

ESCOLHA DE TRATAMENTOS OTIMIZADOS NA CONSTRUÇÃO DE FATORIAIS FRACIONÁRIOS

Claudiney Nunes de LIMA¹
Júlio Sílvio de Sousa BUENO FILHO²

- RESUMO: Este trabalho trata da implementação de algoritmo de simples troca do tipo *exchange* (trocas). Foi empregado um critério de eficiência para a escolha de tratamentos de fatoriais fracionários. O delineamento encontrado foi comparado a uma alternativa usual da literatura. O delineamento D-ótimo foi mais eficiente que o delineamento composto central. O algoritmo resultante é flexível e recomenda-se que sejam utilizados por pesquisadores práticos para construir alternativas aos fatoriais fracionários comumente encontrados na literatura. Isso vale tanto para estágios iniciais da pesquisa (escolha de tratamentos) quanto para fases mais adiantadas de otimização usando modelos de superfície de resposta.
- PALAVRAS-CHAVE: Algoritmo de troca; delineamento ótimo; delineamento composto central; fatoriais fracionários

1 Introdução

Planejar experimentos é, sem dúvida, uma das mais importantes fases do processo de investigação científica. Quando cuidadosamente executado, o planejamento cria uma estrutura bem definida para o experimento seja em termos dos fatores em estudo ou das unidades, justificando a definição de um modelo para a análise estatística. Dessa forma, o produto final do planejamento que é o conjunto de dados, poderá ser tratado com base em resultados teóricos que permitem implementação computacional e interpretação mais simples.

Em experimentos fatoriais estuda-se, simultaneamente, mais de um fator, e o número de tratamentos geralmente é elevado por ser a combinação das categorias

¹Universidade Federal de São João del-Rei – UFSJ, Campus Alto Paraopeba, Caixa Postal: 131, CEP: 36420-000, Ouro Branco, MG, Brasil. E-mail: pleudiney@yahoo.com.br

²Universidade Federal de Lavras – UFLA, Departamento de Ciências Exatas, Caixa Postal: 3037, CEP: 37200-000, Lavras, MG, Brasil. E-mail: jssbueno@ufla.br

dos fatores (fatoriais completos), que, por sua vez, representam os tipos (fator qualitativo) ou níveis (fator quantitativo) escolhidos para serem estudados.

Limitações diversas, como disponibilidade de material experimental, de recursos financeiros, de laboratórios e de equipamentos disponíveis, dentre outros, podem exigir ensaios com uma quantidade reduzida de parcelas ou unidades experimentais. Essa e outras justificativas também podem levar à redução do número de tratamentos. O uso de apenas uma parte dos tratamentos de um fatorial completo traz a vantagem de economia de recursos e de tempo, mas apresenta a desvantagem de que efeitos principais e interações podem estar confundidos, isto é, não podem ser estimados separadamente. Muitas vezes, esse problema é de pouco interesse dos pesquisadores nas interações de ordens elevadas devido ao fato de quase sempre serem irrelevantes e, ou, de difícil interpretação prática.

O pesquisador, então, pode optar por uma quantidade de tratamentos possível, definindo uma fração do fatorial completo ($1/2, 1/3$ ou outras). O problema, nesse caso, consiste em escolher o grupo de tratamentos que irá compor o fatorial fracionário pretendido de forma a otimizar alguma propriedade estatística, por exemplo, minimizar a variância generalizada dos estimadores dos parâmetros.

O delineamento composto central (DCC) introduzido por Box & Wilson (1951) é um dos delineamentos mais populares para o ajuste de modelos de superfície de resposta. Ele consiste de n_f pontos de um fatorial de 2^k ou um fatorial fracionário de resolução V ou mais, $2k$ pontos axiais e n_c pontos centrais (nível intermediário “0” de cada fator). Os pontos centrais fornecem uma estimativa do erro puro e também informam sobre a existência ou não, da curvatura no sistema sob estudo. Caso exista, a adição de pontos axiais permite uma estimação eficiente dos termos quadráticos puros.

