

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE MATEMÁTICA ESTATÍSTICA E CIÊNCIA DA
COMPUTAÇÃO

**IMPACTO DOS CONTRASTES DE
INTERESSE NO DELINEAMENTO DE
UM EXPERIMENTO EM BLOCOS**

NILDA DORIS MONTES VILLANUEVA

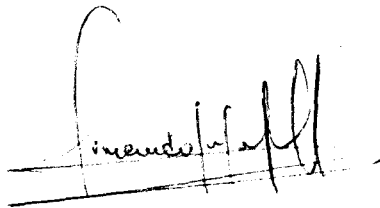
Prof. Dr. ARMANDO MARIO INFANTE
Orientador

CAMPINAS - SÃO PAULO

1993

**IMPACTO DOS CONTRASTES DE INTERESSE NO
DELINEAMENTO DE UM EXPERIMENTO EM BLOCOS**

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corrigida e defendida por NILDA DORIS MONTES VILLANUEVA e aprovada pela Comissão Julgadora.



Prof. Dr. Armando Mario Infante

Campinas, 6 de outubro de 1993.

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Estatística.

A mis queridos padres Ignacio y Gudelia.

A mis hermanos.

Agradecimentos

A Deus, pelo seu amor, sua luz, sua graça, sua força e sua presença constantes em minha vida.

Ao professor Dr. Armando Mario Infante, pelos conhecimentos transmitidos, pelo contínuo incentivo e pela competente e fraterna orientação na construção deste trabalho.

À minha família, pelo apoio incondicional às minhas decisões profissionais, mesmo quando tais decisões significaram uma convivência com a saudade.

Aos professores da UNMSM e da UNICAMP, que contribuíram para a minha formação estatística.

Ao professor Dr. Jonathan Biele, pelo incentivo, pela boa vontade e pelas valiosas sugestões apresentadas.

Aos amigos de sempre, pelo incentivo e apoio permanentes na realização da pós-graduação.

Aos amigos do mestrado, pelo companherismo e solidariedade nos momentos difíceis, e pela alegria infinita de se fazer novas amizades.

Ao Marcelo Silva, Emma Cambillo, Rosangela Junqueira, Maria Elena Infante e Cristiana Schmidt, pelo seu carinho e apoio constantes, pela sua partilha e suas mãos sempre estendidas.

Ao Povo do Brasil, ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela concessão da bolsa de mestrado por 30 meses.

Ao Fundo de Apoio ao Ensino e à Pesquisa (FAEP/UNICAMP), pela contribuição para a finalização desta tese, através do auxílio-ponte No. 0210/92.

“Above all, I believe that every experimenter should consider his problem and evolve a design to suit it. If he has a conventional problem a conventional design may be best, but an unusual problem may call for an unusual design and a bizarre problem for a bizarre design. My main plea is not for a change of convention but for freedom.”

S. C. Pearce.

RESUMO

Neste trabalho são exploradas as idéias de Pearce (1976, 1982), e Pearce *et al.* (1974) sobre o planejamento estatístico de experimentos. O processo de construção de delineamentos em blocos foi especialmente estudado, procurando obter esquemas experimentais que possam responder com máximo detalhe às questões de interesse do pesquisador. Assim, o trabalho é orientado basicamente ao estudo dos contrastes de interesse, porquanto eles encontram-se diretamente relacionados com os objetivos do experimento. Contrastes naturais e básicos são estudados primeiro. Eles são estimados independentemente e com replicações efetivas e/ou fatores de eficiência facilmente determináveis. Ambos indicam possíveis partições da soma de quadrados dos tratamentos, fornecendo informação valiosa para a análise da variância dos resultados experimentais. A eficiência da maior parte dos delineamentos não ortogonais propostos por Pearce (1963), é explicitamente calculada através da estrutura espectral da matriz de informação correspondente a cada plano; os resultados obtidos são compilados numa tabela. A seguir, é explorado um teorema devido a Gupta (1988), que estabelece a relação entre a estrutura de dispersão de um conjunto de contrastes estimados e a matriz de informação do delineamento. Esse resultado permite encontrar planos experimentais compatíveis com especificações para a estimação dos contrastes de interesse. As conseqüências e limitações desse resultado são examinadas para diferentes estruturas de dispersão da matriz dos contrastes, em particular no caso dos experimentos que visam à comparação de diversos tratamentos com um controle. Também são apresentadas diversas situações experimentais hipotéticas baseadas em uma ilustração devida a Pearce (1963). Finalmente é estudada a A-otimalidade dos delineamentos de tipo S para a estimação de contrastes suplementares, estendendo os resultados de Gupta (1989) para o caso dos delineamentos não binários. A utilidade da teoria apresentada para a construção de delineamentos é ilustrada mediante diversos exemplos, realizando os cálculos das quantidades relevantes mediante os pacotes estatísticos SAS e SOC.

ABSTRACT

Pearce's conceptions on statistical planning of experiments are explored in this work. The construction process of block designs was especially considered, in order to obtain experimental designs that depend upon the experimenter's needs. This way, the work is oriented basically to the study of contrasts of chief interest, because they are directly related with the objectives of the experiment. Firstly, are studied the natural and basic contrasts. They are estimated independently and with effective replications and/or efficiency factors that are readily determined. Both indicate possible partitions of the treatment sum of squares and aid of the appropriate analysis of variance. The efficiency of most non-orthogonal designs proposed by Pearce (1963) is explicitly calculated using the spectral decomposition of the associated information matrix. From these studies were constructed a new table for the compilation of the results obtained. Next, is explored Gupta's theorem, which gives the relationship between the set of contrasts estimated with specified variances and covariances and the information matrix of the design. This result allows us to find experimental designs compatible with the experimenter's specifications for the precision of estimation of contrasts of interest. Consequences and limitations of these results are examined for different structures of the variance-covariance matrix associated with the contrasts, especially for experiments for the comparison of test treatments with a control. Hypothetical experimental cases based on Pearce's example (1963) are shown also. Finally, it is studied the A-optimality of type S designs for the estimation of supplemented contrasts, extending Gupta's results (1989) for non-binary designs. The usefulness of the theory presented in the construction of designs is illustrated in several examples, using the statistical packages SAS and SOC for calculation of the relevant quantities.

SUMÁRIO

1 Introdução	1
2 Delineamentos experimentais com blocos	6
2.1 Delineamento e modelo	6
2.1.1 Etapas do planejamento experimental	7
2.2 Formulação do modelo	11
2.3 Matriz de informação do delineamento	17
2.3.1 Conexidade	19
2.3.2 Inversas generalizadas	25
2.3.2.1 Inversa de Tocher	25
2.3.2.2 Inversa de Pearce	26
2.3.2.3 Inversa de Moore-Penrose	26

2.4 Contrastes e estimabilidade	27
2.5 Ortogonalidade	31
2.6 Replicações efetivas	34
2.7 Fatores de eficiência	35
3 Contrastes e sua eficiência	37
3.1 Contrastes naturais	38
3.2 Contrastes básicos	40
3.3 Propriedades	46
3.4 Exemplo	50
4 Eficiência de delineamentos não ortogonais	53
4.1 Delineamentos de tipo T	55
4.2 Delineamentos de tipo S	57
4.3 Delineamentos de tipo G	60

4.4 Delineamentos de tipo M	63
4.4.1 Delineamentos de tipo B	64
4.5 Delineamentos cíclicos	66
4.6 Compilação de resultados	68
4.7 Exemplos	70
5 Matriz de informação e contrastes de interesse	75
5.1 Equilíbrio de delineamentos	76
5.2 Teorema de Gupta	80
5.3 Exemplos	84
5.4 Delineamentos para comparar tratamentos com um controle	93
6 Delineamentos A-otimais de tipo S	110
6.1 Delineamentos próprios de tipo S	111
6.2 Matriz de informação	114

6.3 Matriz de dispersão dos contrastes suplementares	115
6.4 Otimalidade de delineamentos	115
6.4.1 A-otimalidade	116
6.5 Limite inferior para a variância média	120
6.6 Exemplo	122
7 Considerações finais	129
Apêndice A	132
Apêndice B	139
Lista de notações	141
Bibliografia	144

Capítulo 1

Introdução

As técnicas estatísticas do *Planejamento de Experimentos* são de vital importância para a organização eficiente da experimentação em diversas áreas científicas e tecnológicas. Os pesquisadores dessas áreas podem utilizar esta teoria para construir planos ou delineamentos experimentais que permitam obter informações precisas e econômicas para um determinado problema experimental, partindo de uma formulação clara do mesmo.

Os conceitos modernos da teoria do Planejamento de Experimentos, são principalmente devidos a R. A. Fisher, que formulou e desenvolveu as ideias básicas no período de 1920-1945, veja Yates (1964, 1975), Box (1980), Preece (1990). Os princípios do planejamento de experimentos comparativos enunciados por Fisher são a *replicação*, a *aleatorização* e o *controle local ou blocagem*. O primeiro deles exige que em um experimento, o mesmo tratamento seja atribuído a diversas unidades experimentais, para que o erro experimental possa ser estimado *internamente*. O princípio da aleatorização exige que a atribuição dos tratamentos às unidades experimentais seja completamente aleatória, para que o erro experimental seja estimado *validamente*.

Finalmente, o conceito de blocagem, aplicado nos experimentos agrícolas assessorados por Fisher na Estação Experimental de Rothamsted, consiste em agrupar as unidades experimentais em grupos ou blocos homogêneos, atribuindo aleatoriamente os tratamentos às unidades experimentais dentro de cada bloco. Isso produz um incremento

na sensibilidade do experimento após a eliminação da porção do erro experimental devida aos blocos. Essas idéias levaram à construção de diversos delineamentos em blocos, e em particular aos blocos completos aleatorizados.

Na teoria do Planejamento de Experimentos parece existir linhas de pensamento bem definidas, sendo uma delas a escola biométrica inglesa, veja por exemplo Preece (1982a) e Mead (1990). Este trabalho foi desenvolvido tomando principalmente as idéias dessa escola. Entre essas idéias basicamente se encontram:

1. O delineamento selecionado para um experimento dado depende das perguntas e prioridades do pesquisador. Assim, o estudo de contrastes tem um caráter central, atribuindo como conseqüência menor importância às comparações múltiplas utilizadas em outras abordagens do Planejamento de Experimentos.
2. A teoria dos modelos lineares é um instrumento geral utilizado para obter informações valiosas sobre um experimento antes dele ser realizado.
3. A quantidade de informação fornecida pela análise clássica dos experimentos em blocos deve ser medida. A mesma é denominada *intrablocos*, pois ela está contida nas diferenças entre as respostas dentro dos blocos.

Em particular neste trabalho, exploraremos principalmente as idéias de S.C. Pearce (1960, 1963, 1974, 1976a, 1982, 1983b). As mesmas baseiam-se no princípio de que um plano experimental deve ser desenvolvido para resolver problemas. Isto é, os planos experimentais devem ser construídos de tal maneira que eles se adequem à realidade e não a realidade aos planos, tendo em vista que cada pesquisa tem seus objetivos, limitações e alcance particulares.

Em particular, ele observou que: (a) muitos pesquisadores não estão interessados no contrastes elementares, senão em outros mais complexos; (b) quaisquer que sejam os contrastes de interesse, eles deverão ser estimados independentemente, se isso for possível e (c) somente certos contrastes estão sob estudo num experimento em particular; por isso não parece vantajoso exigir igual precisão para todos os contrastes.

O objetivo do experimento varia de uma pesquisa a outra. Porém, no caso de experimentos comparativos, o interesse do pesquisador concentra-se na medição dos efeitos dos tratamentos da melhor maneira possível. Isto é realizado diminuindo o

erro experimental e os vícios devidos ao material disponível e aumentando a precisão da estimação dos efeitos de interesse. Essas tarefas são executadas mediante a estimação de certas funções lineares, chamadas *contrastos*, que dependem dos parâmetros correspondentes aos tratamentos. Assim, este trabalho está orientado basicamente ao estudo desses contrastes e tem por objetivo principal desenvolver planos experimentais úteis e adequados, sendo a construção dos mesmos voltados essencialmente à obtenção de informações precisas sobre as comparações de interesse.

Dentre os diferentes tipos de planos experimentais, aqueles que utilizam blocos de unidades relativamente homogêneas são as mais freqüentes na prática. Por esse motivo, todo o nosso estudo será feito para esse tipo de planos, com ênfase no estágio de construção dos mesmos, e procurando responder com máximo detalhe as questões de interesse do pesquisador.

A seguir, será detalhada a estrutura deste trabalho.

O Capítulo 2 começará com uma breve descrição das etapas na realização de um experimento. Logo será definido um modelo geral para experimentos em blocos, estudando as relações que existem entre suas componentes. Será definida depois a matriz de informação do delineamento na análise intrabloco, estudando suas propriedades e explorando seus elementos. A propriedade de *conexidade* relacionada com o posto da matriz de informação será definida e explorada mediante uma breve digressão sobre grafos associados a matrizes de informação. Após a apresentação de diversas inversas generalizadas para essas matrizes, serão definidos os conceitos básicos de *contraste*, *estimabilidade* e *ortogonalidade*, serão estudados dois conceitos importantes: as *replicações efetivas* e os *fatores de eficiência* de um delineamento. Todos esses conceitos serão instrumentos teóricos básicos para poder estudar e desenvolver o material desta dissertação.

No Capítulo 3 serão estudados os *contrastos naturais e básicos* de um delineamento em blocos. Sua importância reside no fato deles serem estimados independentemente. No caso dos contrastes naturais, serão facilmente determinadas suas replicações efetivas e no caso dos contrastes básicos seus fatores de eficiência. Para estes últimos será possível determinar a quantidade de informação a seu respeito na análise intra-bloco, e se alguns deles não forem estimados com eficiência completa, o resto da informação poderá ser recuperada a partir da variação entre blocos experimentais, veja Pearce, Caliński e Marshall (1974). Os dois tipos de contrastes indicam possíveis partições da soma de quadrados dos tratamentos na análise da variância dos resultados experimentais. Nos delineamentos equi-replicados, os contrastes naturais e básicos são os mesmos. Para este

caso serão fornecidos resultados relacionados com os fatores de eficiência e a ortogonalidade dos delineamentos, finalizando o capítulo com um exemplo detalhado que mostra a utilidade desta teoria.

No Capítulo 4 será calculada a eficiência de diversos tipos de delineamentos não ortogonais, correspondentes à classificação proposta por Pearce (1963, 1976a). Para cada um desses delineamentos será derivada a matriz de informação para o caso geral e as replicações efetivas e fatores de eficiência para o caso equi-replicado. No caso especial dos delineamentos de tipo S , os fatores de eficiência serão também calculados para a situação mais usual onde o tratamento suplementar é replicado com maior ou menor número de unidades experimentais em relação aos outros tratamentos. Os resultados obtidos estão compilados numa tabela, sendo também apresentados diversos exemplos ilustrativos extraídos da literatura, onde eles foram, porém, apresentados com outras finalidades.

Uma propriedade importante dos delineamentos em blocos é seu *equilíbrio*, relacionado com a estrutura da matriz de informação da análise intra-bloco. No Capítulo 5 serão definidos alguns tipos de equilíbrio, apresentando depois matrizes de informação associados a eles. Um teorema geral demonstrado por Gupta (1988a) que inclui esses tipos será apresentado, estudado e explorado. Esse teorema será útil quando o objetivo for estudar um certo conjunto de contrastes de interesse definidos pelo pesquisador, com variâncias e covariâncias pre-especificadas. A partir dele encontraremos a estrutura da matriz de informação adequada para essas especificações, o que por sua vez nos permitirá gerar diversos planos experimentais possíveis. Serão feitas algumas extensões dos resultados apresentados nos artigos para diferentes estruturas de dispersão da matriz de contrastes, em particular, para experimentos que visam a comparação do controle com diversos tratamentos em estudo. Serão exibidos, além disso, outros exemplos e derivados possíveis planos experimentais, todos eles pelo método de tentativa e erro. Também serão calculados os fatores de eficiência dos diversos planos encontrados, os quais servirão para avaliar a qualidade dos mesmos.

Quando se tem um conjunto de tratamentos onde um deles tem uma relevância especial, como por exemplo um tratamento controle ou padrão, o interesse da pesquisa é comparar o tratamento relevante com os outros. Neste caso, os contrastes apropriados chamam-se *contrastos suplementares*. No Capítulo 6 será procurada uma estimação ótima destes contrastes dentro da classe dos delineamentos de tipo S , usando o critério de A -otimalidade introduzido por Kiefer (1958). Será dada uma condição para que esses delineamentos sejam mais eficientes e será derivado o limite inferior para a variância média dos contrastes suplementares, nos casos binário e não binário, para delineamentos

próprios. Finalmente, será apresentado um exemplo mostrando a utilidade desta teoria. Nele serão encontrados planos experimentais para diversos tamanhos de blocos, avaliando-os depois em base a sua precisão e eficiência de estimação dos contrastes em estudo.

No Capítulo 7 serão apresentadas as considerações finais sobre o trabalho.

O cálculo numérico das quantidades mencionadas acima, tais como variâncias e fatores de eficiência, foi realizado utilizando o módulo IML do pacote estatístico SAS e o módulo CM do pacote estatístico SOC, ambos disponíveis no CCUEC-UNICAMP.

No Apêndice estão contidos os lemas, teoremas e definições usados no texto e nas demonstrações apresentadas. Uma lista de notações também será exibida, completando este trabalho com as referências bibliográficas utilizadas.

Capítulo 2

Delimitamentos experimentais com blocos

2.1 Delimitamento e modelo

Na agricultura, na biologia experimental, na indústria e em diversas áreas de pesquisa científica e tecnológica, são planejados experimentos com a finalidade de obter dados que respondam às perguntas formuladas pelos pesquisadores. Assim, um bom planejamento experimental deve considerar primeiramente o problema a ser resolvido.

Na primeira seção deste capítulo serão detalhadas diversas etapas do planejamento experimental, ilustrando-as mediante um exemplo.

No restante do capítulo, será desenvolvido formalmente um modelo estatístico geral para descrever e analisar experimentos em blocos de tamanho variável, com tratamentos não necessariamente equi-replicados que podem, além disso, possuir estruturas exploráveis na pesquisa das comparações de interesse. Assim, na Seção 2, este modelo será apresentado, junto com a estimação de seus parâmetros pelo método usual dos mínimos quadrados. Na Seção 3, será estudada a matriz que descreve a estimação dos parâmetros dos tratamentos (matriz C) e exploradas suas propriedades. O conceito

de conexidade relacionado com o posto desta matriz e com os grafos associados aos delineamentos, será também estudado. Ainda nesta secção algumas inversas generalizadas da matriz C , de utilidade neste trabalho, serão discutidas.

O conceito geral de contrastes e suas propriedades serão introduzidos na Seção 4 junto com a definição de estimabilidade. O importante conceito de ortogonalidade de delineamentos em blocos será introduzido, definido e estudado na Seção 5.

Nas duas últimas seções deste capítulo explorar-se-á a idéia de eficiência, que permite medir a efetividade com que um plano responde às perguntas do pesquisador, comparando-o com planos mais simples considerados relevantes. Em particular serão introduzidas as noções de *replicação efetiva* e *fator de eficiência* de um contraste. Essas noções serão utilizadas nos capítulos seguintes para avaliar a qualidade do planos experimentais.

2.1.1 Etapas do planejamento experimental

A experimentação envolve várias etapas, cada uma das quais inclui considerações estatísticas. Elas são brevemente descritas a seguir.

1. Análise dos Objetivos

Um bom experimento comparativo deve ter objetivos claramente definidos. Eles devem ser especificados desde o início em forma de **contrastos** de interesse. Logo, o trabalho experimental deve ser encaminhado para obter estimativas precisas dos mesmos. Nesta primeira etapa, as respostas e os tratamentos são selecionados e as relações entre eles explicitadas no sentido de saber qual é a sua estrutura subjacente.

Assim por exemplo, se foi decidido realizar um experimento com quatro tratamentos, o delineamento a ser adotado dependerá da estrutura destes tratamentos. Um deles pode ser um tratamento padrão e os outros, tratamentos novos que serão comparados com ele, ou os tratamentos podem formar um conjunto fatorial de dois fatores com dois níveis cada um e ainda neste caso os dois fatores isoladamente considerados podem possuir efeitos conhecidos, desejando-se estudar a interação entre eles. Finalmente, esta interação pode não existir, de modo que a atenção deverá-se

concentrar no estudo dos efeitos principais dos fatores.

2. Recursos

Uma vez definidos os objetivos, é necessário examinar os recursos disponíveis, isto é: a natureza das unidades experimentais que as torna apropriadas ou não para a tarefa a ser realizada, a variabilidade que elas possuem e a possível existência de formas de blocagem, para explorar uniformidades entre elas. Outras indagações nesta etapa devem incluir as características do material, a perícia dos operadores envolvidos e a suficiência da equipe disponível para o trabalho experimental.

3. Delineamento

Tendo em vista as observações nas etapas anteriores, um delineamento experimental relevante e praticável deve ser construído. O esquema não deve conduzir a dificuldades na aplicação dos tratamentos, para que sejam obtidos dados confiáveis.

4. Implementação

Tendo sido organizado um plano experimental inicial, será adequado explorar em detalhe o trabalho a ser feito: a existência de documentos preliminares, informações sobre fontes e qualidade do material experimental etc. Aqui, deveria iniciar-se um registro detalhado do experimento. É essencial que o estatístico conheça todas as operações experimentais a serem feitas, para delinear experimentos realistas e analisar os dados tendo uma idéia clara do que eles significam.

5. Análise de Dados

O cálculo da análise da variância pode ser um processo altamente técnico, mas sua eventual complexidade não deve obscurecer o fato de que ele permite essencialmente avaliar adequadamente aqueles contrastes definidos na etapa 1 e levados ao delineamento na etapa 3. Em geral, também será útil voltar depois à etapa 2, examinando se o delineamento integrou todas as fontes de variação esperadas, tentando detectar a possível existência de fontes importantes ignoradas. No mínimo, os dados devem ser exploratoriamente examinados para *detectar falhas na etapa 4*.

Alguns aspectos das etapas anteriores podem ser exemplificados considerando uma situação experimental especial, similar à apresentada por Pearce (1976b).

Exemplo 2.1

Suponha que 6 tratamentos agronômicos A, B, C, D, E e F devem ser comparados em 6 blocos de 4 unidades experimentais cada um. Suponha também que os tratamentos formam um conjunto fatorial do tipo 3×2 , onde o primeiro fator designa um tipo de variedade vegetal com três níveis denotados por V1, V2 e V3, e o segundo fator corresponde ao tipo de fertilizante, administrado em dois níveis, denotados por F1 e F2. Assim, os tratamentos consistirão nas combinações dos níveis de ambos os fatores, na forma

	V1	V2	V3	
F1	A	B	C	.
F2	D	E	F	

Se o interesse do experimentador é estimar o efeito principal do fator **fertilizante**, sendo menos importante o fator **variedade**, então o delineamento deverá conter juntos os tratamentos A e D, B e E, C e F. Assim, um possível delineamento poderia ser o seguinte:

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>
<i>B</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>A</i>
<i>C</i>	<i>C</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>B</i>
<i>E</i>	<i>D</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>D</i>	<i>D</i>
<i>F</i>	<i>F</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>F</i>	<i>E</i>

Figura 2.1: *Delineamento A1*

Por outro lado, se o experimentador tem interesse na estimação do efeito principal do segundo fator, deverá-se ter cuidado em manter juntos os tratamentos A, B, C e D, E, F. Nesse caso, o seguinte delineamento poderia ser apropriado:

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
<i>B</i>	<i>B</i>	<i>B</i>	<i>D</i>	<i>D</i>	<i>D</i>
<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>E</i>	<i>E</i>	<i>E</i>
<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>F</i>	<i>F</i>	<i>F</i>

Figura 2.2: *Delineamento A2*

Em ambos os delineamentos ganha-se por um lado e perde-se por outro. Por exemplo, no Delineamento *A2* contrastes de tratamentos dentro dos grupos A, B, C e D, E, F poderão ser bem estimados, não acontecendo isso para as comparações entre os níveis do fertilizante para cada variedade. Portanto, os diversos objetivos deverão levar a diferentes delineamentos e a seleção deles dependerá das necessidades do experimentador. ■

A qualidade de um delineamento proposto para um experimento dado, pode ser primeiramente avaliada pesquisando a matriz de dispersão dos estimadores dos contrastes que motivam o experimento. Assim, para um contraste de interesse, é desejável que a sua variância seja tão pequena quanto possível. Também, freqüentemente é desejável que os contrastes sejam estimados com covariâncias nulas. Se os dados são considerados realizações de variáveis aleatórias com uma distribuição normal conjunta, esses contrastes darão origem a estimadores estatisticamente independentes, obtendo-se assim informações não redundantes a seu respeito. Esta propriedade desejável nem sempre poderá ser alcançada.

