

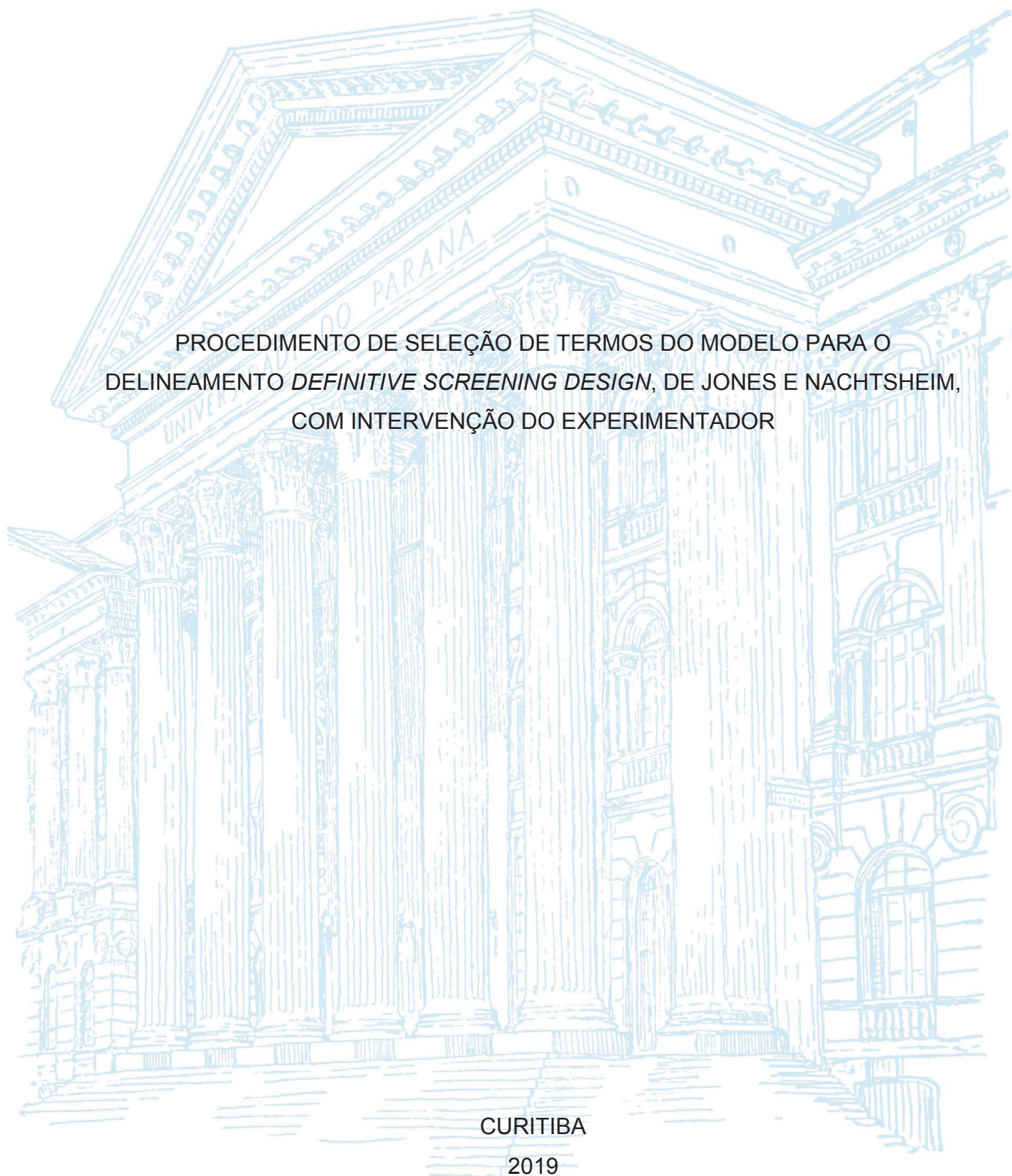
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

HENRIQUE FAVRE

PROCEDIMENTO DE SELEÇÃO DE TERMOS DO MODELO PARA O
DELINEAMENTO *DEFINITIVE SCREENING DESIGN*, DE JONES E NACHTSHEIM,
COM INTERVENÇÃO DO EXPERIMENTADOR

CURITIBA

2019



HENRIQUE FAVRE

PROCEDIMENTO DE SELEÇÃO DE TERMOS DO MODELO PARA O
DELINEAMENTO *DEFINITIVE SCREENING DESIGN*, DE JONES E NACHTSHEIM,
COM INTERVENÇÃO DO EXPERIMENTADOR

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, na Área de Concentração em Programação Matemática, na Linha de Pesquisa de Métodos Estatísticos Aplicados à Engenharia, dos setores de Tecnologia e de Ciências Exatas, da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Métodos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Anselmo Chaves Neto

CURITIBA

2019

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

F277p

Favre, Henrique

Procedimento de seleção de termos do modelo para o delineamento definitive screening design, de Jones e Nachtshiem, com intervenção do experimentador [recurso eletrônico] / Henrique Favre. – Curitiba, 2019.

Dissertação – Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós – Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, 2019.

Orientador: Anselmo Chaves Neto.

1. Modelos matemáticos. 2. Estatística. 3. Algoritmo. I. Universidade Federal do Paraná. II. Chaves Neto, Anselmo. III. Título.

CDD: 511.8

Bibliotecária: Vanusa Maciel CRB- 9/1928



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO MÉTODOS NUMÉRICOS
EM ENGENHARIA - 40001016030P0

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **HENRIQUE FAVRE** intitulada: **PROCEDIMENTO DE SELEÇÃO DE TERMOS DO MODELO PARA O DELINEAMENTO DEFINITIVE SCREENING DESIGN, DE JONES E NACHTSHEIM, COM INTERVENÇÃO DO EXPERIMENTADOR**, após terem inquirido o aluno e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 19 de Junho de 2019.

ANSELMO CHAVES NETO

Presidente da Banca Examinadora (UFPR)

ADILSON DOS ANJOS

Avaliador Externo (UFPR)

GUSTAVO VALENTIM LOCH

Avaliador Interno (UFPR)

PARTICIPADO POR VIDEO-CONFERÊNCIA

JAIRO MARLON CORREA

Avaliador Externo (UFPR)

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Eneida e Larry, pelos bons exemplos e pelo valor dado à educação durante toda a minha vida.

À minha amada esposa, Gabriela, pelo incentivo e por muitas vezes ter se desdobrado de modo a garantir que eu pudesse empreender na difícil missão de concorrer à vaga no PPGMNE e concluir o programa de Mestrado.

Ao meu precioso filho Eduardo, que chegou durante o Mestrado trazendo alegria às nossas vidas e a quem desejo retribuir com bons exemplos.

Ao meu gerente Boris, por ter apoiado e removido barreiras para que eu pudesse conciliar trabalho e Mestrado, e por ter me guiado nas escolhas de tema.

Ao Mestre em Métodos Numéricos e meu amigo Cristian, e ao futuro Dr. em Engenharia Mecânica Tiago, pelos incentivos durante todo esse percurso.

Ao Prof. Dr. Anselmo, que reencontrei neste programa, anos após minha graduação, ainda melhor professor, que me apoiou e me guiou durante a execução deste trabalho.

Aos brilhantes Estatísticos e colegas de trabalho Keith, Eric e Christian, que me iluminaram em algumas importantes discussões a respeito deste trabalho.

Ao Jair, pela infundável prestatividade a todos no PPGMNE.

Aos colegas de PPGMNE Fernando, Tiago, Amanda, Carolina, Tulipa, Vanessa, Miray, Rômulo, Maicon, Paulo, Dayane, Patrícia, Matheus, Kally, Lucas, Michelly, Mauren, Nicole, Eurico, Ivan e Inajara, todos estes que ao menos uma vez durante a minha jornada me inspiraram e me auxiliaram com informações importantes, dicas preciosas e palavras de incentivo.

RESUMO

Este trabalho descreve a aplicação do delineamento de experimento denominado *Definitive Screening Design* (DSD) para a estimação dos efeitos de seis fatores (ingredientes) na aceitação geral de um painel de consumidores para um produto alimentício. O delineamento DSD possui propriedades que o tornam excelente alternativa a delineamentos fatoriais fracionados para a triagem de fatores de entrada. O DSD aproveita, ainda, o princípio da parcimônia de efeitos e quando há a presença de até três fatores ativos projeta-se em uma superfície de resposta para otimização da variável-resposta. Isto potencialmente reduz o esforço experimental. Entretanto, a natureza supersaturada do delineamento DSD torna mais complexo, durante a análise estatística dos dados, o processo de seleção de quais termos devem compor o modelo matemático. Os autores do delineamento desenvolveram um método para a realização dessa seleção de termos, denominado Fit DSD, que, entretanto, mostrou-se ineficaz na aplicação prática aqui realizada. Esse trabalho replica, no software R, o algoritmo Fit DSD, e propõe ainda duas modificações a esse método, permitindo a intervenção do pesquisador. Os resultados são avaliados. Um trabalho de simulação é realizado, demonstrando os efeitos de tais alterações no poder do método em apontar o modelo correto e no erro tipo I, tanto quando intervenções do pesquisador são “acertadas” quanto quando “erradas”.

Palavras-chave: Delineamento de Experimentos. DSD. Estatística. Seleção de Termos do Modelo.

ABSTRACT

This work describes the application of Definitive Screening Designs (DSDs) in estimating the effects of six factors (ingredients) on the measure of Overall Liking by a panel of consumers of a given food product. The DSD design has properties that make for an excellent alternative to fractional factorial designs on the screening of input factors. Additionally, DSD benefits from sparsity of effects by projecting into a Response Surface Design when at the presence of up to three active main factors, which allows for the optimization of the response variable. This potentially reduces the experimental effort. Nonetheless, due to DSD's supersaturated nature, the process to select which terms will be part of the mathematical model becomes more complex during the stage of statistical data analysis. DSD authors have developed a method to perform such model term selection, named Fit DSD, which, however, failed in this specific application. This work replicates, with R code, the Fit DSD algorithm, and proposes two modifications to this method to allow the intervention of the researcher. Results are evaluated. Simulations are performed to demonstrate the effects of such modifications to the method's power to find the actual model and to type I error, both in scenarios in which researcher's interventions are correct as well as incorrect.

Keywords: Design of Experiments. DSD. Statistics. Selection of Terms in Model.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – MODELO GENÉRICO DE UM PROCESSO OU SISTEMA	20
FIGURA 2 – ESPAÇO EXPERIMENTAL DE ESTUDO COM TRÊS FATORES: TEMPERATURA, AQUECIMENTO E PRÉ-AQUECIMENTO	23
FIGURA 3 – SELEÇÃO DE NÍVEIS EM UM EXPERIMENTO	24
FIGURA 4 – OPÇÕES DE DELINEAMENTOS PARA O CASO DE 3 FATORES.....	25
FIGURA 5 – GRÁFICOS DE SUPERFÍCIE DE DELINEAMENTO DE TRIAGEM E DE OTIMIZAÇÃO COM DOIS FATORES, E CADA TERMO COM EFEITO DE MAGNITUDE 1.....	29
FIGURA 6 – DISTRIBUIÇÃO F COM G.L. 7, 5	33
FIGURA 7 – EXEMPLO DA DIFERENÇA ENTRE AJUSTE PELA MÉDIA E AJUSTE LINEAR	34
FIGURA 8 – ANÁLISE GRÁFICA DOS EFEITOS DE UM EXPERIMENTO	37
FIGURA 9 – GRÁFICO <i>PROFILER</i>	38
FIGURA 10 – ANÁLISE DE SIGNIFICÂNCIA ESTATÍSTICA	38
FIGURA 11 – EXEMPLIFICAÇÃO DE AJUSTES DE MODELO	41
FIGURA 12 – FUNÇÃO PRESS, NO SOFTWARE R	43
FIGURA 13 – MATRIZ DE CORRELAÇÃO DOS DELINEAMENTOS 2^3 e $2^{(3-1)}$	46
FIGURA 14 – MATRIZ DE CORRELAÇÃO DO DSD COM 6 FATORES E 13 CORRIDAS	53
FIGURA 15 – MATRIZ DE CORRELAÇÃO DO DSD COM 6 FATORES E 17 CORRIDAS	54
FIGURA 16 – MATRIZ DE CORRELAÇÃO DO DELINEAMENTO FATORIAL FRACIONADO $2^{(6-2)}$, COM 6 FATORES E 17 CORRIDAS.....	54
FIGURA 17 – DELINEAMENTO DSD_{6+2}	61
FIGURA 18 – DELINEAMENTO DSD_{6+2} , COM X_1 E X_4 INATIVOS	63
FIGURA 19 – PESAGEM DE UM DOS INGREDIENTES	75
FIGURA 20 – IDENTIFICAÇÃO E ENVELOPAMENTO DE AMOSTRA	75
FIGURA 21 – PESQUISA EM CAMPO	76
FIGURA 22 – GRÁFICO DE PERFIL DAS MÉDIAS DE ACEITABILIDADE GLOBAL, PELO PAINEL DE CONSUMIDORES, POR ORDEM DE DEGUSTAÇÃO	83
FIGURA 23 – MODELO AJUSTADO PELO MÉTODO FIT DSD	84

FIGURA 24 – MODELO SELECIONADO PELO MÉTODO FIT DSD COM INTERVENÇÃO INTERATIVA	91
FIGURA 25 – MODELO SELECIONADO PELO MÉTODO FIT DSD COM INTERVENÇÃO NÃO-INTERATIVA	94
FIGURA 26 – DELINEAMENTO DSD PROJETADO NOS FATORES ATIVOS X_1 , X_2 E X_6	98
FIGURA 27 – ANÁLISE DOS RESÍDUOS DE Y_1 DO MODELO SELECIONADO ..	100
FIGURA 28 – PASSOS PARA A OTIMIZAÇÃO DO PRODUTO.....	102
FIGURA 29 – PASSOS PARA OTIMIZAÇÃO DO PRODUTO ALIMENTÍCIO	103
FIGURA 30 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=10$; $SN_ratio=1$ ou 3 ; $mA=6$; $2A=2$; $mF=0$; $mFE=0$)	106
FIGURA 31 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=10$; $SN_ratio=1$ ou 3 ; $mA=6$; $2A=2$; $mF=2$; $mFE=0$ ou 2)	107
FIGURA 32 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=10$; $SN_ratio=1$ ou 3 ; $mA=6$; $2A=2$; $mF=4$; $mFE=0$)	107
FIGURA 33 – ERRO TIPO I PARA FATORES PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=10$; $SN_ratio=1$; $mA=6$; $2A=2$; $mF=0$ ou 4 ; $mFE=0$ ou 2)	108
FIGURA 34 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=8$; $SN_ratio=1$; $mA=4$ ou 6 ; $2A=3$; $mF=0$; $mFE=0$; $2F=0$; $2FE=0$).....	109
FIGURA 35 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=8$; $SN_ratio=1$; $mA=4$ ou 6 ; $2A=3$; $mF=4$; $mFE=0$; $2F=0$; $2FE=0$).....	110
FIGURA 36 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=8$; $SN_ratio=1$; $mA=4$; $2A=3$; $mF=4$; $mFE=2$; $2F=0$; $2FE=0$).....	110
FIGURA 37 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=8$; $SN_ratio=1$; $mA=4$; $2A=3$; $mF=4$; $mFE=2$; $2F=0$; $2FE=0$).....	111

FIGURA 38 – ERRO TIPO I PARA FATORES DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO (m=10; SN_ratio=1; mA=6; 2A=2; mF=0 ou 4; mFE=0 ou 2).....	112
FIGURA 39 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD INTERATIVO (m=6; SN_ratio=1 ou 3; mA=3; 2A=2; mF=0; mFE=0).....	113
FIGURA 40 – ERRO TIPO I PARA FATORES DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD INTERATIVO (m=8; SN_ratio=1 ou 3; mA=3; 2A=2)	114
FIGURA 41 – ERRO TIPO I PARA FATORES DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO (m=6; SN_ratio=3; mA=3; 2A=2)	114

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – DELINEAMENTO DO TIPO FATORIAL COMPLETO 2 ²	35
TABELA 2 – DELINEAMENTO FATORIAL COMPLETO 2 ³	44
TABELA 3 – DELINEAMENTO FATORIAL FRACIONADO 2 ⁽³⁻¹⁾	45
TABELA 4 – ESTRUTURA DO DESENHO DSD PARA M FATORES.....	49
TABELA 5 – ESTRUTURA DO DESENHO DSD MÍNIMO, PARA 6 FATORES	50
TABELA 6 – ESCALA HEDÔNICA PARA ACEITABILIDADE DE PRODUTO	66
TABELA 7 – DELINEAMENTO DE EXPERIMENTO DO PROJETO EGH102.....	74
TABELA 8 – IDENTIFICAÇÃO DA ORDEM DAS DEGUSTAÇÕES, POR CONSUMIDOR	77
TABELA 9 – RESULTADOS DO EXPERIMENTO EGH102	82
TABELA 10 – ETAPAS DO MÉTODO FIT DSD DE JONES E NACHTSHEIM (2017)	84
TABELA 11 – RESULTADOS DAS ETAPAS DE FIT DSD COM INTERVENÇÃO INTERATIVA.....	92
TABELA 12 – ETAPAS DE FIT DSD COM INTERVENÇÃO NÃO INTERATIVA.....	95
TABELA 13 – COMPARATIVO DE DESEMPENHO DOS TRÊS MÉTODOS, NO EXPERIMENTO EGH102	97
TABELA 14 – FATORES E NÍVEIS PARA SIMULAÇÕES DO MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO, NA AVALIAÇÃO DO PODER PARA DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS.....	106
TABELA 15 – FATORES E NÍVEIS PARA SIMULAÇÕES DO MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO, NA AVALIAÇÃO DO PODER PARA DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM	109
TABELA 16 – RESULTADOS DE SIMULAÇÕES ADICIONAIS DO MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO, NA AVALIAÇÃO DO PODER PARA DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM	112
TABELA 17 – FATORES E NÍVEIS PARA SIMULAÇÕES DO MÉTODO FIT DSD INTERATIVO, NA AVALIAÇÃO DO PODER PARA DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS	113

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	16
1.1 JUSTIFICATIVA	16
1.2 OBJETIVO GERAL	17
1.2.1 Objetivos Específicos	17
2 REVISÃO DE LITERATURA	19
2.1 UM BREVE HISTÓRICO DE DELINEAMENTO DE EXPERIMENTOS	19
2.2 ETAPAS E PRINCÍPIOS PARA A CONDUÇÃO DE EXPERIMENTOS DELINEADOS	21
2.2.1 Etapas para a Condução de Delineamentos Experimentais	21
2.2.2 Princípios de Delineamento de Experimentos	26
2.3 EXPERIMENTOS DE TRIAGEM E DE OTIMIZAÇÃO	27
2.4 ANÁLISE ESTATÍSTICA DE EXPERIMENTOS COM VARIÁVEIS DE ENTRADA CONTÍNUAS	30
2.4.1 Estimativa dos Coeficientes β_i	30
2.4.2 Testes Estatísticos para o Modelo Geral e para os Coeficientes β_i	32
2.4.2.1 Teste de Significância para a Regressão	32
2.4.2.2 Teste de Significância para a Regressão	34
2.4.3 Exemplificação de Análise Estatística em Delineamento Experimental	35
2.4.4 Avaliação do Ajuste de Modelos	40
2.5 DELINEAMENTOS DE EXPERIMENTO SUPERSATURADOS	44
2.5.1 Confundimento Entre Fatores	44
2.5.2 Os Princípios de Esparsidade, Hierarquia e Hereditariedade de Efeitos	46
2.5.3 Características de Delineamentos Supersaturados	48
2.6 O DELINEAMENTO DO TIPO DSD – <i>DEFINITIVE SCREENING DESIGN</i>	49
2.6.1 Origem do DSD	49
2.6.2 Propriedades e Vantagens do DSD	52
2.6.3 Limitações do DSD.....	55
2.6.4 Outros Desenvolvimentos e Aplicações de DSD.....	58
2.7 O ALGORITMO FIT DSD	60
2.8 ESTUDOS DE CONSUMIDOR	65
2.8.1 Aplicação de Estudos de Consumidor.....	65
2.8.2 Avaliação Estatística de Estudos de Consumidor	66

2.8.3 Delineamentos de Experimentos para Otimização de Aceitabilidade Global de Produtos Alimentícios por Consumidores	67
3 MATERIAL E MÉTODOS	71
3.1 MATERIAL	71
3.2 MÉTODO DE DELINEAMENTO EXPERIMENTAL	71
3.3 MÉTODO PARA O PREPARO DE AMOSTRAS.....	74
3.4 MÉTODO DE RECRUTAMENTO DE CONSUMIDORES	75
3.5 MÉTODOS DE TESTE DE LOCALIZAÇÃO CENTRAL (<i>CLT</i>).....	76
3.6 MÉTODOS ESTATÍSTICOS PARA ANÁLISE DO EXPERIMENTO.....	80
3.7 MÉTODOS COMPUTACIONAIS PARA REALIZAÇÃO DE SIMULAÇÕES	81
4 APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS	82
4.1 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	82
4.1.1 Obtenção das Médias de Aceitabilidade Global dos Produtos (<i>LSMeans</i>).....	82
4.1.2 Resultados da Análise Estatística dos Dados pelo Método Fit DSD	83
4.2 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS E ADAPTAÇÕES PROPOSTAS AO MÉTODO FIT DSD PARA ANÁLISE ESTATÍSTICA DOS DADOS	86
4.2.1 Resultados das Adaptações Propostas ao Experimento <i>EGH102</i>	90
4.2.1.1 Resultados da Análise Estatística dos Dados pelo método “Fit DSD Interativo”	90
4.2.1.2 Resultados da Análise Estatística dos Dados pelo método Fit DSD Não Interativo.....	93
4.3 SELEÇÃO DE MODELO PARA O EXPERIMENTO <i>EGH102</i>	97
4.3.1 Etapa de Conclusão e Recomendações do Experimento <i>EGH102</i>	99
4.4 DISCUSSÃO DAS METODOLOGIAS PROPOSTAS ATRAVÉS DE SIMULAÇÕES.....	104
4.4.1 Resultados da Simulação.....	105
4.4.1.1 Método Fit DSD com Intervenção Não Interativa – Efeitos Principais	105
4.4.1.2 Método Fit DSD com Intervenção Não Interativa – Efeitos de Segunda Ordem 108	
4.4.1.3 Método Fit DSD com Intervenção Interativa – Fatores Principais e de Segunda Ordem	112
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS	115
5.1 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	116
REFERÊNCIAS.....	117

APÊNDICE 1 – CÓDIGOS UTILIZADOS, EM R.....	121
APÊNDICE 2 – DADOS BRUTOS DO EXPERIMENTO EGH102.....	132

1 INTRODUÇÃO

Delineamentos de Experimentos (DOE) são utilizados na indústria desde a metade do século XX, sendo reconhecidos como uma das técnicas estatísticas mais eficientes na obtenção de modelos matemáticos de causa-e-efeito considerando fatores de entrada e de saída. Tais técnicas evoluíram ao longo das últimas décadas na esteira de suas aplicações em diversos campos, principalmente na Indústria (MONTGOMERY, 2009).

Um dos recentes desenvolvimentos nesse campo é a introdução de delineamentos de triagem do tipo DSD – Delineamentos de Triagem Definitivos (do inglês *Definitive Screening Designs*), introduzidos por Jones e Nachtsheim (2011), como alternativa a delineamentos de triagem fatoriais e fatoriais fracionados.

Este trabalho propõe a utilização do delineamento DSD em uma aplicação industrial para a otimização da composição de um produto alimentício, sendo o contexto de otimização a maximização da aceitabilidade média por seus consumidores.

1.1 JUSTIFICATIVA

Estudos que envolvem a avaliação da aceitabilidade de produtos por consumidores são notoriamente caros, com incrementos anuais de custos de 5 a 10%, segundo Meilgaard et al. (2007), e envolvem questões tais como: a confecção de protótipos; a movimentação das amostras até localização central com ampla estrutura e controle de temperatura; o recrutamento e pagamento de dezenas – ou mesmo centenas – de consumidores que representem o perfil populacional desejado; a coleta e processamento dos dados; entre outros aspectos que tornam longo o processo de experimentação e dificultam a realização de múltiplos estudos sequenciais.

O delineamento experimental do tipo *Definitive Screening Design* (DSD), introduzido por Jones e Nachtsheim (2011) e em evolução desde então, possui propriedades que permitem que experimentos de triagem se projetem, conforme o número de fatores ativos, em um experimento de otimização, o que tradicionalmente

exige um experimento sequencial incompatível com experimentos para a avaliação da aceitabilidade de produtos por consumidores.

A motivação original desse trabalho é trazer a aplicação de DSD para a otimização de um produto alimentício, sendo que o desafio de selecionar os termos do modelo, conforme método desenvolvido por Jones e Nachtsheim (2017), motivou ainda a criação de duas adaptações a tal método que permitem a intervenção do pesquisador na seleção de termos do modelo matemático, disponibilizadas em código programado em R (R CORE TEAM, 2019).

1.2 OBJETIVO GERAL

Propor alternativas ao algoritmo de ajuste de modelos para o delineamento DSD, de Jones e Nachtsheim (2017), permitindo a possibilidade de que pesquisadores que tenham conhecimento prévio a respeito de efeitos ativos e de tamanhos de efeito com efeito prático negligenciável, intervenham na seleção de termos do modelo matemático.

1.2.1 Objetivos Específicos

- a) Utilizar o delineamento DSD (Definitive Screening Design) para estabelecer quais ingredientes de um produto alimentício possuem maior efeito sobre a aceitabilidade por seus consumidores, representados por um conjunto amostral representativo de população de interesse;
- b) Definição dos fatores de estudo e escolha do delineamento para o estudo, conforme as restrições de sessões de degustação;
- c) Produção de protótipos e condução dos experimentos em campo;
- d) Análise estatística dos resultados e escolha do melhor modelo matemático para ajuste aos dados;
- e) Otimização de produto, mantendo o nível de aceitabilidade médio por consumidores e reduzindo seu custo;
- f) Discussão das vantagens e desvantagens do método até então recomendado para a seleção de termos de modelo, com a proposta de

alternativas ou adaptações a esse método, que possibilitem a adição, por investigadores, do uso de conhecimento prévio a respeito de fatores ativos.

2 REVISÃO DE LITERATURA

Nessa seção, apresenta-se o tema de Delineamento de Experimentos e seus conceitos relevantes ao trabalho realizado. O delineamento do tipo *Definitive Screening Design*, também denominado DSD, é apresentado e seu histórico de evolução, pautado por estudos de ajuste de termos de segunda-ordem, é discutido.

Discutem-se também alguns conceitos de estudos de consumidor, realizados pela Indústria de Alimentos como orientação para otimização de seus produtos, e as abordagens para a condução de experimentos e para a avaliação estatística de resultados de estudos de consumidor.

2.1 UM BREVE HISTÓRICO DE DELINEAMENTO DE EXPERIMENTOS

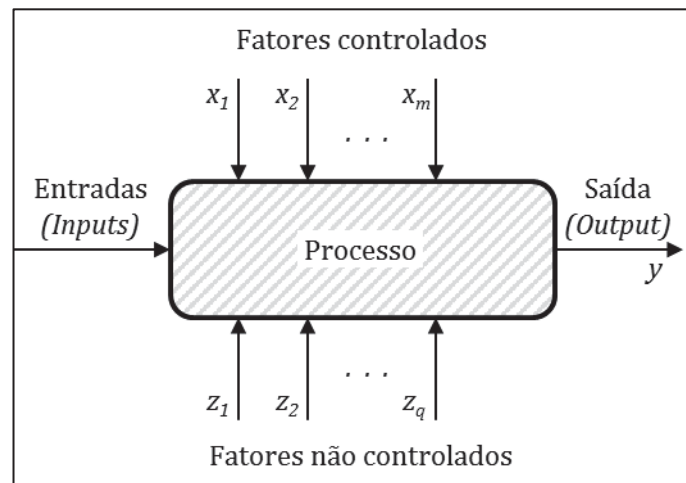
As técnicas de Delineamento de Experimentos permitem o estabelecimento da relação de causa-e-efeito de variáveis independentes, denominadas variáveis de entrada, e variáveis dependentes, denominadas variáveis-resposta, através do uso do resultado de experimentos no ajuste de modelos matemáticos do tipo $\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$, especialmente quando modelos fenomenológicos (denominados *mechanistic models*), provenientes de axiomas ou postulados, não são suficientemente conhecidos (MONTGOMERY, 2009).

Esse campo de estudo foi desenvolvido inicialmente, entre os anos 1920 e 1930, por Sir Ronald A. Fisher, responsável à época pela realização de análises estatísticas de dados da estação de experimentação agrícola Rothamsted, na região de Londres, Inglaterra. Apesar de ter à sua disposição dados de clima e produtividade de solo coletados ao longo de diversos anos, Fisher foi incapaz de extrair conclusões devido ao fato de que na maioria dos casos, dentre outras dificuldades, as variáveis mensuradas se modificavam de forma simultânea umas com as outras, o que impossibilitava o estabelecimento de relação de causa-e-efeito. Essa experiência malsucedida levou Fisher a desenvolver técnicas de experimentação tais como os delineamentos fatoriais e a Análise de Variância (ANOVA) (FISHER BOX, 1978).

Breyfogle III (2003) ressalta que as técnicas de Delineamento de Experimentos ou DoE (do inglês *Design of Experiments*), oferecem uma abordagem estruturada para alterar a regulação de diversos fatores de um processo de uma única vez e observar seus efeitos, além de fornecer um modelo preditivo para a variável-resposta.

Em relação ao descrito, o estabelecimento da relação de causa-e-efeito através de experimentos delineados consiste na mudança sistemática de fatores controlados (variáveis X), organizados em sequência aleatória, denominadas “corridas” e medição de uma variável de saída Y . Assim, um processo no qual variáveis desconhecidas Z , não controladas e externas ao experimento devem ser mantidas fixas tanto quanto possível. Essas variáveis ou fatores desconhecidos compõem o ruído experimental ou simplesmente o erro. O efeito de cada variável X na variável Y é quantificado e sua significância é atestada quando seu efeito é estatisticamente grande e suficiente quando comparado ao “tamanho do erro”. Um desenho esquemático é mostrado na FIGURA 1:

FIGURA 1 – MODELO GENÉRICO DE UM PROCESSO OU SISTEMA



Fonte: O autor, adaptado de Montgomery (2009).

Box e Wilson (1951) foram os responsáveis por introduzir técnicas de modelagem de superfícies de resposta, a partir das quais houve o crescimento no uso de experimentação em ambiente industrial. Na indústria pode ocorrer de as respostas serem extraídas em menos tempo do que em experimentações no campo da

Agronomia, possibilitando aos investigadores a adoção de abordagens sequenciais de experimentação. Como resultado, o uso de Delineamentos Experimentais passou a ser adotado em larga escala em indústrias químicas e de transformação.

Montgomery (2009) descreve ainda que desenvolvimentos subsequentes podem ser atribuídos a Genichi Taguchi, que popularizou delineamentos que trabalham com amostras de menor tamanho que o delineamento fatorial completo. Isto vem a ser a técnica Taguchi que é muito aplicada no desenvolvimento de produtos robustos, ou seja, que são insensíveis às fontes de variabilidade externa. Assim, com vistas à melhoria da Qualidade, é responsável em parte pela adoção de Delineamento de Experimentos em indústrias de produção de peças em quantidades discretas, como automotiva, de semicondutores e aeroespacial.

2.2 ETAPAS E PRINCÍPIOS PARA A CONDUÇÃO DE EXPERIMENTOS DELINEADOS

2.2.1 Etapas para a Condução de Delineamentos Experimentais

Os seguintes passos são utilizados para a abordagem estatística de experimentação, denominada Delineamento de Experimentos: reconhecimento e declaração do problema; definição dos fatores de entrada de estudo; definição do espaço experimental – fatores, níveis e faixas; escolha do tipo de delineamento experimental; condução do experimento; análise estatística dos dados, conclusão e recomendações. Ressalta ainda que as quatro primeiras etapas são consideradas como etapas de pré-experimentação, ou seja, fazem parte da definição do problema e planejamento da abordagem experimental. As demais etapas iniciam com a condução do experimento em si, que geram dados para a análise objetiva e geração de recomendações (MONTGOMERY, 2009).

Em análise ao exposto em Montgomery (2009), interpretam-se como pontos principais de cada uma das etapas descritas:

a) Reconhecimento e declaração do problema.

- Nessa etapa de pré-experimentação, recomenda-se que um time multifuncional reúna-se para definir, de modo claro, qual(is) o(s) problema(s) a ser(em) resolvido(s), o que tende a tornar claro o tipo de experimento a ser adotado, dentre os quais: caracterização ou triagem de fatores; otimização; confirmação; descoberta; estabilidade ou robustez.

b) Definição dos fatores de entrada de estudo:

- Aqui deve-se garantir que o conjunto de medidas quantitativas a serem tomadas como variável-resposta Y reflita aquilo que se deseja estudar ou otimizar.
- A variabilidade do sistema de medição deve ser analisada para que se garanta que as medidas sejam representações fiéis do fenômeno em análise. A média de múltiplas avaliações pode ser tomada de modo a mitigar a variabilidade de sistemas de medição.

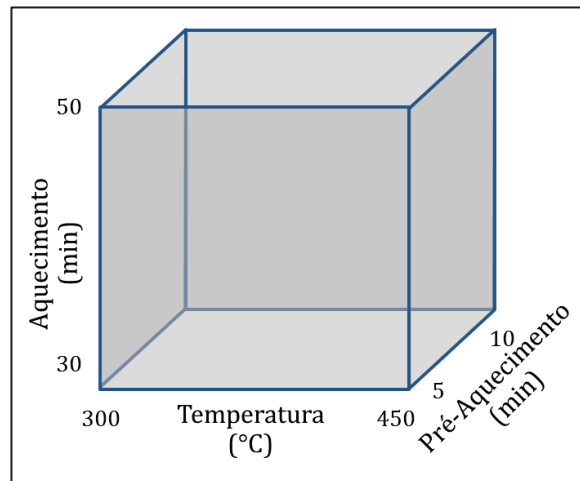
c) Definição do espaço experimental – fatores, níveis e faixas:

- Os fatores que possuam efeito potencial sobre a variável-resposta podem ser classificados como fatores do delineamento (*design factors*)¹ ou como fatores de ruído (*nuisance factors*), sendo os primeiros aqueles cujos efeitos deseja-se conhecer; e os fatores de ruído aqueles que, sendo controláveis ou somente mensuráveis, são tratados com a estratégia apropriada para que, durante a etapa de análise de dados, o efeito dos fatores do delineamento sejam melhor discernidos perante o ruído experimental puro. Dentre tais estratégias destacam-se a blocagem e a tratativa pelo uso de covariáveis.
- Após classificação dos fatores, e dotado de conhecimento de processo prévio, deve-se determinar as faixas e níveis em que cada fator será examinado, compondo-se o espaço de estudo. O espaço

¹ A partir desse ponto, o uso da palavra “fator” referir-se-á a fatores de delineamento.

de estudo, salvo casos de delineamentos específicos em espaços com restrições ou estudos de mistura (em que a soma de fatores deve somar 1), é um hipercubo conforme exemplificado, para três fatores, na FIGURA 2.

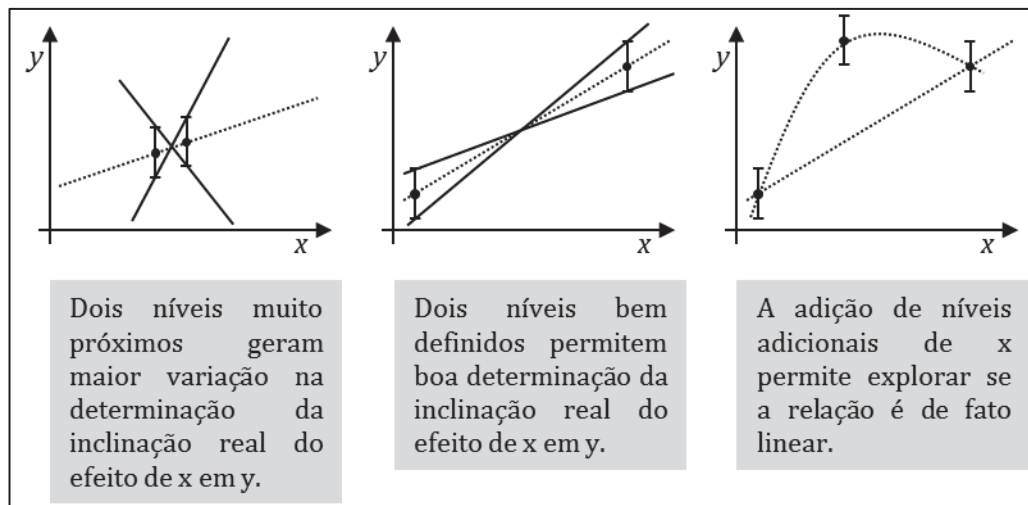
FIGURA 2 – ESPAÇO EXPERIMENTAL DE ESTUDO COM TRÊS FATORES: TEMPERATURA, AQUECIMENTO E PRÉ-AQUECIMENTO



Fonte: O autor (2019).

- Nesse exemplo, qualquer combinação de níveis dos três fatores: A - Temperatura, B - Aquecimento e C - Pré-Aquecimento, pode fazer parte do experimento, respeitados os limites impostos pelas faixas definidas: $300^{\circ}\text{C} < A < 450^{\circ}\text{C}$; $30 \text{ min} < B < 50 \text{ min}$; $5 \text{ min} < C < 10 \text{ min}$.
- Montgomery (2009) ressalta que essas três primeiras etapas são essenciais para o sucesso de um experimento. A FIGURA 3 ilustra, para o caso univariado, e considerando o impacto do erro experimental na precisão das estimativas, os potenciais impactos da má definição dos níveis de um fator, além da possibilidade do uso de pontos centrais para a exploração da presença de curvatura.

FIGURA 3 – SELEÇÃO DE NÍVEIS EM UM EXPERIMENTO

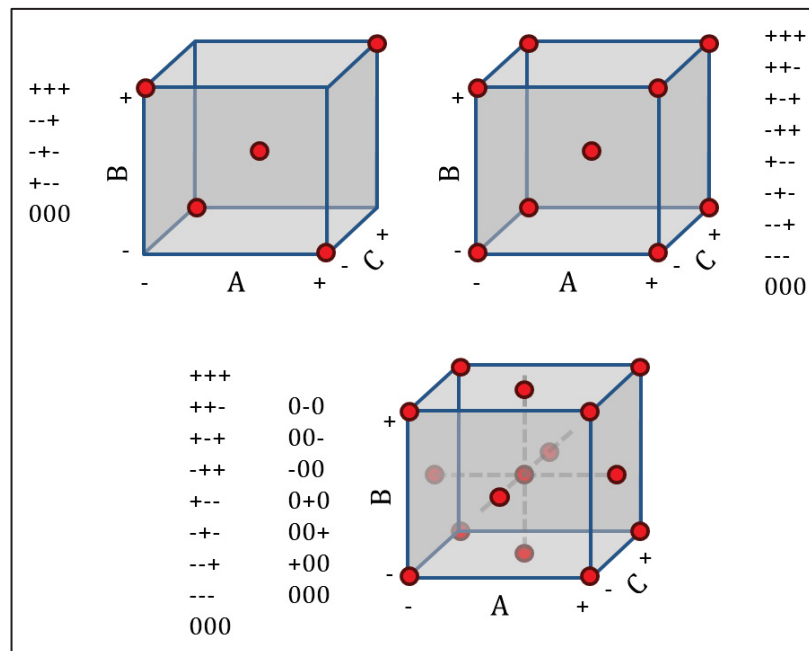


Fonte: O autor (2019).

d) Escolha do tipo de delineamento experimental:

- Conforme os recursos disponíveis e objetivos do estudo, essa etapa trata basicamente da escolha, dentre as disponíveis em um catálogo de opções, do delineamento mais adequado ao problema de investigação. Programas de computador costumam gerar as combinações selecionadas de um dado delineamento em ordem aleatória.
- A FIGURA 4 mostra três possíveis delineamentos para o caso de três fatores, sendo os extremos de cada fator codificados como “-” para os valores mínimos, “+” para valores máximos e “0” para pontos centrais, assim denominados por serem equidistantes entre os níveis mínimo e máximo de um dado fator. Cada ponto se refere a uma corrida, cujas combinações estão codificadas ao lado de cada experimento. Delineamentos com maiores números de corridas tendem a possibilitar a estimativa dita “limpa”, ou seja, ausente de confundimento, de fatores principais e de maior ordem, que são discutidos na seção 2.5.1.