Os pontos axiais são colocados a uma distância α do centro do delineamento. A escolha α e n_c depende das propriedades exigidas do delineamento, tais como rotacionalidade¹. A Figura 1 mostra um DCC para $k = 3$ fatores com os níveis codificados em -1 e 1. Os pontos axiais tem coordenadas $(\pm\alpha, 0, 0), (0, \pm\alpha, 0)$ e $(0, 0, \pm\alpha)$; e o ponto central, $(0, 0, 0)$.

Os valores da distância axial geralmente variam de 1 a \sqrt{k} . O primeiro coloca todos os pontos axiais na face do cubo (também chamado de cubo de face centrada) ou hiper-cubo, enquanto o último coloca todos os pontos em uma esfera comum.

Do ponto de vista estatístico, a escolha dos tratamentos pode tornar um delineamento mais eficiente do que outro. Essa eficiência pode ser mensurada por meio de alguns critérios de otimalidade que podem ser implementados em algoritmos de busca. Dessa forma, os planos experimentais resultantes dessa busca são designados como ótimos. O problema da escolha otimizada de tratamentos consiste em selecionar, de um conjunto N tratamentos candidatos, um subconjunto com apenas $v < N$ tratamentos a serem avaliados, de tal maneira que o delineamento resultante seja o melhor possível em algum sentido. Em geral, para modelos lineares fixos, isto se reduz a estudar as propriedades da matriz de informação de Fisher

¹Maiores detalhes sobre os valores de α e n_c associados com algumas propriedades, podem ser encontradas em Box & Draper (1987) e Box *et al.* (2005).

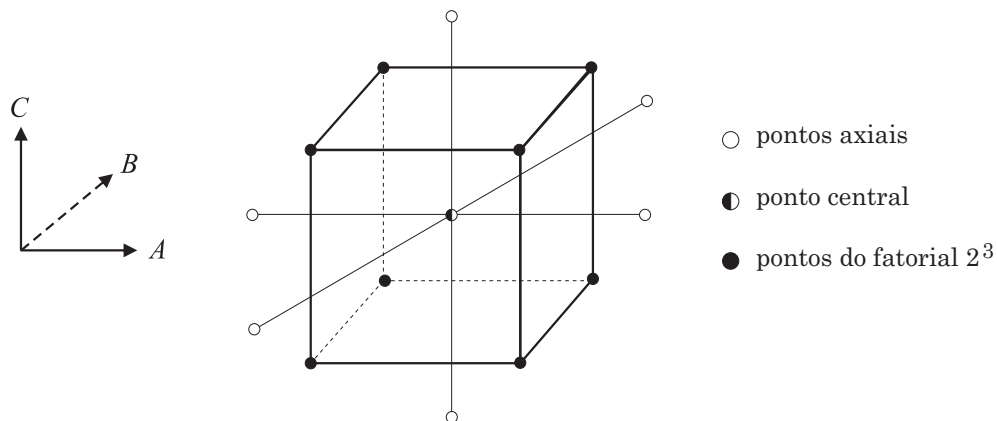


Figura 1 - Delineamento composto central para $k = 3$ fatores, 6 pontos axiais α e um ponto central.

(Chaloner e Verdinelli, 1995). Vários algoritmos computacionais para a construção de delineamentos com v tratamentos estão disponíveis na literatura, mas uma das classes mais importantes nessa direção são os algoritmos de troca (EA, do inglês *exchange algorithm*), dentre os quais podem ser citados: EA, atribuído a Fedorov (1972); EA, devido a Wynn (1970); EA, chamado de DETMAX, elaborado por Mitchell (1974); EA, atribuído a Cook & Nachtsheim (1980); e, por fim, EA, atribuído a Atkinson & Donev (1989). Os quatro primeiros algoritmos foram implementados no software SAS (proc optex). A esse respeito, Nguyen & Miller (1992) apresenta uma revisão dos algoritmos citados anteriormente, sugerindo uma implementação melhorada do EA de Fedorov (1972), comparando-o com os demais.