A teoria do modelos lineares, usualmente utilizada para avaliar os resultados experimentais, pode ser aplicada para planejar melhor o experimento. Isto será feito aqui, construindo um modelo geral, onde se consideram blocos de diversos tamanhos e diferentes quantidades de replicações para os tratamentos, explorando a matriz de informação do delineamento para aferir méritos e deficiências do mesmo.

Começaremos apresentando uma definição para os delineamentos em blocos, que será considerada em todo este trabalho.

Definição 2.1 *Um plano ou delineamento d em blocos, é uma partição de um conjunto finito de unidades experimentais em b grupos denominados blocos, conjuntamente com outro conjunto de v tratamentos, tal que o j -ésimo bloco contém k_j unidades experimentais e o i -ésimo tratamento aparece r_i vezes no delineamento, $i = 1, \dots, v$; $j = 1, \dots, b$.*

Uma definição mais formal pode ser encontrada em Bailey (1991).

2.2 Formulação do modelo

A análise dos resultados de um experimento com n unidades experimentais agrupadas em b blocos de unidades relativamente homogêneas, recebendo no total v tratamentos diferentes, é feita mediante o modelo estatístico

$$\mathbf{Y} = \mu \mathbf{1}_n + \mathbf{D}' \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\Delta}' \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.1)$$

Nesta equação, \mathbf{Y} representa um vetor coluna aleatório de n observações, cada uma delas a ser realizada sobre uma unidade experimental diferente. O parâmetro μ é um número real; $\boldsymbol{\beta}$ é um vetor de parâmetros reais com uma componente para cada um dos b blocos do experimento, e $\boldsymbol{\tau}$ é um vetor de parâmetros com uma componente para cada tratamento. O vetor $\boldsymbol{\varepsilon}$ é uma coluna de n perturbações aleatórias independentes tais que $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$ e $Var(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 I$. Essas perturbações representam as diversas fontes de erro (na agricultura por exemplo, elas representam as variações locais no solo e no clima, os erros de medição etc.). Neste trabalho será assumido em particular que o vetor $\boldsymbol{\varepsilon}$ possui uma distribuição normal multivariada. $\mathbf{1}_n$ é um vetor coluna de dimensão n com todos seus elementos iguais a 1, \mathbf{D} é a **matriz de delineamento para blocos** e $\boldsymbol{\Delta}$ é a **matriz de delineamento para tratamentos**. Elas possuem dimensões $b \times n$ e $v \times n$, respectivamente.

Um mérito da formulação do modelo (2.1) é sua generalidade, que permite incluir blocos de diferentes tamanhos e tratamentos com diversos números de replicações. Outra vantagem é o isolamento das diversas fontes de variabilidade dos resultados exper-

imentais. Uma desvantagem deste modelo, porém, é o preço algébrico que impõe, sendo necessária a introdução de diversas notações adicionais, que serão apresentadas a seguir.

A matriz \mathbf{D} possui uma linha para cada bloco e uma coluna para cada unidade experimental. Seus elementos estão definidos mediante a fórmula

$$d_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se a } j\text{-ésima unidade experimental está no bloco } i \\ 0 & \text{em caso contrário} \end{cases} .$$

Analogamente, a matriz $\mathbf{\Delta}$ tem uma linha para cada tratamento e uma coluna para cada unidade experimental. Seus elementos estão dados por

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se a } j\text{-ésima unidade experimental recebe o } i\text{-ésimo tratamento} \\ 0 & \text{em caso contrário} \end{cases} .$$

Assim, a matriz \mathbf{D} descreve a partição das unidades experimentais em blocos, enquanto a matriz $\mathbf{\Delta}$ explicita a atribuição dos tratamentos às unidades experimentais.

O vetor coluna formado pelas quantidades de replicações dos tratamentos, com elementos r_1, r_2, \dots, r_v (onde r_i é o número de replicações do tratamento i), será denotado por \mathbf{r} . A matriz diagonal cujos elementos não nulos são os elementos de \mathbf{r} , será denotada por \mathbf{r}^δ . O vetor coluna dos tamanhos dos blocos, com elementos k_1, k_2, \dots, k_b (onde k_j é o tamanho do bloco j), será denotado por \mathbf{k} e a matriz diagonal com elementos não nulos conformados pelos elementos de \mathbf{k} será denotado por \mathbf{k}^δ , com inversa $\mathbf{k}^{-\delta}$. Assim, as matrizes $\mathbf{\Delta}$ e \mathbf{D} satisfazem as seguintes relações:

$$\mathbf{\Delta} \mathbf{1}_n = \mathbf{r} \tag{2.2}$$

$$\mathbf{\Delta}' \mathbf{1}_v = \mathbf{1}_n \tag{2.3}$$

$$\mathbf{\Delta} \mathbf{\Delta}' = \mathbf{r}^\delta \tag{2.4}$$

$$\mathbf{D} \mathbf{1}_n = \mathbf{k} \tag{2.5}$$

$$\mathbf{D}' \mathbf{1}_b = \mathbf{1}_n \tag{2.6}$$

$$\mathbf{D} \mathbf{D}' = \mathbf{k}^\delta \tag{2.7}$$

As mesmas podem ser demonstradas decompondo as matrizes em seus elementos. Assim, por exemplo, se a_i é a i -ésima componente do vetor $\Delta \mathbf{1}_n$, então $a_i = \sum_{k=1}^n \delta_{ik} 1_{k1} = \sum_{k=1}^n \delta_{ik} =$ número de unidades experimentais que recebem o i -ésimo tratamento $= r_i$, provando a relação (2.2).

A **matriz de incidência** do delineamento, denotada por N , tem uma linha para cada tratamento e uma coluna para cada bloco. Ela é definida mediante a relação

$$N = \Delta \mathbf{D}' \quad (2.8)$$

Esta matriz fornece uma descrição sucinta do delineamento: cada um de seus elementos n_{ij} mostra o número de vezes que o tratamento i ocorre no bloco j . A soma de cada coluna exhibe o tamanho de um bloco e a soma de cada linha corresponde à replicação de um tratamento:

$$N \mathbf{1}_b = \mathbf{r} \quad (2.9)$$

e

$$N' \mathbf{1}_v = \mathbf{k} \quad (2.10)$$

A seguir apresentaremos algumas definições para delineamentos em blocos, necessárias neste trabalho.

Definição 2.2 *Um delineamento em blocos é dito próprio se $k_j = k$ para todo j , isto é se $\mathbf{k} = k \mathbf{1}_b$.*

Definição 2.3 *Um delineamento em blocos é dito equi-replicado se $r_i = r$ para todo i , isto é se $\mathbf{r} = r \mathbf{1}_v$.*

Definição 2.4 *Um delineamento em blocos é dito binário se nenhum tratamento é atribuído mais de uma vez em cada bloco, isto é, se n_{ij} é 0 ou 1 para todo i e todo j .*

A **matriz de concorrências** dos tratamentos é a matriz NN' . Seus elementos extra-diagonais mostram o número de vezes que pares de tratamentos ocorrem juntos no mesmo bloco. Se o delineamento é binário, os elementos diagonais de NN' são precisamente as replicações dos tratamentos.

Exemplo 2.1 (Continuação):

A matriz de incidência do delineamento A1 é

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Assim, $N\mathbf{1}_6 = N'\mathbf{1}_6 = 4\mathbf{1}_6$ e a matriz de concorrências dos tratamentos é

$$NN' = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 4 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 4 & 2 & 2 & 4 \\ 4 & 2 & 2 & 4 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 4 & 2 & 2 & 4 \end{pmatrix}. \quad \blacksquare$$

Três quantidades úteis podem ser definidas utilizando a realização \mathbf{y} do vetor aleatório \mathbf{Y} de (2.1), formada pelos valores observados da resposta experimental. Elas são: a soma $G = \mathbf{1}_n' \mathbf{y}$ das n observações individuais, o vetor $B = \mathbf{D} \mathbf{y}$ formado pelos totais dos b blocos e o vetor $T = \mathbf{\Delta} \mathbf{y}$ constituído pelos totais dos tratamentos.

Uma vez introduzidas essas relações, os parâmetros do modelo podem ser estimados mediante o método dos mínimos quadrados. A minimização do quadrado da norma euclidiana $\| \mathbf{y} - \mu \mathbf{1} - \mathbf{D}' \beta - \mathbf{\Delta}' \tau \|^2$ leva ao sistema chamado de *equações normais*

completas exibido no seguinte lema. ($\|\mathbf{x}\|$ denota a norma euclidiana $(\sum_{i=1}^n x_i^2)^{1/2}$ do vetor $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)'$.)

Lema 2.1 *Os valores $\hat{\mu}, \hat{\beta}$ e $\hat{\tau}$ que minimizam a função $\|\mathbf{y} - \hat{\mu}\mathbf{1} - \mathbf{D}'\hat{\beta} - \mathbf{\Delta}'\hat{\tau}\|^2$ satisfazem o sistema de equações*

$$\begin{aligned} n \hat{\mu} + \mathbf{k}' \hat{\beta} + \mathbf{r}' \hat{\tau} &= G \\ \mathbf{k} \hat{\mu} + \mathbf{k}^\delta \hat{\beta} + N' \hat{\tau} &= B \\ \mathbf{r} \hat{\mu} + N \hat{\beta} + \mathbf{r}^\delta \hat{\tau} &= T \end{aligned}$$

A demonstração deste resultado e do seguinte lema são clássicos e serão omitidas. Elas podem ser consultadas, por exemplo, em Pearce (1983) ou John (1987).

Sejam as matrizes particionadas $X = (\mathbf{1} \mid \mathbf{D}' \mid \mathbf{\Delta}')$ e $\gamma = (\mu \mid \beta \mid \tau)$. As equações do Lema 2.1 não têm solução única, já que a matriz $X'X$ não é de posto completo. De fato, o posto de $(X'X)$ é no máximo igual a $b + v - 1$, e o número de parâmetros de γ é igual à ordem $b + v + 1$ da matriz X .

No presente caso, a tarefa de encontrar uma solução é simplificada se o conjunto de equações envolve somente os parâmetros dos tratamentos, que são os de interesse primário. Isto é realizado eliminando $\hat{\mu}$ e $\hat{\beta}$ das equações normais completas. O seguinte lema exhibe o resultado dessa eliminação.

Lema 2.2 *O sistema de equações normais conduz ao sistema*

$$(\mathbf{r}^\delta - N \mathbf{k}^{-\delta} N') \hat{\tau} = T - N \mathbf{k}^{-\delta} B,$$

obtido pela eliminação de $\hat{\mu}$ e $\hat{\beta}$ no sistema do Lema 2.1.

Denotando mediante $Q = T - N \mathbf{k}^{-\delta} B$, o *vetor dos totais reduzidos* e mediante C à matriz $\mathbf{r}^{\delta} - N \mathbf{k}^{-\delta} N'$, resulta o sistema

$$C \hat{\tau} = Q. \quad (2.11)$$

O vetor Q contém os totais ajustados dos tratamentos, pois T representa os totais brutos e $\mathbf{k}^{-\delta} B$ é o vetor das médias dos blocos. Assim, o efeito de subtrair $N \mathbf{k}^{-\delta} B$ de T , é tirar a cada total as médias dos blocos, ponderadas pelo número de vezes que o tratamento ocorre em cada bloco. A soma das componentes de Q é igual a zero, pois

$$\mathbf{1}'_{\mathbf{v}} Q = \mathbf{1}'_{\mathbf{v}} (T - N \mathbf{k}^{-\delta} B) = \mathbf{1}'_{\mathbf{v}} T - \mathbf{k}' \mathbf{k}^{-\delta} B = \mathbf{1}'_{\mathbf{v}} T - \mathbf{1}'_{\mathbf{b}} B = G - G = 0.$$

As quantidades acima (C , Q , $\hat{\tau}$, B) são básicas para a análise clássica da variância dos resultados experimentais. Elas são utilizadas para decompor a soma total (reduzida) de quadrados $\|\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}} \mathbf{1}\|^2$ em três componentes. A primeira é a soma de quadrados dos blocos, a segunda é a soma de quadrados dos tratamentos e a terceira é a soma de quadrados do erro. Em geral, duas partições desta soma são possíveis: a primeira somente considera blocos, logo adiciona os efeitos dos tratamentos e a segunda só considera tratamentos e logo adiciona os efeitos dos blocos.

A análise de um experimento, na qual os efeitos dos tratamentos são estimados utilizando unicamente as comparações feitas dentro dos blocos é chamada **análise intra-bloco** (*intra-block analysis*, em inglês).

Se os blocos podem ser considerados como uma amostra extraída de alguma população, então estimadores de comparações de tratamentos podem também ser obtidos a partir das diferenças entre os blocos, dando resultado a **análise interbloco** (*interblock analysis*, em inglês). Para maiores detalhes a respeito, veja Chakrabarti (1962), Pearce, Caliński e Marshall (1974), Pearce (1983a), John (1987) entre outros.

As equações (2.11) são denominadas **equações normais intra-bloco reduzidas** (*reduced intrablock normal equations*, em inglês) para os parâmetros dos tratamentos.

Na seguinte seção, estudaremos as propriedades da matriz de coeficientes C das equações normais reduzidas. Ela foi introduzida por Chakrabarti (1962) e é chamada também de **matriz de informação do delineamento** ou simplesmente matriz C (*information matrix* ou *C-matrix*, em inglês). Desempenha um papel importante na construção de delineamentos em blocos, pois seus elementos contêm informação sobre as concorrências dos tratamentos, capturando assim informações relevantes sobre τ contidas no delineamento. Por isso ela tem um papel fundamental no planejamento de experimentos, permitindo estabelecer critérios de otimalidade para a escolha entre os diferentes delineamentos em blocos, veja John (1987) e Constantine (1987).

As propriedades de ortogonalidade, conexidade e eficiência de um delineamento, também poderão ser determinadas pesquisando a estrutura da matriz C .

2.3 Matriz de informação do delineamento

As propriedades da matriz de informação estão contidas no lema seguinte.

Lema 2.3 *A matriz C é: (i) singular, (ii) simétrica, (iii) duplamente centrada (isto é, suas linhas e colunas somam zero) e (iv) positiva semidefinida.*

Prova.

(i) Para demonstrar a singularidade de C , é suficiente provar que C possui no mínimo um autovalor nulo. Isso resulta das relações

$$\begin{aligned} C \mathbf{1}_v &= (\mathbf{r}^\delta - N \mathbf{k}^{-\delta} N') \mathbf{1}_v = \mathbf{r}^\delta \mathbf{1}_v - N \mathbf{k}^{-\delta} N' \mathbf{1}_v \\ &= \mathbf{r} - N \mathbf{k}^{-\delta} \mathbf{k} = \mathbf{r} - N \mathbf{1}_b = \mathbf{r} - \mathbf{r} = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (2.12)$$

(ii) C é a diferença de duas matrizes simétricas.

(iii) Dos resultados anteriores, temos que $C \mathbf{1}_v = C' \mathbf{1}_v = \mathbf{0}$.

(iv) Para demonstrar que é positiva semidefinida, é suficiente expressar C em termos da matriz de projeção $\Phi = I - D'k^{-\delta}D$ e aplicar o Teorema A.6 do Apêndice. ■

Os valores absolutos dos elementos extradiagonais c_{ij} da matriz de informação são chamadas **concorrências ponderadas** (*weighted concurrences*, em inglês), e os elementos diagonais c_{ii} , **quase-replicações** (*quasireplications*, em inglês). Elas têm a forma

$$-c_{ij} = \sum_{l=1}^b \frac{1}{k_l} n_{il} n_{jl}, \quad i \neq j \quad (2.13)$$

$$c_{ii} = - \sum_{j \neq i} c_{ij} \quad (2.14)$$

Assim, em (2.13), o produto $n_{il}n_{jl}$ conta o número de vezes que os tratamentos i e j ocorrem conjuntamente no bloco l , ponderando esse valor pela inversa do tamanho k_l do bloco. A somatória de (2.13) é igual ao número total de concorrências ponderadas dos tratamentos i e j , obtido utilizando todos os blocos. A fórmula (2.14) mostra que as quase-replicações de um tratamento coincidem com o total de concorrências ponderadas que o tratamento i faz com os outros, fornecendo assim informação sobre o grau de participação de cada tratamento no delineamento. A estrutura da matriz C determina as propriedades de um delineamento em blocos, seus elementos fornecem informação relevante sobre as comparações de interesse. Pearce (1976a) mostrou que a precisão de estimação de um delineamento em blocos depende inteiramente das concorrências ponderadas.

O vetor Q de totais ajustados sintetiza os dados fornecidos pelas observações experimentais e a matriz C condensa as informações sobre o delineamento experimental. As duas quantidades, relacionadas pela equação (2.11), resumem toda a informação experimental via o modelo (2.1).

Da relação (2.12), pode-se notar que a matriz C possui pelo menos um autovalor nulo. Assim, o posto de C é menor ou igual a $v - 1$.

Uma propriedade dos delineamentos em blocos, relacionada com esse *posto* é sua conexidade, que será tratada a seguir.

2.3.1 Conexidade

Começaremos apresentando a definição de conexidade

Definição 2.5 *Um tratamento i e um bloco j em um delineamento com blocos são ditos associados, se o tratamento i aparece no bloco j . Dois tratamentos são ditos conexos se é possível passar de um ao outro através de uma cadeia consistindo alternativamente de tratamentos e blocos, tais que quaisquer dois membros de uma cadeia estão associados. Um delineamento é dito conexo se cada par de tratamentos é conexo.*

Um resultado importante sobre a conexidade está contido no seguinte teorema, cuja demonstração pode ser encontrada em Dey (1986) ou John (1987).

Teorema 2.1 *Um delineamento em blocos é conexo se e somente se $\text{posto}(C) = v - 1$.*

Uma imagem intuitiva da conexidade de um delineamento, pode ser obtida se os delineamentos são representados graficamente. Para isso introduziremos os seguintes conceitos.

Definição 2.6 *Um grafo \mathcal{G} é uma coleção de subconjuntos de cardinalidade 2 (possivelmente repetidos) chamados de arestas e de um conjunto finito de pontos chamados vértices.*

Definição 2.7 *Um grafo \mathcal{G} é conexo se dois vértices distintos quaisquer podem ser ligados por uma coleção de arestas, denominada caminho.*

A cada grafo \mathcal{G} pode ser associada sua *matriz de Kirchhoff* $C = (e_{ij})$, com linhas e colunas indexadas pelos vértices de \mathcal{G} numa ordem fixada, da seguinte forma:

$$-e_{ij} = \text{número de arestas entre os vértices } i \text{ e } j, \quad i \neq j \quad (2.15)$$

$$e_{ii} = -\sum_{j \neq i} e_{ij}. \quad (2.16)$$

Incidentalmente, observamos que a matriz de Kirchhoff possui propriedades análogas às da matriz C de informação de um delineamento experimental, veja Constantine (1987). Se o delineamento é próprio, isto é se os blocos são de igual tamanho k , a matriz C tem a forma

$$C = \frac{1}{k}(k\mathbf{r}^{\delta} - NN').$$

Para estes delineamentos, a matriz kC tem todos seus elementos inteiros. Eles têm a seguinte forma

$$-c_{ij} = \sum_{l=1}^b n_{il}n_{jl}, \quad i \neq j$$

$$c_{ii} = -\sum_{j \neq i} c_{ij}.$$

A semelhança entre estas fórmulas e as de (2.15) e (2.16), sugere associar a cada delineamento d com blocos um grafo $\mathcal{G}(d)$ cujos vértices representam os v tratamentos e cujas arestas representam as concorrências de cada par de tratamentos (i, j) em um bloco de d . Assim, pode-se observar que para $i \neq j$, o número de arestas entre i e j é igual ao número de concorrências dos tratamentos i e j em todos os blocos. Desta forma, a matriz kC é a matriz de Kirchhoff do grafo $\mathcal{G}(d)$, sendo um múltiplo da matriz de informação do delineamento d .

Destas considerações resulta o seguinte

Lema 2.4 *A matriz de informação C do delineamento d , tem posto $v - 1$ se e somente se o grafo $\mathcal{G}(d)$ é conexo.*

Os fatos acima podem ser ilustrados mediante os seguintes exemplos.

Exemplo 2.1 (continuação)

A matriz $4C$ do Delineamento A1 é dada por

$$\begin{pmatrix} 12 & -2 & -2 & -4 & -2 & -2 \\ -2 & 12 & -2 & -2 & -4 & -2 \\ -2 & -2 & 12 & -2 & -2 & -4 \\ -4 & -2 & -2 & 12 & -2 & -2 \\ -2 & -4 & -2 & -2 & 12 & -2 \\ -2 & -2 & -4 & -2 & -2 & 12 \end{pmatrix}.$$

associado ao grafo conexo $\mathcal{G}(A1)$ dado por

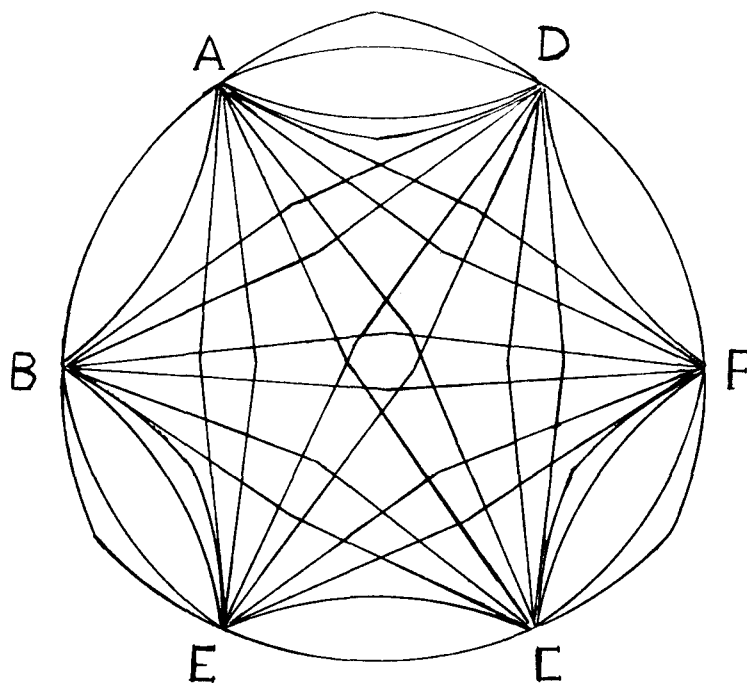


Figura 2.3: Grafo associado ao Delineamento A1

Da figura acima, pode-se observar a simetria do grafo e as relações de concorrências entre os tratamentos.

Exemplo 2.2

Considere o Delineamento $A3$ abaixo, com $v = 6$ tratamentos denotados por $0, 1, \dots, 5$ e 6 blocos de tamanho $k = 2$.

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>
0	1	2	3	4	5	
1	2	3	4	5	0	

Figura 2.4: *Delineamento A3*

A matriz $2C$ é dada por

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

correspondendo ao grafo conexo $\mathcal{G}(A3)$ dado por

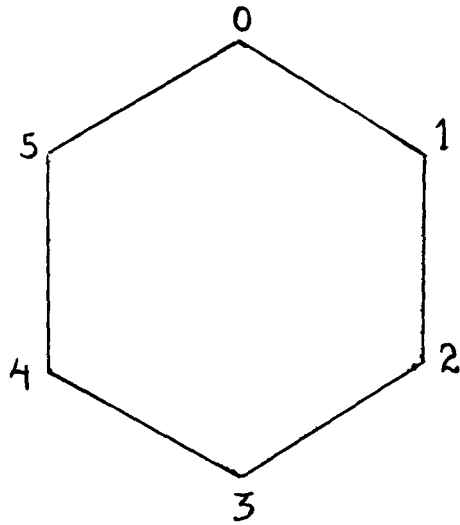


Figura 2.5: Grafo associado ao Delineamento $A3$

Mencionaremos, para finalizar esta digressão, que correspondências entre delineamentos e grafos, como as exibidas acima, permitem explorar a otimalidade de planos experimentais mediante o estudo da simetria dos grafos, veja por exemplo Paterson (1983) e Constantine (1987). ■

A seguir, daremos algumas inversas generalizadas da matriz C , úteis para o cálculo das variâncias dos contrastes.

2.3.2 Inversas generalizadas

Diversas formas particulares têm sido propostas para inversas generalizadas da matriz de informação C . Examinaremos em particular aquelas que têm importância teórica e utilidade para este trabalho.

