



HAIANY APARECIDA FERREIRA

**OTIMIZAÇÃO DE FATORES PARA A CLONAGEM EM *COFFEA*
ARABICA UTILIZANDO CORRELAÇÃO CANÔNICA EM
EXPERIMENTOS ROTACIONAIS SUBDIVISÍVEIS EM BLOCOS**

LAVRAS – MG

2023

HAIANY APARECIDA FERREIRA

**OTIMIZAÇÃO DE FATORES PARA A CLONAGEM EM *COFFEA ARABICA*
UTILIZANDO CORRELAÇÃO CANÔNICA EM EXPERIMENTOS ROTACIONAIS
SUBDIVISÍVEIS EM BLOCOS**

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

Prof. Dr. Marcelo Ângelo Cirillo
Orientador

**LAVRAS – MG
2023**

**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, Haiany Aparecida.

Otimização de fatores para a clonagem em coffea arabica
utilizando correlação canônica em experimentos rotacionais
subdivisíveis em blocos / Haiany Aparecida Ferreira. - 2023.
84 p.

Orientador(a): Marcelo Ângelo Cirillo.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2023.
Bibliografia.

1. Simulação monte carlo. 2. D-ótimo. 3. Segmentos caulinares.
I. Cirillo, Marcelo Ângelo. II. Título.

HAIANY APARECIDA FERREIRA

**OTIMIZAÇÃO DE FATORES PARA A CLONAGEM EM *COFFEA ARABICA*
UTILIZANDO CORRELAÇÃO CANÔNICA EM EXPERIMENTOS ROTACIONAIS
SUBDIVISÍVEIS EM BLOCOS**

**FACTOR OPTIMIZATION FOR CLONING IN COFFEA ARABICA USING
CANONICAL CORRELATION IN BLOCK SUBDIVISIBLE ROTATIONAL
EXPERIMENTS**

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

APROVADA em 23 de Maio de 2023.

Profa. Dra Evelise Roman Corbalan Gois Freire	UFLA
Prof. Dr. Tales Jesus Fernandes	UFLA
Prof. Dr. Tiago Teruel Rezende	UFLA
Profa. Dra. Jackelya Araujo da Silva	UFPI

Prof. Dr. Marcelo Ângelo Cirillo
Orientador

**LAVRAS – MG
2023**

Dedico primeiramente a Deus, aos meus pais Arivaldo e Regiane, meus irmãos Higor e Kaylon e meus cães Teemo e Kai'Sa.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer a Deus pois sem Ele nada disso seria possível. Ao apoio constante dos meus pais Arivaldo e Regiane e dos meus irmãos Higor e Kaylon. Ao meu orientador professor Marcelo Ângelo Cirillo por toda orientação e paciência durante este doutorado.

Aos meus avós Isabel e José por estarem sempre presentes. Aos meus amigos que ao longo dessa caminhada mesmo com a correria sempre me apoiaram mesmo a distância, e não menos importante, aos meus cães Teemo e Kai'Sa que são essenciais em minha vida.

Por fim, agradeço a UFLA, ao DES, a todos os funcionários que de uma forma ou de outra contribuíram para que este momento chegasse. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001 que foi essencial para a conclusão desta etapa.

*"Em algum lugar, alguma coisa incrível está esperando para ser descoberta."
(Carl Sagan)*

RESUMO

A blocagem de delineamentos rotacionais dependendo do número de fatores e repetições, pode resultar em delineamentos quase ortogonais e diante desta situação, tem-se como alternativa o uso de delineamentos ótimos, que minimizem a variância das estimativas dos parâmetros do modelo a ser adotado. Em uma abordagem multivariada, a consideração da estrutura experimental torna-se mais complexa, uma vez que, matrizes de covariâncias entre os níveis dos fatores devem ser analisadas. Seguindo, essas argumentações, este trabalho tem por objetivo avaliar a eficiência dos delineamentos equiradiais subdivisíveis em blocos, com análise dos índices de redundância e descrição da porcentagem da variabilidade no primeiro par canônico de variáveis. Para isto, utilizou-se simulações monte carlo em diferentes cenários, envolvendo, tamanhos amostrais (N), heterogeneidade entre as matrizes de covariâncias (δ) e especificação das coordenadas polares e esféricas. Concluiu-se que, o delineamento equiradial no formato de hexágono, apresentou melhores índices de eficiência. Em relação a porcentagem de variação explicada pelo primeiro par canônico e os índices de redundância, os resultados foram similares em relação ao uso das coordenadas polares e esféricas, para todas as situações envolvendo grau de heterogeneidade entre as matrizes de covariâncias e tamanhos amostrais. Por fim, realizar uma aplicação em dados de segmentos caulinares de uma progênie de *coffea arabica*.

Palavras-chave: Coodenadas polares. Esféricas. Simulação monte carlo. D-ótimo. Segmentos caulinares.

ABSTRACT

The blocking of rotational designs depending on the number of factors and repetitions, can result in almost orthogonal designs and in this situation, there is an alternative to the use of optimal designs, which minimizes the variance of the estimates of the parameters of the model to be adopted. In a multivariate approach, the consideration of the experimental structure becomes more complex, since covariance matrices between factor levels must be analyzed. Following these arguments, this work aims to evaluate the efficiency of equiradial subdivisible designs in blocks, with and analysis of redundancy indices description of the percentage of variability in the first canonical pair of variables. For this, Monte Carlo simulations were used in different scenarios, involving sample sizes (N), heterogeneity between the covariance matrices (δ) and specification of polar and spherical coordinates. It was concluded that for the equiradial design in the shape of a hexagon, it presented better efficiency indices. Regarding the percentage of variation explained by the first to canonical and the redundancy indices, the results were similar in relation to the use of polar and spherical coordinates, for all situations involving degree of heterogeneity between the covariance matrices and sample sizes. Finally, perform an application on data from stem segments of an arabica coffea progeny.

Keywords: Polar coordinates. Spherical. Monte carlo simulation. D-optimal. Stem segments.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Representação de um DCCR para $k = 2$	23
Figura 2.2 – Representação de um DCCR para $k = 3$	24
Figura 2.3 – Ilustração geométrica para o delineamento rotacional equiradial considerando 6 pontos experimentais.	31
Figura 2.4 – Representação de um delineamento na forma de um heptágono e um octágono.	32
Figura 2.5 – Representação da elipse de confiança de um modelo de regressão com dois parâmetros.	33
Figura 3.1 – Representação do delineamento em forma (a) hexagonal e (b) heptagonal.	44
Figura 3.2 – Experimento referente a formação de mudas clonais de <i>coffea arabica</i>	49
Figura 4.1 – Estimativas dos índices de redundância para o primeiro par de variáveis canônicas para $N = 30$, em função do grau de heterogeneidade δ considerando o delineamento $M_{3_{opt}}$ com coordenadas polares: (a) $R(Y X)$ e (b) $R(X Y)$	57
Figura 4.2 – Estimativas dos índices de redundância para o primeiro par de variáveis canônicas para $N = 30$, em função do grau de heterogeneidade δ considerando o delineamento $M_{3_{opt}}$ com coordenadas esféricas: $R(Y X)$ e (b) $R(X Y)$	58
Figura 4.3 – Análise da redundância para os pares de variáveis canônicas.	60

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Representação dos pontos axiais.	21
Tabela 2.2 – Soluções exatas e aproximadas (*) de DCCRs ortogonais e divisíveis em blocos. Considerando os seguintes níveis: fatorial = ± 1 ; axial = $\pm \alpha$; pontos centrais = zero; c = segundo momento de cada fator; N, d, p, h = componentes da matriz $X'X$	28
Tabela 2.3 – Determinantes de $X'X$ do delineamento equiradial.	34
Tabela 2.4 – Determinantes de $X'X$ dos DCCs.	34
Tabela 2.5 – Valores de eficiência relativa D.	35
Tabela 3.1 – Layout dos cenários utilizados no processo de simulação monte carlo, para cada tamanho amostral.	46
Tabela 3.2 – Delineamento subdivisível em blocos com 40 tratamentos selecionados para efeitos principais e quadráticos dos fatores tiametoxam, sacarose e substrato (% de fibra de coco no substrato de casca de pinus) em escala natural. (continua)	50
Tabela 3.2 – Delineamento subdivisível em blocos com 40 tratamentos selecionados para efeitos principais e quadráticos dos fatores tiametoxam, sacarose e substrato (% de fibra de coco no substrato de casca de pinus) em escala natural. (conclusão)	51
Tabela 3.3 – Delineamento subdivisível em blocos com 40 tratamentos selecionados para efeitos principais e quadráticos dos fatores tiametoxam, sacarose e substrato (% de fibra de coco no substrato de casca de pinus) em escala codificada. (continua)	52
Tabela 3.3 – Delineamento subdivisível em blocos com 40 tratamentos selecionados para efeitos principais e quadráticos dos fatores tiametoxam, sacarose e substrato (% de fibra de coco no substrato de casca de pinus) em escala codificada. (conclusão)	53
Tabela 4.1 – Eficiência D dos delineamentos M_1, M_2, M_3 e M_4 em relação a $M_{1_{opt}}, M_{2_{opt}}, M_{3_{opt}}$ e $M_{4_{opt}}$ considerando coordenadas polares e esféricas.	54

Tabela 4.2 – Correlação média obtida em 1000 realizações monte carlo referente ao primeiro par canônico considerando os delineamentos $M_{3_{opt}}$ com escala trigonométrica polar e esférica.	56
Tabela 4.3 – Coeficientes do primeiro par de variáveis canônicas (U_1, V_1) e estimação de sua correlação.	58
Tabela 4.4 – Porcentagem do índice de redundância dos grupos de variáveis dependentes observadas nos delineamentos DCCR e DCCR ótimo explicadas no primeiro par canônico (U_1, V_1).	59
Tabela 4.5 – Estimativas dos parâmetros do modelo linear considerando o delineamento subdivisível em blocos.	60
Tabela 4.6 – Estimativas dos parâmetros do modelo quadrático.	62
Tabela 4.7 – Resultados ótimos obtidos pela análise ridge para cada delineamento, em função dos objetivos máximos e mínimos.	63
Tabela 1 – Valores do máximo referente ao DCCR subdivisível em blocos.	82
Tabela 2 – Valores do mínimo referente ao DCCR subdivisível em blocos.	82
Tabela 3 – Valores do máximo referente ao DCCR ótimo.	83
Tabela 4 – Valores do mínimo referente ao DCCR ótimo.	83

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	REFERENCIAL TEÓRICO	17
2.1	Modelos de Superfície de Resposta de Segunda Ordem	17
2.1.1	Delineamento Composto Central Rotacional	20
2.1.1.1	Delineamento Composto Central Rotacional Ortogonal Subdivisível em Blocos	24
2.1.1.2	Formalização do Modelo Multivariado para Análise de Experimentos Subdi-	
	visíveis em Blocos	28
2.2	Delineamentos Equiradiais	29
2.2.1	Delineamentos D-ótimos como critério de comparação entre os DCCs e Equi-	
	radiais	32
2.3	Análise Canônica Assimétrica	35
2.3.1	Análise de Correlação Canônica	36
2.3.2	Análise de Redundância	38
2.4	Segmentos Caulinares em <i>Coffea Arabica</i>	41
3	METODOLOGIA	43
3.1	Cenários de simulação com a adaptação para análise de correlação canônica	
	e análise dos índices de redundância	43
3.2	Descrição das variáveis dos segmentos caulinares de uma progênie <i>coffea ara-</i>	
	<i>bica</i> e coleta dos dados	48
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	54
4.1	Resultados referentes à otimização dos delineamentos dos cenários da simulação	54
4.2	Análise da correlação do primeiro par canônico e redundâncias do grupo de	
	variáveis da simulação.	56
4.3	Aplicação a segmentos caulinares de uma progênie <i>coffea arabica</i>	58
5	CONCLUSÃO	65
	REFERÊNCIAS	66

ANEXO A – Delineamentos utilizados na construção das matrizes em coordenadas polares. D_1 (hexagonal) e D_2 (heptagonal) considerando um fator de correção c conforme proposto por Conagin (1982). D_3 (hexagonal) e D_4 (heptagonal) considerando um fator de correção $c = 1$.	70
ANEXO B – Delineamentos utilizados na construção das matrizes em coordenadas esféricas. D_1 (hexagonal) e D_2 (heptagonal) considerando um fator de correção c conforme proposto por Conagin (1982). D_3 (hexagonal) e D_4 (heptagonal) considerando um fator de correção $c = 1$.	72
ANEXO C – Delineamentos utilizados na construção das matrizes em coordenadas polares otimizadas. D_1 (hexagonal) e D_2 (heptagonal) considerando um fator de correção c conforme proposto por Conagin (1982). D_3 (hexagonal) e D_4 (heptagonal) considerando um fator de correção $c = 1$.	74
ANEXO D – Delineamentos utilizados na construção das matrizes em coordenadas esféricas otimizadas. D_1 (hexagonal) e D_2 (heptagonal) considerando um fator de correção c conforme proposto por Conagin (1982). D_3 (hexagonal) e D_4 (heptagonal) considerando um fator de correção $c = 1$.	76
ANEXO E – Script modelagem quadrática para o DCCR subdivisível em blocos.	78
ANEXO F – Tabelas dos valores preditos versus os raios, mediante os fatores substrato, sacarose e tiametoxam quanto a análise ridge.	82

1 INTRODUÇÃO

Atualmente o gênero *coffea* possui mais de 124 espécies, tendo seu desenvolvimento industrial baseado principalmente em duas espécies cultivadas, que são equivalentes a quase toda a produção e consumo mundial de café: o *coffea arabica* (café arábica) e o *coffea canephora* (café canéfora) que representam, respectivamente, 65% e 35% da produção global de café (ARIMAR-SETIOWATI et al., 2023).

O *coffea canephora* quando propagado através de sementes tem como resultado colheitas heterogêneas e irregulares. Isso acontece decorrente de características de incapacidade de uma planta fértil formar sementes quando fertilizada por seu próprio pólen (auto incompatibilidade genética) e fecundação cruzada específicas da espécie dando origem a plantas heterozigotas e distintas (JÚNIOR et al., 2020).

Assim sendo, a propagação de cafeeiros por meio de segmentos caulinares é uma realidade para *coffea canephora*, devido às vantagens proporcionadas por esta técnica em relação à propagação por semente. Isso possibilita a propagação fiel do genótipo da planta matriz e, consequentemente, a obtenção de lavouras uniformes em relação ao porte, maturação de frutos e outras características de interesse (FERRÃO et al., 2017).

No caso do *coffea arabica* tem suas cultivares comumente propagadas por sementes. Isso acontece porque as cultivares são predominantemente autopolinizadas e consequentemente homozigotas, sendo bastante uniformes. Contudo, até 20% de alogamia dessas cultivares podem ser atingidas, não sendo aptas de preservar plantas heterozigotas com loci condicionados para heterose na resistência de patógenos e produção de grãos (VALLEJOS-TORRES et al., 2020).

Para a espécie *coffea arabica*, a propagação vegetativa é de interesse para a multiplicação de híbridos e genótipos superiores selecionados em qualquer etapa de um programa de melhoramento genético. Isso possibilita a fixação desses genótipos sem a necessidade de avançar em gerações, o que pode representar um grande avanço nos programas de melhoramento (REZENDE et al., 2017).

A propagação vegetativa em *coffea arabica* é possível e viável da mesma forma que para a espécie *coffea canephora*, necessitando da utilização de fitorreguladores e ambiente com temperatura e umidade controlados (JESUS et al., 2010). Alguns dos fatores já estudados e relatados na literatura são importantes para uma melhor eficiência do processo, como a concentração do fi-

torregulador, o comprimento, o tipo de segmento caulinar e o ambiente de aclimação das mudas (REZENDE et al., 2010; REZENDE et al., 2017).

No entanto, esse processo pode ser melhorado devido ao grande número de fatores que afetam o desempenho do processo de enraizamento de segmentos caulinares, como relatados em outras espécies e que ainda não foram avaliados os seus efeitos sobre o desempenho do enraizamento de segmentos caulinares de *coffea arabica*. Um método de viabilização dessa técnica seria através da clonagem de genótipos superiores em *coffea arabica* utilizando controle do substrato aplicado no *coffea*, uma vez que esse fator é um ponto muito sensível para o enraizamento caulinar.

Frente a isso, são visados estudos que envolvam otimização com o intuito de obter informações que possam permitir o estabelecimento de procedimentos que melhorem a eficiência do processo e a qualidade das mudas clonais. Diante disso, algumas pesquisas estatísticas podem ser aplicadas. Dentre elas, a otimização em experimentos rotacionais subdivisíveis em blocos, dada em uma abordagem multivariada.

Delineamentos rotacionais são caracterizados pela equidade a localização dos pontos experimentais e igualdade das variâncias preditas nesses pontos fornecendo uma precisão igual das estimativas em todas as direções. Dentre os delineamentos que podem ser classificados como rotacionais estão: os delineamentos compostos centrais rotacionais (DCCR) e os delineamentos equirradiais.

Contudo, se tratando da subdivisão em blocos, tais delineamentos podem ser adaptados, seguindo a metodologia proposta por Conagin (1982), a qual descreve a subdivisão em blocos de delineamentos compostos centrais rotacionais. Nesta abordagem, o autor apresenta uma nova estrutura de arranjos que garante a propriedade de quasi-rotacionalidade e de ortogonalidade.

