **Computer Journal**, v.7, p.308–313, 1965.

NGUYEN, N.; MILLER, A. J. A review of some exchange algorithms for constructing discrete  $D$ -optimal designs. **Computational Statistics and Data Analysis**, v.14, p.489–498, 1992.

PRONZATO, L. Optimal experimental design and some related control problems. **Automatica**, v.44, p.303–325, 2008.

R CORE TEAM. **R: A Language and Environment for Statistical Computing**. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2018.

SAKIA, R. M. The Box-Cox transformation technique: A review. **Journal of the Royal Statistical Society: Serie B**, v.41, n.2, p.169–178, 1992.

SMUCKER, B.; KRZYWINSKI, M.; ALTMAN, N. Optimal experimental design. **Nature Methods**, v.15, p.557–560, 2018.

WOODS, D. C.; LEWIS, S. M.; ECCLESTON, J. A.; RUSSELL, K. G. Designs for generalized linear models with several variables and model uncertainty. **Technometrics**, v.48, n.2, p.284–292, 2006.

WYNN, H. P. Results in the theory and construction of  $D$ -optimum experimental designs. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B**, v.34, p.133–147, 1972.

ZHANG, Y. Bayesian  $D$ -Optimal Design for Generalized Linear Models. Blacksburg, 2006. 108p. Thesis(Ph.D.) - Virginia Polytechnic Institute and State University.