



WEDERSON LEANDRO FERREIRA

**SELEÇÃO DE DELINEAMENTOS EM
UM ESPAÇO SIMPLEX COM EFEITO DE
BORDA EM ALGUNS COMPONENTES DE
MISTURA**

LAVRAS - MG

2016

WEDERSON LEANDRO FERREIRA

**SELEÇÃO DE DELINEAMENTOS EM
UM ESPAÇO SIMPLEX COM EFEITO
DE BORDA EM ALGUNS COMPONENTES
DE MISTURA**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

Orientador

Dr. Marcelo Ângelo Cirillo

LAVRAS - MG

2016

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Ferreira, Wederson Leandro.

Seleção de delineamentos em um espaço simplex com efeito de
borda em alguns componentes de mistura / Wederson Leandro
Ferreira. – Lavras : UFLA, 2016.

89 p.

Tese(doutorado)–Universidade Federal de Lavras, 2016.

Orientador(a): Marcelo Ângelo Cirillo.

Bibliografia.

1. Problemas de mistura. 2. Termos inversos. 3. Critérios de
otimalidade. 4. Modelos lineares normais. 5. Modelos lineares
generalizados. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

WEDERSON LEANDRO FERREIRA

**SELEÇÃO DE DELINEAMENTOS EM UM ESPAÇO SIMPLEX COM
EFEITO DE BORDA EM ALGUNS COMPONENTES DE MISTURA**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

APROVADA em 5 de fevereiro de 2016.

Dra. Carla Regina Guimarães Brighenti UFSJ

Dr. Teodorico de Castro Ramalho UFLA

Dr. Júlio Silvío de Sousa Bueno Filho UFLA

Dr. Márcio Balestre UFLA

Dr. Marcelo Ângelo Cirillo
Orientador

LAVRAS - MG

2016

A minha família, em especial minha mãe, que jamais mediu esforços em valorizar todas as etapas educacionais que alcancei até o momento.

A todos os amigos do meio acadêmico, ou não, que deram, e ainda me dão, exemplos de caráter, honestidade e bom senso, contribuindo, dessa forma, para as vitórias até aqui alcançadas.

DEDICO

AGRADECIMENTOS

A Deus por todas as coisas boas que vivi, porque entendo que o bem é proveniente apenas Dele.

A minha mãe, pelo exemplo e caráter de sempre.

Aos meus irmãos e sobrinhos, pelo apoio que sempre me deram cada um a seu modo.

A Universidade Federal de Lavras, de maneira especial ao Programa de Pós-graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, pela oportunidade de poder cursar o Doutorado.

A CAPES, pela concessão da bolsa de estudos.

Ao professor Dr. Marcelo Ângelo Cirillo, pela orientação e paciência sempre demonstradas ao longo do tempo.

Aos demais professores e funcionários do Programa que tiveram papel fundamental para o meu crescimento acadêmico.

E não poderia deixar de fazer menção a todos os Colegas do Doutorado, alguns desde o Mestrado, que não considero apenas como amigos, mas, sim, verdadeiros irmãos, e que essa sólida amizade construída ao longo do tempo jamais se apegue.

RESUMO

Este trabalho se propôs a abordar e avaliar via simulação de dados, os critérios de otimalidade A e D em delineamentos de misturas construídos a partir de um delineamento rotacional, considerando modelos normais e não normais explorando a fronteira do zero em partes dos componentes de um simplex e, também, analisar o uso dos termos inversos nesses componentes. Em função da restrição matemática imposta aos delineamentos de mistura, a obtenção da propriedade de rotacionalidade é obtida pela utilização de procedimento algébrico específico, para que sua característica inerente seja preservada, isto é, a variância de predição seja constante para todos os pontos experimentais. No cenário de problemas de misturas, quando a resposta apresentar mudanças extremas, quando parte dos componentes tenderem à fronteira do zero, os modelos usualmente utilizados podem não ser capazes e condizentes para lidar com esse fato e, neste caso, a inclusão de termos inversos, associados a esses componentes nos modelos clássicos pode ser uma alternativa mais adequada, porque essas mudanças extremas, em tese, ocorrem com menor incidência na fronteira dos referidos componentes. Pelos cenários avaliados, constatou-se que as análises realizadas sugerem que a precisão dos modelos lineares normais com termos inversos foi mais relevante ao analisar o quadrado médio residual, considerando delineamentos D-ótimos de mistura em detrimento do A-ótimo e rotacional, com maior ênfase quando parte dos componentes do simplex estão próximos de zero. Já, ao considerar a resposta como uma contagem, o uso dos termos inversos nos componentes do simplex que estão na fronteira do zero, foi mais eficaz ao analisar a *deviance*, utilizando a propriedade de D-otimalidade para o modelo normal, todavia ajustando modelo Poisson.

Palavras-chave: Problemas de mistura. Termos inversos. Critérios de otimalidade. Modelos lineares normais. Modelos lineares generalizados.

ABSTRACT

This study was conducted with the objective of addressing and assessing, via simulation data, the criteria of A- and D-optimality in mixture designs constructed based on a rotational design, considering normal and non-normal models, exploring zero boundary in some of the simplex components and analyzing the use of inverses terms on these components. Given the mathematical restriction imposed over the mixture designs, rotatority property is obtained by using specific algebraic procedure, in order for its inherent characteristic to be preserved, i.e. the prediction variance be constant for all experimental points. In the scenario of mixture problems, when the response presents extreme changes, when part of the components tend to zero border, the models usually used may not be capable or compatible to handle this fact. In this case, the inclusion of inverses terms associated to these components in classical models may be a more suitable alternative, given that these extreme changes occur with lower incidence on the border of the referred components. Considering the evaluated scenarios, we verified that the analysis performed suggest that the precision of the normal linear models with inverses terms was more relevant when analyzing the residual mean square, considering D-optimal mixture designs in detriment of the A-optimal and rotational designs, with greater emphasis when part of the simplex components are close to zero. When considering the response as a count, the use of inverse terms in the simplex components nearing the zero boundary was more effective in analyzing the *deviance* using the D-optimality property for the Normal model, however adjusting the Poisson model.

Keywords: Mixture problems. Terms inverses. Optimality criteria. Normal linear models. Generalized linear models.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Coordenadas triangulares de um simplex-lattice $\{3,3\}$ para os componentes X_1 , X_2 e X_3	19
Figura 2	Coordenadas triangulares de um simplex-centroide para os componentes X_1 , X_2 e X_3	20
Figura 3	Coordenadas triangulares de um simplex-lattice $\{3,3\}$ para os componentes X_1 , X_2 e X_3 com eixos axiais.....	23
Figura 4	Coordenadas triangulares de um simplex-centroide para os componentes X_1 , X_2 e X_3 com eixos axiais.....	23
Figura 5	Box-plot para comparação das <i>deviances</i> no ajuste de 2 modelos de mistura Poisson, utilizando as propriedades de Rotacionalidade, A-ótimo e D-ótimo para os modelos normais com presença de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.....	71
Figura 6	Box-plot para comparação das <i>deviances</i> no ajuste de 2 modelos de mistura Poisson, utilizando as propriedades de Rotacionalidade, A-ótimo e D-ótimo para os modelos normais com ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.....	71

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Principais distribuições pertencentes à família exponencial.....	46
Tabela 2	Resumo dos cenários avaliados no procedimento Monte Carlo.....	57
Tabela 3	Quantificação das medidas de interesse na inversa da matriz de informação dos delineamentos Rotacionais, D-ótimos e A-ótimos sobre a presença e ausência de efeito de borda com e sem termos inversos.....	62
Tabela 4	Porcentagens de delineamentos ótimos que resultaram em quadrados médios residuais inferiores ao delineamento original (Rotacional), ajustando o modelo normal com e sem termos inversos na presença e ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.....	65
Tabela 5	Porcentagens de hipóteses rejeitadas pela estatística F de falta de ajuste, utilizando modelos com e sem termos inversos aos níveis de significâncias de 5 e 10% de probabilidades, usando três delineamentos no cenário de presença e ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.....	67
Tabela 6	Porcentagens de hipóteses rejeitadas pela estatística χ^2 de falta de ajuste, ajustando dois modelos Poisson, considerando os níveis de significâncias de 5 e 10% de probabilidades, com três perfis de delineamentos do modelo linear normal no cenário de presença e ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.....	74

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	REFERENCIAL TEÓRICO	15
2.1	Problemas de misturas e delineamentos de misturas.....	17
2.2	Inclusão de pontos axiais em problemas de misturas.....	21
2.3	Modelos de misturas.....	24
2.4	Modelos de misturas com termos inversos	26
2.5	Obtenção de componentes de misturas a partir de delineamentos rotacionais.....	32
2.6	Delineamentos ótimos.....	37
2.6.1	Critérios de delineamentos ótimos.....	37
2.6.2	Algoritmos de busca de delineamentos ótimos.....	39
2.7	Modelos Lineares Generalizados.....	44
2.7.1	Função de ligação.....	45
2.7.2	Função desvio.....	46
3	METODOLOGIA	51
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	60
4.1	Análise e quantificação das medidas de interesse da inversa da matriz de informação dos delineamentos sobre a presença e ausência de efeito de borda com e sem termos inversos.....	60
4.2	Análise exploratória do ajuste do modelo linear normal com e sem termos inversos na presença e ausência de efeito de borda em alguns dos componentes de misturas.....	63
4.3	Desempenho do teste de falta de ajuste em relação a especificação do modelo sem termos inversos na presença e ausência de efeito de borda em alguns dos componentes de misturas.....	67
4.4	<i>Deviance</i> do modelo Poisson em relação ao uso dos termos inversos na presença e ausência do efeito de borda em alguns dos componentes de misturas.....	69
4.5	Inferência acerca dos parâmetros do modelo Poisson analisando o uso dos termos inversos na presença e ausência do efeito de borda em alguns dos componentes de misturas.....	73

5	CONCLUSÕES	76
6	TRABALHOS FUTUROS	77
	REFERÊNCIAS	78
	ANEXOS	81

1 INTRODUÇÃO

Em algumas situações envolvendo problemas de misturas a resposta pode apresentar mudanças extremas, quando parte dos componentes tendem a uma fronteira, geralmente zero, e, neste caso, os modelos usualmente utilizados podem não ser capazes e condizentes para lidar com esse fato. Uma alternativa foi proposta por Draper e John (1977) no intuito de modelar essas mudanças extremas, com a inclusão de termos inversos nos modelos clássicos, pois recorrendo a esse procedimento as mudanças extremas, em tese, ocorrerão com menor incidência na fronteira dos componentes.

É comum que em problemas de misturas que a resposta seja um número na escala contínua, entretanto é possível que a mesma seja uma contagem. A contagem surge, por exemplo, quando realiza-se um experimento em que cada ensaio é composto de diferentes proporções de princípios ativos que somam a unidade, e que serão aplicados em um espaço delimitado, com o objetivo de se obter as proporções ideais de tal modo que haja a letalidade eliminando o maior número de organismos, como: animais, plantas, fungos, protozoários, bactérias, entre outros.

Ao se realizar a modelagem estatística é aconselhável sempre optar por delineamentos que usufruam de boas propriedades. Dentre elas citam-se ortogonalidade, robustez, eficiência, dentre outras, em que uma ou mais delas é desejável, conforme a área e problemas de aplicações estudados. Em problemas aplicados à área industrial, por exemplo, a rotacionalidade é as vezes requerida, pelo fato de a variância de predição ser constante para todos os pontos experimentais, sendo essa a principal característica do Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR), segundo Atkinson, Donev e Tobias (2007).

Mateus, Barbin e Conagin (2001) estudaram a viabilidade do uso dos DCCRs em áreas de pesquisas relacionadas às ciências agrárias, por meio de

técnicas de simulação e concluíram que esses delineamentos se comportam adequadamente quando atendem aos critérios de otimalidade D e G. Estes e outros critérios são definidos similarmente por Cornell (2002), entretanto, para o contexto de modelos de misturas têm recebido popularidade considerável, devido a introdução de diversos novos algoritmos na literatura para obtenção dos mesmos, bem como ao advento de programas computacionais robustos.

Em problemas de misturas, a utilização direta de um delineamento rotacional com todas as suas características inerentes, não se torna possível devido à restrição matemática da soma das proporções dos componentes ser igual a unidade. Desta forma, Cornell (2002) desenvolveu um procedimento algébrico para obter os componentes de misturas por meio de um delineamento rotacional, de tal modo que sua característica fundamental seja preservada. É carente na literatura estatística pesquisas relacionadas a delineamentos ótimos provenientes de delineamentos rotacionais, sobretudo ao considerar termos inversos na matriz de delineamento e quando alguns dos componentes de misturas tendem a fronteira do simplex.

Delineamentos de misturas originalmente não apresentam a propriedade de rotacionalidade, portanto, o comportamento dos critérios de otimalidade aplicados aos delineamentos de misturas rotacionais foram pouco explorados. Decorrente desse fato, este trabalho tem por objetivo avaliar os critérios de otimalidade A e D em delineamentos de misturas construídos a partir de um delineamento rotacional e/ou aproximadamente rotacional. Com esse propósito foram considerados modelos normais e não normais de forma a explorar a fronteira do zero em partes dos componentes de um simplex, assim como analisar o uso dos termos inversos nesses componentes.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

A seleção de um delineamento com o propósito de ajustar um modelo em determinadas metodologias estatísticas, não é um procedimento trivial. Na metodologia estatística de superfície de resposta, Box e Draper (2007) argumentam que uma série de propriedades deve ser levada em conta para realizar tal seleção, dentre elas a propriedade de robustez em relação às observações discrepantes e na violação de suposições teóricas e/ou na presença de erros no conjunto de variáveis preditoras. Assim como obter estimativa interna da variância do erro com um número mínimo de pontos experimentais.

Outro fator a ser considerado, dependendo do problema, trata-se da minimização da variância de predição, relevância dada na construção de um critério de otimalidade, dentre os vários critérios alfabéticos usualmente conhecidos (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009). Esses critérios, no entanto, pressupõem que o modelo ajustado esteja correto, porém surgem situações nas quais o viés da resposta predita poderá ocorrer devido ao ajuste do modelo inadequado (KHURI, 2003). Desta forma, o critério de delineamento com mínimo viés, assim como o de mínima variância, tem sido muito estudado em distintos problemas. No entanto, uma estratégia de delineamento que, por exemplo, envolve a proteção contra o viés, trabalha contra uma estratégia desenvolvida para a variância mínima (RUGGOO; VANDEBROEK, 2006). Goos et al. (2005) mostraram que é possível considerar em um mesmo critério de otimalidade, ou seja, em um mesmo critério de seleção de delineamentos, a minimização de variância e viés da resposta predita.

Box e Draper (1959) obtiveram condições necessárias e suficientes para delineamento de mínimo viés. Entretanto, Butler (2006) mostra que em alguns

casos, como uma superfície de resposta polinomial de primeira ordem em mais de um fator, as condições necessárias e suficientes são equivalentes às condições suficientes definidas por Box e Draper (1959). A abordagem desses autores incorpora viés ao critério de delineamento, assumindo que a superfície de resposta verdadeira é um polinômio de ordem mais elevada que o do modelo ajustado, sendo, por exemplo, a superfície de resposta a ser ajustada um polinômio de ordem d_1 em k fatores

$$y_x = f_1(x)' \beta_1 + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2),$$

sendo $f_1(x)$ um vetor contendo todos os termos polinomiais de ordem até d_1 . A superfície de resposta verdadeira é assumida como um polinômio de ordem d_2 , sendo $d_2 > d_1$, tal que:

$$\begin{aligned} y_x &= \eta_x + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2), \\ \eta_x &= f_1(x)' \beta_1 + f_2(x)' \beta_2, \end{aligned}$$

em que $f_2(x)$ é um vetor contendo todos os termos polinomiais de ordem $d_1 + 1$ até d_2 e β_1 e β_2 são vetores de parâmetros desconhecidos.