Reportando esta abordagem, com o uso de metodologias multivariadas e de variáveis canônicas, principal foco deste trabalho, a adaptação de estruturas de repetição e fatores torna-se necessária para estimar as matrizes de covariância entre e dentro dos níveis de um fator. Como resultado complementar à análise da porcentagem explicada pelos pares de variáveis canônicas têm-se os índices de redundância, que têm o propósito de quantificar a variância compartilhada de um grupo de variáveis dependentes em relação a função canônica do grupo oposto, definido como variáveis independentes e vice-versa (HOWARD; BALDWIN; BROWN, 2012).

Em virtude do que foi mencionado, dada as deficiências teóricas em relação as propriedades de ortogonalidade dos delineamentos subdivisíveis em blocos, que carecem de uma seleção de um delineamento ótimo. Bem como de uma análise da variabilidade dos dados em uma técnica de redução de dimensão, vista em uma abordagem multivariada. Este trabalho, tem por objetivo estudar a eficiência dos delineamentos equiradiais subdivisíveis em blocos e análise dos índices de redundância e descrição da porcentagem da variabilidade no primeiro par canônico de variáveis e realizar uma aplicação em dados de segmentos caulinares de uma progênie *coffea arabica*.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Segundo Khuri e Cornell (1996), a metodologia de superfície de resposta compreende um determinado conjunto de técnicas estatísticas, as quais abrangem alguns fatores. Dentre os principais têm-se: o arranjo de uma série de experimentos que seja capaz de produzir medidas confiáveis da resposta de interesse, a determinação do modelo matemático que melhor se ajuste aos dados e, por fim, a determinação das configurações ótimas dos fatores experimentais que produzem o valor máximo ou mínimo da resposta.

Frente a isso, para melhor compreensão deste trabalho alguns assuntos foram abordados, como: Delineamentos Rotacionais e Equiradiais Subdivisíveis em Blocos, Formalização do Modelo Multivariado para Análise de Experimentos Subdivisíveis em Blocos, Análise de Correlação Canônica e Análise de Redundância.

2.1 Modelos de Superfície de Resposta de Segunda Ordem

A princípio, o arranjo da série de experimentos capaz de explorar a superfície de resposta (o arranjo) foi feito em indústrias químicas. Um exemplo seria a investigação do uso de alguns produtos químicos em uma planta piloto, supondo como variável resposta (y) a pureza desses produtos e os fatores pressão (x_1) e temperatura (x_2) como variáveis independentes.

Como se pode ver, trata-se de dois fatores e, mediante isso, tem-se um espaço bidimensional. Logo, a resposta em função dos níveis dos fatores (x_1) e (x_2) é dada por:

$$y = f(x_1, x_2) + \varepsilon, \quad (2.1)$$

em que ε se trata do erro aleatório e $f(x_1, x_2) = \eta$ representa a superfície de resposta dada pela função da resposta esperada.

Para encontrar uma aproximação mais adequada entre y e as variáveis independentes, um polinômio de ordem baixa em alguma região das variáveis independentes é empregado. Desse modo, a função de aproximação é o modelo de primeira ordem

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon, \quad (2.2)$$

em que x_1, \dots, x_k corresponde às k variáveis independentes, y à variável resposta observada, β_0, \dots, β_k são os parâmetros desconhecidos e ε é o erro aleatório do modelo. Logo, a superfície de resposta possibilita a aproximação de um modelo empírico da relação entre os fatores e as respostas.

Contudo, podem ocorrer situações em que este modelo não é cabível, como quando ocorre curvatura na superfície. Neste caso, polinômios de ordem superior devem ser utilizados, como o modelo de segunda ordem.

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k \beta_{ij} x_{ij} + \varepsilon, \quad (2.3)$$

em que β_0 , β_1 e ε são tais como em (2.2), sendo β_{ii} e β_{ij} , respectivamente, a representação dos coeficientes desconhecidos dos efeitos quadráticos e as interações de dois fatores.

Esse modelo pode ser representado matricialmente como $Y = X\beta + \varepsilon$, tal que X corresponde à matriz de delineamento, a qual deve ser padronizada após a realização do experimento, conforme o delineamento proposto pelo pesquisador e possibilitar a análise de dados coletados e Y corresponde aos valores observados na resposta.

Esses delineamentos, conforme citado em Box e Hunter (1957), possuem algumas propriedades desejáveis como, por exemplo, a ortogonalidade, a função de variância e a rotacionalidade. Para chegar a essas características, é necessário verificar desde o princípio do experimento como, por exemplo, a distribuição de pontos na região experimental de um delineamento.

Uma vez que a distribuição é bem quantificada pelos seus momentos, afeta diretamente muitas de suas propriedades, como a média da amostra pelo primeiro momento, a variância pelo segundo momento e a simetria pelo terceiro momento (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016).

Dentre as propriedades desejáveis, a classificação de um delineamento como ortogonal é dita satisfeita quando a matriz de informação $X'X$ é diagonal, ocasionando uma menor variância nos parâmetros estimados frente a matriz de delineamento escolhida.

Já a função de variância é definida pela relação $NV(\hat{y}_x)/\sigma^2$, sendo a variância $V(\hat{y}_x)$ reduzida pelo incremento de N experimentos. Essa função, portanto, se trata de uma medida padronizada da precisão da resposta estimada em qualquer ponto no espaço de variáveis (BOX; HUNTER et al., 1957).

Quanto a certificação de rotacionalidade de um delineamento, a representação dos parâmetros da distribuição dos pontos do delineamento é dada através da matriz de momentos, que pode ser definida por:

$$\frac{X'X}{N}, \quad (2.4)$$

a qual se trata de uma matriz não singular, normalizada e tal que se existir $\left(\frac{X'X}{N}\right)^{-1}$ ela é simétrica. Sendo a matriz X dada por:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \dots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \dots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & x_{2N} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

em que cada entrada de x_{ij} é ± 1 .

Para a construção da matriz de momentos, considerando a ordem assumida inicialmente pelo modelo $Y = X\beta + \varepsilon$ de ordem d com k variáveis. Logo, o momento de ordem δ com $(\delta = 0, 1, \dots, 2d)$ é dado por:

$$[1^{\delta_1} \quad 2^{\delta_2} \quad 3^{\delta_3} \quad \dots \quad k^{\delta_k}] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{u1}^{\delta_1} x_{u2}^{\delta_2} \dots x_{uk}^{\delta_k} \quad (2.6)$$

em que $\sum_{j=1}^k \delta_j = \delta$ define a ordem. Veja também que os elementos da matriz de momentos são os momentos do delineamento escritos na notação padrão dada pela equação (2.6).

Para melhor entendimento, considere o modelo de segundo grau para k fatores levando em consideração a existência de interações eq.(2.3), tendo a matriz de momentos exemplificada por:

$$\frac{X'X}{N} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\sum x_{i1}}{N} & \frac{\sum x_{i2}}{N} & \dots & \frac{\sum x_{ik}}{N} \\ \frac{\sum x_{i1}}{N} & \frac{\sum x_{i1}^2}{N} & \frac{\sum x_{i1}x_{i2}}{N} & \dots & \frac{\sum x_{i1}x_{ik}}{N} \\ \frac{\sum x_{i2}}{N} & \frac{\sum x_{i1}x_{i2}}{N} & \frac{\sum x_{i2}^2}{N} & \dots & \frac{\sum x_{i2}x_{ik}}{N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\sum x_{ik}}{N} & \frac{\sum x_{i1}x_{ik}}{N} & \frac{\sum x_{i2}x_{ik}}{N} & \dots & \frac{\sum x_{ik}^2}{N} \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

A certificação da rotacionalidade através da matriz de momentos, fornecida pelo delineamento, exige duas condições que devem ser mantidas. A primeira descreve que todos os momentos ímpares do delineamento são iguais a zero e a segunda determina que $\frac{[iii]}{[iij]} = \frac{F+2\alpha^4}{F} = 3$, em que F é número de pontos fatoriais, ou seja,

$$\frac{\frac{\sum_{i=1}^N x_{iu}^4}{N}}{\frac{\sum_{i=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2}{N}} = \frac{x_{1u}^4 + \dots + x_{Nu}^4}{x_{1u}^2 x_{2u}^2 + \dots + x_{Nu}^2 x_{(N+1)u}^2}. \quad (2.8)$$

Uma vez que essa razão é igual a 3, verifica-se que há rotacionalidade no delineamento. Além disso, a rotacionalidade de um delineamento tem como propriedades a equidistância dos pontos experimentais em relação ao centro do delineamento e entre si e as variâncias preditas iguais nos pontos (BOX; HUNTER et al., 1957).

Entre os delineamentos que apresentam rotacionalidade e se enquadram como sendo de segunda ordem devido a seus atributos, têm-se o delineamento fatorial com 3 níveis, o delineamento Box-Behnken, o delineamento equiradial e o mais utilizado, o delineamento composto central rotacional (DCCR). Neste trabalho o foco será o delineamento composto central rotacional e equiradial.

2.1.1 Delineamento Composto Central Rotacional

Introduzidos por Box e Wilson (1951), os delineamentos compostos centrais rotacionais consistem na obtenção de dados para o ajuste de uma superfície de segunda ordem (GHOSH; RAO, 1996). Além disso, considerados a classe de delineamentos de segunda ordem mais célebre eles são amplamente aplicados devido a três propriedades (ZHANG; XIAOFENG, 2009), dadas por:

1. Considerados muito eficientes, os DCCRs fornecem muitas informações em relação aos efeitos das variáveis do experimento e ao erro total experimental em um número mínimo de ensaios necessários.
2. Capacidade de execução sequencial e divisão em dois subconjuntos de pontos experimentais: um subconjunto estimando efeitos de interação linear e de dois fatores e o outro subconjunto estimando efeitos de curvatura.

3. Flexibilidade e disponibilidade de várias variedades de DCCRs possibilitando seu uso em diferentes regiões experimentais de operabilidade e interesse.

A composição deste delineamento é estruturada por três conjuntos de pontos: fatoriais, axiais e centrais. Os pontos fatoriais correspondem a um delineamento fatorial de dois níveis 2^k ou fracionário (resolução V^1), em que k corresponde ao número de fatores.

Os níveis fatoriais representados pela matriz de delineamento podem ser dados por $x_i = \pm 1$, no qual $x_i = -1$ corresponde ao menor nível e $x_i = 1$ corresponde ao maior nível em relação ao delineamento. Além disso, estes pontos contribuem para a estimativa dos termos de interação e a resolução V para a estimativa dos termos lineares e de interação de dois fatores.

Já os pontos axiais (ou estrelas) são situados de uma maneira estratégica no delineamento mantendo as condições iniciais de certificação da rotacionalidade. Ademais, possibilitam as estimativas de termos quadráticos e fornecem uma estimativa do erro puro (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016). Sua representação é dada conforme a tabela a seguir.

Tabela 2.1 – Representação dos pontos axiais.

x_1	x_2	\dots	x_k
$-\alpha$	0	\dots	0
α	0	\dots	0
0	$-\alpha$	\dots	0
0	α	\dots	0
\vdots	\vdots	\dots	\vdots
0	0	\dots	$-\alpha$
0	0	\dots	α

Fonte: Myers et. al. (2016).

em que $\alpha = \sqrt[4]{2^k}$ sendo k o número de fatores, como nos pontos fatoriais tem-se que $-\alpha$ corresponde ao menor nível e α corresponde ao maior nível. Sendo α a distância do ponto axial até a origem. Além disso, o conceito de rotacionalidade em um delineamento composto central (DCC) acontece a partir da definição do valor de α , que em um DCC é comumente utilizado como \sqrt{k} . Já com a definição de rotacionalidade, ou seja, um DCCR $\alpha = \sqrt[4]{2^k}$.

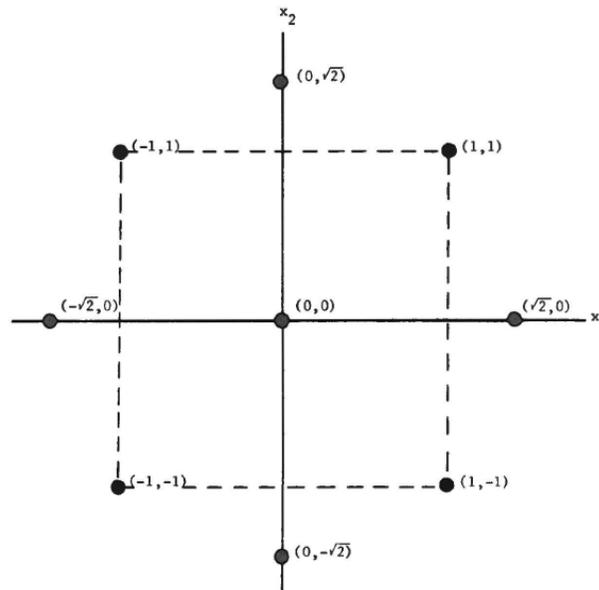
¹ Experimentos fatoriais caracterizados pelo não confundimento dos efeitos principais ou interações de segundo grau com outros efeitos principais ou interações de segundo grau. Entretanto, interações de segundo grau podem ser associadas a interações de terceiro ou graus superiores (CIRILLO, 2015)

Quanto aos pontos centrais, pode-se dizer que eles se encaixam na categoria de pontos intermediários em relação ao experimento. Logo, quando for necessário aumentar o número de pontos no experimento, é indicado aumentar os pontos centrais visto que, por se tratar de um ponto intermediário não favorece efetivamente quanto ao erro experimental tradicional. Ademais, assim como os axiais permitem o ajuste de modelos de ordem superiores.

Sendo assim, o número de combinações fornecido pelo DCCR dado pela combinação dos 2^k pontos fatoriais com $2k$ pontos axiais e n_c pontos centrais, é dado por $2^k + 2k + n_c$. Dessa maneira, em termos de exemplificação, a construção da matriz de delineamento de um DCCR composto por 2 fatores, ou seja, $k = 2$, um ponto central, $n_c = 1$, e ponto axial, $\alpha = \sqrt{2}$, é dada por:

$$X = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

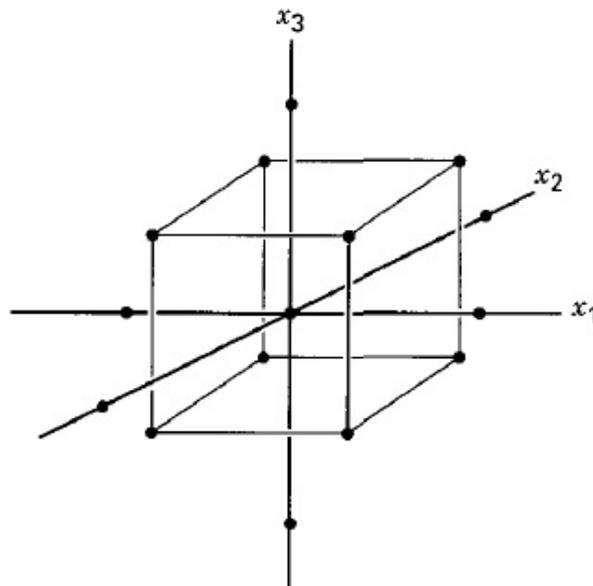
a qual também pode ser representada através da figura a seguir.

Figura 2.1 – Representação de um DCCR para $k = 2$.

Fonte: Khuri (1996).

Note que, a distribuição dos pontos experimentais é dada na forma de um quadrado e mais os pontos axiais ou estrela. Desse modo, tem-se a distribuição dada em uma (hiper) esfera com o centro no próprio planejamento do experimento, podendo ser estendido para número de fatores superiores, como $k = 3$, conforme a figura a seguir.

Figura 2.2 – Representação de um DCCR para $k = 3$.



Fonte: Montgomery (2001).

em que a distribuição dos pontos experimentais originam um cubo, tal que para os axiais têm-se a distribuição dada em uma (hiper) esfera. Vale ressaltar que o valor de α é muito importante em um estudo experimental, visto que ele depende do número de fatores, então quanto maior for o número de fatores mais distante o ponto axial estará em relação ao centro do delineamento.

Mediante isso, influencia-se diretamente o estudo proposto e o pesquisador deve ter muita cautela quanto a isso, visto que ele desconhece, a princípio, a localização do ótimo. Além disso, outro desafio para o pesquisador na prática é a garantia da rotacionalidade do DCCR uma vez que este é subdividido em blocos, o que é muito comum na experimentação na prática.

2.1.1.1 Delineamento Composto Central Rotacional Ortogonal Subdivisível em Blocos

Visando contornar o problema do DCCR em relação a partição em blocos, Conagin (1982) visualizou uma alternativa proposta por relatar um procedimento metodológico o qual permitiu preservar as características relacionadas a ortogonalidade e a rotacionalidade de modo que a subdivisão dos blocos seja feita de forma independente. Para melhor compreensão, considere a exemplificação

considerando um modelo completo de segunda ordem, dado por

$$Y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} (x_{iu}^2 - c) + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + \epsilon_u \quad (2.10)$$

em que $u = 1, 2, \dots, N$ e $i, j = 1, 2, \dots, k$.

Assumindo a matriz de delineamento X para $k = 2$ fatores, $N = 9$ observações, $n_c = 1$ ponto central e um fator de correção c aplicado nos termos quadráticos e de interação, tem-se que:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1-c & 1-c & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1-c & 1-c & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1-c & 1-c & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1-c & 1-c & 1 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 - c & -c & 0 \\ 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 - c & -c & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & -c & \alpha^2 - c & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & -c & \alpha^2 - c & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -c & -c & 0 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

em que c pode ser definido como $c = \frac{F' + 2\alpha^2}{N}$.