A teoria de delineamentos ótimos tornou-se um importante componente no desenvolvimento geral do delineamento experimental para modelos de regressão. A principal característica dessa teoria é a percepção do delineamento como uma medida de probabilidade com forte ênfase na redução da variância com respeito ao modelo ajustado. Dentre os critérios de otimalidade que se baseiam na redução da variância, destaca-se o D. O critério D-ótimo minimiza a variância generalizada dos coeficientes a estimar com o modelo.

Desde Kiefer (1959), procura-se comparar delineamentos utilizando esses critérios e Fedorov (1972) propôs um algoritmo de busca de trocas que corresponde, grosso modo, ao algoritmo de otimização *steepest descent*. Tal algoritmo e diversas de suas adaptações têm possibilitado a construção de delineamentos otimizados para fatoriais fracionários.

O trabalho em delineamentos ótimos de experimentos foi iniciado por Wald (1943) e mais tarde se desenvolveu, em grande parte, em uma série de artigos a partir de Kiefer (1959). Definidos os principais critérios de otimização e os respectivos delineamentos ótimos, pode-se medir a eficiência relativa entre dois delineamentos quaisquer ξ_1 e ξ_2 associados a um mesmo modelo.

Seja Ψ a função desejada da variância do BLUE de θ , $V(\hat{\theta}|\xi)$. Uma medida da eficiência relativa $E(\xi_1, \xi_2)$ do primeiro em relação ao segundo pode ser obtida por meio de

$$E(\xi_1, \xi_2) = \frac{\Psi[V(\hat{\theta}|\xi_1)]}{\Psi[V(\hat{\theta}|\xi_2)]}.$$

Se Ψ for a média das variâncias de θ , então $\Psi = \sum_i^v(\text{autovalores}) = \text{traço}(V(\hat{\theta}|\xi))$, ou, se Ψ for a variância generalizada de θ , então $\Psi = \prod_i^v(\text{autovalores}) = \text{Det}(V(\hat{\theta}|\xi))$, em que v é o número de tratamentos ou de níveis de interesse do fator em estudo. Note que para problemas específicos, Ψ pode ser a variância de qualquer combinação linear de interesse (um ou mais) elementos de $V(\hat{\theta}|\xi)$.

Segundo Nguyen & Miller (1992), o objetivo de todos os métodos numéricos para se encontrarem delineamentos ótimos ou quase ótimos é selecionar v pontos (tratamentos), a serem incluídos no delineamento, de um conjunto finito de N pontos possíveis, que são chamados de pontos candidatos, cujo número pode ser bastante grande em algumas situações práticas. A tarefa de construção de delineamentos experimentais, então, consiste em escolher v linhas de X (tratamentos) dos N pontos candidatos (conjunto de todas as possíveis combinações dos níveis dos fatores), de forma que a matriz de informação resultante $X'X$ seja ótima em algum sentido. A melhor combinação desses pontos é chamada de ótima e a matriz delineamento correspondente, de matriz delineamento ótima.

Podem-se citar vários critérios de otimalidade tais como: A, D, E e outros, também chamados de critérios alfabéticos de otimalidade (Kiefer, 1959; Chaloner & Verdinelli, 1995; Atkinson *et al.*, 2007). Em especial, a D-otimalidade, visa minimizar o volume da região de confiança multidimensional (elipsóide) para o vetor de estimativas parâmetros e a A-otimalidade visa minimizar a média da variância das estimativas. Os demais critérios de otimalidade baseiam-se em outras funções da matriz de informação e, ou, de sua inversa, que é proporcional a matriz de covariâncias dos parâmetros do modelo. O delineamento ótimo é aquele que maximiza a informação sobre (ou minimiza a variância de) alguma função desejada dos parâmetros.

Neste sentido, os objetivos deste trabalho podem ser resumidos em:

- implementar algoritmos de simples troca para a escolha de tratamentos para a construção de um fatorial fracionário;
- discutir a obtenção de delineamentos ótimos em termos de eficiência estatística para ensaios com estrutura fatorial em que o interesse seja estimar os efeitos principais e interações de baixa ordem do modelo fatorial (modelo de superfície de resposta).