Em virtude do que foi mencionado sucintamente, percebe-se que a seleção de delineamentos não é algo rotineiro e simples, fato que é agravado quando as metodologias pressupõem restrição quanto ao uso dos componentes envolvidos no processo. Em muitos problemas de superfícies de resposta, quando há estas restrições, Ryan (2007) comenta, por exemplo, que os delineamentos clássicos utilizados não são aplicáveis nesta situação devido à restrição imposta ao espaço experimental. Nesse contexto, enquadram-se os delineamentos de misturas nos quais a região experimental é descrita por um simplex.

2.1 Problemas de mistura e delineamentos de misturas

Cornell (2002) define que em problema de mistura, em geral, assume-se que a resposta medida depende unicamente das proporções dos componentes presentes na mistura e não sobre a quantidade da mistura. Entretanto, o mesmo autor destaca que há casos em que esta definição deve ser ampliada em função desta resposta ser afetada também pela quantidade da mistura.

A característica distintiva do problema de mistura, quando a resposta é dependente unicamente dos componentes, é que os fatores experimentais controláveis ou independentes representem valores proporcionais da mistura ao invés de quantidades irrestritas, sendo que as proporções podem ser representadas em volumes, em peso, entre outros (CORNELL, 2002). As proporções são não-negativas e geralmente devem se somar à unidade.

Salienta-se, segundo Ryan (2007), que existindo uma restrição na mistura total, usualmente também haverá restrições sobre os componentes individuais, tornando, neste caso, o espaço experimental não-retangular ou hiper-retangular. Por conseguinte, alguns tipos de delineamentos, como por exemplo, os delineamentos no esquema de fatorial completo ou fracionário tornam-se inaplicáveis.

Assim, esses problemas de misturas apresentam características próprias e, em geral, quando se alteram as variáveis independentes, mudanças esperadas ocorrerão na variável resposta. Por conseguinte, quando se realizam ensaios com misturas, modificações provocadas nos componentes implicarão em alteração proporcional na resposta.

Quando se considera três componentes, a região experimental forma um triângulo equilátero e cada lado do triângulo definirá misturas binárias. Nos vértices estarão as formulações dos componentes puros e no interior estarão contidas as misturas ternárias. Portanto, para absorver essas particularidades

inerentes aos problemas de misturas à experimentação e modelagem envolvem delineamentos e regressão polinomial adequados aos componentes utilizados (Cornell, 2002).

Dadas essas considerações, o arranjo e a distribuição dos pontos experimentais nos limites (arestas) do simplex são determinados por uma classe de delineamentos, seguindo essas especificações. Um arranjo ordenado que consiste de uma distribuição uniforme dos pontos espaçados sobre um simplex é conhecido como um lattice, por fazer referência a uma matriz de pontos (CORNELL, 2002). Scheffé (1958) sugeriu os delineamentos simplex-lattice caracterizados pelo par $\{q, m\}$, em que q indica o número de componentes de misturas ajustados por um modelo polinomial de ordem m , sendo este interpretado pelo número de $m + 1$ proporções a serem alocadas em cada aresta do simplex. Desta forma, garante-se o arranjo de pontos formados pelas combinações das proporções, igualmente espaçadas no simplex entre 0 e 1, descritas para cada nível do fator x , isto é:

$$x_i = 0, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, 1. \quad (1)$$

O número total de pontos em um delineamento simplex-lattice $\{q, m\}$, é definido por:

$$\binom{m+q-1}{m} = \frac{(m+q-1)!}{m!(q-1)!}. \quad (2)$$

A Figura 1 ilustra um caso particular do simplex-lattice $\{3, 3\}$.

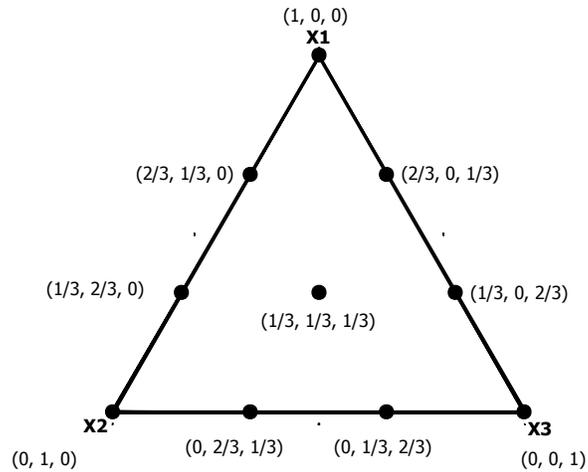


Figura 1 Coordenadas triangulares de um simplex-lattice $\{3,3\}$ para os componentes X1, X2 e X3.

No delineamento simplex-centroide o arranjo do número de pontos distintos é igual a $2^q - 1$. Esses pontos correspondem a q permutações das misturas puras $(1, 0, \dots, 0)$; $\binom{q}{2}$ permutações de todas as misturas binárias $(1/2, 1/2, 0, \dots, 0)$; $\binom{q}{3}$ permutações das misturas $(1/3, 1/3, 1/3, 0, \dots, 0)$ e assim por diante, até finalizar o centroide geral $(1/q, 1/q, \dots, 1/q)$. Em outras palavras, o delineamento é constituído por todos os subconjuntos dos componentes q , entretanto, apenas com as misturas dos componentes que estão presentes em proporções iguais, conforme ilustrado na Figura 2 para três componentes (CORNELL, 2002).

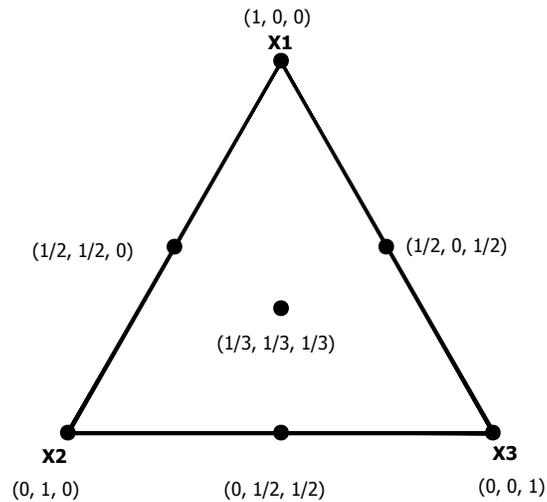


Figura 2 Coordenadas triangulares de um simplex-centroide para os componentes X1, X2 e X3.

Uma crítica aos delineamentos simplex, descritos anteriormente, é pelo fato de que a maioria dos pontos experimentais ocorre na fronteira da região, utilizando no máximo $q - 1$ componentes. Entretanto, é quase sempre desejável alocar mais pontos no interior dessa região, de tal modo que utilize todos os q componentes de misturas. Uma solução para que mais pontos sejam distribuídos internamente, se dá por meio do uso de eixos axiais.

2.2 Inclusão de pontos axiais em problemas de misturas

Uma simetria axial indica a correspondência entre dois ou mais pontos, em que o segmento que os une encontra-se numa reta fixa no seu meio. Usualmente, são pontos alocados nos pontos fatoriais de um experimento, no intuito de obter alguma propriedade que se deseja para o delineamento.

O conceito de rotacionalidade está associado à escolha do valor do ponto axial α , comumente empregado em um delineamento composto central que apresenta pontos fatoriais, centrais e axiais. O valor α dos pontos axiais em particular é definido por

$$\alpha = \sqrt[q]{Mc}, \quad (3)$$

em que c é uma quantidade escalar denominada de raio multiplicador, adota-se igual a 1 na maioria dos casos e $M = 2^{q-1}$, sendo q o número de variáveis envolvidas no planejamento experimental (CORNELL, 2002; MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009).

Nos delineamentos considerados rotacionais, a principal propriedade dar-se-á no fato de que as variâncias de predições da resposta dependem exclusivamente da distância ao ponto central, ou seja, a precisão da variância de predição for idêntica em todos os pontos de uma esfera ou hiperesfera, cujo centro é o centro de planejamento.

A estabilidade ocasionada por essa propriedade se refere à homogeneidade de variância de predições, entretanto, não está garantida a mesma precisão experimental em todo o intervalo experimental dos fatores avaliados. Para alcançar tal objetivo é recomendado inserir mais pontos centrais, conforme ilustrado na matriz D a seguir, referente ao delineamento composto central rotacional com nove repetições no ponto central.

$$D = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ -1,4142 & 0 \\ 1,4142 & 0 \\ 0 & -1,4142 \\ 0 & 1,4142 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} . \quad (4)$$

Cornell (2002) argumenta que o caso mais simples de pontos axiais de um delineamento é um cujos pontos são posicionados de forma equidistantes do centroide. Ocorrendo isto, essa distância é denotada por Δ e assume um valor máximo de $(q - 1)/q$, sendo q , neste caso, o número de componentes de mistura, conforme ilustrados na Figura 3 e na Figura 4, observando que quanto mais fatores analisados mais distantes os pontos axiais estarão do centro.

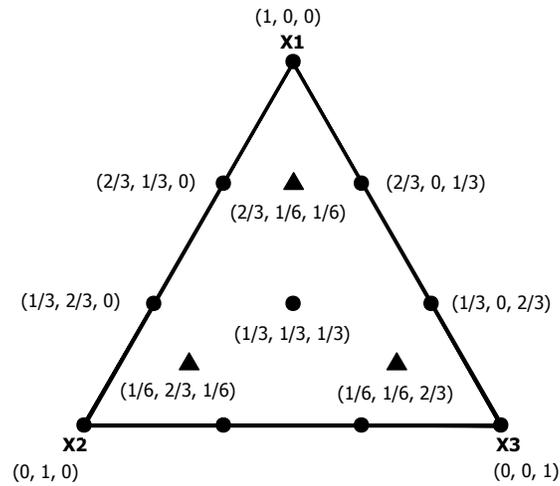


Figura 3 Coordenadas triangulares de um simplex-lattice $\{3,3\}$ para os componentes X_1 , X_2 e X_3 com os eixos axiais.

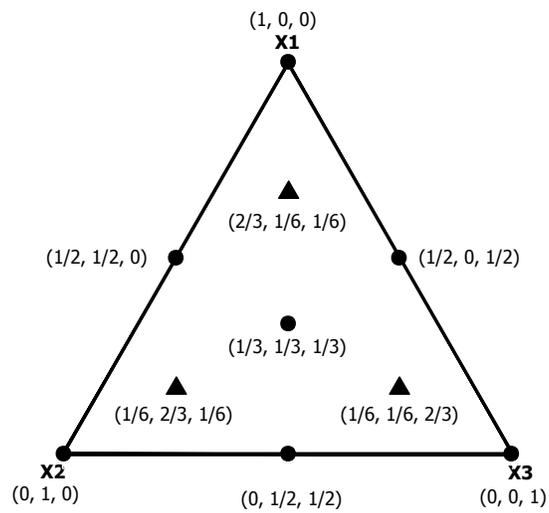


Figura 4 Coordenadas triangulares de um simplex-centroide para os componentes X_1 , X_2 e X_3 , com eixos axiais.

2.3 Modelos de misturas

Segundo Cornell (2002), uma função de regressão ajustada para dados coletados em um delineamento simplex pode ser realizada através da seguinte equação:

$$\eta(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i \leq j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i \leq j \leq k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots \quad (5)$$

em que são incluídos termos até a m -ésima ordem, sendo η a resposta esperada da mistura formulada. Entretanto, convém salientar que a expressão (5) está sujeita a restrição $\sum_{i=1}^q x_i = 1$, com $x_i \geq 0$, e, portanto, as estimativas dos coeficientes β_i , β_{ij} , β_{ijk} , \dots , relativas aos respectivos coeficientes na expressão (5) não são únicas.

Desta forma, a solução mais adequada foi desenvolvida por Scheffé (1958), por meio da obtenção de uma classe de modelos a serem utilizados nos delineamentos simplex, referidos na literatura como polinômios canônicos de Scheffé, conforme discriminado a seguir:

(1) Polinômio canônico linear

$$\eta_1(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i; \quad (6)$$

(2) Polinômio canônico de segunda ordem

$$\eta_2(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j ; \quad (7)$$

(3) Polinômio canônico cúbico

$$\eta_3(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) \text{ e } (8)$$

(4) Polinômio canônico especial

$$\eta_4(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k. \quad (9)$$

Esses modelos, quando utilizados com os correspondentes delineamentos simplex, simplifica grandemente a estimação de mínimos quadrados dos respectivos coeficientes.

Muitos problemas de superfícies de resposta envolvem restrições para os componentes envolvidos, conforme já discutido. Ocorre que em alguns casos a resposta pode apresentar mudanças extremas quando parte deles tende a uma fronteira, geralmente zero e neste caso os modelos utilizados podem não ser adequados para lidar com essa situação. Na próxima seção é apresentada uma alternativa, proposta pelos autores Draper e John (1977), no intuito de modelar essas mudanças extremas com a inclusão de termos inversos nos modelos clássicos.

2.4 Modelos de misturas com termos inversos

Uma classe bem conhecida de problemas de superfície de resposta envolve restrição do tipo

$$\sum_{i=1}^q r_{ij}x_i \geq c_j, \quad j = 1, 2, \dots, k,$$

sobre as variáveis preditoras. Porém, quando as restrições são do tipo mais simples, $\sum_{i=1}^q x_i = 1$, com $x_i \geq 0$, que não restringe o total de cada componente x_i , e a resposta trata-se de uma proporção relativa das variáveis preditoras, tem-se o referido na literatura como problema de mistura, conforme comentado no tópico anterior (DRAPER; JOHN, 1977).

Outro fato a ser analisado é quando ocorrem mudanças extremas nas respostas quando um, ou mais, componentes de misturas tendem a fronteira do simplex, isto é:

$$f(x_i) \rightarrow \pm\infty, \text{ com } x_i \rightarrow 0,$$

neste caso, os modelos usualmente utilizados podem não ser adequados e condizentes para lidar com essa situação.

Muitas vezes, segundo os mesmos autores, ensaios exatamente na fronteira não serão permitidos, mas, sim, somente para algumas quantidades muito próximas, ou seja, desta forma surge a restrição

$$x_i \geq \varepsilon > 0, \quad i = 1, 2, \dots, q.$$

Em situações como esta, as variâncias dos erros serão totalmente não homogêneas. E no intuito de modelar essas mudanças extremas para algum componente $x_i \rightarrow 0$, foi definida uma classe de novos modelos. Assim, tendo por base os modelos de misturas mencionados em 2.3, a inclusão dos termos inversos, conforme propõem Draper e John (1977), é descrita a seguir:

$$\eta_1^*(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} x_i^{-1}; \quad (10)$$

$$\eta_2^*(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} x_i^{-1}; \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \eta_3^*(x) = & \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) \\ & + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} x_i^{-1} \text{ e} \end{aligned} \quad (12)$$

$$\eta_4^*(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} x_i^{-1}. \quad (13)$$

Convém ressaltar que esses modelos, segundo os mesmos autores, são extensões dos modelos canônicos de Scheffé, com os termos inversos adicionados para refletir as possíveis mudanças extremas nas respostas que podem ocorrer. Visando melhor explicação, reporta-se à expansão da série de Taylor em $f(x)$, ou seja:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^n(a)(x-a)^n}{n!}. \quad (14)$$

Considerando $f(x) = \frac{1}{x_i}$, aplicada em $a = 1$, resulta em

$$\frac{1}{x_i} = 1 - (x_i - 1) + (x_i - 1)^2 + (x_i - 1)^3 + \dots \quad (15)$$

É perceptível que x_i^{-1} pode ser considerado um caso especial de polinômios e vê-se que x_i^{-1} está confundido com x_i , x_i^2 , x_i^3 , e assim por diante (DRAPER; JOHN, 1977). Portanto, esses modelos devem ser usados para fins preditivos e não atentar-se para a significância e interpretação dos coeficientes.