Dessa maneira, a matriz de informação dada por $X'X$ é expressa como:

$$X'X = \begin{pmatrix} N & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p & q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

As quantidades necessárias para obter as constantes em $X'X$ são definidas a seguir.

$$N = F + T, \quad (2.13)$$

em que N corresponde ao número total de pontos do delineamento; $F = \left(\frac{1}{2^f}\right) (2^k)$ se trata do número de pontos fatoriais, sendo f o grau de fracionamento do fatorial e k o número de fatores; $T = 2k + n$, sendo $2k$ o número de pontos axiais e $n = a_0 + b_0$ corresponde ao número de pontos centrais, sendo a_0 os pontos centrais axiais e b_0 os pontos centrais fatoriais.

$$d = F + 2\alpha^2, \quad (2.14)$$

sendo α o ponto o axial.

$$p = \frac{FT - 4F\alpha^2 - 4\alpha^2 + 2(F + T)\alpha^4}{(F + T)}, \quad (2.15)$$

$$q = \frac{FT - 4F\alpha^2 - 4\alpha^4}{F + T}, \quad (2.16)$$

$$h = F, \quad (2.17)$$

em que p pode ser definido como $p = q + 2\alpha^4$.

Note que, a matriz $X'X$ não resulta em uma matriz diagonal, ou seja, não é ortogonal. Para que isso ocorra deve-se impor que $q = 0$, para que assim, as covariâncias entre os coeficientes quadráticos puros sejam iguais a 0. Assumindo então que

$$q = 0, \quad (2.18)$$

$$q = \frac{FT - 4F\alpha^2 - 4\alpha^4}{F + T} = 0. \quad (2.19)$$

Logo, as seguintes relações podem ser obtidas.

$$\frac{FT - 4F\alpha^2 - 4\alpha^4}{F + T} = 0, \quad (2.20)$$

$$FT - 4F\alpha^2 - 4\alpha^4 = 0. \quad (2.21)$$

A proposta de Conagin (1982) para particionar o DCCR em blocos, compreendia de modo que cada bloco fosse constituído de um delineamento de primeira ordem e ortogonal. De modo que o número de parcelas em cada bloco seja proporcional a colaboração de cada um deles ao total da soma de quadrados do delineamento.

As etapas para que isso ocorresse consistia em considerar a seguinte relação

$$\frac{2\alpha^2}{F + 2\alpha^2} = \frac{2k + a_0}{N} = \frac{n_0}{N} = \Omega. \quad (2.22)$$

em que $n_c = a_0 + b_0$ corresponde aos pontos centrais, tal que a_0 se trata dos pontos centrais na parte axial e b_0 o restante dos pontos centrais que serão distribuídos igualmente nos outros blocos da parte fatorial.

Logo, incluindo os termos correspondentes aos blocos o modelo pode ser representado por:

$$Y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} (x_{iu}^2 - c) + \sum \sum_{i < j} \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + \sum_{m=1}^b \delta (z_{mu} - \bar{z}_m) + \epsilon_u \quad (2.23)$$

em que $u = 1, 2, \dots, N$, $i, j = 1, 2, \dots, k$ e $m = 1, 2, \dots, b$.

Dessa forma, voltando a equação (2.21) substituindo $n_0 = N\Omega$ para que haja ortogonalidade, tem-se que:

$$n_0^2 q = 4(N - 2n_0)\alpha^4 - 4Fn_0\alpha^2 + Fn_0^2 = 0. \quad (2.24)$$

Uma vez que $q = 0$ seja satisfeito, o valor de N é determinado. Nesse caso verifica-se se N é inteiro. Se ele não for, toma-se valores inteiros próximos a N . Logo, é necessário calcular novamente os valores de α e n_0 , originando assim a quase perfeita rotacionalidade e a quase perfeita subdivisão em blocos. A seguir a tabela é exemplificada considerando essas características frente a diferentes números de fatores k .

Tabela 2.2 – Soluções exatas e aproximadas (*) de DCCRs ortogonais e divisíveis em blocos. Considerando os seguintes níveis: fatorial = ± 1 ; axial = $\pm \alpha$; pontos centrais = zero; c = segundo momento de cada fator; N, d, p, h = componentes da matriz $X'X$.

Características	k = 2	k = 3*	k = 4	k = 5	k = 6	k = 6*
N	16	24	36	36	36	60
n	8	10	12	10	8	16
a_0	4	4	4	2	0	4
b_0	4	6	8	8	8	12
Fatorial	completo	completo	completo	metade	quarto	metade
b	2	2;3	2;3	2;3	2;3	2;3;5
α (rotacionalidade)	1,414	1,682	2,000	2,000	2,000	2,378
$\frac{2\alpha^2}{F'+2\alpha^2}$	0,500	0,414	0,333	0,333	0,333	0,261
α (obtido)	1,414	1,711	2,000	2,000	2,000	2,431
$\frac{2\alpha^2}{F'+2\alpha^2}$	0,500	0,423	0,333	0,333	0,333	0,270
$\frac{2k+a_0}{N}$	0,500	0,417	0,333	0,333	0,333	0,267
$d = F' + 2\alpha^2$	8,000	13,857	24,000	24,000	24,000	43,818
$p = 2\alpha^4$	8,000	17,149	32,000	32,000	32,000	69,830
$h = F'$	4,000	8,000	16,000	16,000	16,000	32,000
$c = \frac{F'+2\alpha^2}{N}$	0,500	0,577	0,667	0,667	0,667	0,730
Rotacionalidade	3,000	3,144	3,000	3,000	3,000	3,182

Fonte: Adaptado de Conagin (1982).

Através da tabela anterior, tem-se que b representa o número de blocos e a rotacionalidade deve ser igual a 3 quando k for exato. Isso pode ser comprovado através do cálculo obtido através de resultados dados pela matriz de momentos, conforme apresentado na seção 2.1, ou seja, $\frac{\sum X_{iu}^4}{\sum X_{iu}^2 \sum X_{ju}^2}$.

2.1.1.2 Formalização do Modelo Multivariado para Análise de Experimentos Subdivisíveis em Blocos

Seguindo a especificação da matriz de delineamento composto central rotacional subdivisível em blocos, seção 3.1.1.1, a proposta de um modelo multivariado será dada conforme procedimento descrito a seguir.

$$\mathbf{Y} = D\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.25)$$

em que $\mathbf{Y} = [Y_1 Y_2 \cdots Y_r]'$ se trata da matriz das r respostas obtidas, $\boldsymbol{\beta} = [\beta_1 \beta_2 \cdots \beta_r]'$ corresponde ao vetor paramétrico a ser estimado conjuntamente e $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_r]'$ é o vetor dos erros aleatórios associado ao j -ésimo experimento, isto é, ($j=1, \dots, r$). Por fim, tem-se D como uma matriz bloco

diagonal definida por $D = \begin{bmatrix} D_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & D_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & D_r \end{bmatrix}$ em que cada elemento da diagonal corresponde a um delineamento.

A representação da equação (2.25) também pode ser dada matricialmente. A seguir, é mostrada a representação matricial.

$$\begin{bmatrix} Y_{11} \\ Y_{21} \\ \vdots \\ Y_{N1} \\ \dots \\ Y_{12} \\ Y_{22} \\ \vdots \\ Y_{N2} \\ \dots \\ Y_{1r} \\ Y_{2r} \\ \vdots \\ Y_{Nr} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{1(N_1 \times p_1)} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & D_{2(N_2 \times p_2)} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & D_{3(N_3 \times p_3)} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & D_{r(N_r \times p_r)} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \beta_{01} \\ \beta_{11} \\ \vdots \\ \beta_{p_1 1} \\ \dots \\ \beta_{02} \\ \beta_{12} \\ \vdots \\ \beta_{p_2 2} \\ \dots \\ \vdots \\ \beta_{0r} \\ \beta_{1r} \\ \vdots \\ \beta_{p_r r} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{21} \\ \vdots \\ \varepsilon_{N1} \\ \dots \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{22} \\ \vdots \\ \varepsilon_{N2} \\ \dots \\ \varepsilon_{1r} \\ \varepsilon_{2r} \\ \vdots \\ \varepsilon_{Nr} \end{bmatrix}, \quad (2.26)$$

em que D_r corresponde aos delineamentos diagonais constituindo os blocos.

2.2 Delineamentos Equiradiais

Segundo Myers et. al. (2016) os delineamentos equiradiais podem ser dados como delineamentos de dois fatores especiais, pois são interessantes para a modelagem de funções de resposta de segunda ordem que atuam como delineamentos alternativos ao DCCR.

Por se tratar de um delineamento rotacional assim como os DCCRs, os delineamentos equirradiais tem como característica pontos experimentais distribuídos de forma equidistante em relação ao centro do delineamento e entre si. Sua estruturação é feita na forma de dois ou mais conjuntos de pontos, os quais são chamados de conjuntos equirradiais (KHURI; CORNELL, 2018) tendo uma distribuição de pontos rotativos feita de modo parecido com uma esfera comum.

Supondo um espaço bidimensional, essa classe começa com um pentágono de pontos equidistantes em um círculo com uma distância ou raio ρ em relação ao centro do delineamento, tal que $\rho \geq 1$. O segundo conjunto de pontos é formado pelo ponto (ou pontos) central em um círculo com raio $\rho = 0$.

Além do pentágono, a configuração deste delineamento pode ser expressa através da forma hexagonal, heptagonal, octagonal e assim por diante, originando vértices de um polígono regular, poliedro ou politopo, os quais são inscritos na circunferência, esfera ou hiperesfera (IWUNDU; ONU, 2017).

A matriz de delineamento neste caso é caracterizada por

$$D = \left[\rho \cos(\theta + 2\pi u/n_1), \quad \rho \sin(\theta + 2\pi u/n_1), \right] \quad u = 0, 1, 2, \dots, n_1 - 1 \quad (2.27)$$

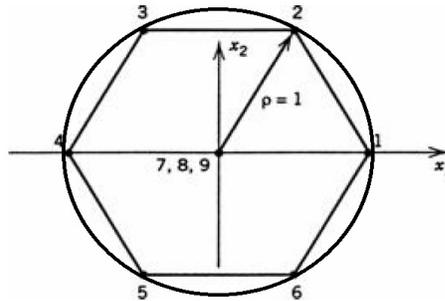
em que $x_1 = \rho \cos(\theta + 2\pi u/n_1)$ e $x_2 = \rho \sin(\theta + 2\pi u/n_1)$ se referem aos fatores definidos no experimento; ρ trata-se da distância dos pontos até o centro do delineamento cujo valor determina a natureza da escala e n_1 corresponde ao número de pontos na esfera, ademais são assumidos também n_c pontos centrais (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016).

Já θ não tem efeito sobre a matriz de informação $X'X$, ou seja, não afeta a estrutura de variância do delineamento, podendo ser assumido igual a zero. Logo, todos os delineamentos equirradiais têm que $X'X$ é invariante a rotação do delineamento (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2016).

Para visualizar este delineamento toma-se como base o círculo, cujos pontos estão inscritos e igualmente espaçados entre si. Desse modo, sua representação pode ser visualizada como se fosse um polígono regular sob este próprio círculo, a considerar que o ângulo formado entre estes pontos é o mesmo (IWUNDU; ONU, 2017).

Um exemplo dentre as representações das possíveis figuras inscritas nos círculos através dos pontos, muito utilizado e que permite um certo grau de liberdade por falta de ajuste, citado em Myers et. al (2016) é o hexágono, ou seja, 6 pontos equidistantes do centro do delineamento. A considerar $n_1 = 6$, $n_c = 3$ e $\rho = 1$, tem-se a seguinte ilustração:

Figura 2.3 – Ilustração geométrica para o delineamento rotacional equiradial considerando 6 pontos experimentais.



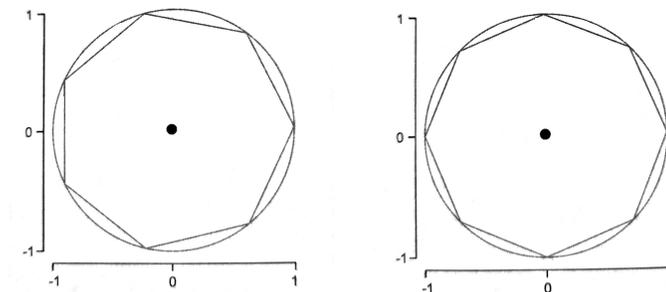
Fonte: Adaptado de Myers et. al. (2016).

em que os pontos 1,2,3,4,5 e 6 equivalem aos n_1 pontos na esfera e os pontos 7,8 e 9 equivalem aos n_c pontos centrais. Conforme a figura anterior e seguindo a eq. (2.27) tem-se que a matriz de delineamento D considerando uma estrutura hexagonal é dada por:

$$D = \begin{bmatrix} 1,000 & 0,000 \\ 0,500 & 0,866 \\ -0,500 & 0,866 \\ -1,000 & 0,000 \\ -0,500 & -0,866 \\ 0,500 & -0,866 \\ 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

Ademais algumas ilustrações referentes aos delineamentos equiradiais heptagonal e octagonal.

Figura 2.4 – Representação de um delineamento na forma de um heptágono e um octágono.



Fonte: Cirillo (2015).

Ademais, vale ressaltar que apesar de alternativos em relação a outros delineamentos, como o DCCR, os delineamentos equirradiais podem ter sua preferência avaliada de acordo com alguns estudos que podem variar conforme critérios de otimização alfabética e eficiência do delineamento através de diferentes pesquisas (IWUNDU, 2016).

2.2.1 Delineamentos D-ótimos como critério de comparação entre os DCCs e Equiradiais

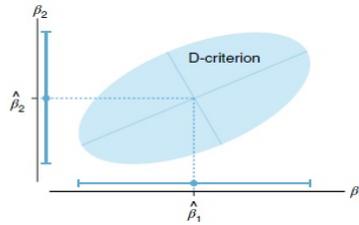
Alguns métodos estatísticos, como a eficiência e a otimização, podem ser utilizados na construção do delineamento visando as vantagens e desvantagens de um delineamento em relação ao outro. Um exemplo seria o delineamento composto central (DCC) em relação ao seu delineamento alternativo em alguns estudos, como o delineamento equirradial.

A eficiência de um delineamento tem como objetivo medir a sua qualidade e pode ser mensurada de acordo com os chamados critérios de otimalidade. Esses critérios podem ser denotados como A, D, G e I e apresentam como característica comum a matriz de informação $X'X$.

A seleção do critério a ser adotado pelo pesquisador vai variar de acordo com os objetivos do experimento. Sendo, o critério de otimização D o mais utilizado para originar delineamentos ótimos, possuindo uma criação a qual possibilita a minimização do volume do elipsoide de confiança sobre os p parâmetros do modelo assumido.

Por esse motivo o termo "D" em D-ótimo representa determinante, pois a minimização do elipsoide de confiança é obtida minimizando o determinante da matriz de informação $X'X$ (SILVESTRINI, 2015).

Figura 2.5 – Representação da elipse de confiança de um modelo de regressão com dois parâmetros.



Fonte: Smucker et. al. (2018).

Conforme a Figura 2.5 tem-se uma elipse projetada com intervalos de confiança unidimensionais para cada parâmetro, β_1 e β_2 , em cada eixo. O critério D minimiza a área da elipse que define o intervalo de confiança conjunto para os parâmetros e isso reduz a variância das estimativas dos parâmetros e/ou a correlação entre as estimativas (SMUCKER; KRZYWINSKI; ALTMAN, 2018).

A partir disso, o critério de eficiência D de um delineamento é definido como:

$$D_{eff} = 100 \times \left(\det \left(\frac{X'X}{N} \right) \right)^{\frac{1}{p}} \quad (2.29)$$

em que $\frac{X'X}{N}$ se trata da matriz de informação normalizada do delineamento e p o número de parâmetros do modelo.

Contudo, há situações em que o pesquisador almeja comparar a eficiência de dois delineamentos. Mediante isso tem-se a eficiência relativa, que nada mais é do que a razão das suas eficiências separadas, conforme dado a seguir.

$$D_{rel,eff} = \left(\frac{\det \left(\frac{X'X}{N} \right)_1}{\det \left(\frac{X'X}{N} \right)_2} \right)^{\frac{1}{p}} \quad (2.30)$$

A considerar um delineamento de N pontos e X a matriz de delineamento, a matriz de informação normalizada, dada por $\frac{X'X}{N}$, contribui com a remoção do efeito de alteração dos tamanhos do delineamento.

Para fins comparativos quanto aos resultados obtidos em (2.29) quanto a eficiência, os valores dependem do número de pontos do delineamento e do número de variáveis controláveis no modelo. O delineamento considerado melhor é aquele que apresenta maior eficiência D (JONES;

GOOS, 2012). Se tratando da eficiência relativa (2.30), se a razão for maior que 1, $\left(\frac{X'X}{N}\right)_1$ é melhor que $\left(\frac{X'X}{N}\right)_2$.

Um trabalho na literatura que retrata esse estudo com base em um delineamento equiradial e um DCC é Iwundu (2016). Nesse trabalho a autora comparou as eficiências D dos delineamentos equiradiais com relação aos DCCs esféricos padronizados, inscritos e circunscritos.

Para isso a autora considerou as matrizes de delineamento referentes aos delineamentos equiradiais de dois fatores considerando $\rho = 1$ e número de pontos $n = 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12$ e número de pontos centrais $n_c = 1$. A matriz de um DCCR circunscrito de $n = 9$ pontos e número de pontos centrais $n_c = 1$ e um DCC inscrito de $n = 9$ pontos e número de pontos centrais $n_c = 1$.