2 Metodologia

2.1 Modelo para seleção dos tratamentos e critérios alfabéticos de otimalidade

A pressuposição básica deste trabalho é que, para a análise dos dados, serão adotados modelos polinomiais do tipo Gauss-Markov Normais, em que $\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$, em que \mathbf{y} é o vetor das observações ($n \times 1$); X é uma matriz cujas colunas são expansões dos níveis de cada fator para acomodar o polinômio a ser ajustado; $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de parâmetros do modelo e $\boldsymbol{\varepsilon}$ é o vetor dos erros aleatórios correspondentes às observações ($n \times 1$).

O estimador de mínimos quadrados de $\boldsymbol{\beta}$ é $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (X'X)^{-1}X'\mathbf{y}$ e sua matriz de covariâncias é dada por: $\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = (X'X)^{-1}\sigma^2$. Na prática, σ^2 também deve ser estimado e uma estimativa é obtida pelo quadrado médio do resíduo da análise de variância dos resultados do experimento. Note-se que σ^2 não depende de X e, portanto, pode-se estudar apenas as propriedades da matriz $X'X$. Dentre os critérios de otimalidade disponíveis na literatura para tal otimização, os de maior interesse neste trabalho são os critérios A e D.

Geralmente, os algoritmos de construção desses delineamentos são do tipo *exchange*, que consiste na geração aleatória de um delineamento inicial, a partir dos N pontos candidatos, de tamanho v . Cada combinação do delineamento inicial é sequencialmente substituída por uma combinação do conjunto de pontos candidatos. A troca que resultar numa melhora do delineamento é aceita. O procedimento somente para quando não houver mais troca que resulte em uma melhora e deve ser repetido várias vezes para evitar que fique preso em ótimos locais (cada ponto de parada é um ótimo local).

2.2 Implementação do algoritmo *exchange*

O algoritmo *exchange* foi implementado na linguagem *R*. Para uma melhor compreensão da sua implementação, são descritos, a seguir, seus passos ².

Definidos o número total de tratamentos (N pontos candidatos) e o número de tratamentos v a serem alocados às unidades experimentais, o algoritmo inicialmente sorteia um delineamento do conjunto ξ dos delineamentos possíveis. Após o sorteio, é, então, construída a matriz de delineamento X do modelo adotado. O próximo passo é obter a matriz de informação e, a partir dessa, determinar o valor do determinante da matriz $X'X$, que é armazenado.

Um novo passo consiste na troca entre linhas da matriz X do delineamento e outras linhas candidatas. Após montar a nova matriz de informação do delineamento, é obtido o novo valor do determinante para fins de comparação.

Assim, é realizada a comparação entre os dois valores do critério para o delineamento inicial e o obtido pelo intercâmbio. Havendo um aumento no determinante, a troca é efetivada. Caso contrário, é mantida a configuração anterior. O processo é repetido até que não haja mais aumento do determinante.

²O programa desenvolvido encontra-se no Apêndice.

Para se evitar problema de ótimos locais, procede-se ao sorteio de vários delineamentos iniciais, obtendo-se vários delineamentos ao ser percorrido todo o domínio.

2.3 Passos do algoritmo *exchange*

1) Sorteio

Definidos o número de fatores do ensaio fatorial para s níveis, o número de parâmetros do modelo e o número de unidades experimentais, o algoritmo, então, constrói a matriz base ξ_N , com todos os pontos candidatos e, então, sorteia um delineamento inicial qualquer ξ_1 contendo os tratamentos a serem alocados às unidades experimentais.

2) Matriz do delineamento

Definido o delineamento ξ_1 , o algoritmo, então, encontra a sua respectiva matriz de delineamento X_1 .

3) Matriz de informação

A matriz de informação $(X_1'X_1)$ é encontrada a partir da matriz de delineamento e armazenada.