FIGURA 4 – OPÇÕES DE DELINEAMENTOS PARA O CASO DE 3 FATORES



Fonte: O autor (2019)

e) Condução do Experimento:

- Durante a condução do experimento em si, é de vital importância garantir que os resultados extraídos representem exatamente as condições preconizadas pelas corridas, garantindo-se que o equipamento estabilize sob os parâmetros modificados antes da coleta de amostras.

f) Análise estatística dos dados:

- A análise estatística de dados permite avaliar de forma objetiva, sob a estrutura de testes de hipóteses, a significância dos efeitos encontrados. Análises gráficas fornecem facilidade na interpretação e um modelo ajustado pode ser apresentado de modo a estabelecer a relação entre a variável-resposta e os fatores importantes.
- O modelo ajustado deve, em princípio, conter os fatores estatisticamente significativos.

g) Conclusão e Recomendações:

- Recomendações práticas devem derivar da análise de dados. Corridas de confirmação ou adicionais podem ser utilizadas para confirmar os resultados ou auxiliar na decisão de um dentre mais modelos preditivos potenciais.
- Novas hipóteses podem surgir. Montgomery (2009) reforça que a natureza da experimentação é iterativa, sendo preferível, na maior parte das vezes, não delinear grandes e compreensivos estudos ao início de uma investigação. Ao invés disso, Montgomery (2009) sugere o uso de não mais que 25% dos recursos no experimento inicial, garantindo a realização de experimentos sequenciais que permitam o atingimento dos objetivos de investigação.

2.2.2 Princípios de Delineamento de Experimentos

Montgomery (2009) aponta como três os princípios básicos de delineamento de experimentos: aleatorização, replicação e blocagem.

a) Aleatorização

- A aleatorização na condução das corridas experimentais permite tornar válido o pressuposto de métodos estatísticos de que o erro seja uma variável independente e distribuída de forma aleatória. Adicionalmente, aleatorizar a condução de corridas permite “balancear” o efeito adverso que fatores externos ao delineamento possam causar na tomada de conclusões.

b) Replicação

- A realização de corridas em réplica, ou seja, com exatamente as mesmas configurações para as variáveis de entrada X , permite a correta estimativa do erro amostral, o que é parte vital para determinar se as diferenças encontradas entre diferentes níveis das variáveis X_i , durante o experimento, são de fato significantes ou tão somente expressão do ruído experimental.

- Box, Hunter e Hunter (2005) ressaltam que réplicas devem ser genuínas, ou seja, não se tratando da tomada de mais amostras em uma dada corrida, e sim da repetição de todos os passos para a geração de cada uma das amostras.

c) Blocagem

- Em ambiente real de experimentação é comum que se encontrem fontes de variação conhecidas que não podem ser contornadas. Montgomery (2009) ilustra esse conceito com o exemplo de um experimento industrial que requer dois lotes de matéria-prima para que todas as corridas possam ser realizadas. Nesse caso, o efeito lote-a-lote de matéria-prima, mesmo não sendo de interesse para a investigação, precisa ser reconhecido e bloqueado. Cada lote forma um bloco e as corridas do delineamento experimental são divididas entre os dois blocos de forma homogênea.

2.3 EXPERIMENTOS DE TRIAGEM E DE OTIMIZAÇÃO

Um experimento pode ser categorizado de acordo com seu objetivo, como de Triagem (*Screening*) e de Otimização (*Optimization*) (MONTGOMERY, 2009).

Os métodos tratados neste trabalho referem-se a aplicações em que todas as variáveis de entrada são quantitativas e contínuas, sem a utilização de blocagem e com todos os efeitos fixos, relacionando-se ao trabalho desenvolvido na seção 3.

Em experimentos de triagem busca-se, dentre diversos potenciais fatores de entrada, a triagem daqueles com os maiores efeitos sobre a variável-resposta de interesse, sem necessariamente o objetivo de estabelecimento de um de um modelo matemático preditivo.

O modelo de um delineamento de triagem apresenta a Equação (1), para a variável resposta Y:

$$Y_i = f(x, \beta) = \beta_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j x_{ij} + \sum_{j=1}^{m-1} \sum_{k=j+1}^m \beta_{jk} x_{ij} x_{ik} + \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, n \quad (1)$$

Sendo: β_0 o intercepto, β_i o efeito do fator X_i , β_{ij} o efeito da interação entre os fatores i e j e ε é o erro. Se Y for observada n vezes os erros ε_i $i = 1, 2, \dots, n$ serão todos independentes entre si e identicamente distribuídos segundo a distribuição $N(0, \sigma^2)$ – média zero e variância σ^2 (MONTGOMERY, 2009).

Experimentos de Otimização buscam a obtenção de modelos preditivos de superfície de resposta (RSM) e foram introduzidos por Box e Wilson (1951). Tais modelos buscam, através dos resultados obtidos, o melhor ajuste à função real $f(x_i)$; $i = 1, \dots, m$ por uma função $F(x_i)$; $i = 1, \dots, m$, onde o termo “melhor ajuste” refere-se à menor soma quadrática dos erros ε , dados pela Equação (2):

$$SQE = \sum_{i=1}^n [y_i - F(x_i)]^2 \quad (2)$$

O modelo de superfície de resposta apresenta a forma da Equação **Error! Reference source not found.** para a variável resposta Y:

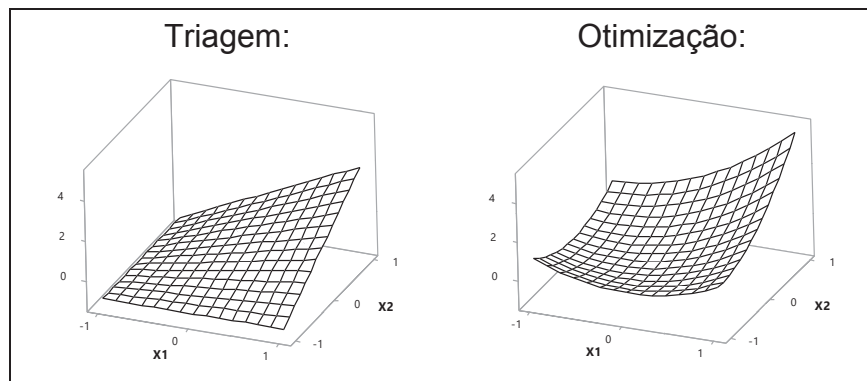
$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j x_{ij} + \sum_{j=1}^{m-1} \sum_{k=j+1}^m \beta_{jk} x_{ij} x_{ik} + \sum_{j=1}^m \beta_{jj} x_{ij}^2 + \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, n \quad (3)$$

Sendo: β_0 o intercepto, β_i o efeito do fator X_i , β_{ij} o efeito da interação entre os fatores i e j , β_{ii} o efeito quadrático do fator X_i , ε o erro, com distribuição $N(0, \sigma^2 I)$.

Esse modelo é denominado por Montgomery (2009) como Modelo de Superfície de Resposta de Segunda-Ordem (*Second-Order Response Surface Model*).

Graficamente, os modelos citados tomam as formas da FIGURA 5, assumindo todos os efeitos como ativos, positivos e de mesma magnitude (nos exemplos gráficos, magnitude 1).

FIGURA 5 – GRÁFICOS DE SUPERFÍCIE DE DELINEAMENTO DE TRIAGEM E DE OTIMIZAÇÃO COM DOIS FATORES, E CADA TERMO COM EFEITO DE MAGNITUDE 1



Fonte: O autor (2019).

Box, Hunter e Hunter (2005) ressaltam que modelos como os de superfície de resposta representam aproximações locais de respostas que devem (ao menos inicialmente) ser estudadas de forma empírica. Isto pode levar um investigador experiente ao desenvolvimento de modelos físicos e/ou determinísticos (*mechanistic models*). Segundo Kuhn (1996), mesmo modelos teóricos na física e química se tratam de aproximações boas o suficiente até o surgimento de um modelo melhor. Box, Hunter e Hunter (2005) ressaltam ainda que modelos empíricos podem sugerir o mecanismo pelo qual o fenômeno físico opera, auxiliando na obtenção de modelos físicos, que frequentemente requerem menos parâmetros.

Box e Wilson (1951) sugerem aos investigadores que, quando da presença de diversos fatores potenciais e dado que experimentos de otimização requerem maior número de corridas, utilizem-se da abordagem sequencial, ou seja, um experimento é conduzido para a triagem dos fatores com maior efeito sobre a variável-resposta e obtenção do vetor-gradiente que represente o mais inclinado caminho em direção ao objetivo do estudo (pico ou vale). Um novo espaço experimental é definido, os fatores não triados são mantidos fixos em suas melhores condições e um novo experimento, de otimização, é conduzido com os fatores triados.

Originalmente, a análise de experimentos se beneficiava de desenhos ortogonais, em que todos os níveis de todos os fatores ocorrem na mesma frequência em todos os demais fatores, ou seja, para quaisquer dois fatores codificados entre -1 e +1, $\sum x_1 x_2 = 0$:

Entretanto, a evolução dos métodos computacionais permitiu que a análise de experimentos não dependesse necessariamente da geração de delineamentos completamente ortogonais. Portanto, pelo fato da ortogonalidade permitir a estimativa independente (“limpa”) dos efeitos de um fator torna-se uma característica desejada em delineamentos experimentais, como ressaltam Box, Hunter e Hunter (2005):

Em geral, quando os X's são ortogonais, variâncias são minimizadas e os cálculos tornam-se compreensíveis e largamente simplificados. Portanto a ortogonalidade é uma propriedade que ainda é importante mesmo nessa era de computadores. (BOX, HUNTER, HUNTER, 2005, p. 386).

Em análise ao texto, por “compreensíveis e largamente simplificados” os autores se referem ao fato de que a estimativa de um coeficiente β_i se mantém igualmente independente da adição ou não de um outro fator no modelo, o que não ocorre na presença de colinearidade entre dois fatores X.

2.4 ANÁLISE ESTATÍSTICA DE EXPERIMENTOS COM VARIÁVEIS DE ENTRADA CONTÍNUAS

2.4.1 Estimativa dos Coeficientes β_i

A estimativa dos coeficientes β_i dos modelos ajustados é, assim como para análises de Regressão, realizada pelo método dos mínimos quadrados, ou seja, função que representa a soma das distâncias ao quadrado entre os valores observados e os obtidos pelo modelo da Equação (4) (MONTGOMERY et al., 2006):

$$S(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k) = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n \left(y_i - \hat{\beta}_0 - \sum_{j=1}^k \hat{\beta}_j x_{ij} \right)^2 \quad (4)$$

O melhor modelo ajustado é aquele que minimiza tal soma, ou seja, a função da Equação (4) deve ser minimizada com respeito a $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$:

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_0} \Big|_{\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_k} = 2 \sum_{i=1}^n \left(y_i - \hat{\beta}_0 - \sum_{j=1}^k \hat{\beta}_j x_{ij} \right) = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_j} \Big|_{\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_k} = 2 \sum_{i=1}^n \left(y_i - \hat{\beta}_0 - \sum_{j=1}^k \hat{\beta}_j x_{ij} \right) x_{ij} = 0; \quad j = 1, 2, \dots, k \quad (6)$$

Da simplificação da Equação (6), resulta um sistema de equações (7) denominado equações normais de mínimos quadrados:

$$\left\{ \begin{array}{l} n\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n x_{i2} + \dots + \hat{\beta}_k \sum_{i=1}^n x_{ik} = \sum_{i=1}^n y_i \\ \hat{\beta}_0 \sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} + \dots + \hat{\beta}_k \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{ik} = \sum_{i=1}^n x_{i1}y_i \\ \vdots \\ \hat{\beta}_0 \sum_{i=1}^n x_{ik} + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_{ik}x_{i1} + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n x_{ik}x_{i2} + \dots + \hat{\beta}_k \sum_{i=1}^n x_{ik}^2 = \sum_{i=1}^n x_{ik}y_i \end{array} \right. \quad (7)$$

Montgomery et al. (2006) demonstram que é possível simplificar esse problema de minimização para abordagem matricial equivalente, de mais simples compreensão e manipulação computacional, dado pela Equação (8):

$$\underline{\hat{y}} = X\underline{\hat{\beta}} = X(X'X)^{-1}X'y; \quad \underline{\hat{\beta}} = (X'X)^{-1}X'y \quad (8)$$

$$\text{onde: } \underline{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}; \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{bmatrix}; \quad \underline{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}; \quad \underline{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix},$$

Cujo resultado \hat{y} é a representação vetorial das estimativas de $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$.

Pode-se também escrever que:

$$\underline{\hat{\beta}} = H\underline{y}, \quad (9)$$

onde H é conhecida como a matriz Chapéu, ou *Hat Matrix* (MONTGOMERY, 2009), dada pela Equação (10):

$$H = X(X'X)^{-1}X' \quad (10)$$

Montgomery et al. (2006) demonstram ainda que, sob o pressuposto de resíduos com distribuição Normal, o estimador de máxima verossimilhança $\hat{\beta}$ para β é o mesmo obtido pelo método dos mínimos quadrados.

2.4.2 Testes Estatísticos para o Modelo Geral e para os Coeficientes β_i

2.4.2.1 Teste de Significância para a Regressão

Montgomery et al. (2006) utilizam o método estatístico de Análise de Variância (ANOVA) para determinar se um dado modelo obtido é significativo, ou seja, se o ajuste de mínimos quadrados reduz o erro de forma significativa quando comparado a um simples modelo de ajuste pela média de todos os resultados.

Isso significa testar a hipótese de que ao menos um dos coeficientes β_j é significativamente diferente de zero. Na forma de teste de hipótese da Equação (11):

$$\begin{aligned} H_0: \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_k = 0 \\ H_1: \beta_j \neq 0, \text{ para ao menos um } j \end{aligned} \quad (11)$$

A soma de quadrados total SS_T é particionada na soma de quadrados devido à regressão e na soma de quadrados dos resíduos, conforme a Equação (12).

$$SS_T = SS_R + SS_{Res} \quad (12)$$

Os quadrados médios MS_R e MS_{Res} são dados, respectivamente, pela divisão de SS_R e SS_{Res} por seus respectivos graus de liberdade. Assim, $MS_R = SS_R/k$, sendo k o número de preditores no modelo, e $MS_{Res} = SS_{Res}/(n - k - 1)$, sendo demonstrado por Montgomery et al. (2006) que $MS_R \sim \chi_k$ e $MS_{Res} \sim \chi_{n-k-1}$ e que a razão $F_0 = MS_R/MS_{Res} \sim F_{k,n-k-1}$. Ressalta-se ainda que MS_{Res} é, um estimador não viciado para σ^2 .

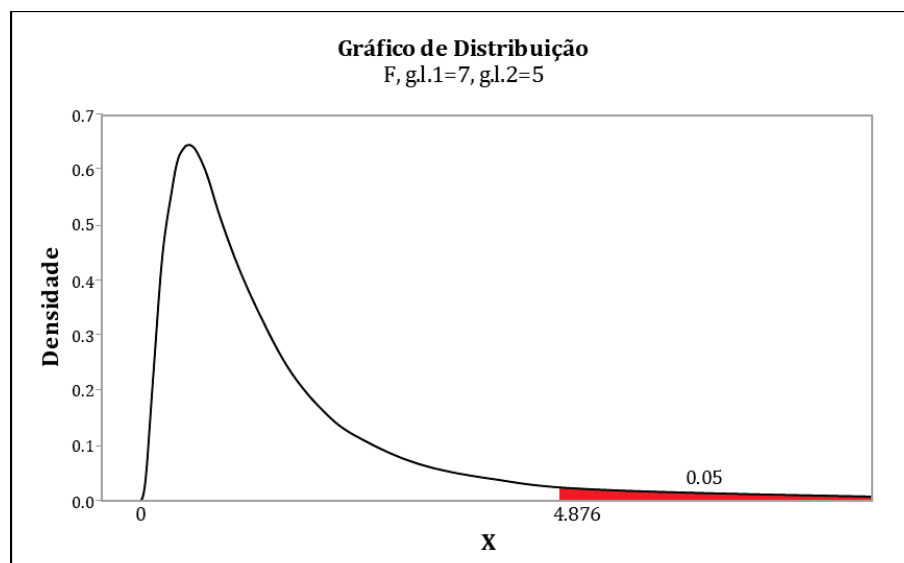
Segue, portanto, que a realização do teste de hipótese F permite verificar se a razão MS_R/MS_{Res} é significativamente maior que 1.

Montgomery et al. (2006) definem que a hipótese formulada em (11) é rejeitada para um valor observado de F_0 que seja maior que um valor de F denominado crítico, dado um nível de significância α pré-determinado, seguindo a Equação (13):

$$F_0 > F_{Crit} = F_{\alpha,k,n-k-1} \quad (13)$$

Exemplifica-se o exposto com o caso de um ajuste de 13 observações por um modelo com 7 (sete) preditores. Aqui, $k = 7$ e $n-k-1 = 13-7-1 = 5$. Caso a razão MS_R/MS_{Res} seja maior que o valor crítico de 4,876 mostrado na FIGURA 6, a hipótese formulada em (3) é rejeitada.

FIGURA 6 – DISTRIBUIÇÃO F COM G.L. 7, 5

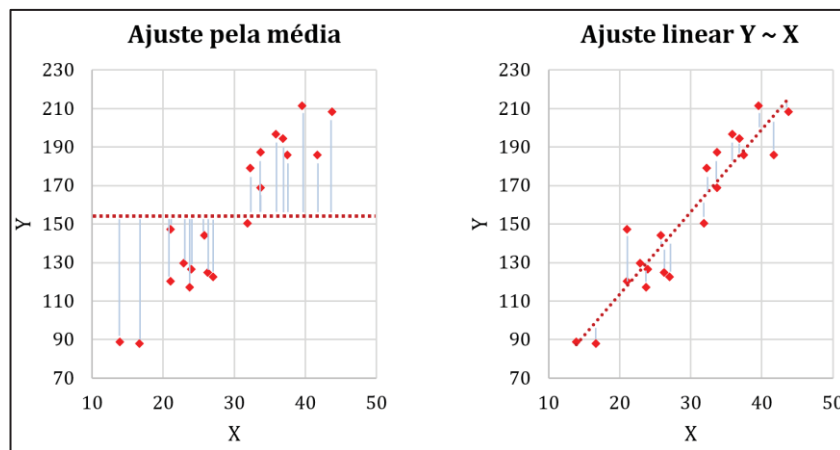


Fonte: O autor (2019).

Interpreta-se do exposto que a rejeição à hipótese nula possui o seguinte significado prático: a redução no ruído devido ao ajuste dos dados pelo modelo é grande o suficiente para que se considere o ajuste como melhor que o ajuste pela média.

Exemplifica-se essa interpretação com a FIGURA 7, que mostra a redução da distância dos resíduos ao modelo na medida em que um ajuste pela média é substituído por um ajuste linear, por mínimos quadrados, de Y pela variável X, ou $Y \sim X$, pela notação utilizada na especificação de modelos no software R.

FIGURA 7 – EXEMPLO DA DIFERENÇA ENTRE AJUSTE PELA MÉDIA E AJUSTE LINEAR



Fonte: O autor (2019).

O método de ajuste é válido quando os pressupostos quanto aos resíduos, distribuídos conforme a distribuição Normal, $N(0, \sigma^2)$, independentes e identicamente distribuídos.

2.4.2.2 Teste de Significância para a Regressão

Montgomery et al. (2006) demonstram ainda como determinar, dado que um modelo seja significativo, qual(is) coeficiente(s) β_j é (ou são) significativo(s), o que equivale a testar a seguinte hipótese (14), para cada β_j .

$$\begin{aligned} H_0: \beta_j &= 0 \\ H_1: \beta_j &\neq 0 \end{aligned} \tag{14}$$

A estatística para esse teste de hipótese é:

$$t_0: \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}} = \frac{\hat{\beta}_j}{se(\hat{\beta}_j)}, \quad (15)$$

onde C_{jj} é o elemento j da diagonal da matriz $(X'X)^{-1}$, e "se" é uma notação que denomina o erro padrão (*standard error*) do estimador de β .

Montgomery et al. (2006) descrevem que a hipótese nula H_0 deve ser rejeitada caso $|t_0| > t_{\frac{\alpha}{2}, n-k-1}$, e ressaltam que esse teste considera a presença de outros termos no modelo, ou seja, o teste avalia a contribuição de um fator X_j , dada a presença dos demais fatores no modelo.

2.4.3 Exemplificação de Análise Estatística em Delineamento Experimental

Aplicando os métodos das seções anteriores, pode-se construir um exemplo. Seja o delineamento do tipo fatorial completo 2^2 da TABELA 1, ou seja, com dois fatores em dois níveis cada, em duplicata, ou seja, com oito corridas:

TABELA 1 – DELINEAMENTO DO TIPO FATORIAL COMPLETO 2^2

Corrida	X ₁	X ₂	X ₁ *X ₂	y
1	+1	+1	+1	31
2	-1	+1	-1	29
3	+1	-1	-1	49
4	-1	-1	+1	46
5	+1	+1	+1	33
6	-1	+1	-1	26
7	+1	-1	-1	50
8	-1	-1	+1	48

Fonte: O autor (2019).

Segue, de (9) e (10):

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}; X' = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}; X'X = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}$$

Portanto:

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{bmatrix}; (X'X)^{-1}X' = \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\hat{\beta}} = (X'X)^{-1}X'y = \begin{bmatrix} 39,00 \\ 1,75 \\ -9,25 \\ 0,50 \end{bmatrix}$$

Em desenhos balanceados e de dois níveis, como o descrito nesse exemplo, os efeitos podem ser calculados subtraindo a média de y quando X_i está em seu nível mínimo da média de y quando X_i está em seu nível máximo, conforme (16), (17) e (18).

$$\hat{\beta}_{X_1} = \frac{(31 + 49 + 33 + 50) - (29 + 46 + 26 + 48)}{4} = 3,50 \quad (16)$$

$$\hat{\beta}_{X_2} = \frac{(31 + 29 + 33 + 26) - (49 + 46 + 50 + 48)}{4} = -18,50 \quad (17)$$

$$\hat{\beta}_{X_1 * X_2} = \frac{(31 + 46 + 33 + 48) - (29 + 49 + 26 + 50)}{4} = 1,00 \quad (18)$$

Como, aqui, a codificação para os níveis mínimo e máximo de cada fator são, respectivamente, -1 e +1, ou seja, possui uma amplitude igual a 2, esse cálculo fornece valores dobrados em relação ao cálculo matricial, que fornece o efeito a cada mudança unitária em X_i .

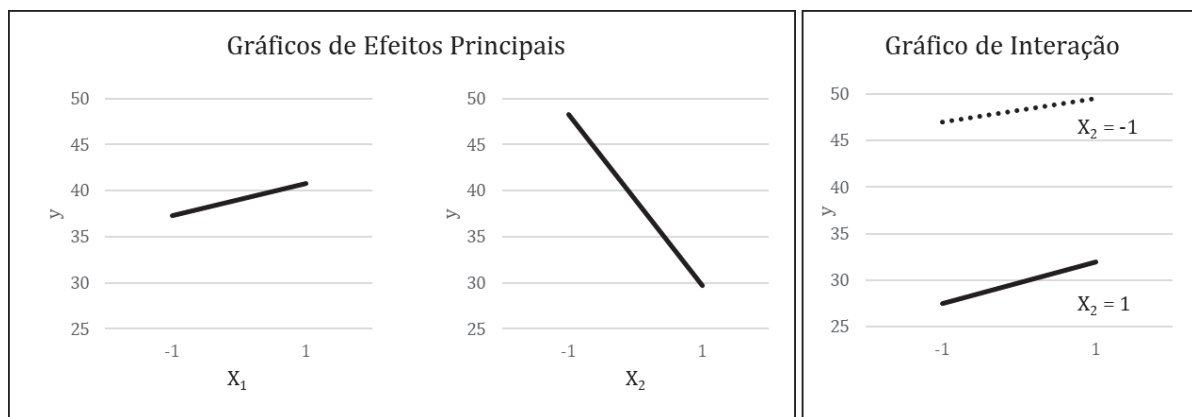
A Equação (19) dá a estimativa de y :

$$\hat{y} = 39 + 1,75 * x_1 - 9,25 * x_2 + 0,50 * x_1 * x_2 \quad (19)$$

Com X_2 apresentando um efeito negativo e de magnitude 9,25 em y ; X_1 apresentando um efeito positivo em y de magnitude 1,75; e a interação $X_1 * X_2$ possuindo efeito positivo de magnitude 0,50.

A FIGURA 8 apresenta os gráficos de efeitos principais e de interação obtidos com os dados do experimento:

FIGURA 8 – ANÁLISE GRÁFICA DOS EFEITOS DE UM EXPERIMENTO



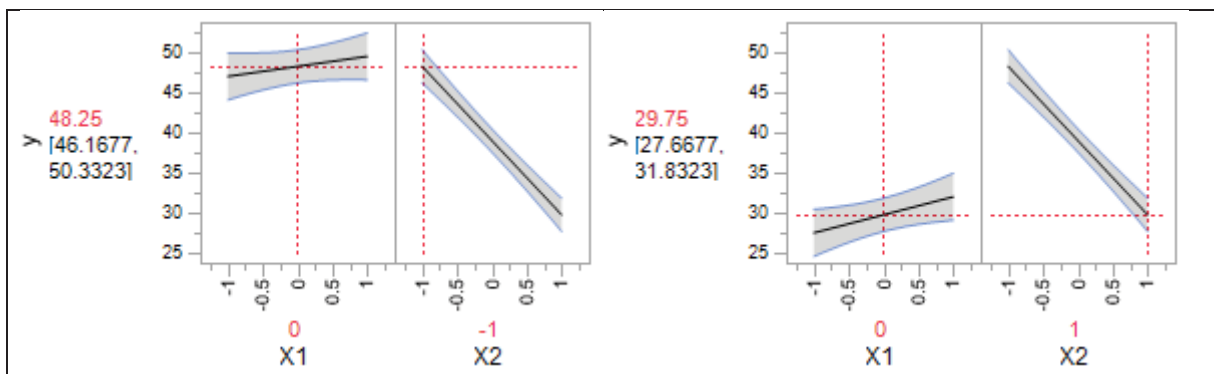
Fonte: O autor (2019).

de onde nota-se a maior magnitude de X_2 em relação a X_1 e a aparente não interação entre os dois fatores, visto que o comportamento da variável resposta muda na mesma magnitude devido a X_1 , tanto quando X_2 está em seu máximo como quando X_2 está em seu mínimo.

Alguns *softwares* estatísticos disponibilizam versões interativas dos gráficos de efeitos principais. O *software* JMP (SAS INSTITUTE, 2018) denomina tal ferramenta como *profiler*. Este gráfico permite observar o efeito de um fator, condicionado ao nível dos demais fatores, de modo interativo. Na presença de interações, pode-se observar a mudança na inclinação da reta em um dado fator quando se modifica o fator com o qual interage (SAS INSTITUTE, 2018).

A FIGURA 9 mostra um exemplo gerado com os mesmos dados. Cada par de gráficos mostra o efeito de X_1 em y , à esquerda quando X_2 está em seu mínimo e à direita quando X_2 está em seu máximo. As bandas representam os intervalos de confiança (I.C.) de 95% para as estimativas, ou seja, dado o número de amostras e a qualidade do ajuste dos dados ao modelo, pode-se estimar um intervalo dentro do qual espera-se que o parâmetro estimado esteja, com 95% de confiança (BOX, HUNTER, HUNTER, 2005).

FIGURA 9 – GRÁFICO PROFILER



Fonte: O autor (2019).

A análise da significância estatística dos termos pode ser realizada em softwares Estatísticos como o R (R CORE TEAM, 2019), que gera a saída da FIGURA 10:

FIGURA 10 – ANÁLISE DE SIGNIFICÂNCIA ESTATÍSTICA

```
> X <- data.frame(X1 = c(1,-1,1,-1,1,-1,1,-1), X2 = c(1,1,-1,-1,1,1,-1,-1))
> y <- c(31,29,49,46,33,26,50,48)
> model <- lm(y ~ X$X1+X$X2+X$X1*X$X2, data = X)
> summary(model)

Call:
lm(formula = y ~ X$X1 + X$X2 + X$X1 * X$X2)

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  39.0000    0.5303   73.539 2.05e-07 ***
X$X1         1.7500    0.5303    3.300  0.0299 *
X$X2        -9.2500    0.5303  -17.442 6.34e-05 ***
X$X1:X$X2    0.5000    0.5303    0.943  0.3992
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.5 on 4 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9875, Adjusted R-squared:  0.9781
F-statistic: 105.3 on 3 and 4 DF, p-value: 0.0002917
```

Fonte: O autor (2019).

A análise dos p-valores ($\Pr(>|t|)$) indica que os efeitos principais de X_1 e X_2 são, portanto, significativos a 5%, e a interação $X_1 * X_2$ não é significativa a 5%.

No caso de X_1 , a interpretação do p-valor de 0,0299 é: “Existe uma probabilidade de 0,0299 de que o efeito observado de X_1 sobre a variável resposta tenha ocorrido ao acaso”, ou seja, temos evidência suficiente para declarar como significativo o efeito de X_1 , dado que o nível escolhido para o teste é de 5%. Analogamente, o efeito proporcionado por X_2 em Y apresenta probabilidade próxima a zero de ter ocorrido ao acaso.

Sullivan e Feinn (2012) ressaltam que, além de p-valores significativos, investigadores devem se ater principalmente ao tamanho dos efeitos encontrados, e à relevância prática de tais efeitos sobre o que quer que se esteja investigando, ou seja, um p-valor baixo não necessariamente resulta em informação relevante se o efeito associado ao fator significativo não possuir relevância prática.

Reforça-se aqui que, apesar de se obter uma equação de predição de y a partir da análise do delineamento demonstrado nesse exemplo, delineamentos de triagem, dentre os quais se destaca os do tipo fatoriais fracionados, não se propõem geralmente à obtenção de modelo preditivo.

Delineamentos em que os fatores são variados em apenas dois níveis também não permitem a estimativa de curvatura, ou seja, de efeitos que não sejam lineares. A adição de pontos centrais, corridas nas quais os ajustes no nível “zero” são realizados em todos os fatores ao mesmo tempo (vide exemplos da FIGURA 4) auxilia a que investigadores testem a hipótese sobre existência de curvatura, ainda que não seja possível identificar qual(is) fator(es) sejam responsáveis pelo fenômeno.

Este trabalho não trata do tema de resolução de delineamentos fatoriais fracionados, para o qual se recomenda a leitura do capítulo 8 de Montgomery (2009).

2.4.4 Avaliação do Ajuste de Modelos

Em famosa citação, George E. P. Box afirma que “todos os modelos estão errados, porém alguns são úteis”, visto que todo modelo matemático é uma aproximação de uma realidade desconhecida (BOX, HUNTER, HUNTER, 2005).

O desafio na escolha de um modelo para o estabelecimento de relação de causa-e-efeito, durante a etapa de Análise Estatística dos Dados de um Delineamento de Experimentos, portanto, reside na escolha de quais termos devem ser incluídos e quais devem ser excluídos, notadamente com o objetivo de se evitar um modelo sobreajustado.

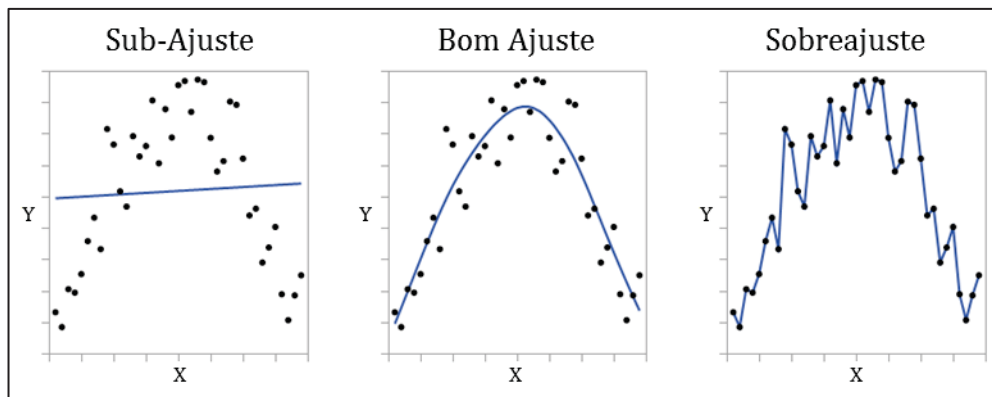
O Coeficiente de Determinação R^2 é amplamente utilizado para quantificar a qualidade de ajuste de um modelo (CAMERON e WINDMEIJER, 1997). Tal índice varia entre 0 e 100%, e quantifica, pelos erros ao quadrado, o quanto da variação na variável resposta é explicada pelo modelo em comparação a um ajuste feito somente pela média, sendo dado pela Equação (20):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (20)$$

Hawkins (2004) explica que o problema de sobreajuste (*overfitting*) ocorre sempre que um modelo é mais complexo que outro modelo cujo ajuste aos dados é igualmente bom sob o ponto de vista de prover uma explicação do fenômeno sob estudo.

Tal conceito é exemplificado na FIGURA 11, em que o mesmo conjunto de dados é modelado de três formas.

FIGURA 11 – EXEMPLIFICAÇÃO DE AJUSTES DE MODELO



Fonte: O autor (2019).

Interpreta-se que, como Delineamentos de Experimentos são concebidos para que todos os dados gerados sejam utilizados durante a etapa de análise, ao contrário de métodos de aprendizado de máquina, em que técnicas de validação de modelo utilizam somente uma parte dos dados para a geração do modelo e a parte restante é utilizada para testes de ajuste, torna-se mais difícil definir quando, de fato, existe sobreajuste em um DOE.

Hawkins (2004) considera o sobreajuste, portanto, como um problema comparativo e não absoluto, ou seja, não existe meio objetivo de se avaliar se um modelo sofre de sobreajuste. O autor ressalta ainda que o conhecimento científico sobre o problema deve ser utilizado na decisão do modelo mais adequado.

Em análise ao texto, o modelo escolhido, após a condução de um experimento, deve ser, dentre todos aqueles que possuam um bom ajuste aos dados, o mais simples dentre eles. É também importante que as previsões realizadas pelo modelo façam sentido do ponto de vista prático.

Analisando-se a equação (20), o valor de R^2 sempre cresce à medida que mais variáveis independentes p são introduzidas no modelo, o que faz com que a simples introdução de mais variáveis independentes no modelo possa torná-lo artificialmente alto, contradizendo assim o conceito de seleção do modelo mais simples que explique bem o fenômeno sob estudo. Uma adaptação ao Coeficiente de Determinação R^2 , denominado R^2 -Ajustado, Equação (21), introduz uma penalização

que corrige essa falha, o que, segundo Montgomery (2009), o torna útil para experimentos complexos com diversos fatores, quando se deseja avaliar o impacto de reduzir ou incrementar o número de termos do modelo:

$$R^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{n - 1}{n - p - 1}, \quad (21)$$

sendo n o número de observações e p o total de termos no modelo.

Montgomery et al. (2006) demonstram um segundo método para cálculo do R^2 -Ajustado, visto na Equação (22), que prescinde da obtenção prévia do valor de R^2 , utilizando as Somas de Quadrados dos Resíduos (SQ_{Res}) e Total (SQ_T):

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{SQ_{Res}(n - p)}{SQ_T(n - 1)} \quad (22)$$

Montgomery (2009) ressalta ainda o índice PRESS, cujo acrônimo traduz-se do inglês como “Soma dos Quadrados dos Erros de Predição”. Essa medida avalia um modelo previamente escolhido com o seguinte algoritmo:

1. Seleciona-se uma corrida i .
2. Ajusta-se o modelo selecionado com as demais $n-1$ corridas.
3. O valor predito para a resposta da corrida i é comparado com o valor obtido, ou seja, obtém-se o resíduo e_i , valor este elevado ao quadrado e registrado.
4. Repete-se a operação para todas as corridas.
5. O valor de PRESS é o resultado da soma de todos os resíduos.

Conclui-se, portanto, que quanto menor o valor de PRESS de um dentre um conjunto de mais modelos candidatos, menos a retirada de uma única observação afeta o ajuste, o que é um indício de ausência de sobreajuste.

Montgomery (2009) mostra ainda que o cálculo da medida de PRESS não requer necessariamente a realização dos passos descritos, e pode ser dada simplesmente, e de forma computacionalmente rápida pela Equação (23):

$$PRESS = \sum_{i=1}^n \left(\frac{e_i}{1 - h_{ii}} \right)^2, \quad (23)$$

onde h_{ii} é o i -ésimo elemento diagonal da matriz chapéu H .

A implementação da medida PRESS, em R (R CORE TEAM, 2019), dados uma matriz de preditores X (incluindo, como primeira coluna, um vetor de 'uns' referente ao intercepto) e um vetor \underline{Y} encontra-se na FIGURA 12.

FIGURA 12 – FUNÇÃO PRESS, NO SOFTWARE R

```
press <- function(X,Y){
PRESS = 0
Hat <- X%%solve(t(X)%%X)%%t(X)
pred_y <- Hat%%Y
ei <- Y-pred_y
for(i in 1:nrow(ei)){
  PRESS = PRESS + ((ei[i]/(1-diag(Hat)[i]))^2)
}
return(PRESS)
}
```

Fonte: O autor (2019).

O Critério de Informação de Akaike: AIC (AKAIKE, 1973) encontra-se também dentre os mais utilizados para a avaliação da qualidade do ajuste de modelos, sendo um índice que se torna menor quanto maior a verossimilhança de um modelo e maior quanto mais termos são incluídos no modelo, ou seja, assim como o R^2 -Ajustado, um modelo é penalizado com a adição de mais termos caso a adição não traga benefício em termos de ajuste. Seu cálculo é dado na Equação (24):

$$AIC = -2 \ln(\hat{L}) + 2K, \quad (24)$$

sendo k o número de parâmetros estimados pelo modelo e \hat{L} o valor da função de verossimilhança para o modelo.

Larksi (2012) relata que o AICc, ou Critério de Informação de Akaike Corrigido, é utilizado quando o número de dados é pequeno em relação ao número de parâmetros ajustáveis no modelo com mais termos dentre aqueles à disposição para escolha. Sua fórmula é dada na Equação (25):

$$AICc = AIC + \frac{2K(K + 1)}{n - K - 1} \quad (25)$$

Em análise simples da fórmula do AICc, nota-se que este converge ao valor de AIC quando $n \rightarrow \infty$, sendo n o número de observações.

Assim como a medida PRESS, o valor de AIC não possui uma interpretação prática quando avaliado para um único modelo, porém permite a comparação entre diferentes modelos candidatos.

2.5 DELINEAMENTOS DE EXPERIMENTO SUPERSATURADOS

2.5.1 Confundimento Entre Fatores

Montgomery et al. (2006) mostram que, para uma análise com n corridas, o número de graus de liberdade permite a estimativa de até $n-1$ coeficientes β .

Por exemplo, sejam as TABELAS 2 e 3, contendo os delineamentos de um fatorial completo 2^3 (três fatores, cada um em dois níveis) e um fatorial fracionado do tipo 2^{3-1} :

TABELA 2 – DELINEAMENTO FATORIAL COMPLETO 2^3

Corrida	X ₁	X ₂	X ₃	X ₁ *X ₂	X ₁ *X ₃	X ₂ *X ₃	X ₁ *X ₂ *X ₃
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1
3	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1
4	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
5	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1
6	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
7	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
8	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1

Fonte: O autor (2019).

TABELA 3 – DELINEAMENTO FATORIAL FRACIONADO 2^{3-1}

Corrida	X_1	X_2	X_3	X_1*X_2	X_1*X_3	X_2*X_3	$X_1*X_2*X_3$
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
3	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
4	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1

Fonte: O autor (2019).

Montgomery (2009) mostra que o delineamento 2^{3-1} é construído a partir das corridas do delineamento 2^3 em que $X_1*X_2*X_3$ estão em +1, sendo esta portanto a coluna geratriz do delineamento fracionado. Note-se ainda que o segundo delineamento apresenta confundimento completo entre fatores principais e as interações duplas, o que é representado pelas colunas iguais entre X_1 e a interação X_2*X_3 , assim como para os pares X_2 e X_1*X_3 e X_3 e X_1*X_2 . Além disso, o efeito da interação tripla não é estimável por este fator apresentar somente o nível +1.