2.3.2.1 Inversa de Tocher

Ela foi proposta por Tocher (1952) e tem a forma

$$\Omega = C^- = \left(C + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{n} \right)^{-1} \quad (2.17)$$

onde \mathbf{r} é o vetor de replicações e n o número de unidades experimentais. A matriz Ω satisfaz a relação

$$\Omega^{-1} \mathbf{1}_v = \mathbf{r}.$$

Esta matriz é importante desde que a soma de quadrados dos tratamentos, quantidade essencial na análise da variância dos dados experimentais, pode ser calculada em termos dela como $Q' \Omega Q$. Também, $\sigma^2 \Omega$ é a matriz de covariâncias dos estimadores $\hat{\tau}$ dos

parâmetros dos tratamentos se a restrição identificatória $\mathbf{r}'\tau = 0$ é introduzida para obter a unicidade na solução das equações normais reduzidas.

2.3.2.2 Inversa de Pearce

Ela foi proposta por Pearce (1976) e tem a forma

$$\Xi = C^- = \left(C + \frac{\mathbf{q}\mathbf{q}'}{\mu} \right)^{-1},$$

onde \mathbf{q} , conformado pelos elementos diagonais de C , é o vetor das *quase-replicações* e $\mu = \mathbf{q}'\mathbf{1}_v$ é chamado de *tamanho do experimento*.

As matrizes Ξ e \mathbf{q} satisfazem a relação

$$\Xi^{-1}\mathbf{1} = \mathbf{q}.$$

A matriz Ξ corresponde à restrição identificatória $\mathbf{q}'\tau = 0$. Em Pearce (1976a) é demonstrado que para o estudo de contrastes Ξ é equivalente a Ω , e que a soma de quadrados de tratamentos é $Q'\Xi Q$.

2.3.2.3 Inversa de Moore-Penrose

Para a inversa generalizada C^+ de C introduzida por Moore-Penrose, é utilizada a decomposição espectral da matriz C na forma

$$C^+ = \sum_{i=1}^h \frac{u_i u_i'}{\lambda_i},$$

onde h = número de autovalores não nulos de C , veja por exemplo Rao (1965). Ela é única e possui as seguintes propriedades

- $C^+C = CC^+ = \sum_{i=1}^h u_i u_i'$
- $C^+CC^+ = C^+$.

Se $h = v - 1$ (isto é se o delineamento é conexo) a inversa generalizada de Moore-Penrose

$$C^+ = \left(C + \frac{1}{v} \mathbf{1}\mathbf{1}' \right)^{-1}$$

é uma matriz duplamente centrada. Ela corresponde à restrição identificatória $\mathbf{1}'\tau = 0$.

Com qualquer dessas inversas pode ser calculada a tabela da análise da variância correspondente aos resultados experimentais, veja por exemplo Pearce (1983a) e Dey (1986).

Em seguida definiremos duas noções importantes no estudo de um delineamento em blocos.

2.4 Contrastes e estimabilidade

Antes de definir esses conceitos, será conveniente introduzir uma relação auxiliar para expressar as equações normais reduzidas e outras quantidades de interesse em termos de uma matriz de projeção, facilitando as demonstrações de resultados nesta seção.

Considere então a matriz $\Phi = I - D'k^{-\delta}D$. Ela é simétrica, idempotente e singular, pois $\Phi = \Phi'$, $\Phi\Phi = \Phi$ e $\Phi\mathbf{1}_n = \mathbf{0}$. Ela é assim uma matriz de projeção que satisfaz também a relação $\Phi\mathbf{D}' = \mathbf{0}$.

Lema 2.5 O vetor Q e a matriz C podem ser expressos em termos da matriz Φ mediante as fórmulas

$$Q = \Delta\Phi\mathbf{y} \quad (2.18)$$

$$C = \Delta\Phi\Delta'. \quad (2.19)$$

Prova. Os resultados são obtidos usando as relações $T = \Delta\mathbf{y}$, $B = \mathbf{D}\mathbf{y}$ e $N = \Delta\mathbf{D}'$. ■

Assim, a equação (2.11) pode também ser expressa em termos de Φ , na forma

$$\Delta\Phi\Delta'\hat{\tau} = \Delta\Phi\mathbf{y}. \quad (2.20)$$

Como C é uma matriz de posto incompleto, uma solução geral de (2.11) é dada por

$$\hat{\tau} = C^-\mathbf{Q} \quad (2.21)$$

onde C^- é qualquer inversa generalizada de C , ou seja qualquer solução da equação matricial $CC^-C = C$.

As equações de (2.21) não têm solução única. Para que isso aconteça, no caso dos delineamentos conexos, será necessário impor uma única restrição identificatória do tipo $l'\tau = 0$. Porém, aqui serão desconsideradas a utilização de restrições, desde que o interesse principal é estimar certas funções lineares de τ chamadas *contrastes*, que serão invariantes para qualquer solução escolhida $\hat{\tau}$, não afetando assim as inferências a seu respeito.

Definição 2.8 A função linear $\mathbf{c}'\tau$ é dita um contraste nos parâmetros dos tratamentos se a soma dos elementos do vetor de coeficientes \mathbf{c} é igual a zero, isto é se $\mathbf{c}'\mathbf{1} = 0$.

Definição 2.9 Um contraste de tratamentos $\mathbf{c}'\tau$ é dito elementar se o vetor \mathbf{c} tem somente duas entradas não nulas, cujos valores podem ser supostos iguais a 1 e -1, (isto é, contrastes da forma $\tau_i - \tau_j$, $i \neq j$).

A equação dada em (2.21) pode ser levada à forma

$$\begin{aligned}
 \hat{\tau} &= C^{-}\Delta\Phi\mathbf{Y} \\
 &= C^{-}\Delta\Phi(\alpha\mathbf{1} + \mathbf{D}'\beta + \Delta'\tau + \varepsilon) \\
 &= \alpha C^{-}\Delta\Phi\mathbf{1} + C^{-}\Delta\Phi\mathbf{D}'\beta \\
 &\quad + C^{-}\Delta\Phi\Delta'\tau + C^{-}\Delta\Phi\varepsilon \\
 &= C^{-}C\tau + C^{-}\Delta\Phi\varepsilon,
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Obtendo-se a expressão

$$\begin{aligned}
 \mathbf{c}'\hat{\tau} &= \mathbf{c}'(C^{-}C\tau + C^{-}\Delta\Phi\varepsilon) \\
 &= \mathbf{c}'C^{-}C\tau + \mathbf{c}'C^{-}\Delta\Phi\varepsilon.
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

para o estimador do contraste $\mathbf{c}'\tau$.

Outros resultados úteis para o estudo dos contrastes, tratados no Capítulo 3, são os seguintes.

Definição 2.10 Uma função linear $\mathbf{l}'\tau$ dos parâmetros dos tratamentos é dita estimável, se existe uma combinação linear $\mathbf{b}'\mathbf{Y}$ das respostas experimentais tal que $E(\mathbf{b}'\mathbf{Y}) = \mathbf{l}'\tau$.

Teorema 2.2 *Uma condição necessária e suficiente para que uma função linear $c'\tau$ dos parâmetros dos tratamentos seja estimável é que o vetor de coeficientes c satisfaça a relação*

$$c' C^- C = c', \quad (2.24)$$

onde C^- é qualquer inversa generalizada de C .

Lema 2.6 *Se um delineamento é conexo, uma função linear $l'\tau$ dos parâmetros dos tratamentos é estimável se e somente se $l'\mathbf{1} = 0$.*

As demonstrações dos resultados elementares acima, podem ser encontrados por exemplo em Caliński (1977), Pearce (1983a) ou John (1987).

Os delineamentos conexos são importantes por que neles todos os contrastes nos parâmetros dos tratamentos são estimáveis a partir das comparações dentro dos blocos. No percurso deste trabalho, serão estudados somente delineamentos deste tipo.

A decomposição espectral da matriz simétrica C tem a forma

$$C = \sum_{i=1}^h \lambda_i u_i u_i', \quad (2.25)$$

onde h é o número de autovalores λ_i não nulos de C e u_i ($i = 1, \dots, h$) são os autovetores normalizados correspondentes, todos ortogonais ao vetor $\mathbf{1}_v$.

Se o vetor de coeficientes c é escrito em termos dos autovetores u_i correspondentes aos autovalores não nulos de C na forma

$$c = \sum_i \alpha_i u_i, \quad (2.26)$$

ele satisfaz a condição de estimabilidade. Assim, da relação (2.23) resulta

$$c' \hat{\tau} = c' \tau + c' C^{-} \Delta \Phi \varepsilon. \quad (2.27)$$

O cálculo dos momentos da variável $c' \hat{\tau}$ fornece o seguinte resultado.

Lema 2.7 *Se o vetor de coeficientes c satisfaz a condição de estimabilidade (2.23) resulta*

$$E(c' \hat{\tau}) = c' \tau$$

e

$$Var(c' \hat{\tau}) = \sigma^2 c' C^{-} c.$$

Prova. É direta utilizando o resultado (2.24) e as propriedades da matriz Φ . ■

Assim, contrastes podem ser estimados sem vício, se eles são derivados dos autovetores não envolvidos na singularidade de C , e suas variâncias independem da inversa generalizada C^{-} escolhida. Desta forma, tanto a esperança, quanto a variância do contraste são avaliados sem ambigüidade.

A exploração de tipos especiais de contrastes será prosseguida no Capítulo 3, após introduzir outras noções úteis. A primeira delas corresponde à propriedade de ortogonalidade para delineamentos. Ela tem tido diversas abordagens, encontrando-se uma discussão detalhada a respeito em Preece (1977). A noção inicial pertence a Yates (1933), veja também Pearce (1970).

2.5 Ortogonalidade

Definição 2.11 *Os tratamentos e os blocos de um delineamento são ditos ortogonais se as relações*

$$n_{ij} = \frac{r_i k_j}{n}, \quad i = 1, \dots, v, \quad j = 1, \dots, b$$

são satisfeitas para todo tratamento e para todo bloco, onde n_{ij} é o (i, j) -ésimo elemento da matriz de incidência N . Equivalentemente, se é satisfeita a relação

$$N = \frac{\mathbf{r} \mathbf{k}'}{n},$$

onde \mathbf{r} é o vetor de replicações dos tratamentos, \mathbf{k} é o vetor de tamanhos dos blocos e n o número de unidades experimentais.

A ortogonalidade parcial entre tratamentos e blocos, como definida em Pearce (1983a), tem a seguinte forma

Definição 2.12 *Os tratamentos e os blocos de um delineamento são ditos parcialmente ortogonais se as relações*

$$n_{ij} = \frac{r_i k_j}{n}$$

são satisfeitas somente para alguns tratamentos e para alguns blocos.

Se todos os blocos e tratamentos de um delineamento são ortogonais, será possível estimar separadamente os efeitos dos blocos e os efeitos dos tratamentos. As diferenças entre tratamentos poderão ser estimadas independentemente das diferenças entre blocos, isto é, as médias dos tratamentos não serão contaminadas pelas diferenças entre os blocos. Este fato é demonstrado a seguir.

Se o delineamento é ortogonal, a matriz de informação C e o vetor de totais ajustados Q tem a seguinte forma:

$$C = \mathbf{r}^\delta - N \mathbf{k}^{-\delta} N' = \mathbf{r}^\delta - \frac{\mathbf{r} \mathbf{k}'}{n} \mathbf{k}^{-\delta} \frac{\mathbf{k} \mathbf{r}'}{n} = \mathbf{r}^\delta - \frac{1}{n} \mathbf{r} \mathbf{r}'$$

$$Q = T - N \mathbf{k}^{-\delta} B = T - \frac{\mathbf{r} \mathbf{k}'}{n} \mathbf{k}^{-\delta} B = T - \mathbf{r} \bar{y},$$

onde \bar{y} é a média geral das n observações experimentais.

De (2.17), temos que a inversa de Tocher de C é a matriz

$$\Omega = \mathbf{r}^{-\delta}.$$

Assim, o vetor de parâmetros de tratamentos é estimado por

$$\hat{\tau} = \Omega Q = (\mathbf{r}^{-\delta} T - \bar{y} \mathbf{1}_v)$$

e o contraste $c' \tau$ tem estimador

$$c' \hat{\tau} = c' (\mathbf{r}^{-\delta} T - \bar{y} \mathbf{1}_v) = c' \mathbf{r}^{-\delta} T - \bar{y} c' \mathbf{1}_v = c' \mathbf{r}^{-\delta} T$$

Logo, se o delineamento em blocos é ortogonal, os contrastes dos parâmetros dos tratamentos são estimáveis, com estimadores dados pelos contrastes nas médias não ajustadas dos tratamentos e não é necessário fazer ajuste nenhum para os totais dos blocos, como também não é necessário eliminar os efeitos dos blocos no cálculo da soma de quadrados dos tratamentos. Portanto, toda a informação sobre os efeitos dos tratamentos estará contida nas comparações realizadas dentro dos blocos. Similarmente, os parâmetros dos blocos podem ser estimados separadamente, sem necessidade de eliminar os efeitos dos tratamentos.

Em resumo, a vantagem básica da ortogonalidade entre tratamentos e blocos é simplesmente a independência ou separação entre seus correspondentes efeitos. Neste caso coincidem as duas possíveis partições da soma total de quadrados da análise da variância.

Nas seguintes seções, definiremos dois termos introduzidos por Pearce (1964, 1970). O primeiro deles relaciona-se com a variância da estimação dos contrastes e o segundo com a eficiência dessa estimação. Ambas quantidades serão utilizadas nos capítulos seguintes, para avaliar a precisão na estimação de contrastes.

2.6 Replicações efetivas

Definição 2.13 *Se c é o vetor de coeficientes de um contraste, sua replicação efetiva relativa a um delineamento dado é definida mediante $R = (c' C^- c)^{-1}$, onde C^- é uma inversa generalizada arbitrária da matriz de informação C do delineamento.*

O seguinte exemplo ilustra a utilidade da definição acima.

Exemplo 2.3

Supondo um delineamento em blocos completos aleatorizados com 4 tratamentos, se $c'\tau$ representa a diferença normalizada entre o primeiro e o segundo tratamento, isto é $c' = (1, -1, 0, 0)/\sqrt{2}$, sua replicação efetiva é

$$R = \frac{1}{c' r^{-\delta} c} = \frac{1}{1/2r + 1/2r} = r .$$

Assim $R = r$, e deste resultado pode-se concluir que se o delineamento é ortogonal, a replicação efetiva coincide com a replicação ordinária. Porém, se blocos foram introduzidos com perda de informação, então acontecerá que $R < r$. No caso extremo, se a informação sobre $c'\tau$ não pode ser extraída da análise intra-bloco, então $R = 0$. ■

Em um delineamento ortogonal, todas as comparações entre os tratamentos são estimadas inteiramente utilizando comparações feitas dentro dos blocos. Isto é, toda a informação sobre os tratamentos é obtida na análise intrabloco.

Num delineamento não ortogonal, parte da informação é obtida das comparações dentro dos blocos. A informação restante deve ser recuperada usando a chamada análise interbloco (*interblock analysis*, em inglês), veja por exemplo Pearce, Caliński, e Marshall (1974), Dey (1986) ou John (1987). Para este propósito *fatores de eficiência* obtidos a partir da análise intrabloco, serão definidos e usados para prover critérios de comparação dos diferentes delineamentos não ortogonais.

2.7 Fatores de eficiência

Os fatores de eficiência de um delineamento em blocos são quantidades que permitem comparar as variâncias dos estimadores dos contrastes dos tratamentos, com as obtidas a partir de um delineamento ortogonal, supondo que a variância σ^2 do erro é a mesma para ambos os delineamentos. Em virtude do demonstrado acima, isto é equivalente a fazer comparações com respeito ao delineamento que poderia ter sido obtido sem fazer uso de blocos. Desta maneira, os fatores de eficiência provêem uma medida da efetividade da blocagem.

Existem duas maneiras de fazer estas comparações. Uma delas, exposta por Atiqullah (1961), considera fixo o número de unidades experimentais. A outra, proposta por Pearce (1970), considera fixo o vetor de replicações \mathbf{r} . Neste trabalho nos restringiremos à segunda abordagem, no qual se comparam dois delineamentos em blocos O e A , onde O é um delineamento ortogonal e A é algum outro delineamento dado, ambos com o mesmo vetor de replicações \mathbf{r} .

Definição 2.14 *O fator de eficiência de A em relação a O para um contraste especificado $c'\tau$, é o quociente entre a precisão $[Var(c'\hat{\tau})]_A^{-1}$ de $c'\hat{\tau}$ sob o delineamento não ortogonal A e a precisão $[Var(c'\hat{\tau})]_O^{-1}$ sob o delineamento ortogonal O . Isto é*

$$ef(c'\tau) = \frac{[Var(c'\hat{\tau})]_O}{[Var(c'\hat{\tau})]_A}$$

Conseqüentemente, o fator de eficiência de A com respeito a O pode-se calcular mediante o quociente

$$ef(c'\tau) = \frac{\sigma^2 c' \mathbf{r}^{-\delta} c}{\sigma^2 c' C^- c} = \frac{c' \mathbf{r}^{-\delta} c}{c' C^- c}.$$

onde C^- é uma inversa generalizada de C .

A partir de agora os fatores de eficiência serão considerados em relação a planos ortogonais como na definição 2.14, sem fazer menção expressa disso.

A teoria apresentada neste capítulo servirá de base para o desenvolvimento dos capítulos seguintes. Em particular, nos Capítulos 3 e 4 serão examinados os conceitos de fator de eficiência e replicação efetiva para um certo tipo de contrastes.

No próximo capítulo serão estudados os contrastes naturais e básicos de um delineamento com blocos, juntamente com suas propriedades.

Capítulo 3

Contrastes e sua eficiência

Como foi estudado no capítulo anterior, todas as comparações entre os tratamentos de um delineamento completamente ortogonal serão feitas com eficiência completa na análise intra-bloco. Neste caso, a precisão dependerá inteiramente do grau de replicação dos tratamentos. Também, existirá liberdade para quebrar a soma de quadrados dos tratamentos, porque a matriz de informação terá um único autovalor com multiplicidade $v - 1$, gerando um subespaço de autovetores de dimensão $v - 1$ e fazendo que qualquer decomposição ortogonal dos autovetores induza uma quebra possível da soma de quadrados dos tratamentos.

A situação é diferente quando o delineamento experimental utilizado não é ortogonal. Nesse caso, alguma informação será necessariamente perdida e por isso é importante identificar os contrastes que serão afetados e selecionar o delineamento experimental para assegurar que esses contrastes sejam os de menor interesse. Também, a liberdade de partição da soma dos quadrados dos tratamentos pode ser prejudicada e é importante saber quais partições podem ser *validamente* feitas. Neste capítulo será demonstrado que para qualquer delineamento em blocos existem dois tipos de contrastes chamados **naturais** e **básicos**, que possuem certas propriedades desejáveis, tais como a independência de sua estimação. O conhecimento destes contrastes será de considerável utilidade no desenvolvimento de experimentos em blocos.

Nas Seções 1 e 2, os contrastes naturais e básicos serão definidos a partir

da decomposição espectral da matriz de informação e de uma ponderação da matriz de informação. Ainda nesta seção, serão apresentados diversos resultados relacionados ao estudo desses contrastes. Na Seção 3 serão estudadas suas propriedades e por último, será apresentado na Seção 4 um exemplo ilustrativo mostrando sua utilidade. O estudo será feito para delineamentos em blocos, utilizando a teoria dos modelos lineares, baseado nos trabalhos de Pearce (1982) e Pearce, Caliński e Marshall (1974).

3.1 Contrastes naturais

A decomposição espectral da matriz de informação C tem a forma

$$C = \sum_{i=1}^h \lambda_i u_i u_i',$$

onde h é o número de autovalores não nulos de C , $\lambda_1, \dots, \lambda_h$ os autovalores e u_1, \dots, u_h os autovetores ortonormais correspondentes, com

$$u_i' u_i = 1 \quad , \quad u_i' u_j = 0 \quad \forall i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, h.$$

Definição 3.1 *Um contraste $u'\tau$ é dito natural se u é um autovetor associado a um autovalor não nulo da matriz C .*

Assim, os autovetores u_1, \dots, u_h da matriz de informação do delineamento geram os *contrastos naturais*. Eles induzem uma partição da soma de quadrados dos tratamentos, como demonstrado no seguinte lema.

Lema 3.1 *A soma de quadrados dos tratamentos decomposta em termos dos estimadores dos contrastes naturais é igual a $\sum_{i=1}^h \lambda_i (u_i' \hat{\tau})^2$.*

Prova. É obtida mediante a decomposição espectral da matriz C :

$$\begin{aligned} Q' C^{-} Q &= (C \hat{\tau})' C^{-} C \hat{\tau} = \hat{\tau}' C C^{-} C \hat{\tau} = \hat{\tau}' C \hat{\tau} \\ &= \sum_{i=1}^h \lambda_i (u_i' \hat{\tau})^2 \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Lema 3.2 *A soma de quadrados dos tratamentos pode-se escrever mediante o vetor dos totais ajustados Q como $\sum_{i=1}^h \frac{1}{\lambda_i} (u_i' Q)^2$*

Prova. Utilizando a inversa generalizada de Moore-Penrose de C resulta

$$Q' C^{-} Q = Q' C^{+} Q = \sum_{i=1}^h \frac{1}{\lambda_i} (u_i' Q)^2. \quad \blacksquare$$

Quando os autovalores são múltiplos, outras partições alternativas são possíveis. Assim, por exemplo, se $\lambda_i = \lambda_j$, os contrastes $u_i^{*'} \tau$ e $u_j^{*'} \tau$ com

$$u_i^{*} = \frac{(\psi_1 u_i + \psi_2 u_j)}{\sqrt{\psi_1^2 + \psi_2^2}} \quad \epsilon \quad u_j^{*} = \frac{(\psi_1 u_i - \psi_2 u_j)}{\sqrt{\psi_1^2 + \psi_2^2}}$$

também são naturais.

Essas partições serão igualmente boas se todos os tratamentos forem igualmente importantes para o experimentador. Porém os contrastes de interesse devem ser definidos desde o princípio, de acordo com os objetivos do experimento. Essas partições alternativas podem ser úteis na procura de um delineamento, onde estes contrastes sejam justamente aqueles gerados pela partição.

Observe que os contrastes naturais produzem uma decomposição ortogonal da soma de quadrados dos tratamentos. Eles são estatisticamente independentes sob a suposição de normalidade para o vetor \mathbf{Y} de respostas no modelo (2.1).

3.2 Contrastes básicos

Um novo conjunto de contrastes, chamados *básicos*, podem ser construídos mediante a matriz

$$F = r^{-\frac{1}{2}\delta} C' r^{-\frac{1}{2}\delta},$$

que expressa uma ponderação da matriz de informação do delineamento.

A decomposição espectral de F tem a forma

$$F = \sum_{i=1}^h \epsilon_i p_i p_i', \quad (3.1)$$

onde h é o número de autovalores ϵ_i não nulos de F e p_1, \dots, p_h são autovetores ortonormais com

$$p_i' p_i = 1 \quad \text{e} \quad p_i' p_j = 0 \quad \text{para} \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, h. \quad (3.2)$$

Os seguintes resultados permitem relacionar a estrutura da matriz de informação com a decomposição (3.1), exibindo as propriedades básicas da matriz F .

Lema 3.3 *A inversa generalizada de Moore-Penrose da matriz F é*

$$F^+ = \sum_{i=1}^h \frac{p_i p_i'}{\epsilon_i},$$

onde h é o número de autovalores não nulos de F .

Lema 3.4 *Uma inversa generalizada de C é dada por*

$$C^- = r^{-\frac{1}{2}\delta} F^+ r^{-\frac{1}{2}\delta}. \quad (3.3)$$

Lema 3.5 *A matriz F é (i) simétrica, (ii) singular, (iii) positiva semidefinida e (iv) carece de autovalores superiores a 1.*

Prova.

(i) Imediato, pela simetria da matriz C .

(ii) As relações

$$\begin{aligned} F(r^{\frac{1}{2}\delta} \mathbf{1}_v) &= r^{-\frac{1}{2}\delta} C r^{-1/2\delta} r^{\frac{1}{2}\delta} \mathbf{1}_v \\ &= r^{\frac{1}{2}\delta} C \mathbf{1}_v \\ &= \mathbf{0} \end{aligned}$$

provam que a matriz F tem a mesma quantidade de autovalores nulos do que C .

(iii) Decompondo a matriz F em termos das matrizes Φ e Δ , resulta

$$\begin{aligned}
 F &= r^{-\frac{1}{2}\delta} C r^{-\frac{1}{2}\delta} \\
 &= r^{-\frac{1}{2}\delta} \Delta \Phi \Delta' r^{-\frac{1}{2}\delta} \\
 &= r^{-\frac{1}{2}\delta} \Delta \Phi \Phi' \Delta' r^{-\frac{1}{2}\delta} \\
 &= (r^{-\frac{1}{2}\delta} \Delta \Phi) (r^{-\frac{1}{2}\delta} \Delta \Phi)'
 \end{aligned}$$

Pelo Teorema A.6 do Apêndice, F não tem autovalores negativos.