4) Critério

Calcula-se o determinante de $(X_1'X_1)$.

5) Troca

Na matriz do delineamento X_1 de ξ_1 é efetivada a troca de uma de suas linhas com uma linha da matriz dos pontos candidatos ξ_N .

6) Construção do delineamento ξ_2

Após o intercâmbio, obtém-se um novo delineamento. A partir daí, segue-se o mesmo passo efetivado em ξ_1 .

7) Construção da matriz do delineamento ξ_2

$$X_2$$

8) Construção da matriz de informação para o delineamento ξ_2

$$(X_2'X_2)$$

9) Decisão

Compararam-se os valores obtidos pelo critério de otimização que foram encontrados nos delineamentos ξ_1 e ξ_2 . Assim, a decisão é tomada comparando-se o critério obtido pelo ξ_1 versus ξ_2 .

O delineamento escolhido será aquele que possuir maior determinante para a matriz de informação. Ao se maximizar o determinante, obtém-se um elipsóide de menor volume para os coeficientes do modelo.

Comparando-se os dois delineamentos por meio do determinante das respectivas matrizes de informação, o algoritmo encaminha seguinte decisão:

- Se $\det (X_1'X_1) > \det (X_2'X_2)$, o melhor delineamento é ξ_1 . Assim, o algoritmo o mantém.
- Se $\det (X_1'X_1) < \det (X_2'X_2)$, neste caso o delineamento ξ_2 é melhor do que ξ_1 . Logo, é armazenado.

10) **Ciclo**

Encontrando-se o melhor delineamento, uma nova troca é efetuada, repetindo-se, assim, todo o processo.

11) **Fim**

O algoritmo repete todo o procedimento para um número pré-determinado de sorteios iniciais. Terminado o processo, o melhor delineamento encontrado pelo algoritmo é, então, apresentado e armazenado.

3 Resultados e discussão

Como visto, a escolha de um subconjunto de tratamentos é um dos objetivos do experimento e da região de interesse. Em um fatorial, geralmente existem diferentes conjuntos de combinações de níveis dos fatores que podem ser usados, tal como o delineamento composto central e muitos outros compostos de fatoriais fracionários. Desse modo, alguns critérios como resolução e aberração buscam atender a princípios como os de ortogonalidade e estimabilidade. Note que a estimabilidade está implícita na presença de colunas da matriz de delineamento correspondentes aos efeitos do modelo. Assim, o compromisso de se encontrar um subconjunto de tratamentos com propriedades desejáveis, pode, em geral, ser traduzido pela busca de maior eficiência, pois essa propriedade implica em estimabilidade, estrutura de confundimento mais favorável, etc.

O delineamento otimizado (segundo o critério D), encontrado pelo algoritmo de busca, para 15 tratamentos escolhidos, entre os 27 tratamentos de um fatorial completo 3^3 com os fatores A, B e C, considerando o ajuste do modelo de segunda ordem, está apresentado na Tabela 1.

Apesar de os dois delineamentos possuírem 11 tratamentos em comum, o delineamento D-ótimo foi mais eficiente, $EF = \frac{24192 \times 10^4}{18432 \times 10^4} = 1,3125$, ou seja, aproximadamente 31% mais eficiente do que o delineamento composto central. Além disso, a estrutura dos aliases dos dois delineamentos é um pouco complexa, devido ao fato de ambos possuírem confundimento parcial dos efeitos, sendo, assim, complicado estabelecer o conjunto de aliases de cada um.