Os delineamentos, geralmente visualizados somente com as colunas dos fatores principais X_i , foram expandidos na TABELA 3 para visualização das interações duplas X_i*X_j e a interação tripla $X_1*X_2*X_3$, por multiplicação simples, em cada linha, dos itens correspondentes.

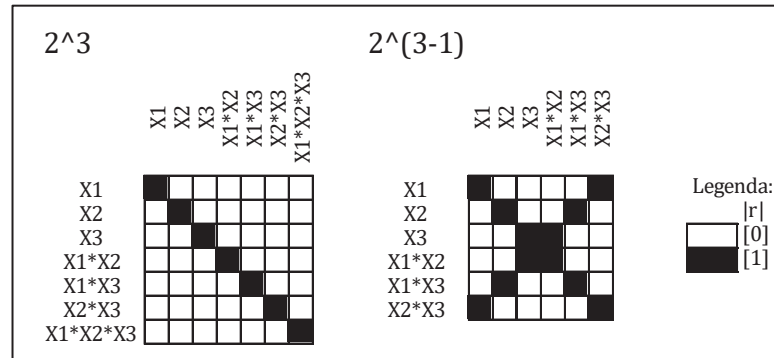
SAS Institute (2018) apresenta um método visual para representação do grau de confundimento entre fatores em um delineamento, disponível no *software* JMP (SAS Institute, 2018), pela utilização de uma matriz de correlação de todas as combinações de fatores de interesse do investigador, onde o valor do coeficiente de Correlação de Pearson r , em módulo, para quaisquer dois fatores i e j é codificado em diferentes tons de cores.

Segundo Box, Hunter e Hunter (2005), o coeficiente r é dado por:

$$r = \frac{\sum(x_1 - \bar{x}_1)(x_2 - \bar{x}_2)/(n - 1)}{s_1 s_2} \quad (26)$$

Tais matrizes de correlação dos delineamentos 2^3 e 2^{3-1} possuem as matrizes conforme a FIGURA 13.

FIGURA 13 – MATRIZ DE CORRELAÇÃO DOS DELINEAMENTOS 2^3 e $2^{(3-1)}$



Fonte: O autor (2019)

A FIGURA 13 mostra os elementos fora da diagonal principal todos correspondentes a zero no primeiro caso e, no segundo caso, os pares em confundimento completo correspondem a um índice r de 1, portanto em preto.

Box, Hunter e Hunter (2005) descrevem que a implicação prática da existência de confundimento é que, na presença de um efeito significativo de um fator em confundimento, torna-se impossível descobrir se o efeito se deve a este fator ou a outro com o qual esteja confundido. Na ocorrência de tal evento, Montgomery (2009) recomenda a realização de experimentos sequenciais que permitam testar qual dos fatores em confundimento é o responsável pelo efeito em questão.

2.5.2 Os Princípios de Esparsidade, Hierarquia e Hereditariedade de Efeitos

Análise do desenho da TABELA 2 permite prever como possível a estimativa do efeito de até sete coeficientes: $\beta_{X1}, \beta_{X2}, \beta_{X3}, \beta_{X1*X2}, \beta_{X1*X3}, \beta_{X2*X3}, \beta_{X1*X2*X3}$. Entretanto, o número de corridas não permite a realização de teste de significância para todos os efeitos, visto que, com a ausência de réplicas e a necessidade de estimativa do intercepto, não restam graus de liberdade para a estimativa do erro.

SAS Institute (2018) lista os princípios de Esparsidade (citado por alguns autores como parcimônia), Hierarquia e Hereditariedade de efeitos como observados,

na prática, na condução de experimentos em diversos campos, conforme demonstram alguns autores, como Juran (1999).

O princípio da Esparsidade de efeitos se refere à tendência de que a maior parte da variação em y é explicada por um número relativamente pequeno de fatores. Os estudos de Box e Meyer (1986) mostram que o princípio de Pareto se aplica em experimentos delineados, em que frequentemente uma larga proporção da variação em Y é associada com uma pequena proporção de variáveis de entrada X .

O princípio de Hierarquia de efeitos preconiza que efeitos principais tendem a explicar a maior parte da variação na variável-resposta, seguido por efeitos de segunda-ordem (interações duplas e fatores quadráticos), por efeitos de terceira ordem, e assim por diante. O efeito prático desse princípio é que grande parte dos delineamentos trata como negligenciáveis os fatores de terceira ordem (interações triplas ou efeitos cúbicos), ou seja, evitando a adição de efeitos que “consomem” graus de liberdade (em forma de mais corridas), sem o benefício de melhores estimativas para Y (SAS Institute, 2018).

O princípio de Hereditariedade de Efeitos pode ser descrito como a baixa probabilidade de um efeito de ordem superior ser significativo sem que os fatores de ordem inferior o sejam por eles mesmos. Por exemplo, $X_1 * X_2$ raramente será significativo se os fatores X_1 e X_2 não forem significativos (SAS Institute, 2018).

Chipman et al. (1997) definem a hereditariedade de fatores de duas maneiras:

- Hereditariedade forte, quando ambos os efeitos principais precisam ser ativos, ou seja, possuírem efeitos significativos, para que a interação entre eles seja considerada como candidata a entrada em um modelo; e
- Hereditariedade fraca, quando basta que um dentre dois efeitos principais seja ativo para que a interação entre os dois fatores seja considerada como candidata a entrada em um modelo.

O trabalho de Li et al. (2006) mostra, através da análise de diversos experimentos fatoriais completos, que os três princípios (Esparsidade, Hereditariedade e Hierarquia) tendem a ocorrer na realidade em diversos campos da ciência. Por exemplo, segundo os autores, um par de fatores principais inativos possui probabilidade 69 vezes menor de interagir entre si quando comparados a um par de fatores principais ativos.

Em análise a estes três princípios, conclui-se que delineamentos de experimentos deles se beneficiam ao, por exemplo, reduzir em número de corridas ao considerar interações de terceira ordem ou superior como negligenciáveis ou permitir que se assuma o risco de geração de confundimento entre fatores principais com interações triplas.

A metodologia abordada neste trabalho se beneficia desses três princípios.

2.5.3 Características de Delineamentos Supersaturados

Um delineamento do tipo supersaturado é aquele cujo desenho permite a estimação de mais termos que o permitido pelo número de corridas, originalmente proposto por Satterthwaite (1959) na forma de delineamentos cujas corridas eram definidas de forma aleatória.

Lin (1993) revisita o tema de delineamentos supersaturados. Sua proposta envolve o uso de “frações-metade” da matriz de Hadamard, que é uma classe de matriz de elementos binários cujas colunas são todas ortogonais entre si.

Montgomery (2009) esclarece que quando o número de fatores estimáveis excede o número de corridas, torna-se impossível uma matriz de delineamento ortogonal, o que acarreta em efeitos não independentes entre si. Metodologias para a definição de delineamentos supersaturados utilizam algoritmos de busca numérica que buscam minimizar o grau de colinearidade entre os fatores de entrada. Por exemplo, o método *D-Optimal* cria o delineamento que minimiza a determinante da matriz inversa $X'X$. Estes tendem a funcionar bem quando comparados a delineamentos construídos com base em estruturas ortogonais.

2.6 O DELINEAMENTO DO TIPO DSD – *DEFINITIVE SCREENING DESIGN*

2.6.1 Origem do DSD

O delineamento experimental denominado DSD – *Definitive Screening Design* – foi introduzido em 2011 por Jones e Nachtsheim (2011), como alternativa a delineamentos de experimentos de triagem tradicionais, tais como os delineamentos fatoriais introduzidos por Fisher. DSDs são estabelecidos para investigações do efeito de quatro ou mais fatores sobre uma ou mais variáveis de resposta.

O DSD é classificado como um delineamento de triagem que, entretanto, possui a propriedade de estimar efeitos quadráticos e se projetar em um RSM para quaisquer três (3) ou menos fatores, caso os demais se mostrem inativos.

A TABELA 4 mostra um esquema genérico das n corridas de um DSD. Além de um ponto central (uma corrida com todos os fatores testados em seus pontos médios), cada fator assume o valor médio em duas ocasiões, com os demais fatores assumindo valores máximos ou mínimos.

TABELA 4 – ESTRUTURA DO DESENHO DSD PARA M FATORES

Corridas	Fatores					
	Corrida(i)	$X_{i,1}$	$X_{i,2}$	$X_{i,3}$...	$X_{i,m}$
Dupla 1	1	0	± 1	± 1	...	± 1
	2	0	∓ 1	∓ 1	...	∓ 1
2	3	± 1	0	± 1	...	± 1
	4	∓ 1	0	∓ 1	...	∓ 1
3	5	± 1	± 1	0	...	± 1
	6	∓ 1	∓ 1	0	...	∓ 1
...	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
m	$2m-1$	± 1	± 1	± 1	...	0
	$2m$	∓ 1	∓ 1	∓ 1	...	0
Pt. Central	$2m+1$	0	0	0	...	0

Fonte: JONES e NACHTSHEIM (2011)

Com $m = 6$, o DSD toma a forma da TABELA 5:

TABELA 5 – ESTRUTURA DO DESENHO DSD MÍNIMO, PARA 6 FATORES

Corrida	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆
1	0	+1	+1	+1	+1	+1
2	0	-1	-1	-1	-1	-1
3	+1	0	+1	+1	-1	+1
4	-1	0	-1	-1	+1	-1
5	+1	-1	0	+1	+1	-1
6	-1	+1	0	-1	-1	+1
7	+1	-1	-1	0	+1	+1
8	-1	+1	+1	0	-1	-1
9	+1	+1	-1	-1	0	+1
10	-1	-1	+1	+1	0	-1
11	+1	-1	+1	-1	-1	0
12	-1	+1	-1	+1	+1	0
13	0	0	0	0	0	0

Fonte: O autor (2019).

Jones e Nachtsheim (2011) classificam o DSD como um delineamento supersaturado em relação a um modelo de superfície de resposta de segunda-ordem, dado na Equação (27):

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j x_{ij} + \sum_{j=1}^{m-1} \sum_{k=j+1}^m \beta_{jk} x_{ij} x_{ik} + \sum_{j=1}^m \beta_{jj} x_{ij}^2 + \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, n \quad (27)$$

Os autores ressaltam que desse fato surge a importância de se encontrar a melhor abordagem para a seleção de quais termos devem ser introduzidos no modelo, durante a etapa de análise estatística dos dados.

Originalmente, os autores do DSD apresentam um algoritmo de busca numérica para a definição dos valores ± 1 para as corridas ímpares e de ∓ 1 para as corridas pares, tendo encontrado delineamentos ortogonais para quatro, seis, oito e dez fatores. Posteriormente simplificado por Xiao et al. (2012), que mostram que os delineamentos podem ser obtidos pela simples utilização de matrizes de Conferência

(*Conference matrix*), provenientes do ramo de telefonia – utilizadas para conexões telefônicas em modo de conferência – e disponíveis para todos os números pares entre 6 e 30, exceto para 22.

Xiao et al. (2012) definem uma matriz de Conferência como uma matriz quadrada de tamanho m cuja diagonal é composta por zeros e as entradas são -1 ou 1, satisfazendo o descrito na Equação (28):

$$C'_m C_m = (m - 1)I_m \quad (28)$$

e então demonstra que o delineamento DSD, D com m fatores, é dado pela matriz descrita em (29):

$$D_m = \begin{bmatrix} C_m \\ -C_m \\ 0' \end{bmatrix} \quad (29)$$

Por exemplo, de (28), dada a Matriz de Conferência de tamanho 6x6:

$$C_6 = \begin{bmatrix} 0 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & 0 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & 0 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & 0 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\text{segue que } -C_6 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & 0 & +1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & 0 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & +1 & 0 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & -1 & +1 & 0 \end{bmatrix},$$

e portanto, de (29):

$$D_6 = \begin{bmatrix} C_6 \\ -C_6 \\ 0' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & 0 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & 0 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & 0 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & 0 & +1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & 0 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & +1 & 0 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & -1 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Se rearranjadas as linhas, estas apresentarão o padrão da TABELA 5, com sequências pareadas de corridas espelhadas, mais o ponto central:

$$D_6 = \begin{bmatrix} 0 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & 0 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ -1 & 0 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & 0 & -1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & 0 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & 0 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & 0 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & +1 & 0 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & 0 \\ -1 & +1 & -1 & -1 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

2.6.2 Propriedades e Vantagens do DSD

Jones e Nachtsheim (2011) citam algumas vantagens do DSD sobre delineamentos fatoriais utilizados tradicionalmente e que geram número similar de corridas, notadamente os experimentos fatoriais fracionados:

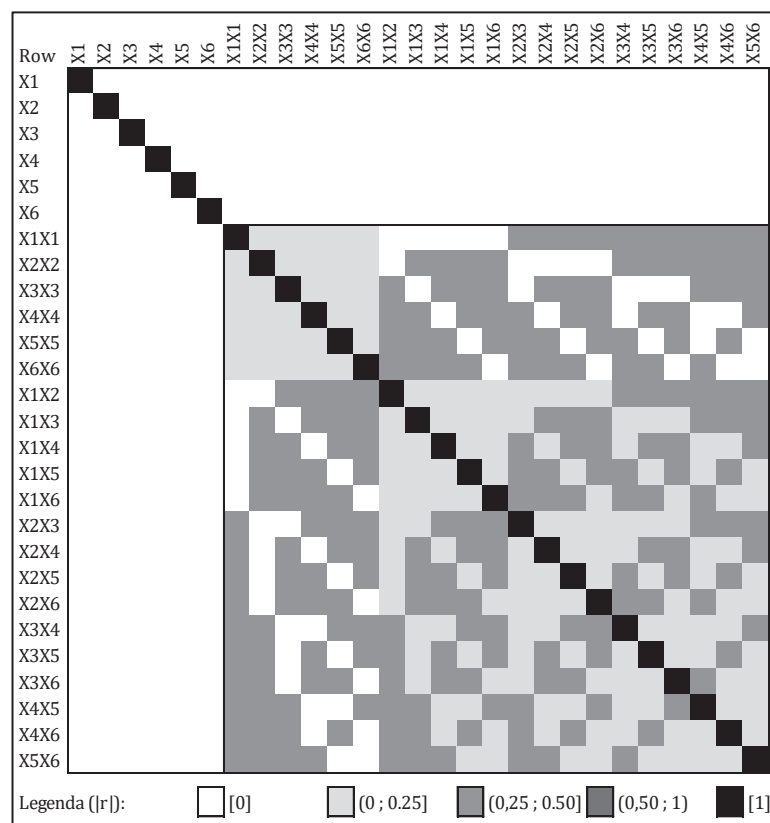
Todos os fatores são investigados em três níveis: Mínimo, Máximo e Ponto Central, o que dá, na visão dos autores, mais conforto aos investigadores quando se compara à condução de estudos somente em pontos mínimos e máximos, além de permitir a detecção da presença de efeitos quadráticos. Em delineamentos fatoriais de tamanhos similares, cada fator somente assume dois níveis: mínimo e máximo.

Efeitos principais podem ser estimados de maneira independente, ou seja, são ortogonais entre si e aos efeitos de segunda ordem (interações duplas e efeitos quadráticos) (JONES E NACHTSHEIM, 2011).

Efeitos de segunda ordem não são completamente ortogonais entre si, ou seja, tais colunas possuem um grau de correlação umas com as outras. Comparativamente, delineamentos fatoriais fracionados de tamanhos similares não são capazes de estimar efeitos quadráticos e cada interação dupla está sempre completamente confundida com outra interação dupla ou com efeitos principais (JONES E NACHTSHEIM, 2011).

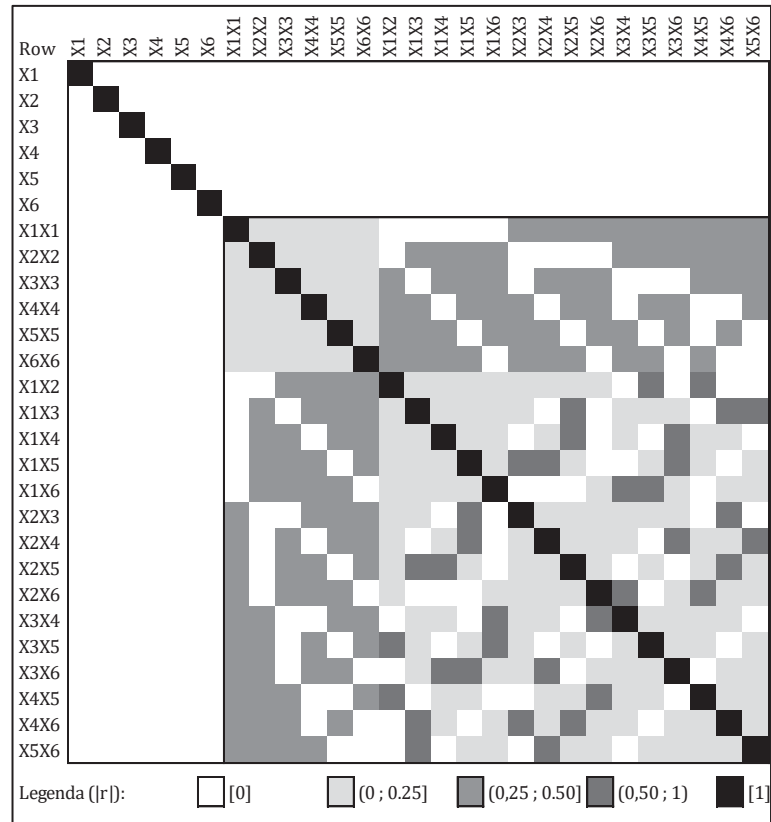
As FIGURAS 14, 15 e 16 mostram as matrizes de correlação para, respectivamente, o delineamento DSD de 6 fatores – com 13 corridas, o delineamento DSD de 6 fatores – com 17 corridas, e o delineamento Fatorial Fracionado de tamanho igual, em número de corridas, para 6 fatores, ou seja, 2^{6-2} – com 17 corridas:

FIGURA 14 – MATRIZ DE CORRELAÇÃO DO DSD COM 6 FATORES E 13 CORRIDAS



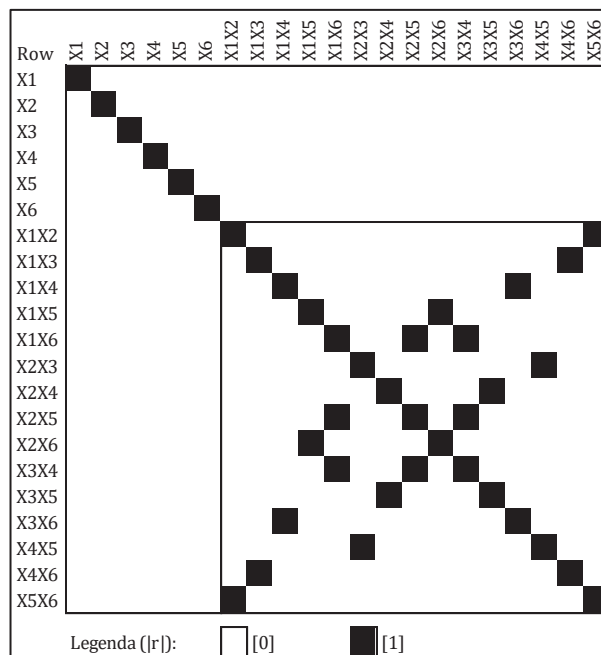
Fonte: O autor (2019).

FIGURA 15 – MATRIZ DE CORRELAÇÃO DO DSD COM 6 FATORES E 17 CORRIDAS



Fonte: O autor (2019).

FIGURA 16 – MATRIZ DE CORRELAÇÃO DO DELINEAMENTO FATORIAL FRACIONADO $2^{(6-2)}$, COM 6 FATORES E 17 CORRIDAS



Fonte: O autor (2019).

Quando o número de fatores m é par, o número de corridas mínimo é de $2m + 1$. Delineamentos fatoriais fracionados de tamanhos similares requerem necessariamente uma potência de 2 como número de corridas. O uso de 17 corridas no Delineamento da FIGURA 15, de 6 fatores, é esclarecido adiante, na seção 2.6.3.

Para estudos de seis (6) a doze (12) fatores, o DSD se beneficia da esparsidade e projetividade de efeitos, visto que, quando apenas uma fração dos fatores se mostra inativo, este se projeta em um modelo do tipo RSM (Superfície de Resposta) para quaisquer grupos de dois (2) ou três (3) fatores (JONES e NACHTSHEIM, 2011).

Jones e Nachtsheim (2011) ressaltam que o delineamento DSD é um delineamento espelhado, ou seja, cada corrida possui uma linha correspondente com os sinais trocados. Nessa dissertação, será utilizado o termo em inglês *foldover*.

Jones e Nachtsheim (2011) observam ainda que quando o número de fatores m é ímpar, os fatores principais encontrados em seu método de busca numérica se tornam não ortogonais à coluna de intercepto (vetor de tamanho n com todos os valores iguais a 1 e, portanto, para que se garanta a propriedade de ortogonalidade, recomenda-se a geração de um desenho com $(m + 1)$ fatores e despreza a coluna do último fator, atingindo-se assim a ortogonalidade ao custo de duas (2) corridas extras. Para $m = 22$, uma abordagem adaptada é tomada, o que não será abordado nessa dissertação.

2.6.3 Limitações do DSD

O fato do DSD ser capaz de estimar os efeitos das interações de segunda ordem e dos termos quadráticos os torna um delineamento do tipo supersaturado, ou seja, capaz de estimar mais termos que o permitido pelo número de corridas, sendo possível estimar um total de $2m + \binom{m}{2}$ efeitos. Um delineamento com $m=6$ fatores leva, portanto, à possibilidade de que sejam estimados os efeitos de $(6*2 + 15) = 27$ fatores.

Desse fato decorre a dificuldade maior para a definição, durante a etapa de análise dos dados, de quais termos farão parte do modelo ajustado, problema ausente em delineamentos não supersaturados.

Jones e Nachtsheim (2017) sugerem a adição de quatro (4) corridas adicionais a cada experimento, através da adição, durante o delineamento, de dois (2) fatores do tipo *dummy*, também denominados pelos autores como *fakes*, ou seja, fatores falsos, criados artificialmente e que são ignorados durante a etapa de análise, ao custo de quatro (4) corridas adicionais.

Originalmente, Jones e Nachtsheim (2011) sugeriram o uso do método de seleção do tipo *Forward Stepwise* com uso do critério AICc, menos propenso a problemas de sobreajuste de modelo, segundo os autores, que métodos como o BIC, proposto por Schwarz (1978).

O método *Forward Stepwise* consiste, segundo Montgomery et al. (2006) em um algoritmo que parte de um modelo de média, ou seja, contendo somente o termo β_0 , e, a cada passo, adicionam-se termos um a um, enquanto estes contribuam ao modelo por algum critério pré-estabelecido, por exemplo na redução do valor de AICc.

Estudo subsequente de Errore et al. (2017) abordam este e outros métodos de seleção, utilizando-se da simulação computacional de um espaço experimental de DSDs com diferentes condições tais como: número de fatores m , razão sinal/ruído (*signal-to-noise ratio*), número de efeitos principais ativos, número de efeitos de segunda ordem ativos e adição ou não de corridas extras através de fatores *dummy*.

De cada simulação, um delineamento DSD é gerado aleatoriamente e fatores são aleatoriamente sorteados como ativos, gerando um modelo real e conhecido. Dados aleatórios são gerados conforme esse modelo, os algoritmos de seleção de termos do modelo são executados e comparados contra o modelo real através de 3 medidas de eficácia:

- Sensitividade: Razão do total de efeitos selecionados, sobre o total de efeitos ativos.

- Especificidade: A razão do número total de efeitos inativos não selecionados, sobre o total de efeitos inativos.
- Proporção real: Razão do total de termos corretamente classificados como ativos ou inativos, sobre o total de termos possíveis.

Como conclusão, alguns métodos tais como Lasso/AICc e Gauss-Dantzig/AICc apresentam melhores resultados em níveis baixos de esparsidade. Os resultados melhoram sensivelmente quando da adição de fatores *dummy*, sendo a prática posteriormente reforçada como recomendação-padrão para o uso de DSDs por Jones e Nachtsheim (2017).

Essa recomendação resulta, para $m=6$, que o delineamento DSD recomendado possua $(2(6 + 2) + 1) = 17$ corridas, e tome a seguinte forma, sendo as duas últimas colunas referentes a fatores *dummy*, que devem ser ignorados durante a etapa de análise estatística dos dados:

$$D_{6+2} = \begin{bmatrix} 0 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & 0 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & 0 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ -1 & +1 & 0 & -1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & 0 & +1 & +1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & 0 & -1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & 0 & +1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 & 0 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & 0 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 & +1 & 0 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & 0 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & -1 & +1 & +1 & 0 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & +1 & -1 & +1 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Aqui, a matriz de Conferência toma a forma da Matriz:

$$C_8 = \begin{bmatrix} 0 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & 0 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & 0 & +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & 0 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & 0 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & 0 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

2.6.4 Outros Desenvolvimentos e Aplicações de DSD

Lin (2015) propõe um método de construção de blocos para DSDs que herda as propriedades originais dos DSDs. Jones e Nachtsheim (2016) introduzem a possibilidade do uso de variáveis categóricas e de esquemas de blocagem que mantêm a ortogonalidade do delineamento.

Lin e Yang (2015) propõem o uso de DSDs em delineamentos do tipo *split-plot*, necessários nos casos em que a variação em um ou mais fatores X é difícil.

Erler et al. (2013) utilizam DSD na obtenção de um modelo quadrático, a partir de seis (6) fatores de entrada, para a caracterização e posterior análise de robustez de um processo biológico de tratamento de proteína terapêutica por formaldeídos.

Kalaw et al. (2015) aplicam um delineamento DSD de nove (9) corridas para avaliar a significância de fatores na força compressiva e no peso volumétrico de uma mistura ternária de geopolímeros, que apresentam utilização crescente em substituição ao tradicional cimento do tipo Portland (OPC). Os autores identificam todos os fatores como significativos, além de dois efeitos quadráticos e nenhuma interação.

Na área Química, o delineamento DSD foi aplicado por Libbrecht et al. (2015) na otimização da síntese de carbono mesoporoso de modelo suave, representada pela maior absorção de Bisfenol A (BPA).

Hecht et al. (2015) utilizam DSD com sucesso na otimização de parâmetros para espectrometria de massa para análises de glicanos.

Kauffman et al. (2015) aplicam DSD em conjunto com delineamentos fatoriais fracionados no desenvolvimento de uma estratégia generalizada para otimizar a formulação de nanopartículas lipídicas para entrega intracelular de RNA mensageiro (mRNA) ao fígado, algo com potencial para induzir a produção de proteínas em diversas aplicações terapêuticas.

Tai et al. (2015) delinearam um DSD para a triagem de dez (10) fatores de modo a caracterizar a fermentação do processo de fermentação da bactéria *E. Coli* para a produção de proteína recombinante.

Na Área Ambiental, Fidaleo et al. (2016) utilizam DSD para demonstrar a aplicabilidade na triagem de fatores para descolorização eletroquímica de anodos de diamante dopados com boro. Nesse estudo, os autores fazem a triagem de 9 fatores utilizando DSDs e utilizam delineamentos de otimização do tipo *Central Composite*, em um total de apenas 41 corridas. Abordagem semelhante, de combinar DSDs e *Central Composite* foi feita por Du et al. (2017) no estudo da degradação de Cromotrópico 2R, e também de Zhang et al. (2018), que realizaram a triagem de nove (9) variáveis operacionais na oxidação química de um ácido *orange-II* (AO-II), sendo as quatro (4) variáveis significativas estudadas subsequentemente com o delineamento de otimização *Central Composite*.

Em Alimentos, DSD foi aplicado na melhoria de qualidade de pães livres de glúten em Bourekoua et al. (2018). Os autores utilizam as propriedades de DSD para otimizar diversas características analíticas e sensoriais de tais pães, como volume, dureza, maleabilidade, mastigabilidade, cor e tamanho das migalhas.

Van Heugten et al. (2017) utilizaram um delineamento DSD para identificar e compreender parâmetros críticos de processo na produção de um creme de cetomacrogol, estudo no qual a temperatura de envase e a velocidade de mistura apresentaram os maiores efeitos nas variáveis-resposta estudadas, por exemplo viscosidade, tensão axial do equipamento, taxa de cisalhamento e pressão de saída.

2.7 O ALGORITMO FIT DSD

Miller e Sitter (2005) mostram que designs *foldover* permitem a separação dos efeitos principais da análise de efeitos de segunda ordem, ao identificarem que o espaço amostral das respostas pode ser dividido no espaço gerado pelos efeitos principais e seu complementar ortogonal. O espaço gerado pelos efeitos principais é chamado de “espaço ímpar”, por conter a informação a respeito dos efeitos principais, as interações de terceira ordem e demais fatores de ordem ímpar. O espaço gerado complementar contém informação de todos os efeitos de ordem par, e é denominado “espaço par”.

Esse particionamento de Y resulta na possibilidade de se estimar, de forma independente, os efeitos principais e os efeitos de ordem superior, assumindo como negligenciáveis, pelo princípio da hierarquia, interações de ordem maiores que dois.

Jones e Nachtsheim (2017) ressaltam que um DSD, além de sua natureza *foldover* permitir essa divisão entre espaço par e ímpar, a natureza ortogonal dos efeitos principais permite ainda a estimativa independente de tais efeitos, ao contrário dos delineamentos estudados por Miller e Sitter (2005).

Em 2017, Jones e Nachtsheim (2017) propuseram um novo método para a seleção de termos de um modelo, implementado no software JMP (SAS Institute, 2018), sob a função *Fit Definitive Screening Design*. No artigo, o método é denominado somente como *New*, e será denominado neste trabalho como método “Fit DSD”.

Tal método se aproveita da estrutura ortogonal e *foldover* do DSD e se utiliza dos fatores *dummy* para a estimativa pura do RMSE (Raiz da média dos resíduos ao quadrado), visto que tais fatores não se relacionam com qualquer variação de fatores reais do estudo, combinados com a estimativa do RMSE dos pontos centrais (caso realizem-se réplicas de tais pontos).

Jones e Nachtsheim (2017) particionam o modelo $Y = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$, em forma matricial, em grupos de colunas ortogonais entre si, conforme a Equação (30):

$$\underline{Y} = \underline{\mu}1 + D\underline{\beta}_D + F\underline{\beta}_F + X_2\underline{\beta}_2 + \underline{\varepsilon}, \tag{30}$$

onde \underline{Y} é o vetor de respostas com n posições e os demais blocos conforme a FIGURA 17, que mostra o particionamento aplicado a um delineamento D_{6+2} .

A coluna $\underline{\mu}$ é um vetor de “uns” de tamanho n , D possui tamanho $n \times m$, F é da forma $n \times m_F$ (onde m_F é o número de fatores *dummy*) e X_2 possui dimensão $n \times m_2$, (onde $m_2 = \frac{m(m+1)}{2}$). Os componentes $\underline{\beta}_D$, $\underline{\beta}_F$ e $\underline{\beta}_2$ são vetores com as estimativas dos coeficientes dos fatores do modelo, sendo $\underline{\beta}_F$ assumido como zero por se tratarem de colunas correspondentes aos fatores *dummy*. O componente $\underline{\varepsilon}$ é um vetor de tamanho n que se assume distribuído conforme a distribuição Normal, com média zero e variância σ^2 .

FIGURA 17 – DELINEAMENTO DSD₆₊₂

Corr.	$\underline{\mu}$		D						F		X2																				
	1	1	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X1X1	X2X2	X3X3	X4X4	X5X5	X6X6	X1X2	X1X3	X1X4	X1X5	X1X6	X2X3	X2X4	X2X5	X2X6	X3X4	X3X5	X3X6	X4X5	X4X6	X5X6
1	1	1	0	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	0	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
3	1	1	1	0	1	1	-1	1	-1	-1	1	0	1	1	1	1	0	1	-1	1	0	0	0	0	0	1	-1	1	-1	1	-1
4	1	1	-1	0	-1	-1	1	-1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	1	-1	1	0	0	0	0	0	1	-1	1	-1	1	-1
5	1	1	1	-1	0	1	1	-1	1	-1	1	1	0	1	1	1	-1	0	1	1	-1	0	-1	-1	1	0	0	0	1	-1	-1
6	1	1	-1	1	0	-1	-1	1	-1	1	1	1	0	1	1	1	-1	0	1	1	-1	0	-1	-1	1	0	0	0	1	-1	-1
7	1	1	1	-1	-1	0	1	1	-1	1	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	1	1	1	0	-1	-1	0	-1	-1	0	0	1
8	1	1	-1	1	1	0	-1	-1	1	-1	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	1	1	1	0	-1	-1	0	-1	-1	0	0	1
9	1	1	1	1	-1	-1	0	1	1	-1	1	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	1	-1	-1	0	1	1	0	-1	0	-1	0
10	1	1	-1	-1	1	1	0	-1	-1	1	1	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	1	-1	-1	0	1	1	0	-1	0	-1	0
11	1	1	1	-1	1	-1	-1	0	1	1	1	1	1	1	0	0	-1	1	-1	-1	0	-1	1	1	0	-1	-1	0	1	0	0
12	1	1	-1	1	-1	1	1	0	-1	-1	1	1	1	1	1	0	-1	1	-1	-1	0	-1	1	1	0	-1	-1	0	1	0	0
13	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
14	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	0	-1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
15	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1
16	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1
17	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Fonte: O autor (2019)

Jones e Nachtsheim (2017) demonstram ainda que, dado um operador da projeção ortogonal no espaço-coluna de F (Equação (31):

$$P_F = F(F'F)^{-1}F' \quad (31)$$

o erro quadrático médio, denominado MSE_F , dado pela Equação (32):

$$MSE_F = \frac{\underline{Y}' P_F \underline{Y}}{m_f} \quad (32)$$

é um estimador não viciado para σ^2 , denominado s_e^2 , assumindo, pelo princípio da esparsidade, os efeitos de terceira-ordem e acima como negligenciáveis.

Tal estimativa, segundo os autores, pode ser combinada (em inglês, *pooled*) com a estimativa da variância σ^2 proveniente de pontos centrais corridos em réplica, o que não será coberto nessa dissertação por não tratar-se de característica do caso estudado.

Calculada a estimativa s_e^2 para a variância σ^2 , as etapas do algoritmo Fit DSD são:

1 – A variável resposta \underline{y} é dividida em duas, sendo \underline{y}_{ME} os valores preditos após regressão de \underline{y} somente com um modelo de regressão ajustado pelos fatores principais e *dummies*, sem estimativa do intercepto; e \underline{y}_{2nd} os resíduos da regressão anterior, ou seja:

$$\underline{y}_{2nd} = \underline{y} - \underline{y}_{ME} \quad (33)$$

2 – Realiza-se o teste estatístico t de todos os efeitos principais em modelo ajustado com efeitos principais sobre a resposta \underline{y}_{ME} , mantendo-se todos aqueles com significância a 5%. Aqui, utiliza-se s_e^2 como estimativa de σ^2 .

3 – Assumindo os coeficientes β referentes aos efeitos principais não significativos, estes são considerados como inativos e reutilizados no refinamento da estimativa do RMSE, refazendo-se o cálculo de P_F com a adição das colunas referentes aos fatores principais inativos e adicionado o número de termos aos graus de liberdade m_f . Aqui, supondo-se X_1 e X_4 como inativos, a FIGURA 17 seria reconfigurada conforme a FIGURA 18:

FIGURA 18 – DELINEAMENTO DSD6+2, COM X_1 E X_4 INATIVOS

Corr.	μ	D				F				X2																				
	1	X2	X3	X5	X6	X7	X8	X1	X4	X1X1	X2X2	X3X3	X4X4	X5X5	X6X6	X1X2	X1X3	X1X4	X1X5	X1X6	X2X3	X2X4	X2X5	X2X6	X3X4	X3X5	X3X6	X4X5	X4X6	X5X6
1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0	-1	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
3	1	0	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	1	-1	1	0	0	0	0	0	1	-1	1	-1	1	-1
4	1	0	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	0	1	1	1	1	0	1	-1	1	0	0	0	0	0	1	-1	1	-1	1	-1
5	1	-1	0	1	-1	1	-1	1	1	1	1	0	1	1	1	-1	0	1	1	-1	0	-1	-1	1	0	0	0	1	-1	-1
6	1	1	0	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	0	1	1	1	-1	0	1	1	-1	0	-1	-1	1	0	0	0	1	-1	-1
7	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	0	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	1	1	1	0	-1	-1	0	-1	-1	0	0	1
8	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	0	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	1	1	1	0	-1	-1	0	-1	-1	0	0	1
9	1	1	-1	0	1	1	-1	1	-1	1	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	1	-1	-1	0	1	1	0	-1	0	-1	0
10	1	-1	1	0	-1	-1	1	-1	1	1	1	1	1	0	1	1	-1	-1	0	1	-1	-1	0	1	1	0	-1	0	-1	0
11	1	-1	1	-1	0	1	1	1	-1	1	1	1	1	1	0	-1	1	-1	-1	0	-1	1	1	0	-1	-1	0	1	0	0
12	1	1	-1	1	0	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	0	-1	1	-1	-1	0	-1	1	1	0	-1	-1	0	1	0	0
13	1	1	-1	-1	-1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1
14	1	-1	1	1	1	0	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
15	1	1	1	1	-1	-1	0	1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1
16	1	-1	-1	-1	1	1	0	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1
17	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Fonte: O autor (2019)

4 – Para y_{2nd} , ajustam-se todos os possíveis modelos de segunda ordem, desde modelos com um (1) termo de segunda ordem até $c/2$ termos, denominado “teto”, onde c é a soma do número de fatores e o número de fatores *dummy*, enquanto a adição de um elemento adicional for justificada por um teste de hipótese F com nível de significância de 20%. O modelo de melhor ajuste é extraído. Esse trabalho cobre casos que respeitem o princípio de hereditariedade forte, em que efeitos de ordem superior somente são considerados como potencialmente pertencentes ao modelo caso os efeitos principais que os compõem sejam ativos. No caso descrito em que X_1 e X_4 são inativos, desconsideram-se nessa etapa, portanto, os efeitos X_1*X_1 , X_4*X_4 , X_1*X_2 , X_1*X_3 , X_1*X_4 , X_1*X_5 , X_1*X_6 , X_2*X_4 , X_3*X_4 , X_4*X_5 e X_4*X_6 .

5 – Combinam-se os termos dos passos 3 e 4 em um modelo, ajustando-o por mínimos quadrados em Y .

6 – Após o ajuste, reduz-se o modelo pela remoção de termos não significativos, um a um, em ordem inversa de significância, caso permitido pelo princípio da hereditariedade.²

Em análise ao método, aqui deve-se ressaltar que, caso seja subestimada a estimativa de σ^2 , surge como consequência uma maior probabilidade de Erro do Tipo I.

Jones e Nachtsheim (2017) realizaram trabalhos de simulação em que, de cada simulação, um delineamento DSD é gerado aleatoriamente e fatores são aleatoriamente sorteados como ativos, gerando um modelo real e conhecido. Dados aleatórios são gerados conforme esse modelo, os algoritmos de seleção de termos do modelo são executados e comparados contra o modelo real. Diferente de ERRORE et al. (2017), os autores passam a avaliar a qualidade dos desenhos pelas seguintes medidas:

- Poder: probabilidade de se detectar um efeito ativo caso este pertença ao modelo real, ou seja, ativo. Deseja-se maximizar o Poder.
- Erro Tipo I: rejeitar H_0 quando H_0 for verdadeira (MEYER, 1983), ou seja, a probabilidade de que fatores com efeitos nulos ou muito pequenos sejam estatisticamente significativos e, portanto, inseridos em um modelo sem que influenciem a variável-resposta.

Jones e Nachtsheim (2017) adaptaram ainda o uso do algoritmo Fit DSD para diversos casos, como por exemplo, sem hereditariedade e sem a adição de fatores do tipo *dummy*, casos que não serão cobertos nessa dissertação.

² O passo 6 não consta em Jones e Nachtsheim (2017), entretanto é sugerido por Jones em SAS Institute (2018), capítulo 8, página 281.

Os autores destacam os resultados largamente superiores aos algoritmos com que foram comparados, Stepwise pelo critério AICc e ElasticNet, e ressaltam ainda que esse algoritmo pode ser utilizado em qualquer delineamento do tipo *foldover*.