(iv) A decomposição da matriz $I_v - F$ fornece

$$\begin{aligned}
 I_v - F &= r^{-\frac{1}{2}\delta} N k^{-\delta} N' r^{-\frac{1}{2}\delta} \\
 &= r^{-\frac{1}{2}\delta} N k^{-\frac{1}{2}\delta} k^{-\frac{1}{2}\delta} N' r^{-\frac{1}{2}\delta} \\
 &= (r^{-\frac{1}{2}\delta} N k^{-\frac{1}{2}\delta}) (r^{-\frac{1}{2}\delta} N k^{-\frac{1}{2}\delta})'
 \end{aligned}$$

Pelo Teorema A.6 do Apêndice, nenhum autovalor da matriz $I_v - F$ é negativo. Da relação

$$F p = \epsilon p,$$

e aplicando o Lema A.3 do apêndice, resulta

$$(I_v - F)p = (1 - \epsilon)p.$$

Assim,

$$0 \leq \epsilon \leq 1. \quad \blacksquare$$

Em seguida definiremos e exploraremos as propriedades dos contrastes básicos, para logo estudar os fatores de eficiência dos mesmos.

Definição 3.2 Um contraste $z'\tau$ é dito básico se $z = r^{\frac{1}{2}\delta}p$, onde p é um autovetor associado a um autovalor não nulo da matriz F .

Lema 3.6 Os vetores de coeficientes dos contrastes básicos são ortonormais com respeito à matriz $r^{-\delta}$. Isto é

$$z_i' r^{-\delta} z_i = 1 \quad (3.4)$$

$$z_i' r^{-\delta} z_j = 0, \quad (i \neq j) \quad (3.5)$$

Prova. As relações (3.4) e (3.5) devem-se à ortonormalidade dos autovetores de F . \blacksquare

Lema 3.7 Se $z_i = r^{\frac{1}{2}\delta}p_i$ ($i < v$), então $z_i' \mathbf{1}_v = 0$.

Prova.

Para demonstrar que os z_i representam coeficientes de contrastes é suficiente escrever o autovetor associado ao autovalor nulo de F como $p_v = r^{\frac{1}{2}\delta} \mathbf{1}_v$, assim temos que $z_v = r^{\frac{1}{2}\delta} p_v = r^{\delta} \mathbf{1}_v$.

Se $i < v$, da relação (3.5) resulta

$$z'_i \mathbf{1}_v = z'_i \mathbf{r}^{-\delta} z_v = 0. \quad \blacksquare$$

Lema 3.8 *Se Z é uma matriz de ordem $v \times v$ contendo z_i na sua i -ésima coluna, então*

$$\begin{aligned} Z' \mathbf{r}^{-\delta} Z &= I_v \\ Z Z' &= \mathbf{r}^\delta \end{aligned}$$

Prova. É Imediata, utilizando as relações (3.1) e (3.2) ■

Lema 3.9 *Os autovalores ϵ_i da matriz F , podem ser encontrados a partir da matriz $C \mathbf{r}^{-\delta}$*

Prova. Desenvolvendo $(C \mathbf{r}^{-\delta}) z_i$ temos.

$$\begin{aligned} C \mathbf{r}^{-\delta} z_i &= (r^{\frac{1}{2}\delta} F r^{\frac{1}{2}\delta}) \mathbf{r}^{-\delta} z_i \\ &= r^{\frac{1}{2}\delta} F r^{-\frac{1}{2}\delta} z_i \\ &= r^{\frac{1}{2}\delta} \sum_{j=1}^h \epsilon_j p_j p'_j r^{-\frac{1}{2}\delta} z_i \\ &= r^{\frac{1}{2}\delta} \sum_{j=1}^h \epsilon_j p_j p'_j r^{-\frac{1}{2}\delta} r^{\frac{1}{2}\delta} p_i \\ &= r^{\frac{1}{2}\delta} \sum_{j=1}^h \epsilon_j p_j p'_j p_i \\ &= \epsilon_i r^{\frac{1}{2}\delta} p_i \\ &= \epsilon_i z_i \quad \blacksquare \end{aligned} \tag{3.6}$$

Também, a matriz C pode ser decomposta em termos de Z

Lema 3.10 *Se Z é uma matriz de ordem $v \times v$, que contém z_i na sua i -ésima coluna, então $C = Z \epsilon^\delta Z'$*

Prova. Expressando C em termos de F

$$\begin{aligned}
 C &= r^{\frac{1}{2}\delta} F r^{\frac{1}{2}\delta} \\
 &= r^{\frac{1}{2}\delta} \left(\sum_{i=1}^h \epsilon_i p_i p_i' \right) r^{\frac{1}{2}\delta} \\
 &= \sum_{i=1}^h \epsilon_i r^{\frac{1}{2}\delta} p_i p_i' r^{\frac{1}{2}\delta} \\
 &= \sum_{i=1}^h \epsilon_i z_i z_i' = Z \epsilon^\delta Z'
 \end{aligned}
 \tag{3.7}$$

A soma de quadrados de tratamentos pode ser particionada usando os contrastes básicos. Este resultado será exibido a seguir

Lema 3.11 *A soma de quadrados dos tratamentos decomposta em termos dos estimadores dos contrastes básicos é igual a $\sum_{i=1}^h \epsilon_i (z_i' \hat{\tau})^2$*

Prova.

$$\begin{aligned}
 Q' C^{-1} Q &= \hat{\tau}' C \hat{\tau} = \hat{\tau}' r^{\frac{1}{2}\delta} F r^{\frac{1}{2}\delta} \hat{\tau} \\
 &= \hat{\tau}' r^{\frac{1}{2}\delta} \left(\sum_{i=1}^h \epsilon_i p_i p_i' \right) r^{\frac{1}{2}\delta} \hat{\tau} \\
 &= \sum_{i=1}^h \epsilon_i \hat{\tau}' r^{\frac{1}{2}\delta} p_i p_i' r^{\frac{1}{2}\delta} \hat{\tau} \\
 &= \sum_{i=1}^h \epsilon_i \hat{\tau}' z_i z_i' \hat{\tau}
 \end{aligned}$$

Assim

$$Q' C^{-1} Q = \sum_{i=1}^h \epsilon_i (z'_i \hat{\tau})^2. \quad \blacksquare$$

3.3 Propriedades

Será necessário agora explorar as propriedades estatísticas dos dois tipos de contrastes acima definidos. Estas propriedades estão intimamente relacionadas com os autovalores da matriz C e F .

Lema 3.12 *Se $c'\tau = u'_i\tau$, $i = 1, \dots, h$, é um contraste natural, sua replicação efetiva é o correspondente autovalor λ_i da matriz C .*

Prova. A replicação efetiva definida no Capítulo 2 é

$$R_i = \frac{1}{c' C^{-1} c} = \frac{1}{c' C^+ c} = \frac{1}{u'_i C^+ u_i} = \frac{1}{u'_i (\sum_{j=1}^h \frac{1}{\lambda_j} u_j u'_j) u_i} = \lambda_i,$$

para $i = 1, \dots, h$, pela ortogonalidade dos autovetores. \blacksquare

O resultado anterior pode ser obtido também a partir da matriz C como no seguinte resultado.

Lema 3.13 *A replicação efetiva R_i do contraste natural $u'_i\tau$ é $u'_i C u_i$.*

Prova. A replicação efetiva é dada por

$$\begin{aligned}
\lambda_i &= \sum_{j=1}^h \lambda_j u'_i u_j u'_j u_i \\
&= u'_i \left(\sum_{j=1}^h \lambda_j u_j u'_j \right) u_i \\
&= u'_i C u_i \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Assim, os autovalores da matriz C são as replicações efetivas dos contrastes naturais.

O resultado correspondente aos contrastes básicos figura a seguir.

Lema 3.14 *O fator de eficiência de um contraste básico $z'_i \tau$, $i = 1, \dots, h$, é o correspondente autovalor ϵ_i da matriz F .*

Prova. Aplicando a Definição 2.14, o Lema 3.4 e as relações (3.4) e (3.5), obtém-se

$$\begin{aligned}
\frac{c' \mathbf{r}^{-\delta} c}{c' C^{-1} c} &= \frac{z'_i \mathbf{r}^{-\delta} z_i}{z'_i C^{-1} z_i} \\
&= \frac{1}{(r^{\frac{1}{2}\delta} p_i)' r^{-\frac{1}{2}\delta} \left(\sum_{j=1}^h \frac{p_j p'_j}{\epsilon_j} \right) r^{-\frac{1}{2}\delta} r^{\frac{1}{2}\delta} p_i} \\
&= \frac{1}{p'_i r^{\frac{1}{2}\delta} r^{-\frac{1}{2}\delta} \sum_{j=1}^h \frac{p_j p'_j}{\epsilon_j} r^{-\frac{1}{2}\delta} r^{\frac{1}{2}\delta} p_i} \\
&= \frac{1}{p'_i \sum_{j=1}^h \frac{p_j p'_j p_i}{\epsilon_j}} \\
&= \frac{1}{\sum_{j=1}^h \frac{p'_i p_j p'_j}{p_i} \epsilon_j} = \epsilon_i. \quad \blacksquare
\end{aligned}$$

Isto é, os autovalores não nulos da matriz F são os fatores de eficiência dos contrastes básicos, quando estes podem ser estimados na análise intrabloco. Para estes

contrastes, a soma dos fatores de eficiência na análise intrabloco e na análise interbloco é 1 e esse fato permite determinar a quantidade de informação que deve ser recuperada na análise interbloco, veja Pearce, Caliński e Marshall (1974).

Outros resultados úteis em relação aos fatores de eficiência dos contrastes básicos para delineamentos em blocos, são dados a seguir. O primeiro deles trata da relação que existe entre os contrastes naturais e básicos no caso equi-replicado.

Lema 3.15 *Se o delineamento em blocos é equi-replicado, os contrastes naturais e básicos coincidem exceto um fator de escala. O fator de eficiência é $\epsilon_i = \frac{R_i}{r} = \frac{\lambda_i}{r}$.*

Prova. Expressando a matriz F em termos de C , resulta a relação

$$F = r^{-\frac{1}{2}\delta} C r^{-\frac{1}{2}\delta}.$$

Se o delineamento é equi-replicado, essa matriz tem a forma

$$F = \frac{1}{\sqrt{r}} I C \frac{1}{\sqrt{r}} I = \frac{1}{r} C,$$

com autovalores iguais a $\frac{\lambda_i}{r}$, $i = 1, \dots, v$. ■

O próximo resultado mostra que a partir do conhecimento dos fatores de eficiência dos contrastes básicos, se poderá ter informação à respeito da eficiência do plano experimental. A demonstração deste resultado encontra-se em John (1987).

Lema 3.16 *Nenhum contraste de tratamentos $c'\tau$ pode ter fator de eficiência menor (maior) que o mínimo (máximo) fator de eficiência dos contrastes básicos. Isto é*

$$\epsilon_{min} \leq ef(c'\tau) \leq \epsilon_{max}$$

Um resultado relacionado com a ortogonalidade entre tratamentos e blocos, equivalente à definição 3.8 e dada em termos dos fatores de eficiência dos contrastes, foi fornecida por Pearce (1983a).

Lema 3.17 *Os tratamentos e os blocos de um delineamento são ditos ortogonais se todos os contrastes são estimados com eficiência completa. Isto é, se todos os autovalores não nulos da matriz F são iguais a 1.*

Assim, os contrastes básicos e naturais oferecem várias vantagens além da independência na sua estimação. Eles fornecem importante informação sobre a potência do experimento planejado, desde que **um autovalor de C indica a variância do contraste natural e o autovalor de F a eficiência da estimação do contraste básico**, sendo esses contrastes os mesmos no caso dos delineamentos equi-replicados. Assim, é mais fácil determinar o alcance do delineamento experimental antes da execução do experimento.

Para finalizar, deve-se notar que em Caliński (1977) é sugerida uma generalização dos contrastes básicos. Os contrastes naturais e básicos, já estudados, são casos particulares da mesma.

A utilidade da teoria apresentada, será ilustrada através do seguinte exemplo, derivado da situação experimental apresentada no Exemplo 2.1.

3.4 Exemplo

A matriz F para o delineamento A1 do Exemplo 2.1 pode ser obtida mediante a matriz de informação C

$$F = r^{-\frac{1}{2}\delta} C r^{-\frac{1}{2}\delta} = \frac{1}{r} C = \frac{1}{4} C = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 6 & -1 & -1 & -2 & -1 & -1 \\ -1 & 6 & -1 & -1 & -2 & -1 \\ -1 & -1 & 6 & -1 & -1 & -2 \\ -2 & -1 & -1 & 6 & -1 & -1 \\ -1 & -2 & -1 & -1 & 6 & -1 \\ -1 & -1 & -2 & -1 & -1 & 6 \end{pmatrix}$$

Os autovalores de C são $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 3$, $\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = 4$ e os autovalores de F são $\epsilon_1 = 0$, $\epsilon_2 = \epsilon_3 = 0.75$ e $\epsilon_4 = \epsilon_5 = \epsilon_6 = 1$.

Os autovetores de ambas matrizes coincidem, pois o delineamento é equi-replicado com quatro replicações para cada tratamento. Uma possível escolha para eles é a seguinte:

$$\begin{aligned} u'_1 &= \frac{1}{\sqrt{6}}(1, 1, 1, 1, 1, 1) \\ u'_2 &= \frac{1}{\sqrt{12}}(-1, -1, 2, -1, -1, 2) \\ u'_3 &= \frac{1}{2}(1, -1, 0, 1, -1, 0) \\ u'_4 &= \frac{1}{2}(-1, 1, 0, 1, -1, 0) \\ u'_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 0, 1, 0, 0, -1) \\ u'_6 &= \frac{1}{2}(1, 1, 0, -1, -1, 0). \end{aligned}$$

Os contrastes básicos têm neste caso a forma $z_i = r^{1/2\delta} p_i = 2p_i = 2u_i$.

Eles não serão univocamente determinados, pois os autovalores 3 e 4 têm multiplicidade 2 e 3, respectivamente.

Assim, o contraste

$$c'_1 = \frac{2}{\sqrt{6}}(1, 1, 1, -1, -1, -1)$$

é básico, sendo de interesse para a situação experimental em estudo. Ele tem fator de eficiência igual a 1, replicação efetiva igual a 4 e variância igual a $0.25\sigma^2$. Será estimado com eficiência completa e toda a informação a seu respeito será tirada da análise intra-bloco.

Também são contrastes básicos os contrastes da interação

$$c'_2 = (1, -1, 0, -1, 1, 0) \quad c'_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, -2, -1, -1, 2).$$

Eles têm a mesma replicação efetiva 4, são estimados com variância $0.25\sigma^2$ e com fatores de eficiência iguais a 1.

Por outro lado, o efeito principal do fator variedade é estimado pelos contrastes

$$c'_4 = (1, -1, 0, 1, -1, 0) \quad c'_5 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, -2, 1, 1, -2).$$

Ambos são básicos, com replicações efetivas iguais a 3 e estimados com variâncias $0.33\sigma^2$ e fatores de eficiência de 0.75.

Desta forma, se $\tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6)'$ é o vetor dos parâmetros de tratamentos, a soma de quadrados associada $SQ_{TRAT} = \sum_{i=1}^5 \epsilon_i (c'_i \hat{\tau})^2$ pode ser decomposta de acordo à seguinte tabela parcial de análise da variância dos resultados experimentais.

Tabela 3.1: *Partição da soma de quadrados dos tratamentos para o delineamento A1.*

Fonte de Variação	Soma de Quadrados	Graus de liberdade
Fertilizante (F)	$(c'_1 \hat{\tau})^2$	1
Variedade (V)	$\frac{3}{4}[(c'_4 \hat{\tau})^2 + (c'_5 \hat{\tau})^2]$	2
Interação ($F \times V$)	$(c'_2 \hat{\tau})^2 + (c'_3 \hat{\tau})^2$	2

Observe-se que a multiplicidade dos autovalores das matrizes C e F , permite encontrar ainda partições alternativas da soma de quadrados dos tratamentos. Assim por exemplo, os vetores c_1 , c_2 , e c_3 podem ser combinados de outras maneiras. ■

O estudo feito neste capítulo mostrou a informação que pode ser obtida a respeito dos contrastes, suas variâncias e suas eficiências, utilizando a decomposição espectral das matrizes C e F . No Capítulo 4, será feita uma digressão para explorar a estrutura espectral das matrizes C e F para diversos tipos de delineamentos não ortogonais. A mesma permitirá estudar de forma sistemática replicações efetivas e fatores de eficiência dos contrastes naturais e básicos para esses delineamentos.

Capítulo 4

Eficiência de Delineamentos não ortogonais

Os contrastes naturais e básicos produzem informações importantes sobre a solvência com que o plano experimental pode responder às perguntas do pesquisador.

Neste capítulo estudaremos de maneira sistemática esse assunto. Para isso, será explorada a análise da classe dos delineamentos não ortogonais proposta por Pearce (1963, 1976a). No primeiro desses artigos, Pearce propõe uma classificação que utiliza como critério os padrões de simetria da matriz $\Omega^{-1} = C + rr'/n$, feita antes da popularização do uso das inversas generalizadas na Estatística e sem utilizar diretamente a matriz C . No segundo artigo, Pearce (1976a) estende as definições consideradas após introduzir a noção de concorrência ponderada, já discutida no Capítulo 2. A generalidade da ponderação permite neste caso ampliar as classes de planos não ortogonais da classificação original.

Neste capítulo utilizaremos essa segunda classificação ampliada, para obter a estrutura ou padrão da matriz C para alguns tipos importantes de delineamentos não ortogonais em blocos. Utilizando esse padrão e a estrutura espectral associada, poderão ser obtidas diversas quantidades relevantes para avaliar a qualidade e permitir a comparação direta de delineamentos experimentais.

Para cada classe de delineamentos serão calculadas as replicações efetivas e os fatores de eficiência. Como foi visto nos Capítulos 2 e 3, as primeiras estão relacionadas com as variâncias dos contrastes estimados, enquanto os segundos indicam a eficiência da estimação.

Da classificação dada por Pearce, foram extraídos os delineamentos com matriz de informação completamente simétrica. Embora os delineamentos cíclicos não estejam dentro desta classe, eles também serão estudados aqui devido a simplicidade da estrutura espectral da matriz C associada, que produz interessantes propriedades.

Neste trabalho apresentaremos demonstrações detalhadas só nos casos em que as mesmas não se encontram na literatura consultada. Para os delineamentos que denominaremos de tipo S foi derivada a estrutura da matriz F para o caso usual em que o tratamento controle ou padrão é replicado um número diferente de vezes, calculando neste caso os fatores de eficiência. Para os outros tipos de delineamentos, esses fatores foram derivados somente para o caso equi-replicado.

O grupo de delineamentos apresentado aqui, distingue-se por sua aplicabilidade prática, especialmente na agricultura. Esses delineamentos possuem certas propriedades desejáveis, tais como a simplicidade na análise dos dados e a flexibilidade na sua construção (no sentido de permitir blocos de diferentes tamanhos e/ou diferentes replicações dos tratamentos). Alguns delineamentos provêm informação precisa de certos contrastes, pois são construídos levando em consideração as relações existentes entre tratamentos ou grupos de tratamentos.

Começaremos a explorar a classificação introduzindo os delineamentos totalmente equilibrados (ou totalmente balanceados) e os que possuem equilíbrio suplementar (ou balanço suplementar). Prosseguiremos com os delineamentos divisíveis em grupos, os multiparticionados, os biparticionados e os cíclicos. Finalmente apresentaremos uma tabela para exibir os resultados obtidos, ilustrando depois os mesmos mediante exemplos.

4.1 Delineamentos de tipo T

O primeiro grupo da classificação está constituído pelos delineamentos totalmente equilibrados ou de tipo T (*totally balanced*, em inglês). A definição original de Pearce (1963) e a sua extensão figuram a seguir.

Definição 4.1 *Seja d um delineamento experimental, com matriz de informação C e vetor de replicações \mathbf{r} , e seja $\Omega^{-1} = C + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{n}$. d é dito totalmente equilibrado se Ω^{-1} é completamente simétrica, isto é se (i) todos os elementos diagonais de Ω^{-1} são iguais à constante a e (ii) todos os elementos fora da diagonal principal são iguais à constante b .*

Da relação $\Omega^{-1}\mathbf{1} = \mathbf{r}$, segue que os delineamentos definidos acima serão sempre equi-replicados. A definição anterior pode ser generalizada como segue.

Definição 4.2 *Um delineamento d é dito do tipo T_0 , se todos os pares de tratamentos possuem o mesmo número β de concorrências ponderadas.*

Como veremos, os delineamentos acima possuem a qualidade distintiva de estimar todos os contrastes com igual precisão, permitindo quebrar ortogonalmente a soma de quadrados dos tratamentos de qualquer maneira desejada. Um caso particular destes são os blocos incompletos equilibrados ou blocos incompletos balanceados (*balanced incomplete block designs ou BIBD*, em inglês). Porém, no caso geral dos delineamentos de tipo T_0 não é necessário que esses delineamentos possuam blocos de igual tamanho, nem que o número de replicações seja o mesmo para todos os tratamentos. Além disso, não é necessário também que o número v de tratamentos seja superior ao tamanho k dos blocos.

Lema 4.1 *Seja d um delineamento experimental de tipo T_0 para v tratamentos. Então (i) os contrastes naturais correspondentes a qualquer comparação de tratamentos são estimados com variâncias iguais a $\frac{\sigma^2}{v\beta}$ e (ii) se d é equi-replicado com r replicações, seus fatores de eficiência são iguais a $\frac{v\beta}{r}$.*

Prova. (i) De acordo com a definição anterior, a matriz C para estes delineamentos tem a forma

$$C = \begin{pmatrix} (v-1)\beta & -\beta & \cdots & -\beta \\ -\beta & (v-1)\beta & \cdots & -\beta \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\beta & -\beta & \cdots & (v-1)\beta \end{pmatrix} = v\beta I_v - \beta \mathbf{1}_v \mathbf{1}'_v$$

Os autovalores da matriz C são as quantidades λ que anulam o determinante da matriz $|C - \lambda I_v|$. Os mesmos serão obtidos utilizando o Lema A.1 e o Corolário A.2 do Apêndice.

$$\begin{aligned} |C - \lambda I_v| &= |v\beta I_v - \beta \mathbf{1}_v \mathbf{1}'_v - \lambda I_v| \\ &= |(v\beta - \lambda)I_v - \beta \mathbf{1}_v \mathbf{1}'_v| \\ &= (v\beta - \lambda)^v \left| I_v - \frac{\beta}{v\beta - \lambda} \mathbf{1}_v \mathbf{1}'_v \right| \\ &= (v\beta - \lambda)^v \left(1 - \frac{v\beta}{v\beta - \lambda} \right) \\ &= (v\beta - \lambda)^{v-1} (-\lambda). \end{aligned}$$

Assim, os autovalores são $\lambda = 0$ com multiplicidade 1 e $\lambda = v\beta$ com multiplicidade $v - 1$.

(ii) Se o delineamento é equi-replicado, a matriz F é igual a $\frac{1}{r} C$ com autovalores $\epsilon = 0$ com multiplicidade 1, e $\epsilon = \frac{v\beta}{r}$ com multiplicidade $(v - 1)$. ■

Desta forma, os contrastes naturais e qualquer contraste normalizado serão estimados com variâncias iguais a $\frac{\sigma^2}{v\beta}$. Neste caso, a matriz C tem um único autovalor de multiplicidade $v - 1$, ao qual corresponderá um espaço de autovetores de dimensão $v - 1$. Qualquer combinação linear destes autovetores será também um contraste natural, isto é, qualquer contraste será natural. As replicações efetivas dos contrastes serão todas iguais a $v\beta$.

Corolário 4.1 *Se o delineamento d é um BIBD com parâmetros k , v , r e α , então (i) os contrastes naturais correspondentes a qualquer comparação de tratamentos são estimados com variâncias iguais a $\frac{k\sigma^2}{v\alpha}$ e (ii) os fatores de eficiência são iguais a $\frac{v\alpha}{rk}$.*

Prova. Se d é um BIBD, a matriz C tem a estrutura

$$C = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} r(k-1) & -\alpha & \cdots & -\alpha \\ -\alpha & r(k-1) & \cdots & -\alpha \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -\alpha & -\alpha & \cdots & r(k-1) \end{pmatrix}.$$

Neste caso $\beta = \frac{\alpha}{k}$, substituindo este valor nos resultados do lema anterior obtém-se as replicações efetivas dos contrastes, iguais a $\lambda = \frac{v\alpha}{k}$. Desta forma, eles serão estimados todos com a mesma precisão $\frac{k}{v\alpha}\sigma^2$ e com o mesmo fator de eficiência $\epsilon = \frac{\alpha v}{rk}$. ■

Observação: Os fatores de eficiência acima obtidos coincidem com a conhecida medida de eficiência E para delineamentos em blocos incompletos equilibrados, exibida por exemplo em Cochran e Cox (1957).