Tabela 1 - Delineamento D-ótimo com 15 tratamentos selecionados para efeitos principais, quadráticos e interações de dois fatores e o delineamento composto central (DCC: $2^k + 2k + 1$) com ponto axial sendo $\alpha = 1$

Delineamento D-ótimo			DCC com $\alpha = 1$		
Fatores			Fatores		
A	B	C	A	B	C
-1	-1	-1	-1	-1	-1
1	-1	-1	1	-1	-1
1	1	-1	-1	1	-1
-1	1	-1	1	1	-1
-1	-1	1	-1	-1	1
-1	1	1	1	-1	1
-1	0	0	-1	1	1
0	1	0	1	1	1
1	-1	0	0	0	0
0	-1	-1	-1	0	0
1	-1	1	1	0	0
1	0	-1	0	-1	0
0	0	1	0	1	0
1	0	1	0	0	-1
1	1	1	0	0	1

Observando-se apenas as inversas das matrizes de informação (matriz de dispersão) dos delineamentos ótimo e composto central, respectivamente, tem-se:

$$\left(X'_{\text{ótimo}}X_{\text{ótimo}}\right)^{-1} = \frac{\sigma_e^2}{100} \times$$

$$\begin{matrix} & \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{33} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{23} \\ \beta_0 & \mathbf{67} & 0 & -1 & -2 & -28 & -22 & -28 & 2 & 0 & -2 \\ \beta_1 & & \mathbf{9} & 1 & 0 & -1 & 2 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ \beta_2 & & & \mathbf{9} & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \\ \beta_3 & & & & \mathbf{9} & 0 & 3 & 0 & 0 & -2 & 1 \\ \beta_{11} & & & & & \mathbf{45} & -3 & -8 & 1 & 0 & 4 \\ \beta_{22} & & & & & & \mathbf{36} & -3 & 1 & -1 & -1 \\ \beta_{33} & & & & & & & \mathbf{45} & -5 & 0 & -2 \\ \beta_{12} & & & & & & & & \mathbf{12} & 0 & 0 \\ \beta_{13} & & & & & & & & & \mathbf{10} & 0 \\ \beta_{23} & & & & & & & & & & \mathbf{12} \end{matrix}$$

em que “*Sim.*” indica que a matriz é simétrica.

$$\left(X'_{\text{DCC}}X_{\text{DCC}}\right)^{-1} = \frac{\sigma_e^2}{100} \times$$

$$\begin{matrix} & \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{33} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{23} \\ \beta_0 & \mathbf{29} & 0 & 0 & 0 & -11 & -11 & -11 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1 & & \mathbf{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_2 & & & \mathbf{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_3 & & & & \mathbf{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{11} & & & & & \mathbf{39} & -11 & -11 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{22} & & & & & & \mathbf{39} & -11 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{33} & & & & & & & \mathbf{39} & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{12} & & & & & & & & \mathbf{13} & 0 & 0 \\ \beta_{13} & & & & & & & & & \mathbf{13} & 0 \\ \beta_{23} & & & & & & & & & & \mathbf{13} \end{matrix}$$

Note-se que cada linha ou coluna representa os coeficientes do modelo de regressão, sendo que os elementos da matriz de dispersão são as covariâncias dos coeficientes, de forma que os elementos na diagonal principal representam as variâncias e os que se situam fora dela são as covariâncias. Apesar de a estrutura de covariância do delineamento ótimo apresentar mais covariâncias do que a do DCC, as variâncias dos seus coeficientes são, na maioria, inferiores. O fato de que a matriz de covariâncias do DCC está mais próxima da ortogonalidade do que do delineamento otimizado, não impede obter combinações lineares no delineamento otimizado mais precisas. Por exemplo: caso o pesquisador esteja interessado na combinação $\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_2$, as variâncias do seu estimador nos delineamentos otimizado e DCC são, respectivamente, iguais a $(\mathbf{16} = 9 + 9 - 2 \times 1)$ e $(\mathbf{20} = 10 + 10 - 2 \times 0) \times (\sigma^2/1000)$.

Outra informação adicional é que a variância média dos coeficientes do modelo, ou seja, o traço da matriz de covariâncias dos delineamentos ótimo e DCC, que foram iguais a 2,54 e 2,13, respectivamente. Ou seja, o delineamento D-ótimo é 19% menos eficiente ao DCC. Como o critério D leva em conta a estrutura de variâncias e covariâncias dos coeficientes e, como o modelo de superfície de resposta é uma combinação linear desses coeficientes, seria interessante utilizar um critério que levasse em consideração não só as variâncias, como também as covariâncias dos coeficientes para o melhor ajuste do modelo para a descrição da relação entre a variável resposta e os fatores.