Outro aspecto importante é que, de forma isolada, poderá haver o definido pelos autores Draper e John (1977) como “efeito de borda” para componentes específicos e, desta forma, caso isto seja confirmado, a inclusão dos termos inversos poderá ocorrer somente para esses componentes isoladamente.

Quando há restrições do tipo $x_i > a_i > 0$ ($i = 1, 2, \dots, q$) ($\sum a_i < 1$) é possível transformar os componentes em pseudocomponentes, a fim de aplicar modelos com termos inversos que contemplem a restrição $x_i > 0$.

Com o intuito de modelar mudanças extremas que podem ocorrer numa fronteira diferente de zero, a seguinte transformação é proposta por Draper e John (1977) :

$$a'_i = a_i - \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, q;$$

em que

$$a_i > \varepsilon_i > 0 \quad i = 1, 2, \dots, q,$$

sendo ε_i uma pequena quantidade. Assim, os componentes transformados serão redefinidos por

$$x'_i = \frac{x_i - a'_i}{1 - \sum_1^q a'_i}. \quad (16)$$

Observa-se que quando $x_i = a_i$, $x'_i = \varepsilon_i / (1 - \sum a_i + \sum \varepsilon_i) > 0$, ou seja, a fronteira $x_i = a_i$ foi movida para a vizinhança de 0. Isso permite que os termos inversos $(x'_i)^{-1}$, possam devidamente representar mudanças extremas próximo dessa fronteira. Pode-se observar também que $\sum_{i=1}^q x'_i = 1$. Para fins didáticos, algumas demonstrações serão apresentadas:

Prova 1: $x'_i > 0$:

$$\text{Como } a'_i = a_i - \varepsilon_i \Rightarrow a_i = a'_i + \varepsilon_i.$$

Substituindo este resultado em (16)

$$x'_i = \frac{x_i - a'_i}{1 - \sum_1^q a'_i},$$

segue que

$$x'_i = \frac{a'_i + \varepsilon_i - a'_i}{1 - \sum_1^q (a_i - \varepsilon_i)} = \frac{\varepsilon_i}{1 - \sum_1^q a_i + \sum_1^q \varepsilon_i} = \frac{\varepsilon_i}{1 - 1 + \sum_1^q \varepsilon_i} = \frac{\varepsilon_i}{\sum_1^q \varepsilon_i}.$$

Como $\varepsilon_i > 0$, segue que $x'_i > 0$.

Prova 2: $\sum_{i=1}^q x'_i = 1$:

$$x'_i = \frac{x_i - a'_i}{1 - \sum_1^q a'_i},$$

aplicando o somatório de $i = 1$ até $i = q$ em ambos os termos da igualdade, segue que

$$\sum_{i=1}^q x'_i = \sum_{i=1}^q \frac{x_i - a'_i}{1 - \sum_{i=1}^q a'_i}$$

$$\sum_{i=1}^q x'_i = \frac{\sum_{i=1}^q x_i - \sum_{i=1}^q a'_i}{1 - \sum_{i=1}^q a'_i} = \frac{1 - \sum_{i=1}^q a'_i}{1 - \sum_{i=1}^q a'_i} = 1.$$

Importante ressaltar que quando um componente assume o valor 0, não é possível assumir termos inversos de modo usual no modelo. Neste caso é possível adicionar uma pequena quantidade α_i , para cada componente, logo, há uma normalização para que as restrições usuais do simplex ainda se mantenham e um modelo com termos inversos possa ser aplicado aos dados. Segundo essa recomendação, uma transformação proposta por Draper e John (1977) é:

$$x'_i = \left(1 - \sum_{i=1}^q \alpha_i\right) x_i + \alpha_i, \quad (17)$$

que satisfaz

$$x'_i \geq \alpha_i; \quad \sum_{i=1}^q x'_i = 1.$$

Prova 3: $\sum_{i=1}^q x'_i = 1$, com a codificação

$$x'_i = \left(1 - \sum_{i=1}^q \alpha_i\right) x_i + \alpha_i$$

$$x'_i = x_i - x_i \sum_{i=1}^q \alpha_i + \alpha_i,$$

aplicando o somatório de $i = 1$ até $i = q$ em ambos os termos da igualdade, segue que

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^q x'_i &= \sum_{i=1}^q (x_i - x_i \sum_{i=1}^q \alpha_i + \alpha_i) \\
\sum_{i=1}^q x'_i &= \sum_{i=1}^q x_i - \sum_{i=1}^q x_i \sum_{i=1}^q \alpha_i + \sum_{i=1}^q \alpha_i \\
\sum_{i=1}^q x'_i &= 1 - 1 \cdot \sum_{i=1}^q \alpha_i + \sum_{i=1}^q \alpha_i = 1.
\end{aligned}$$

Assumindo $\alpha_i = \alpha$ para todo $i, (i = 1, 2, \dots, q)$, a transformação é simplificada, conforme demonstração apresentada:

Prova 4: $\sum_{i=1}^q x'_i = 1$.

$$\begin{aligned}
x'_i &= \left(1 - \sum_{i=1}^q \alpha\right) x_i + \alpha \\
x'_i &= x_i - x_i q \alpha + \alpha,
\end{aligned}$$

aplicando o somatório de $i = 1$ até $i = q$ em ambos os termos da igualdade, segue que

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^q x'_i &= \sum_{i=1}^q (x_i - x_i q \alpha + \alpha) \\
\sum_{i=1}^q x'_i &= \sum_{i=1}^q x_i - \sum_{i=1}^q x_i q \alpha + q \alpha \\
\sum_{i=1}^q x'_i &= 1 - 1 \cdot q \alpha + q \alpha = 1.
\end{aligned}$$

Assim, mesmo com a nova codificação está assegurada a soma da unidade de todos os pseudocomponentes.

Valores apropriados de ϵ_i e α podem ser selecionados no intervalo compreendido entre 0,02 a 0,05, que serão apropriados na maioria dos problemas práticos. Mais detalhes sobre a metodologia podem ser vistos em Draper e John (1977).

2.5 Obtenção de componentes de misturas a partir de delineamentos rotacionais

Seguindo a definição dos delineamentos rotacionais mencionada na seção 2.2, Cornell (2002) apresentou um procedimento algébrico para obter os componentes de mistura por meio de um delineamento rotacional, de tal modo que a sua característica fundamental seja preservada ao ajustar modelos de ordem 1 e 2.

Para isso, supõe-se que não haja interesse em todos os pontos do simplex, mas, sim, em uma sub-região contida no mesmo, uma vez que ocasionalmente experimentos podem ser planejados para serem realizados em alguma vizinhança razoavelmente bem definida, ou, também, denominada de região de interesse, justamente por explorar esta região e verificar se há outras misturas nas imediações das condições habituais que podem produzir um rendimento melhor do que está sendo produzido (CORNELL, 2002). Outra razão para restringir a experimentação a uma sub-região do simplex é que algumas misturas não estão dentro da sub-região ou não são viáveis ou simplesmente não são desejáveis e, portanto, não se deseja utilizá-las.

Decorrente dessas considerações, define-se o vetor $x_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0q})'$ o centroide da região elipsoidal de interesse, que pode coincidir com o centroide do simplex e seja também $h = (h_1, h_2, \dots, h_q)'$, em que x_{0i} corresponde ao centro do intervalo de interesse para a combinação i , e $2h_i$ representa a extensão ou amplitude do intervalo simétrico de interesse para a combinação i . Logo, no caso geral de q -componentes, uma região elipsoidal é expressa como:

$$\sum_{i=1}^q \left(\frac{x_i - x_{0i}}{h_i} \right)^2 \leq 1. \quad (18)$$

O ponto $(x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0q})$ encontra-se, naturalmente, estritamente dentro do simplex e, por conseguinte, a condição $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$ é também forçada sobre x_{0i} , que é $x_{01} + x_{02} + \dots + x_{0q} = 1$.

Para a formulação de um conjunto de componentes de misturas a partir de variáveis que formam um delineamento rotacional, o procedimento mencionado acima, proposto por Cornell (2002), considera o delineamento dado por:

$$\mathbf{X} = \mathbf{D}_w \mathbf{T}'_1 \mathbf{H} + [\mathbf{x}'_0]. \quad (19)$$

Se o delineamento em \mathbf{W} ($\mathbf{W} = [1 \ \mathbf{D}_w]$) é rotacional, a escolha adequada de \mathbf{T}_1 , de \mathbf{T} ortogonal, pode ser usada sem afetar a variância de predição da resposta em \mathbf{W} , uma vez que a magnitude desta variância de predição é uma função apenas da distância a partir do centro do delineamento para onde o ponto w está localizado e não uma função de direção (CORNELL, 2002). A construção desse delineamento \mathbf{X} é verificada nos seguintes passos:

i) Obtenção da matriz \mathbf{D}_w :

Assumindo $q - 1$ variáveis, o delineamento composto central, com n_0 pontos centrais, a matriz de delineamento resultante é dada por:

$$\mathbf{D}_w = \begin{bmatrix} \pm c & \pm c & \cdots & \pm c \\ \pm c & \pm c & \cdots & \pm c \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \pm c & \pm c & \cdots & \pm c \\ \hline -g & 0 & \cdots & 0 \\ g & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -g & & 0 \\ 0 & g & & 0 \\ \vdots & \vdots & & 0 \\ 0 & 0 & & -g \\ 0 & 0 & & g \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \mathbf{D}_1 \\ \\ \mathbf{D}_2 \\ \\ \mathbf{D}_3 \end{matrix} \quad (20)$$

A matriz \mathbf{D}_w corresponde a uma combinação de delineamentos, de modo que as dimensões de cada delineamento são especificadas pelo número de componentes q , pontos centrais n_0 e $M = 2^{q-1}$ (CORNELL, 2002). Desta forma, obter-se-á a matriz \mathbf{D}_1 de dimensão $(M \times (q - 1))$, \mathbf{D}_2 de dimensão $2(q - 1) \times (q - 1)$ e a matriz \mathbf{D}_3 de dimensão $n_0 \times (q - 1)$. Pelas pautações ensejadas anteriormente conclui-se que a dimensão de \mathbf{D}_w será $(M + 2(q - 1) + n_0) \times (q - 1)$.

A rotacionalidade é garantida por considerar $g = \sqrt[q]{M}c$, em que $M = 2^{q-1}$ e para o procedimento em questão c é obtido da seguinte forma:

$$c = \frac{\rho^*}{\sqrt[q]{q-1}}, \text{ sendo} \quad (21)$$

$\rho^* = \min_{1 \leq i \leq q} \rho_i$ e ρ_i especificado por:

$$\rho_i = x_{0i} \left(\frac{1}{h_i^2} + \frac{1}{a - h_i^2} \right)^{\frac{1}{2}} ; i = 1, 2, \dots, q, \quad \text{e } a = \sum_{i=1}^q h_i^2.$$

logo, ρ^* é o raio da esfera maior, sendo essa caracterizada pela região estendida de interesse no espaço do delineamento (CORNELL, 2002).

ii) Obtenção da matriz \mathbf{T}_1 :

A matriz será uma partição da matriz ortogonal $\mathbf{T} = [\mathbf{T}_1 \quad \mathbf{T}_2]$, para obter a matriz \mathbf{T}_2 será definido a quantidade

$$\tilde{h}_i = \frac{h_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^q h_i^2}}, \quad (22)$$

que definirá o vetor \mathbf{T}_2 com dimensão $(q \times 1)$, como segue:

$$\mathbf{T}_2 = \tilde{\mathbf{h}} = \begin{bmatrix} \tilde{h}_1 \\ \tilde{h}_2 \\ \vdots \\ \tilde{h}_q \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Com essas especificações os elementos da matriz \mathbf{T}_1 , de dimensão $(q \times q - 1)$, são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{cases} t_{11} = -h_2 \\ t_{21} = h_1 \\ t_{i1} = 0, \quad i = 3, 4, \dots, q \end{cases}$$

$$\begin{cases} t_{12} = -h_1 h_3 \\ t_{22} = -h_2 h_3 \\ t_{32} = h_1^2 + h_2^2 \\ t_{i2} = 0, \quad i > 3 \end{cases}$$

$$\begin{cases} t_{13} = -h_1 h_4 \\ t_{23} = -h_2 h_4 \\ t_{33} = -h_2 h_4 \\ t_{43} = h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 \\ t_{i3} = 0, \quad i > 4. \end{cases}$$

Com essa formulação $\mathbf{T}'\mathbf{T} = \mathbf{I}$, pois \mathbf{T} deverá ser ortogonal no contexto deste procedimento (CORNELL, 2002).

iii) Obtenção da matriz \mathbf{H} :

A matriz \mathbf{H} será uma matriz diagonal formada pelos elementos do vetor h . Logo, a dimensão da matriz será $q \times q$.

iv) Obtenção da matriz $[\mathbf{x}'_0]$:

A matriz $[\mathbf{x}'_0]$ é uma matriz na qual suas linhas são todas iguais e iguais ao vetor x'_0 , sua dimensão será $(M + 2(q - 1) + n_0) \times q$. Isto é:

$$[\mathbf{x}'_0] = \begin{bmatrix} x'_0 \\ x'_0 \\ \vdots \\ x'_0 \end{bmatrix}. \quad (24)$$

Diante das definições apresentadas nos últimos quatro itens é possível determinar a expressão, segundo Cornell (2002), para a matriz \mathbf{X} , na equação (19).

2.6 Delineamentos ótimos

A formulação do delineamento experimental não é uma tarefa trivial, pois requer muitos aspectos distintos, tais como as hipóteses a serem testadas, fatores que influenciam a resposta e a região experimental. Nesse contexto, os delineamentos são estratégias experimentais que viabilizam a realização de inferências estatísticas, que para avaliar os efeitos de seus fatores, torna-se imprescindível conhecer suas propriedades, como, por exemplo, a rotacionalidade (RODRIGUES; LEMMA, 2009; RYAN, 2007).

Dentre os possíveis delineamentos que podem ser utilizados na execução de um experimento, deve-se optar por aquele que além de ser plausível na prática, seja eficiente segundo propriedades estatísticas que reflitam os objetivos do estudo (FERREIRA, 2011). Desses delineamentos experimentais, segundo Zen et al. (2015), existe uma classe que são ótimos a partir de algum critério estatístico.

Ainda que não tão populares como os fatoriais completos e fracionários, delineamentos ótimos têm sido usados em inúmeras aplicações, destacando-se em problemas onde existem regiões de operacionalidade restrita (RYAN, 2007).

2.6.1 Critérios de delineamentos ótimos

Existem muitos critérios de delineamentos especificados na literatura estatística e usualmente conhecidos como “Alphabetic Optimality”, que em geral concentram suas várias características ótimas individuais na matriz $X'X$ que ocorre no ajuste de mínimos quadrados de uma dada função de resposta (RYAN, 2007). Esses estudos estão a cada dia sendo aprimorados e se revelando de grande interesse prático.

A partir da teoria de delineamentos ótimos é possível planejar experimentos que proporcionem a máxima informação a respeito de aspectos que se deseja investigar, cujo objetivo é garantir planejamentos eficientes especificados *a priori* (ATKINSON; DONEV; TOBIAS, 2007; FERREIRA, 2011).