Nosso próximo objetivo é estudar planos experimentais nos quais a presença de um tratamento específico não perturba o anterior padrão de simetria da matriz Ω^{-1} .

4.2 Delineamentos de tipo S

As definições estrita e ampla desses delinamentos são as seguintes.

Definição 4.3 *Seja d um delineamento experimental, com matriz de informação C e vetor de replicações \mathbf{r} , e seja $\Omega^{-1} = C + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{n}$. Se Ω^{-1} pode ser particionada na forma*

$$\begin{pmatrix} a & b_0 \mathbf{1}'_{v-1} \\ b_0 \mathbf{1}_{v-1} & (a-b)I_{v-1} + b \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} \end{pmatrix},$$

onde a , b e b_0 são constantes reais, o delineamento d tem equilíbrio suplementado. Neste caso, d é dito de Tipo S .

Da relação $\Omega^{-1} \mathbf{1} = \mathbf{r}$, segue que o vetor de replicações dos delineamentos definidos acima sempre serão da forma $\mathbf{r} = (r_0, r, \dots, r)'$.

Definição 4.4 Um delineamento d em blocos é dito do tipo S_0 , se existe um tratamento que faz β_0 concorrências ponderadas com cada um dos outros, todos os outros pares de tratamentos fazendo β concorrências ponderadas entre si.

Nestes delineamentos, aquele tratamento que é diferente dos outros é chamado de **tratamento suplementar** (*supplementing treatment*, em inglês). Os tratamentos não suplementares são totalmente equilibrados entre eles, exibindo a mesma relação com respeito ao tratamento suplementar.

Os delineamentos acima surgem quando um tratamento, geralmente um controle ou padrão, tem um status especial frente ao resto dos tratamentos, sendo o principal interesse obter (a) comparações precisas entre ele e os outros tratamentos ou (b) comparações precisas entre os outros tratamentos. Situações experimentais onde este tipo de delineamentos pode ser aplicado apresentam-se com frequência na prática, como veremos no Cap. 6, onde eles serão estudados com mais detalhe.

As propriedades estatísticas dos delineamentos com equilíbrio suplementar são exibidas no seguinte resultado

Lema 4.2 Seja d um delineamento de tipo S_0 para v tratamentos. Então (i) os contrastes naturais correspondentes às comparações do tratamento suplementar com os outros e as

comparações entre os outros tratamentos são estimados com variâncias iguais a $\frac{\sigma^2}{v\beta_0}$ e $\frac{\sigma^2}{\beta_0+(v-1)\beta}$ e (ii) se d tem vetor de replicações dado por $\mathbf{r} = (r_0, r, \dots, r)'$, seus fatores de eficiência são iguais a $\frac{\beta_0+(v-1)\beta}{r}$ e $(\frac{1}{r} + \frac{v-1}{r_0})\beta_0$, respectivamente.

Prova. (i) A matriz C para este tipo de delineamentos tem a estrutura

$$C = \begin{pmatrix} (v-1)\beta_0 & -\beta_0 \mathbf{1}'_{v-1} \\ -\beta_0 \mathbf{1}_{v-1} & (\beta_0 + (v-1)\beta)I_{v-1} - \beta \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} \end{pmatrix}.$$

Neste caso os autovalores serão encontrados calculando o determinante de $|C - \lambda I_v|$, aplicando o Corolário A.3 e operando como no Lema 4.1:

$$\begin{aligned} |C - \lambda I_v| &= |(v-1)\beta_0 - \lambda| \left| (\beta_0 + (v-1)\beta - \lambda)I_{v-1} - \beta \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} - \frac{\beta_0^2}{(v-1)\beta_0 - \lambda} \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} \right| \\ &= [\beta_0 + (v-1)\beta - \lambda]^{v-2} [\lambda^2 - \lambda v \beta_0], \end{aligned}$$

os autovalores obtidos são $\lambda = \beta_0 + (v-1)\beta$ com multiplicidade $(v-2)$, $\lambda = v\beta_0$ com multiplicidade 1 e $\lambda = 0$ com multiplicidade 1.

(ii) Para este tipo de delineamentos o vetor de replicações é usualmente $\mathbf{r} = (r_0, r, r, \dots, r)'$, onde r_0 é o número de replicações do tratamento suplementar e r designa o número de replicações dos outros tratamentos. Calculando $F = r^{-\frac{1}{2}\delta} C r^{-\frac{1}{2}\delta}$, obtém-se a estrutura

$$F = \begin{pmatrix} \frac{(v-1)\beta_0}{r_0} & \frac{-\beta_0}{\sqrt{r r_0}} \mathbf{1}'_{v-1} \\ \frac{-\beta_0}{\sqrt{r r_0}} \mathbf{1}_{v-1} & \left(\frac{\beta_0+(v-1)\beta}{r} \right) I_{v-1} - \frac{\beta}{r} \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} \end{pmatrix},$$

com autovalores λ que anulam o determinante

$$\begin{aligned} |F - \lambda I_v| &= \left| \frac{(v-1)\beta_0}{r_0} - \lambda \right| \left| \frac{(\beta_0 + (v-1)\beta)}{r} - \lambda \right| I_{v-1} - \left(\frac{\beta}{r} + \frac{\beta_0^2}{r((v-1)\beta_0 - \lambda r_0)} \right) \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} \\ &= \left(\frac{\beta_0 + (v-1)\beta}{r} - \lambda \right)^{v-2} (\lambda r r_0 - (\beta_0 r_0 + (v-1)r\beta_0)\lambda). \end{aligned}$$

Assim, os autovalores de F são $\epsilon = \frac{(\beta_0 + (v-1)\beta)}{r}$ com multiplicidade $v-2$, $\epsilon = \frac{\beta_0}{r} + \frac{(v-1)\beta_0}{r_0}$ com multiplicidade 1 e $\epsilon = 0$ com multiplicidade 1. ■

Estudaremos a seguir os delineamentos divisíveis em grupos e os delineamentos multiparticionados. Neles os tratamentos são divididos em classes, obtendo-se assim matrizes em Ω^{-1} e C particionadas.

4.3 Delineamentos de tipo G

As duas definições correspondentes a esses delineamentos são as seguintes.

Definição 4.5 *Seja d um delineamento experimental, com matriz de informação C e vetor de replicações \mathbf{r} , e seja $\Omega^{-1} = C + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{n}$. d é dito divisível em grupos (group-divisible, em inglês) ou de tipo G se (i) os tratamentos se dividem em m grupos de t membros cada um, (ii) os elementos diagonais de Ω^{-1} são iguais à constante a e (iii) os elementos extra-diagonais são iguais à constante b se os dois tratamentos estão no mesmo grupo e à constante b' , em caso contrário.*

A definição anterior pode ser estendida como segue.

Definição 4.6 *Um delineamento d é dito de tipo G_0 se todos os tratamentos formam m grupos de t membros cada grupo, tais que qualquer par de tratamentos no mesmo grupo*

faz β_1 concorrências ponderadas e qualquer par de tratamentos em grupos diferentes faz β_2 concorrências ponderadas.

Nos delineamentos de tipo G_0 não é necessário que os blocos sejam do mesmo tamanho, nem que os tratamentos sejam igualmente replicados.

Este tipo de delineamentos tem sua utilidade quando o interesse é estimar contrastes dentro dos grupos, mais do que estimá-los entre os grupos. Eles podem ser úteis em experimentos com um conjunto fatorial de tratamentos onde algumas interações ou efeitos principais são de maior importância. Os seguintes resultados mostram as propriedades desses delineamentos.

Lema 4.3 *Seja d um delineamento experimental de tipo G_0 . Então (i) os contrastes naturais correspondentes às comparações de tratamentos dentro de cada classe e as comparações de tratamentos entre classes, são estimados com variâncias iguais a $\frac{\sigma^2}{\beta_0 + \beta_1}$ e $\frac{\sigma^2}{v\beta_2}$, respectivamente; (ii) se d é equi-replicado com r replicações, seus fatores de eficiência são iguais a $\frac{\beta_0 + \beta_1}{r}$ e $\frac{v\beta_2}{r}$, respectivamente.*

Prova. (i) A matriz C do delineamento tem a forma

$$C = \begin{pmatrix} (\beta_0 + \beta_1)I_t - \beta_1 1_t 1_t' & -\beta_2 1_t 1_t' & \cdots & -\beta_2 1_t 1_t' \\ -\beta_2 1_t 1_t' & (\beta_0 + \beta_1)I_t - \beta_1 1_t 1_t' & \cdots & -\beta_2 1_t 1_t' \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -\beta_2 1_t 1_t' & -\beta_2 1_t 1_t' & \cdots & (\beta_0 + \beta_1)I_t - \beta_1 1_t 1_t' \end{pmatrix},$$

com m^2 sub-matrizes de ordem t . Neste caso, os autovalores serão encontrados aplicando o Teorema A.4 do Apêndice e operando como no Lema 4.1. Se $S = (\beta_0 + \beta_1)I_t - \beta_1 1_t 1_t'$ e $M = -\beta_2 1_t 1_t'$, deve-se anular o determinante

$$|C - \lambda I_v| = |S - \lambda I_t - M|^{m-1} |S - \lambda I_t + (m-1)M|$$

$$= (\beta_0 + \beta_1 - \lambda)^{m(t-1)} (\beta_0 + \beta_1 - \lambda + t\beta_2 - t\beta_1)^{m-1} \\ (\beta_0 + \beta_1 - \lambda - \beta_1 t - mt\beta_2 + t\beta_2)$$

Cada elemento diagonal de C satisfaz a relação $\beta_0 = (t-1)\beta_1 + (m-1)t\beta_2$ e $m \times t = v$, substituindo esses valores nas equações acima obtêm-se os autovalores $\lambda = \beta_0 + \beta_1$ com multiplicidade $m(t-1)$, $\lambda = v\beta_2$ com multiplicidade $m-1$ e $\lambda = 0$ com multiplicidade 1. ■

Corolário 4.2 *Se d é próprio, equi-replicado e binário, então (i) os contrastes naturais correspondentes às comparações de tratamentos dentro de cada classe e as comparações de tratamentos entre classes, são estimados com variâncias iguais a $\frac{k\sigma^2}{rk-r+\alpha_1}$ e $\frac{k\sigma^2}{v\alpha_2}$, respectivamente e (ii) os fatores de eficiência são iguais a $\frac{rk-r+\alpha_1}{rk}$ e $\frac{v\alpha_2}{rk}$, respectivamente.*

Prova. (i) A matriz C tem a estrutura

$$C = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} (r(k-1) + \alpha_1)I_t - \alpha_1 1_t 1_t' & -\alpha_2 1_t 1_t' & \cdots & -\alpha_2 1_t 1_t' \\ -\alpha_2 1_t 1_t' & (r(k-1) + \alpha_1)I_t - \alpha_2 1_t 1_t' & \cdots & -\alpha_2 1_t 1_t' \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\alpha_2 1_t 1_t' & -\alpha_2 1_t 1_t' & \cdots & (r(k-1) + \alpha_1)I_t - \alpha_1 1_t 1_t' \end{pmatrix}$$

onde α_1 e α_2 denotam concorrências não ponderadas. Os autovalores desta matriz são $\lambda = \frac{rk-r+\alpha_1}{k}$ com multiplicidade $m(t-1)$, $\lambda = \frac{v\alpha_2}{k}$ com multiplicidade $(m-1)$ e $\lambda = 0$ com multiplicidade 1.

(ii) Os autovalores da matriz F são $\epsilon = \frac{rk-r+\alpha_1}{rk}$ com multiplicidade 1, $\epsilon = \frac{v\alpha_2}{rk}$ com multiplicidade $(m-1)$ e $\epsilon = 0$, com multiplicidade 1. ■

4.4 Delineamentos de tipo M

Os delineamentos multiparticionados são definidos mediante submatrizes de Ω^{-1} , não necessariamente da mesma dimensão.

Definição 4.7 *Seja d um delineamento com matriz de informação C e vetor de replicações \mathbf{r} , e seja $\Omega^{-1} = C + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{n}$. d é dito de tipo M se Ω^{-1} pode ser particionada como*

$$\begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & \cdots & D_{1m} \\ D_{12} & D_{22} & \cdots & D_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{1m} & D_{2m} & \cdots & D_{mm} \end{pmatrix}$$

onde as submatrizes diagonais D_{ii} têm elementos diagonais iguais à constante a_i e elementos extra-diagonais iguais à constante b_i e as matrizes extra-diagonais D_{ij} ($i \neq j$) tem todos seus elementos iguais à constante d_{ij} , $i, j = 1, \dots, m$.

Definição 4.8 *Seja d um delineamento experimental com blocos. d é dito de tipo M_0 , se todos os tratamentos se dividem em m grupos com v_i tratamentos no i -ésimo grupo, tal que todos os pares de tratamentos do i -ésimo grupo fazem β_{ii} concorrências ponderadas e todos os pares de diferentes grupos fazem β_{ij} concorrências ponderadas para um tratamento no i -ésimo e o outro no j -ésimo grupo. $i, j = 1, \dots, m$.*

Em delineamentos deste tipo, os blocos podem ser de diferentes tamanhos e as replicações podem ser desiguais. Eles são principalmente usados quando os tratamentos são agrupados de maneira que as comparações principais devem ser feitas geralmente dentro dos grupos, e ocasionalmente entre eles.

4.4.1 Delineamentos de tipo B

Um caso particular dos delineamentos multiparticionados são os biparticionados ou de tipo B , definidos a seguir.

Definição 4.9 *Seja d um delineamento com matriz de informação C e vetor de replicações \mathbf{r} , e seja $\Omega^{-1} = C + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{n}$. d é dito de tipo B se Ω^{-1} pode ser particionada na forma*

$$\begin{pmatrix} (a_1 - b_1)I + b_1\mathbf{1}\mathbf{1}' & d_{12}\mathbf{1}\mathbf{1}' \\ d_{12}\mathbf{1}\mathbf{1}' & (a_2 - b_2)I + b_2\mathbf{1}\mathbf{1}' \end{pmatrix}.$$

Definição 4.10 *Um delineamento é dito do Tipo B_0 , se os tratamentos se dividem em dois grupos, tal que todos os pares de tratamentos do primeiro grupo fazem β_1 concorrências ponderadas, todos os pares do segundo grupo fazem β_2 concorrências ponderadas e todos os pares de diferentes grupos fazem β_3 concorrências ponderadas.*

Lema 4.4 *Seja d um delineamento de tipo B_0 , então (i) os contrastes naturais correspondentes às comparações dentro do primeiro grupo, as comparações dentro do segundo grupo e às comparações entre os grupos são estimados com variâncias iguais a $\frac{\sigma^2}{\beta_0 + \beta_1}$, $\frac{\sigma^2}{\beta + \beta_2}$ e $\frac{\sigma^2}{v\beta_3}$ respectivamente e (ii) se d é equi-replicado com r replicações, seus fatores de eficiência são iguais a $\frac{\beta_0 + \beta_1}{r}$, $\frac{\beta + \beta_2}{r}$ e $\frac{v\beta_3}{r}$, respectivamente.*

Prova. (i) A matriz C tem a estrutura

$$C = \begin{pmatrix} (\beta_0 + \beta_1)I_t - \beta_1\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t & -\beta_3\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_{v-t} \\ -\beta_3\mathbf{1}_{v-t}\mathbf{1}'_t & (\beta + \beta_2)I_{v-t} - \beta_2\mathbf{1}_{v-t}\mathbf{1}'_{v-t} \end{pmatrix}$$

Utilizando o Teorema A.1, o Lema A.1 e o Corolário A.2, resulta

$$\begin{aligned}
|C - \lambda I_v| &= (\beta_0 - \lambda + \beta_1)^{t-1} (\beta_0 - \lambda - (t-1)\beta_1) \\
&\quad \left| (\beta + \beta_2 - \lambda) I_{v-t} - \beta_2 \mathbf{1}_{v-t} \mathbf{1}'_{v-t} - \beta_3 \mathbf{1}_{v-t} \mathbf{1}'_t \left(\frac{1}{(\beta_0 - \lambda + \beta_1)} I_t + \frac{\beta_1}{(\beta_0 - \lambda + \beta_1)(\beta_0 - \lambda - (t-1)\beta_1)} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t \right) \beta_3 \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_{v-t} \right| \\
&= (\beta_0 - \lambda + \beta_1)^{t-1} (\beta + \beta_2 - \lambda)^{v-t-1} \lambda (\lambda - v\beta_3)
\end{aligned}$$

Desta forma, os autovalores são $\lambda = \beta_0 + \beta_1$ com multiplicidade $t - 1$, $\lambda = \beta + \beta_2$ com multiplicidade $v - t - 1$, $\lambda = v\beta_3$ com multiplicidade 1 e $\lambda = 0$ com multiplicidade 1.

(ii) Se o delineamento é equi-replicado, os autovalores da matriz F serão $\epsilon = \frac{\beta_0 + \beta_1}{r}$ com multiplicidade $t - 1$, $\epsilon = \frac{\beta + \beta_2}{r}$ com multiplicidade $v - t - 1$, $\epsilon = \frac{v\beta_3}{r}$ com multiplicidade 1 e $\epsilon = 0$ com multiplicidade 1. ■

No caso de se ter igual número de tratamentos em cada grupo, temos o seguinte resultado.

Corolário 4.3 *Seja d um delineamento experimental com blocos. Se d é de tipo B com igual número de tratamentos em cada grupo, então (i) os contrastes naturais correspondentes às comparações dentro do primeiro grupo, as comparações dentro do segundo grupo e às comparações entre os grupos são estimados com variâncias iguais a $\frac{\sigma^2}{\beta_0 + \beta_1}$, $\frac{\sigma^2}{\beta + \beta_2}$ e $\frac{\sigma^2}{2(\beta_0 - (t-1)\beta_1)}$, respectivamente e (ii) se d é equi-replicado com vetor $r\mathbf{1}$, seus fatores de eficiência são iguais a $\frac{\beta_0 + \beta_1}{r}$, $\frac{\beta + \beta_2}{r}$ e $\frac{2(\beta_0 - (t-1)\beta_1)}{r}$, respectivamente.*

Prova. (i) É suficiente substituir v por $2t$ e $\beta_3 = \frac{\beta_0 - (t-1)\beta_1}{t}$ no lema anterior. ■

A seguir, estudaremos uma importante classe de delineamentos em blocos recentemente desenvolvida.

4.5 Delineamentos cíclicos

Os delineamentos cíclicos são delineamentos em blocos incompletos, consistindo no caso mais simples de um conjunto de blocos obtidos a partir de uma permutação cíclica do bloco inicial. Assim, nestes delineamentos os tratamentos são arranjados em um ciclo. Assim por exemplo, se $v = 5$ pode ser obtido o seguinte arranjo.

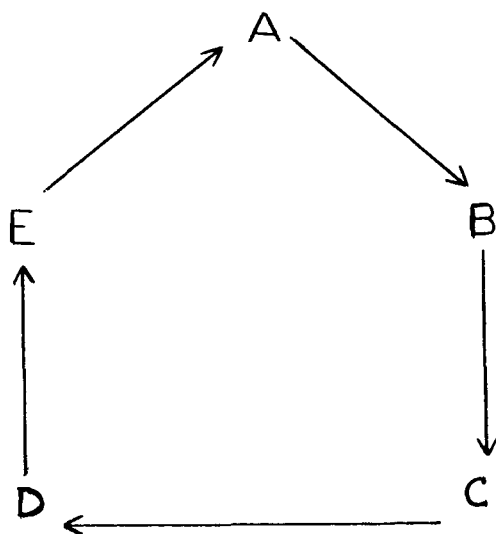


Figura 4.1: *Arranjo cíclico*

Escolhendo o primeiro bloco, os outros são derivados dele por permutação cíclica. Se por exemplo o bloco 1 contém os tratamentos ABC , os outros conteriam BCD , CDE , DEA e EAB respectivamente.

I	II	III	IV	V
A	B	C	D	E
B	C	D	E	A
C	D	E	A	B

Figura 4.2: *Delineamento cíclico em blocos, correspondente ao arranjo de figura 4.1.*

Estes delineamentos devem ser binários, equi-replicados e próprios. Assim os BIBD obtidos a partir de permutações cíclicas de um bloco inicial são delineamentos cíclicos. A matriz de concorrências NN' e a matriz de informação C têm neste caso a estrutura de matrizes *circulantes*, cada uma definida a partir de sua primeira linha.

Além de sua flexibilidade, estes delineamentos têm algumas propriedades atrativas, já que o plano experimental completo pode ser gerado facilmente a partir dos blocos iniciais. Os delineamentos cíclicos exibem suas vantagens se o interesse é comparar cada tratamento com seus vizinhos, veja por exemplo David (1982), Dey (1986) e John (1987).

Definição 4.11 *Um delineamento experimental d em blocos é dito cíclico se a matriz C tem a estrutura simétrica*

$$C = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} r(k-1) & -\alpha_1 & -\alpha_2 & \cdots & -\alpha_{v-1} \\ -\alpha_{v-1} & r(k-1) & -\alpha_1 & \cdots & -\alpha_{v-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\alpha_1 & -\alpha_2 & -\alpha_3 & \cdots & r(k-1) \end{pmatrix},$$

onde $\alpha_i = \alpha_{v-i}$, $i = 1, \dots, v-1$.

Lema 4.5 *Se d é um delineamento cíclico, então (i) os contrastes naturais são estimados com variâncias iguais a $\frac{\sigma^2}{\lambda_j}$ e (ii) seus fatores de eficiência são iguais a $\frac{\lambda_j}{r}$.*

Prova. Isto é facilmente demonstrado aplicando o Teorema A.2 do Apêndice. Assim, os autovalores da matriz C têm a forma

$$\lambda_j = \frac{r(k-1)}{k} - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{v-1} \alpha_i \cos\left(\frac{2\pi ji}{v}\right), \quad j = 1, 2, \dots, v-1$$

Os autovalores da matriz F são

$$\epsilon_j = \frac{k-1}{k} - \frac{1}{rk} \sum_{i=1}^{v-1} \alpha_i \cos\left(\frac{2\pi ji}{v}\right), \quad j = 1, 2, \dots, v-1 \quad \blacksquare$$

4.6 Compilação de resultados

Os resultados anteriores podem ser exibidos na seguinte Tabela 4.1. A mesma exhibe as replicações efetivas no caso geral e os fatores de eficiência no caso particular de delineamentos equi-replicados para todos os delineamentos acima definidos, exceto os de tipo S (pois nesse caso foi deduzida a forma da matriz F para o caso mais usual com $\mathbf{r} = (r_0, r, \dots, r)'$).

Tabela 4.1: *Replicações efetivas e fatores de eficiência para as classes de delineamentos estudadas.*

Delineamento	Replicação efetiva	Fator de eficiência	Comparações correspondentes
de tipo T_0	$v\beta$	$\frac{v\beta}{r}$	contraste arbitrário
de tipo S_0	$v\beta_0$ $\beta_0 + (v - 1)\beta$	$\frac{\beta_0}{r} + \frac{(v-1)\beta_0}{r_0}$ $\frac{\beta_0 + (v-1)\beta}{r}$	controle vs outros tratamentos entre os outros tratamentos
de tipo G_0 caso geral	$v\beta_2$ $\beta_0 + \beta_1$	$\frac{\beta_2}{r}$ $\frac{\beta_0 + \beta_1}{r}$	entre trat. de diferentes grupos entre trat. dentro de cada grupo
especial(*)	$\frac{v\alpha_2}{rk-r+\alpha_1}$ $\frac{k}{k}$	$\frac{v\alpha_2}{rk-r+\alpha_1}$ $\frac{rk}{rk}$	entre trat. de diferentes grupos entre trat. dentro de cada grupo
de tipo B_0 equi-agrupado	$v\beta_3$ $\beta_0 + \beta_1$ $\beta + \beta_2$	$\frac{v\beta_3}{r}$ $\frac{\beta_0 + \beta_1}{r}$ $\frac{\beta + \beta_2}{r}$	entre os grupos entre trats. do grupo 1 entre trats. do grupo 2
não equi-agrupado	$2(\beta_0 - (t - 1)\beta_1)$ $\beta_0 + \beta_1$ $\beta + \beta_2$	$\frac{2(\beta_0 - (t-1)\beta_1)}{r}$ $\frac{\beta_0 + \beta_1}{r}$ $\frac{\beta + \beta_2}{r}$	entre os grupos entre trats. do grupo 1 entre trats. do grupo 2

(*) Se o delineamento é próprio, binário e equi-replicado.