O D-ótimo minimiza a variância generalizada das estimativas dos componentes de β , o que equivale a minimizar o volume da região de confiança multidimensional para os componentes de β . Ou ainda, minimiza a variância de todas as combinações lineares entre os parâmetros de β .

O mesmo resultado obtido com o DCC pode ser generalizado para situações experimentais mais complexas, pois eficiência e ortogonalidade não são sinônimos (Mead, 1990).

Assim, pode-se construir delineamentos fatoriais fracionários ótimos por meio do algoritmo *exchange* mais eficientes aos clássicos da literatura, além da flexibilidade de sua construção para qualquer quantidade de pontos experimentais.

Conclusões

Para a escolha de tratamentos em fatoriais fracionários, em geral pode-se obter delineamentos otimizados mais eficientes do que os delineamentos já conhecidos usando algoritmos do tipo *exchange*. Isso se aplica tanto na fase inicial de estudos com muitos fatores quanto para delineamentos de superfície de resposta, como os fatoriais com 3 níveis.

Agradecimentos

À CAPES pela bolsa de doutorado concedida ao primeiro autor, Ao CNPq pela bolsa de Produtividade em Pesquisa concedida ao segundo autor.

LIMA, C. N. de; BUENO FILHO, J. S. de S. Optimal treatment choice for the construction of fractional factorial designs. *Rev. Bras. Biom.*, São Paulo, v.28, n.3, p.1-14, 2010.

- **ABSTRACT:** *This work deals with implementing exchange algorithm. Efficiency based optimality criteria was used to find optimal fractional factorials for response surface designs. Treatment choice was considered. Design found was compared to alternative from literature. D-optimal design was more efficient than design constructed using other methods like combinatorial considerations. Resulting algorithm is flexible and should be used by applied researchers as alternative to fractional factorials. This is also valid for initial steps of research as well as for fitting response surfaces in optimization steps.*
- **KEYWORDS:** *Central composite design; exchange algorithm; fractional factorials, optimal design.*

Referências

- ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N. The construction of exact D-optimum experimental designs with application to blocking response surface designs. *Biometrika*, London, v.76, n.3, p.515-526, 1989.
- ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N.; TOBIAS, R. D. *Optimum experimental designs with SAS*. New York: Oxford University Press, 2007. 511p.
- BOX, G. E. P.; WILSON, K. B. On the experimental attainment of optimum conditions. *J. R. Stat. Soc., Série B*, Oxford, v.13, n.1, p.1-45, 1951.
- BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. *Empirical model building and response surfaces*. New York: J. Wiley, 1987. 669p.
- BOX, G. E. P.; HUNTER, J. S.; HUNTER W. G. *Statistics for experimenters: design, innovation, and discovery*. 2.ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2005. 639p.

- CHALONER, K.; VERDINELLI, I. Bayesian experimental design: a review. *Stat. Sci.*, Hayward, v.10, n.3, p.237-304, 1995.
- COOK, R. D.; NACHTSHEIM, C. J. A comparison of algorithms for constructing exact D-optimal designs. *Technometrics*, Washington, v.22, n.3, p.315-324, 1980.
- FEDOROV, V. V. *Theory of optimal experiments*. New York: Academic Press, 1972. 292p.
- KIEFER, J. Optimum experimental designs. *J. R. Stat. Soc., Série B.*, Oxford, v.21, n.2, p.272-319, 1959.
- MITCHELL, T. J. An algorithm for the construction of D-optimal designs. *Technometrics*, Washington, v.16, n.2, p.203-210, 1974.
- NGUYEN, N.; MILLER, A. J. A review of some exchange algorithms for constructing discrete D-optimal designs. *Comput. Stat. Data Anal.*, Amsterdam, v.14, n.4, p.489-498, 1992.
- R DEVELOPMENT CORE TEAM. *R: A language and environment for statistical computing*. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2009. Disponível em: < <http://www.R-project.org> >. Acesso em: 2009.
- WALD, A. On the efficient design of statistical investigations. *Ann. Math. Stat.*, An Arbor, v.14, n.2, p.134-140, 1943.
- WYNN, H. P. The sequential generation of D-optimal experimental designs. *Ann. Math. Stat.*, An Arbor, v.41, n.5, p.1655-1664, 1970.