Os critérios de otimalidade para delineamentos, segundo Atkinson, Donev e Tobias (2007), são denotados por $\Psi\{\mathbf{M}(\xi)\}$ e são funções da matriz de informação $\mathbf{X}'\mathbf{X}$, ou de sua inversa, do delineamento ξ e influenciam as medidas de precisão das estimativas dos parâmetros do modelo ora assumido. Assim, um critério de classificação que minimiza $\Psi\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\}$ é dito delineamento ótimo, como, por exemplo, o A-ótimo e D-ótimo.

1) D-ótimo

Um delineamento D-ótimo, segundo Atkinson, Donev e Tobias (2007), é definido por

$$\Psi\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\} = \det(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}. \quad (25)$$

Ou de forma equivalente por $D = \Psi\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\} = \det(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \tilde{\lambda}^{-p}$, em que $\tilde{\lambda}$ é a média geométrica dos autovalores de $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ e p é a quantidade de parâmetros a ser estimada no modelo adotado (BOX; DRAPER, 2007).

Um modelo estimado pelo método de mínimos quadrados, a matriz de variâncias e covariâncias dos parâmetros desconhecidos, é proporcional assintoticamente ao inverso da matriz de informação e visa minimizar o volume da região de confiança multidimensional (elipsoide) do vetor de estimativas desse vetor de parâmetros, tornando as regiões de confiança com menores volumes (BOX; DRAPER, 2007; CHEN; LIN, 2015; KLEIN, 2004; RYAN,

2007). O critério D é uma função de $\tilde{\lambda}$ apenas, sendo, portanto, uma medida do tamanho da região de confiança sozinho.

2) A-ótimo

Um delineamento A-ótimo, segundo Atkinson, Donev e Tobias (2007), é definido por

$$\Psi \{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\} = \text{tr} (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \sum \lambda_i, \quad (26)$$

em que λ_i é cada autovalor de $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$. Esse critério minimiza o traço da matriz de variâncias e covariâncias, ou seja, minimiza a soma das variâncias ou equivalentemente a variância média (BOX; DRAPER, 2007). Isto posto, em função de $V[\hat{\beta}] = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\sigma^2$.

2.6.2 Algoritmos de busca de delineamentos ótimos

Um dos principais métodos a serem empregados na geração de um delineamento D-ótimo é o método do tipo *exchange*, mencionado por Liao (2001). Em síntese, esse método consiste em gerar um delineamento inicial com k pontos aleatórios, de modo que a matriz de informação seja não singular. Após procedimento iterativo, no qual os pesos inicialmente atribuídos são atualizados novos delineamentos são gerados e comparados através de uma função aplicada à matriz de informação $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ que caracterize o critério, como, por exemplo, D-ótimo e A-ótimo, ou seja, $\phi(\xi) = |\mathbf{M}(\xi)|$ e $\phi(\xi) = \text{Tr}\mathbf{M}^{-1}(\xi)$, respectivamente.

Considerando o modelo linear a seguir

$$y(x) = \beta'f(x) + \epsilon(x), \quad x \in \mathcal{X},$$

em que χ é o espaço do delineamento com seus infinitos pontos suportes para x .

em que $y(x)$ é uma observação em x no χ , $\mathbf{f}(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x))'$; $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)'$ um vetor parâmetros desconhecidos e $\epsilon(x)$ satisfazendo $E(\epsilon) = 0$ e $Var(\epsilon) = \sigma^2$. Os passos necessários para gerar um delineamento D-ótimo e um A-ótimo são apresentados a seguir, conforme proposto por Liao (2001):

1) Algoritmo *exchange* para o delineamento D-ótimo

(a) Gerar pontos suportes aleatórios x_1, x_2, \dots, x_k em χ , de modo que

$$\det(f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_k)) \neq 0.$$

(b) Para $j = 0$ calcular o determinante de $\mathbf{M}(\xi_j)$, sendo

$$\xi_j = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_k \\ 1/k & \dots & 1/k \end{pmatrix}$$

em que $1/k$ são os pesos ótimos.

(c) Para cada ponto suporte x_i é replicado um novo ponto x , denotando-se um novo delineamento $\xi_j(i, x)$. Então se muda x por x^* , que satisfaça $|\mathbf{M}(\xi_j(i, x^*))| = \max_{x \in \chi} |\mathbf{M}(\xi_j(i, x))|$.

(d) Seja $j = j + 1$, denotando-se um novo delineamento ξ_j .

(e) Repetem-se os passos c-d até que a mudança relativa do determinante da matriz do delineamento seja menor que um pequeno valor positivo ε , isto é

$$|\mathbf{M}(\xi_{j+1})| - \frac{|\mathbf{M}(\xi_j)|}{|\mathbf{M}(\xi_{j+1})|} < \varepsilon.$$

2) Algoritmo *exchange* para o delineamento A-ótimo

(a) Gerar pontos suportes aleatórios x_1, x_2, \dots, x_k em \mathcal{X} , de modo que

$$\det(f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_k)) \neq 0.$$

(b) Para $j = 0$ calcular o traço de $\mathbf{M}^{-1}(\xi_j)$, denotado por $Tr\mathbf{M}^{-1}(\xi_j)$, em que

$$\xi_j = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_k \\ w_1 & \dots & w_k \end{pmatrix},$$

sendo w_i os pesos ótimos, obtidos por

$$w_i = \frac{\sqrt{b_{ii}}}{\sum_{j \leq k} \sqrt{b_{jj}}},$$

para todos $i = 1, 2, \dots, k$, em que b_{ii} são os elementos diagonais da matriz $(\mathbf{X}\mathbf{X}')^{-1}$ e $\mathbf{X}' = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_k))$ é a matriz não singular $k \times k$.

(c) Para cada ponto suporte x_i é replicado um novo ponto x .

i) Denotando-se um novo delineamento $\xi_j(i, x)$ e a matriz de informação como

$$\mathbf{M}(\xi_j(i, x)) = \mathbf{M}(\xi_j) - w_i f(x_i) f'(x_i) + w_i f(x) f'(x),$$

em que w_i é o peso de x_i .

ii) Então muda-se x por x^* , que satisfaça

$$\text{Tr} \mathbf{M}^{-1}(\xi_j(i, x^*)) = \min_{x \in \mathcal{X}} (\text{Tr} \mathbf{M}^{-1}(\xi_j(i, x))).$$

iii) Calculam-se os pesos A-ótimos.

(d) Seja $j = j + 1$, denotando-se um novo delineamento ξ_j .

(e) Repetem-se os passos c-d até que a mudança relativa do valor critério A do novo delineamento seja menor que um pequeno valor positivo ε , isto é

$$\frac{[\text{Tr} \mathbf{M}^{-1}(\xi_{j+1}) - \text{Tr} \mathbf{M}^{-1}(\xi_j)]}{\text{Tr} \mathbf{M}^{-1}(\xi_{j+1})} < \varepsilon.$$

Em síntese, os algoritmos tipo *exchange* constituem uma técnica comum de busca de delineamentos ótimos, que para executá-los o passo inicial é discretizar a região experimental numa lista de pontos, formando o conjunto de candidatos (FERREIRA, 2011). Um delineamento é escolhido como suporte para a busca e seus pontos começam a ser trocados por pontos candidatos que, se melhorado o valor do critério pela permuta, esta é efetivada. Caso contrário, é rejeitada. Todo o espaço dos pontos candidatos é avaliado e permanece o delineamento que propicia o melhor valor do critério estipulado (CHEN; LIN, 2015).

É sabido que um aspecto importante quanto aos modelos não-lineares é a dependência da matriz de variâncias e covariâncias para os estimadores dos parâmetros em relação ao parâmetro β , tornando os critérios mencionados anteriormente também dependentes, não apenas da matriz de informação como foi o caso, mas também necessárias informações *a priori* sobre os mesmos parâmetros na fase de delineamentos.

Algo análogo ocorre na construção de planejamentos ótimos de experimento para Modelos Lineares Generalizados (MLGs) que esbarra no problema de que a obtenção do delineamento ótimo é totalmente dependente da matriz de delineamento e do modelo, através de seus parâmetros desconhecidos. Isso porque a função de variância é dependente da média e esta, por sua vez, através de uma função de ligação é dependente do vetor de parâmetros desconhecidos, por meio do preditor linear. Desta forma, a obtenção dos delineamentos ótimos está atrelada, não apenas à matriz de informação, mas, também, ao vetor de parâmetros, tornando este problema ainda não totalmente resolvido devido a este aspecto dificultador (PINTO; PEREIRA, 2012). Yang e Mandal (2015), por exemplo, definiram às condições necessárias para um delineamento D-ótimo no contexto MLG e ainda ilustraram a obtenção do mesmo para um caso real, definindo o número de réplicas a serem usadas.

2.7 Modelos Lineares Generalizados

Basicamente, a formulação de um Modelo Linear Generalizado (MLG) considera uma classe de distribuições que pertencem à família exponencial e, assim, flexibiliza a relação funcional entre a média da variável resposta e o preditor linear (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009).

Com esse propósito, McCulloch e Searle (2001) sugerem que a construção de um modelo linear generalizado seja dada em três decisões básicas:

- (i) Qual é a distribuição dos dados para valores fixos dos preditores e eventualmente após uma transformação?
- (ii) Qual a função da média que será modelada como linear nos preditores?
- (iii) Quais serão os preditores?

Em termos matriciais, considere o vetor Y_1, \dots, Y_n assumido para consistir medições independentes e aleatórias a partir de uma distribuição com uma densidade pertencente à família exponencial ou similar à família exponencial:

$$f(y_i, \theta_i, \phi) = \exp\{\phi[y_i \theta_i - b(\theta_i)] + c(y_i, \phi)\}, \quad (27)$$

em que $b(\theta)$ e $c(y, \theta)$ são funções específicas. O parâmetro θ é o parâmetro de localização e ϕ^{-1} é o parâmetro de dispersão.

Pode-se mostrar que a média e a variância da resposta y são dadas $\forall i$ por

$$E(Y_i) = \mu_i = b'(\theta_i) \text{ e } V(Y_i) = \phi^{-1} b''(\theta_i).$$

A parte da variância que não depende de θ é dada por $V(\mu_i) = d\mu_i/d\theta_i$ e é denominada de função de variância, que depende unicamente da sua média

μ . A função de variância desempenha papel importante na família exponencial por caracterizar a distribuição, tendo, assim, uma classe de distribuições correspondentes e vice-versa.

Escolhendo a distribuição de probabilidade, implicitamente são definidos a função de variância e o parâmetro de dispersão, sendo este constante para os membros da família exponencial.

2.7.1 Função de ligação

Usualmente deseja-se relacionar os parâmetros da distribuição a vários preditores e este procedimento é feito pela modelagem de transformação da média μ_i , através de uma função $g(\cdot)$ sendo uma função monótona e diferenciável, com um modelo linear nos preditores. Essa função conhecida, segundo McCulloch e Searle (2001) é denominada de função de ligação, representada por $g(\mu_i)$, na qual a relação com o preditor linear é verificada por:

$$g(\mu_i) = \eta_i = x_i' \beta \quad (28)$$

e

$$\mu_i = g^{-1}(\eta_i), \quad (29)$$

em que $i = 1, 2, \dots, n$ e $g(\cdot): D_{\mu_i} \rightarrow \mathbb{R}$, sendo D_{μ_i} o domínio correspondente de μ_i . Assim, nota-se que $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)$, $p < n$ é o vetor de parâmetros no preditor linear estimado em \mathbb{R}^p e x_i' é a i -ésima linha da matriz do modelo.

Para cada membro da família exponencial existe uma função de ligação natural, denominada de função de ligação canônica. Isso não significa que se está restrito ao uso dessa ligação canônica, todavia, deve-se compreender que esta ligação natural usufrui de certas vantagens teóricas e práticas (MYERS;

MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009). Isto é, garante-se uma estatística suficiente de dimensão igual a β , além de tornar aditivos os efeitos do componente sistemático. Para a função de ligação canônica, a seguinte relação é válida:

$$g[E(Y)] = \theta. \quad (30)$$

O entendimento da função de ligação canônica se inicia ao se identificar o parâmetro θ na descrição da família exponencial.

Tabela 1 Principais distribuições pertencentes à família exponencial.

Modelos	Normal	Poisson	Binomial	Gama	Normal Inversa
θ	μ	$\log \mu$	$\log[\mu/(1 - \mu)]$	$-1/\mu$	$-1/2\mu^2$
$V(\mu)$	1	μ	$\mu(1 - \mu)$	μ^2	μ^3
Ligação Canônica	$\eta = \mu$	$\eta = \log \mu$	$\eta = \log \left[\frac{\mu}{1 - \mu} \right]$	$\eta = \mu^{-1}$	$\eta = \mu^{-2}$

2.7.2 Função desvio

Seja o logaritmo da função de verossimilhança definido por

$$L(\mu, y) = \sum_{i=1}^n L(\mu_i, y_i),$$

em que $\mu_i = g^{-1}(\theta_i)$. Para o modelo saturado, $n = p$, a função é definida por

$$L(y, y) = \sum_{i=1}^n L(y_i, y_i),$$

modelo para o qual os valores ajustados $\hat{\mu}_i$ são iguais às respostas observadas y_i . Quando $n < p$, $L(\mu_i, y_i)$ é substituída por $L(\hat{\mu}_i, y_i)$, assim como $\eta_i = x_i' \beta$ é substituído por $\hat{\eta}_i = x_i' \hat{\beta}$.

A função desvio (*deviance*) de um modelo qualquer é definida como sendo o desvio deste modelo em relação ao modelo saturado, conforme apresentado a seguir:

$$D(y, \hat{\mu}) = 2[L(y, y) - L(\hat{\mu}, y)], \quad (31)$$

que pode ser interpretado como a distância entre o logaritmo da função de verossimilhança do modelo saturado e do modelo que está sendo testado. Alternativamente ela pode ser expressa reescrevendo $D(y, \hat{\mu})$ em termos da família exponencial:

$$D(y, \hat{\mu}) = 2 \sum_{i=1}^n [y_i(\tilde{\theta}_i - \hat{\theta}_i) + b(\hat{\theta}_i) - b(\tilde{\theta}_i)], \quad (32)$$

em que $\tilde{\theta}_i$ e $\hat{\theta}_i$ são as estimativas de máxima verossimilhança de θ , provenientes dos modelos saturado e testado, respectivamente.

Lindsey (1997) demonstra que $D(y, \hat{\mu})$ possui distribuição assintótica χ^2 , qui-quadrado, com $n - p$ graus de liberdade. Myers, Montgomery e Anderson-Cook (2009) argumentam que $D(y, \hat{\mu})$ é um teste de falta de ajuste, pois dado o modelo saturado obtém-se a reprodução exata dos dados. Assim, tendo esse modelo como referência, o modelo pesquisado é interpretado como uma medida que se aproxime da reprodução dos dados. Nesse contexto, a comparação é feita de modo que à medida que entram variáveis explanatórias no componente sistemático, a *deviance* decresce até se tornar zero para o modelo

saturado. Um modelo em questão bem ajustado, apresenta uma máxima verossimilhança grande e uma pequena *deviance*, portanto, justifica-se uma medida de falta de ajuste em relação ao modelo saturado.

Assumindo a distribuição de Poisson especificada em $y \sim \text{Poisson}(\mu)$, dado um desenvolvimento algébrico, identificamos o parâmetro canônico e suas funções específicas:

$$\begin{aligned} & \exp\{\log(e^{-\mu}\mu^y) - \log y!\} \\ & \exp\{\log(e^{-\mu}) + \log(\mu^y) - \log y!\} \\ & \exp\{-\mu + y \log \mu - \log y!\} \\ & \exp\{y \log \mu - \mu - \log y!\}. \end{aligned}$$

Obtém-se, comparando-a com a expressão (27):

$$\theta = \log \mu; \quad b(\theta) = \mu; \quad \phi = 1 \text{ e } c(y, \phi) = -\log y!.$$

Isolando μ , em $\theta = \log \mu$, obtém-se $\mu = e^\theta$, implicando em $b(\theta) = e^\theta$.