Mediante isso Iwundu (2016) obteve o determinante das matrizes de informação com relação aos delineamentos equiradiais e ao DCC circunscrito e inscrito, conforme apresentado nas tabelas a seguir.

Tabela 2.3 – Determinantes de $X'X$ do delineamento equiradial.

Tamanho amostral (N)	Determinante $X'X$ DE
6	$2,639 \times 10^{-4}$
7	$2,678 \times 10^{-4}$
8	$2,376 \times 10^{-4}$
9	$2,489 \times 10^{-4}$
10	$2,299 \times 10^{-4}$
11	$2,225 \times 10^{-4}$
12	$2,149 \times 10^{-4}$

Fonte: Iwundu (2016).

Tabela 2.4 – Determinantes de $X'X$ dos DCCs.

Determinante $X'X$ DCC Circunscrito	Determinante $X'X$ DCC Inscrito
$6,158 \times 10^{-4}$	$2,224 \times 10^{-4}$

Fonte: Iwundu (2016).

Obtendo também os valores da eficiência relativa D correspondentes aos delineamentos equiradiais e aos DCCs inscrito e circunscrito, conforme a tabela a seguir.

Tabela 2.5 – Valores de eficiência relativa D.

Tamanho amostral (N)	Valores de eficiência D dos DE em relação ao DCC Circunscrito	Valores de eficiência D dos DE em relação ao DCC Inscrito
6	0,403	1,029
7	0,404	1,031
8	0,396	1,011
9	0,399	1,019
10	0,394	1,006
11	0,392	1,002
12	0,398	0,994

Fonte: Iwundu (2016).

Com base nos resultados obtidos por Iwundu (2016) com relação aos valores de eficiência relativa apresentados na Tabela 2.5 pode-se concluir que os delineamentos equirradiais não são inferiores se comparados ao DCC. Na verdade, estes delineamentos apresentaram resultados melhores que o DCC inscrito sob o critério de eficiência D.

Contudo, quando comparado ao circunscrito tem-se que os delineamentos equirradiais não são tão confiáveis quanto o DCC circunscrito, visto que os valores de eficiência D relativa foram inferiores a 50% em todos os tamanhos amostrais considerados, indicando cautela quanto ao uso dos delineamentos equirradiais.

2.3 Análise Canônica Assimétrica

Algumas pesquisas podem abordar situações em que duas matrizes de dados podem ser consideradas visando a análise da relação entre estes dados. Mediante isso, pode ocorrer o que chamamos de análise canônica assimétrica. A assimetria em uma análise denota que duas matrizes de dados, embora usadas na mesma análise, não desempenham o mesmo papel. Há uma matriz de variáveis respostas, Y , e uma matriz de variáveis explicativas, X .

As variáveis respostas geralmente são os dados de composição da comunidade e as explicativas explicam a variação em Y . Podem ser dadas como formas de análise canônica assimétricas a análise de correlação canônica e a análise de redundância, tal que ambas constituem ordenações de Y restritas por X (LEGENDRE; OKSANEN; BRAAK, 2011)

2.3.1 Análise de Correlação Canônica

Proposta por Hotelling (1936), a análise de correlação canônica (ACC) visa identificar e quantificar as associações entre dois conjuntos de variáveis. Foi desenvolvida inicialmente através do exemplo de relacionar habilidade de leitura com a habilidade aritmética em um grupo de 140 alunos da sétima série (MONROY, 2012).

Outros exemplos citados posteriormente, de conjuntos de variáveis, medidas em cada unidade de pesquisa, são índices de preços e índices de produção, comportamento dos alunos e comportamento dos professores, variáveis ecológicas e variáveis ambientais, e assim por diante (RENCHEER, 2002).

Essa técnica de análise multivariada se concentra na correlação em uma combinação linear de variáveis em um conjunto e uma combinação linear das variáveis em outro conjunto (JOHNSON; WICHERN, 2014). Partindo disso a ideia inicial seria então determinar o par de combinações lineares com a maior correlação.

A seguir, determina-se o par de combinações lineares com a maior correlação entre todos os pares não correlacionados com o par selecionado inicialmente e assim por diante. Esses pares de variáveis são chamados de variáveis canônicas e suas correlações são chamadas correlações canônicas.

As correlações canônicas mensuram a força de associação entre os dois conjuntos de variáveis, apresentando uma característica de maximização da técnica configurando uma tentativa de concentrar uma relação de alta dimensão entre dois conjuntos de variáveis em alguns pares de variáveis canônicas (JOHNSON; WICHERN, 2014).

Para entender essa técnica partindo do início, é necessário considerar dois grupos de variáveis. Para isso, suponha que sejam dadas duas variáveis aleatórias $X \in \mathfrak{R}^p$, o primeiro grupo de p variáveis e $Y \in \mathfrak{R}^q$ o segundo grupo de q variáveis. O intuito é encontrar um índice que descreva um possível vínculo entre X e Y , ou seja, combinações lineares dadas por

$$a^T X \quad e \quad b^T Y \quad (2.31)$$

de variáveis aleatórias. Esses vetores a e b tratam-se de vetores canônicos e são encontrados de modo que a relação dos dois índices $a^\top x$ e $b^\top y$ seja quantizada de alguma forma interpretável. Sendo assim, tem-se que essas combinações lineares originam as variáveis canônicas U e V :

$$\begin{aligned} U &= a^\top X, \\ V &= b^\top Y \end{aligned} \tag{2.32}$$

Tal que,

$$\begin{aligned} \text{Var}(U) &= a' \text{Cov}(X) a = a' \sum_{11} a, \\ \text{Var}(V) &= b' \text{Cov}(Y) b = b' \sum_{22} b, \\ \text{Cov}(U, V) &= a' \text{Cov}(X, Y) b = a' \sum_{12} b. \end{aligned} \tag{2.33}$$

Os vetores coeficientes a e b procurados são dados tal que a correlação em (2.34) seja a maior possível.

$$\rho_{U,V} = \text{Corr}(U, V) = \frac{a' \sum_{12} b}{\sqrt{a' \sum_{11} a} \sqrt{b' \sum_{22} b}} \tag{2.34}$$

Sendo assim, o primeiro par de variáveis canônicas é o par de combinações lineares U_1 e V_1 contendo variâncias unitárias,

$$\begin{aligned} a' \sum_{11} a &= 1 \\ b' \sum_{22} b &= 1 \end{aligned} \tag{2.35}$$

e que maximizem a correlação (2.34), ou seja, $\max \text{Corr}(U, V)$.

O segundo par de variáveis canônicas, o par de combinações lineares U_2 e V_2 contendo variâncias unitárias, que maximizem (2.34), ou seja, $\max \text{Corr}(U, V)$ entre todas as escolhas não correlacionadas com o primeiro par de variáveis canônicas.

Assim o k – ésimo par de variáveis canônicas, o par de combinações lineares U_k e V_k com variâncias unitárias, possuindo $\max \text{Corr}(U, V)$ entre todas as escolhas não correlacionadas com os k pares de variáveis canônicas anteriores. Essa corresponde a k – ésima correlação canônica (JOHNSON; WICHERN, 2014).

A relação entre o conjunto de variáveis originais X e Y , e o conjunto de variáveis canônicas U e V é vista como melhor modo de rotacionar o conjunto de variáveis canônicas e o conjunto de variáveis originais de seus espaços de medição original para novos espaços de um modo que maximiza sua correlação linear.

Além disso, a rotação dos sistemas de coordenadas é descrita pelos parâmetros ajustados através da ACC. Os vetores canônicos encapsulam como ir do sistema de coordenadas com as variáveis originais para o novo espaço latente. As variáveis canônicas codificam a incorporação de cada ponto de dados nesse novo espaço.

Propriamente o meio mais comum para calcular a ACC quanto a essa rotação do sistema de coordenadas é a decomposição de valores singulares (DVS), a qual, assumindo X e Y centrados, é aplicada à matriz de correlação $\frac{X'Y}{N}$ (WANG et al., 2020).

2.3.2 Análise de Redundância

Introduzida por Rao (1964), a análise de redundância (AR) foi proposta na forma de um problema em um exercício de seu livro, sendo posteriormente redescoberta por Wollenberg (1977). Esta análise compreende um método combinando regressão e análise dos componentes principais (ACP).

A AR trata de uma extensão direta de análise de regressão na modelagem de dados com respostas multivariadas (BORCARD et al., 2011). Para entender melhor a extensão quanto a análise de componentes principais, vale lembrar que este método trata da redução de dimensão de um conjunto de dados de alta dimensão.

Recapitulando, para melhor compreensão de um ACP, considere inicialmente um vetor aleatório X_p com média zero e matriz de covariância \sum_{XX} . Uma possível aproximação q-dimensional de X_p seria $E_q P_q$, tal que as colunas de E_q são autovetores de \sum_{XX} com os q-maiores autovalores ($\lambda_i, i = 1, \dots, q$) e $P_q = E_q^T X$ é o vetor componente principal (BAKALIAN et al., 2010).

São consideradas propriedades do ACP, as amplitudes que não são correlacionadas, os modos ortogonais e a proporção de variância total ótima contabilizada pelos q primeiros autovetores, podendo ser expressa por:

$$R_{XX}^2(q) = \frac{\sum_{i=1}^q \lambda_i}{\sum_{i=1}^p \lambda_i}. \quad (2.36)$$

Dessa maneira, assim como ACP a AR também trata de uma metodologia que ocasiona a descrição de baixas dimensões de relações lineares entre dois vetores aleatórios. Tratando-se de uma análise assimétrica, ela envolve dois conjuntos de variáveis, tal que Y compreende as variáveis respostas e X as variáveis explicativas. Visto de uma forma descritiva, Y é dado tal que os vetores de ordenação resultantes são combinações lineares de X .

A extensão de componentes principais acontece porque as combinações das variáveis respostas Y são dos vetores de ordenação canônicos. E assim como o ACP a AR proporciona uma descrição de baixa dimensão da relação linear entre Y e X . Isso implica que cada um dos vetores de ordenação corresponde a uma projeção unidimensional da distribuição dos objetos em um espaço que conserva entre eles as distâncias euclidianas.

Contudo, os vetores de ordenação diferem dos componentes principais (CP). Isso acontece porque, uma vez que os CPs podem ser computados na tabela de dados Y , os vetores de ordenação são restritos a serem combinações lineares das variáveis em X . (LEGENDRE; LEGENDRE, 2012).

Os trabalhos Bakalian et al (2010) e Capblancq et. al. (2018) tratam sobre AR e ACP. No primeiro trabalho os autores utilizaram AR e ACP combinados de temperaturas globais da superfície do mar e pressões do nível do mar realizados para os dados de reanálise dos Centros Nacionais de Previsão ambiental e uma simulação do modelo climático do Centro Canadense de Modelagem e Análise Climática. Logo, os autores discutiram as vantagens e desvantagens de AR

e ACP combinados, em que a AR tende a ser fornecer uma imagem mais clara e consistente dos processos físicos subjacentes.

Já Capblancq et. al. (2018), visando identificar assinaturas de adaptação local, verificaram que a AR tem um melhor desempenho do que o ACP na identificação da variação adaptativa quando os gradientes de seleção são fracamente correlacionados com a estrutura da população.

Dessa modo, a análise de redundância se mostra uma opção considerável mediante estudos multivariados em análise de grupos. Contudo, para essa metodologia são necessárias alguns passos algébricos dados em duas etapas, tal que X e Y são centrados com média zero. A primeira etapa consiste em uma regressão multivariada calculada para cada variável Y centrada em todas as variáveis X centradas, uma a uma. Os valores ajustados \hat{Y} são produzidos através da seguinte expressão.

$$\hat{Y} = XB = X [X'X]^{-1} X'Y \quad (2.37)$$

a qual é equivalente a uma série de regressões lineares múltiplas de variáveis individuais de Y em X , cálculo dos vetores dos valores ajustados e ligação desses vetores para formar a matriz \hat{Y} .

A segunda etapa consiste em uma análise de CP de \hat{Y} , o qual produz os autovalores e autovetores canônicos assim como os eixos canônicos (scores de ordenação dos objetos). A execução desta etapa é feita para obter diagramas de ordenação de espaço reduzido exigindo os objetos, variáveis de resposta e explicativas para os eixos mais relevantes da relação canônica.

Os eixos canônicos, assim como os valores ajustados de uma regressão linear múltipla, também são combinações lineares das variáveis explicativas em X , as quais são propriedades definidoras dos eixos canônicos.

Assim, a AR trata de uma medida de associação entre X e Y baseada nas correlações entre as variáveis e as variáveis canônicas. Uma vez que, essas correlações dão informações univariadas, a redundância se torna uma medida univariada em vez de multivariada. Supondo que a correlação múltipla quadrada de Y_j regredida por X 's seja dada por $R_{Y_j|X}^2$, a redundância de $Y|v$ é a correlação múltipla quadrada média:

$$Rd(Y|v) = \frac{\sum_{j=1}^p R_{Y_j|X}^2}{p}, \quad (2.38)$$

Sendo análogo a redundância de $X|u$, dada por:

$$Rd(X|u) = \frac{\sum_{j=1}^q R_{X_j|Y}^2}{q}, \quad (2.39)$$

em que $Rd(Y|v)$ e $Rd(X|u)$ não são simétricas.

2.4 Segmentos Caulinares em *Coffea Arabica*

Atualmente o café é uma das bebidas mais consumidas no mundo e apresenta um alto valor econômico. Contando com exportações globais de cafés da espécie arábica em torno de 60%, e da espécie canéfora (robusta) aproximadamente 40% (EMBRAPA, 2023).

Frente a isso, métodos visando plantas mais produtivas e resistentes a doenças são utilizados. Como é o caso de programas de melhoramento de longa duração, o qual justifica o uso de métodos de propagação vegetativa que coletam as melhores características das plantas no final de um período reduzido (ANGELO et al., 2018).

Apesar das propagações vegetativas serem realizadas há algum tempo, quando se fala em *coffea arabica* ela não tem sido muito praticada. Contudo, essa propagação pode ser utilizada tendo como justificativa a exploração imediata de híbridos F_1 . Tais híbridos podem ser obtidos através de cruzamentos Icatu x Catuaí, Icatu x Catimor e Catuaí x Híbrido de TimorLeste (JESUS et al., 2010).

A propagação vegetativa de *coffea arabica* de híbridos F_1 acarretou o interesse desse material em escala comercial, almejando preservar a heterozigose para produtividade e a expressão benéfica para fatores de interesse, como a dificuldade à ferrugem (JESUS et al., 2010). O que caracteriza uma grande economia de tempo devido a redução do número de ciclos de seleção para obtenção de linhagens, certificando a uniformidade da população e manutenção do ganho genético alcançado na seleção (FILHO et al., 2018).

Logo, a clonagem nessas plantas possibilita a sustentação de respectivos fenótipos expressos nos descendentes. Sendo um dos motivos para uma produção da clonagem de mudas via enraizamento de segmentos nodais, em uma escala comercial, a quantidade baixa de ramos ortotrópicos criados pela planta matriz (REZENDE et al., 2017). Um ramo ortotrópico é aquele gerado a partir das gemas seriadas presentes ao longo do tronco do cafeeiro e crescimento vertical em relação ao arbusto cafeeiro (EMBRAPA, 2023).

Outro ponto a ser levado em consideração é a relação do cafeeiro com o meio ambiente, uma vez que a lavoura é influenciada diretamente pelos fatores climáticos no seu desenvolvimento. Logo, a aclimação é um termo determinante para a propagação em massa das plantas cafeeiras. Sendo os ensaios de aclimação em viveiros ou estufas de extrema importância (OYARCE et al., 2021).

Quanto ao método de propagação clonal por estaquia, comumente utilizado no *coffea canephora*, não se apresentou favorável no *coffea arabica*. Um dos motivos seria que o cafeeiro *coffea arabica* não produz naturalmente um número alto de brotos ortotrópicos, reprimindo a multiplicação por corte.

Sendo assim, uma forma de propagação clonal alternativa seria a propagação por miniestaquia. Essa técnica consiste na retirada das minicepas em mini-sebes clonais, geralmente dispostas em casa de vegetação. Logo, este método baseia-se na maior juvenilidade das miniestacas adquiridas de brotos em coletas contínuas neste sistema, o que acarreta um índice de enraizamento melhor do material vegetal (FILHO et al., 2018).

Assim, estudos envolvendo segmentos caulinares em *coffea arabica* no processo de clonagem dos híbridos F₁ podem revolucionar a cafeicultura nos próximos anos. No entanto, ainda há uma defasagem em estudos envolvendo algumas características dessa técnica de enraizamento. Como no caso de otimização do processo produtivo a nível industrial (REZENDE et al., 2017).

3 METODOLOGIA

Em consonância com os objetivos propostos, a metodologia utilizada na obtenção dos resultados, encontra-se descrita em duas seções: 3.1 Cenários de simulação com a adaptação para análise de correlação canônica e análise dos índices de redundância; 3.2 Descrição das variáveis dos segmentos caulinares de uma progênie *coffea arabica* e coleta dos dados.