2.8 ESTUDOS DE CONSUMIDOR

2.8.1 Aplicação de Estudos de Consumidor

Dutcosky (2013) relata como a Indústria de Bens de Consumo, que inclui o ramo alimentício, utiliza-se de estudos de consumidor baseados em avaliação quantitativa às cegas para desenvolvimento e otimização de seus produtos.

Protótipos de produtos podem ser gerados em forma de delineamento experimental para a avaliação de tais consumidores, por exemplo com a variação de níveis ou tipos de ingredientes, ou de método de produção (MEILGAARD et al., 2007).

Uma amostra de consumidores é recrutada de modo a representar uma população-alvo de um determinado produto. Agências de estudo de consumidor realizam o recrutamento a partir de uma base cadastral de consumidores, seus padrões de consumo e suas características demográficas.

A etapa de campo de tais estudos é geralmente conduzida de um dentre três modos, segundo Ressorección (1998).

1. Em laboratório, que proporciona máximo controle sobre preparação, quantidade de porção e ambiente de consumo, entretanto não representando o ambiente de consumo familiar do produto pelos consumidores, e geralmente não comportando grande quantidade de consumidores;
2. Teste em Localização Central (*CLT – Central Location Test*), ou seja, em um único local para onde os consumidores recrutados dirigem-se durante o período de realização do estudo, realizam o uso do produto por si próprios conforme orientações, e registram suas impressões

através de formulários eletrônicos e/ou de entrevista, sendo menos controlado que o teste em laboratório entretanto ainda sem representar fielmente a ocasião de consumo;

3. Teste nas residências dos consumidores (*HUT – Home Use Test*), caso em que um entrevistador deixa uma amostra do produto na casa do consumidor e, ao retornar, realiza a coleta de dados através de formulários eletrônicos ou de entrevista. Trata-se de método que melhor representa o consumo real do produto, porém dificilmente cobre o mesmo número de consumidores que um CLT, devido aos maiores tempo e custo envolvidos, além de não ser recomendado para um comparativo com mais que três produtos.

2.8.2 Avaliação Estatística de Estudos de Consumidor

A principal variável-resposta da etapa de coleta de dados em estudos de consumidor são as notas médias de Aceitabilidade Global do Produto e que são atribuídas por um painel de consumidores selecionados, registrados em escala hedônica introduzida por Jones et al. (1955), mostrada na TABELA 6; com graduações desde “desgostei muitíssimo” (com valor 1), até “gostei muitíssimo” (com valor 9).

TABELA 6 – ESCALA HEDÔNICA PARA ACEITABILIDADE DE PRODUTO

Descrição Apresentada	Valor Numérico
Desgostei muitíssimo	1
Desgostei muito	2
Desgostei moderadamente	3
Desgostei ligeiramente	4
Nem gostei e nem desgostei	5
Gostei ligeiramente	6
Gostei moderadamente	7
Gostei muito	8
Gostei muitíssimo	9

Fonte: JONES et al. (1955).

Segundo Lim (2011), essa escala foi desenvolvida pela necessidade de se superar as limitações de testes de comparações pareadas, tendo sido rapidamente adotada pela indústria e academia, o que impediu refinamentos que os próprios autores consideravam necessários. Estudos de Jones et al. (1955) demonstram que, semanticamente, as distâncias entre os pontos da escala não são iguais, entretanto refinamentos na escala nunca chegaram a ser implementados (LIM, 2011).

Lim (2011) discorre ainda sobre o efeito do contexto sobre o uso da escala e suas consequências, como por exemplo a dificuldade de comparação de resultados entre estudos com diferentes grupos de produtos avaliados e o Efeito de Ordem, que torna o resultado da degustação de um produto diferente conforme a ordem em que é degustado, tanto de forma absoluta quanto em relação ao produto anteriormente degustado. Para mitigação do efeito de ordem, Macfie et al. (1989) apresentam delineamentos que buscam o balanço do Efeito de Ordem entre todos os julgadores.

2.8.3 Delineamentos de Experimentos para Otimização de Aceitabilidade Global de Produtos Alimentícios por Consumidores

Apesar de delineamentos experimentais para otimização de produtos alimentícios seguirem basicamente as etapas preconizadas por Montgomery (2009), tais estudos possuem peculiaridades quando comparados a experimentos realizados em ambiente puramente industrial e cujas variáveis-resposta são resultados de medições realizadas por instrumentos de medição.

Aqui são novamente listadas as etapas de experimentação de Montgomery (2009) vistas na seção 2.2, sendo as peculiaridades em experimentos de desenvolvimento e otimização de alimentos ressaltadas pelo autor dessa dissertação.

- a) Etapa de reconhecimento e declaração do problema.
 - Experimentos em produtos alimentícios geralmente se busca a triagem de fatores influentes ou a otimização de fatores em busca da maximização da aceitabilidade por consumidores com o menor custo possível de formulação (MEILGAARD et al., 2007).

b) Etapa de definição dos fatores de entrada de estudo:

- Fatores de entrada podem incluir novos tipos de ingredientes, níveis de ingredientes existentes, ou diferentes métodos de preparação.

c) Etapa de definição do espaço experimental – fatores, níveis e faixas:

- Em pesquisas de produtos alimentícios, o espaço experimental precisa compreender uma variação perceptível pelos consumidores que provarão as amostras (MEILGAARD et al., 2007).
- Em interpretação ao texto, devem ainda ser evitadas regiões experimentais que produzam protótipos descaracterizados, ou seja, que não sejam reconhecidos durante a degustação como o produto alvo. Por exemplo, em um delineamento de um iogurte de morango, o ingrediente Aroma de Morango não deve ter seu mínimo na formulação como zero, pois este se descaracterizaria como iogurte de morango.

d) Etapa de escolha do tipo de delineamento experimental:

- Além dos fatores de decisão citados por Montgomery (2009), um produto cuja formulação esteja sendo modificada em grande proporção, e que não possua ingrediente de preenchimento cuja função seja a de preencher uma quantidade sem necessariamente afetar em aroma, sabor e textura, deve ser alvo de um delineamento do tipo mistura, em que a soma dos ingredientes deve resultar em um valor fixo (ŞAHIN, 2015).
- Interpreta-se, portanto, que nos casos em que essa limitação não se fizer presente, a gama de tipos de delineamentos disponíveis não se altera.

e) Etapa de condução do experimento:

- Para alimentos, por experiência do autor, uma degustação prévia dos protótipos gerados é desejável afim de garantir que nenhum deles represente um produto descaracterizado, o que é sintoma de má definição do espaço experimental. Nesse caso, pode ser necessário reduzir a faixa de variação de um ou mais ingredientes, ou introduzir

restrições lineares ao espaço de estudo, o que não é comportado pelo delineamento DSD (JONES e NACHTSHEIM, 2011).

- Avaliação da resposta y de cada corrida, pela submissão dos protótipos à avaliação de consumidores. Cada consumidor avalia os produtos seguindo uma ordenação pseudo-aleatória para eliminar fatores-ruído relacionados ao efeito de ordem de degustação (viés de posição), apresentadas em rotação conforme modelos como WLS, ou Quadrados Latinos de Williams (WILLIAMS, 1949), de modo a mitigar os efeitos de posição e de ordem, ou seja, os efeitos causados na degustação de uma amostra pela posição em que é degustada e o efeito causado em uma degustação pela degustação imediatamente anterior. O efeito de ordem é conhecido e considerado durante a etapa de análise estatística dos dados.
- Códigos aleatórios de três dígitos são utilizados para permitir a identificação das amostras, sem que permitam a identificação pelos consumidores daquilo que esteja sendo testado.
- A pergunta mais importante, que represente objetivo principal do estudo, deve ser feita em primeiro lugar, de modo a eliminar qualquer tipo de vício causado por perguntas anteriormente feitas, visto que Meilgaard et al. (2007) mostram que as respostas das pessoas costumam acompanhar respostas dadas anteriormente, denominado “efeito Halo”.

f) Etapa de análise estatística dos dados:

- Para avaliação de aceitabilidade média (global) de consumidores, toma-se a média de notas dadas pelo painel de consumidores, após ajustá-las, por um modelo de Análise de Variância (ANOVA) de Efeitos Mistos, aos fatores “Produto” (fator categórico nominal fixo); “Consumidor” (devido a diferentes sensibilidades sensoriais e consequente usos de diferentes regiões da escala por cada consumidor – fator categórico nominal aleatório); e “Ordem do produto na degustação” (devido ao viés de posição – fator nominal categórico fixo). (MEILGAARD et al., 2007; ABNT NBR ISO 11136, 2016). Tais médias ajustadas são denominadas LSMeans por

softwares Estatísticos, ou Média dado um ajuste por Mínimos Quadrados.

- Dados provenientes desse tipo de escala são do tipo ordinal e não possuem um valor de zero verdadeiro, devendo em teoria serem aplicadas técnicas de Estatística Não-Paramétrica durante as análises. Entretanto, o uso do modelo de ANOVA de Efeitos Mistos para a estimativa da aceitabilidade média pelos consumidores é disseminado por pesquisadores, visto que pressupostos como o de Normalidade dos resíduos e de Homogeneidade da Variância passam a ser atendidos quando o número de degustações para cada estímulo é maior que 75 (LIM, 2011).
- Como o interesse de investigação não está geralmente em modelar a aceitabilidade dos produtos por cada consumidor, e sim para o conjunto da população, as médias são utilizadas como estimativas para a aceitabilidade média de um produto (DUTCOSKY, 2013).

g) Etapa de conclusão e recomendações:

- Ressalta-se que os estudos de consumidor, sejam do tipo CLT ou do tipo HUT possuem alto custo para execução. Adicionalmente, é virtualmente impossível conduzir dois estudos de consumidor recrutando os mesmos consumidores. Devido a esses fatos, a recomendação de Montgomery (2009) para abordagem sequencial de experimentação dificilmente é seguida em estudos de consumidor para a melhoria de aceitabilidade por consumidor de produtos alimentícios.

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 MATERIAL

Para a etapa de condução do experimento para otimização de produto alimentício (projeto *EGH102*), confeccionou-se em bancada cada um dos protótipos contidos no delineamento experimental DSD, em quantidade suficiente para a degustação do número total de 150 consumidores.

Por razões de confidencialidade, o produto e sua forma de apresentação não são mostrados e os ingredientes foram aqui renomeados como X_1 , X_2 , X_3 , X_4 , X_5 e X_6 , sendo X_3 e X_6 ingredientes potencialmente novos para o produto.

Ressalta-se que mesmo experimentos do tipo triagem, recomendados para a triagem de fatores cujos efeitos não são conhecidos, podem ser delineados com a presença de tais tipos de fatores. No caso em questão, por exemplo, apesar do conhecimento a priori de que os fatores X_1 e X_2 costumam possuir efeito principal e interação significativos, o que poderia ser justificativa para que não fossem incluídos em triagem, o interesse dos pesquisadores estava em descobrir se havia ou não interação de X_1 e X_2 com os demais (X_3 , X_4 , X_5 e X_6), estes nunca estudados anteriormente por Delineamento de Experimentos.

Os demais ingredientes da formulação foram mantidos fixos, com a exceção do ingrediente X_7 , sem característica sensorial, e utilizado meramente como veículo para facilitar o processamento em linha de produção, servindo como preenchimento de quantidade de fórmula. Devido a essas características do ingrediente X_7 , um delineamento de experimento do tipo “Mistura” não se fez necessário e não foi considerado.

3.2 MÉTODO DE DELINEAMENTO EXPERIMENTAL

Os passos para a realização de um Experimento de otimização de produto alimentício são os mesmos adotados em outras linhas de pesquisa, como preconizados em 2.2.

Primeiramente, seguiu-se a etapa de reconhecimento e declaração do problema, em que se definiu a necessidade de melhoria de Qualidade em um dos sabores do produto, incluindo otimização dos níveis de alguns dos ingredientes atuais, e a inclusão de novos ingredientes que pudessem enriquecer a experiência sensorial dos consumidores. O experimento foi denominado *EGH102*.

Na etapa de definição dos fatores de entrada de estudo, a equipe do projeto definiu que seriam seis os ingredientes incluídos em um estudo de delineamento experimental, sendo quatro os ingredientes já existentes e dois os ingredientes novos.

Para a etapa de definição do espaço experimental – fatores, níveis e faixas, determinaram-se os níveis de cada fator de modo a garantir que todo o espaço amostral se mantivesse bem caracterizado, após preparação, como amostras características do tipo de produto e sabor avaliados.

Uma degustação prévia dos protótipos gerados foi realizada afim de garantir que nenhum deles representasse um produto descaracterizado, o que comprometeria a discriminação pelos consumidores.

Não houve, nessa etapa, a necessidade de introdução de restrições lineares ao espaço de estudo.

Os valores para as massas de ingredientes adicionadas aos protótipos são aqui apresentados na forma codificada -1, 0 e +1, de modo que se evite a eventual identificação por concorrentes de mercado.

A última etapa de planejamento, escolha do tipo de delineamento experimental, levou em consideração o fato de que os pesquisadores encarregados pela pesquisa possuíam orçamento suficiente para a condução de até três dias de estudo em campo conduzido por agência externa.

Dado que procedimentos internos estabelecem que até 6 (seis) degustações podem ser realizadas em cada sessão, o limite de protótipos era de 18 (dezoito).

Pelo número de fatores (seis ingredientes) e pelas características do estudo: de triagem, sem restrições lineares e não considerado como um experimento de mistura, foi, portanto, escolhido o delineamento DSD com $m = 6$ fatores, codificados entre X_1 e X_6 , e a adição de dois (2) fatores *dummy/fakes*, utilizados para aumentar o número de corridas em quatro porém sem qualquer efeito prático, codificados como F_1 e F_2 , em um total de 17 corridas.

Uma amostra contendo o produto padrão, código 582, também foi introduzida para degustação. Dado que essa amostra se encontrava dentro do espaço de estudo, ou seja, com nenhum ingrediente em nível fora da faixa -1 a 1, representado pelas amostras experimentais, esta amostra pôde ser introduzida nas sessões de degustação pelos consumidores justo às demais, sem prejuízo às conclusões do estudo. A amostra 582 será denominada também “amostra de validação”.

Como o algoritmo Fit DSD utiliza a estrutura *foldover* na estimativa do RMSE, este não comporta a adição de amostras não provenientes do delineamento. Entretanto, o resultado de aceitação dessa amostra serve como medida para validação do modelo, ou seja, uma oportunidade a mais para a avaliação do ajuste e comparação entre eventuais modelos candidatos.

Os pesquisadores possuíam ainda, como objetivo secundário, o interesse em determinar se o produto atual (padrão) pode ter seu custo reduzido, mantendo seu nível de aceitabilidade pelos consumidores. O uso de DSD foi considerado principalmente devido ao seu potencial de projetar-se em um RSM no caso de 3 ou menos fatores principais ativos.

A TABELA 7 mostra o delineamento utilizado e o código de três dígitos, dispostos de forma aleatória, para identificação cega das amostras.

TABELA 7 – DELINEAMENTO DE EXPERIMENTO DO PROJETO EGH102

Protótipos do Delineamento DSD								
Código	X₁	X₂	X₃	X₄	X₅	X₆	F₁	F₂
831	0	1	1	1	1	1	1	1
724	0	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
915	1	0	1	1	-1	1	-1	-1
948	-1	0	-1	-1	1	-1	1	1
682	1	-1	0	1	1	-1	1	-1
185	-1	1	0	-1	-1	1	-1	1
706	1	-1	-1	0	1	1	-1	1
250	-1	1	1	0	-1	-1	1	-1
326	1	1	-1	-1	0	1	1	-1
806	-1	-1	1	1	0	-1	-1	1
647	1	-1	1	-1	-1	0	1	1
514	-1	1	-1	1	1	0	-1	-1
546	1	1	-1	1	-1	-1	0	1
379	-1	-1	1	-1	1	1	0	-1
151	1	1	1	-1	1	-1	-1	0
269	-1	-1	-1	1	-1	1	1	0
498	0	0	0	0	0	0	0	0

Amostra extra (Padrão)								
Código	X₁	X₂	X₃	X₄	X₅	X₆	F₁	F₂
582	-0.303	1	-1	-0.333	0	-1	N/A	N/A

Fonte: O autor (2019).

3.3 MÉTODO PARA O PREPARO DE AMOSTRAS

As variações impostas pelos fatores do experimento são todas traduzidas em quantidades diferentes de seus ingredientes. Tais ingredientes utilizados são pesados manualmente e produzidos em ambiente de bancada laboratorial, utilizando-se balança analítica marca Toledo, modelo AR2140. Detalhes de processamento posterior não podem ser descritos por motivo de confidencialidade. O produto é embalado em material de embalagem identificado com o código da corrida e selado a quente em seladora manual marca Intertec, modelo 3000. Cada embalagem, após procedimentos de preparação, é utilizada na degustação de um consumidor. São, portanto, $18 \times 150 = 2700$ embalagens confeccionadas em bancada de laboratório.

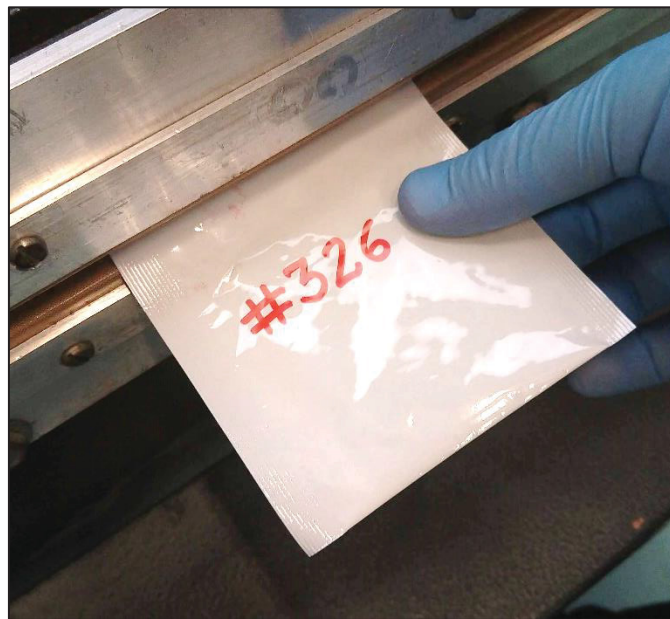
As FIGURAS 19 e 20 e ilustram parte do processo de fabricação dos protótipos.

FIGURA 19 – PESAGEM DE UM DOS INGREDIENTES



Fonte: O autor (2019).

FIGURA 20 – IDENTIFICAÇÃO E ENVELOPAMENTO DE AMOSTRA



Fonte: O autor (2019).

3.4 MÉTODO DE RECRUTAMENTO DE CONSUMIDORES

Cento e cinquenta consumidores foram recrutados por agência especializada na realização de trabalhos de campo, utilizando-se de base própria cadastral e de forma a representar o perfil demográfico solicitado pelo departamento de *Marketing* em características tais como: região geográfica, idade, sexo, classe econômica, ter ou

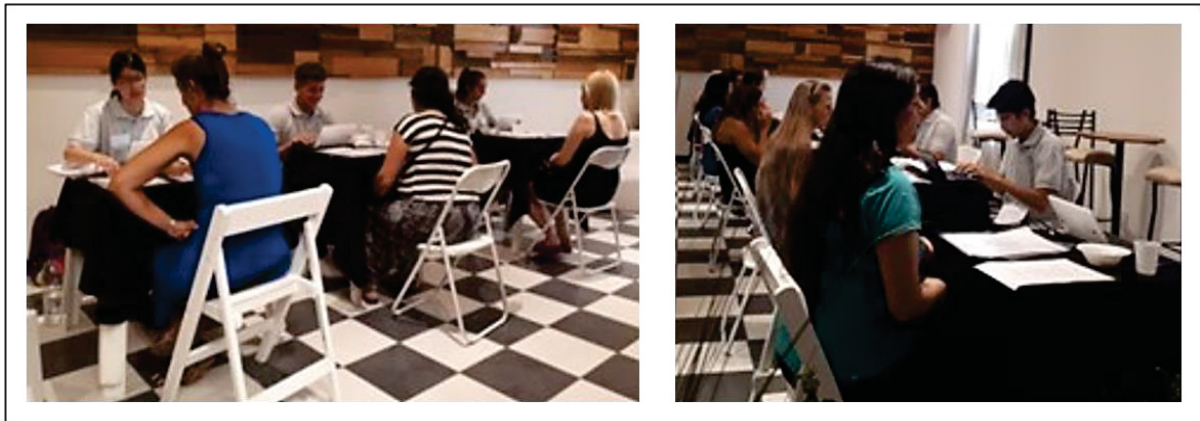
não filhos, frequência de consumo de produtos da categoria em estudo, ser consumidor(a) do produto, não rejeitar o sabor utilizado no teste, entre outras características para recrutamento.

O perfil socioeconômico atingido pela amostra de consumidores não é dado por motivo de confidencialidade.

3.5 MÉTODOS DE TESTE DE LOCALIZAÇÃO CENTRAL (CLT)

Os consumidores participantes receberam uma ajuda de custo e dirigiram-se, ao longo de três dias, a uma localização central, mostrada na FIGURA 21, onde fazem uma entrevista prévia de perfil, realizam as degustações dos protótipos e recebem um *Tablet* contendo as instruções para inserção de respostas no questionário.

FIGURA 21 – PESQUISA EM CAMPO



Fonte: O autor (2019).

Os produtos foram preparados em temperatura controlada de acordo com as instruções de preparação contidas na embalagem para consumidor final, e apresentados aos consumidores em recipiente não identificado. Demais detalhes de apresentação não podem ser divulgados por motivo de confidencialidade.

Assistentes de pesquisa se encarregavam de entregar os produtos para degustação dos consumidores, nos recipientes adequados.

A ordem em que cada consumidor recebeu suas amostras foi definida com base em um Quadrado Latino de Williams de 18 posições mostrado na TABELA 8 e obtidos em Sailer (2019). As ordens de degustação abaixo garantem um bom balanceamento quando ao viés de posição, ou seja, uma dada sequência qualquer de duas amostras não se repete de forma desbalanceada em relação a outros pares.

TABELA 8 – IDENTIFICAÇÃO DA ORDEM DAS DEGUSTAÇÕES, POR CONSUMIDOR

Ident. Consumidor	Primeiro Dia						Segundo Dia						Terceiro Dia					
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
C1	151	498	647	915	724	269	326	806	582	514	546	379	948	706	682	831	185	250
C2	706	831	379	250	514	185	806	682	269	948	915	546	498	582	151	326	647	724
C3	806	514	269	379	915	706	498	831	151	250	647	185	724	682	326	948	582	546
C4	724	647	326	151	582	498	546	915	948	269	682	806	185	514	250	379	831	706
C5	498	915	151	269	647	806	724	514	326	379	582	706	546	831	948	250	682	185
C6	326	724	582	647	546	151	948	498	682	915	185	269	250	806	831	514	706	379
C7	250	185	831	682	706	948	379	546	514	582	806	326	269	724	915	647	498	151
C8	647	151	724	498	326	915	582	269	546	806	948	514	682	379	185	706	250	831
C9	831	250	706	185	379	682	514	948	806	546	269	582	915	326	498	724	151	647
C10	514	379	806	706	269	831	915	250	498	185	151	682	647	948	724	546	326	582
C11	379	706	514	831	806	250	269	185	915	682	498	948	151	546	647	582	724	326
C12	948	546	682	582	185	326	250	724	831	647	706	151	379	498	514	915	806	269
C13	546	582	948	326	682	724	185	647	250	151	831	498	706	915	379	269	514	806
C14	185	682	250	948	831	546	706	582	379	326	514	724	806	647	269	151	915	498
C15	582	326	546	724	948	647	682	151	185	498	250	915	831	269	706	806	379	514
C16	682	948	185	546	250	582	831	326	706	724	379	647	514	151	806	498	269	915
C17	269	806	915	514	498	379	151	706	647	831	724	250	326	185	582	682	546	948
C18	915	269	498	806	151	514	647	379	724	706	326	831	582	250	546	185	948	682
C19	647	831	498	269	546	185	250	724	151	706	806	326	582	915	379	514	682	948
C20	915	514	326	948	706	682	724	379	185	582	269	806	831	151	647	250	498	546
C21	724	706	185	326	269	915	831	514	647	948	498	682	546	379	250	582	151	806
C22	546	498	250	647	151	831	806	269	582	185	379	724	682	706	948	326	514	915
C23	831	269	647	185	498	724	546	706	250	326	151	915	806	514	582	948	379	682
C24	250	546	151	498	806	647	582	831	379	269	682	185	948	724	514	706	915	326
C25	948	682	514	379	915	582	326	806	706	151	724	250	185	546	269	498	831	647
C26	498	647	546	831	250	269	151	185	806	724	582	706	379	326	682	915	948	514
C27	514	948	915	682	326	379	706	582	724	806	185	151	269	250	831	546	647	498
C28	706	326	724	915	185	514	269	948	831	682	647	379	498	582	546	806	250	151
C29	326	915	706	514	724	948	185	682	269	379	831	582	647	806	498	151	546	250
C30	582	806	379	151	682	250	948	546	514	498	915	647	326	831	706	269	724	185
C31	806	151	582	250	379	546	682	498	948	647	514	831	915	269	326	185	706	724
C32	682	379	948	582	514	806	915	151	326	250	706	546	724	498	185	647	269	831
C33	151	250	806	546	582	498	379	647	682	831	948	269	514	185	915	724	326	706
C34	379	582	682	806	948	151	514	250	915	546	326	498	706	647	724	831	185	269
C35	185	724	269	706	831	326	647	915	498	514	546	948	250	682	151	379	806	582
C36	269	185	831	724	647	706	498	326	546	915	250	514	151	948	806	682	582	379
C37	498	682	706	915	724	151	514	379	948	831	269	647	185	806	250	326	582	546
C38	806	326	647	546	831	582	379	250	151	185	915	269	682	948	498	514	706	724
C39	379	831	151	647	915	806	682	326	498	546	706	582	724	250	514	185	948	269

Ident. Consumidor	Primeiro Dia					Segundo Dia					Terceiro Dia							
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
C40	724	706	514	498	948	682	269	915	185	151	250	379	582	831	546	647	326	806
C41	682	915	498	151	706	379	724	831	514	647	948	806	269	326	185	546	250	582
C42	514	724	948	706	269	498	185	682	250	915	582	151	546	379	326	831	806	647
C43	546	582	326	250	806	185	647	269	831	948	379	514	151	724	915	706	682	498
C44	706	498	724	682	514	915	948	151	269	379	185	831	250	647	582	806	546	326
C45	326	546	806	582	647	250	831	185	379	269	151	948	915	514	682	724	498	706
C46	831	647	379	806	151	326	915	546	682	582	498	250	706	185	724	269	514	948
C47	647	806	831	326	379	546	151	582	915	250	682	185	498	269	706	948	724	514
C48	185	269	250	948	582	514	546	724	326	706	806	498	647	682	831	915	379	151
C49	269	948	185	514	250	724	582	706	546	498	326	682	806	915	647	151	831	379
C50	582	250	546	185	326	269	806	948	647	514	831	724	379	706	151	498	915	682
C51	948	514	269	724	185	706	250	498	582	682	546	915	326	151	806	379	647	831
C52	250	185	582	269	546	948	326	514	806	724	647	706	831	498	379	682	151	915
C53	151	379	915	831	682	647	498	806	706	326	724	546	514	582	948	250	269	185
C54	915	151	682	379	498	831	706	647	724	806	514	326	948	546	269	582	185	250
C55	514	682	948	806	269	706	498	915	724	379	326	250	582	185	831	647	151	546
C56	185	647	250	546	379	151	915	831	706	582	806	326	682	724	514	498	948	269
C57	915	379	706	250	806	185	682	647	514	546	948	151	269	831	498	582	724	326
C58	269	948	498	514	724	682	326	806	582	706	831	915	151	379	546	250	647	185
C59	682	806	514	706	948	915	269	379	498	250	724	185	326	647	582	546	831	151
C60	498	269	724	948	326	514	582	682	831	806	151	706	546	915	647	379	185	250
C61	546	151	647	831	185	582	250	326	379	724	915	498	706	269	806	948	682	514
C62	948	514	269	682	498	806	724	706	326	915	582	379	831	250	151	185	546	647
C63	647	546	185	151	250	831	379	582	915	326	706	724	806	498	682	269	514	948
C64	379	250	915	185	706	647	806	546	682	151	514	831	948	582	269	326	498	724
C65	250	185	379	647	915	546	706	151	806	831	682	582	514	326	948	724	269	498
C66	582	326	831	724	151	498	546	269	647	948	185	514	250	682	379	806	915	706
C67	326	724	582	498	831	269	151	948	546	514	647	682	185	806	250	706	379	915
C68	151	831	546	582	647	326	185	724	250	498	379	269	915	948	706	514	806	682
C69	724	498	326	269	582	948	831	514	151	682	546	806	647	706	185	915	250	379
C70	831	582	151	326	546	724	647	498	185	269	250	948	379	514	915	682	706	806
C71	706	915	806	379	682	250	514	185	948	647	269	546	498	151	724	831	326	582
C72	806	706	682	915	514	379	948	250	269	185	498	647	724	546	326	151	582	831
C73	915	582	806	831	269	185	706	724	151	498	514	948	326	647	546	379	250	682
C74	647	379	948	682	498	250	724	546	185	326	831	514	582	151	915	706	806	269
C75	724	498	185	948	831	647	582	379	915	682	806	250	269	546	706	326	151	514
C76	269	806	706	915	151	582	514	831	326	185	546	724	250	498	682	948	379	647
C77	582	831	915	185	806	724	269	498	706	948	151	647	514	379	326	682	546	250
C78	706	269	151	806	514	915	326	582	546	831	250	185	682	724	379	498	647	948
C79	682	250	379	546	647	326	948	514	498	151	724	706	185	269	831	806	582	915
C80	806	915	269	582	706	831	151	185	514	724	326	498	546	948	250	647	682	379
C81	379	682	647	250	948	546	498	326	724	514	185	151	831	706	582	269	915	806
C82	498	948	724	647	185	379	831	682	582	250	915	546	806	326	269	514	706	151
C83	948	647	498	379	724	682	185	250	831	546	582	326	915	514	806	151	269	706
C84	326	514	546	151	250	706	682	269	379	806	647	915	948	582	498	831	724	185
C85	514	151	326	706	546	269	250	806	682	915	379	582	647	831	948	185	498	724
C86	250	546	682	326	379	514	647	151	948	706	498	269	724	806	185	915	831	582
C87	151	706	514	269	326	806	546	915	250	582	682	831	379	185	647	724	948	498
C88	546	326	250	514	682	151	379	706	647	269	948	806	498	915	724	582	185	831
C89	185	724	831	498	582	948	915	647	806	379	269	682	706	250	151	546	514	326

Ident. Consumidor	Primeiro Dia					Segundo Dia					Terceiro Dia							
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
C90	831	185	582	724	915	498	806	948	269	647	706	379	151	682	514	250	326	546
C91	546	682	269	326	151	582	948	915	724	806	379	706	647	514	831	250	498	185
C92	514	250	706	185	806	498	915	831	582	647	326	379	682	724	546	948	269	151
C93	915	806	582	706	326	514	682	250	546	185	269	498	151	831	948	647	724	379
C94	151	269	948	546	724	682	379	326	647	582	831	915	498	806	185	706	250	514
C95	682	326	546	582	269	915	151	806	948	706	724	514	379	250	647	185	831	498
C96	948	151	724	269	379	546	647	682	831	326	498	582	185	915	250	806	514	706
C97	185	498	250	831	514	647	706	379	806	724	915	948	582	151	326	269	682	546
C98	269	546	151	682	948	326	724	582	379	915	647	806	831	706	498	514	185	250
C99	250	185	514	498	706	831	806	647	915	379	582	724	326	948	682	151	546	269
C100	806	706	915	514	582	250	326	185	682	498	546	831	269	647	151	379	948	724
C101	706	514	806	250	915	185	582	498	326	831	682	647	546	379	269	724	151	948
C102	647	379	831	724	498	948	185	151	250	269	514	546	706	682	806	326	915	582
C103	379	724	647	948	831	151	498	269	185	546	250	682	514	326	706	582	806	915
C104	498	831	185	647	250	379	514	724	706	948	806	151	915	269	582	546	326	682
C105	724	948	379	151	647	269	831	546	498	682	185	326	250	582	514	915	706	806
C106	831	647	498	379	185	724	250	948	514	151	706	269	806	546	915	682	582	326
C107	582	915	326	806	682	706	546	514	269	250	151	185	948	498	724	831	379	647
C108	326	582	682	915	546	806	269	706	151	514	948	250	724	185	379	498	647	831
C109	948	706	185	326	806	647	250	915	269	546	831	514	724	151	379	498	582	682
C110	151	498	514	682	546	582	915	379	647	724	326	831	706	269	948	250	185	806
C111	915	546	647	514	326	151	706	498	948	682	185	582	806	379	250	724	269	831
C112	806	185	250	948	269	706	831	326	724	647	379	915	582	546	682	514	498	151
C113	706	326	948	647	185	915	806	546	250	514	269	151	831	498	724	682	379	582
C114	250	806	269	185	831	948	724	706	379	326	582	647	682	915	498	546	151	514
C115	682	582	498	379	151	724	514	831	546	269	915	250	647	806	326	185	706	948
C116	185	948	806	706	250	326	269	647	831	915	724	546	379	514	582	151	682	498
C117	498	682	151	582	514	379	546	724	915	831	647	269	326	250	706	806	948	185
C118	546	514	915	151	647	498	326	682	706	582	948	379	185	724	806	831	250	269
C119	514	151	546	498	915	682	647	582	326	379	706	724	948	831	185	269	806	250
C120	724	831	379	269	582	250	682	806	498	185	151	948	514	706	546	326	915	647
C121	724	647	326	151	582	498	546	915	948	269	682	806	185	514	250	379	831	706
C122	582	379	682	724	498	831	151	269	514	250	546	806	915	185	647	948	326	706
C123	269	250	831	806	724	185	379	948	582	706	682	326	498	647	151	915	514	546
C124	379	724	582	831	682	269	498	250	151	806	514	185	546	948	915	706	647	326
C125	647	915	326	546	706	514	948	151	185	498	806	682	250	582	269	379	831	724
C126	326	647	706	915	948	546	185	514	806	151	250	498	269	682	831	582	724	379
C127	915	185	831	706	546	151	682	582	724	379	948	806	326	250	647	498	269	514
C128	250	498	806	514	379	269	582	647	151	326	706	948	185	724	915	682	831	546
C129	582	379	151	806	706	250	185	498	915	514	831	269	546	647	682	326	724	948
C130	546	831	682	915	724	185	948	706	326	151	647	582	269	379	514	806	498	250
C131	185	706	915	151	831	582	546	379	682	806	724	250	948	498	326	514	647	269
C132	682	546	724	831	948	915	326	185	647	706	269	151	514	582	498	379	250	806
C133	514	269	498	647	250	326	806	948	379	724	582	682	151	546	706	831	185	915
C134	831	915	546	185	682	706	724	151	948	582	326	379	647	806	269	250	514	498
C135	498	514	250	269	806	647	379	326	582	948	151	724	706	682	185	546	915	831
C136	379	806	582	250	151	498	706	514	185	269	915	647	831	326	546	948	682	724
C137	806	250	379	498	582	514	151	269	706	647	185	326	915	948	831	724	546	682
C138	326	948	647	724	269	682	514	546	498	831	250	915	806	185	379	706	582	151
C139	948	724	326	682	647	546	269	831	514	915	498	185	250	706	806	151	379	582

Ident. Consumidor	Primeiro Dia					Segundo Dia					Terceiro Dia							
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
C140	269	647	514	326	498	948	250	724	806	682	379	546	582	831	151	915	706	185
C141	724	682	948	546	326	831	647	915	269	185	514	706	498	151	250	582	806	379
C142	647	326	269	948	514	724	498	682	250	546	806	831	379	915	582	185	151	706
C143	151	582	706	379	185	806	915	250	831	498	546	514	682	269	724	647	948	326
C144	706	151	185	582	915	379	831	806	546	250	682	498	724	514	948	269	326	647
C145	250	806	582	379	269	185	151	546	915	498	706	831	514	682	948	647	724	326
C146	682	647	831	326	498	724	546	948	185	514	379	706	806	915	250	151	582	269
C147	546	498	185	831	379	682	806	647	250	326	582	724	269	948	151	514	915	706
C148	269	582	151	250	915	806	706	379	514	185	948	546	724	498	326	831	647	682
C149	806	379	250	185	582	546	269	498	151	831	915	682	706	647	514	326	948	724
C150	151	269	915	582	706	250	514	806	948	379	724	185	326	546	647	498	682	831

Fonte: O autor (2019).

Os resultados contidos neste trabalho se referem à primeira pergunta do questionário: “De MANEIRA GERAL, qual das frases descreve a SUA opinião sobre o produto que você acabou de provar?”, cujo resultado é denominado “Aceitabilidade Global”, ou o termo em inglês “*Overall Liking*”.

Tal pergunta é acompanhada das frases da escala hedônica apresentada em 2.8.2, e o resultado é convertido, para cada degustação, em um valor entre 1 e 9.

3.6 MÉTODO ESTATÍSTICOS PARA ANÁLISE DO EXPERIMENTO

Conforme descrito em 2.8.3, na etapa de “Análise Estatística dos Dados”, os dados brutos contendo as avaliações dos 150 consumidores foram inseridos no software JMP 14 Pro (SAS Institute, 2018) para a estimativa das médias de aceitabilidade de cada produto, ajustadas por Ordem de Degustação (efeito fixo) e Consumidor (efeito aleatório), sendo esta denominada variável Y1: Aceitabilidade Global.

O custo de matéria-prima, ponderado pelas quantidades na fórmula, foi realizado para cada protótipo e calculado como uma proporção em relação ao custo da amostra de validação 582, inserido como Y2: “Custo Relativo à Amostra 582”.

O modelo estatístico ajustado aos dados foi feito conforme o descrito nas seções 2.4.1 e 2.4.2, com os termos selecionados pelo algoritmo Fit DSD.

Em seguida, o mesmo foi realizado por dois métodos propostos pelo autor.

Dentre os modelos disponíveis, um modelo foi escolhido conforme as propriedades do delineamento DSD e as diretrizes apresentadas na seção 2.4.4.

Uma análise dos resíduos é realizada de modo a demonstrar que se distribuem aleatoriamente, seguindo a distribuição Normal com média zero e variância constante.

Uma otimização de produto é proposta de modo a obter-se um produto tão aceito quanto a amostra 582 e de menor custo.

Tais etapas são descritas em detalhe na seção 4 – Apresentação dos Resultados.

3.7 MÉTODOS COMPUTACIONAIS PARA REALIZAÇÃO DE SIMULAÇÕES

Para a definição dos termos do modelo, o método Fit DSD foi programado pelo autor, em R (R CORE TEAM, 2019), com base no artigo de Jones e Nachtsheim (2017), assim como as adaptações ao método propostas nessa dissertação.

As simulações para a avaliação de resultados das adaptações propostas também foram programadas em R (R CORE TEAM, 2019).

Todos os códigos constam como Apêndice a essa dissertação, sendo os resultados discutidos na seção 4.

4 APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS

4.1 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados brutos do experimento *EGH102*, por conter um grande volume de dados, estão apresentados no Apêndice 1.

4.1.1 Obtenção das Médias de Aceitabilidade Global dos Produtos (*LSMeans*)

A etapa de Análise Estatística dos Dados forneceu as médias de Aceitabilidade Global dos produtos, por Mínimos Quadrados, (*LSMeans*) considerando o Consumidor como fator nominal aleatório e Ordem na Degustação, como fator nominal fixo. Esta etapa foi realizada com o software JMP 14 Pro (SAS Institute, 2018). Os resultados são mostrados na TABELA 9.