Dos resultados exibidos na tabela, pode-se observar que tanto variâncias, quanto replicações efetivas e eficiências dos contrastes naturais e básicos dependem essencialmente das concorrências ponderadas. Também, pelo Lema 3.16 do Capítulo 3, para

cada tipo de delineamento equi-replicado, teremos o fator de eficiência mínimo e máximo para a estimação de qualquer contraste. Desta forma pode-se ganhar uma visão ampla de alcances e limitações dos delineamentos.

Ilustraremos os resultados anteriores apresentando três exemplos diferentes, mencionados em Pearce (1983, 1976c, 1963) e utilizados originalmente para outras finalidades. Aqui, a qualidade deles será avaliada pela precisão e eficiência na estimação dos contrastes naturais e básicos. Dita avaliação será feita utilizando os resultados apresentados na Tabela 4.1.

4.7 Exemplos

Primeiramente, será revisitado um delineamento não ortogonal de tipo T apresentado por Pearce (1983) com a finalidade de mostrar que esses delineamentos são mais gerais que os BIBD. Aqui, porém, será avaliada a qualidade desse delineamento em base aos resultados apresentados.

Exemplo 4.1 Considere o plano

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>B</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>C</i>
<i>B</i>	<i>B</i>	
<i>C</i>	<i>C</i>	

Figura 4.3: *Delineamento 3A*

Nele, os blocos são de diferentes tamanhos, além de serem dois deles maiores do que o número de tratamentos. O delineamento não é equi-replicado, tendo $\mathbf{r} = (4, 3, 3)$, $\mathbf{k} = (4, 4, 2)$, $v = 3$, $b = 3$ e $n = 10$. Sua matriz de informação é

$$C = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

com autovalores $\lambda_1 = 0$ e $\lambda_2 = \lambda_3 = v\beta = 3$.

Assim, os contrastes naturais são $c_2'\tau$ e $c_3'\tau$ com $c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1, 0)$ e $c_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}(-1, -1, 2)$. Eles serão estimados com variâncias iguais a $0.33\sigma^2$ e replicações efetivas iguais a 3. A matriz F é

$$F = \begin{pmatrix} 0.500000 & -0.288675 & -0.288675 \\ -0.288675 & 0.666667 & -0.333333 \\ -0.288675 & -0.333333 & 0.666667 \end{pmatrix},$$

com autovalores $\epsilon_1 = 0$, $\epsilon_2 = 0.833333$ e $\epsilon_3 = 1$.

Os contrastes básicos são $z_2'\tau$ e $z_3'\tau$ com $z_2 = (2, -1, -1)$ e $z_3 = (0, 1, -1)$, estimados com fatores de eficiência de 0.83 e 1 respectivamente. Logo, a diferença entre os tratamentos B e C é estimada com eficiência completa. ■

Nosso segundo exemplo é um BIBD mencionado por Pearce (1976c).

Exemplo 4.2 Considere o seguinte delineamento

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>	<i>VII</i>
<i>A</i>	<i>F</i>	<i>G</i>	<i>B</i>	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>D</i>
<i>G</i>	<i>A</i>	<i>F</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>B</i>	<i>B</i>
<i>C</i>	<i>D</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>C</i>	<i>E</i>	<i>A</i>
<i>E</i>	<i>G</i>	<i>B</i>	<i>G</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	<i>C</i>

Figura 4.4: *Delineamento 3B*

O mesmo verifica $v = 7$, $b = 7$, $\alpha = 2$, $r = k = 4$ **17** e

$$C = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 12 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ -2 & 12 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ -2 & -2 & 12 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ -2 & -2 & -2 & 12 & -2 & -2 & -2 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 12 & -2 & -2 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & -2 & 12 & -2 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 & 12 \end{pmatrix}.$$

Os autovalores de C são $\lambda_1 = 0$ com multiplicidade 1 e $\lambda_2 = \frac{v\beta}{k} = 3.5$ com multiplicidade 6. Assim, qualquer contraste normalizado será estimado com a mesma precisão de $\frac{k\sigma^2}{v\alpha} = \frac{2}{7}\sigma^2$, com replicação efetiva de 3.5 e com fator de eficiência $\epsilon = \frac{v\alpha}{rk} = 0.875$. ■

O último exemplo é um delineamento não ortogonal de tipo G , binário, próprio e equi-replicado, também considerado por Pearce (1963).

Exemplo 4.3 O delineamento

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>	<i>VII</i>	<i>VIII</i>
<i>C</i>	<i>A</i>	<i>D</i>	<i>G</i>	<i>H</i>	<i>F</i>	<i>B</i>	<i>E</i>
<i>D</i>	<i>B</i>	<i>G</i>	<i>H</i>	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>C</i>	<i>F</i>
<i>G</i>	<i>C</i>	<i>F</i>	<i>D</i>	<i>B</i>	<i>H</i>	<i>E</i>	<i>A</i>
<i>B</i>	<i>H</i>	<i>E</i>	<i>C</i>	<i>A</i>	<i>G</i>	<i>F</i>	<i>D</i>
<i>A</i>	<i>G</i>	<i>H</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>B</i>	<i>D</i>	<i>C</i>
<i>H</i>	<i>D</i>	<i>C</i>	<i>F</i>	<i>G</i>	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>

Figura 4.5: *Delineamento 3C*

tem $\mathbf{r} = \mathbf{k} = 6\mathbf{1}_8$, $v = b = 8$ e $n = 48$. Ele tem 4 grupos com dois tratamentos em cada grupo, isto é $m = 4$ e $t = 2$. Sua matriz de informação é

$$C = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 30 & -6 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 \\ -6 & 30 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 \\ -4 & -4 & 30 & -6 & -4 & -4 & -4 & -4 \\ -4 & -4 & -6 & 30 & -4 & -4 & -4 & -4 \\ -4 & -4 & -4 & -4 & 30 & -6 & -4 & -4 \\ -4 & -4 & -4 & -4 & -6 & 30 & -4 & -4 \\ -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 30 & -6 \\ -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -6 & 30 \end{pmatrix},$$

com autovalores $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = 5.33$, $\lambda_5 = \lambda_6 = \lambda_7 = \lambda_8 = 6$.

A matriz $F = \frac{1}{6} C$ tem autovalores $\epsilon_1 = 0$, $\epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 0.88$, $\epsilon_5 = \epsilon_6 = \epsilon_7 = \epsilon_8 = 1$. Os contrastes naturais (que são também básicos) são

$$u'_2 = \frac{1}{2\sqrt{6}}(-1, -1, -1, -1, -1, -1, 3, 3)$$

$$u'_3 = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-1, -1, -1, -1, 2, 2, 0, 0)$$

$$u'_4 = \frac{1}{2}(-1, -1, 1, 1, 0, 0, 0, 0)$$

$$u'_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0)$$

$$u'_6 = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0)$$

$$u'_7 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$$

$$u'_8 = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1)$$

Eles serão estimados com variâncias $0.19\sigma^2$ e $0.17\sigma^2$ e eficiências de 0.88 e 1 no caso dos três primeiros e no caso dos quatro últimos, respectivamente. Assim, as comparações de tratamentos dentro de cada grupo serão feitas com eficiência completa. ■

No próximo capítulo, se estudará a relação que existe entre os contrastes de interesse, a matriz de variâncias e covariâncias de sua estimação e a forma da matriz C na construção de delineamentos em blocos.

Capítulo 5

Matriz de informação e contrastes de interesse

No Capítulo 2, enfatizou-se que a primeira tarefa para delinear um bom experimento, é a determinação de objetivos mediante contrastes de interesse, que existem independentemente do experimento a ser planejado para sua estimação. A capacidade de fornecer estimadores precisos para esses contrastes determina a qualidade do delineamento. No Capítulo 3 foram estudados os contrastes naturais e básicos e suas propriedades. A obtenção de delineamentos nos quais os contrastes de interesse sejam justamente os contrastes naturais ou básicos é um ideal. Nesse caso, a partir de um delineamento proposto, encontra-se a matriz de informação e a matriz F correspondente, assim como seus autovalores e autovetores. Logo, pesquisa-se se os autovetores coincidem com os vetores de coeficientes associados aos contrastes de interesse, resultando fácil nestes casos encontrar a variância e/ou a eficiência de estimação para cada contraste.

O processo acima descrito é ideal, pois nem sempre se poderá construir um delineamento onde os contrastes de interesse coincidam justamente com os naturais ou básicos. Se essa situação não acontecer, um processo mais realista deve começar considerando os contrastes de interesse. Isto será feito no presente capítulo: partindo dos contrastes especificados pelo experimentador e da precisão com que ele deseja estimá-los, encontrar-se-á a matriz de informação C , para depois procurar um delineamento a ela associado. Para isso será utilizado um resultado que explicitará a estrutura da matriz de informação.

Começaremos este capítulo introduzindo o conceito de *equilíbrio* ou *balanço* de delineamentos em blocos, apresentando a seguir um teorema importante que relaciona os estimadores dos contrastes de interesse e sua matriz de dispersão com a matriz de informação C . Por último, um resultado útil derivado para situações experimentais onde o interesse é comparar diversos tratamentos com um controle, será apresentado e explorado em detalhe. A utilidade dos resultados para a construção de delineamentos será ilustrada mediante diversos exemplos.

5.1 Equilíbrio de delineamentos

O equilíbrio de um plano experimental tem sido estudado desde enfoques diferentes pelos diversos autores, podendo-se encontrar uma discussão detalhada a respeito em Preece (1982). Apresentam-se a seguir algumas definições para delineamentos em blocos, as mesmas são casos particulares do Teorema 5.2.

Definição 5.1 *Um delineamento em blocos é denominado equilibrado (ou balanceado), se cada um dos h contrastes estimáveis $c'_i\tau$, $i = 1, \dots, h$ com*

$$c'_i c_i = 1 \quad e \quad c'_i c_j = 0 \quad \text{para } i \neq j; \quad h = \text{posto}(C) \leq v - 1$$

é estimado com a mesma variância.

Esta definição é uma extensão da originalmente usada por Tocher (1952) e Rao (1958) para delineamentos conexos e aplicada por vários autores, veja por exemplo Pearce (1964) e Raghavarao (1971).

Definição 5.2 *Um delineamento em blocos é denominado $\mathbf{r}^{-\delta}$ – equilibrado ou $\mathbf{r}^{-\delta}$ – balanceado ($\mathbf{r}^{-\delta}$ –balanced, em inglês), se cada um dos contrastes estimáveis $c'_i\tau$ com*

$$c'_i \mathbf{r}^{-\delta} c_i = 1 \quad e \quad c'_i \mathbf{r}^{-\delta} c_j = 0 \quad \text{se } i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, h$$

é estimado com a mesma variância.

A Definição 5.1 é um caso particular desta definição, que tem sido usada implicitamente por Nair e Rao (1948), Jones (1959) e Caliński (1971).

Caliński (1977), desenvolveu uma definição ainda mais geral de equilíbrio para delineamentos em blocos, na qual é utilizada uma matriz X real arbitrária, simétrica e positiva definida de ordem $v \times v$.

Definição 5.3 *Um delineamento em blocos é denominado X^{-1} equilibrado ou X^{-1} balanceado (X^{-1} -balanced, em inglês), se cada um dos contrastes estimáveis $c'_i\tau$, com*

$$c'_i X^{-1} c_i = 1 \quad e \quad c'_i X^{-1} c_j = 0 \quad se \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, h$$

é estimado com a mesma variância.

Pode-se observar que as Definições 5.1 e 5.2 são casos particulares da Definição 5.3, gerados quando $X = I$ e $X = \mathbf{r}^{-\delta}$ respectivamente.

Na procura de delineamentos equilibrados, diversos autores estudaram a estrutura da matriz C , principalmente para delineamentos conexos. Assim, no caso particular destes delineamentos, temos os seguintes resultados.

Corolário 5.1 *Um delineamento conexo é equilibrado, se e somente se sua matriz C de informação tem a forma*

$$C = \lambda \left(I - \frac{1}{v} \mathbf{1}_v \mathbf{1}'_v \right),$$

onde n é o número de unidades experimentais e $\lambda = (n - \text{tr}(N\mathbf{k}^{-\delta}N'))/v - 1$.

Este resultado foi originalmente demonstrado por Rao (1958).

Corolário 5.2 *Um delineamento conexo é $\mathbf{r}^{-\delta}$ -equilibrado se e somente se sua matriz C de informação tem a forma*

$$C = \lambda \left(\mathbf{r}^{\delta} - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{n} \right),$$

onde $\lambda = (n - \text{tr}(N\mathbf{k}^{-\delta}N')) / (n - \frac{\mathbf{r}'\mathbf{r}}{n})$.

Corolário 5.3 *Um delineamento conexo é X^{-1} -equilibrado se e somente se sua matriz de informação tem a forma:*

$$C = \lambda \left(X - \frac{X\mathbf{1}\mathbf{1}'X}{\mathbf{1}'X\mathbf{1}} \right),$$

onde $\lambda = \frac{n - \text{tr}(N\mathbf{k}^{-\delta}N')}{\text{tr}(X) - \frac{1}{\mathbf{1}'X\mathbf{1}}}$.

Delineamentos em blocos que satisfazem o Corolário 5.1, tem sido chamados **equilibrados (ou balanceados) com respeito à variância** (*variance-balanced*, em inglês) ou também V-equilibrados por Tocher (1952) e Rao (1958) e utilizados por vários autores tais como Atiqullah (1961), Raghavarao (1962) e Chakrabarti (1964). Construções para delineamentos não próprios e/ou não equi-replicados com este tipo de equilíbrio foram dados por John (1964), Kulshreshtha, Dey e Saha (1972), Hedayat e Federer (1974) e Kageyama (1976).

Os delineamentos que satisfazem o Corolário 5.2, tem sido chamados de **equilibrados (ou balanceados) com respeito à eficiência** (*efficiency-balanced*, em inglês) ou também E-equilibrados por Puri e Nigam (1975) e Williams (1975).

Pode-se observar que se $\lambda = r$, no Corolário 5.1, a matriz C tem a forma

$$C = rI - \frac{r}{v} \mathbf{1}\mathbf{1}',$$

correspondente aos conhecidos delineamentos em **blocos completos aleatorizados** (*complete randomized block designs*, em inglês). Da mesma forma, se $\lambda = 1$ no Corolário 5.2, a matriz de informação é

$$C = \mathbf{r}^\delta - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{n},$$

que corresponde a delineamentos com matriz de incidência $N = \frac{\mathbf{r}\mathbf{k}'}{n}$, onde os blocos são ortogonais aos tratamentos.

Os delineamentos que satisfazem os Corolários 5.1 e 5.2, são úteis quando todas as comparações dos tratamentos são igualmente interessantes. Esse é o caso, por exemplo de experimentos com variedades vegetais, onde se requer que todas as comparações possíveis entre elas sejam feitas com a mesma precisão.

Quando o conjunto de contrastes de interesse dado pelo experimentador é homogêneo, um delineamento equilibrado relevante será aquele que possibilite que esses contrastes sejam estimados com a mesma precisão. Isto pode ser obtido construindo delineamentos que satisfaçam o Corolário 5.3.

A forma da matriz C dada pelos Corolários 5.1, 5.2 e 5.3, e na literatura em geral, é apropriada para a construção de delineamentos equilibrados para os contrastes elementares, ou como no Corolário 5.3 para os contrastes de interesse. Porém, como é indicado em Pearce (1975, 1986) existem muitas situações experimentais, nas quais alguns contrastes são considerados de maior interesse, sendo os restantes de menor importância. Neste caso, surge a necessidade de delinear experimentos relacionando (a) os contrastes desejados, (b) o grau relativo de importância indicado pelo experimentador, (expressado por exemplo através da precisão de estimação dos contrastes e determinado pela matriz de dispersão dos mesmos) e (c) a forma ideal da matriz de informação C , associada ao delineamento procurado para a estimação desses contrastes.

Quando os contrastes de interesse não são mutuamente ortogonais (como acontece no caso em que vários tratamentos são comparados com um controle) e se requer estimá-los independentemente, será também interessante a construção de delineamentos que cumpram essa condição. Um resultado que pode ser utilizado para essas finalidades será apresentado a seguir.

5.2 Teorema de Gupta

O seguinte teorema puramente algébrico, encontra-se demonstrado em Gupta (1988a) via resultados de Healy (1968).

Teorema 5.1 *Sejam M , B , L matrizes reais de ordem $l \times l$, $v \times v$ e $v \times l$ respectivamente, tais que M é simétrica e definida positiva, B é simétrica e semidefinida positiva e $\text{posto}(L) \leq v - 1$. Se B^- denota uma inversa generalizada arbitrária de B , a relação $L'B^-L = M^{-1}$ é equivalente à relação $B = LML'$. ■*

O teorema acima permite iluminar as relações entre contrastes e delineamentos, no caso particular em que a matriz B é a matriz de informação de um delineamento. Isso é possível, por exemplo no seguinte resultado, apresentado em Gupta (1988a, 1988b e 1989).

Teorema 5.2 *Seja C a matriz de informação de um delineamento em blocos para v tratamentos, L uma matriz de ordem $v \times l$ com colunas linearmente independentes exibindo o conjunto de contrastes de interesse nos parâmetros dos tratamentos, M uma matriz simétrica definida positiva de ordem $l \times l$ e C^- uma inversa generalizada arbitrária de C . Então,*

$$L'C^-L = M^{-1} \quad \text{se e somente se} \quad C = LML' \quad \blacksquare$$

No que segue, examinaremos dois casos especiais deste resultado apresentados por Gupta. No primeiro deles, os contrastes poderão ser estimados independente-

mente sob a suposição de normalidade das respostas no modelo básico (2.1). Nesse caso $M^{-1} = E^{-\delta}$, isto é $Var(l'_i \hat{\tau}) = \sigma^2 e_i$ e $Cov(l'_i \hat{\tau}, l'_j \hat{\tau}) = 0$, $i \neq j$, onde l_i e l_j são os vetores de coeficientes dos contrastes de tratamentos, $i, j = 1, \dots, v - 1$.

O segundo caso corresponde aos **contrastos equilibrados**, com matriz de dispersão completamente simétrica; nesta situação $M^{-1} = (a - b)I + b\mathbf{1}\mathbf{1}'$

O seguinte corolário exhibe a forma explícita da matriz C quando M é completamente simétrica, abrangendo também delineamentos não conexos. Assim, o resultado do Corolário 5.3 é um caso particular dele quando $h = v - 1$, isto é, quando o delineamento é conexo.

Corolário 5.4 *Se C tem posto h e se $a > 0$ não coincide com b nem com $-(h-1)b$, então $L'C^{-1}L = (a - b)I + b\mathbf{1}\mathbf{1}'$ se e somente se*

$$C = \frac{1}{a - b} \left[LL' - \frac{b}{a + (h - 1)b} L\mathbf{1}\mathbf{1}'L \right]. \quad \blacksquare$$

Em seguida será feita uma exploração de conseqüências estatísticas do Teorema 5.2, extendendo assim os resultados de Gupta (1988a) a diversas situações experimentais. O Corolário 5.5 abaixo, será útil quando o interesse principal reside na estimação de um contraste, sendo os contrastes restantes estimados com variâncias e covariâncias iguais. No Corolário 5.6, a estrutura de covariância dos contrastes de interesse será dividida em dois grupos diferentes e não correlacionados, cada grupo apresentando variâncias e covariâncias iguais. Análogamente, no Corolário 5.7, a covariância entre os grupos não é nula. Estes tipos de estruturas são apropriadas para construir delineamentos de tipo S , de tipo B (biparticionados) e delineamentos de tipo G (divisíveis em grupos).

As demonstrações destes corolários foram obtidos aplicando os Teoremas A.3 e A.5 e o Corolário A.4 do Apêndice, ou utilizando a técnica de inversão de matrizes particionadas, desenvolvida por Roy e Sarhan (1956) e Greenberg e Sarhan (1959).

Corolário 5.5 *Se $a > 0$, $c > 0$, $c \neq d$, então*

$$L'C^{-1}L = \begin{pmatrix} a & b\mathbf{1}' \\ b\mathbf{1} & (c-d)I + dJ \end{pmatrix}$$

se e somente se

$$C = L \begin{pmatrix} e & f\mathbf{1}' \\ f\mathbf{1} & (g-h)I + hJ \end{pmatrix} L',$$

onde

$$e = \frac{1}{a}[1 + \gamma b^2(l-1)], \quad f = -\gamma b, \quad g = \frac{1}{c-d}[1 - \gamma(ad - b^2)],$$

$$h = \frac{\gamma(b^2 - ad)}{c-d} \quad e \quad \gamma = \frac{1}{[a(c-d) + (l-1)(ad - b^2)]}. \quad \blacksquare$$

Corolário 5.6 Se $a \neq b$, $c \neq d$, $a, c > 0$, $a \neq -(k-1)b$, $c \neq -(n-1)d$, então

$$L'C^{-1}L = \begin{pmatrix} (a-b)I_k + bJ_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (c-d)I_n + dJ_n \end{pmatrix}$$

se e somente se

$$C = L \begin{pmatrix} \frac{1}{a-b} \left(I_k - \frac{b}{a+(k-1)b} J_k \right) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{1}{c-d} \left(I_l - \frac{d}{c+(n-1)d} J_n \right) \end{pmatrix} L'. \quad \blacksquare$$

Um caso particular do Corolário 5.6 é produzido quando a matriz $L'C^{-1}L$ possui a forma

$$L'C^{-1}L = \begin{pmatrix} (a-b)I + bJ & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (a-b)I + bJ \end{pmatrix}.$$

Corolário 5.7 *Se $a \neq b$, $c \neq d$, $a, c > 0$, $a \neq -(k-1)b$, $c \neq -(k-1)d$, então*

$$L'C^{-1}L = \begin{pmatrix} (a-b)I_k + bJ_k & mJ_k \\ mJ_k & (c-d)I_k + dJ_k \end{pmatrix}$$

se e somente se

$$C = L \begin{pmatrix} (a^* - b^*)I_k + b^*J_k & m^*J_k \\ m^*J_k & (c^* - d^*)I_k + d^*J_k \end{pmatrix} L',$$

onde

$$\begin{aligned} a^* &= b^* + \frac{1}{a-b} \\ b^* &= -\frac{b}{(a-b)((a-b) + bk)} - \frac{mm^*k}{(a-b) + bk} \\ m^* &= \frac{\left(\frac{m}{a-b} - \frac{kmb}{(a-b)^2 + (a-b)bk}\right)}{\left(\frac{k^2 m^2}{(a-b) + bk} - ((c-d) + dk)\right)} \\ c^* &= d^* + \frac{1}{c-d} \\ d^* &= -\frac{d}{(c-d)((c-d) + dk)} - \frac{mm^*k}{(c-d) + dk}. \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Um caso particular do Corolário 5.7 é gerado pela matriz

$$L' C^{-1} L = \begin{pmatrix} (a-b)I_k + bJ_k & mJ_k \\ mJ_k & (a-b)I_k + bJ_k \end{pmatrix}.$$

Neste caso, os valores de a^* , b^* e m^* são dados por

$$\begin{aligned} a^* &= b^* + \frac{1}{a-b} \\ b^* &= -\frac{b}{(a-b)((a-b)+bk)} - \frac{mm^*k}{(a-b)+bk} \\ m^* &= \frac{\left(\frac{m}{a-b} - \frac{kmb}{(a-b)^2+(a-b)bk}\right)}{\left(\frac{k^2 m^2}{(a-b)+bk} - ((a-b)+bk)\right)}. \end{aligned}$$

Em seguida ilustraremos a utilidade destes resultados na construção de delineamentos.

5.3 Exemplos

Exemplo 5.1 Nosso primeiro exemplo, extraído de Gupta (1988a), corresponde a um experimento geral com v tratamentos e uma matriz de coeficientes de contrastes L , quando a matriz de dispersão dos contrastes é completamente simétrica com elementos diagonais iguais à constante a e elementos extra diagonais iguais à constante b .