A média e a função de variância, respectivamente, são obtidas por:

$$b(\theta) = e^\theta \Rightarrow b'(\theta) = e^\theta = \mu \quad (33)$$

$$b''(\theta) = e^\theta \Rightarrow b'(\theta) = e^\theta = \mu$$

$$V(\mu) = \mu. \quad (34)$$

Naturalmente por se tratar do modelo Poisson $V(\mu) = \mu$. Considerando o parâmetro canônico $\theta = \eta$, sendo este um preditor linear, após a obtenção das estimativas utilizando um procedimento numérico, usualmente Newton-Raphson ou Escore de Fisher, torna-se viável verificar a falta de ajuste

por meio da *deviance*. Desta forma, utilizando a expressão (32), adaptando-a ao modelo Poisson, tem-se:

$$D(y, \hat{\mu}) = 2 \sum_{i=1}^n [y_i(\tilde{\theta}_i - \hat{\theta}_i) + b(\hat{\theta}_i) - b(\tilde{\theta}_i)].$$

Para o caso particular tem-se: $\hat{\theta}_i = \log \hat{\mu}_i$ e para o modelo completo $b(\tilde{\theta}_i) = \tilde{\mu}_i$. Assim, $b(\hat{\theta}_i) = \hat{\mu}_i$ e $\tilde{\theta}_i = \log \tilde{\mu}_i = \log y_i$, substituindo os respectivos termos, tem-se:

$$D(y, \hat{\mu}) = 2 \sum_{i=1}^n [y_i(\log y_i - \log \hat{\mu}_i) + \hat{\mu}_i - y_i],$$

para $y_i > 0$. Ou, alternativamente

$$D(y, \hat{\mu}) = 2 \sum_{i=1}^n [y_i \log(y_i/\hat{\mu}_i) - (y_i - \hat{\mu}_i)].$$

Seja a função de probabilidade da Poisson

$$f(\mu_i, y_i) = \frac{e^{-\mu_i} \mu_i^{y_i}}{y_i!}.$$

Fazendo $y_i = 0$, obtém-se

$$\begin{aligned} f(\tilde{\mu}_i, 0) &= e^{-\tilde{\mu}_i} = e^{-y_i} = 1 \text{ e} \\ f(\hat{\mu}_i, 0) &= e^{-\hat{\mu}_i}. \end{aligned}$$

Utilizando a expressão (31) da *deviance*, tem-se

$$D(y, \hat{\mu}) = \left\{ \sum_{i=1}^n \{2(\log f(\tilde{\mu}_i, 0) - \log f(\hat{\mu}_i, 0))\} \right\}$$

$$D(y, \hat{\mu}) = \left\{ \sum_{i=1}^n \{2(\log 1 - \log e^{-\hat{\mu}_i})\} \right.$$

$$D(y, \hat{\mu}) = \left\{ \sum_{i=1}^n 2\hat{\mu}_i. \right.$$

Desta forma, a *deviance* para a distribuição de Poisson para $y = 0$ e para $y > 0$, será

$$D(y, \hat{\mu}) = \begin{cases} 2 \sum_{i=1}^n y_i \log(y_i / \hat{\mu}_i) - (y_i - \hat{\mu}_i); & \text{para } y > 0 \\ \sum_{i=1}^n \{2\hat{\mu}_i\}; & \text{para } y = 0. \end{cases} \quad (35)$$

Para a distribuição normal, através de procedimento algébrico análogo, a *deviance* será:

$$D(y, \hat{\mu}) = \left\{ \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}_i)^2, \right. \quad (36)$$

que coincide com a soma de quadrados de resíduos e o desenvolvimento para se chegar à expressão (36) pode ser vista em Dobson e Barnett (2008).

3 METODOLOGIA

Em consonância com os objetivos propostos, a construção de um delineamento de mistura que preserve a propriedade de rotacionalidade é feita combinando um espaço restrito do simplex com um Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR).

Mediante o exposto, o DCCR com nove repetições do ponto central para dois componentes será:

$$D_w = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ -1,4142 & 0 \\ 1,4142 & 0 \\ 0 & -1,4142 \\ 0 & 1,4142 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} . \quad (37)$$

O valor 1,4142 é referente ao valor do ponto axial, obtido por $\sqrt[4]{M}$, em que $M = 2^{q-1}$. Sendo que q é o número de componentes de misturas que serão 3. Assim, $M = 2^{3-1} = 4$, implicando $\sqrt[4]{4} = 1,4142$.

A partir da matriz (37), as respectivas matrizes para os três componentes de misturas (consideradas na simulação dos dados) serão obtidas através da equação:

$$X = D_w T_1' H + [x_0'] .$$

Em que x_0 corresponde ao centroide do simplex, ou seja, $x_0 = (0,3333; 0,3333; 0,3333)$ e os demais elementos da equação foram implementados computacionalmente. Também será definido o vetor $h = (h_1, h_2, h_3)'$, que representa a extensão ou semi-amplitude do intervalo simétrico de interesse para a combinação i (1, 2, 3).

Para que a cada simulação realizada a matriz de delineamento seja aleatória e assegure o efeito de borda (fronteira do zero) no segundo componente e em menor intensidade no terceiro, o vetor h será definido da seguinte maneira:

$$h = (0,10; a; 0,10)' ,$$

em que a será um valor aleatório com três casas decimais, de tal modo que $0,119 \leq a \leq 0,289$. Este procedimento garantirá o processo aleatório na geração dos delineamentos de misturas rotacionais, efeito de borda (componente tendendo a zero) no segundo (maior intensidade) e terceiro componentes e, simultaneamente, não permitirá que haja o valor 0 exatamente para nenhum dos componentes, pois inviabilizaria a obtenção dos termos inversos, tornando desnecessário, desta forma, o uso de pseudocomponentes.

A título de ilustração, considere um caso particular para o vetor $h = (0,10; 0,15; 0,10)$. Sequencialmente, serão apresentados, para este valor específico de h , todos os resultados obtidos computacionalmente dos termos da equação $X = D_w T_1' H + [x_0']$, com o intuito de se obter a matriz do

delineamento rotacional de mistura \mathbf{X} , com exceção de \mathbf{D}_w (37), mas para efeito de simplificação será considerado apenas um ponto central.

$$\mathbf{T}_1 = \begin{bmatrix} -0,8320503 & -0,2690691 \\ 0,5547002 & -0,4036037 \\ 0,0000000 & 0,8744746 \end{bmatrix}, \quad (38)$$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0,10 & 0 & 0 \\ 0 & 0,15 & 0 \\ 0 & 0 & 0,10 \end{bmatrix} \text{ e} \quad (39)$$

$$[\mathbf{x}'_0] = \begin{bmatrix} 0,333 & 0,333 & 0,333 \\ 0,333 & 0,333 & 0,333 \\ 0,333 & 0,333 & 0,333 \\ 0,333 & 0,333 & 0,333 \\ 0,333 & 0,333 & 0,333 \\ 0,333 & 0,333 & 0,333 \\ 0,333 & 0,333 & 0,333 \\ 0,333 & 0,333 & 0,333 \end{bmatrix}. \quad (40)$$

Desta forma, com a expressão $\mathbf{X} = \mathbf{D}_w \mathbf{T}'_1 \mathbf{H} + [\mathbf{x}'_0]$, define-se a matriz \mathbf{X} a seguir com quatro casas decimais:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0,5855 & 0,2814 & 0,1330 \\ 0,2044 & 0,6625 & 0,1330 \\ 0,4622 & 0,0041 & 0,5336 \\ 0,0811 & 0,3852 & 0,5336 \\ 0,6028 & 0,0638 & 0,3333 \\ 0,0638 & 0,6028 & 0,3333 \\ 0,4205 & 0,5294 & 0,0501 \\ 0,2461 & 0,1372 & 0,6165 \\ 0,3333 & 0,3333 & 0,3333 \end{bmatrix}. \quad (41)$$

E a respectiva matriz com termos inversos:

$$X_{TI} = \begin{bmatrix} 0,5855 & 0,2814 & 0,1330 & 1,7079 & 3,5536 & 7,5187 \\ 0,2044 & 0,6625 & 0,1330 & 4,8923 & 1,5094 & 7,5187 \\ 0,4622 & 0,0041 & 0,5336 & 2,1635 & 243,9024 & 1,8740 \\ 0,0811 & 0,3852 & 0,5336 & 12,3304 & 2,5960 & 1,8740 \\ 0,6028 & 0,0638 & 0,3333 & 1,6589 & 15,6739 & 3,0003 \\ 0,0638 & 0,6028 & 0,3333 & 15,6739 & 1,6589 & 3,0003 \\ 0,4205 & 0,5294 & 0,0501 & 2,3781 & 1,8889 & 19,9600 \\ 0,2461 & 0,1372 & 0,6165 & 4,0633 & 7,2886 & 1,6220 \\ 0,3333 & 0,3333 & 0,3333 & 3,0003 & 3,0003 & 3,0003 \end{bmatrix}. \quad (42)$$

Após a geração do delineamento rotacional que contempla o efeito de borda, ou seja, o valor do segundo e terceiro, este em menor intensidade, componentes tendendo à fronteira do zero, controlada em diferentes distâncias, procedeu-se à obtenção das medidas do determinante e traço da inversa da matriz de informação $X'X$ do delineamentos rotacional. Também foi obtido o determinante da inversa da matriz de informação $X'X$ do delineamento D-ótimo e o traço para o A-ótimo, obtidos a partir dos delineamentos de misturas rotacionais, nos cenários de presença e ausência de efeito de borda. Para os três delineamentos de misturas mencionados, o modelo utilizado será $E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i$. Também foram obtidas as mesmas medidas nas matrizes dos delineamentos rotacionais, A-ótimos e D-ótimos, porém alocando nestas matrizes as colunas referentes aos termos inversos dos três componentes de misturas, e, neste caso, o modelo será $E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} x_i^{-1}$.

Considerando o ajuste de modelos, ressalva-se que neste trabalho não serão obtidos delineamentos ótimos no contexto de Modelos Lineares Generalizados, mas com o intuito de contribuição prática serão obtidos delineamentos ótimos para modelos lineares normais, entretanto ajustando MLGs para casos em que a resposta esperada seja uma contagem.

No que tange aos objetivos de ajustes de modelos, procedeu-se ao ajuste dos modelos normais em função dos preditores, com ausência dos termos inversos em η_1 (43) e com presença dos termos inversos em η_2 (44)

$$\eta_1 = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 \quad (43)$$

e

$$\begin{aligned} \eta_2 = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 + \beta_{-1} x_1^{-1} + \beta_{-2} x_2^{-1} \\ + \beta_{-3} x_3^{-1}. \end{aligned} \quad (44)$$

Para o modelo Poisson, objetivando-se analisar os efeitos do uso termos inversos unicamente sobre os componentes que tendem a zero com maior intensidade, sobretudo o segundo, foram definidos o preditor η_3 (45), com termo inverso no primeiro componente e o preditor η_4 (46) também com termos inversos no segundo e terceiro componentes:

$$\eta_3 = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 + \beta_{-1} x_1^{-1}, \quad (45)$$

e

$$\begin{aligned} \eta_4 = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 + \beta_{-1} x_1^{-1} + \beta_{-2} x_2^{-1} \\ + \beta_{-3} x_3^{-1}. \end{aligned} \quad (46)$$

Para o modelo normal utilizou-se a função de ligação identidade (47), naturalmente por μ assumir valores em $(-\infty, \infty)$. Em relação ao modelo Poisson, dado $\mu > 0$, utilizou-se a função de ligação (48):

$$\eta = \mu \quad (47)$$

e

$$\eta = \log \mu. \quad (48)$$

Para cada delineamento gerado, ao usar o modelo normal, um vetor Y de valores da distribuição normal será obtido, ou seja, $Y \sim N(0, 6)$. E para o modelo de Poisson gerar um vetor de valores da distribuição de Poisson, com vetor de médias $\lambda = \mu$, será considerada a função de ligação canônica. Assim,

$$u = e^{x'\beta}. \quad (49)$$

Para formar o preditor linear $x'\beta$, x' será a matriz X_{TI} (42) e $\beta = (0,41; 0,99; 5,75; 0,02; 0,003; 0,0001)$ e, assim, a cada simulação realizada um novo vetor distinto de valores será gerado.

Seguindo essas especificações, os cenários avaliados no estudo de simulação estão descritos na Tabela 2.

Tabela 2 Resumo dos cenários avaliados no procedimento Monte Carlo.

Efeito de borda	Modelo ajustado	Delineamento usado
Presença	Normal	Rotacional
		D-ótimo
		A-ótimo
	Poisson	Rotacional p/ modelo normal
		D-ótimo p/ modelo normal
		A-ótimo p/ modelo normal
Ausência	Normal	Rotacional
		D-ótimo
		A-ótimo
	Poisson	Rotacional p/ modelo normal
		D-ótimo p/ modelo normal
		A-ótimo p/ modelo normal

As hipóteses a serem testadas em relação à presença dos termos inversos, considerando o modelo normal, são descritas a seguir por:

$$\begin{cases} H_0: \beta_{-1} = \beta_{-2} = \beta_{-3} = 0 \\ H_1: \beta_{-i} \neq 0 \text{ para pelo menos um } i, \text{ com } i = 1, 2 \text{ e } 3. \end{cases}$$

Neste sentido, a rejeição indica que pelo menos um dos termos inversos torna a regressão mais adequada. Ou seja, diferencia o uso, ou não, dos termos inversos nos respectivos ajustes, utilizando as três propriedades de delineamentos.

A estatística de teste é definida por:

$$F = \frac{(RSS_R - RSS_C)/(q - p)}{(RSS_C)/(n - p)} \sim F_{(q-p, n-p)}.$$

Em que RSS_R é a soma dos quadrados residuais do modelo reduzido (p parâmetros) e RSS_C a do modelo completo (q parâmetros) da análise de variância usual, sob a hipótese nula de que os parâmetros das variáveis faltantes no modelo reduzido são equivalentes a zero (DANTAS; MEDEIROS; LUSTOSA, 2013; FARAWAY, 2002; MOTULSKY; CHRISTOPOULOS, 2003).

Para o caso particular das hipóteses estatísticas formuladas nos dois modelos, ter-se-á:

$$F = \frac{(RSS_R - RSS_C)/(9 - 6)}{RSS_C/(17 - 6)} \sim F_{(3, 11)}.$$

Em relação ao modelo Poisson as hipóteses a serem testadas foram especificadas da seguinte forma:

$$\begin{cases} H_0: \beta_{-2} = \beta_{-3} = 0 \\ H_1: \beta_{-i} \neq 0 \text{ para pelo menos um } i, \text{ com } i = 1 \text{ e } 2. \end{cases}$$

Assim, por meio da deviance

$$D_j(y, \hat{\mu}) = \begin{cases} 2 \sum_{i=1}^n y_i \log(y_i / \hat{\mu}_i) - (y_i - \hat{\mu}_i); \text{ para } y > 0 \\ \sum_{i=1}^n \{2\hat{\mu}_i\}; \text{ para } y = 0 \end{cases}, \quad j = 1, 2,$$

tornou-se possível avaliar a significância do modelo, preditor η_4 (46), com todos os termos inversos (D_1) e o modelo que usou termo inverso somente no primeiro componente (D_2). Logo, segundo Myers, Montgomery e Anderson-Cook (2009):

$$(D_2 - D_1) \stackrel{a}{\sim} \chi^2_2.$$

Para todos os cenários (Tabela 2), em ambos os modelos foram realizadas 1.000 simulações, das quais se obteve a distribuição empírica dos quadrados médios residuais e das *deviances*, assim como os *p*-valores dos testes de falta de ajuste foram confrontados com o nível de significância fixado em 5 e 10%, por meio de rotinas computacionais elaboradas no software R (R CORE TEAM, 2015).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Análise e quantificação das medidas de interesse da inversa da matriz de informação dos delineamentos sobre a presença e ausência de efeito de borda com e sem termos inversos

Na Tabela 3 abaixo as medidas referentes a inversa da matriz de informação $X'X$ do delineamento rotacional, são provenientes da matriz X , 41, sem a repetição do ponto central. Isto deve-se ao fato que é possível obter uma extensiva família de delineamentos rotacionais de misturas com presença e ausência do efeito de borda em alguns dos componentes. Os delineamentos ótimos foram obtidos a partir de um grupo de delineamentos rotacionais, com um delineamento inicial sorteado como suporte para a busca e seus pontos são trocados por pontos candidatos até que as trocas não alterem de forma significativa a função critério, isto para evitar ótimo locais.