TABELA 9 – RESULTADOS DO EXPERIMENTO EGH102

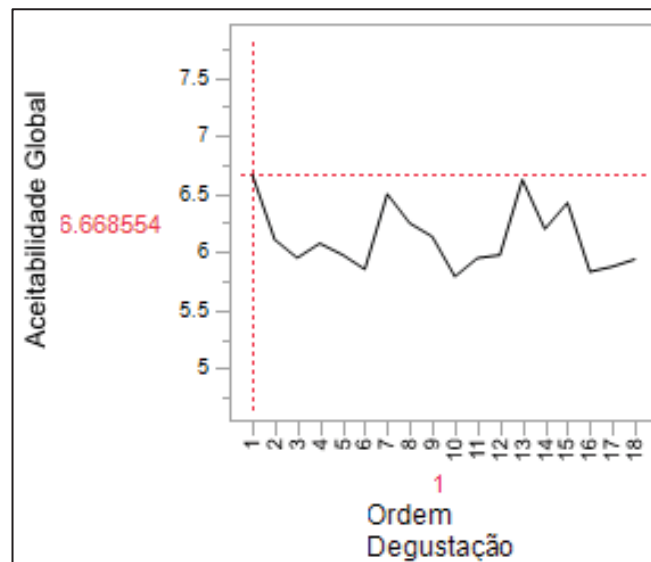
Protótipos do Delineamento DSD										
Código	X₁	X₂	X₃	X₄	X₅	X₆	F₁	F₂	Y₁: Aceit. Global	Y₂: Custo/Custo 582
831	0	1	1	1	1	1	1	1	6,360	2,227
724	0	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	4,979	0,928
915	1	0	1	1	-1	1	-1	-1	5,395	2,220
948	-1	0	-1	-1	1	-1	1	1	6,244	0,935
682	1	-1	0	1	1	-1	1	-1	4,163	1,042
185	-1	1	0	-1	-1	1	-1	1	6,257	2,113
706	1	-1	-1	0	1	1	-1	1	3,799	2,149
250	-1	1	1	0	-1	-1	1	-1	6,422	1,006
326	1	1	-1	-1	0	1	1	-1	6,122	2,190
806	-1	-1	1	1	0	-1	-1	1	4,817	0,965
647	1	-1	1	-1	-1	0	1	1	3,972	1,585
514	-1	1	-1	1	1	0	-1	-1	6,271	1,570
546	1	1	-1	1	-1	-1	0	1	6,138	1,069
379	-1	-1	1	-1	1	1	0	-1	4,238	2,086
151	1	1	1	-1	1	-1	-1	0	6,118	1,097
269	-1	-1	-1	1	-1	1	1	0	4,415	2,058
498	0	0	0	0	0	0	0	0	5,998	1,578
Amostra extra (Padrão)										
Código	X₁	X₂	X₃	X₄	X₅	X₆	F₁	F₂	Y₁: Aceit. Global	Y₂: Custo/Custo 582
582	-0,303	1	-1	-0,333	0	-1	N/A	N/A	6,642	1,000

Fonte: O autor (2019).

Nota-se que a amostra padrão, de validação (código 582), tendo sido otimizada ao longo dos anos por tentativa-e-erro pelos pesquisadores, apresenta o maior dentre todos os resultados para aceitabilidade global média, de 6,642.

A FIGURA 22 ilustra o efeito de ordem, sendo a média do valor de Aceitabilidade Global de todos os protótipos em cada posição de degustação caracterizada por maiores resultados nas primeiras degustações de cada sessão – degustações 1, 7 e 13.

FIGURA 22 – GRÁFICO DE PERFIL DAS MÉDIAS DE ACEITABILIDADE GLOBAL, PELO PAINEL DE CONSUMIDORES, POR ORDEM DE DEGUSTAÇÃO

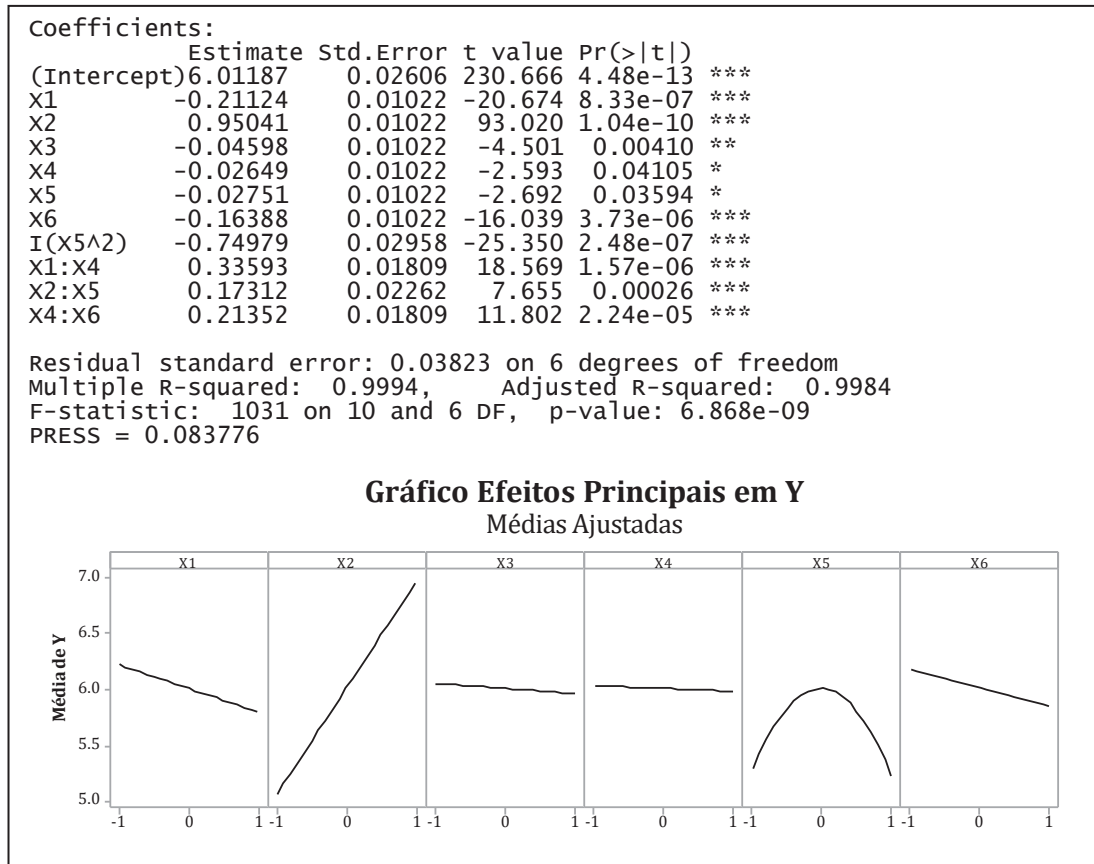


Fonte: O autor (2019).

4.1.2 Resultados da Análise Estatística dos Dados pelo Método Fit DSD

A utilização do método Fit DSD de Jones e Nachtsheim (2017) resulta no modelo apresentado na FIGURA 23, cujos efeitos principais de todos os ingredientes são considerados significativos a 5%. Além disto, três interações de segunda ordem ($X_1 \cdot X_4$, $X_2 \cdot X_5$ e $X_4 \cdot X_6$) e um efeito quadrático ($X_5 \cdot X_5$) são considerados significativos por esse algoritmo.

FIGURA 23 – MODELO AJUSTADO PELO MÉTODO FIT DSD



Fonte: O autor (2019).

Os passos realizados pelo algoritmo estão registrados na TABELA 10.

TABELA 10 – ETAPAS DO MÉTODO FIT DSD DE JONES E NACHTSHEIM (2017)

Etapa do algoritmo	Saída
Cálculo RMSE, via fatores <i>dummy</i>	RMSE = 0.0113003
Cálculo y_{ME}	$y_{ME} = [0,42; -0,42; 0,69; -0,65; -0,69; -1,31; -1,05; -1,15; 0,95; 1,15; 0; -0,95; 0,65; -0,85; 1,31; 1,05; 0,85]$
Cálculo y_{2nd}	$y_{2nd} = [5,82; 5,82; 5,67; 5,47; 5,67; 5,11; 5,21; 5,12; 5,19; 5,12; 6; 5,19; 5,47; 5,27; 5,11; 5,21; 5,27]$
Teste estatístico t para os efeitos principais	Todos os efeitos principais selecionados
Recálculo do RMSE	Não realizado pois todos os efeitos principais são significativos
Listagem dos termos de segunda ordem candidatos	Assumindo hereditariedade, todos os 21 efeitos de segunda-ordem são candidatos a entrar no modelo: $X_1 * X_1, X_2 * X_2, X_3 * X_3, X_4 * X_4, X_5 * X_5, X_6 * X_6, X_1 * X_2, X_1 * X_3, X_1 * X_4,$

Etapa do algoritmo	Saída
	$X_1 * X_5, X_1 * X_6, X_2 * X_3, X_2 * X_4, X_2 * X_5, X_2 * X_6, X_3 * X_4, X_3 * X_5, X_3 * X_6, X_4 * X_5, X_4 * X_6, X_5 * X_6$
Cálculo da estatística F	$F = 485600$
Teste F	$P(F > 485600) = 0,000 < 0,20$ Selecionar ao menos um termo de segunda-ordem
Definição do teto	Com 6 efeitos principais selecionados, Teto = $8/2 = 4$
Encontrar melhor modelo com 1 termo de segunda ordem	Termo selecionado: $X_2 * X_2$
Cálculo da estatística F	$F = 592,384$
Teste F	$P(F > 592,384) = 0,00169 < 0,20$ Serão selecionados ao menos dois termos de segunda-ordem
Encontrar melhor modelo com 2 termos de segunda ordem	Termos selecionados: $X_2 * X_2$ e $X_1 * X_1$
Cálculo da estatística F	$F = 270,721$
Teste F	$P(F > 270,721) = 0,00368 < 0,20$ Serão selecionados ao menos três termos de segunda-ordem
Encontrar melhor modelo com 3 termos de segunda ordem	Termos selecionados: $X_1 * X_4, X_4 * X_6$ e $X_5 * X_5$
Cálculo da estatística F	$F = 147,45$
Teste F	$P(F > 147,45) = 0,0067 < 0,20$ Decisão: Será selecionado o melhor modelo com 4 termos de segunda-ordem, visto que foi atingido o teto do número de termos
Encontrar melhor modelo com 4 termos de segunda ordem	Termos selecionados: $X_1 * X_4, X_4 * X_6, X_5 * X_5$ e $X_2 * X_5$
Seleção do modelo final	$Y_1 \sim X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6 + X_1 * X_4 + X_4 * X_6 + X_5 * X_5 + X_2 * X_5$
Redução do modelo	Nenhum termo removido, visto que todos são significativos a 5%.

Fonte: O autor (2019).

O modelo ajustado é exposto na equação (34):

$$\begin{aligned} \hat{Y}_1 = & 6,01187 - 0,21124 X_1 + 0,95041 X_2 - 0,04598 X_3 - 0,02649 X_4 \\ & - 0,02751 X_5 - 0,16388 X_6 - 0,74979 X_5^2 + 0,33593 X_1 * X_4 \\ & + 0,17312 X_2 * X_5 + 0,21352 X_4 * X_6 \end{aligned} \quad (34)$$

4.2 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS E ADAPTAÇÕES PROPOSTAS AO MÉTODO FIT DSD PARA ANÁLISE ESTATÍSTICA DOS DADOS

O modelo possui R^2 de 0,9994 e R^2 -Ajustado de 0,9984. O cálculo de PRESS para esse modelo resulta em 0,083776 e o valor de AICc é 21,73. Conforme o esclarecido no item 2.4.4, a interpretação de tais índices não permite a tomada de conclusão de imediato, porém são úteis na comparação de diferentes modelos candidatos.

Apesar de bons resultados do ponto de vista estatístico no ajuste do modelo, os pesquisadores identificaram ainda, nesse modelo proposto pelo método Fit DSD, sintomas de sobreajuste e de ajuste de termos incorretos, quais sejam:

- A imagem da função desse modelo, respeitados os valores de X_1 - X_6 entre -1 e 1, é de [3,17 a 7,97]. O valor máximo predito para y é, portanto, de 7,97, quando as variáveis de entrada assumem os seguintes níveis: $X_1 = -1$; $X_2 = 1$; $X_3 = -1$; $X_4 = -1$; $X_5 = 0,097$; $X_6 = -1$. Tal resultado não é condizente com resultados práticos de produtos otimizados em estudos similares anteriores cujos resultados não ultrapassam a média de 7,00 e, tampouco, com a amplitude de resultados do próprio experimento cujas aceitabilidades médias estão entre 3,80 e 6,42.
- Fatores com efeitos normalmente tidos como negligenciáveis, como aqueles de X_3 , X_4 e X_5 , respectivamente -0,046, -0,026 e -0,028 foram selecionados como termos do modelo. Tomando o exemplo de X_4 , a variação desse ingrediente de seu nível mínimo (-1) até máximo (+1) impacta a média de Aceitabilidade Global do Produto em somente 0,052 pontos, efeito tido como negligenciável do ponto de vista prático pelos investigadores.
- O proeminente efeito quadrático de X_5 , não antecipado pelos pesquisadores.

- O valor predito para a amostra de validação 582, de 7,35, com I.C. de 95% = [7,27 ; 7,43], não contendo seu resultado real de 6,642.
- Pesquisas anteriores com o mesmo sabor e outros sabores do mesmo produto revelam que a interação $X_1 * X_2$ e o termo quadrático $X_1 * X_1$, em níveis similares aos testados nesse experimento, costumam mostrar efeitos de grande magnitude e com significância estatística.

Devido aos sintomas de sobreajuste não foi possível aqui completar a última fase: conclusão e recomendações.

A partir do insucesso da aplicação do algoritmo Fit DSD nesse caso específico e devido ao alto custo para a realização de experimentos sequenciais que permitiriam confirmar ou desbancar a existência dos efeitos apontados pelo algoritmo, este trabalho propõe a aplicação de um método alternativo ao Fit DSD. Essa proposta introduz a possibilidade de intervenção do pesquisador.

Nota-se que diversos dos sintomas da não adequação do modelo ajustado têm como base o conhecimento prévio dos pesquisadores especialistas. Portanto, as adaptações propostas como alternativas que possibilitam intervenção ao método Fit DSD levam em consideração o conhecimento prévio dos pesquisadores.

No método “Fit DSD com intervenção interativa” durante o passo de seleção dos efeitos principais, o pesquisador tem a oportunidade de remover fatores que, mesmo significativos, apresentem efeito prático negligenciável. Mantendo-se o pressuposto de hereditariedade, removem-se da etapa seguinte, portanto, todos os efeitos de segunda ordem relacionados aos fatores principais removidos.³

No método “Fit DSD com intervenção não interativa”, determina-se *a priori* alguns fatores que deverão compor o modelo, independentemente de serem ou não

³ Essa ideia é sugerida pelo Dr. Bradley Jones, um dos criadores do delineamento DSD, em comunicação por *e-mail* com o autor dessa dissertação, após ter recebido do autor dessa dissertação uma sugestão de abordagem com intervenção e avaliação do ajuste do experimento EGH102 via Fit DSD.

significativos, respeitando-se o limitante de termos possíveis devido aos graus de liberdade e os critérios de hereditariedade.

O algoritmo Fit DSD realiza, originalmente, as seguintes etapas (JONES e NACHTSHEIM, 2017):

Passo 1: Estimativa do RMSE através dos fatores *dummy*;

Passo 2: Cálculo dos vetores \underline{y}_{ME} e \underline{y}_{2nd} , sendo $\underline{y}_{ME} + \underline{y}_{2nd} = \underline{y}$, onde $\underline{y}_{ME} = [X_{DF}(X'_{DF} X_{DF}) - 1 X'_{DF} \underline{y}]$ e $\underline{y}_{2nd} = [\underline{y} - \underline{y}_{ME}]$. \underline{y}_{ME} refere-se ao espaço dos efeitos principais e fatores *dummy*; e \underline{y}_{2nd} ao espaço dos efeitos de segunda-ordem.

Passo 3 – Efeitos principais: Teste t com $\alpha = 0,05$ para os efeitos principais, utilizando a estimativa de RMSE do Passo 1. Selecionar os efeitos principais significativos.

Passo 3.1: Refinamento da estimativa do RMSE com os efeitos principais não significativos a $\alpha = 0,05$, sendo efeitos não selecionados combinados (*pooled*) aos fatores *dummy*. Etapa desnecessária caso todos os efeitos principais sejam estatisticamente significativos;

Passo 3.2: Cálculo da estatística F sobre os resíduos e definição da necessidade ou não da inclusão de ao menos um fator de segunda-ordem, utilizando $\alpha = 0,20$;

Passo 4 – Efeitos de segunda-ordem: Assumindo hereditariedade com os k efeitos principais mantidos no modelo, criar lista dos $k(k+1)/2$ fatores de segunda-ordem candidatos a entrada no modelo;

Passo 4.1: Ajustar todas as combinações possíveis e selecionar o modelo com 1 termo de segunda-ordem com menor RSS (soma de resíduos ao quadrado, denominado R1). Realizar teste F sobre $F1 = [R1/(c-1)]s_e^2 \sim F_{(c-1,VE)}$, com $\alpha = 0,20$

Passo 4.2: Caso $F1 < 0,20$, ajustar todas as combinações possíveis e selecionar o modelo com 2 termos de segunda-ordem com menor RSS (soma de resíduos ao quadrado, denominado R2). Realizar teste F sobre $F2 = [R2/(c-2)]s_e^2 \sim F_{(c-2, vE)}$, com $\alpha = 0,20$.

Passo 4.3: Continuar o procedimento até que $P_{(F1)} > 0,20$ ou o teto do número de termos seja atingido, sendo o teto definido por $c/2$, ou todos os $k(k+1)/2$ possíveis caso o número de efeitos principais seja menor ou igual a três (3).

Passo 5 – Seleção do modelo: O modelo final terá os termos selecionados nas duas etapas (efeitos principais e efeitos de segunda-ordem).

Passo 6 – Redução do modelo: Após ajuste por mínimos quadrados, removem-se os termos não significativos, respeitando-se o princípio da hereditariedade.

Na alteração proposta para o método com intervenção interativa, os efeitos principais podem ser mantidos ou removidos do modelo após análise do seu tamanho de efeito pelo investigador. Caso sejam removidos, eles são reintroduzidos no cálculo da estimativa do RMSE, que é a mesma tratativa já dada a efeitos não significativos. Na etapa subsequente, pela assunção de hereditariedade, os candidatos de segunda-ordem passam a não mais incluir os efeitos removidos no modelo.

Trata-se, portanto, da inclusão do seguinte passo, entre os passos 3 e 3.1:

Passo 3.05: Remoção de efeitos principais tidos como negligenciáveis pelo pesquisador por critérios previamente estabelecidos.

Na alteração proposta ao método com intervenção não interativa, uma lista de termos que farão parte do modelo é definida a priori, respeitando o critério de hereditariedade, sendo sempre incluídas em todos os modelos ajustados. Caso mais de um termo de segunda ordem seja incluído o Passo 4 inicia-se a partir do número de termos de segunda-ordem forçados no modelo.

Trata-se, portanto, da inclusão do seguinte passo, entre os passos 3.1 e 3.2:

Passo 3.05: Efeitos principais incluídos a priori são mantidos no modelo independentemente dos resultados do teste estatístico t.

E da inclusão do seguinte passo, entre os passos 4 e 4.1:

Passo 4.05: Remover da lista todas as combinações de termos que não contenham os fatores de segunda-ordem incluídos a priori.

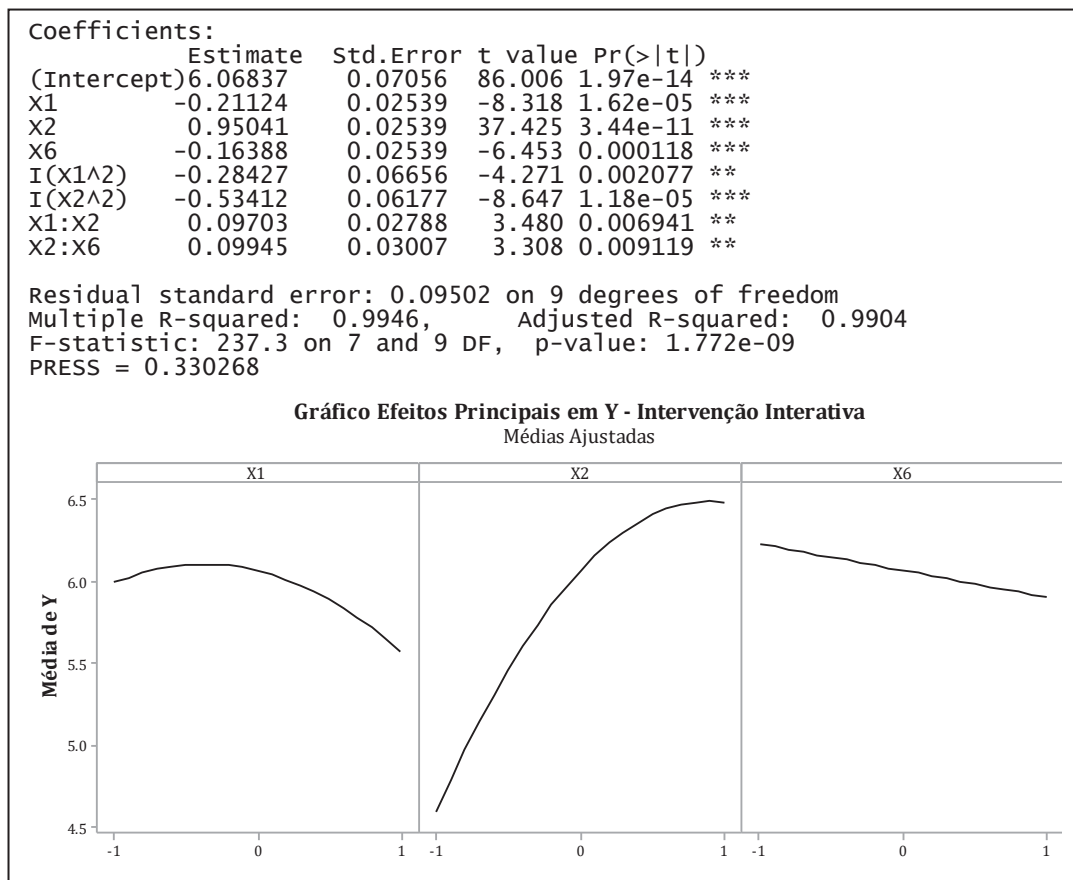
Os três métodos têm seus códigos em R disponibilizados no Apêndice dessa dissertação.

4.2.1 Resultados das Adaptações Propostas ao Experimento *EGH102*

4.2.1.1 Resultados da Análise Estatística dos Dados pelo método “Fit DSD Interativo”

Nesse cenário, X_3 , X_4 e X_5 foram manualmente removidos do modelo devido à baixa magnitude de seus efeitos na aceitabilidade global dos protótipos, sendo os efeitos de segunda-ordem escolhidos livremente pelo passo 4 do método Fit DSD através de uma lista reduzida de termos de segunda-ordem candidatos. O modelo resultante consta na FIGURA 24.

FIGURA 24 – MODELO SELECIONADO PELO MÉTODO FIT DSD COM INTERVENÇÃO INTERATIVA



Fonte: O autor (2019).

O modelo ajustado é exposto na equação (35):

$$\hat{Y}_1 = 6.01187 - 0.21124 X_1 + 0.95041 X_2 - 0.16388 X_6 - 0.28427 X_1^2 - 0.53412 X_2^2 + 0.09703 X_1 * X_2 + 0.09945 X_2 * X_6 \quad (35)$$

O modelo possui R^2 de 0,9946 e R^2 -Ajustado de 0,9904. O cálculo de PRESS para esse modelo resulta em 0,330268, maior que o resultante do método *Fit DSD* e o valor de AICc é 1,165, menor que o resultante do método *Fit DSD*.

Quanto aos sintomas de inadequação levantados pelos investigadores durante a análise estatística dos dados originalmente realizada observou-se que:

- A imagem da função fica na faixa [3,73 ; 6,59], em linha com resultados de estudos anteriores e com a amplitude de resultados encontrados no experimento.

- Fatores X_3 , X_4 e X_5 não incluídos, por iniciativa dos pesquisadores.
- Como consequência, pelo princípio da hereditariedade, o efeito quadrático de X_5 não é selecionado.
- O valor predito para a amostra de validação 582, de 6,558, com I.C. de 95% = [6,37 ; 6,75] que contém o resultado real de 6,642.
- Os fatores X_1*X_2 e X_1*X_1 são automaticamente selecionados pelo algoritmo, em conformidade às expectativas dos pesquisadores.

Os passos se sucedem conforme relatados na TABELA 11.

TABELA 11 – RESULTADOS DAS ETAPAS DE FIT DSD COM INTERVENÇÃO INTERATIVA

Etapa do algoritmo	Saída
Cálculo RMSE, via fatores <i>dummy</i>	RMSE = 0.0113003
Cálculo y_{ME}	$\underline{y}_{ME} = [0.42; -0.42; 0.69; -0.65; -0.69; -1.31; -1.05; -1.15; 0.95; 1.15; 0; -0.95; 0.65; -0.85; 1.31; 1.05; 0.85]$
Cálculo y_{2nd}	$\underline{Y}_{2nd} = [5.82; 5.82; 5.67; 5.47; 5.67; 5.11; 5.21; 5.12; 5.19; 5.12; 6; 5.19; 5.47; 5.27; 5.11; 5.21; 5.27]$
Teste estatístico t para os efeitos principais	Todos os efeitos principais selecionados
Intervenção do pesquisador	Efeitos X_3 , X_4 e X_5 removidos
Recálculo do RMSE	RMSE = 0.1002784
Listagem dos termos de segunda ordem candidatos	Assumindo hereditariedade: X_1*X_1 , X_2*X_2 , X_6*X_6 , X_1*X_2 , X_1*X_6 , X_2*X_6
Cálculo da estatística F	$F = 6167$
Teste F	$P(F > 6167) = 0.0002 < 0,20$ Será selecionado ao menos um termo de segunda-ordem
Definição do teto: número máximo de termos de 2ª ordem	Como somente 3 efeitos principais foram selecionados, Teto = 6
Encontrar melhor modelo com 1 termo de segunda ordem	Termo selecionado: X_2*X_2
Cálculo da estatística F	$F = 7.523$
Teste F	$P(F > 7.523) = 0.02 < 0,20$

Etapa do algoritmo	Saída
	Serão selecionados ao menos dois termos de segunda-ordem
Encontrar melhor modelo com 2 termos de segunda ordem	Termos selecionados: $X_2 * X_2$ e $X_1 * X_1$
Cálculo da estatística F	$F = 3.438$
Teste F	$P(F > 3.438) = 0.098 < 0,20$ Serão selecionados ao menos três termos de segunda-ordem
Encontrar melhor modelo com 3 termos de segunda ordem	Termos selecionados: $X_2 * X_2$, $X_1 * X_1$ e $X_1 * X_2$
Cálculo da estatística F	$F = 2.58$
Teste F	$P(F > 2.58) = 0.161 < 0,20$ Serão selecionados ao menos quatro termos de segunda-ordem
Encontrar melhor modelo com 4 termos de segunda ordem	Termos selecionados: $X_2 * X_2$, $X_1 * X_1$, $X_1 * X_2$ e $X_2 * X_6$
Cálculo da estatística F	$F = 0.770$
Teste F	$P(F > 0.770) = 0.588 > 0,20$ Decisão: Ficar com o modelo com 4 termos de segunda-ordem
Seleção do modelo final	$Y_1 \sim X_1 + X_2 + X_6 + X_2 * X_2 + X_1 * X_1 + X_1 * X_2 + X_2 * X_6$
Redução do modelo	Nenhum termo removido, visto que todos são significativos a 5%.

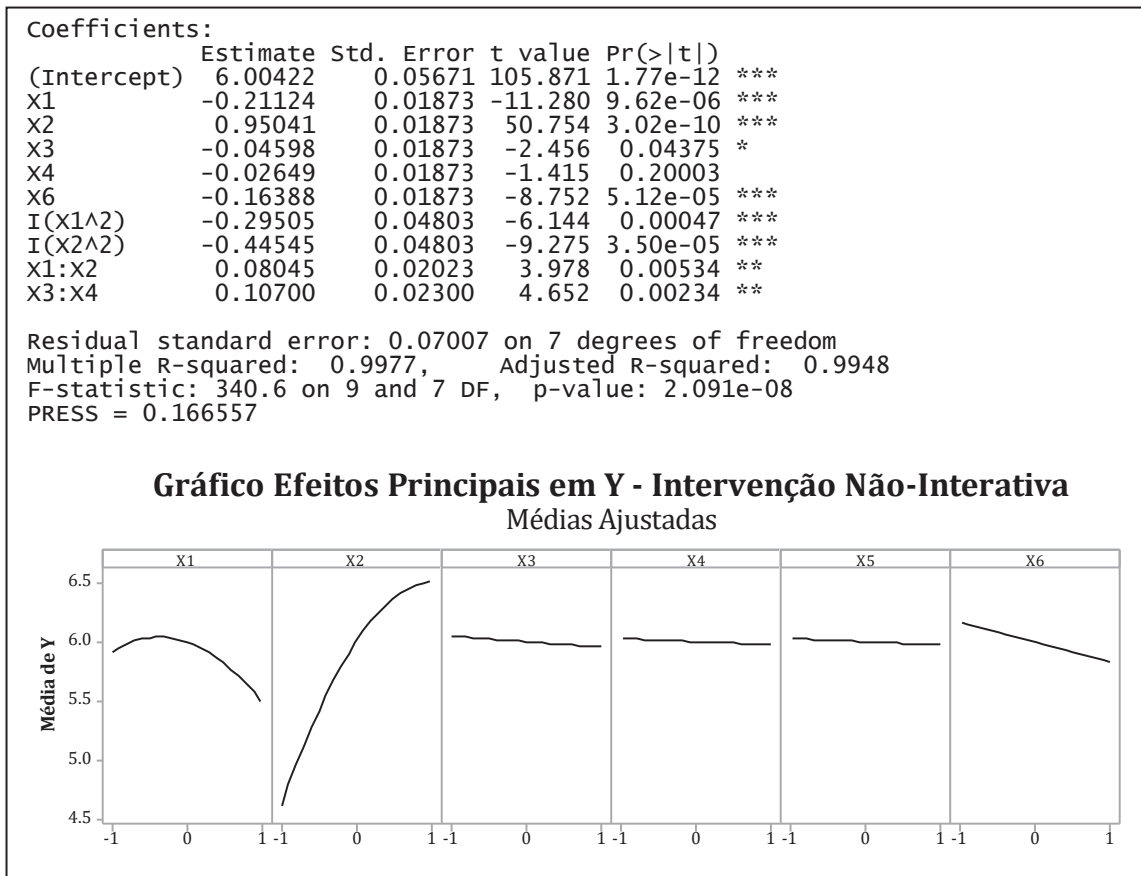
Fonte: O autor (2019).

4.2.1.2 Resultados da Análise Estatística dos Dados pelo método Fit DSD Não Interativo

Nesse cenário, o conhecimento prévio dos pesquisadores a respeito dos efeitos dos fatores X_1 e X_2 foram levados em consideração. X_1 , X_2 , $X_1 * X_1$ e $X_1 * X_2$ foram manualmente incluídos no modelo, independente da significância de seus efeitos e suas contribuições para a redução da soma de resíduos ao quadrado.

O modelo resultante consta na FIGURA 25.

FIGURA 25 – MODELO SELECIONADO PELO MÉTODO FIT DSD COM INTERVENÇÃO NÃO-INTERATIVA



Fonte: O autor (2019).

O modelo possui R^2 de 0,9977 e R^2 -Ajustado de 0,9948. O cálculo de PRESS para esse modelo resulta em 0,166557, maior que o resultante do método *Fit DSD* e o valor de AICc é 17,540, menor que o resultante do método *Fit DSD*.

O modelo ajustado é exposto na equação (36):

$$\hat{Y}_1 = 6.00422 - 0.21124 X_1 + 0.95041 X_2 - 0.16388 X_6 - 0.29505 X_1^2 - 0.44545 X_2^2 + 0.08045 X_1 X_2 + 0.10700 X_3 X_4 \quad (36)$$

Quanto aos sintomas de inadequação levantados pelos investigadores durante a análise estatística dos dados realizada:

- A imagem da função fica na faixa [3,73 ; 6,89], em linha com resultados de estudos anteriores e com a amplitude de resultados encontrados no experimento.

- Fatores X_3 e X_4 , são significativos porém com baixo efeito prático, acabam por fazer parte do modelo.
- O efeito quadrático $X_5^*X_5$ não é selecionado, mesmo antes da remoção de X_5 na etapa de redução do modelo (última etapa do algoritmo), o que condiz com as expectativas dos pesquisadores.
- O valor predito para a amostra de validação 582, de 6,776, com I.C. de 95% = [6,66 ; 6,89] que contém o resultado real de 6,642.
- Os fatores, X_1 , X_2 , X_1*X_2 e $X_1^*X_1$, incluídos de forma forçada, são todos significativos no modelo final, em conformidade à expectativa dos pesquisadores.

Os passos se sucedem conforme a TABELA 12.

TABELA 12 – ETAPAS DE FIT DSD COM INTERVENÇÃO NÃO INTERATIVA

Etapa do algoritmo	Saída
Cálculo RMSE, via fatores <i>dummy</i>	RMSE = 0.0113003
Cálculo y_{ME}	$y_{ME} = [0.42; -0.42; 0.69; -0.65; -0.69; -1.31; -1.05; -1.15; 0.95; 1.15; 0; -0.95; 0.65; -0.85; 1.31; 1.05; 0.85]$
Cálculo y_{2nd}	$y_{2nd} = [5.82; 5.82; 5.67; 5.47; 5.67; 5.11; 5.21; 5.12; 5.19; 5.12; 6; 5.19; 5.47; 5.27; 5.11; 5.21; 5.27]$
Teste estatístico t para os efeitos principais	Todos os efeitos principais selecionados
Intervenção do pesquisador	Não altera o resultado visto que X_1 e X_2 já foram selecionados
Recálculo do RMSE	Não realizado pois todos os efeitos escolhidos já estão selecionados
Listagem dos termos de segunda ordem candidatos	Assumindo hereditariedade, todos os 21 efeitos de segunda-ordem são candidatos a entrar no modelo: $X_1^*X_1, X_2^*X_2, X_3^*X_3, X_4^*X_4, X_5^*X_5, X_6^*X_6, X_1^*X_2, X_1^*X_3, X_1^*X_4, X_1^*X_5, X_1^*X_6, X_2^*X_3, X_2^*X_4, X_2^*X_5, X_2^*X_6, X_3^*X_4, X_3^*X_5, X_3^*X_6, X_4^*X_5, X_4^*X_6, X_5^*X_6$
Cálculo da estatística F	F = 485600
Teste F	P (F > 485600) = 0.000 < 0,20

Etapa do algoritmo	Saída
	Será selecionado ao menos um termo de segunda-ordem
Definição do teto	Com 6 efeitos principais selecionados, $Teto = 8/2 = 4$
Encontrar melhor modelo com 1 termo de 2ª ordem	Etapa não realizada pois são dois os termos de segunda ordem forçados no modelo
Listagem e seleção dos termos de segunda ordem candidatos ao modelo com 2 termos de 2ª ordem	Somente X_1*X_1 e X_1*X_2 , por serem os termos forçados no modelo
Cálculo da estatística F	$F = 1003.8$
Teste F	$P(F > 1003.8) = 0.0010 < 0,20$ Serão selecionados ao menos três termos de segunda-ordem
Listagem dos termos de segunda ordem candidatos ao modelo com 3 termos de segunda ordem	Somente combinações de 3 fatores de segunda ordem que contenham os fatores X_1*X_1 e X_1*X_2 , por serem os termos forçados no modelo
Encontrar melhor modelo com 3 termos de 2ª ordem	Termos selecionados: X_2*X_2 , X_1*X_1 e X_1*X_2
Cálculo da estatística F	$F = 203.2$
Teste F	$P(F > 203.2) = 0.005 < 0,20$ Serão selecionados ao menos quatro termos de segunda-ordem
Listagem dos termos de segunda ordem candidatos ao modelo com 4 termos de segunda ordem	Somente combinações de 4 fatores de segunda ordem que contenham os fatores X_1*X_1 e X_1*X_2 , por serem os termos forçados no modelo
Encontrar melhor modelo com 4 termos de 2ª ordem	Termos selecionados: X_2*X_2 , X_1*X_1 , X_1*X_2 e X_3*X_4
Seleção do modelo	$Y_1 \sim X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6 + X_2*X_2 + X_1*X_1 + X_1*X_2 + X_3*X_4$
Redução do modelo	Remoção de X_5 , não significativo a 5% (p -valor = 0.1531) e não envolvido em efeitos de segunda-ordem. Fator X_4 mantido no modelo por fazer parte da interação X_3*X_4 .

Fonte: O autor (2019).

4.3 SELEÇÃO DE MODELO PARA O EXPERIMENTO EGH102

Cada método ajustou um modelo diferente para os dados do experimento *EGH102*. A TABELA 13 mostra um comparativo de desempenho dos três métodos.

TABELA 13 – COMPARATIVO DE DESEMPENHO DOS TRÊS MÉTODOS, NO EXPERIMENTO EGH102

	Fit DSD	Fit DSD com Intervenção interativa	Fit DSD com intervenção não-interativa
Modelo Selecionado	$Y_1 \sim X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6 + X_1 * X_4 + X_2 * X_5 + X_4 * X_6 + X_5 * X_5$	$Y_1 \sim X_1 + X_2 + X_6 + X_1 * X_1 + X_2 * X_2 + X_1 * X_2 + X_2 * X_6$	$Y_1 \sim X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6 + X_1 * X_1 + X_2 * X_2 + X_1 * X_2 + X_3 * X_4$
R ² Ajustado	99,8%	99,0%	99,6%
PRESS	0,084	0,330	0,167
AICc	21,73	1,17	17,54
Imagem da função	[3,17 ; 7,97]	[3,73 ; 6,59]	[3,73 ; 6,87]
Predição da amostra 582 (y = 6,642)	7,350 I.C. 95% [7,27 ; 7,43] Erro de 0,708	6,558 I.C. 95% [6,37 ; 6,75] Erro de 0,084	6,777 I.C. 95% [6,66 ; 6,89] Erro de 0,135

Fonte: O autor (2019).

Todos os métodos de seleção geraram modelos bons do ponto de vista estatístico, notadamente com R²-Ajustado acima de 99%. O conhecimento prévio dos pesquisadores responsáveis pela formulação do produto de que os termos X_1 , X_2 , $X_1 * X_2$ e $X_1 * X_1$ são ativos, podem ser considerados como confirmados, visto que os termos adicionados são todos significativos nos modelos gerados por via interativa.

O ajuste Fit DSD, principalmente ao incluir o termo $X_5 * X_5$, incorre em aparente sobreajuste, o que resulta no modelo com maior diferença em relação à amostra de validação 582, fora do delineamento DSD, porém incluída nas degustações do consumidor. Então, foi descartado como modelo a utilizar.

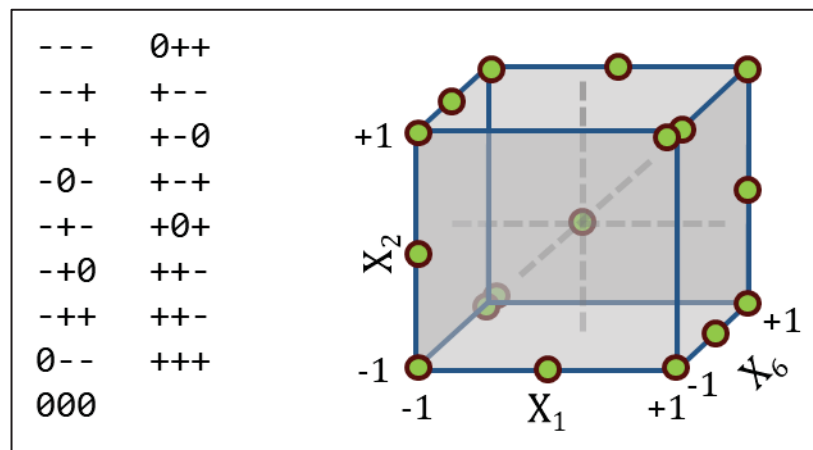
Dentre os modelos restantes, escolheu-se o modelo gerado pelo método “Fit DSD com Intervenção interativa”, a partir do conceito de Hawkins (2004), que

preconiza utilizar, dentre todos os modelos que possuam um bom ajuste aos dados, o mais simples dentre eles.

Pesa ainda na decisão de escolha o fato de que sendo “ $Y_1 \sim X_1 + X_2 + X_6 + X_1 * X_1 + X_2 * X_2 + X_1 * X_2 + X_2 * X_6$ ” o modelo escolhido, este é, por propriedade do delineamento DSD, uma projeção de três (3) fatores (X_1 , X_2 e X_6) que forma um delineamento próprio para superfície de resposta, visto que os termos X_3 , X_4 e X_5 são considerados como inativos. Portanto, os resultados podem ser utilizados para a obtenção de um modelo preditivo de otimização.