Recebido em 14.09.2009.

Aprovado após revisão em 16.08.2010.

Apêndice

Programa 1: Rotina R para implementação do algoritmo *exchange* para a construção de fatoriais fracionários com k fatores de 3 níveis.

```
#####  
# Função que faz as trocas de linhas (tratamentos) entre o deli-  
# neamento e o conjunto de pontos candidatos.  
#####  
Troca      <- function(Xbase,X0,Crit0)  
{  
  HT1      <- 0  
  for (i in 1:nf)  
  {  
    for (j in 1:n)  
    {  
      X      <- X0  
      X[i,] <- Xbase[j,]  
      Crit   <- det(t(X)%*%X)  
      if (Crit > Crit0)  
      {  
        Crit0 <- Crit  
        X0    <- X  
        HT1   <- 1  
      }  
    }  
  }  
  list(X0,HT1)  
}
```

```
#####
# Construção da matriz do delineamento para o seguinte modelo: #
#   Y = A + B + C + A^2 + B^2 + C^2 + AB + AC + BC + ABC      #
#####
k         <- 3         #           Número de fatores           #
n         <- 3^k # Nº total de pontos candidatos (tratamentos) #
nf        <- 15 # Nº de tratamentos do fatorial fracionário #
Xb        <- matrix(0,n,k)
# Construção das três primeiras colunas (Efeitos principais) #
Xb[,1:k]  <- as.matrix(expand.grid(-1:1,-1:1,-1:1))
# Construção dos demais efeitos de acordo com o modelo de     #
# superfície de resposta #
colnames(Xb)<- c(A,B,C)
A         <- Xb[,1]
B         <- Xb[,2]
C         <- Xb[,3]
y         <- rnorm(n)
modelo    <- lm(y ~ A+B+C+I(A^2)+I(B^2)+I(C^2)+A*B+A*C+B*C)
Xbase     <- model.matrix(modelo)
#####
#           Repete a otimização até sair do ótimo local       #
#####
inicio    <- Sys.time()
N         <- 10000 #           Número de tentativas           #
pontos    <- c(1:n)
critvec   <- 0*c(1:N)
critfin   <- 0*c(1:N)
Crit0     <- 0
Crit      <- Crit0 + 1
CritFin   <- Crit0
for(k in 1: N)
{
  Crit0     <- 0
  while(Crit0 < 10^(-6))
  {
    iX0     <- sort(sample(pontos,nf))
    X0      <- Xbase[iX0,]
    Crit0   <- det(t(X0)%*%X0)
  }
# Escolher uma linha de X0 para troca com uma de Xbase     #
HT         <- 1
  while(HT==1)
  {
    invoca  <- Troca(Xbase,X0,Crit0)

```

```

XO      <- invoca[[1]]
Crit0   <- det(t(XO) %*% XO)
HT      <- invoca[[2]]
}
X       <- XO
Crit    <- det(t(X) %*% X)
critvec[k]<- Crit
if(Crit > CritFin)
{
  XFinal <- X
  CritFin <- Crit
}
critfin[k]<- CritFin
}
(tempo      <- Sys.time() - inicio)      tempo de execução #
XFinal     # melhor delineamento selecionado #
CritFin
det(t(XFinal)%*%XFinal)                  # Valor do critério (D) #
write.table(XFinal,file = XFinal do exchange (Critério D).txt,
append=TRUE)
sum(diag(t(XFinal)%*%XFinal)) # Traço da matriz de informação do
# melhor delineamento encontrado #

par(mfrow=c(2,1))
plot(critvec)
plot(critfin)

```