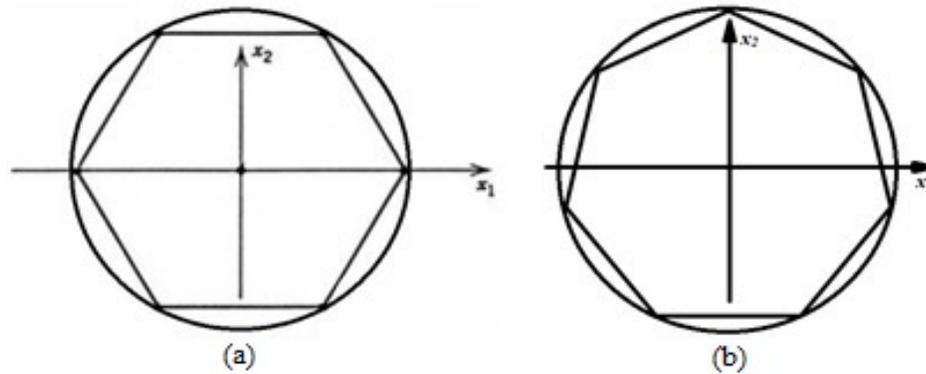
3.1 Cenários de simulação com a adaptação para análise de correlação canônica e análise dos índices de redundância

Conforme citado anteriormente, a composição da matriz de um delineamento equiradial assume dois fatores utilizando coordenadas polares. Contudo, não há nenhuma restrição ao uso de coordenadas esféricas, uma vez que na modelagem estatística espaços neste formato são interessantes, pois atualizam o número de fatores de 2 para 3, o que ocasiona uma exploração de mais interações.

Mediante isso, para este trabalho foram consideradas 4 matrizes com 2 blocos diagonais, definidos pelos delineamentos equiradiais, nos quais, as componentes referentes aos fatores foram especificadas em função das coordenadas polares e esféricas.

Desta forma, seguindo a estrutura hexagonal D_1 e heptagonal D_2 , ambas com o fator de correção $c = (F' + 2\alpha^2)/N$. Dada respectivamente as mesmas estruturas, definiu-se os delineamentos D_3 e D_4 , assumindo o fator de correção $c = 1$. Para cada delineamento equiradial, utilizou-se as coordenadas polares e esféricas e, por fim, o delineamento D_5 como composto central rotacional dado em (2.11).

Figura 3.1 – Representação do delineamento em forma (a) hexagonal e (b) heptagonal.



Fonte: Adaptado de Cirillo (2015).

Dessa maneira as matrizes blocos diagonais construídas foram geradas, conforme as expressões (3.1), (3.2), (3.3) e (3.4).

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} D_{1(N_1 \times p_1)} & 0 \\ 0 & D_{2(N_2 \times p_2)} \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} D_{3(N_1 \times p_1)} & 0 \\ 0 & D_{4(N_2 \times p_2)} \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{M}_3 = \begin{pmatrix} D_{3(N_1 \times p_1)} & 0 \\ 0 & D_{3(N_2 \times p_2)} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{M}_4 = \begin{pmatrix} D_{3(N_1 \times p_1)} & 0 \\ 0 & D_{5(N_2 \times p_2)} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Com estas mesmas especificações $D_i (i = 1, \dots, 5)$, gerou-se os delineamentos D-ótimos, utilizando o algoritmo *exchangeable*, assumindo 500 iterações e uma margem de erro tolerável no procedimento iterativo definido em 0,001. Desta forma, formou-se as matrizes bloco diagonais $M_{1_{opt}}$, $M_{2_{opt}}$, $M_{3_{opt}}$ e $M_{4_{opt}}$, de forma análoga as expressões (3.1), (3.2), (3.3) e (3.4), substituindo os delineamentos D-ótimos gerados.

Para a estimação dos parâmetros considerou-se o produto de kronecker, uma vez que ele leva em consideração as matrizes particionadas testando todos os produtos. Então para efeito de

estimação dos parâmetros não faz diferença a ortogonalidade, entretanto, na geração de um novo delineamento é interessante comparar um delinamento ortogonal e um não ortogonal.

Assim as pré suposições assumidas pelo modelo são dadas por: $E(\varepsilon_j) = 0$; $Var(\varepsilon_j) = 0_{jj}^2 I_N$ sendo $j = 1, 2, \dots, r$; $Cor(\varepsilon_j, \varepsilon_{j'}) = 0_{jj'}^2 I_N$ sendo $j, j' = 1, 2, \dots, r$ em que $(j \neq j')$. Sendo a matriz de covariância dos resíduos estimados conjuntamente definida como

$$Var(\varepsilon) = \sum_{r \times r} \otimes I_N \quad (3.5)$$

em que a matriz $\sum_{r \times r}$ tem seus elementos i e j denotados por $\sigma_{jj'}^2$ onde $j, j' = 1, 2, \dots, r$. Logo, ela pode ser estimada por:

$$\hat{\sum}_{r \times r} = (\hat{\sigma}_j^2) \quad (3.6)$$

em que $\hat{\sigma}_j = \frac{Y_j' [I_N - D_j (D_j' D_j)^{-1} D_j'] [I_N - D_j (D_j' D_j)^{-1} D_j'] Y_j}{N}$ para $j = 1, \dots, r$ (KHURI; CORNELL, 1996).

Dessa maneira, o melhor estimador não viesado para β é obtido pela equação a seguir.

$$\hat{\beta} = (D' \Delta^{-1} D)^{-1} D' \Delta^{-1} Y \quad (3.7)$$

em que $\Delta^{-1} = \sum_{r \times r} \otimes I_N$.

Sendo assim, a adaptação de estruturas de repetição e fatores torna-se necessária para estimar as matrizes de covariância entre e dentro dos níveis de um fator. Logo, seria cabível o estudo envolvendo variáveis canônicas, considerando as matrizes H e L , aplicadas no sistema de equações $(H - \lambda_i L)e_i = 0$.

A solução deste sistema implica a geração das variáveis canônicas que maximiza $\lambda_i = (e_i' H e_i) / (e_i' E e_i)$, sendo e_i o i -ésimo autovetor correspondente ao autovalor λ_i . Nestas condições, na prática, considera λ_1 , que está associado a e_1 , referindo-se ao primeiro par de variáveis canônicas (MAZOUZ; ASSANI; RODRÍGUEZ, 2013)

Com o propósito de aplicar a análise de correlação canônica, computou-se as matrizes de covariâncias, de modo que, o pareamento entre os dados fosse caracterizado pela relação definida a seguir em (3.8) e (3.9).

$$\Sigma_1 = M_i^t M_i \quad \text{para } i = 1, \dots, 4 \quad (3.8)$$

$$\Sigma_2 = \sqrt[p]{\delta \Sigma_1} \quad (3.9)$$

Em função dessas matrizes de covariâncias, dois grupos de variáveis foram gerados via 1000 realizações monte carlo, por meio da distribuição normal multivariada representadas por $X \sim N_p \left(0, \Sigma_1 \right)$ e $Y \sim N_p \left(0, \Sigma_2 \right)$ com amostras de tamanho $n = 30, 70$ e 100 simuladas preservando o pareamento entre os dados. Logo, os cenários utilizados no processo de simulação para cada tamanho amostral foram definidos, conforme layout sugerido na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Layout dos cenários utilizados no processo de simulação monte carlo, para cada tamanho amostral.

δ	Coordenadas	Matrizes utilizadas na Formação dos blocos para composição de bloco diagonal M	
2	Polares	$M_1 = (D_1, D_2)$	$M_{1_{opt}} = (D_{1_{opt}}, D_{2_{opt}})$
		$M_2 = (D_3, D_4)$	$M_{2_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{4_{opt}})$
		$M_3 = (D_3, D_3)$	$M_{3_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{3_{opt}})$
		$M_4 = (D_3, D_5)$	$M_{4_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{5_{opt}})$
2	Esféricas	$M_1 = (D_1, D_2)$	$M_{1_{opt}} = (D_{1_{opt}}, D_{2_{opt}})$
		$M_2 = (D_3, D_4)$	$M_{2_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{4_{opt}})$
		$M_3 = (D_3, D_3)$	$M_{3_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{3_{opt}})$
		$M_4 = (D_3, D_5)$	$M_{4_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{5_{opt}})$
10	Polares	$M_1 = (D_1, D_2)$	$M_{1_{opt}} = (D_{1_{opt}}, D_{2_{opt}})$
		$M_2 = (D_3, D_4)$	$M_{2_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{4_{opt}})$
		$M_3 = (D_3, D_3)$	$M_{3_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{3_{opt}})$
		$M_4 = (D_3, D_5)$	$M_{4_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{5_{opt}})$
10	Esféricas	$M_1 = (D_1, D_2)$	$M_{1_{opt}} = (D_{1_{opt}}, D_{2_{opt}})$
		$M_2 = (D_3, D_4)$	$M_{2_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{4_{opt}})$
		$M_3 = (D_3, D_3)$	$M_{3_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{3_{opt}})$
		$M_4 = (D_3, D_5)$	$M_{4_{opt}} = (D_{3_{opt}}, D_{5_{opt}})$

Fonte: Do autor (2023).

Com a padronização dos dados, utilizando a matriz de correlação, a aplicação da análise de correlação canônica foi realizada seguindo o procedimento proposto por Lattin et al. (2011) com o intuito de pesquisar qual a melhor combinação linear de X e Y que resultará na máxima correlação.

Desta forma enunciando $\mu = Xb$ e $t = Ya$ representando, respectivamente, as combinações lineares de X e Y definidas como pares de variáveis canônicas. Assim, a máxima correlação foi determinada nos coeficientes a e b que maximizaram $r(t, \mu)$ dada em (3.10).

$$r(t, \mu) = \frac{1}{(n-1)} a' Y X b \quad (3.10)$$

sujeito as restrições definidas em (3.11) e (3.12)

$$\frac{1}{(n-1)} a' Y X a = 1 \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{(n-1)} b' Y X b = 1 \quad (3.12)$$

Desta forma, seguindo o procedimento de estimação por meio da máxima verossimilhança, as estimativas das cargas canônicas que relaciona as correlações entre as variáveis originais e canônicas foram determinadas e descritas nas expressões (3.13) e (3.14), respectivamente referindo-se as correlações X e μ e Y e t .

$$f = \frac{1}{n-1} X' \mu = \frac{1}{n-1} X' (Xb) = R_{Xb} \quad (3.13)$$

$$g = \frac{1}{n-1} Y' t = \frac{1}{n-1} Y' (Ya) = R_{Ya} \quad (3.14)$$

Com a obtenção desses resultados, os índices de redundância que explicam a relação da variação de uma combinação linear dada em t é explicada por parte da variação de Y e, de forma análoga, a variação da combinação linear de μ é explicada por parte da variação de X . Os índices de redundância foram estimados conforme as expressões (3.15) e (3.16).

$$R_d(t|\mu) = \left[\frac{r^2(t, \mu)(g'g)}{p} \right] \quad (3.15)$$

$$R_d(\mu|t) = \left[\frac{r^2(t, \mu)(f'f)}{p} \right] \quad (3.16)$$

Em conformidade com a metodologia descrita, elaborou-se um *script* no *software* R para obtenção dos resultados.

3.2 Descrição das variáveis dos segmentos caulinares de uma progênie *coffea arabica* e coleta dos dados

O experimento foi conduzido na área experimental do Setor de Cafeicultura, localizada no Departamento de Agricultura na Escola de Ciências Agrárias de Lavras - ESAL, da Universidade Federal de Lavras (UFLA), Lavras – MG. Foram utilizados os delineamentos composto central e D-ótimo para a avaliação de três fatores selecionados em etapas anteriores. Os fatores foram substrato, sacarose e tiametoxam.

Foram utilizados segmentos caulinares de ramos ortotrópicos de uma única progênie F₂. Os segmentos caulinares foram cortados e preparados para terem apenas um par de gemas vegetativas e um par de folhas. Os ramos foram submersos em solução contendo hipoclorito de sódio (2,5%) durante 10 minutos.

Em seguida, as bases dos segmentos caulinares foram imersas em talco contendo o Ácido-Indol-Butírico (AIB) na concentração de 4.000 mg kg⁻¹. Posteriormente, foram acondicionadas em recipientes de propagação do tipo tubete (120cm³) contendo substrato composto por fibra de coco e casca de pinus em proporções (níveis) estabelecida em função do planejamento experimental (Tabelas 3.3 e 3.2) com adubo de liberação controlada Osmocote Plus® com as seguintes concentrações de minerais: 15% de N; 9% K₂O; 12% de P₂O₅; 0,06% Mg; 2,3% S; 0,05% Cu; 0,45% Fe; 0,06% Mn e 0,02% Mo, na dose de 12,5 g L⁻¹ de substrato.

O fator tiametoxam foi aplicado logo após o acondicionamento dos segmentos caulinares no substrato, os níveis estão detalhados nas Tabelas 3.2 e 3.3 . O fator sacarose foi aplicado no substrato em três épocas, sendo a primeira no momento da instalação, a segunda 15 dias após a instalação e a terceira 30 dias após a instalação dos experimentos.

Figura 3.2 – Experimento referente a formação de mudas clonais de *coffea arabica*.



Fonte: UFLA (2016).

Após oito meses do início do experimento, foram avaliadas algumas características como: a matéria seca da parte aérea e do sistema radicular. Contudo, na hora da coleta algumas parcelas foram perdidas. Mediante isso, os valores dessas parcelas foram obtidos através da estimação de parcelas perdidas de um delineamento em blocos.

Para o planejamento do delineamento composto central para a metodologia de superfície de resposta foi utilizada a função *ccd* () da biblioteca *rsm* (LENTH, 2009). Para o planejamento do delineamento D-ótimo (KIEFER, 1959), o algoritmo de simples troca implementado em linguagem R por Lima e Bueno Filho (2010) .

Assim, os dados coletados se encontram nas tabelas a seguir, tanto na forma natural quanto na forma codificada utilizada nas análises.

Tabela 3.2 – Delineamento subdivisível em blocos com 40 tratamentos selecionados para efeitos principais e quadráticos dos fatores tiametoxam, sacarose e substrato (% de fibra de coco no substrato de casca de pinus) em escala natural. (continua)

Bloco	Escala Natural			Peso raiz (g)	Peso parte aérea (g)
	Substrato (fibra de coco)	Sacarose	Tiametoxam		
1	76,7	3,6	2,8	0,24	1,12
1	23,3	11,2	2,8	0,24	0,29
1	50	7,4	1,8	0,88	0,92
1	23,3	3,6	2,8	0,32	0,65
1	76,7	11,2	0,8	0,27	0,71
1	50	7,4	1,8	1,09	1,17
1	23,3	11,2	0,8	0,17	0,54
1	76,7	3,6	0,8	0,3	0,86
1	50	7,4	1,8	0,65	2,25
1	23,3	3,6	0,8	0,56	1,05
1	76,7	11,2	2,8	0,67	1,87
1	50	13,8	1,8	0,45	0,84
1	50	7,4	0,1	0,29	0,61
1	50	7,4	1,8	0,54	1,14
1	50	1	1,8	0,27	0,63
1	5,1	7,4	1,8	0,38	0,95
1	50	7,4	1,8	0,47	1,79
1	50	7,4	3,5	0,25	0,81
1	94,9	7,4	1,8	0,52	1,14
1	50	7,4	1,8	0,21	0,65
-1	76,7	11,2	2,8	0,34	0,7
-1	23,3	7,4	0,8	0,79	1,35
-1	76,7	11,2	0,8	0,36	0,88

Tabela 3.2 – Delineamento subdivisível em blocos com 40 tratamentos selecionados para efeitos principais e quadráticos dos fatores tiametoxam, sacarose e substrato (% de fibra de coco no substrato de casca de pinus) em escala natural. (conclusão)

Bloco	Escala Natural			Peso raiz (g)	Peso parte aérea (g)
	Substrato (fibra de coco)	Sacarose	Tiametoxam		
-1	76,7	3,6	2,8	0,48	1,14
-1	76,7	3,6	0,8	0,19	0,46
-1	23,3	11,2	0,8	0,52	1,31
-1	50	7,4	0,8	0,54	1,39
-1	23,3	3,6	0,8	0,75	1,24
-1	50	3,6	1,8	0,43	1,24
-1	76,7	3,6	0,8	1,23	1,45
-1	76,7	7,4	1,8	0,8	1,43
-1	23,3	11,2	1,8	0,44	1,1
-1	76,7	7,4	2,8	0,56	0,38
-1	76,7	11,2	0,8	0,37	1,11
-1	23,3	3,6	2,8	0,65	1,3
-1	50	3,6	2,8	0,33	0,83
-1	23,3	7,4	2,8	0,44	1,17
-1	23,3	3,6	1,8	0,42	0,95
-1	23,3	11,2	2,8	0,75	1,65
-1	50	11,2	2,8	0,3	0,8

Fonte: Rezende (2016).