Pela Tabela 3 é observável, como esperado, que em todos os cenários avaliados as medidas dos determinantes e dos traços, critérios dos delineamentos D-ótimos e A-ótimos respectivamente, foram inferiores às do rotacional, pois estes critérios, respectivamente, visam minimizar o determinante e o traço da inversa da matriz de informação.

Pelos perfis dos delineamentos ora estudados, ou seja, com um dos ensaios experimentais presente no delineamento de mistura muito próximo do vértice do simplex, isto implicará a diminuição do determinante e traço, como constata-se pela tabela 3 na presença do efeito de borda. Este fato é um complicador na definição dos delineamentos D-ótimos, porque quão mais próximo do vértice estiver este ponto experimental, menor será o valor do determinante, dificultando, neste sentido, a definição do delineamento ótimo.

Por conseguinte, a busca pelo delineamento D-ótimo, torna-se mais complexa, fazendo com que a convergência do algoritmo de busca seja mais lenta.

Ainda pela Tabela 3, entretanto analisando a inclusão dos termos inversos, constata-se nas três propriedades de delineamentos avaliadas que a análise do determinante, enquanto definição do delineamento mais adequado não é algo trivial devido a obtenção da baixa magnitude numérica desta medida, sobretudo na presença do efeito de borda. Ou seja, oscilações do ponto ao redor da fronteira do vértice do simplex, aspecto considerado no perfil dos delineamentos ora estudados, provocarão desprezíveis modificações no valor do determinante, tornando o diagnóstico do delineamento D-ótimo muito mais trabalhoso e difícil de ser definido. Assim, com único ponto próximo a fronteira do simplex, mudanças significativas nos demais pontos no espaço do simplex, implicará em alterações desprezíveis no valor desta medida ao considerar na matriz X de delineamento as colunas referentes ao termos inversos. No que tange a análise do traço, a análise é semelhante, todavia a sua magnitude numérica é alta.

Diante do exposto, recomenda-se que com um único ponto tendendo ao vértice do simplex, a comparação dos delineamentos via os critérios do determinante e traço seja realizada por meio da análise da matriz de delineamento sem a inclusão dos termos inversos na mesma, ou seja, incluindo os termos inversos diretamente na matriz de delineamento ótima resultante.

Tabela 3 Quantificação das medidas de interesse na inversa da matriz de informação dos delineamentos Rotacionais, D-ótimos e A-ótimos sobre a presença e ausência de efeito de borda com e sem termos inversos.

Sem termo inverso			
Efeito de borda	Delineamento	Medidas	Valor
Presença	Rotacional	Determinante	1,34
	Rotacional	Traço	4,26
	D-ótimo	Determinante	0,31
	A-ótimo	Traço	2,55
Ausência	Rotacional	Determinante	1,49
	Rotacional	Traço	4,43
	D-ótimo	Determinante	0,38
	A-ótimo	Traço	2,77
Com termo inverso			
Presença	Rotacional	Determinante	$9,6 \times 10^{-9}$
	Rotacional	Traço	19,49
	D-ótimo	Determinante	$5,1 \times 10^{-8}$
	A-ótimo	Traço	13,17
Ausência	Rotacional	Determinante	$8,3 \times 10^{-6}$
	Rotacional	Traço	27,31
	D-ótimo	Determinante	$10,1 \times 10^{-6}$
	A-ótimo	Traço	29,60

4.2 Análise exploratória do ajuste do modelo linear normal com e sem termos inversos na presença e ausência de efeito de borda em alguns dos componentes de misturas

Com o propósito de comparar a eficiência através do Quadrado Médio Residual (QMR) obtido nos delineamentos ótimos, considerando o modelo normal na presença e ausência de termos inversos em 1000 simulações Monte Carlo, foi computada a porcentagem das estimativas dos QMRs obtida nos delineamentos A-ótimos e D-ótimos, que foram inferiores àquelas observadas nos delineamentos originais (Rotacionais) assumidos.

Tendo como referência os resultados descritos na Tabela 4, observa-se, que considerando a presença do efeito de borda em parte dos componentes de misturas, em 58% dos casos os delineamentos A-ótimos produziram delineamentos que implicaram em ajustes dos modelos lineares normais de misturas (sem termos inversos) com menores QMRs, comparado com os rotacionais. Utilizando os delineamentos D-ótimos, estes em 46% implicaram em ajustes dos modelos com menores QMRs, também comparados com os rotacionais.

Em relação à inclusão de termos inversos e, ainda, considerando a presença do efeito de borda em parte dos componentes, nota-se que em 59% dos casos os delineamentos A-ótimos produziram delineamentos que implicaram em ajustes dos modelos com menores QMRs, comparados com os rotacionais. Considerando os delineamentos D-ótimos, estes em 66% dos casos implicaram em ajustes dos modelos com menores QMRs, também comparados com os rotacionais. Aspecto que distingue o delineamento D-ótimo de quando não se utilizou os termos inversos nos ajustes do modelo, pois a porcentagem foi de 46% apenas (Tabela 4).

Analisando o cenário de ausência do efeito de borda nos componentes (Tabela 4), sem o uso dos termos inversos, observa-se que em 51% dos casos o uso dos delineamentos A-ótimos implicaram em menores QMRs, comparados com os rotacionais. E o uso dos D-ótimos implicaram em ajustes dos modelos com menores QMRs em maior porcentagem, 53%, também comparados com os rotacionais. Observa-se que os cenários sugerem distinções acerca da análise do menor QMR, quando mantido ou não o efeito de borda, pois os cenários se alternaram na superioridade das proporções, ou seja, na ausência do efeito de borda nos componente sem termos inversos a maior proporção dos menores QMRs ocorreu quando se usou o D-ótimo.

Com a inclusão dos termos inversos, ainda pela Tabela 4, verificou-se que ao considerar a ausência do efeito de borda nos componente, nota-se que 55% dos experimentos simulados o uso dos delineamentos A-ótimos resultaram em menores QMRs, comparados com os rotacionais. Já os delineamentos D-ótimos apresentaram uma porcentagem com 61% de inferioridade dos QMRs aos rotacionais.

Mediante o exposto, verifica-se que o delineamento A-ótimo foi superior ao rotacional em todos os cenários avaliados. Porém, convém salientar que o D-ótimo foi o mais promissor ao considerar a inclusão dos termos inversos, devido às diferenças das porcentagens obtidas nas comparações efetuadas, sobretudo na presença do efeito de borda em parte dos componentes.

Tabela 4 Porcentagens de delineamentos ótimos que resultaram em quadrados médios residuais inferiores ao delineamento original (Rotacional), ajustando o modelo normal com e sem termos inversos na presença e ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.

Sem termos inversos		
Efeito de borda	A-ótimo	D-ótimo
Presença	58%	46%
Ausência	51%	53%
Com termos inversos		
Presença	59%	66%
Ausência	55%	61%

Em síntese, constatou-se que ao analisar a precisão dos ajustes dos modelos lineares normais, sem termos inversos no cenário de presença de efeito de borda em parte dos componentes, o uso dos delineamentos A-ótimos implicaram em maior precisão na maioria das vezes, ao compará-los com os rotacionais. Cenário não possuindo a mesma evidência se for considerado a ausência de efeito de borda nos componentes, caso em que se destacou de forma ligeiramente superior o D-ótimo sobre os demais.

Ademais, ao se considerar o uso dos termos inversos registra-se, frente a todas as situações descritas, que a precisão dos ajustes dos modelos foi consideravelmente maior quando utilizado o delineamento D-ótimo, mesmo que em menor intensidade na ausência do efeito de borda.

Os autores Zhang et al. (2005) ao estudar a eficiência dos delineamentos D-ótimos e A-ótimo em misturas acerca de uma situação proposta, em que a resposta dependeu não apenas dos respectivos componentes e variou-se o número de componentes, mostrou que o D-ótimo tem alta eficiência em termos do A-otimalidade e vice-versa. Com três componentes, o D-ótimo foi mais eficiente, não contrapondo o estudo realizado.

Em comparação realizada por Gomes e Diniz (2002), também entre critérios de otimalidade, em que foram feitas pequenas modificações nas proporções ótimas para contornar os problemas causados pela falta de ingredientes, o A-ótimo mostrou-se mais resistente, enquanto o D-ótimo foi mais sensível nessas modificações, aspecto discordante do cenário avaliado neste trabalho.

4.3 Desempenho do teste de falta de ajuste em relação a especificação do modelo sem termos inversos na presença e ausência de efeito de borda em alguns dos componentes de misturas

Tendo como referência os preditores η_1 (43) e η_2 (44), os resultados inferenciais obtidos referiram-se na significância dos termos inversos, com ajuste do Modelo Normal mediante cenários avaliados (Tabela 2). Nesse contexto, os testes F, de falta de ajuste, foram realizados em função dos níveis nominais de significância fixados em 5 e 10%. Os resultados encontram-se descritos na Tabela 5, com as estimativas das proporções de rejeição.

Tabela 5 Porcentagens de hipóteses rejeitadas pela estatística F de falta de ajuste, utilizando modelos com e sem termos inversos aos níveis de significâncias de 5 e 10% de probabilidades, usando três delineamentos no cenário de presença e ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.

Nível de significância	Efeito de borda	A-ótimo	D-ótimo	Original (Rotacional)
5%	Presença	16%	11%	26%
	Ausência	5%	2%	8%
10%	Presença	22%	15%	35%
	Ausência	8%	4%	13%

Pela Tabela 5, observa-se que considerando a presença do efeito de borda em parte dos componentes de misturas e nível de significância de 5% as

porcentagens de rejeição da hipótese nula foram 11, 16 e 26% para os delineamentos D-ótimo, A-ótimo e rotacional, respectivamente. Já, considerando a ausência de efeito de borda nos componentes as porcentagens de rejeição foram 2, 5 e 8% para os mesmos delineamentos. De forma semelhante, todavia utilizando nível de significância de 10%, as proporções de rejeição aumentaram, como esperado, e foram 15, 22 e 35% e ao considerar a ausência de efeito de borda obteve-se 4, 8 e 13% para os respectivos delineamentos.

Em suma, devido às porcentagens apresentadas da rejeição da hipótese nula, é perceptível que o uso de pelo menos um dos termos inversos possuiu maior relevância utilizando os delineamentos rotacionais, precedendo em grau intermediário o A-ótimo e em menor grau o D-ótimo, com relevância de destaque ao se considerar a presença do efeito de borda. Este é um resultado esperado em função dos estudos realizados, que ficou evidente a hierarquia, na ordem, dos delineamentos D-ótimo, A-ótimo e rotacional na precisão (menor QMR), sobre os ajustes dos modelos lineares normais, sobretudo ao se utilizar termos inversos com a presença do efeito de borda em parte dos componentes.

Ademais, o fato de se obter um menor quadrado médio residual em maior proporção nos delineamentos D-ótimos é um aspecto dificultador de diagnosticar diferenças significativas entre eles nos modelos com e sem os termos inversos, pelo fato dos QMRs, como mencionado, serem menores. Por conseguinte, é esperado que o diagnóstico de diferenças significativas entre o uso ou não de pelo menos um dos termos inversos sejam menos evidentes, respectivamente, no uso dos delineamentos D-ótimos, A-ótimos e rotacionais. Todavia, ficou relativamente evidenciado que há distinção entre considerar ou não o uso dos termos inversos nos ajustes dos modelos, sobretudo na presença do efeito de borda.

4.4 Deviance do modelo Poisson em relação ao uso dos termos inversos na presença e ausência do efeito de borda em alguns dos componentes de misturas

Os cenários de resultados apresentados sequencialmente são provenientes dos ajustes de dois modelos Poisson, considerando presença e ausência efeito de borda dos componentes de misturas nos preditores η_3 (45) e η_4 (46), em que o primeiro modelo, preditor η_3 (45), possuiu termo inverso somente no primeiro componente e o segundo modelo, preditor η_4 (46), também possuiu termos inversos nos segundo e terceiro componentes de misturas. Ressalva-se, que apenas os valores, sobretudo o segundo, do segundo e terceiro componentes de misturas tenderam à fronteira do zero. Os delineamentos de misturas consistiram em três perfis distintos simulados, ou seja, as propriedades de rotacionalidade, A-otimalidade e D-otimalidade dos modelos lineares normais, porém, ajustados modelos Poisson. Desta forma, ressalva-se que não foram obtidas as respectivas propriedades no contexto de MLGs.

Assim, com a finalidade de analisar a influência do uso dos termos inversos, especificamente nos componentes de misturas que tenderam à fronteira do zero sobre a precisão das estimativas das *deviances* oriundas do ajuste dos modelos Poisson, foram considerados os delineamentos Rotacionais, A-ótimos e D-ótimos para o modelo linear normal, cujos resultados estão evidenciados nas Figuras 5 - 6.

Em relação a presença do efeito de borda em parte dos componentes de misturas, Figura 5, os resultados simulados evidenciaram que ao considerar o primeiro modelo Poisson, preditor η_3 (45), houve diferenças no que tange a distribuição empírica descritiva das *deviances* obtidas, considerando-se os três perfis característicos de delineamentos. Observa-se menor dispersão dos valores das *deviances* quando se compara o perfil característico de ser D-ótimo com os

demais, assim como assimetria dos dados nos três cenários de delineamentos avaliados. A medida de tendência central, mediana, foi aproximadamente igual ao A-ótimo e D-ótimo e levemente superior a do rotacional.

Ainda pela Figura 5, entretanto analisando o ajuste do segundo modelo Poisson, preditor η_3 (46), percebeu-se nitidamente que houve diferenças significativas e relevantes acerca da dispersão da distribuição assimétrica das *deviances* nos três perfis de delineamentos avaliados. Veementemente, constata-se que essa dispersão foi regressiva e considerável entre os perfis característicos rotacionais, A-ótimos e D-ótimos, respectivamente. A mediana foi menor ao considerar o delineamento D-ótimo, comparado com os demais.

No contexto de ausência de efeito de borda nos componentes, Figura 6, ao ajustar o primeiro modelo Poisson, preditor η_3 (45), pôde-se perceber uma assimetria e menor dispersão dos valores quando comparados os perfis característicos dos delineamentos D-ótimos com o rotacionais e A-ótimos, assim como a mediana também foi inferior nesse delineamento. Ao se considerar o modelo 2, preditor η_3 (46), ainda pela Figura 6, percebe-se que as observações anteriores permanecem praticamente inalteradas ao comparar o delineamento D-ótimo (modelo linear normal) com os demais.

Observa-se, também, que a presença do efeito de borda impactou no surgimento de uma parcela de valores para as *deviances* que alterou, inclusive, a escala das Figuras 5 e 6.