Seja um experimento com v tratamentos, onde os vetores de coeficientes l_1, l_2, \dots, l_{v-1} dos contrastes de interesse estão identificados pelas colunas da matriz

$$L = \begin{pmatrix} 1'_{v-3} & 2 & 0 \\ -I_{v-3} & 0_{v-3} & 0_{v-3} \\ 0'_{v-3} & -1 & 1 \\ 0'_{v-3} & -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Se o experimentador deseja que estes contrastes sejam estimados com variâncias e covariâncias iguais, a matriz de informação C deve ter a forma

$$C = LML' = \frac{1}{a-b} \left(LL' - \frac{b}{a+(v-2)b} L\mathbf{1}\mathbf{1}'L \right).$$

O Corolário 5.4 permite concluir que

$$C = \frac{1}{(a-b)(a+(v-2)b)} \begin{pmatrix} (v-1)a+(v-3)b & -(a-b)\mathbf{1}' & -2(a+(v-2)b) & -2(a-b) \\ -(a-b)\mathbf{1} & (a+(v-2)b)I - b\mathbf{1}\mathbf{1}' & \mathbf{0} & -2b\mathbf{1} \\ -2(a+(v-2)b) & \mathbf{0}' & 2(a+(v-2)b) & 0 \\ -2(a-b) & -2b\mathbf{1}' & 0 & 2(a+(v-4)b) \end{pmatrix}$$

No caso particular da constante $a = 2b$,

$$L'C^{-1}L = bI + bJ$$

e a estrutura da matriz C é

$$C = \frac{1}{vb} \begin{pmatrix} 3v-1 & -1'_{v-3} & -2v & -2 \\ -1_{v-3} & vI_{v-3} - 1_{v-3}1'_{v-3} & 0_{v-3} & -2\mathbf{1}_{v-3} \\ -2v & 0'_{v-3} & 2v & 0 \\ -2 & -2\mathbf{1}'_{v-3} & 0 & 2(v-2) \end{pmatrix}$$

Assim, um delineamento cuja matriz C tenha a estrutura acima deve ter os tratamentos alocados de tal maneira que as concorrências entre eles satisfaçam as seguintes condições:

1. As concorrências ponderadas dos tratamentos diferentes i e j são constantes para todo $i, j = 1, \dots, v - 2$,
2. As concorrências ponderadas dos tratamentos i e v são o dobro das concorrências ponderadas dos tratamentos diferentes i e j , $i, j = 1, 2, \dots, v - 2$,
3. As concorrências ponderadas dos tratamentos 1 e $v - 1$ são iguais a v vezes as concorrências ponderadas dos tratamentos i e v , para $i = 1, 2, \dots, v - 2$ e
4. Os tratamentos 2, 3, ..., $v - 2$, não concorrem com o tratamento $v - 1$.

Em nosso próximo exemplo exploraremos em detalhe a construção de delineamentos para estimar o conjunto especial de contrastes dado no Exemplo 5.1, para o caso particular de $v = 5$ tratamentos com $\mathbf{b} = \mathbf{1}$.

Exemplo 5.2 Se $v = 5$ e $\mathbf{b} = \mathbf{1}$, o Exemplo 5.1 fornece a matriz de coeficientes de contrastes (supondo que eles são de interesse para o experimentador)

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

e a matriz de dispersão

$$L'CL = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

A matriz de informação do delineamento deve possuir a forma

$$C = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 14 & -1 & -1 & -10 & -2 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -2 \\ -1 & -1 & 4 & 0 & -2 \\ -10 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 6 \end{pmatrix}.$$

Delineamentos que satisfazem os requerimentos acima foram encontrados pelo método de tentativa e erro. Alguns deles figuram a seguir.

Se $\mathbf{r} = (5, 1, 1, 4, 2)$, $\mathbf{k} = (5, 2, 2, 2, 2)$, $b = 5$ e $n = 13$ resulta o Delineamento C1 da Figura 5.1

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>
1	1	1	1	1
2	4	4	4	4
3				
5				
5				

Figura 5.1: *Delineamento C1*

Se $\mathbf{r} = (5, 1, 1, 4, 2)$ $\mathbf{k} = (5, 4, 4)$, $b = 3$ e $n = 13$ resulta o Delineamento C2 da Figura 5.2

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>
1	1	1	1
2	1	1	
3	4	4	
5	4	4	
5			

Figura 5.2: *Delineamento C2*

Se $\mathbf{r} = (4, 1, 1, 6, 2)$, $\mathbf{k} = (5, 3, 3, 3)$, $b = 4$ e $n = 14$ resulta o Delineamento C3 da Figura 5.3

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>
1	1	1	1	1
2	4	4	4	4
3	4	4	4	4
5				
5				

Figura 5.3: *Delineamento C3*

Se $\mathbf{r} = (7, 1, 1, 3, 2)$, $\mathbf{k} = (5, 3, 3, 3)$, $b = 4$ e $n = 14$ resulta o Delineamento C4 da Figura 5.4

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>
1	1	1	1	1
2	1	1	1	1
3	4	4	4	4
5				
5				

Figura 5.4: *Delineamento C4*

Se $\mathbf{r} = (5, 1, 1, 5, 2)$, $\mathbf{k} = (5, 3, 3, 3)$, $b = 4$ e $n = 14$ resulta o Delineamento C5 da Figura 5.5

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>
1	1	1	1	1
2	1	4	4	4
3	4	4	4	4
5				
5				

Figura 5.5: *Delineamento C5*

Se $\mathbf{r} = (6, 1, 1, 4, 2)$, $\mathbf{k} = (5, 3, 3, 3)$, $b = 4$ e $n = 14$ resulta o Delineamento C6 da Figura 5.6

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>
1	1	1	1	1
2	1	1	1	4
3	4	4	4	4
5				
5				

Figura 5.6: *Delineamento C6*

Observe que os delineamentos C4, C5 e C6 são “perturbações” do delineamento C3, obtidos variando as replicações dos tratamentos nos blocos, sem modificar as concorrências entre eles. Observa-se também que essas “perturbações” alteram as eficiências de estimação dos contrastes.

Calculando os fatores de eficiência dos contrastes de interesse, a qualidade de todos os delineamentos acima pode ser avaliada, como se segue

Tabela 5.1: *Fatores de eficiência dos contrastes para os delineamentos C1 até C6*

	C1	C2	C3	C4	C5	C6
Contraste	n=13 b=5	n=13 b=3	n=14 b=4	n=14 b=4	n=14 b=4	n=14 b=4
$l'_1 \hat{\tau}$	0.60	0.60	0.63	0.57	0.60	0.58
$l'_2 \hat{\tau}$	0.60	0.60	0.63	0.57	0.60	0.58
$l'_3 \hat{\tau}$	0.78	0.78	0.83	0.70	0.75	0.71
$l'_4 \hat{\tau}$	0.38	0.38	0.33	0.42	0.35	0.38

A Tabela 5.1 mostra que o último contraste em todos os delineamentos tem fator de eficiência baixo. Isto é devido ao fato de que as concorrências ponderadas dos tratamentos 4 e 5 exigidas pela estrutura da matriz C são nulas. Observe também, que em todos os delineamentos o terceiro contraste será estimado com maior eficiência, todos os outros contrastes tendo eficiências razoavelmente altas. O delineamento C3 possui as máximas eficiências para os três primeiros contrastes.

Desta forma, os delineamentos apresentados serão úteis, desde que sejam utilizadas poucas unidades experimentais. Também, as expectativas do experimentador em relação a precisão da estimação dos contrastes de interesse serão satisfeitas e a perda de eficiência com respeito a delineamentos ortogonais não será muito alta. Por outro lado, para cada vetor de replicações de tratamentos dos delineamentos acima só poderá ser feito um único delineamento ortogonal com apenas um bloco o que é equivalente a um delineamento completamente aleatorizado. Assim, o ganho na eficiência só será possível com 13 ou 14 unidades experimentais muito homogêneas. No caso contrário, essa perda de eficiência será compensada pela redução do erro experimental por causa da blocagem. Desta forma, a eleição de um entre esses delineamentos dependerá das considerações finais do experimentador em relação a estrutura dos tratamentos, estrutura das unidades experimentais, custos, etc. ■

A seguir, se continuará explorando o exemplo anterior no caso em que o interesse seja estimar esse conjunto de contrastes com outra matriz de variâncias e covariâncias.

Se a especificação por parte do experimentador para as variâncias dos contrastes fosse agora $2b = 2 \times \frac{3}{5} = 1.2$, isto é, deseja-se aumentar a precisão dos estimadores desses contrastes, teria-se a matriz de dispersão

$$L'C^{-1}L = \begin{pmatrix} 1.2 & 0.6 & 0.6 & 0.6 \\ 0.6 & 1.2 & 0.6 & 0.6 \\ 0.6 & 0.6 & 1.2 & 0.6 \\ 0.6 & 0.6 & 0.6 & 1.2 \end{pmatrix},$$

resulta a matriz de informação

$$C = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 14 & -1 & -1 & -10 & -2 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -2 \\ -1 & -1 & 4 & 0 & -2 \\ -10 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 6 \end{pmatrix}.$$

Se considerarmos o caso de blocos de igual tamanho, o seguinte delineamento com $\mathbf{r} = (7, 2, 2, 10, 3)$, $\mathbf{k} = 31\mathbf{8}$, $b = 8$ e $n = 24$ é uma possibilidade:

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>	<i>VII</i>	<i>VIII</i>
1	1	2	1	1	1	1	1	1
2	3	3	4	4	4	4	4	4
5	5	5	4	4	4	4	4	4

Figura 5.7: *Delineamento C7*

Outros delineamentos podem ser obtidos “perturbando” o plano anterior nos blocos IV até VIII, sem modificar as concorrências ponderadas.

Desta forma, para diferentes especificações nas matrizes de dispersão dos contrastes dados, encontra-se a matriz de informação apropriada, para logo construir delineamentos adequados pelo método de tentativa e erro.

A seguir, se estudará um tipo especial de contrastes, úteis para a comparação de um grupo de tratamentos com outro tratamento controle. Esta situação, discutida em Gupta (1988a) mediante um exemplo para $v = 4$ tratamentos e ilustrada apenas para o caso de estimação independente dos contrastes, será reanalisada através de outro exemplo, explorando-se diversas situações experimentais.

Na seguinte seção será explorado o Teorema de Gupta para o caso em que o interesse resida na comparação simultânea de diversos tratamentos com um controle.

5.4 Delineamentos para comparar tratamentos com um controle

Delineamentos em blocos para comparar um número de tratamentos com um controle, tem sido considerados na teoria de Planejamento de Experimentos por diversos autores, veja por exemplo, Bechhofer e Tamhane (1981) e Hedayat e Majumdar (1985). Delineamentos equilibrados para esses experimentos tem sido previamente considerados por Hoblyn, Pearce e Freeman (1954) e Pearce (1960,1963,1976a). Este último autor criou para eles a denominação de *delineamentos de tipo S* ou *delineamentos com equilíbrio suplementar*, já utilizada no Capítulo 3.

Neste trabalho os contrastes de interesse para estes delineamentos serão referidos como **contrastos suplementares**, como em Gupta (1988a). Esses contrastes podem ser estimados com variâncias e covariâncias iguais. Bechhofer e Tamhane (1981) derivaram a estrutura da correspondente matriz de informação, verificando-se facilmente, que esse resultado é um caso particular do Corolário 5.4.

Em seguida, ilustraremos através de um exemplo a utilidade da teoria apresentada. Para isso se retomará um delineamento inicialmente mencionado por Pearce (1963, 1983a). Em base à situação experimental que levou a sua construção, serão explo-

radas outras situações hipotéticas, construindo em cada caso possíveis planos experimentais, avaliando-os depois mediante a eficiência da estimação dos contrastes de interesse. Também, será feita uma comparação com o delineamento proposto por Pearce (1963).

Exemplo 5.2

O exemplo a seguir foi apresentado inicialmente com a finalidade de ilustrar a utilidade dos delineamentos de tipo M e enfatizar sua flexibilidade.

Dois experimentos agrônômicos foram planejados para controlar a propagação de uma variedade de fungos em plantações de morangos. Em ambos os casos, os experimentadores dispunham somente de 8 blocos de 4 parcelas, para aplicar nelas tratamentos que deviam ser comparados com um controle O , comum em ambos os experimentos. O tratamento O consistia na aplicação de uma substância padrão na época usual (geralmente a do florescimento das plantas).

No primeiro experimento, o tratamento O devia-se comparar com os tratamentos A, B, C e D, definidos mediante a aplicação da substância padrão em outras épocas (antes ou depois do florescimento). Inicialmente foi proposta a aplicação dos 5 tratamentos em 5 blocos mediante um delineamento totalmente equilibrado.

No segundo experimento, o tratamento O devia ser comparado com os tratamentos P e Q, definidos mediante a aplicação de duas substâncias novas na época usual. O delineamento devia utilizar os 3 blocos restantes, também segundo um esquema totalmente equilibrado.

Em ambos os experimentos, foi excluída uma replicação adicional do tratamento O , por não se dispor de parcelas suficientes. Utilizando esses esquemas experimentais, pode-se concluir que a variância das comparações do tratamento O com os outros tratamentos teria sido de $\frac{8}{15}\sigma^2 = 0.53\sigma^2$ em ambos os experimentos.

Para usufruir das parcelas atribuídas ao controle comum O em ambos os experimentos, foi cogitada a fusão desses experimentos isolados. Desta forma, adotou-se um delineamento de tipo M com 32 parcelas em 8 blocos de tamanho 4. A estrutura dos tratamentos não foi escolhida do tipo fatorial completo, por existir a possibilidade das novas substâncias serem inócuas quando aplicadas em outras épocas, degradando assim o

experimento global no caso de se produzir uma infestação.

O delineamento adotado foi

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>	<i>VII</i>	<i>VIII</i>	
<i>P</i>	<i>O</i>	<i>C</i>	<i>Q</i>	<i>D</i>	<i>A</i>	<i>O</i>	<i>B</i>	
<i>A</i>	<i>C</i>	<i>Q</i>	<i>B</i>	<i>P</i>	<i>O</i>	<i>D</i>	<i>O</i>	,
<i>Q</i>	<i>B</i>	<i>O</i>	<i>P</i>	<i>O</i>	<i>D</i>	<i>C</i>	<i>A</i>	
<i>O</i>	<i>A</i>	<i>P</i>	<i>O</i>	<i>Q</i>	<i>C</i>	<i>B</i>	<i>D</i>	

Figura 5.8: *Delineamento D1*

onde $\mathbf{r}' = (8, 4, 4, 4, 4, 4, 4, 4)$, $\mathbf{k} = 4\mathbf{1}_8$, $v = 7$, $b = 8$ e $n = 32$.

Sua matriz de informação é

$$C = \begin{pmatrix} 6 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -0.5 & -0.5 & -0.5 & -0.25 & -0.25 \\ -1 & -0.5 & 3 & -0.5 & -0.5 & -0.25 & -0.25 \\ -1 & -0.5 & -0.5 & 3 & -0.5 & -0.25 & -0.25 \\ -1 & -0.5 & -0.5 & -0.5 & 3 & -0.25 & -0.25 \\ -1 & -0.25 & -0.25 & -0.25 & -0.25 & 3 & -1 \\ -1 & -0.25 & -0.25 & -0.25 & -0.25 & -1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Observe que a forma da matriz corresponde a um delineamento multiparticionado com três grupos de tratamentos. O primeiro grupo contém o tratamento *O*, o segundo os tratamentos *A*, *B*, *C*, *D* e o terceiro os tratamentos *P* e *Q*.

O conjunto de contrastes de interesse conforma as colunas da matriz

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

A matriz de dispersão destes contrastes foi calculada usando a inversa generalizada de Tocher; ela tem a forma

$$\text{Var}(L'\hat{\tau}) = \sigma^2 \begin{pmatrix} 0.414286 & 0.128571 & 0.128571 & 0.128571 & 0.1 & 0.1 \\ 0.128571 & 0.414286 & 0.128571 & 0.128571 & 0.1 & 0.1 \\ 0.128571 & 0.128571 & 0.414286 & 0.128571 & 0.1 & 0.1 \\ 0.128571 & 0.128571 & 0.128571 & 0.414286 & 0.1 & 0.1 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.425 & 0.175 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.175 & 0.425 \end{pmatrix}.$$

Pode-se observar também que a variância da comparação do tratamento O com os tratamentos A, B, C ou D é $0.414\sigma^2$ e a variância da comparação de O com P e Q é $0.425\sigma^2$.

Os fatores de eficiência destes contrastes figuram no seguinte quadro

Contraste	Fator de eficiência
$l'_1\hat{\tau}$	0.91
$l'_2\hat{\tau}$	0.91
$l'_3\hat{\tau}$	0.91
$l'_4\hat{\tau}$	0.91
$l'_5\hat{\tau}$	0.88
$l'_6\hat{\tau}$	0.88

Ele mostra que as comparações do tratamento padrão com os tratamentos A, B, C e D, são feitas com menor variância e maior eficiência do que as outras

comparações, satisfazendo assim o objetivo desejado. ■

Continuaremos nossa exploração dos delineamentos acima fornecendo uma definição formal para os contrastes suplementares.

Definição 5.4 *Sejam v tratamentos indexados por $1, 2, \dots, v$, com 1 denotando o tratamento controle e $2, 3, \dots, v$ os outros tratamentos. Um contraste $c'\tau$ é dito suplementar se ele tem a forma $\tau_1 - \tau_i$, $i = 2, \dots, v$.*

A seguir será dado um resultado útil na construção de delineamentos experimentais, quando o interesse reside na estimação dos contrastes suplementares com qualquer estrutura desejada em sua matriz de dispersão. Esse resultado, que é um aporte deste trabalho, será posteriormente utilizado na exploração do Exemplo 5.2.

Corolário 5.8 *Se L é a matriz que contém os vetores de coeficientes dos contrastes suplementares como colunas, então*

$$L'C^{-1}L = M^{-1} \text{ se e somente se } C = \begin{pmatrix} \mathbf{1}'M\mathbf{1} & -\mathbf{1}'M \\ -M\mathbf{1} & M \end{pmatrix}$$

Prova. Se L é a matriz de contrastes suplementares, ela tem a forma $L = \begin{pmatrix} \mathbf{1}' \\ -I \end{pmatrix}$. Se M^{-1} é a matriz de dispersão destes contrastes, então

$$C = LML' = \begin{pmatrix} \mathbf{1}' \\ -I \end{pmatrix} M \begin{pmatrix} \mathbf{1} & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}'M\mathbf{1} & -\mathbf{1}'M \\ -M\mathbf{1} & M \end{pmatrix}.$$

Por outro lado, se $C = \begin{pmatrix} \mathbf{1}'M\mathbf{1} & -\mathbf{1}'M \\ -M\mathbf{1} & M \end{pmatrix}$, uma inversa generalizada desta matriz é $C^- = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{0}' \\ 0 & M^{-1} \end{pmatrix}$. Então

$$L' C^{-1} L = M^{-1} \quad \blacksquare$$

O corolário acima mostra a relação que existe entre as concorrências ponderadas dos tratamentos não suplementares (dada pela submatriz M de C) e a matriz de dispersão dos contrastes suplementares. Este resultado será útil para conhecer *a priori* as concorrências ponderadas entre os tratamentos não suplementares, quando a matriz de variâncias e covariâncias dos contrastes suplementares é pre-especificada, ou viceversa. Assim por exemplo, se $v = 3$ tratamentos são comparados e deseja-se estimar os contrastes suplementares com matriz de dispersão $M^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$, pelo Corolário 5.8 temos que $M = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$. Isto permite prever que na construção do delineamento, não poderão ser alocados no mesmo bloco os tratamentos não suplementares, pois a matriz M indica que as concorrências ponderadas entre esses tratamentos são nulas. Por outro lado, se conhecermos a estrutura da matriz C , mediante um delineamento inicial, teremos toda a informação estatística pertinente em relação aos contrastes suplementares, contida na inversa da submatriz M . Assim, no exemplo anterior, supondo que se deseja estimar o mesmo conjunto de contrastes com outras estruturas de covariâncias, ou construir um delineamento não multiparticionado, senão de tipo S por exemplo, pode-se aplicar o resultado acima.

Exemplo 5.2 (Continuação) A seguir, se apresentarão algumas situações experimentais hipotéticas diferentes à apresentada por Pearce (1963), explorando a utilidade do corolário acima.

Caso 1. Supondo que o experimentador deseja estimar os contrastes com a mesma estrutura de dispersão anterior, incrementando a precisão para o primeiro grupo de comparações e reduzindo-a para o segundo grupo, com matriz de dispersão

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.12 & 0.12 & 0.12 & 0.1 & 0.1 \\ 0.12 & 0.4 & 0.12 & 0.12 & 0.1 & 0.1 \\ 0.12 & 0.12 & 0.4 & 0.12 & 0.1 & 0.1 \\ 0.12 & 0.12 & 0.12 & 0.4 & 0.1 & 0.1 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.5 & 0.2 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.12 & 0.2 & 0.5 \end{pmatrix},$$

a matriz C resulta igual a

$$\begin{pmatrix} 6.0177 & -1.1062 & -1.1062 & -1.1062 & -1.1062 & -.7965 & -.7965 \\ -1.1062 & 3.0657 & -0.5057 & -0.5057 & -0.5057 & -0.2212 & -0.2212 \\ -1.1062 & -0.5057 & 3.0657 & -0.5057 & -0.5057 & -0.2212 & -0.2212 \\ -1.1061 & -0.5057 & -0.5057 & 3.0657 & -0.5057 & -0.2212 & -0.2212 \\ -1.1061 & -0.5057 & -0.5057 & -0.5057 & 3.0657 & -0.2212 & -0.2212 \\ -0.7965 & -0.2212 & -0.2212 & -0.2212 & -0.2212 & 2.5074 & -0.8260 \\ -0,7965 & -0.2212 & -0.2212 & -0.2212 & -0.2212 & -0.8260 & 2.5774 \end{pmatrix}.$$

Para essa situação, aparentemente, não será possível construir um delineamento em blocos de tamanho constante ou variável, pela dificuldade em encontrar concorrências ponderadas que se adaptem aos valores da matriz C .

No seguinte caso, a matriz M^{-1} possui uma estrutura semelhante à anterior, exibindo porém covariâncias nulas entre os contrastes suplementares dos diferentes grupos.

Caso 2. Se o experimentador deseja que os contrastes entre os grupos sejam estimados independentemente,

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0 & 0 \\ 0.2 & 0.4 & 0.2 & 0.2 & 0 & 0 \\ 0.2 & 0.2 & 0.4 & 0.2 & 0 & 0 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.581818 & 0.218182 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.218182 & 0.581818 \end{pmatrix}$$

e

$$M = \begin{pmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -0.75 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.75 & 2 \end{pmatrix}.$$

Assim resulta a matriz de informação

$$C = \begin{pmatrix} 6.5 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1.25 & -1.25 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 4 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 4 & 0 & 0 \\ -1.25 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -0.75 \\ -1.25 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.75 & 2 \end{pmatrix}$$

que pode ser obtida mediante o delineamento

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>	<i>VII</i>	<i>VIII</i>	<i>IX</i>	<i>X</i>	<i>XI</i>	<i>XII</i>
<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>P</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>O</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>Q</i>
<i>B</i>	<i>B</i>	<i>B</i>	<i>B</i>	<i>D</i>	<i>D</i>	<i>D</i>	<i>D</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>P</i>	
<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>D</i>	<i>D</i>	<i>D</i>	<i>P</i>	<i>Q</i>	<i>Q</i>	

Figura 5.9: *Delineamento D2*

com $\mathbf{r} = (14, 6, 6, 6, 8, 3, 3)$, $\mathbf{k} = (4, 4, \dots, 4, 2)$, $b = 12$ e $n = 46$. Os fatores de eficiência dos contrastes são

Contraste	Fator de eficiência
$l'_1 \hat{\tau}$	0.6
$l'_2 \hat{\tau}$	0.6
$l'_3 \hat{\tau}$	0.6
$l'_4 \hat{\tau}$	0.5
$l'_5 \hat{\tau}$	0.7
$l'_6 \hat{\tau}$	0.7

Neste delineamento as eficiências são mais baixas que no delineamento *D1*, sendo necessárias 14 unidades experimentais adicionais. A vantagem é que o primeiro grupo de contrastes

será estimado com menor variância e que a covariância das comparações entre os dois grupos é nula.

Caso 3.

Se a matriz de dispersão desejada pelo experimentador é a proposta por Pearce (1963) no experimento do Exemplo 5.2, aplicando o Corolário 5.8 obtemos exatamente a matriz de informação desse experimento. Para essa matriz, podem ser construídos outros delineamentos com o intuito de obter as concorrências ponderadas de C com maior eficiência.

Assim, pode-se verificar que para blocos de tamanho 2 e 3 não existe nenhum delineamento possível. Para blocos de tamanho 4, no caso de delineamentos binários o único que cumpre com as concorrências exigidas pela matriz C é o delineamento proposto por Pearce (1963), não existindo nenhum no caso não binário. Também, para o caso de blocos de tamanho comum 8 não existe nenhum, sendo ainda necessário pesquisar essa existência no caso de blocos de outros tamanhos e de blocos de diferentes tamanhos. No caso deles existirem, esse conjunto de contrastes sempre será estimado com a mesma matriz de covariâncias, conjecturando-se que qualquer delineamento será menos eficiente que o proposto por Pearce (1963).

Caso 4. Supondo que o interesse esteja na estimação independente dos contrastes. As expectativas do experimentador geram dois subcasos de interesse.