Tabela 3.3 – Delineamento subdivisível em blocos com 40 tratamentos selecionados para efeitos principais e quadráticos dos fatores tiametoxam, sacarose e substrato (% de fibra de coco no substrato de casca de pinus) em escala codificada. (continua)

Bloco	Escala Codificada			Peso raiz (g)	Peso parte aérea (g)
	Substrato (fibra de coco)	Sacarose	Tiametoxam		
1	1	-1	1	0,24	1,12
1	-1	1	1	0,24	0,29
1	0	0	0	0,88	0,92
1	-1	-1	1	0,32	0,65
1	1	1	-1	0,27	0,71
1	0	0	0	1,09	1,17
1	-1	1	-1	0,17	0,54
1	1	-1	-1	0,3	0,86
1	0	0	0	0,65	2,25
1	-1	-1	-1	0,56	1,05
1	1	1	1	0,67	1,87
1	0	1,68	0	0,45	0,84
1	0	0	-1,68	0,29	0,61
1	0	0	0	0,54	1,14
1	0	-1,68	0	0,27	0,63
1	-1,68	0	0	0,38	0,95
1	0	0	0	0,47	1,79
1	0	0	1,68	0,25	0,81
1	1,68	0	0	0,52	1,14
1	0	0	0	0,21	0,65
-1	1	1	1	0,34	0,7
-1	-1	0	-1	0,79	1,35
-1	1	1	-1	0,36	0,88

Tabela 3.3 – Delineamento subdivisível em blocos com 40 tratamentos selecionados para efeitos principais e quadráticos dos fatores tiametoxam, sacarose e substrato (% de fibra de coco no substrato de casca de pinus) em escala codificada. (conclusão)

Bloco	Escala Codificada			Peso raiz (g)	Peso parte aérea (g)
	Substrato (fibra de coco)	Sacarose	Tiametoxam		
-1	1	-1	1	0,48	1,14
-1	1	-1	-1	0,19	0,46
-1	-1	1	-1	0,52	1,31
-1	0	0	-1	0,54	1,39
-1	-1	-1	-1	0,75	1,24
-1	0	-1	0	0,43	1,24
-1	1	-1	-1	1,23	1,45
-1	1	0	0	0,8	1,43
-1	-1	1	0	0,44	1,1
-1	1	0	1	0,56	0,38
-1	1	1	-1	0,37	1,11
-1	-1	-1	1	0,65	1,3
-1	0	-1	1	0,33	0,83
-1	-1	0	1	0,44	1,17
-1	-1	-1	0	0,42	0,95
-1	-1	1	1	0,75	1,65
-1	0	1	1	0,3	0,8

Fonte: Rezende (2016).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Conforme a metodologia proposta, os resultados encontram-se descritos em três seções:

4.1 Resultados referentes à otimização dos delineamentos dos cenários da simulação; 4.2 Análise da correlação do primeiro par canônico e redundâncias do grupo de variáveis da simulação; 4.3 Aplicação a segmentos caulinares de uma progênie *coffea arabica*.

4.1 Resultados referentes à otimização dos delineamentos dos cenários da simulação

Em função dos delineamentos especificados na metodologia, as matrizes de informação dos delineamentos blocos diagonais formadas com coordenadas polares (Anexo A) e esféricas (Anexo B) estão expostas no anexo.

Diante do exposto, nota-se que tais delineamentos de fato caracterizam não ortogonais, justamente por não apresentar uma diagonal que expresse variâncias não nulas. Logo, justifica-se um estudo de otimização para buscar um delineamento que minimize as variâncias das estimativas, utilizando-se como critério a pesquisa de delineamentos D-ótimos, dos quais, os resultados relativos a eficiência comparados com os delineamentos originais, encontram-se descritos na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Eficiência D dos delineamentos M_1 , M_2 , M_3 e M_4 em relação a $M_{1_{opt}}$, $M_{2_{opt}}$, $M_{3_{opt}}$ e $M_{4_{opt}}$ considerando coordenadas polares e esféricas.

Escalas das Coordenadas	Delineamentos	Eficiência D
Polares	$M_1, M_{1_{opt}}$	0,991
	$M_2, M_{2_{opt}}$	1,002
	$M_3, M_{3_{opt}}$	0,739
	$M_4, M_{4_{opt}}$	1,057
Esféricas	$M_1, M_{1_{opt}}$	0,959
	$M_2, M_{2_{opt}}$	1,189
	$M_3, M_{3_{opt}}$	0,665
	$M_4, M_{4_{opt}}$	1,059

Fonte: Do autor (2023).

Com base nos resultados descritos na Tabela 4.1, nota-se que, de um modo geral, a mudança da escala trigonométrica polar para esférica apresentou resultados bem próximos e não originou resultados promissores em relação a eficiência. Outra questão relevante detectada, referiu-se aos casos dos delineamentos ótimos $M_{1_{opt}}$, $M_{2_{opt}}$ e $M_{4_{opt}}$ com eficiências próximas a 1.

Para tais casos, segundo, Jones e Goos (2012) entende-se que, as matrizes ótimas geradas não evidenciaram informações referentes as variâncias das estimativas em comparação as matrizes originais M_1 , M_2 e M_4 .

Em particular, a medida de eficiência para o delineamento $M_{3_{opt}}$ por ser mais inferior ao valor unitário sugeriu que a matriz ótima gerada é mais eficiente em relação a matriz original, uma vez que, a lógica do delineamento D-ótimo consistiu em gerar um delineamento, em que, os intervalos de confiança para as estimativas do parâmetro do modelo serão mais precisos, em relação ao delineamento original.

Ainda em relação à eficiência, Khinkis et al. (2003) afirmam que a eficiência de um delineamento D-ótimo pode ser interpretada como o fator pelo qual um dado delineamento deve ser replicado para obter precisão das estimativas dos parâmetros igual a do delineamento D-ótimo obtido.

Por exemplo, se é obtido um delineamento D-ótimo com eficiência igual a 0,5, significa que o delineamento inicial, a partir do qual o delineamento D-ótimo foi obtido, precisa ser replicado 2 vezes para alcançar a mesma precisão do D-ótimo. Neste contexto, tendo como referência o valor 0,5, tem-se como destaque primeiramente o delineamento $M_{3_{opt}}$ com coordenadas esféricas, em seguida, o mesmo sobre coordenadas polares.

Em uma outra estrutura de arranjo de pontos experimentais, Iwundu (2016) comparou a eficiência D dos delineamentos equiradiais de segunda ordem em relação aos delineamentos compostos centrais rotacionais padronizados definidos nas regiões de delineamento circunscrito e inscrito, os quais são classificados em função da localização dos seus pontos axiais. Lembrando que, os valores de eficiência D dependem do número de pontos no delineamento e o número de variáveis controláveis no modelo.

Este estudo revelou que os delineamentos equiradiais de n pontos, ou seja, $n = 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12$ foram melhores do que os delineamentos compostos centrais inscritos, embora inferior ao delineamento composto central circunscrito com valores de eficiência inferiores a 50% em todos os casos estudados. Ou seja, a localização dos pontos influenciou em termos de eficiência.

Logo, neste estudo tem-se que a localização dos pontos iguais em relação aos 2 blocos apresentaram estimativas referentes à eficiência mais destacadas, visto que M_3 e $M_{3_{opt}}$ foi o resultado mais distante de 1, evidenciando que $M_{3_{opt}}$ é mais eficiente em relação a matriz original.

4.2 Análise da correlação do primeiro par canônico e redundâncias do grupo de variáveis da simulação.

Seguindo os delineamentos originais, a seguir são apresentados os resultados obtidos das correlações médias (ρ_1) do primeiro par de variáveis canônicas de $Y|X$ e $X|Y$ para $M_{3_{opt}}$ em coordenadas polares e esféricas na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 – Correlação média obtida em 1000 realizações monte carlo referente ao primeiro par canônico considerando os delineamentos $M_{3_{opt}}$ com escala trigonométrica polar e esférica.

Tamanho amostral (N)	Grau de heterogeneidade δ	ρ_1 (polar)	ρ_1 (esférica)
30	2	0,944	0,944
	10	0,943	0,943
70	2	0,679	0,681
	10	0,682	0,680
100	2	0,577	0,576
	10	0,578	0,579

Fonte: Do autor (2023).

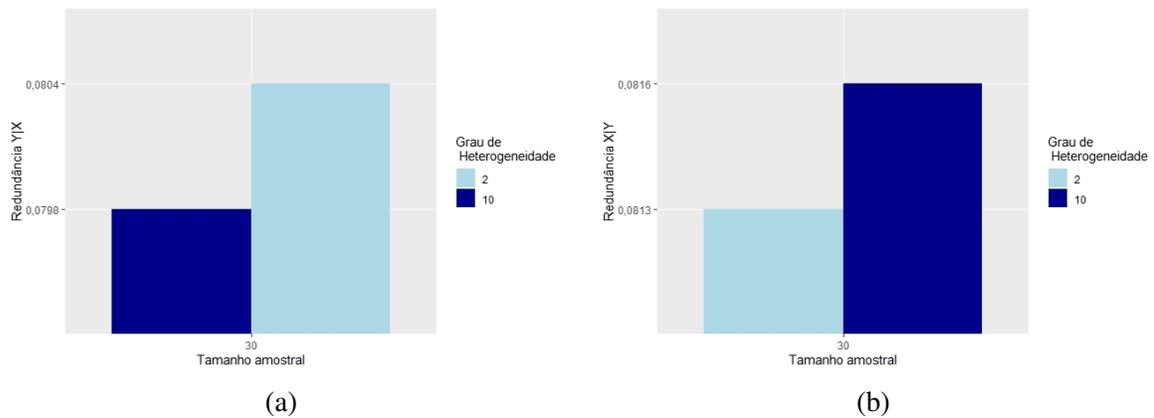
Em virtude dos resultados obtidos respectivos a eficiência terem sido mais relevantes, procedeu-se com a descrição referente a análise de correlação canônica. Assim, por meio da Tabela 4.2, ao comparar a correlação explicada pelo primeiro par canônico, em todos os cenários envolvendo grau de heterogeneidade (δ) e tamanho amostral (N), nota-se que o uso da escala trigonométrica representada nas coordenadas polares e esféricas apresentou resultados similares. No mais, segue os resultados esperados, no tocante ao tamanho amostral, conforme foi incrementado, a estimativa da correlação foi reduzida.

Com ênfase no melhor resultado (Tabela 4.2) verificado em $N = 30$ considerando a matriz $M_{3_{opt}}$, computou-se os índices de redundância para o primeiro par de variável canônica, em cada

situação envolvendo coordenadas polares e esféricas, em função dos graus de heterogeneidade $\delta = 2$ e $\delta = 10$.

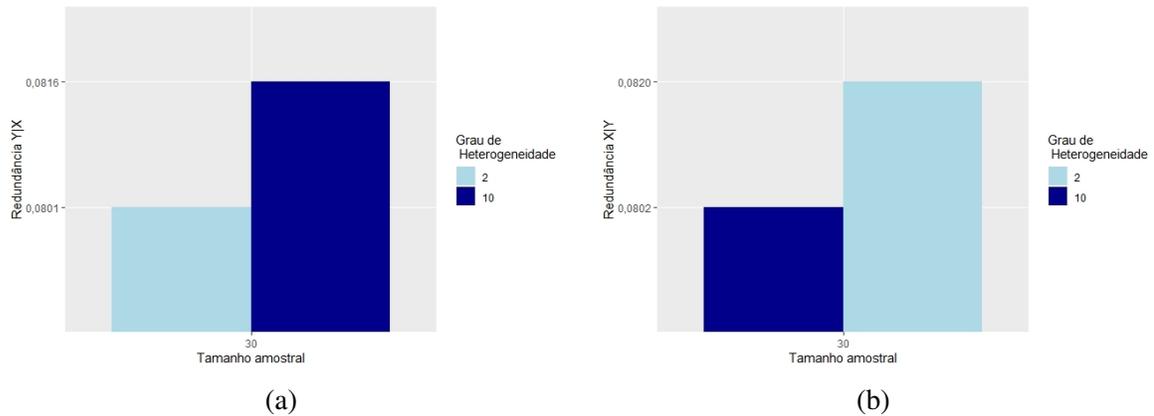
Assim, considerando como grupo de variáveis dependentes Y , e o grupo de variáveis independentes X , pode-se observar por meio das Figuras 4.1(a) e 4.2(a), que aproximadamente 8% da variação do grupo das variáveis dependentes, pode ser explicada pela primeira função canônica do grupo de variáveis independentes, revelando que a especificação dos delineamentos em função das coordenadas esféricas e polares é irrelevante em relação a especificação da ordem dos grupos, como também, a função canônica, ilustrados pela notação $Y|X$ e $X|Y$, cujos resultados poderão ser observados nas Figuras 4.1(b) e 4.2(b).

Figura 4.1 – Estimativas dos índices de redundância para o primeiro par de variáveis canônicas para $N = 30$, em função do grau de heterogeneidade δ considerando o delineamento M_{3opt} com coordenadas polares: (a) $R(Y|X)$ e (b) $R(X|Y)$.



Fonte: Do autor (2023).

Figura 4.2 – Estimativas dos índices de redundância para o primeiro par de variáveis canônicas para $N = 30$, em função do grau de heterogeneidade δ considerando o delineamento $M_{3_{opt}}$ com coordenadas esféricas: (a) $R(Y|X)$ e (b) $R(X|Y)$.



Fonte: Do autor (2023).

4.3 Aplicação a segmentos caulinares de uma progênie *coffea arabica*

Com o propósito de corroborar com a redundância das variáveis observadas nos delineamentos DCCR e DCCR ótimo, seguindo o procedimento metodológico, que contempla as variações “entre” e “dentre” os níveis dos fatores, aplicou-se a correlação canônica, cujos resultados são dados a seguir na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 – Coeficientes do primeiro par de variáveis canônicas (U_1, V_1) e estimação de sua correlação.

Variáveis (DCCR)	U_1	Variáveis (DCCR _{opt})	V_1
Substrato	-0,017	Substrato _{opt}	0,011
Sacarose	-0,167	Sacarose _{opt}	-0,218
Tiametoxam	0,129	Tiametoxam _{opt}	0,785
Peso raiz	-3,386	Peso raiz _{opt}	-0,772
Peso parte aérea	1,631	Peso parte aérea _{opt}	1,248
Correlação canônica (U_1, V_1) = $\rho_1 = 0,778$			

Fonte: Do autor (2023).

em que DCCR_{opt} se trata do DCCR ótimo e Substrato_{opt}, Sacarose_{opt}, Tiametoxam_{opt}, Peso raiz_{opt} e Peso parte aérea_{opt} correspondem as variáveis ótimas.

Os resultados descritos na Tabela 4.3, correspondem aos coeficientes das variáveis, que representam o primeiro par canônico (U_1, V_1). Para este par, a correlação canônica estimada foi 0,778. Embora seja não significativo, ressalta-se que o interesse maior está no escores das variáveis canônicas (U_1, V_1) e na análise da redundância, evidenciada na Tabela 4.4.

Tabela 4.4 – Porcentagem do índice de redundância dos grupos de variáveis dependentes observadas nos delineamentos DCCR e DCCR ótimo explicadas no primeiro par canônico (U_1, V_1).

Índice de redundância	Estimativa (%)
DCCR DCCR _{opt}	22,08
DCCR _{opt} DCCR	19,43

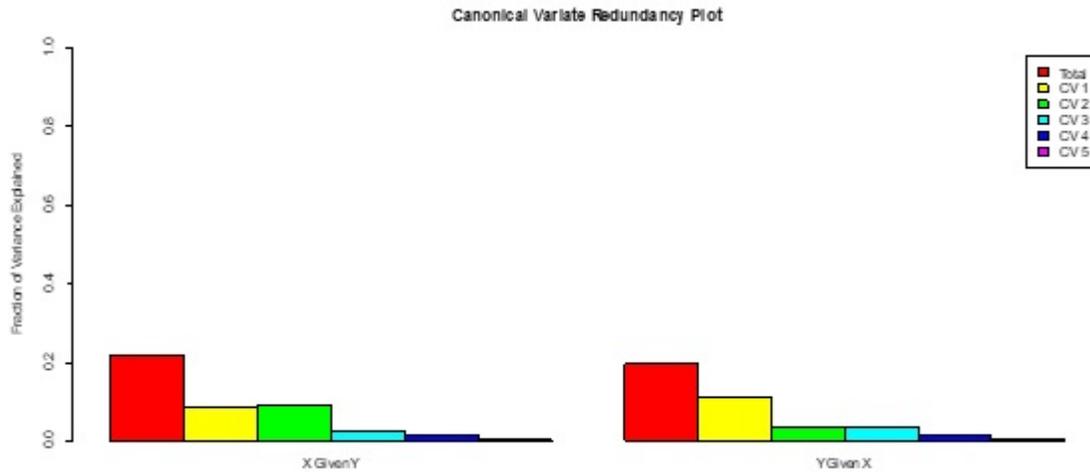
Fonte: Do autor (2023).

Os resultados descritos na Tabela 4.4 mostram que o uso do delineamento composto central otimizado, em termo de perda de informação da variabilidade explicada pelo conjunto de variáveis independentes que formam a primeira variável canônica V_1 é igual a 22,08%.

De forma análoga, a porcentagem da redundância do conjunto de variáveis observados no DCCR ótimo em relação a segunda variável canônica, foi estimada em 19,43%. O valor aproximado entre as duas redundâncias explica que, em termos da redução de dimensão, os escores da primeira ou segunda variável canônica podem substituir a modelagem multivariada considerando os escores na identificação e inferência sobre os tratamentos.

Para fins de comparação a redundância da variabilidade explicada pelos pares de variáveis canônicas, segue ilustrada na Figura 4.3.

Figura 4.3 – Análise da redundância para os pares de variáveis canônicas.



Fonte: Do autor (2023).

Com a confirmação da baixa redundância das variáveis respostas em relação ao primeiro par das variáveis canônicas (U_1, V_1), procedeu-se com o procedimento de otimização considerando os escores gerados pelo mesmo par.

A fim de comparação, considerou-se o modelo linear para o subdivisível em blocos, considerando os delineamentos DCCR e DCCR ótimo, dispostos em blocos. Os resultados encontram-se descritos na Tabela 4.5.