As 17 corridas do delineamento DSD com $m=6$ e dois fatores *dummy* projetam-se em X_1 , X_2 e X_6 conforme a FIGURA 26:

FIGURA 26 – DELINEAMENTO DSD PROJETADO NOS FATORES ATIVOS X_1 , X_2 E X_6



Fonte: O autor (2019).

A escolha do modelo pelo método “Fit DSD com Intervenção interativa” é suportada ainda pela medida de ajuste AICc, de 1,17, que nesse caso beneficia o modelo com bom ajuste e menor número de termos.

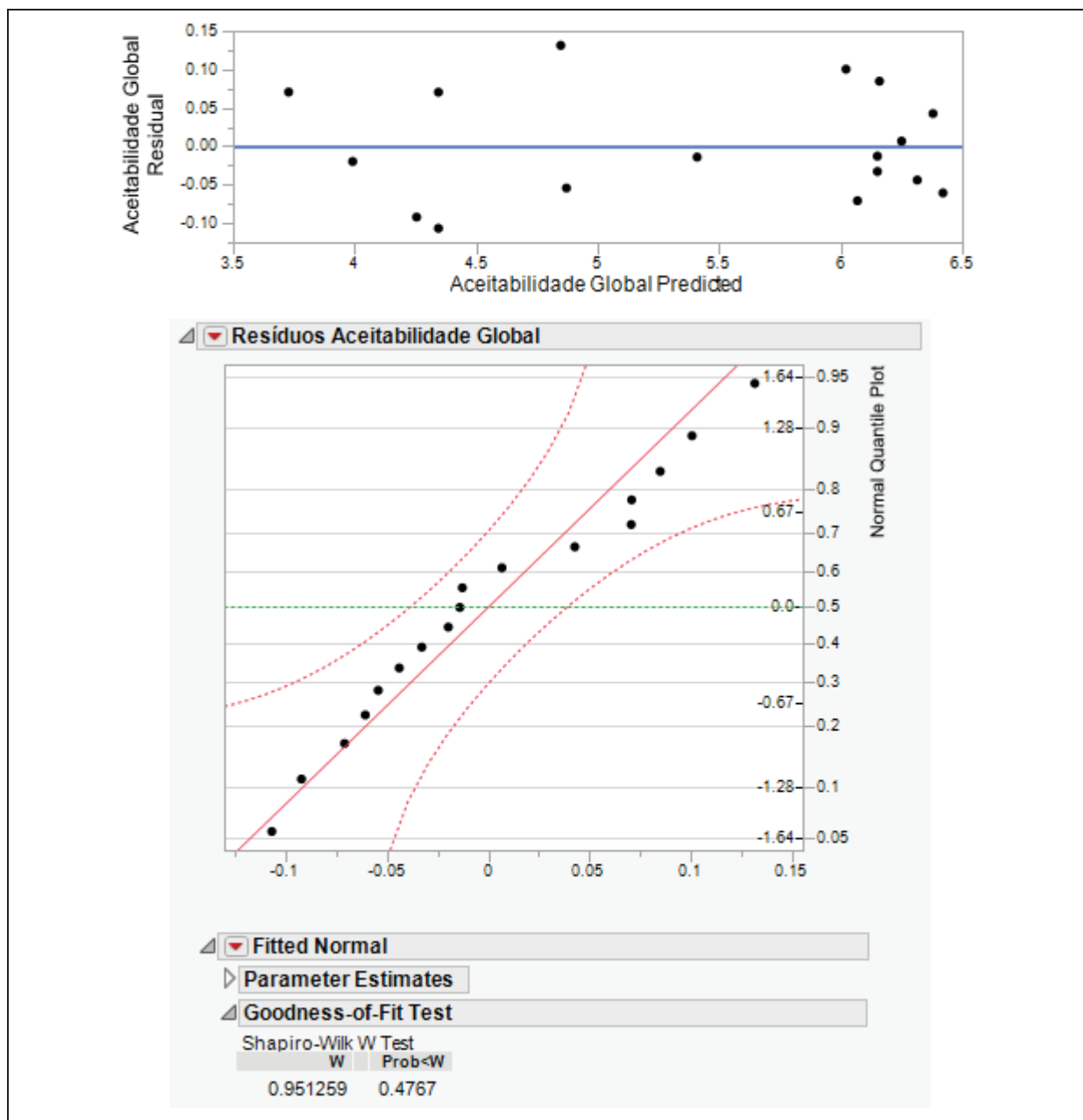
Nota-se que a escolha dentre esses e outros tantos modelos com bom ajuste possivelmente gerados por esse mesmo conjunto de dados, teria sido menos assertiva caso o time do projeto não possuisse:

- Diálogo entre o estatístico, responsável pela análise dos dados e o pesquisador, conhecedor do problema sob estudo e de estudos históricos. De forma que esse comportamento permitiu o questionamento a respeito da inclusão do termo $X_5 * X_5$ no modelo e a não inclusão dos termos $X_1 * X_2$ e $X_1 * X_1$.
- Olhar crítico sobre a variável que se deseja otimizar, o que permitiu a desconfiança a respeito da imagem gerada pela função do modelo originalmente ajustado pelo método Fit DSD, visto que a predição de um valor de aceitabilidade global desse tipo de produto dificilmente chegará ao valor predito de 7,97 em qualquer nível dos ingredientes.
- Meios de incluir no estudo de campo da amostra de validação 582, o que permitiu avaliar o erro de predição de seu resultado, pelo modelo, de forma independente.

4.3.1 Etapa de Conclusão e Recomendações do Experimento *EGH102*

O modelo preditivo gerado para Y_1 : Aceitabilidade Global do Consumidor, é aquele dado na Equação (35):

A análise dos resíduos indica que possuem variância constante ao longo da faixa de predição do estudo e são distribuídos pela distribuição Normal, segundo o teste estatístico de adequação ao ajuste Shapiro-Wilk (1965), conforme mostram as saídas do software JMP 14 Pro (SAS Institute, 2018) na FIGURA 27.

FIGURA 27 – ANÁLISE DOS RESÍDUOS DE Y_1 DO MODELO SELECIONADO

Fonte: O autor (2019).

O modelo para a variável Y_2 , Custo Relativo à Amostra 582, é determinístico e função de todos os ingredientes, conforme o custo relativo de cada um em contraste à amostra 582, e dado pela Equação (37):

$$Y_2 = 1.5776 + 0.0443 X_1 + 0.0327 X_2 + 0.0205 X_3 + 0.0156 X_4 + 0.0091 X_5 + 0.5714 X_6 \quad (37)$$

Todos os coeficientes são positivos, ou seja, nenhum deles custa mais do que o ingrediente de preenchimento de fórmula original, e, portanto, a remoção de qualquer um dentre os ingredientes do delineamento representa redução de custo.

Os níveis de X_3 , X_4 e X_5 não compõem o modelo preditivo para Y_1 : Aceitabilidade Global, sendo seus coeficientes β_3 , β_4 e β_5 assumidos como zero. Pelo efeito positivo de qualquer ingrediente em custo, estes podem ser fixados em seus valores mínimos, de menor custo.

O ingrediente X_6 pode ser também fixado em seu mínimo, pois seu coeficiente β_6 apresenta valor negativo, ou seja, sua adição na fórmula torna o produto menos aceito.

Para otimização de custo, partiu-se da fórmula atual e seus valores preditos, sendo seguidos os passos abaixo, cujos resultados são vistos na FIGURA 28.

- Mantêm-se em seus níveis mínimos os ingredientes X_3 , X_5 e X_6 e reduziu-se X_4 , fator inativo, a seu valor mínimo;
- Reduz-se X_5 (inativo) a seu valor mínimo e, dado que X_2 encontra-se em nível maior que o ponto de máximo de sua curva de efeito em Y_1 , reduziu-se X_2 até esse ponto de máximo;
- X_1 reajustado em ponto próximo em seu menor valor que proporcionasse o valor arbitrário em Aceitabilidade Global de 6,580;
- Devido à interação entre X_1 e X_2 , X_2 pôde ainda ser modificado para um valor menor, mantendo a Aceitabilidade Global predita em 6,580.

FIGURA 28 – PASSOS PARA A OTIMIZAÇÃO DO PRODUTO

Passo 1		Passo 2		Passo 3		Passo 4	
Variável	Valor	Variável	Valor	Variável	Valor	Variável	Valor
X_1	-0,303	X_1	-0,303	X_1	-0,404	X_1	-0,404
X_2	1	X_2	0,769	X_2	0,769	X_2	0,734
X_3	-1	X_3	-1	X_3	-1	X_3	-1
X_4	-1	X_4	-1	X_4	-1	X_4	-1
X_5	0	X_5	-1	X_5	-1	X_5	-1
X_6	-1	X_6	-1	X_6	-1	X_6	-1
\hat{Y}_1	6,558	\hat{Y}_1	6,587	\hat{Y}_1	6,580	\hat{Y}_1	6,580
Y_2	0,989	Y_2	0,973	Y_2	0,968	Y_2	0,967

Fonte: O autor (2019).

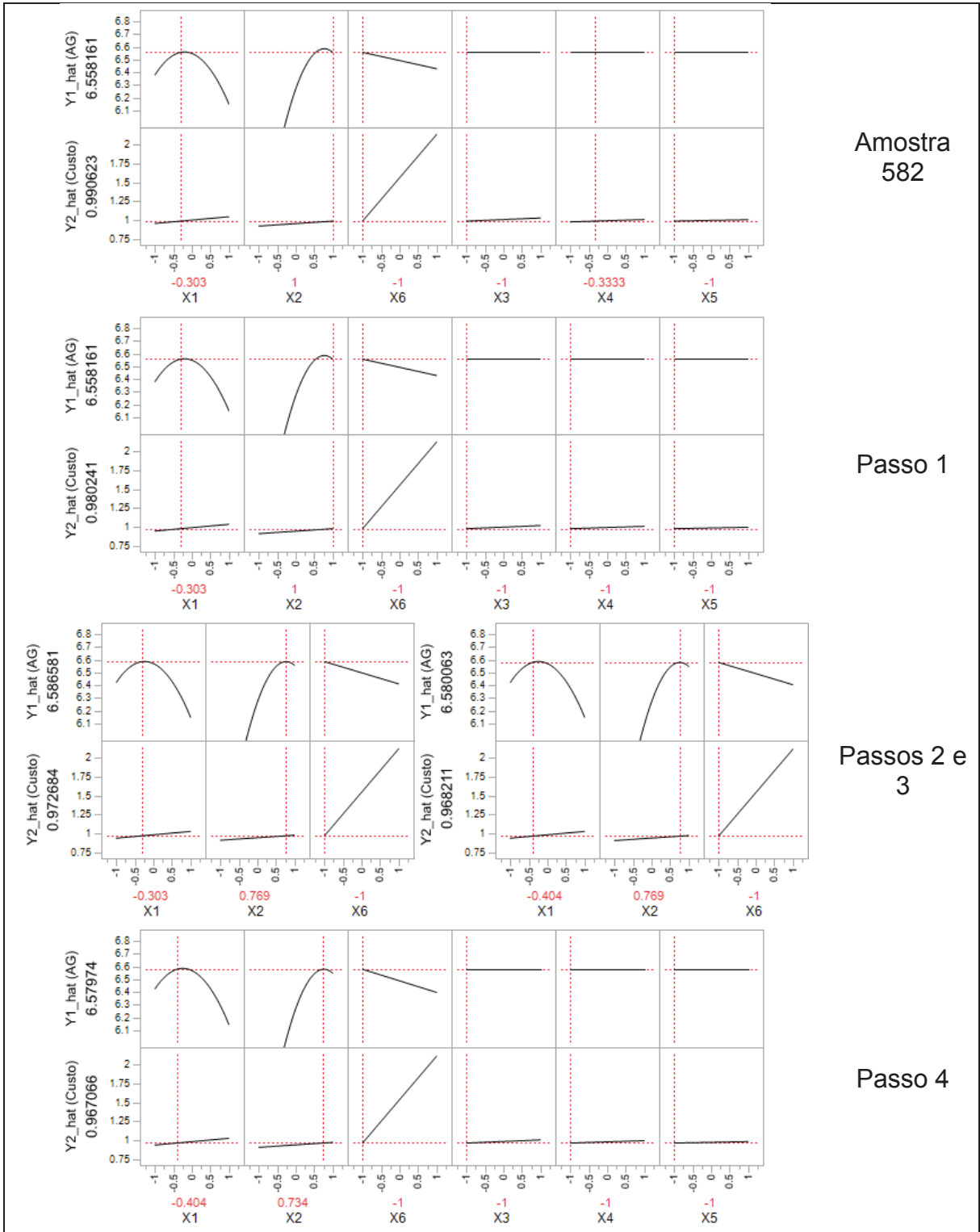
O experimento *EGH102* revelou, portanto, a existência de uma combinação de ingredientes que se espera seja tão aceita quanto a amostra padrão 582, e cujo custo é 3,3% menor.

Esse resultado pôde ser atingido em um único experimento de triagem, que se projetou em um experimento de otimização devido às características do DSD e pela inatividade de três dos seis fatores estudados.

Posterior validação em teste pareado, cujos resultados não serão aqui descritos, confirmou os resultados desse experimento.

Os passos da otimização do produto são vistos na FIGURA 29, nas saídas fornecidas pelo software JMP 14 Pro (SAS Institute, 2018) em gráficos do tipo *profiler*.

FIGURA 29 – PASSOS PARA OTIMIZAÇÃO DO PRODUTO ALIMENTÍCIO



Fonte: O autor (2019).

4.4 DISCUSSÃO DAS METODOLOGIAS PROPOSTAS ATRAVÉS DE SIMULAÇÕES

No caso do Experimento *EGH102* os dois métodos adaptados se mostraram capazes de aproveitar o bom desempenho do algoritmo Fit DSD e, para esse experimento em específico, geraram modelos mais adequados do ponto de vista dos pesquisadores responsáveis pela formulação do produto em estudo.

Entretanto, é trivial supor que uma definição incorreta, por parte do pesquisador, de fatores removidos ou forçados a fazer parte do modelo pode comprometer a qualidade do ajuste final, seja introduzindo termos de efeito nulo (erro do Tipo I) quanto comprometendo o poder do método de inserção dos termos corretos.

Aqui, apresenta-se um trabalho de simulação para determinar o impacto dos métodos Fit DSD adaptados na qualidade final do ajuste.

A metodologia para a definição das condições analisadas segue a mesma estratégia do artigo Jones e Nachtsheim (2017), em que simulações seguem um fatorial completo e um modelo é ajustado aos dados provenientes das simulações. Uma análise descritiva é posteriormente realizada através dos gráficos *profilers* de probabilidade condicional.

Não foram simulados modelos sem hereditariedade e nem delineamentos sem o uso de fatores do tipo *dummy*, condições que comprovadamente possuem efeitos negativos na qualidade de ajuste, conforme as simulações conduzidas por Errore et al. (2016) e por Jones e Nachtsheim (2017).

Nos casos específicos das adaptações propostas ao método Fit DSD, algumas combinações não são possíveis. Por exemplo, dada a restrição de hereditariedade, não é possível forçar dois termos de segunda ordem no modelo quando nenhum fator principal esteja presente no modelo. Tais exclusões são refletidas nos gráficos de análises descritivas.

De cada condição, 100 simulações foram realizadas, mesmo número realizado por Jones e Nachtsheim (2017).

Cada simulação consiste na geração de dados aleatórios conforme um modelo real e conhecido, cujos fatores ativos possuem coeficiente $\beta = 1$ ou $\beta = -1$ quando a razão sinal/ruído é igual a 1, e $\beta = 3$ ou $\beta = -3$ quando a razão sinal/ruído é igual a 3, sendo os sinais sorteados aleatoriamente; e a variância do ruído é $\sigma^2 = 1$.

A avaliação do resultado de cada simulação utiliza o mesmo critério de Jones e Nachtsheim (2017), ou seja, avalia o poder obtido pelo algoritmo em detectar os efeitos sabidamente ativos, tanto para efeitos principais quanto para efeitos de segunda ordem.

Para o método Fit DSD com Intervenção Interativa, decidiu-se incluir ainda a análise de erro do tipo I para os efeitos principais, visto que esse método consiste em evitar que termos de baixa magnitude no efeito sejam inseridos no modelo.

4.4.1 Resultados da Simulação

Nessa subseção, os resultados de simulação são discutidos com principal foco no efeito das alterações propostas ao método Fit DSD, visto que os resultados de Jones e Nachtsheim (2017) e de Errore et al. (2016) já exploram a fundo o efeito dos demais fatores incluídos, além de outros aqui mantidos fixos.

4.4.1.1 Método Fit DSD com Intervenção Não Interativa – Efeitos Principais

Os fatores utilizados na simulação estão dispostos conforme a TABELA 14.

TABELA 14 – FATORES E NÍVEIS PARA SIMULAÇÕES DO MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO, NA AVALIAÇÃO DO PODER PARA DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS

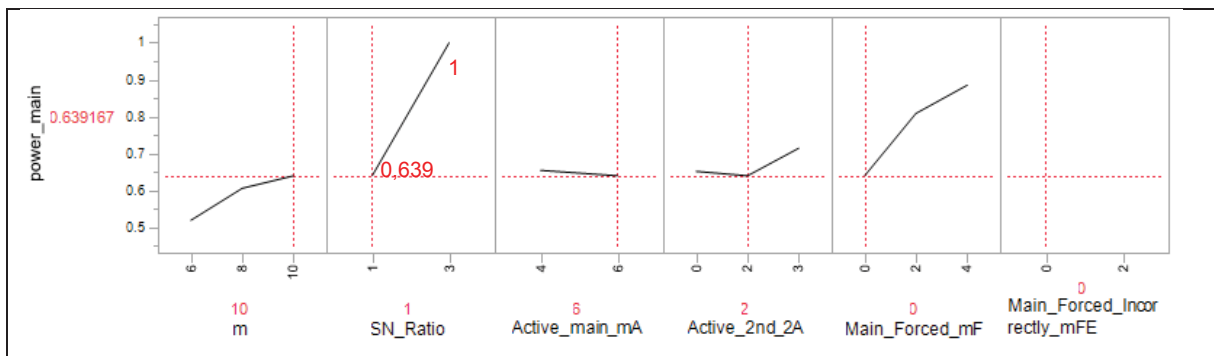
Fatores Variáveis	Níveis		
Número de fatores (m)	6	8	10
Razão sinal-para-ruído (SN_ratio)	1	3	
Fatores principais ativos (mA)	4	6	
Fatores de segunda-ordem ativos (2A)	0	2	3
Fatores principais forçados no modelo (mF)	0	2	4
Fatores principais incorretamente forçados no modelo (mFE)	0	2	
Fatores Fixos	Nível		
Inclusão de 2 fatores fakes (mD)	Sim		
Hereditariedade	Sim		

Fonte: O autor (2019).

As FIGURAS 30, 31 e 32 mostram os efeitos da introdução forçada, tanto correta quanto incorreta, no poder do algoritmo, no caso com $m = 10$, sendo seis (6) efeitos principais ativos, no pior caso de razão sinal/ruído = 1.

A FIGURA 30 mostra o resultado do método Fit DSD, ou seja, sem qualquer termo forçado no modelo, sendo o poder de detecção de efeitos principais de 64%.

FIGURA 30 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=10$; SN_ratio=1 ou 3; mA=6; 2A=2; mF=0; mFE=0)

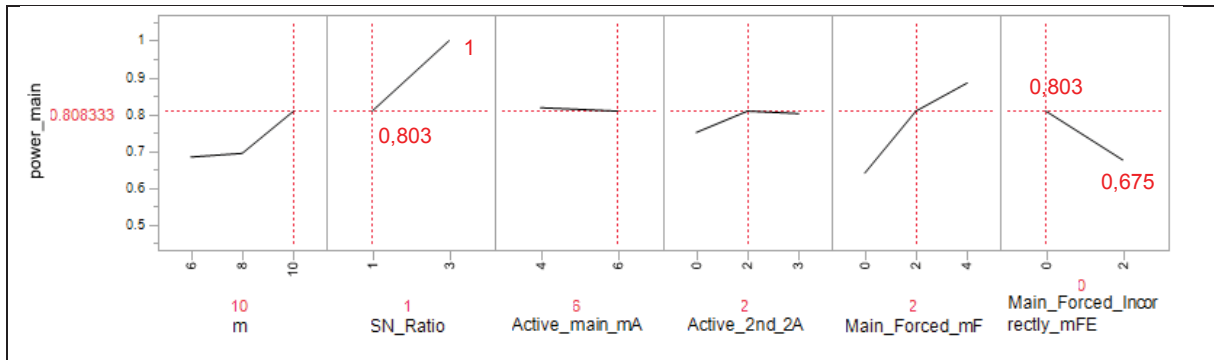


Fonte: O autor (2019).

A FIGURA 31 mostra como a introdução forçada de dois (2) termos de forma correta causa incremento no poder para 81%. Já a introdução de dois termos de forma incorreta (*Main Forced Incorrectly* = 2) acarreta, como esperado, em menor poder em

relação ao método sem intervenção (*Main Forced Incorrectly* = 0), entretanto sem comprometer, nos níveis aqui experimentados, o poder do método Fit DSD, ou seja, sem comprometer o poder de detecção dos efeitos ativos.

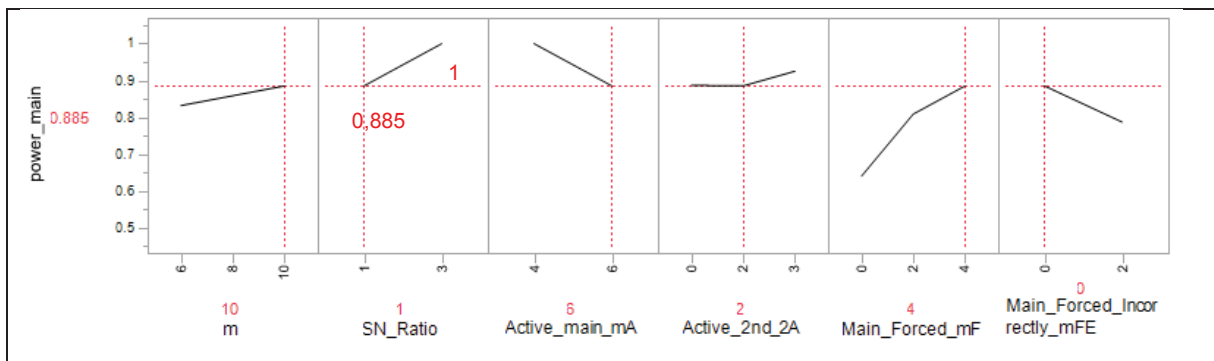
FIGURA 31 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=10$; $SN_ratio=1$ ou 3 ; $mA=6$; $2A=2$; $mF=2$; $mFE=0$ ou 2)



Fonte: O autor (2019).

A FIGURA 32 mostra que, passando a quatro (4) termos forçados de forma correta, o poder de detecção dos efeitos ativos atinge 88%, o que representa um nível próximo ao método Fit DSD em um caso mais favorável de razão sinal/ruído = 3.

FIGURA 32 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=10$; $SN_ratio=1$ ou 3 ; $mA=6$; $2A=2$; $mF=4$; $mFE=0$)



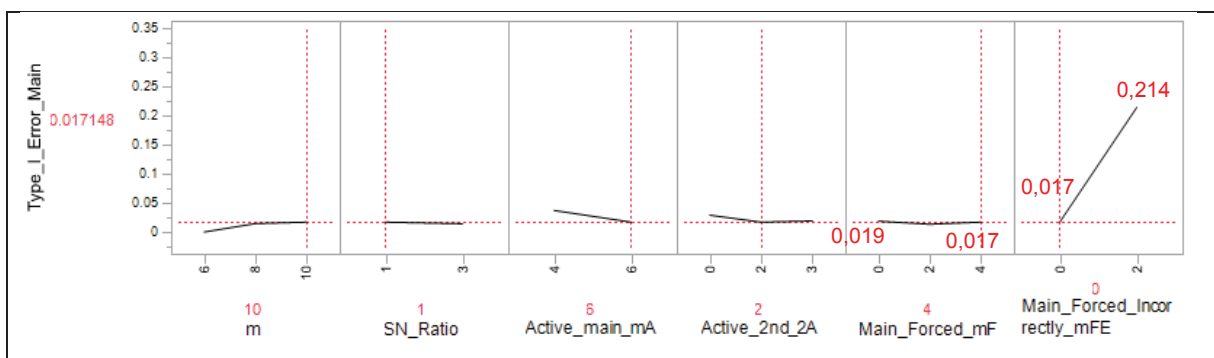
Fonte: O autor (2019).

As probabilidades de Erro Tipo I para fatores principais são afetadas, como esperado, pela inserção forçada de termos de forma incorreta (*mFE*), por exemplo atingindo valor de 21% quando dois (2) termos dentre dez (10) possíveis são forçados de forma incorreta, como é visto na FIGURA 33. Quando nenhum termo é forçado de

forma incorreta, o erro tipo I mantém níveis baixos, abaixo de 0,04, como aqueles observados em Jones e Nachtsheim (2017).

Forçar termos de forma correta não afeta o erro tipo I para os demais termos, o que é intuitivo pelas características de ortogonalidade entre os fatores principais do delineamento DSD.

FIGURA 33 – ERRO TIPO I PARA FATORES PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO (m=10; SN_ratio=1; mA=6; 2A=2; mF=0 ou 4; mFE=0 ou 2)



Fonte: O autor (2019).

Os demais resultados seguem padrão similar ao encontrado por Jones e Nachtsheim (2017) e não são aqui descritos.

4.4.1.2 Método Fit DSD com Intervenção Não Interativa – Efeitos de Segunda Ordem

Neste método proposto a simulação dos efeitos no poder de identificação dos fatores de segunda ordem, algumas restrições se aplicam a um único modelo fatorial completo, como por exemplo a não possibilidade de se forçar fatores de segunda ordem caso não haja qualquer fator principal forçado, pelo princípio da hereditariedade.

Escolheu-se portanto, a realização de quatro fatoriais completos menores, cobrindo os casos possíveis da TABELA 15, sendo os resultados desses quatro delineamentos comparados em sequência lógica. Decidiu-se ainda por fixar alguns dos fatores, atendo-se somente ao caso de $m = 8$ e $SN_ratio = 1$.

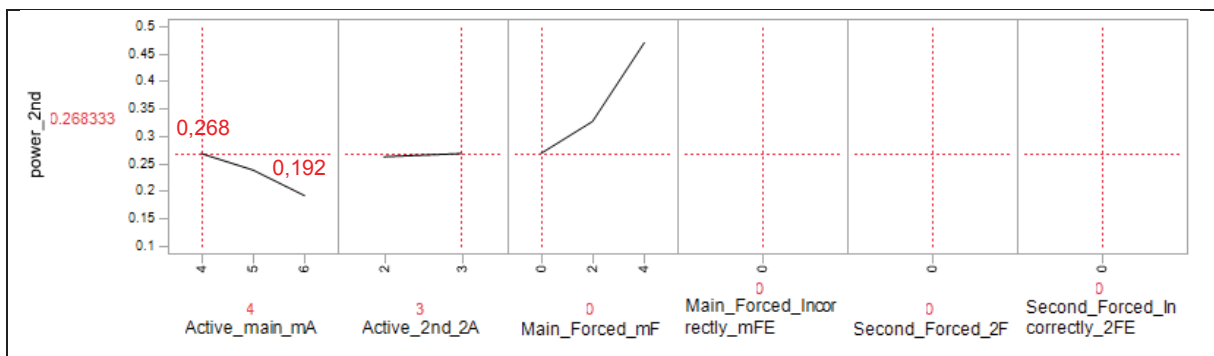
TABELA 15 – FATORES E NÍVEIS PARA SIMULAÇÕES DO MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO, NA AVALIAÇÃO DO PODER PARA DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM

Fatores Variáveis	Níveis		
Fatores principais ativos (mA)	4	5	6
Fatores de segunda-ordem ativos (2A)	2	3	
Fatores principais forçados no modelo (mF)	0	2	
Fatores principais incorretamente forçados no modelo (mFE)	0	2	
Fatores de segunda-ordem forçados no modelo (2F)	0	2	
Fatores de segunda-ordem incorretamente forçados no modelo (2FE)	0	1	
Fatores Fixos	Nível		
Número de fatores (m)	8		
Razão sinal-para-ruído (SN_ratio)	1		
Inclusão de 2 fatores fakes (mD)	Sim		
Hereditariedade	Sim		

Fonte: O autor (2019).

A FIGURA 34 mostra o resultado do método Fit DSD, ou seja, sem qualquer termo forçado no modelo, sendo três (3) os fatores de segunda ordem ativos. Aqui, o poder de detecção de efeitos de segunda ordem é de 27% quando mA = 4, e 19% quando mA = 6.

FIGURA 34 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO (m=8; SN_ratio=1; mA=4 ou 6; 2A=3; mF=0; mFE=0; 2F=0; 2FE=0)

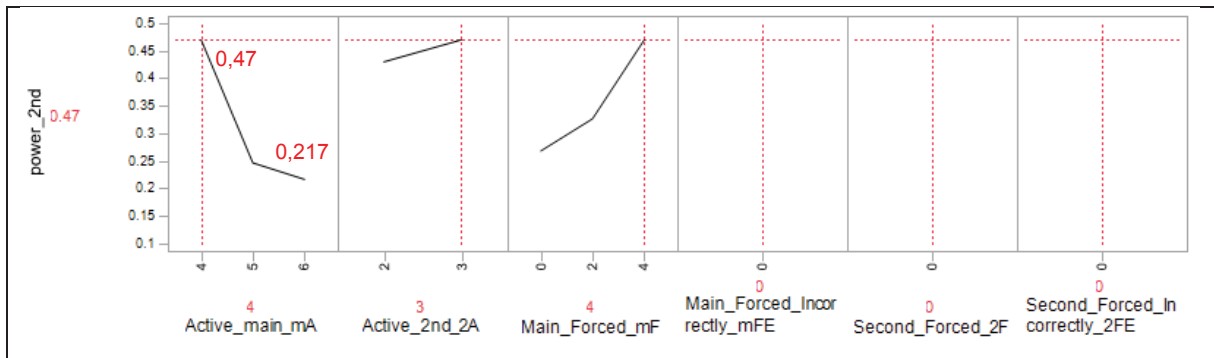


Fonte: O autor (2019).

A FIGURA 35 mostra que apenas forçar efeitos principais de forma correta já acarreta em aumento no poder de detecção de efeitos de segunda ordem, quando são poucos os fatores principais ativos. Aqui, o poder de detecção de efeitos de

segunda ordem passa de 27% quando $mA = 4$ e $mF = 0$ para e 47% quando $mA = 4$ e $mF = 0$. Já para $mA = 6$ e $mF = 4$, nenhum efeito benéfico é obtido, permanecendo o poder baixo, de 22% (vs. 19% quando $mF = 0$).

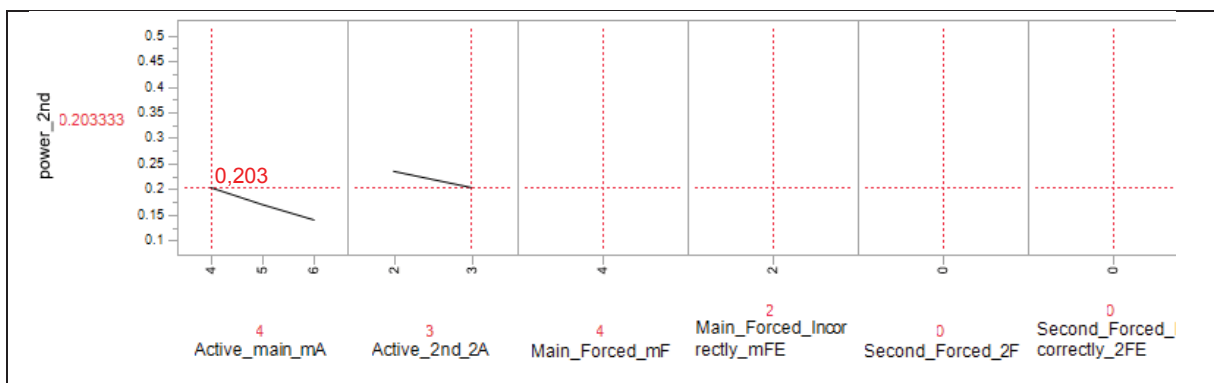
FIGURA 35 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=8$; $SN_ratio=1$; $mA=4$ ou 6 ; $2A=3$; $mF=4$; $mFE=0$; $2F=0$; $2FE=0$)



Fonte: O autor (2019).

A FIGURA 36 mostra que se perde poder na detecção de efeitos ativos de segunda ordem quando dois de quatro fatores principais são forçados de forma incorreta, com poder de 20%, contra 27% quando nenhum dos fatores é forçado ($mF = 4$ e $mFE = 0$) e 20% quando $mF = 4$ e $mFE = 2$.

FIGURA 36 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO ($m=8$; $SN_ratio=1$; $mA=4$; $2A=3$; $mF=4$; $mFE=2$; $2F=0$; $2FE=0$)

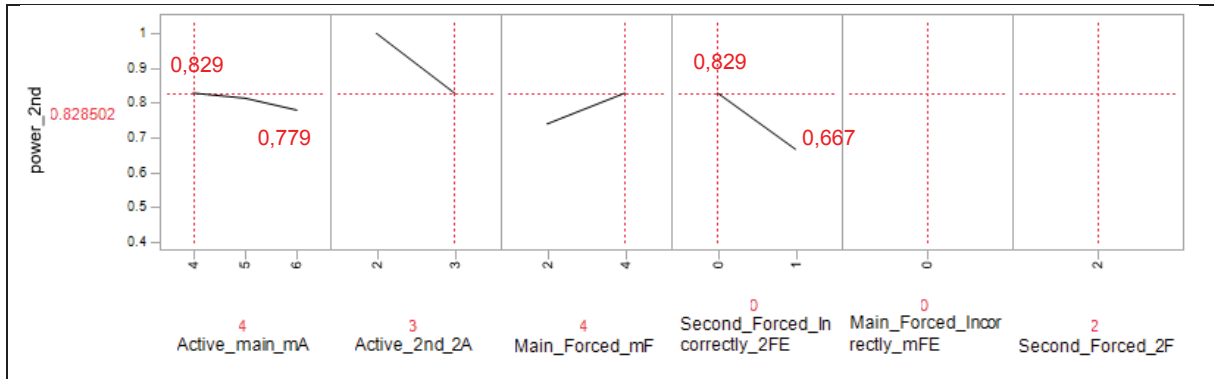


Fonte: O autor (2019).

Passando à simulação de casos em que há introdução forçada de dois (2) fatores de segunda ordem, que dependem, pelo princípio da hereditariedade, da introdução forçada de fatores principais, nota-se incremento no poder para detecção de fatores de segunda ordem. Os poderes mostrados na FIGURA 35 sobem,

respectivamente, de 47% para 83% e de 22% para 78%, modificando-se o parâmetro 2F de zero (0) para dois (2), como ilustrado pela FIGURA 37.

FIGURA 37 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO (m=8; SN_ratio=1; mA=4; 2A=3; mF=4; mFE=2; 2F=0; 2FE=0)



Fonte: O autor (2019).

Sendo somente três os termos de segunda ordem ativos e um dos três termos de segunda ordem forçados de forma incorreta, o poder atinge o valor esperado de 66,7%. Dado que esse caso não representa um notável desafio para o algoritmo Fit DSD com Intervenção Não Interativa, foram adicionalmente simulados casos com 6 fatores de segunda ordem ativos, com dois (2) ou zero (0) fatores de segunda ordem forçados no modelo, e os demais fixos: Fatores principais ativos (mA) = 4; Fatores de segunda-ordem ativos (2A) = 6; Fatores principais incorretamente forçados no modelo (mFE) = 0.

Aqui, nota-se também um moderado incremento de poder para efeitos de segunda ordem, de 26% para 51%. Quando um dos fatores é incorretamente forçado, o poder cai para 41%. Os resultados são exibidos na TABELA 16.

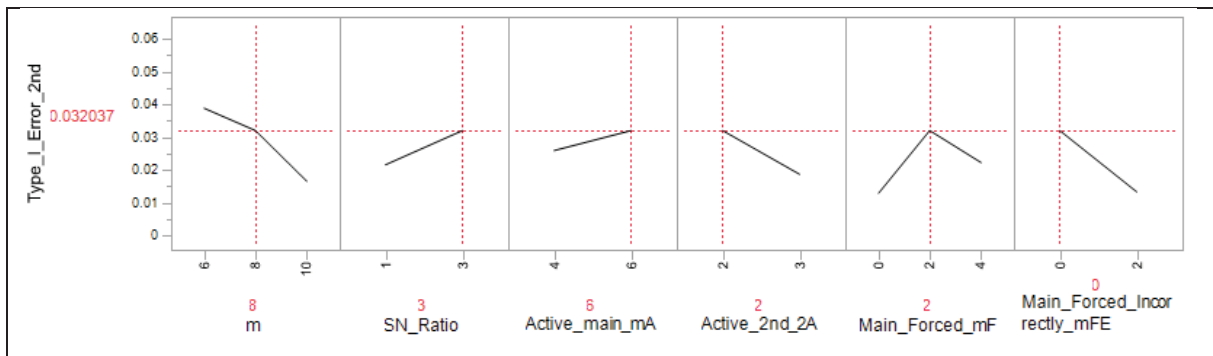
TABELA 16 – RESULTADOS DE SIMULAÇÕES ADICIONAIS DO MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO, NA AVALIAÇÃO DO PODER PARA DETECÇÃO DE EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM

Fatores Variáveis	Níveis		
Fatores principais forçados no modelo (mF)	0	2	2
Fatores de segunda-ordem forçados no modelo (2F)	0	2	2
Fatores de segunda-ordem incorretamente forçados no modelo (2FE)	0	0	1
Poder de detecção de Fatores de Segunda Ordem	26%	51%	41%

Fonte: O autor (2019).

A probabilidade de erro tipo I para fatores de segunda ordem é baixa em todos os cenários, permanecendo sempre abaixo de 0,05, como visto na FIGURA 38.

FIGURA 38 – ERRO TIPO I PARA FATORES DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO (m=10; SN_ratio=1; mA=6; 2A=2; mF=0 ou 4; mFE=0 ou 2)



Fonte: O autor (2019).

4.4.1.3 Método Fit DSD com Intervenção Interativa – Fatores Principais e de Segunda Ordem

Os fatores utilizados para a simulação são dispostos na TABELA 17.

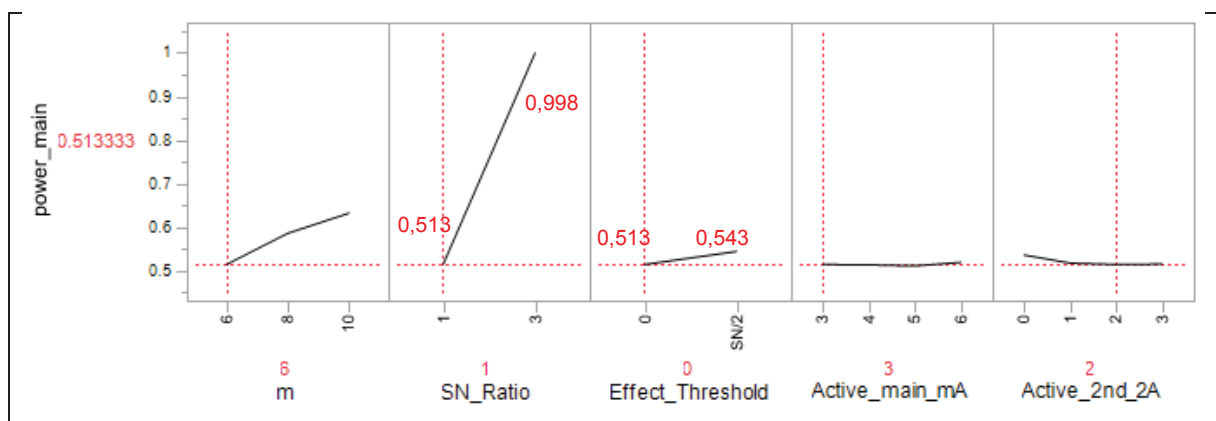
TABELA 17 – FATORES E NÍVEIS PARA SIMULAÇÕES DO MÉTODO FIT DSD INTERATIVO, NA AVALIAÇÃO DO PODER PARA DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS

Fatores Variáveis	Níveis			
Número de fatores (m)	6	8	10	
Razão sinal-para-ruído (SN_ratio)	1	3		
Fatores principais ativos (mA)	3	4	5	6
Fatores de segunda-ordem ativos (2A)	0	1	2	3
Tamanho do efeito considerado para remoção de um fator principal (<i>Effect Threshold</i>)	0	SN_ratio/2		
Fatores Fixos	Nível			
Inclusão de 2 fatores fakes (mD)	Sim			
Hereditariedade	Sim			

Fonte: O autor (2019).