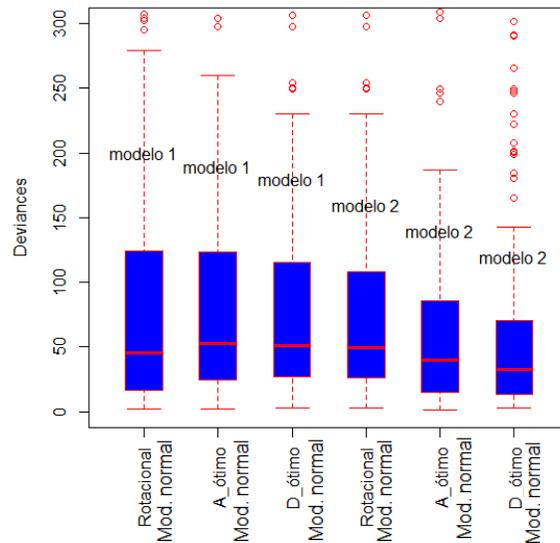


Figura 5 Box-plot para comparação das *deviances* no ajuste de 2 modelos de mistura Poisson, utilizando as propriedades de Rotacionalidade, A-ótimo e D-ótimo para os modelos normais com presença de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.

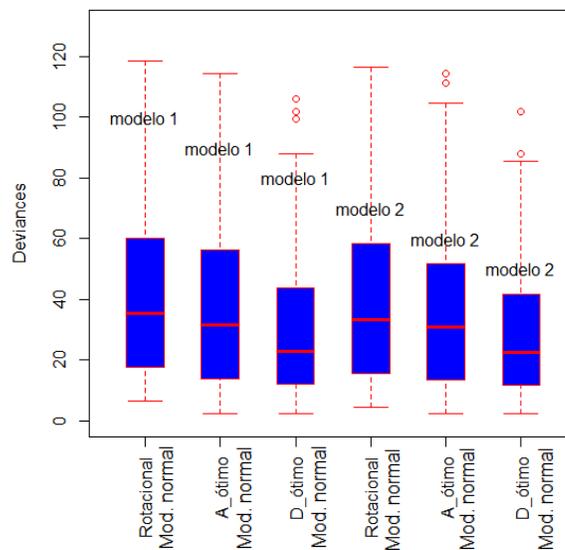


Figura 6 Box-plot para comparação das *deviances* no ajuste de 2 modelos de mistura Poisson, utilizando as propriedades de Rotacionalidade, A-ótimo e D-ótimo para os modelos normais com ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.

Em suma, a performance do ajuste do modelo Poisson ao analisar as suas *deviances* destacou-se positivamente ao considerar o delineamento D-ótimo (modelo linear normal), possuindo, ainda, maior destaque ao considerar o uso dos termos inversos também nos componentes de misturas que tenderam à fronteira do zero. Ao se considerar a ausência do efeito de borda nos componentes de misturas, persiste o destaque do delineamento D-ótimo (modelo linear normal), entretanto, a distribuição das *deviances* não sofreram mudanças relevantes, incluindo termos inversos também nos componentes que tenderam à fronteira do zero com maior intensidade, ou seja, presença de efeito de borda nestes componentes.

4.5 Inferência acerca dos parâmetros do modelo Poisson analisando o uso dos termos inversos na presença e ausência do efeito de borda em alguns dos componentes de misturas

Tendo como referência os preditores η_3 (45) e η_4 (46), os resultados inferenciais obtidos referiram-se na significância dos termos inversos no segundo e terceiro componentes de misturas, com ajuste do Modelo Poisson mediante os cenários avaliados (Tabela 2). Nesse contexto, os testes χ^2 , de falta de ajuste, foram realizados em função dos níveis nominais de significância fixados em 5 e 10%. Ressalva-se que apenas os valores, sobretudo do segundo, do segundo e terceiro componentes de misturas tenderam à fronteira do zero e os delineamentos consistiram em três perfis distintos simulados, isto é, as propriedades de rotacionalidade, A-otimalidade e D-otimalidade para os modelos normais, porém, ajustando modelos Poisson. Os resultados encontram-se descritos na Tabela 6, com as estimativas das porcentagens de rejeição.

Tabela 6 Porcentagens de hipóteses rejeitadas pela estatística χ^2 de falta de ajuste, ajustando dois modelos Poisson, considerando os níveis de significâncias de 5 e 10% de probabilidades, com três perfis de delineamentos do modelo linear normal no cenário de presença e ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.

Nível de significância	Efeito de borda	A-ótimo	D-ótimo	Original (Rotacional)
5%	Presença	19%	48%	68%
	Ausência	6%	5%	7%
10%	Presença	24%	57%	74%
	Ausência	8%	7%	9%

Pela Tabela 6 percebe-se que considerando a presença do efeito de borda em parte dos componentes de misturas ao nível de significância de 5%, as porcentagens de rejeição da hipótese nula foram 19, 48 e 68% para os delineamentos A-ótimo, D-ótimo e rotacional, respectivamente. Já, considerando a ausência de efeito de borda nos componentes as porcentagens de rejeição foram 6, 5 e 7% para os mesmos delineamentos. De forma semelhante, todavia utilizando nível de significância de 10%, como esperado, as proporções de rejeições aumentaram e foram de 24, 57 e 74% na presença do efeito de borda em parte dos componentes. E ao considerar a ausência de efeito de borda obteve-se 8,7 e 9% para os respectivos delineamentos.

Em síntese, é perceptível que o uso de pelo menos um dos termos inversos nos componentes de mistura que tenderam à fronteira do zero nos preditores dos modelos, possuem alta relevância utilizando os delineamentos com a característica de serem rotacionais e D-ótimo e, em menor grau, o

A-ótimo para o modelo linear normal. E indiferente ao uso dos termos inversos nos componentes que tenderam à fronteira do zero, havendo ausência de efeito de borda nos componentes, isto em todos os perfis de delineamentos estudados.

Os autores Vieira e Dal Bello (2006), ao planejar experimentos com mistura, ilustrada com o caso real do estudo de um misto químico que constitui um subsistema de um mecanismo de retardo para acionamento de um motor foguete, incluíram em seus estudos o D-otimalidade para definição do seu delineamento, assim como o ajuste de um modelo normal e um modelo linear generalizado Poisson, e enfatizaram, à época, que foi o único caso por eles conhecido que consideraram um experimento com mistura com resposta não normal. Tendo sido, neste estudo, o modelo normal considerado inadequado.

Frente a todos os resultados, constata-se que ao ajustar modelos Poisson, estes foram mais promissores e obtiveram maior êxito ao analisar suas *deviances*, considerando os delineamentos com características de ser D-ótimos para o modelo normal, por terem sido mais precisas ao obter menor dispersão e valor central da sua distribuição, preponderantemente com a presença do efeito de borda em parte dos componentes incluindo termos inversos nos componentes de mistura que estavam mais próximos do zero.

5 CONCLUSÕES

As análises realizadas sugerem que a precisão dos modelos lineares normais com termos inversos foi mais relevante ao analisar o quadrado médio residual ao considerar delineamentos D-ótimos de mistura em detrimento do A-ótimo e rotacional, com maior ênfase quando parte dos componentes do simplex estarem próximos de zero.

O uso dos termos inversos nos componentes do simplex que estão na fronteira do zero mostrou-se mais eficaz ao analisar a *deviance*, considerando a propriedade de D-otimalidade para o Modelo Normal, todavia ajustando Modelo Poisson.

6 TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho não se encerra com os resultados já obtidos. No intuito de aperfeiçoá-lo, pretende-se ainda:

- 1) Comparar os critérios A e D-otimalidade com a propriedade de rotacionalidade dos delineamentos de misturas, entretanto considerando a abordagem de mínimo viés;
- 2) Estudar, por meio de simulação de dados, os critérios de A e D-otimalidade para modelos lineares generalizados, no contexto de presença de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.

REFERÊNCIAS

- ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N.; TOBIAS, R. D. **Optimum experimental designs, with SAS**. Oxford: Oxford University Press, 2007. 511 p.
- BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. A basis for the selection of a response surface design. **Journal of the American Statistical Association**, New York, v. 54, p. 622-653, 1959.
- BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. **Response surfaces, mixtures, and ridge**. New Jersey: J. Wiley, 2007. 857 p.
- BUTLER, N. A. On the minimum bias response surface designs of Box and Draper. **Journal of Statistical Planning and Inference**, Amsterdam, v. 136, n. 9, p. 3221-3230, Sept. 2006.
- CHEN, R. B.; LIN, K. J. A note on conditionally optimal star points in central composite designs for response surface methodology. **Journal of Chinese Statistical Association**, Beijing, v. 53, n. 2, p. 145-157, June 2015.
- CORNELL, J. A. **Experiments with mixtures: designs, models, and the analysis of mixture data**. 3rd ed. New York: Wiley, 2002. 649 p.
- DANTAS, J. A.; MEDEIROS, O. R.; LUSTOSA, P. R. B. O papel de variáveis econômicas e atributos da carteira na estimação das provisões discricionárias para perdas em operações de crédito nos bancos brasileiros. **Brazilian Business Review - BBR**, Vitória, v. 10, n. 4, p. 69-95, 2013.
- DOBSON, A.; BARNETT, A. G. **An introduction to generalized linear models**. 3rd ed. New York: Chapman and Hall; CRC, 2008. 320 p.
- DRAPER, N. R.; JOHN, R. C. S. A mixtures model with inverse terms. **Technometrics**, Washington, v. 19, n. 1, p. 37-47, 1977.
- FARAWAY, J. J. **Practical regression and ANOVA using R**. 2002. Disponível em: <<http://cran.r-project.org/doc/contrib/Faraway-PRA.pdf>>. Acesso em: 19 jun. 2015.
- FERREIRA, I. E. P. **Delineamentos d-ótimos para os modelos de Michaelis-Menten e de Hill**. 2011. 83 p. Dissertação (Mestrado em Biometria) - Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 2011.

GOMES, P. L. S.; DINIZ, C. A. R. Eficiência de delineamentos quase-ótimos em experimentos com misturas. **Revista de Matemática e Estatística**, Marília, v. 20, n. 1, p. 195-206, 2002.

GOOS, P. et al. Model-robust and model-sensitive designs. **Computational Statistics**, Amsterdam, v. 49, n. 1, p. 201-216, Apr. 2005.

KHURI, A. I. **Advanced calculus with applications in statistics**. 2nd ed. Hoboken: Wiley, 2003. 672 p.

KLEIN, T. Invariant symmetric block matrices for the design of mixture experiments. **Linear Algebra and its applications**, v. 338, p. 261-278, 2004.

LIAO, H. C. **Construction of approximate optimal designs by Exchange algorithm**. 2001. 22 p. Thesis (Ph.D. in Applied Mathematics) - National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, 2001.

LINDSEY, J. K. **Applying generalized linear models**. New York: Springer-Verlag, 1997. 256 p.

MATEUS, N. B.; BARBIN, D.; CONAGIN, A. Viabilidade de uso do delineamento Composto Central. **Acta Scientiarum**, Maringá, v. 23, n. 6, p. 1537-1546, 2001.

MCCULLOCH, C. E.; SEARLE, S. R. **Generalized, linear, and mixed models**. 2nd ed. New York: J. Wiley, 2001. 325 p.

MOTULSKY, H.; CHRISTOPOULOS, A. **Fitting models to biological data using linear and nonlinear regression: a practical guide to curve fitting**. 2nd ed. San Diego: GraphPad Software, 2003. 351 p.

MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. **Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments**. 3rd ed. New York: Wiley, 2009. 1247 p.

PINTO, E. R.; PEREIRA, L. A. Planejamento ótimo de experimento para modelos lineares generalizados usando o software R. In: CONGRESSO NACIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, 34., 2012, Águas de Lindóia. **Anais...** Águas de Lindóia: CNMAC, 2012. p. 1260-1266.

R CORE TEAM. **R: a language and environment for statistical computing**. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2015. Disponível em: <<http://www.R-project.org/>>. Acesso em: 10 jul. 2015.

RODRIGUES, M. I.; LEMMA, A. F. **Planejamento de experimentos & otimização de processos**. 2. ed. Campinas: Cárita, 2009. 358 p.

RUGGOO, A.; VANDEBROEK, M. Model-sensitive sequential optimal designs. **Computational Statistics and Data Analysis**, Amsterdam, v. 51, n. 1, p. 1089-1099, 2006.

RYAN, T. P. **Modern experimental design**. Hoboken: Wiley, 2007. 593 p.

SCHEFFÉ, H. Experiments with mixtures. **Journal of the Royal Statistical Society. Series B**, London, v. 25, n. 2, p. 235-263, 1958.

VIEIRA, A. F. C.; BELLO, L. H. A. Experimentos com mistura para otimização de processos: uma aplicação com respostas não normais. **Pesquisa Operacional**, Rio de Janeiro, v. 26, n. 3, p. 605-623, 2006.

Yang, J.; MANDAL, A. D-optimal factorial designs under generalized linear models. **Communications in Statistics - Simulation and Computation**, Abingdon, v. 44, n. 9, p. 2264–2277, 2015.

ZEN, N. I. M. et al. The use of d-optimal mixture design in optimizing development of Okara tablet formulation as a dietary supplement. **Statistica Sinica**, New York, v. 2015, p. 1-7, 2015.

ZHANG, C. Q. et al. Optimal designs for an additive quadratic mixture model involving the amount of mixture. **Statistica Sinica**, New York, v. 15, p. 165-176, 2005.