Tabela 4.5 – Estimativas dos parâmetros do modelo linear considerando o delineamento subdivisível em blocos.

Parâmetros	Estimativas
Bloco 1	-0,000000005
β_1	-0,282
β_2	-0,682
β_3	0,236
Bloco 2	-0,039
β_1	0,118
β_2	-0,783
β_3	0,722
SQ_{res}	0,314
R^2	0,677

Fonte: Do autor (2023).

Os resultados descritos na Tabela 4.5 evidenciam que, ao ajustar o modelo de regressão linear para os escores da primeira variável canônica (U_1, V_1) por meio do R^2 , percebeu-se uma proximidade com a correlação canônica detectada em ρ_1 . Tal fato já era esperado. Contudo, destaca-se que no modelo considera-se a estrutura do delineamento ainda sendo não ortogonal, conforme pode-se observar na matriz de informação (4.1).

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 13,645 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 13,645 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 13,645 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 20 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 16 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 15 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 16 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

Todavia, ressalta-se que embora a matriz de informação não seja ortogonal, isso não impede que o método de mínimos quadrados seja utilizado, desde que, considere no processo de estimação o produto de kronecker. Justamente por esse método considerar os produtos cruzados entre os blocos da matriz particionada.

Além disso, com esta aplicação, chama-se a atenção de que a redução de dimensão em dados experimentais não é recomendável a utilização de componentes principais. Mas sim, escores das variáveis canônicas, cuja fundamentação teórica envolve maximização de pares de formas quadráticas correspondentes a variação entre níveis dos fatores. Evidentemente, cada fator por ser uma variável independente poderá ser considerado bloco.

Em se tratando de otimização, naturalmente inclui termos quadráticos por caracterizar modelo com curvatura, sendo propício a estimar respostas de máximos e mínimos. Logo, a fim de comparação modelos quadráticos foram ajustados, considerando os delineamentos sem a blocagem, isto é individuais e com a subdivisão em blocos. As estimativas dos parâmetros, encontram-se descritas na Tabela 4.6.

Tabela 4.6 – Estimativas dos parâmetros do modelo quadrático.

Parâmetros	modelo DCCR	modelo DCCR	Sub-Bloco (Bloco 1)	Sub-Bloco (Bloco 2)
β_0	-0,1638	0,1214	*-0,1638	*0,1214
β_1	-0,2816	0,1237	-0,2816	0,1237
β_2	-0,6819	-0,7709	-0,6819	-0,7709
β_3	0,2359	0,7154	0,2359	0,7154
β_{11}	0,0963	-0,1149	0,0963	-0,1149
β_{22}	0,0251	0,0149	0,0251	0,0149
β_{33}	0,1186	-0,0989	0,1186	-0,0989
Autovalores	$\lambda_1 = 0,1186$	$\lambda_{1_{opt}} = 0,0149$	$\lambda_{1_{sub}} = 0,118$	$\lambda_{4_{sub}} = 0,014$
	$\lambda_2 = 0,0963$	$\lambda_{2_{opt}} = -0,0989$	$\lambda_{2_{sub}} = 0,096$	$\lambda_{5_{sub}} = -0,098$
	$\lambda_3 = 0,0251$	$\lambda_{3_{opt}} = -0,1149$	$\lambda_{3_{sub}} = 0,025$	$\lambda_{6_{sub}} = -0,114$

Fonte: Do autor (2023).

em que * (intercepto) representa a estimativa dos blocos, x_1 os níveis codificados para a variável substrato, x_2 os níveis codificados para a variável sacarose e x_3 os níveis codificados para a variável tiametoxam.

Os resultados descritos na Tabela 4.6, correspondem as estimativas dos modelos quadráticos, individuais a cada delineamento, DCCR e DCCR ótimo e considerando a análise conjunta mencionada como subdivisíveis em blocos, conforme descreve seção 3.1.1.

Além disso, sabendo que ao comparar dois delineamentos ortogonais o resultado será um delineamento ortogonal, o que influi em uma eficiência similar. Tem-se que um delineamento ortogonal comparado com um não ortogonal motiva o uso da otimização obtendo-se os delineamentos ótimos.

Logo, os delineamentos podem ser gerados sendo ortogonais ou não. Em outras palavras, quando se tem delineamentos ortogonais encontrar um ótimo não acarretará grandes diferenças, sendo interessante comparar um ortogonal com um não ortogonal, como foi feito no caso da blocagem.

Seguindo estas especificações, de forma comparativa, nota-se que o ajuste para o DCCR resultou em autovalores positivos, o que permite inferir que o modelo apresenta um ponto estacionário, classificado como ponto de mínimo.

Em se tratando dos demais delineamentos, pode-se observar por meio dos resultados dos autovalores, que os sinais oscilaram entre positivo e negativo. Assim sendo, houve evidências

estatísticas de que o ponto estacionário seja classificado como ponto de sela ou *outlier*. Portanto, justifica-se a implementação da análise *ridge*, cujos resultados são dados a seguir na Tabela 4.7.

Tabela 4.7 – Resultados ótimos obtidos pela análise *ridge* para cada delineamento, em função dos objetivos máximos e mínimos.

Delineamento	Objetivo	Substrato	Sacarose	Tiametoxam	Valores preditos escores (U_1, V_1)
DCCR (original)	Máximo	-	-	-	
	Mínimo	86,55	58,985	0,805	-5,115
Análise <i>ridge</i>					
DCCR (ótimo)	Máximo	53,552	3,029	2,597	0,858
	Mínimo	46,204	9,993	1,007	-0,434
DCCR subdivisível em blocos	Máximo	33,192	3,006	2,386	1,189
	Mínimo	60,265	11,790	1,496	-1,942

Fonte: Do autor (2023).

Por meio dos resultados, descritos na Tabela 4.7, ao considerar o DCCR original, cujo delineamento não envolve subdivisão em blocos, inferiu-se de forma exata que a combinação dos níveis dos fatores resultou em um escore para o primeiro par de variável canônica (U_1, V_1), um escore predito mínimo de -5,115, o que denota um valor incoerente, em relação a magnitude dos escores, compreendida em um intervalo de [-1,928; 1,971].

Em se tratando do delineamento DCCR-ótimo, bem como, DCCR subdivisível em blocos, o qual contempla na blocagem o delineamento DCCR original, para a resposta de máxima, percebeu-se que não houve diferenças discrepantes entre os níveis de sacarose e tiametoxam. Contudo, pode-se verificar que o nível de substrato foi reduzido, com valor a um nível de 33,19. Porém, analisando a resposta mínima, percebeu-se um aumento expressivo nos níveis de substrato.

Uma possível explicação em termos práticos em relação a essa sensibilidade do fator substrato pode ser atribuída no fato de que a escolha do substrato foi justamente por se tratar de um fator muito sensível para o enraizamento de um segmento caulinar de um *coffea arabica*. O qual refletiu diretamente nas variáveis peso da raiz e peso da parte aérea.

Em relação ao fator sacarose tem o objetivo de fornecer energia para o desenvolvimento do enraizamento e o tiametoxam se trata de um inseticida que tem o efeito fisioativador, o qual

estimula algumas rotas metabólicas na planta que vai refletir numa ativação fisiológica, o que em campo promove maior enraizamento. Frente a isso, não se mostraram tão sensíveis em relação ao enraizamento quanto o substrato, considerado um fator muito importante em relação ao enraizamento de um segmento caulinar.

Quanto a seleção do delineamento em relação aos resultados obtidos quanto as recomendações do ótimo e do subdivisível em blocos do ponto de vista numérico, apesar da discrepância do substrato, independe visto que no geral os resultados foram bem próximos.

Contudo, partindo do pressuposto que a análise em blocos é mais informativa porque considera um efeito a mais, torna-se mais interessante considerá-la, visto que na prática o estudo consiste em maximizar ou minimizar a resposta. Como no caso do peso da raiz e peso da parte aérea o uso dos escores consiste justamente para a obtenção de uma conclusão conjunta dessas variáveis, que maximize alguma informação retratada em todas as variáveis simultaneamente.

Por fim, deve ser levado em consideração também a disponibilidade de materiais do pesquisador, como o fator substrato, o qual apresentou uma diferença mais discrepante nos dois casos. Ademais, em relação a disposição dos pontos experimentais, uma vez que são igualmente espaçados, isso garante a propriedade da variância de predição. Logo independente do número de pontos, acredita-se que não vai interferir no experimento visto que não interfere na estimativa dos parâmetros.

5 CONCLUSÃO

O procedimento de otimização para pesquisa de novos delineamentos mais eficientes foi adequado, com resultados promissores para delineamentos equirradiais (D_3), especificados com coordenadas esféricas e/ou polares. Quanto a porcentagem de variação explicada pelo primeiro par canônico e os índices de redundância, o delineamento ótimo apresentou resultados similares em relação ao uso das coordenadas polares e esféricas, para todas as situações envolvendo grau de heterogeneidade entre as matrizes de covariâncias e tamanhos amostrais.

Em relação a aplicação, recomenda-se a blocagem nos delineamentos DCCR na abordagem original e otimizada, a ser considerada em um único delineamento, nomeado como subdivisível em blocos. No qual, dado a análise ridge evidenciou que os níveis do fator substrato são mais sensíveis a otimização dos escores preditos obtidos no primeiro par de variáveis canônicas (U_1, V_1). Esse resultado condiz com o esperado na prática uma vez que o substrato se trata de um fator com maior sensibilidade em relação ao enraizamento de um segmento caulinar de um *coffea arabica*.

Ademais, conforme foi observado há a ocorrência da não ortogonalidade. Através da aplicação da técnica de otimização de delineamentos verificou-se que independente da ortogonalidade ou não ortogonalidade, os resultados obtidos pela estimação dos parâmetros considerando os delineamentos individuais ou conjuntos dado pela subdivisão em blocos foram idênticos.

- ANGELO, P. d. S. et al. Sprouting induction for micro-cutting on in vitro cloned arabica coffee plants. **Coffee Science**, Coffee Science, Universidade Federal de Lavras, v. 13, n. 4, p. 489–497, 2018.
- ARIMARSETIOWATI, R. et al. Anatomical studies and evaluation of genetic stability in plantlets derived from somatic embryos of arabica coffee. **HAYATI Journal of Biosciences**, v. 30, n. 3, p. 510–521, 2023.
- BAKALIAN, F. et al. Exploring atmosphere–ocean coupling using principal component and redundancy analysis. **Journal of Climate**, American Meteorological Society, v. 23, n. 18, p. 4926–4943, 2010.
- BORCARD, D. et al. **Numerical ecology with R**. [S.l.]: Springer, 2011.
- BOX, G. E.; HUNTER, J. S. et al. Multi-factor experimental designs for exploring response surfaces. **The Annals of Mathematical Statistics**, Institute of Mathematical Statistics, v. 28, n. 1, p. 195–241, 1957.
- BOX, G. E.; WILSON, K. B. On the experimental attainment of optimum conditions. **Journal of the royal statistical society: Series b (Methodological)**, Wiley Online Library, v. 13, n. 1, p. 1–38, 1951.
- CAPBLANCQ, T. et al. Evaluation of redundancy analysis to identify signatures of local adaptation. **Molecular ecology resources**, Wiley Online Library, v. 18, n. 6, p. 1223–1233, 2018.
- CIRILLO, M. Otimização na experimentação: aplicações nas engenharias e ciências agrárias. **Lavras: UFLA**, 2015.
- CONAGIN, A. Delineamentos "compostos centrais ortogonais, rotacionais e divisíveis em blocos". **Bragantia**, Scielo Brasil, v. 41, n. 1, p. 49–56, 1982.
- EMBRAPA. **Exportações de café em nível mundial totalizam 72,19 milhões de sacas sendo 42,52 milhões de café arábica (58%) e 29,67 milhões de robusta (42%) no período de outubro de 2022 a abril de 2023**. 2023. Disponível em: < <https://www.embrapa.br/busca-de-noticias/-/noticia/81302797/exportacoes-de-cafe-em-nivel-mundial-totalizam-7219-milhoes-de-sacas-sendo-4252-milhoes-de-cafe-arabica-58-e-2967-milhoes-de-robusta-42-no-periodo-de-outubro-de-2022-a-abril-de-2023>>.
- FERRÃO, R. G. et al. **Melhoramento genético de Coffea canephora**. 2. ed. [S.l.]: Vitória: Incaper, 2017.
- FILHO, P. F. M. C. et al. Effect of growth regulators in production and rooting of coffea arabica l. minicuttings. **American Journal of Plant Sciences**, Scientific Research Publishing, v. 9, n. 4, p. 628–636, 2018.
- GHOSH, S.; RAO, C. R. **Design and analysis of experiments**. [S.l.]: Elsevier, 1996.

- HOTELLING, H. Relations between two sets of variates. **Biometrika**, p. 321–377, 1936.
- HOWARD, J. H.; BALDWIN, R. F.; BROWN, B. L. Exploratory analysis for complex-life-cycle amphibians: Revealing complex forest-reproductive effort relationships using redundancy analysis. **Forest ecology and management**, Elsevier, v. 270, p. 175–182, 2012.
- IWUNDU, M.; ONU, O. Equiradial designs under changing axial distances, design sizes and varying center runs with their relationships to the central composite designs. 2017.
- IWUNDU, M. P. Alternative second-order n-point spherical response surface methodology designs and their efficiencies. **International Journal of Statistics and Probability**, Canadian Center of Science and Education, v. 5, p. 22–30, 2016.
- JESUS, A. M. S. et al. Observações anatômicas em plantas de coffea arabica l. obtidas por enraizamento de estacas. **Revista Ceres**, SciELO Brasil, v. 57, p. 175–180, 2010.
- JOHNSON, R.; WICHERN, D. Applied multivariate statistical analysis. **Pearson New International Edition**, 2014.
- JONES, B.; GOOS, P. I-optimal versus d-optimal split-plot response surface designs. **Journal of Quality Technology**, Taylor & Francis, v. 44, n. 2, p. 85–101, 2012.
- JÚNIOR, J. J. T. G. et al. Growth and physiological quality in clonal seedlings of robusta coffee. **Revista Ciência Agronômica**, SciELO Brasil, v. 51, 2020.
- KHINKIS, L. A. et al. Optimal design for estimating parameters of the 4-parameter hill model. **Nonlinearity in biology, toxicology, medicine**, SAGE Publications Sage CA: Los Angeles, CA, v. 1, n. 3, p. 363–377, 2003.
- KHURI, A. I.; CORNELL, J. Response surfaces: designs and analyses (vol. 152). **CRC Press LLC**, 1996.
- KHURI, A. I.; CORNELL, J. A. **Response surfaces: designs and analyses**. [S.l.]: Routledge, 2018.
- KIEFER, J. Optimum experimental designs. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)**, Wiley Online Library, v. 21, n. 2, p. 272–304, 1959.
- LATTIN, J.; CARROLL, J. D.; GREEN, P. E. Análise de dados multivariados. **São Paulo: Cengage Learning**, v. 475, 2011.
- LEGENDRE, P.; LEGENDRE, L. **Numerical ecology**. [S.l.]: Elsevier, 2012.
- LEGENDRE, P.; OKSANEN, J.; BRAAK, C. J. ter. Testing the significance of canonical axes in redundancy analysis. **Methods in Ecology and Evolution**, Wiley Online Library, v. 2, n. 3, p. 269–277, 2011.
- LENTH, R. V. rsm: Response-surface analysis. **Comprehensive R Archive Network (CRAN)**. <https://cran.r-project.org/web/packages/rsm/index.html> [accessed Feb 12 2016], 2009.

- LIMA, C. N. de; FILHO, J. S. d. S. B. Escolha de tratamentos otimizados na construç ao de fatorias fracionarios. **Rev. Bras. Biom**, v. 28, n. 3, p. 1–14, 2010.
- MAZOUZ, R.; ASSANI, A. A.; RODRÍGUEZ, M. A. Application of redundancy analysis to hydroclimatology: A case study of spring heavy floods in southern québec (canada). **Journal of hydrology**, Elsevier, v. 496, p. 187–194, 2013.
- MONROY, L. G. D. **Estadística multivariada: inferencia y métodos**. [S.l.]: Universidad Nacional de Colombia, 2012.
- MONTGOMERY, D. C. **Design and Analysis of Experiments**. [S.l.]: John Wiley and Sons, 2001.
- MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. **Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016.
- OYARCE, J. C. et al. Clonal propagation of coffea arabica with indole butyric acid and acclimatization conditions in amazonas, peru. **International Journal of Agronomy**, Hindawi Limited, v. 2021, p. 1–8, 2021.
- RAO, C. R. The use and interpretation of principal component analysis in applied research. **Sankhyā: The Indian Journal of Statistics, Series A**, JSTOR, p. 329–358, 1964.
- RENCHER, A. C. **Methods of Multivariate Analysis**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2002.
- REZENDE, T. et al. Vegetative propagation of coffee by mini-cutting. **Coffee Science**, Coffee Science, Universidade Federal de Lavras, v. 12, n. 1, p. 91–99, 2017.
- REZENDE, T. T. Clonagem de coffea arabica l. por enraizamento de segmentos de ramos ortotrópicos. Universidade Federal de Lavras, 2016.
- REZENDE, T. T. et al. Types of stem cuttings and environments on the growth of coffee stem shoots. **Scientia Agraria**, Universidade Federal do Paraná, v. 11, n. 5, p. 387–391, 2010.
- SILVESTRINI, R. T. Considerations for d-optimal sequential design. **Quality and Reliability Engineering International**, Wiley Online Library, v. 31, n. 3, p. 399–410, 2015.
- SMUCKER, B.; KRZYWINSKI, M.; ALTMAN, N. Optimal experimental design. **Nature methods**, Nature Publishing Group, v. 15, n. 8, p. 559–560, 2018.
- UFLA. **Pesquisa da ufla analisa técnica de miniestaquia na formação de mudas clonais de café arábica**. 2016. Disponível em: < <https://www.ufla.br/dcom/2016/06/14/pesquisa-da-ufla-analisa-tecnica-de-miniestaquia-na-formacao-de-mudas-clonais-de-cafe-arabica/>>.
- VALLEJOS-TORRES, G. et al. Propagation of rust-tolerant coffea arabica l. plants by sprout rooting in microtunnels. **Journal of Soil Science and Plant Nutrition**, Springer, v. 20, p. 933–940, 2020.