Em relação aos efeitos principais, a FIGURA 39 mostra que a introdução de uma “linha de corte” (*threshold*) do tamanho de efeito para que este seja introduzido no modelo durante a primeira etapa do algoritmo Fit DSD não afeta o poder de detecção de termos em um modelo. Assim como ocorre nas simulações de JONES E NACHTSHEIM, uma razão sinal/ruído de tamanho três (3) torna praticamente certa a introdução de um termo no modelo, mesmo que a linha de corte seja introduzida.

FIGURA 39 – PODER DE DETECÇÃO DE EFEITOS PRINCIPAIS PARA O MÉTODO FIT DSD INTERATIVO (m=6; SN_ratio=1 ou 3; mA=3; 2A=2; mF=0; mFE=0)

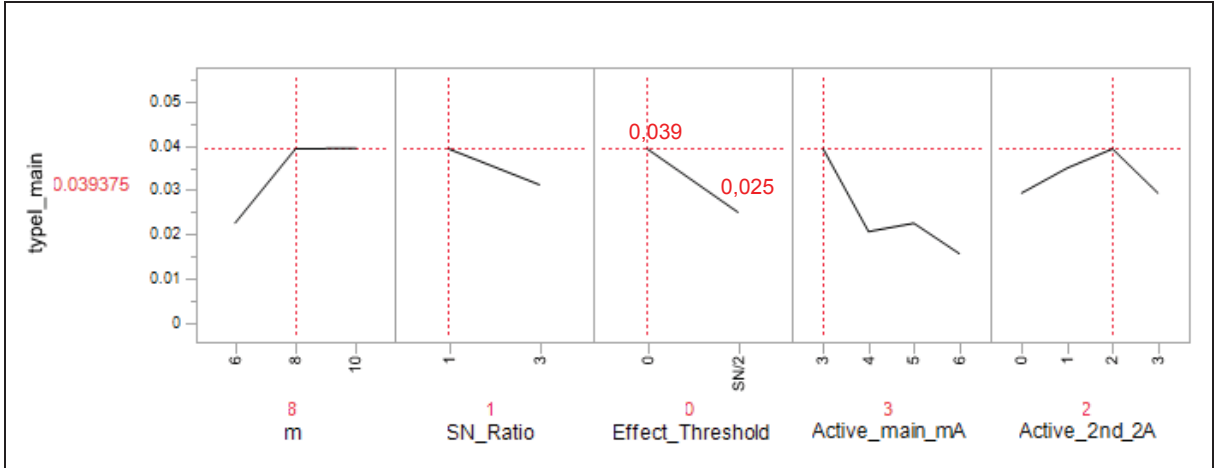


Fonte: O autor (2019).

O método proposto permite ainda uma modesta redução da probabilidade de erro do Tipo I. A FIGURA 40 mostra que, no pior caso, quando o método Fit DSD gera

Erro Tipo I em 4% dos casos, a introdução da linha de corte torna a probabilidade de Erro Tipo I para 2,5%.

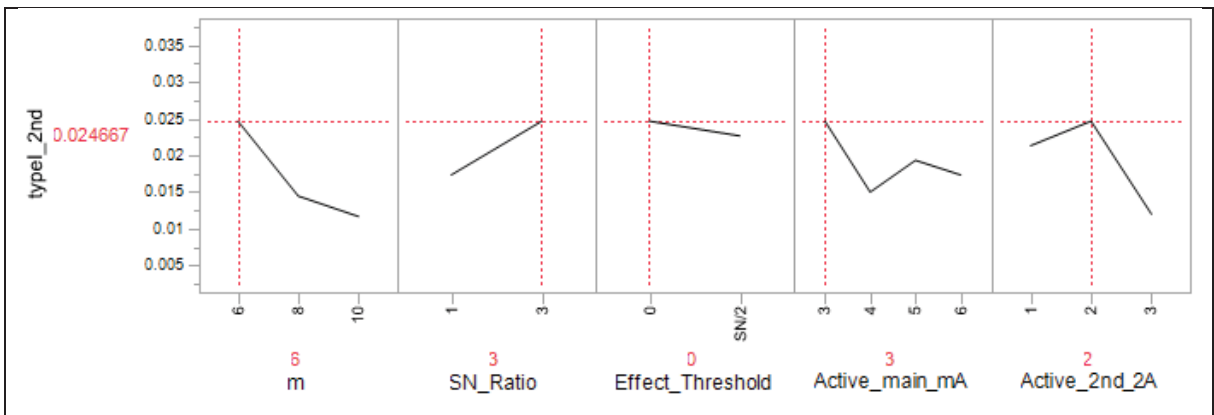
FIGURA 40 – ERRO TIPO I PARA FATORES DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD INTERATIVO (m=8; SN_ratio=1 ou 3; mA=3; 2A=2)



Fonte: O autor (2019).

A FIGURA 41 mostra que a probabilidade de Erro Tipo I para fatores de segunda ordem é baixa em todos os cenários testados, permanecendo sempre abaixo de 0,025.

FIGURA 41 – ERRO TIPO I PARA FATORES DE SEGUNDA ORDEM PARA O MÉTODO FIT DSD NÃO INTERATIVO (m=6; SN_ratio=3; mA=3; 2A=2)



Fonte: O autor (2019).

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O delineamento do tipo DSD foi aplicado com sucesso na otimização de um produto alimentício. Apesar de o método Fit DSD ter incorrido em sobreajuste, duas adaptações ao método foram realizadas para seu aperfeiçoamento, a partir de conhecimento dos pesquisadores de pesquisas anteriores. Ao final, a condução de apenas um experimento permitiu a obtenção de um modelo de superfície de resposta que adequadamente prediz a aceitabilidade média pelos consumidores, o que não é possível de obter-se com delineamentos como o Fatorial Fracionado.

Entre as opções disponíveis do método original e de dois métodos adaptados, foi escolhido o modelo proveniente do método Fit DSD Interativo, em que os efeitos negligenciáveis, porém significativos do ponto de vista estatístico, foram ignorados na primeira etapa, o que eliminou os efeitos de sobre ajuste obtidos pelo método Fit DSD.

Especificamente, descobriu-se que o fator X_2 possui o maior efeito positivo sobre a aceitabilidade global média do produto pelos consumidores. Já X_1 e X_2 interagem de modo que a medida que X_2 , ingrediente, é adicionado o ponto ótimo de X_1 desloca-se para concentrações mais altas. Já o ingrediente X_6 possui efeito negativo na aceitabilidade pelos consumidores. Os efeitos dos ingredientes X_3 , X_4 e X_5 foram considerados nulos.

A nova fórmula pode ser, portanto, modificada com o balanceamento dos níveis de X_1 e X_2 , e fixando os demais em seus mínimos. A nova fórmula possui aceitabilidade global média predita em valor acima da fórmula padrão e com custo 3,3% menor.

Destaca-se ainda a importância para o projeto da utilização de pressupostos de hereditariedade para a obtenção de bom modelo, dos pontos de vista estatístico e prático.

A respeito das adaptações propostas ao método: Fit DSD com Intervenção Interativa; e Fit DSD com Intervenção Não Interativa, os trabalhos de simulação apresentados mostram que intervenções de pesquisadores experientes, baseados em

resultados históricos robustos, trazem benefícios ao método Fit DSD, tanto ao trazer maior poder para detecção de efeitos principais e de segunda ordem, quanto reduzindo as probabilidades de Erro Tipo I.

5.1 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Recomenda-se para estudos subsequentes de otimização do referido produto explorar os ingredientes X_4 e X_5 em valores abaixo de seus mínimos, em busca de redução de custo maior que a já obtida. Os ingredientes X_3 e X_6 , potencialmente novos e que não tiveram efeito positivo nas características sensoriais do produto perante o consumidor, não devem ser adicionados ao produto antes de sofrerem melhorias. O ingrediente X_2 aparenta estar ligeiramente abaixo de seu ponto ótimo, porém como seu nível máximo representa hoje um limite técnico, não é possível estudá-lo em maiores concentrações.

A respeito das adaptações propostas para o método Fit DSD, o código em R encontra-se disponibilizado no apêndice dessa dissertação. O código prescinde de qualquer pacote específico, utilizando apenas o pacote base. Atualmente, este código somente considera análises com fatores contínuos, premissa de hereditariedade e presença de um ponto central, características que podem ser introduzidas por pesquisadores que desejem obter um uso mais generalizado dos novos métodos.

Os métodos propostos são, portanto, recomendados para pesquisadores que desejem utilizar DSD e possuam conhecimento prévio sobre alguns fatores ativos ou de tamanhos de efeito sabidamente negligenciáveis do ponto de vista prático.

Por se tratar de tipo de delineamento de triagem relativamente novo e em constante evolução, recomenda-se o uso do delineamento DSD por pesquisadores de todas as áreas em estudos de triagem que não possuam restrições ao espaço de estudo. Além de possibilitar o estudo de curvaturas em cada fator estudado, e de interações duplas, os benefícios do DSD parecem largamente superar suas limitações.

REFERÊNCIAS

- AKAIKE, H. **Information theory and an extension of the maximum likelihood principle**. In Proceedings of the Second International Symposium on Information Theory, B. N. Petrov and F. Csaki (eds), 267-281, 1973.
- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR ISO 11136: Análise sensorial — Metodologia — Guia geral para condução de testes hedônicos com consumidores em ambientes controlados**. Rio de Janeiro, 2016.
- BOUREKOUA, H.; RÓŻYŁO, R.; BENATALLAH, L.; WÓJTOWICZ, A.; ŁYSIAK, G.; ZIDOUNE, M. N.; SUJAK, A. **Characteristics of gluten-free bread: quality improvement by the addition of starches/hydrocolloids and their combinations using a definitive screening design**, European Food Research and Technology, Volume 244, Issue 2, pp 345–354, 2018.
- BOX, G.; HUNTER, S.; HUNTER, W. **Statistics for Experimenters: design, discovery, and innovation**. 2^a ed. Wiley-Interscience, 2005.
- BOX, G. E. P.; MEYER, D. **An Analysis for Unreplicated Fractional Factorials**, Technometrics, 28:1, 11-18, 1986.
- BOX, G.; WILSON, K. **On the Experimental Attainment of Optimum Conditions**. Journal of the Royal Statistical Society. Series B, 13, 1-45, 1951.
- BREYFOGLE III, F. W. **Implementing Six Sigma – Smarter Solutions Using Statistical Methods**. 2^a ed. Hoboken, NJ: Ed. Wiley, 2003.
- CAMERON, A. C.; WINDMEIJER, F. A. G. **An R-squared Measure of Goodness of Fit for Some Common Nonlinear Regression Models**, Journal of Econometrics 77: 329–342, 1997.
- CHIPMAN, H.; HAMADA, M.; WU, C .F. J. **A Bayesian Variable-Selection Approach for Analyzing Designed Experiments with Complex Aliasing** Technometrics 39(4), p. 372-381, 1997.
- DU, X.; ZHANG, Z.; ZHANG, C.; FU, D., **Definitive screening design applied to electrochemical degradation of Chromotrope 2R with BDD anodes**, Chemosphere, Volume 171, p. 362-369, 2017.
- DUTCOSKY, S. D. **Análise Sensorial de Alimentos**, 4. Ed. PucPress, Curitiba, 2013.
- ERLER, A.; DE MAS, N.; RAMSEY, P.; HENDERSON, G., **Efficient biological process characterization by definitive-screening designs: the formaldehyde treatment of a therapeutic protein as a case study**, Biotechnology Letters, Volume 35, Issue 3, pp 323–329, 2013.

ERRORE, A.; JONES, B.; LI, W.; NACHTSHEIM, C., **Using Definitive Screening Designs to Identify Active First-and Second-Order**, Journal of Quality Technology, Vol. 49, No.3, 244, 264, Jul 2017.

FIDALEO, M.; LAVECCHIA, R.; PETRUCCI, E.; ZUORRO, A., **Application of a novel definitive screening design to decolorization of an azo dye on boron-doped diamond electrodes**, International Journal of Environmental Science and Technology, 13:3, p 835-842, 2016.

FISHER BOX, J., **R.A. Fisher – The Life of a Scientist** 1978.

HAWKINS, D., **The Problem of Overfitting**. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 2004, 44, 1-12, 2004.

HECHT, E. S.; MCCORD, J. P.; MUDDIMAN, D. C. **Definitive Screening Design Optimization of Mass Spectrometry Parameters for Sensitive Comparison of Filter and Solid Phase Extraction Purified, INLIGHT Plasma N-Glycans** Analytical Chemistry, 87 (14), 7305-7312, 2015.

JONES, B.; NACHTSHEIM, C. **A Class of Three-Level Designs for Definitive Screening in the Presence of Second-Order Effects**, Journal of Quality Technology, Vol. 43, No. 1, 2011.

JONES, B.; NACHTSHEIM, C. **Blocking Schemes for Definitive Screening Designs**, Technometrics, 58:1, 74-83, 2016.

JONES, B.; NACHTSHEIM, C. **Effective Design-Based Model Selection for Definitive Screening Designs**, Technometrics, 59:3, 319-329, 2017.

JONES, L. V.; PERYAM, D. R.; THURSTONE, L. L. **Development of a Scale For Measuring Soldiers' Food Preferences**, Journal of Food Science, 20: 512–520, 1955.

JURAN, J. M.; GODFREY, A. B. **Juran's Quality Handbook**. 5.ed. The McGraw-Hill Companies, New York, 1999.

KALAW, M. E.; SUMABAT, A. K.; NGUYEN, H. T.; DUNGCA, J.; BACANI, F.; CULABA, A.; GALLARDO, S.; PROMENTILLA, M. A. **Using Definitive Screening Design to Assess Factor Significance on the Compressive Strength and Volumetric Weight of a Ternary Blend Geopolymer**, Proceedings of the DLSU Research Congress Vol. 3, 2015.

KAUFFMAN, K. J.; DORKIN, J. R., YANG, J. H., HEARTLEIN, M. W., DEROSA, F.; MIR, F. F., FENTON, O. S.; ANDERSON, D. G. **Optimization of Lipid Nanoparticle Formulations for mRNA Delivery in Vivo with Fractional Factorial and Definitive Screening Designs**, Nano Letters, 15 (11), 7300-7306, 2015.

KUHN, T.S. **The Structure Of Scientific Revolutions**, 3^a Ed. The University of Chicago Press, Chicago, 1996.

LARKSI, S. **The Problem of Model Selection and Scientific Realism**, London School of Economics, 2012.

LI, X.; SUDARSANAM, N.; FREY, D. D. **Regularities in Data from Factorial Experiments**, *Complexity* 11(5), pp. 32-45, 2006.

LIBBRECHT, W.; DERUYCK, F.; POELMAN, H.; VERBERCKMOES, A.; THYBAUT, J. DE CLERCQ, J.; VAN DER VOORT, P., **Optimization of soft templated mesoporous carbon synthesis using Definitive Screening Design**, *Chemical Engineering Journal*, Volume 259, Pages 126-134, 2015.

LIM, J. **Hedonic Scaling: A Review of Methods and Theory, Food Quality & Preference** Volume 22, Issue 8, 733-74, 2011.

LIN, D. K. J. **A New Class of Supersaturated Designs**, *Technometrics*, 35:1, P. 28-31, 1993.

LIN, C. Y.; **Construction and selection of the optimal balanced blocked definitive screening design**, *Metrika*, Volume 78, Issue 4, P. 373-383, 2015.

LIN, C.Y.; YANG, P., **Response Surface Methodology Using Split-Plot Definitive Screening Designs**, *Journal of Quality Methodology*, Volume 47, Issue 4, P. 351-362, 2015.

MACFIE, H. J.; BRATCHELL, N.; GREENHOFF, K.; VALLIS, L. V. **Designs to Balance the Effect of Order of Presentation and First-Order Carry-Over Effects in Hall Tests** *Journal of Sensory Studies* 4(2), P. 129-148, 2007.

MEILGAARD, M.; CIVILLE, G. V.; CARR, T. B. **Sensory Evaluation Techniques**. 5^a ed. Boca Raton, FL, CRC Press, 2007.

MEYER, P. L. **Probabilidade: Aplicações à Estatística**, 2^a ed, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, RJ, 1983.

MILLER, A.; SITTER, R. R. **Using Folded-Over Nonorthogonal Designs**. *Technometrics*, 47:4, 502-513, 2005.

MONTGOMERY, D. C. **Design and Analysis of Experiments**. 7.ed. Hoboken, NJ: Ed. Wiley, 2009.

MONTGOMERY, D. C.; PECK, E. A.; Vining, G. G. **Introduction to Linear Regression Analysis**. 4.ed. Hoboken, NJ: Ed. Wiley, 2006.

R CORE TEAM. **R: A Language and Environment for Statistical Computing**. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>, 2019.

RESURRECCION A. V. A. **Consumer Sensory Testing for Product Development**. Gaithersburg, MD: Aspen Publishers, 1998.

ŞAHİN, Y. B.; DEMİRTAS, E. A.; BURNAK, N. **Mixture Design: A Review of Recent Applications in the Food Industry**. Pamukkale University journal of Engineering 22(4), 297-304, 2015.

SAILER, O. **Latin Squares for Constructing "Williams Designs", Balanced for First-order Carry-over (Residual) Effects**, disponível em <<http://statpages.info/latinsq.html>> Acesso em 29 jan. 2019.

SAS INSTITUTE INC. **JMP®, Version 14.0 Pro**, Cary, NC, SAS Institute Inc., 2018.

SAS INSTITUTE INC. **JMP® 14 Design of Experiments Guide**, Cary, NC, SAS Institute Inc., 2018.

SAS INSTITUTE INC. **JMP® 14 Profilers**, Cary, NC, SAS Institute Inc., 2018.

SATTERTHWAITE, F. E. **Random Balance Experimentation**, Technometrics, 1:2, 111-137, 1959.

SCHWARZ, G. **Estimating the Dimension of a Model**, The Annals of Statistics, 6:2, p. 461-464, 1978.

SHAPIRO, S. S.; WILK, M. B. **An analysis of variance test for normality (complete samples)**, Biometrika. 52 (3-4): 591-611, 1965.

SULLIVAN, G. M.; FEINN, R. **Using Effect Size—or Why the P Value Is Not Enough**. *Journal of Graduate Medical Education*: September 2012, Vol. 4, No. 3, pp. 279-282, 2012.

TAI, M.; LY, A.; LEUNG, I.; NAYAR, G., **Efficient high-throughput biological process characterization: Definitive screening design with the Ambr250 bioreactor system**, Biotechnology Progress, 31:5, p. 1388-1395, 2015.

VAN HEUGTEN, A.J.P.; BRAALAB, C.L.; VERSLUIJS-HELDERC, M.; VROMANS, H., **The influence of cetomacrogol ointment processing on structure: A definitive screening design**, European Journal of Pharmaceutical Sciences Volume 99, 1 p. 279-284, 2017.

WILLIAMS, E. J. **Experimental designs balanced for the estimation of residual effects of treatments**. *Australian Journal of Scientific Research*, Ser. A 2, 149-168, 1949.

XIAO, L.; D. K. J. LIN; F. BAI. **Constructing definitive screening designs using conference matrices**. *J. Quality Technology*, 44, 2-8, 2012.

ZHANG, C.; CHEN, W.; XIANA, J.; FU, D., **Application of a novel definitive screening design to in situ chemical oxidation of acid orange-II dye by a Co²⁺/PMS system**, The Royal Society of Chemistry RSC Adv., 2018, 8, p. 3934-3940, 2018.

APÊNDICE 1 – CÓDIGOS UTILIZADOS, EM R

Códigos em R:

- Função Fit_DSD: para uso do método Fit DSD e suas adaptações propostas: Fit DSD com Intervenção Interativa e Fit DSD com Intervenção Não Interativa;
- Função simgrid: Para realização de trabalhos de simulação como os realizados na seção 4.4.
- Demais funções: funções de suporte chamadas pelas funções acima.

```
# Cálculo combinatorial
comb = function(n, x) {
  factorial(n) / factorial(n-x) / factorial(x)
}

# Gera um modelo em forma de texto de um modelo selecionado de um conjunto de
# dados formatado para a função Fit_DSD
modelformula <- function (sel_model, d = DSD_data){
  DSD_data <- d
  colnames(DSD_data) <- gsub(x = names(DSD_data), pattern = "\\.",
                             replacement = ":")
  m <- sum(nchar(names(DSD_data))<4)-1
  nfake <- sum(grepl('Fake', colnames(DSD_data)))
  colnames(DSD_data)[(m+nfake+1):(nfake+(m*2))] <- quadratics(m)

  if(length(sel_model)==0){
    modelformula <- "Y ~ 1"
  } else {
    modelformula <- "Y ~ "
    for (i in 1:length(sel_model)){
      modelformula <- paste0(modelformula,
                             names(DSD_data[c(sel_model[i])]),"+")
    }
    modelformula <- as.formula(substr(modelformula,
                                     1, nchar(modelformula)-1))

    lm(modelformula, data = DSD_data)
  }
  return (modelformula)
}

# Realiza mudança de notação para termos quadráticos de X1:X1 para I(X1^2),
# para que funcionem em fórmulas do R
quadratics <- function (m){
  vec <- c(0)
  for (i in 1:m){
    vec[i] <- paste0("I(X",i,"^2)")
  }
  return(vec)
}

# Extrai Soma de Quadrados de Resíduos por cálculo matricial
rss <- function(Xq, YY, vect){
  XM <- cbind("Intercept" = rep(1), as.matrix(Xq[,vect]))
  if(rcond(XM)>1e-10){
    RRR <- as.vector(YY - XM%%(solve(t(XM)%%XM)%%t(XM)%%YY))%%
    as.vector(YY - XM%%(solve(t(XM)%%XM)%%t(XM)%%YY))
  }
}
```

```

    return(RRR)}else{
      return(Inf)
    }
  }
}

# Cria m nomes de fatores começando com a letra X (X1, X2, ..., Xm)
factor_names <- function(m = 6){
  a <- data.frame("Factor" = c(0), "Effect_Type" = c("Main", "Quadratic",
"Two_Way_Interaction", "Dummy"))
  for (i in 1:m){
    a[i,1] <- paste0("X",i)
    a[i,2] <- "Main"
  }
  return(a)
}

# Cria todos os termos de um RSM com m fatores
full_rsm_factors <- function (m = 6, two_dummy = T){
  a <- factor_names(m)
  if (two_dummy == T){
    a <- rbind(a,c("Fake_1","Dummy")); a <- rbind(a,c("Fake_2","Dummy"))
  }
  for (i in 1:m){
    a <- rbind(a,c(paste0("X",i,":","X",i),"Quadratic"))
  }
  for (i in 1:comb(m,2)){
    a
    rbind(a,c(paste0("X",combn(m,2)[,i][1],":","X",combn(m,2)[,i][2]),"Two_Way_Interact
ion"))
  }
  return(a)
}

# Toma nomes das variáveis à esquerda e à direita de termos de segunda ordem
# que estejam no formato "X_:X_"
right_var <- function(a) substr(a,regexpr(':', a)[1]+1,nchar(a))
left_var <- function(a) substr(a,1,regexpr(':', a)[1]-1)

# Simula uma resposta Y com base em um modelo conhecido
Simulate <- function (m = 6, two_dummy = TRUE, known_coefficients = kc,
                      sd_error = 1){
  design <- Expand_DSDF(m, two_dummy)
  design <- cbind(design,"Y" = rep(0))
  design$Y <- t(known_coefficients %*%
               t(design[,1:(m*2+comb(m,2)+two_dummy*2)])) +
             matrix(rnorm(nrow(design), mean = 0, sd = sd_error),
                   nrow=nrow(design))
  return (design)
}

# Cria uma matriz com o delineamento "expandido", com colunas de quadráticos e
# interações. Depende de um arquivo com delineamentos DSD ("DSD_Designs_F.csv")
Expand_DSDF <- function (m = 6, two_dummy = TRUE){
  rd <- read.csv("DSD_Designs_F.csv", check.names = FALSE)
  rd2 <- rd[(rd$Factors == m & rd$Dummy == two_dummy) == TRUE,]
  rd3 <- Filter(function(x)!all(is.na(x)), rd2)
  rd4 <- rd3 [,-1:-2]
  return(rd4)
}

# Gera a estatística PRESS de qualidade de ajuste
press <- function(X,Y){
  PRESS = 0
  Hat <- X%*%solve(t(X)%*%X)%*%t(X)
  pred_y <- Hat%*%Y
  ei <- Y-pred_y
  for(i in 1:nrow(ei)){
    PRESS = PRESS + ((ei[i]/(1-diag(Hat)[i]))^2)
  }
}

```

```

    }
  return(PRESS)
}

# Gera um modelo real controlando o número de efeitos ativos (principais,
# quadráticos, interações duplas), para trabalhos de simulação
# Saídas:
### [[1]] Texto do modelo na forma "Y ~ X1 + X3 + ..." (para usar em calls)
### [[2]] data.frame com termos, seus efeitos reais e quais desses são
### forçados no modelo
### [[3]] Lista de todos os efeitos ativos
### [[4]] Lista dos efeitos principais forçados no modelo
### [[5]] Lista dos efeitos de segunda ordem forçados no modelo
### [[6]] Indica se foi possível forçar efeitos principais incorretos
### [[7]] Indica se foi possível forçar efeitos de segunda ordem
### [[8]] Indica se foi possível forçar efeitos de segunda ordem incorretos

generate_case_new <- function(m = 6, main = 4, tof = 2, forcedME_C = 3,
                             forcedME_I = 1, forced2nd_C = 2,
                             forced2nd_I = 1, effect_size = 3){
  fake <- 2
  a <- data.frame("Factor" = full_rsm_factors(m,two_dummy=TRUE)[,1],
                 "Effect_Type" = full_rsm_factors(m,two_dummy=TRUE)[,2],
                 "Effect" = rep(0,"ID"=(1:(2*m+comb(m,2)+2)),"Forced"=rep(0))
  # Amostragem dos efeitos principais
  a_main <- sample(1:m, main)
  for (i in 1:main){
    a[a_main[i],3] <- sample(c(effect_size,-effect_size),1)
  }

  # Amostragem dos efeitos de segunda ordem, respeitando hereditariedade
  a_hered <- a[abs(a$Effect)==effect_size & a$Effect_Type=="Main",,1]
  b <- a[(m+1+fake):(m*2)+comb(m,2)+fake),]
  b <- cbind(b,"2nd_candidates"=rep(0))
  for (i in 1:nrow(b)){
    if (left_var(toString(b[i,1])) %in% a_hered &
        right_var(toString(b[i,1])) %in% a_hered){
      b$"2nd_candidates"[i] <- i+m+fake
    } else{
      b$"2nd_candidates"[i] <- 0
    }
  }
  possible2nd <- b[b$"2nd_candidates" > 0,4]
  sampled2nd <- sample(possible2nd, tof)
  for (i in 1:tof){
    a$Effect[sampled2nd[i]] <- sample(c(effect_size,-effect_size),1)
  }

  # Coluna e efeitos inativos
  a <- cbind(a,"Inactive_Eff"=-abs(a[,3])/max(abs(a[,3]))+1)

  # Amostra termos corretamente forçados dentre efeitos principais ativos
  # e envolvidos em termos de segunda ordem
  active_2nd <- a$Factor[a$Effect!=0 & a$Effect_Type!="Main"]

  if(length(active_2nd)==1){
    list_2nd <- unique(c(as.numeric(substr(left_var(active_2nd),2,4)),
                       as.numeric(substr(right_var(as.character(active_2nd)),2,4))))
  }else if(length(active_2nd)==0){
    list_2nd <- NULL
  }else{
    list_2nd <- NULL
    for (i in 1:length(active_2nd)){
      list_2nd[i] <- as.numeric(substr(left_var(active_2nd[i]),2,4))
    }
    for (i in (length(active_2nd)+1):(length(active_2nd)*2)){
      list_2nd[i] <- as.numeric(substr(right_var(as.character

```



```

        (active_2nd[i-(length(active_2nd))]),2,4))
    }
    list_2nd <- unique(list_2nd)
  }

sig_m_not_in_list <- a_main[!a_main %in% list_2nd]
unsig_m <- (1:m)[!(1:m) %in% a_main]
unsig_m_not_in_list <- unsig_m[!unsig_m %in% list_2nd]

if((forcedME_C-forcedME_I) !=0){
  if(length(list_2nd)>=(forcedME_C-forcedME_I)){
    forced_C <- sample(as.character(list_2nd),forcedME_C-forcedME_I)
    a$Forced <- rep(0)
    for (i in 1:(m)){
      a$Forced[as.numeric(forced_C[i])] <- 1
    }else{
      h <- c(as.character(unique(list_2nd)),
            as.numeric(sample(as.character(sig_m_not_in_list),
                              min((forcedME_C-length(list_2nd)-forcedME_I),
                                  length(sig_m_not_in_list))))))
      forced_C <- c(h,sample(unsig_m_not_in_list,
                            forcedME_C-forcedME_I-length(h)))

      a$Forced <- rep(0)
      for (i in 1:(m)){
        a$Forced[as.numeric(forced_C[i])] <- 1
      }
    }
  }
}

# Amostra fatores forçados de forma incorreta, dentre efeitos inativos
notel <- "Forced_Main_Incorrect OK"
if(forcedME_I !=0){
  x <- as.character(a[a$Effect==0 & a$Effect_Type=="Main",]$ID)

  if(!identical(x,character(0))){
    forced_I <- sample(x,forcedME_I)
    for (i in 1:(m)){
      a$Forced[as.numeric(forced_I[i])] <- 1
    }else{
      unselected_main <- a_main[!a_main %in% a$ID[a$Effect_Type=="Main"
                                                & a$Forced==1]]

      forced_I <- sample(unselected_main,forcedME_I)
      notel <- "Forced_Main_Incorrect not possible"
      for (i in 1:(m)){
        a$Forced[as.numeric(forced_I[i])] <- 1
      }
    }
  }
}

# Define os potenciais termos de segunda ordem a forçar no modelo,
# respeitando hereditariedade dentre os fatores principais já forçados
f_hered <- a[a$Forced==1 & a$Effect_Type=="Main",][,1]
b <- a[(m+1+fake):((m*2)+comb(m,2)+fake),]
b <- cbind(b,"Forced2nd_candidates"=rep(0))
for (i in 1:nrow(b)){
  if (left_var(toString(b[i,1])) %in% f_hered &
      right_var(toString(b[i,1])) %in% f_hered){
    b$Forced2nd_candidates[i] <- i+m+fake
  } else{
    b$Forced2nd_candidates[i] <- 0
  }
}

a <- cbind(a,"Potential2nd"=rep(0))
possibleF2nd <- b$ID[b$Forced2nd_candidates > 0]
for (i in 1:nrow(a)){
  a$Potential2nd[possibleF2nd[i]] <- 1
}

```

```

# Amostragem de quais termos de segunda ordem serão forçados
note2 <- "Forced_2nd_Correct OK"
if ((forced2nd_C-forced2nd_I) != 0){
  if(nrow(a[a$Potential2nd==1 & a$Effect_Type!="Main" & a$Effect!=0,])
    >=(forced2nd_C-forced2nd_I)){
    x <- as.character(a[a$Potential2nd==1 & a$Effect_Type!="Main"
      & a$Effect!=0,]$ID)
    forced_2C <- as.numeric(sample(x,forced2nd_C-forced2nd_I))
    note2 <- "Forced_2nd_Correct OK"
    for (i in 1:(forced2nd_C-forced2nd_I)){
      a$Forced[forced_2C[i]] <- 1
    }
  }else{
    note2 <- "Forced_2nd_Correct not possible"
    x = a[a$Potential2nd==1 & a$Effect_Type!="Main" & a$Effect==0,]$ID
    forced_2C <- sample(as.character(x), (forced2nd_C-forced2nd_I))
    for (i in 1:(forced2nd_C-forced2nd_I)){
      a$Forced[as.numeric(forced_2C[i])] <- 1
    }
  }
}

# Amostragem de quais termos de segunda ordem serão incorretamente
# forçados
note3 <- "Forced-I OK"
if (forced2nd_I != 0){
  if(identical(a[a$Potential2nd==1 & a$Effect_Type!="Main"&
    a$Effect_Type!="Dummy" & a$Effect==0 &
    a$Forced==0,]$ID, integer(0))){
    x <- as.character(a[a$Potential2nd==1 & a$Effect_Type!="Main"&
      a$Effect_Type!="Dummy" & a$Effect!=0 &
      a$Forced==0,]$ID)
    forced_2CI <- sample(x,forced2nd_I)
    for (i in 1:(forced2nd_I)){
      a$Forced[as.numeric(forced_2CI[i])] <- 1
    }
  }
  note3 <- "Forced-I Not Possible"
}else{
  x <- as.character(a[a$Potential2nd==1 & a$Effect_Type!="Main"&
    a$Effect_Type!="Dummy" & a$Effect==0 &
    a$Forced==0,]$ID)
  forced_2CI <- sample(x,forced2nd_I)
  for (i in 1:(forced2nd_I)){
    a$Forced[as.numeric(forced_2CI[i])] <- 1
  }
  note3 <- "Forced-I OK"
}
}

a$Factor <- as.character(a$Factor)
a$Factor[(m+3):(2*m+2)] <- quadratics(m)

list_active <- a$Factor[a$Effect!=0]
list_forced_main <- a$Factor[a$Forced!=0 & a$Effect_Type=="Main"]
list_forced_2nd <- a$Factor[a$Forced!=0 & a$Effect_Type!="Main"]

modeltext <- "Y ~ "
for (i in 1:nrow(full_rsm_factors(m,F))){
  modeltext <- ifelse(a[i,3]==0,paste0(modeltext,""),
    paste0(modeltext,a[i,1],"+"))
}
modeltext <- as.formula(substr(modeltext, 1, nchar(modeltext)-1))
output <- list(modeltext, a, list_active, list_forced_main,
  list_forced_2nd, note1, note2, note3)
return (output)
}

# Unir arquivos de simulação em uma única pasta chamada sims_merged
# Pasta deve ser criada antecipadamente

```

```

merge.files <- function (where = "./"){
  setwd(where)
  filenames <- list.files(path="./",pattern="*.csv")
  fullpath <- file.path(".",filenames)
  dataset <- do.call("rbind",lapply(filenames,FUN=function(files){
    read.csv(files)}))
  write.csv (dataset, gsub(":", "-", paste0("./sims_merged/SimOutput - ",
    t0,".csv")))
}

# Essa função é a aplicação do algoritmo proposto por B. Jones e
# C. Nachtsheim (2017)
# Atualmente é válido para os casos com o uso de fatores fake e somente um
# ponto central
# Os dados precisam seguir um formato padrão:
# Primeira linha contendo cabeçalhos, demais linhas contendo dados numéricos
# Primeiras m colunas contendo níveis dos fatores principais, nomeados X1,
# X2, ..., Xm
# Próximas duas colunas contendo os níveis dos fatores Fake_1 e Fake_2
# m colunas sequinets contendo fatores quadráticos nomeados X1:X1, ... Xm:Xm
# Demais colunas contendo todas as interações duplas, X1:X2, X1:X3,...,
# X(m-1):Xm
# Última coluna contendo a variável-resposta, nomeada Y
# A função retorna o modelo selecionado pelo algoritmo
# A função atém-se ao artigo de 2017, não realizando a etapa 6 (redução
# de termos não significativos), que pode ser realizada manualmente
# Para utilizar Método Fit DSD: Manter todos os parâmetros no padrão
# Para simular Método Fit DSD Interativo: Utilizar effect > 0
# Para simular Método Fit DSD Não-Interativo: Utilizar effect = 0 e colocar
# valores forçados em forma vetorial, respeitando hereditariedade, número
# de fatores do delimitamento e notação do R para interações e efeitos
# quadráticos. Por exemplo: forced_main = c("X1","X2"),
# forced_2nd = c("I(X2^2)","X1:X2")

Fit_DSD <- function (dataframe, effect = 0, forced_main = NULL,
  forced_2nd = NULL){
  # Manipulação do conjunto de dados
  DSD_data <- dataframe
  colnames(DSD_data) <- gsub(x = names(DSD_data), pattern = "\\.",
    replacement = ":")
  m <- sum(nchar(names(DSD_data))<4)-1
  nfake <- sum(grepl('Fake', colnames(DSD_data)))
  c <- m + nfake
  colnames(DSD_data)[(m+nfake+1):(nfake+(m*2))] <- quadratics(m)

  #Computa estimativa do rmse (case sem pontos centrais adicionais)
  Y <- DSD_data[,ncol(DSD_data)]
  f <- as.matrix(DSD_data[, (m+1):(m+nfake)])
  pf <- (f%%solve(t(f)%*%f))%*%t(f)
  ss <- t(Y)%*%pf%*%Y
  mse <- ss/nfake #mF = 2
  rmse <- sqrt(mse)

  # Seleção do modelo, conforme artigo B. Jones e C. Nachtsheim (2017)
  # Caso 1: n > 2m + 1 (com fatores dummy)

  # Regressão de y na matriz XDF = [D,F] and extração dos valores preditos
  XDF <- as.matrix(DSD_data[,1:(m+nfake)])
  Yme <- XDF%%(solve(t(XDF)%*%XDF))%*%t(XDF)%*%Y

  # Computar resíduos de Yme, a serem usados como variável-resposta para os
  # efeitos de segunda-ordem
  y2nd <- (diag(nrow(XDF)) - XDF%%(solve(t(XDF)%*%XDF)%*%t(XDF))) %% Y

  # Computar os m coeficientes de regressão
  betahatD <- ((solve(t(XDF)%*%XDF))%*%t(XDF)%*%Y)[1:m,]

```

```

# Calcular estatísticas t para os m efeitos principais, usando o rmse como
# estimador da variância
ME_test <- data.frame("Term" = colnames(XDF[,1:m]), "Effect" = betahatD,
                    "Std_Error" = rmse / sqrt(nrow(XDF)-1-nfake),
                    "t_Ratio" = c(0), "p_value" = c(0))
ME_test$t_Ratio <- ME_test$Effect/ME_test$Std_Error
for (i in 1:m){
  ME_test$p_value[i] <- 2*(1-pt(q = abs(ME_test$t_Ratio[i]), df = nfake))
}

All <- ME_test$Term
AME_pv <- ME_test[ME_test$p_value < 0.05,1]
AME_eff <- ME_test[abs(ME_test$Effect) > effect/2,1]
NonSigME_pv <- ME_test[ME_test$p_value >= 0.05,1]
NonSigME_eff <- ME_test[abs(ME_test$Effect) < effect/2,1]

AME <- intersect(AME_pv,AME_eff)
NonSigME <- All[All %in% AME == FALSE]

if(length(forced_main)==0){
  forced_main=NULL
}else{
  for (i in 1:length(forced_main)){
    if (forced_main[i] %in% AME == FALSE){
      AME[length(AME)+1] <- forced_main[i]
    }
  }
}

AME <- sort(AME)
NonSigME <- All[All %in% AME == FALSE]
mME <- length(AME)

if (length(AME) == 0){
  sel_model <- modelformula(NULL, d = DSD_data)
  return(sel_model)
}

# Nova estimativa do rmse (após pool dos termos não significativos
# com fatores dummy)
if (length(NonSigME) > 0){
  vecmain <- as.vector(c(0))
  for (i in 1:length(NonSigME)){
    vecmain[i] <- as.numeric(substr(NonSigME[i],2,3))
  }
  vecmain <- append(vecmain, c(m+1,m+2))
  pooledF <- as.matrix(DSD_data[,vecmain])
  pooledpf <- (pooledF%*%solve(t(pooledF)%*%pooledF))%*%t(pooledF)
  newss <- t(Y)%*%pooledpf%*%Y
  newmse <- newss/(length(vecmain))
  newrmse <- sqrt(newmse)
  nie <- nfake + length(NonSigME)
} else {
  newmse <- mse
  newrmse <- rmse
  nie <- nfake
}

vec <- as.vector(c(0))
for (i in 1:((m*2)+comb(m,2)+nfake)){
  if (left_var(toString(full_rsm_factors(m)[i,1])) %in% AME &
      right_var(toString(full_rsm_factors(m)[i,1])) %in% AME){
    vec[i] <- i
  } else{
    vec[i] <- 0
  }
}
sigs <- full_rsm_factors(m)[vec!=0,]
}