ANEXOS

```

Rotinas utilizadas do programa R
rm(list=ls(all=TRUE))
#####
# Modelo linear normal – Presença de efeito de borda #####

# Função para obter delineamento Rotacional
funcao=function(w,h,x0)
{
source("Funcao_Matriz_T.txt")
f1=funcao(t(h)) ; T=f1$T1
source("Funcao_Matriz_H.txt")
f2=funcao(h) ; H=f2
source("Funcao_Matriz_X0.txt")
f3=funcao(x0, W) ; X0=f3
source("Funcao_Rho_min.txt")
f4=funcao(h, x0)
Rho_min=f4$Rho_min
c=Rho_min/((length(x0)-1)^0.5)
X= c*W%*%t(T)%*%H+X0
X=round(X,4) # Sem termo inverso
X
}

# Itens necessários para montar a matriz X de mistura rotacional ou não

w1=c(-1,1,-1,1,-1.4142, 1.4142, 0 ,0,0)
w2=c(-1,-1,1,1,0,0,-1.4142, 1.4142,0)
W=cbind(w1,w2) # sai com um ponto central
P_C=matrix(c(0),8,2)
W=rbind(W,P_C)
x0=c(0.3333,0.3333,0.3333) # ponto de interesse

# Gerando a simulação

nsim <- 1000
QM=matrix(0,nsim,6) # Formar uma matriz de quadrados médios
Porc=matrix(0,nsim,4) # Calcular a porcentagem
p_valor=matrix(0,nsim,3) # Matriz de p_valores do teste de falta de ajuste

```

```

# Início

for (i in 1:nsim)

  {

ponto=round(runif(1, min = 0.119, max = 0.289),3)
h=c(0.10,ponto,0.10)
X=funcao(W,h,x0) # gera a matriz X Aleatória
# Vetor de resposta
y= rnorm(nrow(X),0,(6^0.5)) # 6 é a variância comum, y é a resposta normal
simulada
##### Caso Del. rotacional, SEM termo inverso
X_M=cbind(X,X[,1]*X[,2],X[,1]*X[,3],X[,2]*X[,3])
modelo_a=lm(y~-1+X_M)
a=anova(modelo_a)
Quad_Medio_a=a$Mean[2]
QM[i,1] <- Quad_Medio_a
##### Caso Del. rotacional, COM termo inverso
X_TI=cbind(X,X[,1]*X[,2],X[,1]*X[,3],
           X[,2]*X[,3],(X[,1])^(-1),(X[,2])^(-1),(X[,3])^(-1))
modelo_b=lm(y~-1+X_TI)
b=anova(modelo_b)
Quad_Medio_b=b$Mean[2]
QM[i,2] <- Quad_Medio_b
##### Caso Del. A-ótimo, SEM termo inverso
w0 <-c(0.10,0.10,0.15,0.1,0.15,0.1,0.1,0.10)# maior peso para a fronteira
source("A_Otimo.txt")
ch_A <-gera_A(X[1:8,],w0,0.001,500)
F=rbind(ch_A$A_opt,X[9:17,]) # Matriz ótima
F_M=cbind(F,F[,1]*F[,2],F[,1]*F[,3],F[,2]*F[,3])
modelo_c=lm(y~-1+F_M)
c=anova(modelo_c)
Quad_Medio_A_Otimo_Sem_TI=c$Mean[2]
QM[i,3] <- Quad_Medio_A_Otimo_Sem_TI
# Cálculo da porcentagem

if (QM[i,3] <= QM[i,1]) Porc[i,1] = 1 else Porc[i,2] = 0
##### Caso Del. A-ótimo, com termo inverso
F_TI_O=cbind(F,F[,1]*F[,2],F[,1]*F[,3],F[,2]*F[,3],
             (F[,1])^(-1),(F[,2])^(-1),(F[,3])^(-1))

```

```

modelo_d=lm(y~-1+F_TI_O)
d=anova(modelo_d)
Quad_Medio_A_Otimo_COM_TI=d$Mean[2]
QM[i,4] <- Quad_Medio_A_Otimo_COM_TI
# Cálculo da porcentagem
if (QM[i,4] < QM[i,2]) Porc[i,2] = 1 else Porc[i,2] = 0
##### Caso Del. D-ótimo, SEM termo inverso
source("D_Otimo.txt")
ch_D <- gera_D(X[1:8,],w0,0.001,500)
G=rbind(ch_D$D_opt,X[9:17,]) # Matriz ótima
G_M=cbind(G,G[,1]*G[,2],G[,1]*G[,3],G[,2]*G[,3])
modelo_e=lm(y~-1+G_M)
e=anova(modelo_e)
Quad_Medio_D_Otimo_Sem_TI=e$Mean[2]
QM[i,5] <- Quad_Medio_D_Otimo_Sem_TI
# Cálculo da porcentagem
if (QM[i,5] < QM[i,1]) Porc[i,3] = 1 else Porc[i,3] = 0
##### Caso Del. D-ótimo, com termo inverso
G_TI_O=cbind(G,G[,1]*G[,2],G[,1]*G[,3],G[,2]*G[,3],
             (G[,1])^(-1),(G[,2])^(-1),(G[,3])^(-1))
modelo_f=lm(y~-1+G_TI_O)
f=anova(modelo_f)
Quad_Medio_D_Otimo_COM_TI=f$Mean[2]
QM[i,6] <- Quad_Medio_D_Otimo_COM_TI
# Cálculo da porcentagem
if (QM[i,6] < QM[i,2]) Porc[i,4] = 1 else Porc[i,4] = 0
# Teste de Falta de ajuste Caso Del. rotacional, com e sem TI
f1 <- ( (a$Sum[2]-b$Sum[2])/(6-3) )/ (b$Sum[2]/(17-6))
p_valor[i,1] <- round(1-pf(f1,3,11),5)
# Teste de Falta de ajuste Caso A-ótimo, com e sem TI
f2 <- ( (c$Sum[2]-d$Sum[2])/(6-3) )/ (d$Sum[2]/(17-6))
p_valor[i,2] <- round(1-pf(f2,3,11),5)
# Teste de Falta de ajuste Caso D-ótimo, com e sem TI
f3 <- ((e$Sum[2]-f$Sum[2])/f$Sum[2])*((17-9)/6)
p_valor[i,3] <- round(1-pf(f3,3,11),5)

} # FIM

# Porcentagem em que o Del. A-Ótimo SEM TI obteve QM erro menor
# que QM do rotacional também SEM TI

Porcentagem=sum(Porc[,1])/nsim;Porcentagem

```

```

# Porcentagem em que o Del. A-Ótimo COM TI obteve QM erro menor
# que QM do rotacional COM TI
Porcentagem=sum(Porc[,2])/nsim;Porcentagem
# Porcentagem em que o Del. D-Ótimo SEM TI obteve QM erro menor
# que QM do rotacional também SEM TI
Porcentagem=sum(Porc[,3])/nsim;Porcentagem
# Porcentagem em que o Del. D-Ótimo COM TI obteve QM erro menor
# que QM do rotacional COM TI
Porcentagem=sum(Porc[,4])/nsim;Porcentagem

# Médias gerais dos quadrados médios dos erros dos delineamentos utilizados:
# Rotacional SEM TI
Média_QM=mean(QM[,1]);Média_QM
# Rotacional COM TI
Média_QM=mean(QM[,2]);Média_QM
# A_ótimo SEM TI
Média_QM=mean(QM[,3]);Média_QM
# A_ótimo COM TI
Média_QM=mean(QM[,4]);Média_QM
# D_ótimo SEM TI
Média_QM=mean(QM[,5]);Média_QM
# D_ótimo COM TI
Média_QM=mean(QM[,6]);Média_QM

# Teste de Falta de ajuste Caso Del. rotacional com e sem TI
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 5%
(length(p_valor[,1][p_valor[,1]<=0.05])/length(p_valor[,1]))*nsim
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 10%
(length(p_valor[,1][p_valor[,1]<=0.10])/length(p_valor[,1]))*nsim
# Teste de Falta de ajuste Caso A-ótimo, com e sem TI
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 5%
(length(p_valor[,2][p_valor[,2]<=0.05])/length(p_valor[,2]))*nsim
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 10%
(length(p_valor[,2][p_valor[,2]<=0.10])/length(p_valor[,2]))*nsim
# Teste de Falta de ajuste Caso D-ótimo, com e sem TI
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 5%
(length(p_valor[,3][p_valor[,3]<=0.05])/length(p_valor[,3]))*nsim
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 10%
(length(p_valor[,3][p_valor[,3]<=0.10])/length(p_valor[,3]))*nsim

# Gráfico boxplot
# SEM TI

```

```
boxplot(QM[,1],QM[,3],QM[,5],xlab="Delineamentos utilizados - Modelo  
linear normal ",ylab="Quadrados médios  
residuais",names=c("Rotacional","A_ótimo","D_ótimo"),  
boxwex=0.5,border="red",col="blue",staplewex=0.9, ylim=c(0,15),  
main="SEM Termos Inversos – Presença de efeito de borda")
```

```
# COM TI
```

```
boxplot(QM[,2],QM[,4],QM[,6],xlab="Delineamentos utilizados - Modelo  
linear normal",ylab="Quadrados médios  
residuais",names=c("Rotacional","A_ótimo","D_ótimo"),  
boxwex=0.5,border="red",col="blue",staplewex=0.9, ylim=c(0,15),  
main="COM Termo Inverso – Ausência de efeito de borda")
```

```

# Modelo Poisson- Presença de efeito de borda #####

# Gerando a simulação
beta_TI=c(0.41, 0.99, 5.75,0.02,0.003,0.0001)
nsim <- 1000
DEV=matrix(0,nsim,6) # Formar uma matriz de quadrados médios
Porc=matrix(0,nsim,4) # Calcular a porcentagem
p_valor=matrix(0,nsim,3) # Matriz de p_valores do teste de falta de ajuste
# Início

for (i in 1:nsim)
  {
ponto=round(runif(1, min = 0.119, max = 0.289),3)
h=c(0.10,ponto,0.10)
X=funcao(W,h,x0) # gera a matriz X Aleatória
X_TI=cbind(X,(X[,1])^(-1),(X[,2])^(-1),(X[,3])^(-1))
mu_TI <- exp(X_TI%*%beta_TI)
# Vetor de resposta
y_TI <- rpois(nrow(X_TI), lam=mu_TI)
##### Caso Del. rotacional, SEM termo inverso
X_M=cbind(X,X[,1]*X[,2],X[,1]*X[,3],X[,2]*X[,3],(X[,1])^(-1))
modelo_a=glm(y_TI~-1+X_M,family=poisson(link = "log") )
DEVIANCE_a=modelo_a$deviance
DEV[i,1] <- DEVIANCE_a
##### Caso Del. rotacional, COM termo inverso
X_TI=cbind(X,X[,1]*X[,2],X[,1]*X[,3],
           X[,2]*X[,3],(X[,1])^(-1),(X[,2])^(-1),(X[,3])^(-1))
modelo_b=glm(y_TI~-1+X_TI,family=poisson(link = "log"))
DEVIANCE_b=modelo_b$deviance
DEV[i,2] <- DEVIANCE_b
##### Caso Del. A-ótimo, SEM termo inverso
w0 <-c(0.10,0.10,0.15,0.10,0.15,0.10,0.10,0.10) # maior peso para a fronteira
source("A_Otimo.txt")
ch_A <- gera_A(X[1:8,],w0,0.001,500)
F=rbind(ch_A$A_opt,X[9:17,]) # Matriz ótima
F_M=cbind(F,F[,1]*F[,2],F[,1]*F[,3],F[,2]*F[,3],(F[,1])^(-1))
modelo_c=glm(y_TI~-1+F_M,family=poisson(link = "log"))
DEVIANCE_A_Otimo_Sem_TI=modelo_c$deviance
DEV[i,3] <- DEVIANCE_A_Otimo_Sem_TI
# Cálculo da porcentagem

if (DEV[i,3] <= DEV[i,1]) Porc[i,1] = 1 else Porc[i,1] = 0

```

```

##### Caso Del. A-ótimo, com termo inverso
F_TI_O=cbind(F,F[,1]*F[,2],F[,1]*F[,3],F[,2]*F[,3],
             (F[,1])^(-1),(F[,2])^(-1),(F[,3])^(-1))
modelo_d=glm(y_TI~-1+F_TI_O,family=poisson(link = "log"))
DEVIANCE_A_Otimo_COM_TI=modelo_d$deviance
DEV[i,4] <- DEVIANCE_A_Otimo_COM_TI
# Cálculo da porcentagem
if (DEV[i,4] < DEV[i,2]) Porc[i,2] = 1 else Porc[i,2] = 0
##### Caso Del. D-ótimo, SEM termo inverso
source("D_Otimo.txt")
ch_D <- gera_D(X[1:8,],w0,0.001,200)
G=rbind(ch_D$D_opt,X[9:17,]) # Matriz ótima
G_M=cbind(G,G[,1]*G[,2],G[,1]*G[,3],G[,2]*G[,3],
          (G[,1])^(-1))
modelo_e=glm(y_TI~-1+G_M,family=poisson(link = "log"))
DEVIANCE_D_Otimo_Sem_TI=modelo_e$deviance
DEV[i,5] <- DEVIANCE_D_Otimo_Sem_TI
# Cálculo da porcentagem
if (DEV[i,5] < DEV[i,1]) Porc[i,3] = 1 else Porc[i,3] = 0
##### Caso Del. D-ótimo com todos os termos inversos
G_TI_O=cbind(G,G[,1]*G[,2],G[,1]*G[,3],G[,2]*G[,3],
            (G[,1])^(-1),(G[,2])^(-1),(G[,3])^(-1))
modelo_f=glm(y_TI~-1+G_TI_O,family=poisson(link = "log"))
DEVIANCE_D_Otimo_COM_TI=modelo_f$deviance
DEV[i,6] <- DEVIANCE_D_Otimo_COM_TI
# Cálculo da porcentagem
if (DEV[i,6] < DEV[i,2]) Porc[i,4] = 1 else Porc[i,4] = 0
# Teste de Falta de ajuste Caso Del. rotacional, com e sem TI
f1 <- modelo_a$deviance - modelo_b$deviance # diferença de deviance
prob_dev <- 1-pchisq(f1,2)
p_valor[i,1] <- round(prob_dev,5)
# Teste de Falta de ajuste Caso A-ótimo, com e sem TI
f2 <- modelo_c$deviance - modelo_d$deviance # diferença de deviance
prob_dev <- 1-pchisq(f2,2)
p_valor[i,2] <- round(prob_dev,5)
# Teste de Falta de ajuste Caso D-ótimo, com e sem TI
f3 <- modelo_e$deviance - modelo_f$deviance # diferença de deviance
prob_dev <- 1-pchisq(f3,2)
p_valor[i,3] <- round(prob_dev,5)

} # FIM

```

```

# Porcentagem em que o Del. A-Ótimo SEM TI obteve DEV erro menor
# que DEV do rotacional também SEM TI
Porcentagem=sum(Porc[,1])/nsim;Porcentagem
# Porcentagem em que o Del. A-Ótimo COM TI obteve DEV erro menor
# que DEV do rotacional COM TI
Porcentagem=sum(Porc[,2])/nsim;Porcentagem
# Porcentagem em que o Del. D-Ótimo SEM TI obteve DEV erro menor
# que DEV do rotacional também SEM TI
Porcentagem=sum(Porc[,3])/nsim;Porcentagem
# Porcentagem em que o Del. D-Ótimo COM TI obteve DEV erro menor
# que DEV do rotacional COM TI
Porcentagem=sum(Porc[,4])/nsim;Porcentagem
# Médias gerais dos quadrados médios dos erros dos delineamentos utilizados:
# Rotacional SEM TI
Média_DEV=mean(DEV[,1]);Média_DEV
# Rotacional COM TI
Média_DEV=mean(DEV[,2]);Média_DEV
# A_ótimo SEM TI
Média_DEV=mean(DEV[,3]);Média_DEV
# A_ótimo COM TI
Média_DEV=mean(DEV[,4]);Média_DEV
# D_ótimo SEM TI
Média_DEV=mean(DEV[,5]);Média_DEV
# D_ótimo COM TI
Média_DEV=mean(DEV[,6]);Média_DEV
# Teste de Falta de ajuste Caso Del. rotacional com e sem TI
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 5%
(length(p_valor[,1][p_valor[,1]<=0.05])/length(p_valor[,1]))*nsim
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 10%
(length(p_valor[,1][p_valor[,1]<=0.10])/length(p_valor[,1]))*nsim
# Teste de Falta de ajuste Caso A-ótimo, com e sem TI
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 5%
(length(p_valor[,2][p_valor[,2]<=0.05])/length(p_valor[,2]))*nsim
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 10%
(length(p_valor[,2][p_valor[,2]<=0.10])/length(p_valor[,2]))*nsim
# Teste de Falta de ajuste Caso D-ótimo, com e sem TI
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 5%
(length(p_valor[,3][p_valor[,3]<=0.05])/length(p_valor[,3]))*nsim
# Expressão para calcular o número de Hip. nulas rejeitadas 10%
(length(p_valor[,3][p_valor[,3]<=0.10])/length(p_valor[,3]))*nsim
# Gráfico boxplot
DEV[,2]

```

```
# SEM TI
boxplot(DEV[,1],DEV[,3],DEV[,5],DEV[,2],DEV[,4],DEV[,6],las=3,ylab="De
viances",
names=c("Rotacional","A_ótimo","D_ótimo",
"Rotacional","A_ótimo","D_ótimo"),
boxwex=0.5,border="red",col="blue",staplewex=0.9,ylim=c(0,300))
text(1,200,"modelo 1")
text(2,190,"modelo 1")
text(3,180,"modelo 1")
text(4,160,"modelo 2")
text(5,140,"modelo 2")
text(6,120,"modelo 2")
```