WANG, H.-T. et al. Finding the needle in a high-dimensional haystack: Canonical correlation analysis for neuroscientists. **NeuroImage**, Elsevier, v. 216, p. 116745, 2020.

WOLLENBERG, A. L. V. D. Redundancy analysis an alternative for canonical correlation analysis. **Psychometrika**, Springer, v. 42, n. 2, p. 207–219, 1977.

ZHANG, Z.; XIAOFENG, B. Comparison about the three central composite designs with simulation. **2009 International Conference on Advanced Computer Control**. IEEE, p. 163–167, 2009.

ANEXO A – Delineamentos utilizados na construção das matrizes em coordenadas polares.

D_1 (hexagonal) e D_2 (heptagonal) considerando um fator de correção c conforme proposto por Conagin (1982). D_3 (hexagonal) e D_4 (heptagonal) considerando um fator de correção

$$c = 1.$$

$$D_1 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,197 & -0,853 & 0,000 \\ 1,000 & 0,500 & 0,866 & -0,553 & -0,053 & 0,433 \\ 1,000 & -0,500 & 0,866 & -1,053 & -0,053 & -0,433 \\ 1,000 & -1,000 & 0,000 & 0,197 & -0,853 & 0,000 \\ 1,000 & -0,500 & -0,866 & -1,053 & -0,053 & 0,433 \\ 1,000 & 0,500 & -0,866 & -0,553 & -0,053 & -0,433 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 1,196 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 1,196 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$D_2 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,181 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & 0,623 & 0,781 & -0,431 & -0,210 & 0,486 \\ 1,000 & -0,222 & 0,974 & -0,770 & 0,129 & -0,216 \\ 1,000 & -0,901 & 0,433 & -0,007 & -0,632 & -0,390 \\ 1,000 & -0,900 & 0,434 & -0,009 & -0,631 & -0,391 \\ 1,000 & -0,223 & -0,975 & -0,770 & 0,132 & 0,217 \\ 1,000 & 0,622 & -0,782 & -0,432 & -0,208 & -0,486 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 1,180 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 1,180 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$D_3 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,500 & 0,866 & -0,750 & -0,250 & 0,433 \\ 1,000 & -0,500 & 0,866 & -1,250 & -0,250 & -0,433 \\ 1,000 & -1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -0,500 & -0,866 & -1,250 & -0,250 & 0,433 \\ 1,000 & 0,500 & -0,866 & -0,750 & -0,250 & -0,433 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$D_4 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,623 & 0,781 & -0,612 & -0,391 & 0,486 \\ 1,000 & -0,222 & 0,974 & -0,951 & -0,052 & -0,216 \\ 1,000 & -0,901 & 0,433 & -0,188 & -0,813 & -0,390 \\ 1,000 & -0,900 & 0,434 & -0,190 & -0,812 & -0,391 \\ 1,000 & -0,223 & -0,975 & -0,951 & -0,049 & 0,217 \\ 1,000 & 0,622 & -0,782 & -0,613 & -0,389 & -0,486 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (4)$$

ANEXO B – Delineamentos utilizados na construção das matrizes em coordenadas esféricas. D_1 (hexagonal) e D_2 (heptagonal) considerando um fator de correção c conforme proposto por Conagin (1982). D_3 (hexagonal) e D_4 (heptagonal) considerando um fator de correção $c = 1$.

$$D_1 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,197 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & 0,250 & 0,433 & -0,740 & -0,616 & 0,108 \\ 1,000 & -0,433 & 0,750 & -0,616 & -0,240 & -0,325 \\ 1,000 & 0,000 & 0,000 & -0,803 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & -0,250 & -0,433 & -0,740 & -0,616 & 0,108 \\ 1,000 & 0,433 & -0,750 & -0,616 & -0,240 & -0,325 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 1,196 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 1,196 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$D_2 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,181 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & 0,389 & 0,487 & -0,668 & -0,582 & 0,189 \\ 1,000 & -0,217 & 0,488 & -0,772 & 0,085 & -0,206 \\ 1,000 & -0,391 & 0,489 & -0,666 & -0,784 & -0,074 \\ 1,000 & -0,812 & 0,490 & -0,16 & -0,666 & -0,317 \\ 1,000 & -0,049 & 0,491 & -0,817 & 0,772 & 0,011 \\ 1,000 & 0,488 & 0,611 & -0,581 & -0,446 & -0,298 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 1,180 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 1,180 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$D_3 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,250 & 0,433 & -0,937 & -0,813 & 0,108 \\ 1,000 & -0,433 & 0,750 & -0,813 & -0,437 & -0,325 \\ 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -0,250 & -0,433 & -0,937 & -0,813 & 0,108 \\ 1,000 & 0,433 & -0,750 & -0,813 & -0,437 & -0,325 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$D_4 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,389 & 0,487 & -0,849 & -0,763 & 0,189 \\ 1,000 & -0,217 & 0,488 & -0,953 & -0,096 & -0,206 \\ 1,000 & -0,391 & 0,489 & -0,847 & -0,965 & -0,074 \\ 1,000 & -0,812 & 0,490 & -0,341 & -0,847 & -0,317 \\ 1,000 & -0,049 & 0,491 & -0,998 & -0,953 & 0,011 \\ 1,000 & 0,488 & 0,611 & -0,762 & -0,627 & -0,298 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (8)$$

ANEXO C – Delineamentos utilizados na construção das matrizes em coordenadas polares otimizadas. D_1 (hexagonal) e D_2 (heptagonal) considerando um fator de correção c conforme proposto por Conagin (1982). D_3 (hexagonal) e D_4 (heptagonal) considerando um fator de correção $c = 1$.

$$D_1 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,197 & -0,853 & 0,000 \\ 1,000 & 0,500 & 0,866 & -0,553 & -0,053 & 0,433 \\ 1,000 & -0,500 & 0,866 & -1,053 & -0,053 & -0,433 \\ 1,000 & -0,500 & 0,866 & -1,053 & -0,053 & -0,433 \\ 1,000 & -0,500 & -0,866 & -1,053 & -0,053 & 0,433 \\ 1,000 & 0,500 & -0,866 & -0,553 & -0,053 & -0,433 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 1,196 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 1,196 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$D_2 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,181 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & 0,623 & 0,781 & -0,431 & -0,210 & 0,486 \\ 1,000 & -0,222 & 0,974 & -0,770 & 0,129 & -0,216 \\ 1,000 & -0,223 & -0,975 & -0,770 & 0,132 & 0,217 \\ 1,000 & -0,900 & 0,434 & -0,009 & -0,631 & -0,391 \\ 1,000 & -0,223 & -0,975 & -0,770 & 0,132 & 0,217 \\ 1,000 & 0,622 & -0,782 & -0,432 & -0,208 & -0,486 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 1,180 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 1,180 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (10)$$

$$D_3 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & -0,500 & 0,866 & -1,250 & -0,250 & -0,433 \\ 1,000 & -1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -0,500 & -0,866 & -1,250 & -0,250 & 0,433 \\ 1,000 & 0,500 & -0,866 & -0,750 & -0,250 & -0,433 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$D_4 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,623 & 0,781 & -0,612 & -0,391 & 0,486 \\ 1,000 & -0,222 & 0,974 & -0,951 & -0,052 & -0,216 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & -0,900 & 0,434 & -0,190 & -0,812 & -0,391 \\ 1,000 & -0,223 & -0,975 & -0,951 & -0,049 & 0,217 \\ 1,000 & 0,622 & -0,782 & -0,613 & -0,389 & -0,486 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (12)$$

ANEXO D – Delineamentos utilizados na construção das matrizes em coordenadas esféricas otimizadas. D_1 (hexagonal) e D_2 (heptagonal) considerando um fator de correção c conforme proposto por Conagin (1982). D_3 (hexagonal) e D_4 (heptagonal) considerando um fator de correção $c = 1$.

$$D_1 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,197 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & 0,250 & 0,433 & -0,740 & -0,616 & 0,108 \\ 1,000 & -0,433 & 0,750 & -0,616 & -0,240 & -0,325 \\ 1,000 & 0,000 & 0,000 & -0,803 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \\ 1,000 & 0,433 & -0,750 & -0,616 & -0,240 & -0,325 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 1,196 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 1,196 & -0,803 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,803 & 1,196 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$D_2 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,181 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & 0,389 & 0,487 & -0,668 & -0,582 & 0,189 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \\ 1,000 & -0,391 & 0,489 & -0,666 & -0,784 & -0,074 \\ 1,000 & -0,812 & 0,490 & -0,160 & -0,666 & -0,317 \\ 1,000 & -0,049 & 0,491 & -0,817 & 0,772 & 0,011 \\ 1,000 & 0,488 & 0,611 & -0,581 & -0,446 & -0,298 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 1,180 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 1,180 & -0,819 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -0,819 & 1,180 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$D_3 = \begin{pmatrix} 1,000 & 0,433 & -0,750 & -0,813 & -0,437 & -0,325 \\ 1,000 & 0,250 & 0,433 & -0,937 & -0,813 & 0,108 \\ 1,000 & -0,433 & 0,750 & -0,813 & -0,437 & -0,325 \\ 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -0,250 & -0,433 & -0,937 & -0,813 & 0,108 \\ 1,000 & 0,433 & -0,750 & -0,813 & -0,437 & -0,325 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & 1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (15)$$

$$D_4 = \begin{pmatrix} 1,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & 0,389 & 0,487 & -0,849 & -0,763 & 0,189 \\ 1,000 & -0,217 & 0,488 & -0,953 & -0,096 & -0,206 \\ 1,000 & -0,391 & 0,489 & -0,847 & -0,965 & -0,074 \\ 1,000 & -0,812 & 0,490 & -0,341 & -0,847 & -0,317 \\ 1,000 & -0,049 & 0,491 & -0,998 & -0,953 & 0,011 \\ 1,000 & 0,488 & 0,611 & -0,762 & -0,627 & -0,298 \\ 1,000 & 1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -1,414 & 0,000 & 0,999 & -1,000 & 0,000 \\ 1,000 & -0,217 & 0,488 & -0,953 & -0,096 & -0,206 \\ 1,000 & 0,000 & -1,414 & -1,000 & 0,999 & 0,000 \end{pmatrix} \quad (16)$$

ANEXO E – Script modelagem quadrática para o DCCR subdivisível em blocos.

```

rm(list = ls())

##### Entrada dos dados #####

D <- read.table("D.txt",h=T); D

D["x12"] = D$x1^2
D["x22"] = D$x2^2
D["x32"] = D$x3^2

D["x52"] = D$x5^2
D["x62"] = D$x6^2
D["x72"] = D$x7^2

# yres escores primeiro par de variaveis canonicas

yres <- c(1.1739513, -0.5332334, -1.6244492, 1.0500376, -1.1205871, -1.9276807,
          -0.145762, 0.2894475, 1.3235566, 0.6326039, -0.3255533, -1.3659913,
          -0.3512159, -0.1144845, 1.0347181, 0.8854479, 1.1826967, 0.5478137,
          -0.8148931, 0.2035771, -0.1303143, -1.0021627, -1.4915797, 1.9710436,
          -0.2241238, -1.6738687, -0.4616097, -0.2783797, 1.0515065, 0.208591,
          0.470551, -1.0889534, 0.1307525, -1.2122904, 1.4441151, 1.4022861,
          0.6137943, 0.3996552, 0.1433346, -0.2723473)

##### Estimacao dos parametros #####

n <- 40
In <- (diag(rep(1,n))); In
DtD <- as.matrix(t(D))%*%as.matrix(D)

```

```

inv_DtD <- solve(DtD)
yrest <- t(yres); yrest
Dt <- t(D)
yres <- as.matrix(yres); yres
class(yres)
sigma_est <- (as.matrix(yrest)%*%
              (as.matrix(In) - as.matrix(D)%*%as.matrix(inv_DtD)%*%
                as.matrix(Dt))%*%
              (as.matrix(In) - as.matrix(D)%*%as.matrix(inv_DtD)%*%
                as.matrix(Dt))
              %*%as.matrix(yres))/n
mat_corr <- sigma_est^2
delta <- kronecker(solve(mat_corr), In)
Dt_invdelta_D <- as.matrix(t(D))%*%as.matrix(solve(delta))%*%as.matrix(D)
beta <- solve(Dt_invdelta_D)%*%Dt%*%solve(delta)%*%yres; beta
b0 <- beta[1:1];b0

# ##### Formacao da matriz B e b ##### #

# ##### Matriz dos efeitos principais ##### #

b1=as.matrix(beta[2:8,1:1])
b <- c(b1[1,1], b1[2,1],b1[3,1],b1[5,1],b1[6,1],b1[7,1]); b

# ##### Matriz dos efeitos quadraticos ##### #

part_q=diag(c(beta[9,1],beta[10,1],beta[11,1],beta[12,1],beta[13,1],
              beta[14,1]))

B=part_q; B

# ##### Ponto Estacionario ##### #

```

```
Xs = -0.5*(solve(B)%*%b)

# ##### Operacao com autovetores e auto valores ##### #

av=eigen(B); av

# ##### Autovalores: Analise do ponto esta. ##### #

a_val=av$values

# ##### Predicao do ponto estacionario Xs ##### #

pred <-function (x) {b0 + 0.5*t(Xs)%*%b}

pred(Xs)

# ##### Retornando a escala original ##### #

ret_esc=function(x)

{

  esc=matrix(0,3,1)

  sub=x[1,1]*26.7 + 50; esc[1,1]=sub

  sac=x[2,1]*3.8 + 7.4 ;   esc[2,1]=sac
```

```
tiam=x[3,1]*1 + 1.8 ;   esc[3,1]=tiam
```

```
return(resc=esc)
```

```
}
```

```
exec_ret_esc=ret_esc(Xs)
```

ANEXO F – Tabelas dos valores preditos versus os raios, mediante os fatores substrato, sacarose e tiametoxam quanto a análise ridge.

Tabela 1 – Valores do máximo referente ao DCCR subdivisível em blocos.

\hat{y}	Raio	Substrato	Sacarose	Tiametoxam
14,081	86,551	-108,659	-6,255	87,978
3,423	6,889	-27,209	-3,407	6,275
2,626	4,739	-1,018	-1,542	4,097
2,176	3,815	11,905	-0,226	3,345
1,868	3,246	19,604	0,752	2,964
1,637	2,844	24,714	1,508	2,734
1,456	2,540	28,354	2,109	2,579
1,310	2,299	31,077	2,599	2,469
1,189	2,103	33,192	3,006	2,386
1,088	1,939	34,882	3,349	2,321

Tabela 2 – Valores do mínimo referente ao DCCR subdivisível em blocos.

\hat{y}	Raio	Substrato	Sacarose	Tiametoxam
-9,060	21,306	67,383	16,328	1,306
-4,819	8,661	65,582	15,016	1,352
-3,557	5,872	64,119	14,040	1,391
-2,893	4,541	62,907	13,286	1,424
-2,468	3,746	61,887	12,686	1,452
-2,168	3,209	61,016	12,196	1,476
-1,942	2,818	60,265	11,790	1,496
-1,765	2,518	59,609	11,447	1,515
-1,621	2,279	59,032	11,154	1,531
-1,502	2,085	58,520	10,901	1,546

Tabela 3 – Valores do máximo referente ao DCCR ótimo.

\hat{y}	Raio	Substrato	Sacarose	Tiametoxam
1,131	1,941	54,526	1,169	2,825
1,094	1,869	54,405	1,423	2,7965
1,061	1,803	54,291	1,657	2,769
1,029	1,741	54,182	1,874	2,744
1,000	1,683	54,079	2,075	2,719
0,973	1,629	53,980	2,262	2,697
0,947	1,579	53,887	2,436	2,675
0,923	1,532	53,797	2,599	2,654
0,899	1,487	53,712	2,751	2,634
0,878	1,445	53,630	2,894	2,615
0,858	1,406	53,552	3,028	2,597

Tabela 4 – Valores do mínimo referente ao DCCR ótimo.

\hat{y}	Raio	Substrato	Sacarose	Tiametoxam
-0,574	1,327	45,070	10,551	0,781
-0,557	1,293	45,213	10,484	0,809
-0,541	1,262	45,348	10,421	0,836
-0,525	1,232	45,476	10,359	0,861
-0,510	1,203	45,596	10,301	0,885
-0,496	1,176	45,711	10,245	0,908
-0,483	1,149	45,819	10,191	0,929
-0,469	1,125	45,922	10,138	0,950
-0,457	1,101	46,021	10,088	0,970
-0,446	1,078	46,114	10,039	0,989
-0,434	1,056	46,204	9,993	1,007