```

```

#Manipulação para identificação de termos selecionados
n2ot <- mME + ifelse(is.nan(comb(mME,2)),0,comb(mME,2))
Xq <- DSD_data[,vec, drop = FALSE]
Xq_index <- rep(0,n2ot)
Xq_index_forced <- rep(0,length(forced_2nd))
for (i in 1:n2ot){
  Xq_index[i] <- which (names(DSD_data) == names(Xq)[i])
}

if (length(forced_2nd) == 0){
  must_be_in <- NULL
  start_2nd <- 1

}else{
  for (i in 1:length(forced_2nd)){
    Xq_index_forced[i] <- which (names(DSD_data) == forced_2nd[i])
  }
  must_be_in <- which (Xq_index %in% Xq_index_forced)
  start_2nd <- length(forced_2nd)
}

# Teste F para modelo com efeitos principais, que determina se o algoritmo
# segue para os termos de segunda-ordem
TSS <- t(y2nd)%*%y2nd
Fstat <- (TSS/c)/newmse

# Se teste F não é rejeitado, parar e ficar com modelo somente com
# efeitos principais, a não ser que haja fatores de segunda-ordem forçados
if(pf(Fstat, c, df2 = nfake, lower.tail = F) > 0.2 &
  length(forced_2nd) == 0){
  sel_model <- which (names(DSD_data) %in% AME == TRUE)
} else {
  #Se teste F é rejeitado, seguir para seleção guiada de subsets
  sel_model <- which (names(DSD_data) %in% AME == TRUE)
  #Máximo número de termos de segunda ordem para tentativas de 'all subsets'
  ceiling <- ifelse(mME <= 3, ceiling <- n2ot, ceiling <- c/2)

Time0 <- Sys.time()
note4 <<- "OK"
for (i in start_2nd:ceiling){
  RSS <- Inf
  # Usar todas as combinações (solos, depois pares pares, depois
  # trios etc.)
  a <- combn(1:n2ot, i)
  # Remover todas as combinações não contendo termos forçados
  if (!is.null(forced_2nd)){
    pick_col <- NULL
    for (k in 1:ncol(a)){
      if ((must_be_in %in% a[,k])%*%(must_be_in %in% a[,k])==
        length(forced_2nd)){
        pick_col[k] <- k
      }
    }
    pick_col <- na.omit(pick_col)
  }
  a <- a[,pick_col, drop=F]
}

# Com as combinações disponíveis, rodar todos os modelos
# possíveis (all subsets) e ficar com aquele de menor
# soma de quadrados dos resíduos (RSS)
for (j in 1:ncol(a)){
  cand_rss <- rss(Xq, YY = y2nd, as.vector(a[,j]))
  if(cand_rss<RSS){
    RSS <- cand_rss
    model <- as.vector(a[,j])
    new_terms <- model
    Fval <- (RSS/(c-i))/newmse
  }
}

```

```

    }
  }
  # Parar o código quando o teste F não for rejeitado
  if (pf(Fval, c-i, df2 = nie, lower.tail = F) > 0.2) { break
  }
}
# Selecionar o modelo com o maior número de termos e menor RSS
sel_model <- c(sel_model,Xq_index[new_terms])
}
selected <- modelformula(sel_model, d = DSD_data)
return (summary(lm(selected, data = DSD_data)))
}

#####
#
# Função simgrid simula resultados de DSD a partir de arquivo DSD_Sims.csv
# (no diretório de trabalho) contendo parâmetros para a simulação na seguinte
# ordem, numéricos exceto quando indicado entre parênteses:
# Núm. Simulação;m;two_dummy(TRUE ou FALSE);SN_Ratio;Effect_Size;sd_error;
# Effect_Threshold;Active_main_mA;# Active_2nd_2A;Main_Forced_mF;
# Main_Forced_Incorrectly_mFE;Second_Forced_2F;Second_Forced_Incorrectly_2FE;
# Label (Texto Identificador da simulação)
# Esse algoritmo pega um vetor de parâmetros de simulação de um arquivo CSV,
# gera um caso aleatório conforme tais parâmetros (modelo real: true model)
# e simula dados de forma aleatória, conforme SN_ratio
# O algoritmo Fit DSD é aplicado e seu modelo final é comparado ao modelo
# real, gerando um arquivo com os resultados
# Para simular Método Fit DSD: Manter todos os parâmetros forçados e
# Threshold em ZERO
# Para simular Método Fit DSD Interativo: Manter todos os parâmetros forçados
# em ZERO e Threshold > 0
# Para simular Método Fit DSD Não-Interativo: Manter Threshold em ZERO e
# definir parâmetros forçados de forma que se permita atender o pressuposto
# de hereditariedade forte
#
simgrid <- function (start = 1, end = 4, file = 'DSD_Sims.csv', output =
  "simFitDSD.csv"){
  case <- read.csv(file, na.strings = "NULL")
  results <- case[start:end,]
  for (i in 1:(end-start+1)){
    m <- results$m[i]
    two_dummy <- results$two_dummy[i]
    main <- results$Active_main_mA[i]
    tof <- results$Active_2nd_2A[i]
    tmc <- full_rsm_factors(m=m, two_dummy = two_dummy)
    SNR <- results$SN_Ratio[i]
    forcedME_C <- results$Main_Forced_mF[i]
    forcedME_I <- results$Main_Forced_Incorrectly_mFE[i]
    forced2nd_C <- results$Second_Forced_2F[i]
    forced2nd_I <- results$Second_Forced_Incorrectly_2FE[i]
    tmc[((m+1+two_dummy*2):(2*m+two_dummy*2)),1] <- quadratics(m = m)
    this_sim <- generate_case_new (m = m, main = main, tof = tof,
      forcedME_C = forcedME_C, forcedME_I =
      forcedME_I, forced2nd_C = forced2nd_C,
      forced2nd_I = forced2nd_I,
      effect_size = SNR)

    true_model <- this_sim[[2]][,3]
    tmc[,3] <- data.frame("Effect" = true_model)
    forcedME <- this_sim[[4]]
    forced2 <- this_sim[[5]]
    note1 <- this_sim[[6]]
    note2 <- this_sim[[7]]
    note3 <- this_sim[[8]]

    #Parameteros para Fit_DSD
    sim <- Simulate(m = results$m[i], two_dummy = TRUE, known_coefficients =
      true_model, sd_error = results$sd_error[i])
    forcedME <- if(identical (forcedME, character(0)) == TRUE){NULL

```

```

}else{unlist(strsplit(as.character(forcedME), split=" "))}
forced2 <- if(identical (forced2, character(0)) == TRUE){NULL}
}else{ unlist(strsplit(as.character(forced2), split=" "))}

final_model <- Fit_DSD(dataframe = sim,
                      effect = results$Effect_Threshold[i],
                      forced_main = forcedME, forced_2nd = forced2)

if (final_model[1] == "Y ~ 1"){
  selected_terms <- NULL
} else {
  selected_terms <- gsub("`", "", attr(final_model$terms, "term.labels"))
}

n_terms_selected <- length(selected_terms)
n_terms_full <- m*2+comb(m,2)
n_terms_true <- length(tmc[,3][tmc[,3]!=0])
n_main_true <- length(tmc[1:m,3][tmc[1:m,3]!=0])
n_quad_true <- length(tmc[(m+1):(2*m),3][tmc[(m+1):(2*m),3]!=0])
n_inter_true <- length(tmc[(2*m+1):n_terms_full,3]
                      [tmc[(2*m+1):n_terms_full,3]!=0])
true_prop <- n_terms_true / n_terms_full
sim_summary <- data.frame("Term" = tmc[,1], "Effect_Type" = tmc[,2],
                        "Full" = "1", "True" = abs(tmc[,3])/
                        max(abs(tmc[,3])), "Selected" = 0,
                        "Right_1" = 0, "Right_0" = 0, "Wrong_0" = 0,
                        "Wrong_1" = 0, "Right" = 0, "Wrong" = 0)

#Inclui vetor de termos selecionados
for (j in 1:(n_terms_full+two_dummy*2)){
  if (tmc[,1][j] %in% selected_terms){
    sim_summary$Selected[j] <- 1
  }
}

#Computar Right_1 (Efeitos ativos e corretamente selecionados)
sim_summary$Right_1 <- (sim_summary$True * sim_summary$Selected)

#Computar Right_0 (Efeitos inativos e corretamente não selecionados)
for (j in 1:(n_terms_full+two_dummy*2)){
  if (sim_summary$True[j] == 0 & sim_summary$Selected[j] == 0){
    sim_summary$Right_0[j] <- 1
  }
}

#Computar Right (Total de acertos)
sim_summary$Right <- sim_summary$Right_1 + sim_summary$Right_0

#Computar Wrong_0 (Efeitos inativos e incorretamente selecionados)
sim_summary$Wrong_0 <- pmax(sim_summary$Selected - sim_summary$True, 0)

#Computar Wrong_1 (Efeitos inativos e corretamente não selecionados)
sim_summary$Wrong_1 <- pmax(sim_summary$True - sim_summary$Selected, 0)

#Computar Wrong (Total de erros)
sim_summary$Wrong <- sim_summary$Wrong_1 + sim_summary$Wrong_0

sim_summary <- sim_summary[sim_summary$Effect_Type!="Dummy",]

#Computar sensibilidade, especificidade e proporção de corretos
sensitivity <- sum(sim_summary$Right_1)/sum(sim_summary$True)
specificity <- sum(sim_summary$Right_0)/(n_terms_full -
                                       sum(sim_summary$True))
prop_correct <- sum(sim_summary$Right)/n_terms_full

#Computar poder e Erro Tipo I, por tipo de termo
if (final_model[1] != "Y ~ 1"){

```

```

power_main <- sum(attr(terms(final_model), "term.labels")
  %in% tmc$Factor[tmc$Effect!=0 &
    tmc$Effect_Type=="Main"])/main
power_int <- sum(attr(terms(final_model), "term.labels")
  %in% tmc$Factor[tmc$Effect!=0 &
    tmc$Effect_Type=="Two_Way_Interaction"])/
  length(tmc$Factor[tmc$Effect!=0 &
    tmc$Effect_Type=="Two_Way_Interaction"])
power_quad <- sum(attr(terms(final_model), "term.labels")
  %in% tmc$Factor[tmc$Effect!=0 &
    tmc$Effect_Type=="Quadratic"])/
  length(tmc$Factor[tmc$Effect!=0 & tmc$Effect_Type=="Quadratic"])
typeI_main <- sum(attr(terms(final_model), "term.labels")
  %in% tmc$Factor[tmc$Effect==0 &
    tmc$Effect_Type=="Main"])/m
typeI_int <- sum(attr(terms(final_model), "term.labels")
  %in% tmc$Factor[tmc$Effect==0 &
    tmc$Effect_Type=="Two_Way_Interaction"])/comb(m,2)
typeI_quad <- sum(attr(terms(final_model), "term.labels")
  %in% tmc$Factor[tmc$Effect==0 &
    tmc$Effect_Type=="Quadratic"])/m
adj_rsqr <- final_model$adj.r.squared
}else{
  power_main <- 0
  power_int <- 0
  power_quad <- 0
  typeI_main <- 0
  typeI_int <- 0
  typeI_quad <- 0
  adj_rsqr <- "NA"
}

#Gerar uma linha com os resultados
results[(i),15:29] <- c(sensitivity, specificity, prop_correct,
  adj_rsqr, power_main, power_int, power_quad,
  typeI_main, typeI_int, typeI_quad, note1,
  note2, note3, n_quad_true, n_inter_true)

#Contador de tempo
steps <- difftime(Sys.time(), t0, units = c("secs"))
print(c(as.integer(i), steps))
}

write.csv(results, file= output)

return(results)
}

```


APÊNDICE 2 – DADOS BRUTOS DO EXPERIMENTO EGH102

Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG
C1	151	7	C26	498	8	C51	948	7	C76	269	7	C101	706	8	C126	326	4
	498	7		647	4		514	6		806	6		514	4		647	2
	647	6		546	8		269	4		706	4		806	6		706	7
	915	5		831	6		724	6		915	6		250	6		915	9
	724	7		250	5		185	6		151	8		915	7		948	9
	269	2		269	4		706	5		582	8		185	8		546	8
	326	7		151	5		250	7		514	8		582	7		185	6
	806	3		185	9		498	5		831	8		498	3		514	8
	582	6		806	5		582	8		326	8		326	8		806	4
	514	5		724	5		682	5		185	4		831	7		151	1
	546	7		582	6		546	7		546	8		682	5		250	8
	379	1		706	4		915	8		724	2		647	6		498	7
	948	7		379	5		326	8		250	8		546	6		269	6
	706	1		326	5		151	7		498	8		379	1		682	4
	682	5		682	4		806	5		682	7		269	5		831	8
	831	9		915	5		379	4		948	8		724	3		582	7
	185	4		948	6		647	2		379	2		151	2		724	6
	250	8		514	7		831	5		647	2		948	7		379	7
C2	706	7	C27	514	8	C52	250	8	C77	582	7	C102	647	7	C127	915	2
	831	8		948	4		185	1		831	5		379	7		185	8
	379	6		915	7		582	4		915	1		831	9		831	4
	250	8		682	8		269	2		185	8		724	7		706	6
	514	9		326	8		546	6		806	1		498	7		546	5
	185	7		379	2		948	8		724	2		948	8		151	4
	806	7		706	4		326	2		269	3		185	9		682	6
	682	6		582	8		514	4		498	8		151	9		582	7
	269	8		724	6		806	6		706	2		250	6		724	6
	948	4		806	8		724	2		948	7		269	4		379	5
	915	8		185	8		647	4		151	3		514	9		948	5
	546	6		151	8		706	4		647	1		546	8		806	5
	498	6		269	8		831	6		514	8		706	4		326	5
	582	7		250	8		498	3		379	3		682	2		250	6
	151	5		831	8		379	3		326	7		806	5		647	7
	326	7		546	5		682	8		682	1		326	6		498	6
	647	2		647	6		151	3		546	2		915	2		269	6
	724	6		498	6		915	7		250	6		582	8		514	4
C3	806	4	C28	706	6	C53	151	6	C78	706	8	C103	379	3	C128	250	6
	514	1		326	2		379	1		269	8		724	7		498	2
	269	1		724	6		915	7		151	7		647	8		806	2
	379	3		915	8		831	6		806	9		948	9		514	6
	915	7		185	8		682	6		514	8		831	8		379	1
	706	1		514	8		647	6		915	8		151	9		269	2
	498	3		269	2		498	6		326	7		498	6		582	8
	831	7		948	8		806	6		582	8		269	4		647	2
	151	7		831	8		706	6		546	7		185	7		151	6
	250	8		682	2		326	6		831	8		546	8		326	5
	647	1		647	2		724	4		250	8		250	7		706	1
	185	9		379	2		546	6		185	8		682	4		948	6
	724	7		498	8		514	6		682	8		514	5		185	8
	682	1		582	8		582	6		724	8		326	1		724	2
	326	8		546	8		948	6		379	7		706	1		915	5
	948	9		806	2		250	5		498	8		582	5		682	1
	582	9		250	8		269	3		647	6		806	1		831	6
	546	7		151	8		185	8		948	8		915	3		546	5
C4	724	2	C29	326	8	C54	915	3	C79	682	2	C104	498	7	C129	582	7
	647	5		915	8		151	5		250	9		831	8		379	2
	326	1		706	6		682	2		379	5		185	7		151	5
	151	9		514	5		379	4		546	5		647	3		806	8
	582	3		724	6		498	8		647	5		250	8		706	1
	498	8		948	1		831	5		326	5		379	7		250	8
	546	6		185	1		706	4		948	8		514	6		185	5
	915	2		682	1		647	5		514	8		724	3		498	6
	948	8		269	4		724	6		498	8		706	5		915	5
	269	9		379	3		806	5		151	8		948	7		514	5
	682	1		831	2		514	8		724	5		806	5		831	8
	806	8		582	5		326	6		706	5		151	5		269	1
	185	8		647	7		948	6		185	8		915	5		546	6
	514	7		806	7		546	8		269	4		269	7		647	8
	250	2		498	8		269	4		831	8		582	7		682	6
	379	1		151	6		582	8		806	4		546	5		326	5
	831	7		546	7		185	5		582	8		326	5		724	7

Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG
	706	1		250	2		250	6		915	4		682	5		948	2
C5	498	7	C30	582	8	C55	514	7	C80	806	3	C105	724	6	C130	546	8
	915	7		806	2		682	1		915	6		948	8		831	7
	151	4		379	5		948	5		269	4		379	4		682	6
	269	8		151	9		806	4		582	8		151	3		915	8
	647	8		682	8		269	3		706	3		647	2		724	3
	806	4		250	5		706	1		831	8		269	6		185	8
	724	7		948	8		498	6		151	2		831	6		948	6
	514	8		546	8		915	5		185	1		546	4		706	5
	326	8		514	5		724	4		514	1		498	6		326	7
	379	9		498	8		379	5		724	4		682	2		151	8
	582	4		915	8		326	3		326	7		185	7		647	5
	706	2		647	5		250	5		498	6		326	6		582	7
	546	6		326	8		582	5		546	9		250	7		269	4
	831	7		831	8		185	5		948	6		582	9		379	3
	948	7		706	5		831	5		250	9		514	6		514	6
	250	3		269	5		647	5		647	4		915	2		806	3
	682	2		724	5		151	4		682	4		706	1		498	8
	185	8		185	8		546	4		379	7		806	4		250	8
C6	326	7	C31	806	6	C56	185	2	C81	379	4	C106	831	5	C131	185	8
	724	3		151	8		647	3		682	3		647	2		706	5
	582	8		582	5		250	9		647	5		498	9		915	8
	647	3		250	1		546	6		250	8		379	5		151	9
	546	9		379	1		379	1		948	2		185	9		831	5
	151	4		546	3		151	3		546	7		724	2		582	5
	948	8		682	9		915	8		498	7		250	8		546	8
	498	7		498	9		831	9		326	5		948	9		379	5
	682	2		948	7		706	1		724	4		514	8		682	5
	915	4		647	1		582	9		514	4		151	8		806	8
	185	4		514	9		806	7		185	2		706	2		724	5
	269	1		831	8		326	9		151	2		269	1		250	5
	250	6		915	3		682	7		831	5		806	2		948	5
	806	1		269	6		724	6		706	2		546	5		498	8
	831	7		326	8		514	9		582	4		915	1		326	8
	514	8		185	8		498	7		269	1		682	1		514	9
	706	2		706	1		948	6		915	5		582	9		647	5
	379	2		724	7		269	7		806	5		326	9		269	5
C7	250	6	C32	682	3	C57	915	7	C82	498	6	C107	582	5	C132	682	7
	185	8		379	7		379	6		948	7		915	6		546	6
	831	8		948	3		706	7		724	6		326	9		724	4
	682	4		582	5		250	2		647	4		806	1		831	6
	706	4		514	8		806	5		185	5		682	2		948	7
	948	6		806	2		185	8		379	4		706	7		915	7
	379	7		915	1		682	7		831	4		546	6		326	9
	546	6		151	7		647	3		682	2		514	3		185	8
	514	6		326	5		514	2		582	8		269	1		647	6
	582	1		250	7		546	4		250	5		250	3		706	4
	806	7		706	1		948	8		915	6		151	6		269	7
	326	6		546	7		151	8		546	6		185	8		151	8
	269	5		724	6		269	6		806	8		948	9		514	6
	724	7		498	5		831	7		326	5		498	9		582	8
	915	5		185	4		498	7		269	3		724	2		498	9
	647	6		647	2		582	2		514	4		831	9		379	6
	498	5		269	6		724	2		706	3		379	2		250	9
	151	6		831	5		326	7		151	7		647	6		806	5
C8	647	5	C33	151	8	C58	269	7	C83	948	8	C108	326	9	C133	514	6
	151	8		250	8		948	2		647	5		582	4		269	4
	724	3		806	2		498	1		498	9		682	2		498	7
	498	7		546	7		514	2		379	8		915	7		647	2
	326	3		582	8		724	4		724	9		546	7		250	8
	915	4		498	8		682	6		682	8		806	5		326	6
	582	2		379	6		326	4		185	9		269	5		806	7
	269	2		647	6		806	4		250	8		706	3		948	7
	546	2		682	9		582	8		831	9		151	7		379	7
	806	2		831	9		706	4		546	8		514	8		724	7
	948	9		948	8		831	4		582	9		948	4		582	7
	514	9		269	2		915	5		326	8		250	6		682	7
	682	7		514	5		151	4		915	9		724	4		151	7
	379	4		185	9		379	5		514	9		185	8		546	7
	185	6		915	4		546	2		806	5		379	4		706	4
	706	5		724	3		250	4		151	9		498	4		831	7
	250	8		326	7		647	5		269	5		647	1		185	7
	831	7		706	2		185	3		706	2		831	6		915	6

Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG
C9	831	9	C34	379	7	C59	682	5	C84	326	8	C109	948	3	C134	831	9
	250	6		582	8		806	6		514	5		706	5		915	2
	706	1		682	2		514	8		546	8		185	3		546	4
	185	3		806	5		706	1		151	5		326	4		185	2
	379	2		948	7		948	4		250	4		806	7		682	1
	682	1		151	1		915	2		706	2		647	4		706	2
	514	9		514	9		269	6		682	4		250	7		724	7
	948	6		250	8		379	4		269	2		915	6		151	8
	806	4		915	7		498	5		379	4		269	6		948	3
	546	1		546	7		250	4		806	6		546	7		582	4
	269	2		326	4		724	6		647	6		831	7		326	7
	582	9		498	5		185	3		915	8		514	7		379	3
	915	9		706	2		326	6		948	7		724	7		647	4
	326	9		647	1		647	2		582	8		151	7		806	3
	498	1		724	7		582	5		498	6		379	7		269	5
	724	8		831	2		546	7		831	9		498	3		250	1
	151	9		185	5		831	2		724	4		582	7		514	6
	647	1		269	4		151	4		185	9		682	2		498	8
C10	514	8	C35	185	3	C60	498	7	C85	514	6	C110	151	8	C135	498	9
	379	5		724	4		269	2		151	7		498	8		514	7
	806	7		269	3		724	3		326	5		514	6		250	8
	706	7		706	5		948	8		706	4		682	5		269	7
	269	8		831	6		326	6		546	6		546	8		806	6
	831	8		326	7		514	6		269	1		582	6		647	2
	915	6		647	6		582	7		250	8		915	7		379	7
	250	8		915	7		682	2		806	6		379	4		326	8
	498	7		498	7		831	5		682	6		647	5		582	8
	185	9		514	4		806	2		915	5		724	6		948	7
	151	7		546	6		151	6		379	4		326	7		151	8
	682	6		948	5		706	1		582	6		831	6		724	3
	647	5		250	7		546	7		647	4		706	5		706	3
	948	6		682	3		915	3		831	1		269	5		682	5
	724	5		151	6		647	2		948	7		948	7		185	6
	546	8		379	2		379	1		185	4		250	6		546	8
	326	8		806	3		185	8		498	6		185	7		915	6
	582	6		582	7		250	7		724	6		806	5		831	8
C11	379	5	C36	269	4	C61	546	1	C86	250	8	C111	915	6	C136	379	7
	706	1		185	6		151	6		546	8		546	8		806	6
	514	6		831	4		647	2		682	8		647	2		582	8
	831	2		724	4		831	4		326	8		514	7		250	8
	806	2		647	3		185	4		379	8		326	6		151	6
	250	4		706	3		582	7		514	8		151	7		498	8
	269	3		498	5		250	8		647	7		706	2		706	6
	185	3		326	7		326	6		151	7		498	8		514	6
	915	2		546	3		379	2		948	6		948	8		185	6
	682	2		915	3		724	4		706	5		682	2		269	6
	498	8		250	5		915	3		498	7		185	7		915	6
	948	4		514	3		498	6		269	4		582	7		647	5
	151	6		151	6		706	2		724	4		806	3		831	5
	546	6		948	6		269	6		806	5		379	2		326	6
	647	9		806	4		806	7		185	7		250	7		546	6
	582	6		682	7		948	8		915	2		724	7		948	6
	724	4		582	8		682	6		831	6		269	6		682	4
	326	4		379	2		514	2		582	4		831	6		724	6
C12	948	9	C37	498	7	C62	948	2	C87	151	6	C112	806	8	C137	806	7
	546	8		682	1		514	7		706	7		185	2		250	6
	682	8		706	2		269	4		514	8		250	6		379	4
	582	8		915	7		682	3		269	6		948	7		498	6
	185	8		724	3		498	2		326	9		269	1		582	6
	326	5		151	7		806	1		806	5		706	1		514	7
	250	6		514	6		724	3		546	7		831	1		151	7
	724	6		379	3		706	3		915	5		326	1		269	3
	831	8		948	7		326	1		250	8		724	9		706	1
	647	5		831	2		915	2		582	8		647	1		647	5
	706	2		269	1		582	6		682	5		379	1		185	6
	151	8		647	1		379	7		831	1		915	1		326	4
	379	7		185	2		831	7		379	6		582	9		915	4
	498	8		806	4		250	7		185	7		546	6		948	5
	514	8		250	6		151	7		647	8		682	6		831	7
	915	4		326	1		185	3		724	6		514	1		724	4
	806	8		582	9		546	2		948	5		498	1		546	6
	269	8		546	3		647	2		498	6		151	7		682	5
C13	546	3	C38	806	3	C63	647	7	C88	546	5	C113	706	5	C138	326	8

Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG
	582	8		326	6		546	7		326	3		326	6		948	4
	948	8		647	4		185	8		250	1		948	7		647	1
	326	3		546	7		151	5		514	2		647	6		724	4
	682	2		831	7		250	7		682	1		185	2		269	4
	724	7		582	4		831	4		151	2		915	7		682	6
	185	8		379	5		379	3		379	3		806	7		514	8
	647	3		250	4		582	8		706	2		546	5		546	6
	250	8		151	3		915	2		647	2		250	5		498	4
	151	7		185	6		326	3		269	4		514	3		831	8
	831	7		915	3		706	3		948	5		269	5		250	8
	498	7		269	3		724	2		806	4		151	5		915	4
	706	7		682	4		806	3		498	5		831	5		806	2
	915	7		948	6		498	5		915	6		498	7		185	8
	379	7		498	6		682	2		724	3		724	4		379	6
	269	8		514	8		269	5		582	6		682	5		706	6
	514	8		706	2		514	8		185	8		379	5		582	8
	806	3		724	4		948	5		831	9		582	5		151	6
C14	185	1	C39	379	5	C64	379	8	C89	185	1	C114	250	8	C139	948	8
	682	5		831	7		250	8		724	3		806	6		724	6
	250	8		151	5		915	8		831	2		269	8		326	6
	948	8		647	2		185	8		498	3		185	4		682	1
	831	4		915	5		706	8		582	6		831	2		647	4
	546	6		806	5		647	8		948	6		948	5		546	8
	706	4		682	3		806	8		915	2		724	8		269	8
	582	3		326	7		546	8		647	1		706	7		831	8
	379	2		498	7		682	8		806	4		379	6		514	1
	326	7		546	6		151	8		379	1		326	3		915	2
	514	8		706	4		514	8		269	1		582	6		498	1
	724	3		582	6		831	8		682	1		647	1		185	8
	806	4		724	5		948	8		706	1		682	7		250	8
	647	3		250	5		582	8		250	7		915	4		706	7
	269	4		514	6		269	8		151	8		498	7		806	4
	151	7		185	6		326	8		546	6		546	1		151	2
	915	6		948	7		498	8		514	5		151	1		379	1
	498	7		269	6		724	8		326	3		514	2		582	8
C15	582	2	C40	724	7	C65	250	9	C90	831	7	C115	682	5	C140	269	6
	326	7		706	7		185	8		185	8		582	6		647	5
	546	7		514	7		379	2		582	5		498	7		514	8
	724	6		498	6		647	3		724	3		379	3		326	4
	948	7		948	8		915	6		915	3		151	8		498	8
	647	7		682	8		546	8		498	5		724	5		948	6
	682	7		269	7		706	4		806	6		514	5		250	7
	151	7		915	8		151	7		948	6		831	7		724	6
	185	7		185	8		806	7		269	3		546	6		806	4
	498	3		151	5		831	8		647	6		269	5		682	4
	250	3		250	7		682	4		706	7		915	6		379	3
	915	2		379	8		582	8		379	3		250	7		546	7
	831	8		582	8		514	9		151	7		647	4		582	7
	269	6		831	7		326	3		682	6		806	6		831	6
	706	8		546	7		948	3		514	7		326	8		151	8
	806	3		647	2		724	3		250	7		185	8		915	7
	379	8		326	5		269	1		326	6		706	3		706	4
	514	6		806	6		498	7		546	7		948	6		185	3
C16	682	7	C41	682	9	C66	582	6	C91	546	9	C116	185	2	C141	724	5
	948	8		915	9		326	7		682	2		948	4		682	2
	185	8		498	9		831	5		269	1		806	5		948	7
	546	4		151	9		724	4		326	6		706	1		546	5
	250	7		706	9		151	3		151	1		250	2		326	8
	582	7		379	9		498	5		582	6		326	2		831	8
	831	8		724	9		546	7		948	5		269	5		647	3
	326	8		831	9		269	4		915	4		647	5		915	8
	706	2		514	9		647	2		724	8		831	7		269	2
	724	6		647	9		948	3		806	1		915	5		185	6
	379	2		948	9		185	6		379	1		724	6		514	8
	647	2		806	9		514	7		706	5		546	7		706	2
	514	8		269	9		250	7		647	2		379	4		498	2
	151	7		326	9		682	4		514	1		514	6		151	5
	806	2		185	9		379	3		831	8		582	6		250	8
	498	7		546	9		806	5		250	8		151	6		582	7
	269	2		250	9		915	6		498	9		682	4		806	2
	915	7		582	9		706	5		185	3		498	7		379	4
C17	269	5	C42	514	7	C67	326	9	C92	514	3	C117	498	3	C142	647	6
	806	5		724	4		724	7		250	4		682	3		326	8

Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG
	915	7		948	8		582	8		706	2		151	8		269	6
	514	9		706	4		498	8		185	3		582	7		948	8
	498	8		269	3		831	8		806	5		514	7		514	8
	379	4		498	6		269	6		498	3		379	5		724	5
	151	8		185	6		151	7		915	8		546	7		498	6
	706	5		682	3		948	6		831	8		724	7		682	5
	647	6		250	4		546	6		582	8		915	7		250	6
	831	7		915	6		514	6		647	4		831	8		546	7
	724	5		582	5		647	6		326	4		647	5		806	5
	250	9		151	5		682	3		379	1		269	5		831	8
	326	6		546	7		185	7		682	6		326	8		379	6
	185	9		379	4		806	4		724	6		250	8		915	6
	582	6		326	8		250	6		546	8		706	2		582	9
	682	2		831	5		706	4		948	7		806	5		185	8
	546	5		806	4		379	4		269	1		948	7		151	7
	948	4		647	2		915	6		151	6		185	5		706	4
C18	915	6	C43	546	8	C68	151	8	C93	915	8	C118	546	7	C143	151	8
	269	3		582	8		831	4		806	2		514	8		582	8
	498	2		326	9		546	3		582	1		915	2		706	7
	806	1		250	8		582	7		706	3		151	7		379	4
	151	8		806	7		647	3		326	8		647	2		185	7
	514	8		185	8		326	1		514	8		498	3		806	6
	647	4		647	4		185	7		682	2		326	7		915	7
	379	6		269	4		724	4		250	8		682	1		250	6
	724	6		831	6		250	6		546	8		706	2		831	6
	706	8		948	8		498	8		185	2		582	6		498	6
	326	8		379	6		379	4		269	2		948	3		546	7
	831	6		514	8		269	3		498	8		379	3		514	7
	582	9		151	6		915	8		151	7		185	8		682	6
	250	6		724	6		948	3		831	8		724	3		269	5
	546	2		915	7		706	4		948	7		806	6		724	5
	185	1		706	4		514	6		647	2		831	3		647	5
	948	6		682	3		806	4		724	4		250	6		948	6
	682	1		498	8		682	4		379	7		269	7		326	5
C19	647	5	C44	706	3	C69	724	7	C94	151	3	C119	514	8	C144	706	3
	831	6		498	1		498	8		269	6		151	2		151	8
	498	5		724	3		326	6		948	8		546	2		185	3
	269	3		682	4		269	7		546	6		498	2		582	8
	546	4		514	9		582	8		724	3		915	2		915	5
	185	6		915	2		948	7		682	3		682	1		379	1
	250	6		948	2		831	6		379	4		647	4		831	7
	724	5		151	6		514	9		326	8		582	8		806	3
	151	3		269	2		151	5		647	4		326	6		546	9
	706	2		379	2		682	1		582	8		379	4		250	6
	806	3		185	1		546	5		831	5		706	1		682	4
	326	5		831	8		806	6		915	8		724	1		498	3
	582	6		250	5		647	2		498	6		948	8		724	5
	915	4		647	1		706	2		806	6		831	7		514	8
	379	5		582	8		185	9		185	8		185	9		948	8
	514	6		806	8		915	6		706	3		269	2		269	3
	682	4		546	3		250	9		250	8		806	4		326	8
	948	5		326	7		379	5		514	8		250	6		647	2
C20	915	6	C45	326	7	C70	831	8	C95	682	4	C120	724	3	C145	250	8
	514	5		546	6		582	8		326	9		831	2		806	5
	326	7		806	2		151	7		546	8		379	7		582	8
	948	5		582	7		326	9		582	9		269	3		379	5
	706	5		647	4		546	6		269	4		582	8		269	5
	682	5		250	6		724	9		915	7		250	8		185	8
	724	5		831	7		647	6		151	8		682	3		151	5
	379	5		185	6		498	9		806	4		806	3		546	5
	185	5		379	1		185	9		948	6		498	3		915	6
	582	5		269	4		269	4		706	4		185	7		498	6
	269	5		151	7		250	9		724	7		151	2		706	4
	806	5		948	6		948	6		514	8		948	7		831	8
	831	6		915	6		379	8		379	7		514	2		514	8
	151	5		514	7		514	9		250	8		706	7		682	5
	647	3		682	2		915	6		647	4		546	8		948	7
	250	5		724	4		682	6		185	9		326	8		647	5
	498	5		498	6		706	4		831	8		915	8		724	6
	546	4		706	2		806	6		498	8		647	7		326	5
C21	724	7	C46	831	8	C71	706	2	C96	948	8	C121	724	7	C146	682	6
	706	7		647	6		915	7		151	5		647	3		647	6
	185	8		379	5		806	8		724	4		326	4		831	8

Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG
	326	6		806	6		379	6		269	9		151	7		326	6
	269	5		151	7		682	8		379	7		582	9		498	6
	915	6		326	8		250	9		546	7		498	5		724	6
	831	6		915	8		514	4		647	5		546	6		546	8
	514	6		546	8		185	8		682	8		915	9		948	7
	647	5		682	2		948	7		831	8		948	3		185	8
	948	6		582	6		647	2		326	5		269	1		514	6
	498	6		498	4		269	4		498	5		682	2		379	2
	682	5		250	6		546	8		582	5		806	4		706	1
	546	6		706	5		498	2		185	8		185	8		806	8
	379	5		185	7		151	8		915	2		514	9		915	7
	250	6		724	3		724	2		250	6		250	8		250	5
	582	6		269	3		831	7		806	6		379	3		151	9
	151	5		514	7		326	6		514	5		831	8		582	8
	806	6		948	7		582	9		706	5		706	2		269	2
C22	546	7	C47	647	9	C72	806	6	C97	185	8	C122	582	4	C147	546	8
	498	6		806	7		706	5		498	8		379	3		498	8
	250	5		831	8		682	6		250	8		682	6		185	6
	647	1		326	5		915	7		831	6		724	6		831	4
	151	2		379	8		514	4		514	6		498	6		379	1
	831	6		546	5		379	6		647	3		831	3		682	4
	806	4		151	8		948	7		706	6		151	7		806	5
	269	5		582	9		250	5		379	6		269	5		647	5
	582	6		915	7		269	5		806	6		514	8		250	9
	185	7		250	8		185	6		724	6		250	5		326	9
	379	2		682	3		498	6		915	9		546	7		582	5
	724	5		185	9		647	4		948	7		806	9		724	1
	682	3		498	7		724	6		582	6		915	5		269	5
	706	6		269	7		546	6		151	9		185	8		948	5
	948	8		706	6		326	7		326	7		647	2		151	6
	326	6		948	8		151	6		269	5		948	7		514	5
	514	5		724	3		582	7		682	5		326	9		915	2
	915	2		514	3		831	7		546	8		706	4		706	1
C23	831	8	C48	185	9	C73	915	2	C98	269	7	C123	269	7	C148	269	3
	269	5		269	6		582	8		546	7		250	6		582	2
	647	2		250	9		806	4		151	5		831	6		151	5
	185	2		948	9		831	9		682	4		806	6		250	6
	498	7		582	8		269	1		948	2		724	7		915	4
	724	2		514	8		185	9		326	2		185	8		806	3
	546	2		546	8		706	7		724	2		379	6		706	2
	706	2		724	6		724	7		582	3		948	7		379	3
	250	7		326	9		151	9		379	5		582	7		514	6
	326	5		706	7		498	5		915	2		706	4		185	5
	151	7		806	7		514	8		647	4		682	6		948	5
	915	2		498	9		948	8		806	3		326	8		546	4
	806	5		647	4		326	8		831	1		498	6		724	3
	514	3		682	4		647	2		706	4		647	4		498	2
	582	5		831	6		546	8		498	2		151	6		326	4
	948	2		915	6		379	1		514	2		915	7		831	6
	379	1		379	2		250	6		185	4		514	7		647	4
	682	2		151	6		682	1		250	2		546	6		682	5
C24	250	9	C49	269	7	C74	647	4	C99	250	5	C124	379	1	C149	806	2
	546	6		948	8		379	2		185	3		724	1		379	9
	151	2		185	8		948	2		514	5		582	2		250	8
	498	8		514	8		682	5		498	2		831	2		185	8
	806	5		250	8		498	2		706	1		682	2		582	8
	647	1		724	4		250	2		831	5		269	2		546	8
	582	9		582	6		724	8		806	4		498	2		269	8
	831	7		706	2		546	8		647	2		250	2		498	8
	379	1		546	4		185	7		915	5		151	8		151	8
	269	2		498	6		326	8		379	1		806	7		831	8
	682	1		326	6		831	8		582	5		514	8		915	8
	185	8		682	1		514	6		724	4		185	7		682	8
	948	9		806	6		582	8		326	5		546	8		706	8
	724	2		915	6		151	7		948	2		948	8		647	8
	514	7		647	4		915	7		682	2		915	8		514	8
	706	1		151	6		706	2		151	5		706	8		326	8
	915	7		831	5		806	6		546	4		647	8		948	8
	326	5		379	6		269	2		269	2		326	8		724	8
C25	948	7	C50	582	8	C75	724	7	C100	806	8	C125	647	3	C150	151	7
	682	2		250	7		498	7		706	8		915	6		269	2
	514	5		546	3		185	3		915	8		326	2		915	3
	379	2		185	5		948	5		514	7		546	7		582	3

Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG	Cons	Cód.	AG
	915	5		326	2		831	4		582	8		706	2		706	1
	582	6		269	1		647	2		250	7		514	4		250	3
	326	4		806	5		582	5		326	7		948	7		514	6
	806	1		948	3		379	5		185	7		151	7		806	2
	706	4		647	1		915	3		682	5		185	8		948	4
	151	4		514	1		682	4		498	7		498	7		379	3
	724	4		831	5		806	6		546	8		806	7		724	3
	250	1		724	2		250	7		831	9		682	9		185	7
	185	8		379	1		269	6		269	7		250	8		326	7
	546	3		706	1		546	6		647	8		582	8		546	6
	269	2		151	7		706	4		151	8		269	9		647	1
	498	6		498	5		326	6		379	7		379	9		498	5
	831	4		915	1		151	6		948	8		831	9		682	3
	647	2		682	1		514	3		724	7		724	9		831	7