Caso 4.1. Os contrastes podem ser estimados com variâncias $\frac{\sigma^2}{e_i}$, diferentes para cada contraste, sendo a matriz de dispersão

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 1/e_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/e_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/e_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/e_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/e_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/e_6 \end{pmatrix}$$

e a matriz de informação

$$C = LE^{\delta}L' = LML' \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^6 e_i & -e_1 & -e_2 & -e_3 & -e_4 & -e_5 & -e_6 \\ -e_1 & e_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -e_2 & 0 & e_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -e_3 & 0 & 0 & e_3 & 0 & 0 & 0 \\ -e_4 & 0 & 0 & 0 & e_4 & 0 & 0 \\ -e_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_5 & 0 \\ -e_6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_6 \end{pmatrix}.$$

Para a estrutura anterior da matriz C , podem-se apresentar diversas situações que ilustraremos mediante o seguinte exemplo.

Suponha que o experimentador esteja interessado em fazer as comparações entre o controle e os tratamentos A, B, C e D com uma determinada precisão, realizando as comparações do controle com os tratamentos P e Q com outra precisão. Especificando os valores de $e_1 = e_2 = e_3 = e_4 = 2.5$ e $e_5 = e_6 = 2$ para essas comparações, obtém-se a matriz de informação

$$C = \begin{pmatrix} 14 & -2.5 & -2.5 & -2.5 & -2.5 & -2 & -2 \\ -2.5 & 2.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2.5 & 0 & 2.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2.5 & 0 & 0 & 2.5 & 0 & 0 & 0 \\ -2.5 & 0 & 0 & 0 & 2.5 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

A construção de possíveis delineamentos em blocos de igual ou diferente tamanho, surge da análise das concorrências ponderadas na matriz C acima. Em particular, para blocos de tamanho 2, se obtém um único delineamento, que é exibido na figura 5.10,

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI
O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O
A	A	A	A	A	B	B	B	B	B	C	C	C	C	C	D
XVII	XVIII	XIX	XX	XXI	XXII	XXIII	XXIV	XXV	XXVI	XXVII	XXVIII				
O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O				
D	D	D	D	P	P	P	P	Q	Q	Q	Q				

Figura 5.10: *Delineamento D3*

com $\mathbf{r} = (28, 5, 5, 5, 5, 4, 4)$, $\mathbf{k} = 2 \mathbf{1}_{28}$, $b = 28$ e $n = 56$ e os fatores de eficiência

Contraste	Fator de eficiência
$l'_1 \hat{\tau}$	0.59
$l'_2 \hat{\tau}$	0.59
$l'_3 \hat{\tau}$	0.59
$l'_4 \hat{\tau}$	0.59
$l'_5 \hat{\tau}$	0.57
$l'_6 \hat{\tau}$	0.57

Assim, para $v = 7$ tratamentos em blocos de tamanho 2, o fator de eficiência é de 0.59 para o primeiro grupo e 0.57 para o segundo. Esta eficiência não muito alta, será eventualmente compensada pela redução do erro experimental produzida pelo pequeno tamanho dos blocos, sendo a independência da estimação dos contrastes outra vantagem.

Pode-se continuar construindo delineamentos para outros tamanhos de blocos, sendo fácil neste caso, pela estrutura simples da matriz de informação. Porém, o único delineamento binário possível, seria o delineamento D3, já que para tamanhos de blocos maiores do que dois, qualquer delineamento encontrado será não binário, conjecturando-se que os mesmos sejam menos eficientes. Também, eles precisarão de mais unidades experimentais.

Caso 4.2. Se o experimentador deseja que todos os contrastes sejam estimados com a mesma precisão, a matriz de dispersão terá a forma

$$M^{-1} = E^{-\delta} = \begin{pmatrix} 1/e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/e & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/e \end{pmatrix} = \frac{1}{e} I_6$$

Para $\epsilon = 2.5$, por exemplo, a matriz de informação deve ser

$$C = \begin{pmatrix} 15 & -2.5 & -2.5 & -2.5 & -2.5 & -2.5 & -2.5 \\ -2.5 & 2.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2.5 & 0 & 2.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2.5 & 0 & 0 & 2.5 & 0 & 0 & 0 \\ -2.5 & 0 & 0 & 0 & 2.5 & 0 & 0 \\ -2.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2.5 & 0 \\ -2.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2.5 \end{pmatrix}$$

Assim, para blocos de tamanho 2 por exemplo, o delineamento que atribui 5 blocos a cada um dos pares de tratamentos (O,A), (O, B), (O,C), (O,D), (O,P) e (O,Q) é a única possibilidade. Ele possui um total de 30 blocos e 60 unidades experimentais, com o controle replicado 30 vezes e cada um dos outros tratamentos 5 vezes.

Caso 5. Para ilustrar a aplicação do Teorema, Gupta (1988a e 1988b) modifica o experimento de Pearce (1963) contido em nosso Exemplo 5.2, tanto na estrutura dos tratamentos quanto nos objetivos do experimento. Sua versão do experimento supõe que o tratamento 1 seja o padrão aplicado nas épocas usuais, sendo a_1 e a_2 os níveis de uma nova substância, aplicada em duas épocas não usuais b_1 e b_2 , os tratamentos a serem aplicados seriam o tratamento padrão, a_1b_1 , a_1b_2 , a_2b_1 , a_2b_2 , a_1 nas épocas usuais e a_2 nas épocas usuais. Denotaremos eles por 1, 2, 3, 4, 5, 6 e 7 respectivamente. Se o objetivo do experimento é obter informação sobre as comparações

(a) entre os níveis da nova substância aplicada em outras épocas,

(b) entre a nova substância aplicada em outras épocas e a aplicação da preparação padrão nas épocas usuais,

(c) entre a nova substância aplicada em outras épocas e ela mesma aplicada nas épocas usuais, e finalmente

(d) entre os níveis da nova substância aplicados nas épocas usuais,

os contrastes de interesse especificados pelo experimentador são definidos pelas colunas da matriz

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

de acordo ao seguinte quadro

Comparações	Contrastes
(a)	$l_1, l_2, e l_3$
(b)	l_4
(c)	l_5
(d)	l_6

Se os contrastes devem ser estimados independentemente, cada um precisão própria; resulta a matriz de informação

$$C = L E^\delta L' = \begin{pmatrix} 16e_4 & -4e_4 & -4e_4 & -4e_4 & -4e_4 & 0 & 0 \\ -4e_4 & d_0 & -d_1 & -d_2 & -d_3 & -2e_5 & -2e_5 \\ -4e_4 & -d_1 & -d_0 & -d_3 & -d_2 & -2e_5 & -2e_5 \\ -4e_4 & -d_2 & -d_3 & d_0 & -d_1 & -2e_5 & -2e_5 \\ -4e_4 & -d_3 & -d_2 & -d_1 & d_0 & -2e_5 & -2e_5 \\ 0 & -2e_5 & -2e_5 & -2e_5 & -2e_5 & 4e_5 + e_6 & 4e_5 - e_6 \\ 0 & -2e_5 & -2e_5 & -2e_5 & -2e_5 & 4e_5 - e_6 & 4e_5 + e_6 \end{pmatrix},$$

onde $d_0 = e_1 + e_2 + e_3 + e_4 + e_5$, $d_1 = e_2 + e_3 - e_1 - e_4 - e_5$, $d_2 = e_1 + e_3 - e_2 - e_4 - e_5$ e $d_3 = e_1 + e_2 - e_3 - e_4 - e_5$.

Assim, para $e_1 = e_2 = e_3 = 111/180$, $e_4 = 3/16$, $e_5 = 3/10$ e $e_6 = 2$, o conjunto de contrastes dados será estimado com matriz de dispersão $M^{-1} = E^{-\delta}$ e com matriz de informação

$$C = \begin{pmatrix} 3 & -0.75 & -0.75 & -0.75 & -0.75 & 0 & 0 \\ -0.75 & 4.65 & -0.9 & -0.9 & -0.9 & -0.9 & -0.6 \\ -0.75 & -0.9 & 4.65 & -0.9 & -0.9 & -0.6 & -0.6 \\ -0.75 & -0.9 & -0.9 & 4.65 & -0.9 & -0.6 & -0.6 \\ -0.75 & -0.9 & -0.9 & -0.9 & 4.65 & -0.6 & -0.6 \\ 0 & -0.6 & -0.6 & -0.6 & -0.6 & 3.2 & -0.8 \\ 0 & -0.6 & -0.6 & -0.6 & -0.6 & -0.8 & 3.2 \end{pmatrix},$$

Um possível delineamento é

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>	<i>VII</i>	<i>VIII</i>
2	2	2	3	1	1	1	1
3	3	4	4	2	2	2	3
4	5	5	5	3	3	4	4
6	6	6	6	4	5	5	5
7	7	7	7				

Figura 5.11: *Delineamento E1*

com $\mathbf{k} = (5, 5, 5, 5, 4, 4, 4, 4)$, $\mathbf{r} = (4, 6, 6, 6, 6, 4, 4)$, $b = 8$ e $n = 36$.

Na tentativa de construir delineamentos para outros valores diferentes dos e_i , chegou-se à seguinte matriz de informação, sob o suposto de que os valores especificados pelo experimentador fossem $e_1 = e_2 = 2$, $e_3 = 3$, $e_4 = e_5 = 1$ e $e_6 = 5$

$$C = \begin{pmatrix} 16 & -4 & -4 & -4 & -4 & 0 & 0 \\ -4 & 9 & -1 & -1 & \mathbf{1} & -2 & -2 \\ -4 & -1 & 9 & \mathbf{1} & -1 & -2 & -2 \\ -4 & -1 & \mathbf{1} & 9 & -1 & -2 & -2 \\ -4 & \mathbf{1} & -1 & -1 & 9 & -2 & -2 \\ 0 & -2 & -2 & -2 & -2 & 9 & -1 \\ 0 & -2 & -2 & -2 & -2 & -1 & 9 \end{pmatrix}.$$

Embora C seja simétrica, duplamente centrada e positiva semidefinida, ela não está associada a um delineamento, por ter elementos positivos fora da diagonal. Como todos os elementos extradiagonais de C devem ser não positivos e como os elementos diagonais satisfazem a relação $c_{ii} = -\sum_{j=1, j \neq i}^v c_{ij}$, o conjunto de valores possíveis dos e_i que levam a matrizes de informação deve satisfazer

$$d_1 \geq 0 \quad \Rightarrow \quad e_1 + e_3 \geq e_1 + e_4 + e_5$$

$$\begin{aligned}
d_2 \geq 0 &\Rightarrow e_1 + e_3 \geq e_2 + e_4 + e_5 \\
d_3 \geq 0 &\Rightarrow e_1 + e_2 \geq e_3 + e_4 + e_5 \\
4e_5 - e_6 \geq 0 &\Rightarrow e_6 \geq 4e_5.
\end{aligned}$$

Se os e_i cumprem as restrições acima, sempre será possível encontrar matrizes de informação, embora nem sempre as concorrências ponderadas associadas permitam a construção de delineamentos em blocos como no Caso 1.

Assim por exemplo, se as especificações para os e_i são $e_1 = e_2 = e_3 = 2$, $e_4 = e_5 = 1$ e $e_6 = 4$, isto é, se o interesse fosse estimar os contrastes com a estrutura de covariâncias

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.25 \end{pmatrix},$$

teria-se a seguinte matriz de informação

$$C = \begin{pmatrix} 16 & -4 & -4 & -4 & -4 & 0 & 0 \\ -4 & 8 & 0 & 0 & 0 & -2 & -2 \\ -4 & 0 & 8 & 0 & 0 & -2 & -2 \\ -4 & 0 & 0 & 8 & 0 & -2 & -2 \\ -4 & 0 & 0 & 0 & 8 & -2 & -2 \\ 0 & -2 & -2 & -2 & -2 & 8 & 0 \\ 0 & -2 & -2 & -2 & -2 & 0 & 8 \end{pmatrix}.$$

Se o experimentador deseja estimar todos os contrastes com a mesma precisão $\frac{\sigma^2}{e}$, resulta

$$C = eLL' = e \begin{pmatrix} 16 & -4 & -4 & -4 & -4 & 0 & 0 \\ -4 & 5 & 1 & 1 & 1 & -2 & -2 \\ -4 & 1 & 5 & 1 & 1 & -2 & -2 \\ -4 & 1 & 1 & 5 & 1 & -2 & -2 \\ -4 & 1 & 1 & 1 & 5 & -2 & -2 \\ 0 & -2 & -2 & -2 & -2 & 5 & 3 \\ 0 & -2 & -2 & -2 & -2 & 3 & 5 \end{pmatrix}.$$

Neste caso, para nenhum valor de e será possível construir um delineamento, pois a matriz C gerada possui elementos extradiagonais positivos. Esses contrastes não podem ser estimados independentemente e com a mesma precisão. Se o problema é reformulado, procurando o conjunto de contrastes que podem ser estimados independentemente e com a mesma precisão, pode-se demonstrar que esse conjunto corresponde a uma matriz L tal que LL' é uma matriz de Kirchhoff.

Em situações práticas, nem sempre poderão ser satisfeitas as expectativas do experimentador em relação à estrutura da matriz de dispersão desejada. Pode acontecer que a matriz C obtida não corresponda a uma matriz de informação ou, ainda correspondendo, pode ser difícil construir delineamentos associados às concorrências ponderadas dados pelos seus elementos. Porém, existe uma vantagem positiva em saber *a priori* que não é possível construir delineamentos para essas especificações, procurando diversas soluções alternativas.

No seguinte capítulo, se procurará encontrar delineamentos eficientes para estimar os contrastes suplementares dentro da classe de delineamentos de tipo S . O estudo será feito para planos não ortogonais e próprios, utilizando o resultado do Corolário 5.8 apresentado neste capítulo.

Capítulo 6

Delineamentos A-otimais de tipo S

Em diversas áreas científicas e tecnológicas apresentam-se com freqüência situações experimentais onde o interesse principal reside na comparação simultânea de vários tratamentos sob estudo com um outro tratamento controle ou padrão. Este tipo de experimentos, considerado inicialmente por Hoblyn, Pearce e Freeman (1954), foi estudado por Bechhofer e Tamhane (1981), Constantine (1983), Majumdar e Notz (1983), Hedayat e Majumdar (1984,1985), Ting e Notz (1988), Majumdar (1988), Hedayat, Jacroux e Majumdar (1988) e Stufken (1991), entre outros. A maioria dos delineamentos obtidos pertence à classe dos chamados *delineamentos de tipo S* introduzidos no Capítulo 4. Para esta classe de delineamentos em blocos, será interessante encontrar aqueles onde a atribuição do tratamento controle e dos outros tratamentos às unidades experimentais, produzam o melhor conjunto de estimadores para as comparações de interesse. Assim, neste capítulo se procurará encontrar delineamentos eficientes de tipo *S*, para estimar os contrastes suplementares, utilizando o critério da A-otimalidade devido a Kiefer (1958).

A otimalidade dos delineamentos de tipo *S* para comparar tratamentos com um controle, foi estudada por Gupta (1989) no caso deles serem próprios e binários. Nesse trabalho é apresentada uma condição necessária para que esses delineamentos sejam mais eficientes em relação a qualquer outro delineamento não ortogonal.

Neste capítulo serão brevemente apresentadas algumas idéias do planejamento de delineamentos ótimos, extendendo o estudo feito por Gupta (1989) para de-

lineamentos não binários. Em particular, será demonstrada a fórmula para o cálculo do limite inferior da variância média dos contrastes suplementares para o caso não binário, mencionada em Gupta (1989) para o caso binário. Algumas relações existentes entre os parâmetros dos delineamentos do tipo S serão também exploradas, restringindo o estudo ao caso de delineamentos em blocos de igual tamanho. Os resultados serão ilustrados com um exemplo.

6.1 Delineamentos próprios de tipo S

Os delineamentos de tipo S ou delineamentos com equilíbrio suplementar, introduzidos no Capítulo 4, são caracterizados pela presença de um tratamento controle ou padrão (chamado tratamento suplementar) que ocupa um lugar especial no experimento. Os outros tratamentos são totalmente balanceados, cada um deles fazendo o mesmo número de concorrências ponderadas com o tratamento suplementar.

Um estudo sistemático do delineamento de experimentos deste tipo foi desenvolvido por Pearce (1960, 1963, 1964, 1976a, 1983a e 1988). Ele tem proposto várias definições progressivamente mais extensas. A primeira delas, restrita a blocos de igual tamanho é apresentada a seguir, veja Pearce (1960).

Definição 6.1 *Um delineamento próprio d com v tratamentos e b blocos de tamanho k , é dito do tipo S , se a matriz de concorrências NN' têm a seguinte estrutura:*

$$NN' = \begin{pmatrix} s_0 & \alpha_0 & \alpha_0 & \cdots & \alpha_0 \\ \alpha_0 & s & \alpha & \cdots & \alpha \\ \alpha_0 & \alpha & s & \cdots & \alpha \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_0 & \alpha & \alpha & \cdots & s \end{pmatrix}.$$

Onde α_0 representa o número de concorrências que o tratamento suplementar faz com os outros tratamentos, α representa o número de concorrências da cada par de tratamentos

não suplementares, s_0 o número de concorrências do tratamento suplementar e s o número de concorrências dos tratamentos não suplementares.

Outras duas definições propostas por Pearce (1963, 1976a), são as apresentadas no Capítulo 4.

Pode-se observar que sob a definição acima, no caso dos delineamentos serem binários, a matriz NN' tem a forma

$$NN' = \begin{pmatrix} r_0 & \alpha_0 & \alpha_0 & \cdots & \alpha_0 \\ \alpha_0 & r & \alpha & \cdots & \alpha \\ \alpha_0 & \alpha & r & \cdots & \alpha \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_0 & \alpha & \alpha & \cdots & r \end{pmatrix}$$

A seguir, mostraremos certas relações que satisfazem os parâmetros dos delineamentos do tipo S em blocos do mesmo tamanho. As mesmas serão de utilidade para encontrar o limite inferior da variância média dos contrastes suplementares.

Começaremos apresentando um lema geral para delineamentos próprios em blocos.

Lema 6.1 *Seja d um delineamento próprio em blocos de tamanho k para comparar v tratamentos com vetor de replicações \mathbf{r} e matriz de incidência N . Então*

$$k\mathbf{r} = NN'\mathbf{1}_v .$$

Prova.

É suficiente observar que se o delineamento tem blocos de tamanho homogêneo k , as seguintes relações são satisfeitas

$$k\mathbf{r} = kN\mathbf{1}_b = N\mathbf{k} = NN'\mathbf{1}_v . \quad \blacksquare$$

Para delineamentos de tipo S nas condições das definições 6.1 e 4.3, temos o resultado a seguir

Lema 6.2 *Seja d um delineamento de tipo S com blocos de tamanho k e vetor de replicações $\mathbf{r}' = (r_0, r, \dots, r)$. Então*

$$k r_0 = s_0 + (v - 1)\alpha_0 \quad (6.1)$$

$$k r = s + \alpha_0 + (v - 2)\alpha \quad (6.2)$$

Prova. É aplicação imediata do lema anterior quando $\mathbf{r}' = (r_0, r, \dots, r)$ e NN' tem a forma dada na Definição 6.1. \blacksquare

Lema 6.3 *Seja d um delineamento de tipo S com blocos do mesmo tamanho. Então*

$$bk^2 = s_0 + (v - 1)s + 2(v - 1)\alpha_0 + (v - 1)(v - 2)\alpha$$

Prova. Para qualquer delineamento em blocos do mesmo tamanho cumpre-se que

$$bk^2 = k\mathbf{b}\mathbf{k} = k\mathbf{n} = k\mathbf{r}'\mathbf{1}_v = k(N\mathbf{1}_b)'\mathbf{1}_v = (N\mathbf{k})'\mathbf{1}_v = (NN'\mathbf{1}_v)'\mathbf{1}_v$$

Substituindo os resultados dos Lemas 6.1 e 6.2 na relação anterior obtém-se

$$bk^2 = s_0 + (v - 1)s + 2(v - 1)\alpha_0 + (v - 1)(v - 2)\alpha \quad \blacksquare$$

Lema 6.4 *Se d é binário, então $bk(k-1) = 2(v-1)\alpha_0 + (v-1)(v-2)\alpha$.*

Prova. É suficiente substituir $s_0 = r_0$ e $s = r$ no resultado do lema anterior, sabendo que $r_0 + (v-1)r = n = bk$. ■

A seguir estudaremos a estrutura da matriz de informação C dos delineamentos de tipo S e a matriz de dispersão M^{-1} dos contrastes suplementares para esses delineamentos.

6.2 Matriz de informação

A matriz de informação C dos delineamentos do tipo S com blocos do mesmo tamanho tem a estrutura

$$C = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} (v-1)\alpha_0 & -\alpha_0 \mathbf{1}'_{v-1} \\ -\alpha_0 \mathbf{1}_{v-1} & (\alpha_0 + (v-1)\alpha)I_{v-1} - \alpha \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} \end{pmatrix},$$

que escreveremos na forma mais abreviada

$$C = \begin{pmatrix} c & \mathbf{d}'_{v-1} \\ \mathbf{d}_{v-1} & M_{v-1} \end{pmatrix},$$

onde \mathbf{d} é um vetor proporcional a $\mathbf{1}_{v-1}$ e M_{v-1} uma matriz completamente simétrica de ordem $v-1$.

6.3 Matriz de dispersão dos contrastes suplementares

No Capítulo 5 foi deduzida a matriz de dispersão ou covariâncias dos contrastes suplementares estimados $L'\hat{\tau} = (\mathbf{1} - I)\hat{\tau}$ para qualquer tipo de delineamento. Esse resultado, apresentado no Corolário 5.8, mostra que essa matriz é dada pela inversa da submatriz M de C . Para o caso dos delineamentos de tipo S temos o seguinte resultado.

Corolário 6.1 *A matriz de covariâncias dos contrastes suplementares nos delineamentos do tipo S com blocos de igual tamanho tem a estrutura*

$$M_{v-1}^{-1} = \frac{k}{\alpha_0 + (v-1)\alpha} \left(I_{v-1} + \frac{\alpha}{\alpha_0} \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} \right) \quad (6.3)$$

Prova. Utilizando o Teorema A.3 do Apêndice, encontra-se a inversa da submatriz $M_{v-1} = (\alpha_0 + (v-1)\alpha)I_{v-1} - \alpha \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1}$ dos delineamentos de tipo S , na forma

$$M_{v-1}^{-1} = \frac{1}{\frac{\alpha_0 + (v-2)\alpha}{k} + \frac{\alpha}{k}} \left(I_{v-1} + \frac{\frac{\alpha}{k}}{\frac{\alpha_0 + (v-2)\alpha}{k} - \frac{(v-2)\alpha}{k}} \mathbf{1}_{v-1} \mathbf{1}'_{v-1} \right). \quad \blacksquare$$

6.4 Otimalidade de delineamentos

A teoria do planejamento ótimo de experimentos para a estimação de parâmetros de modelos lineares gerais foram desenvolvidos nos últimos 35 anos, tendo sido definidos diversos critérios de otimalidade. Os aportes de Kiefer (1959, 1985) a respeito são consideráveis. Um critério ideado por ele é o de ϕ - otimalidade, (ϕ -optimality, em inglês), veja Kiefer (1958, 1959, 1971, 1974), definido a seguir para experimentos em blocos.

Denotemos mediante $\Omega_{v,b,k}$ a família finita de todos os delineamentos possíveis em b blocos de tamanho k com v tratamentos. Seja d um delineamento de $\Omega_{v,b,k}$ e C_d a matriz de informação correspondente, com decomposição espectral $C_d = 0\mathbf{1}\mathbf{1}' + \sum_{i=1}^{v-1} \lambda_{di} p_i p_i'$, com autovalores $0 = \lambda_{d0} \leq \lambda_{d1} \leq \lambda_{d2} \leq \dots \leq \lambda_{d,v-1}$. Seja $\lambda(d)$ o vetor dos $v - 1$ autovalores e seja ϕ uma função real, côncava, simétrica e não decrescente, definida sobre vetores reais de dimensão $(v - 1)$. O critério de ϕ -otimalidade para delineamentos em blocos é dado pela seguinte definição

Definição 6.2 *Um delineamento em blocos d^* em $\Omega_{v,b,k}$ é ϕ -otimal se $\phi(d) \leq \phi(d^*)$, para todo d em $\Omega_{v,b,k}$.*

Exemplos de ϕ -otimalidade são a *E-otimalidade*, *D-otimalidade* e *A-otimalidade*, correspondentes às funções $\phi(\lambda(d)) = \lambda_{d1}$, $\phi(\lambda(d)) = \prod_{i=1}^{v-1} \lambda_{di}$ e $\phi(\lambda(d)) = -\sum_{i=1}^{v-1} \frac{1}{\lambda_{di}}$, respectivamente.

A A-otimalidade está associada à variância média (*average variance*, em inglês) dos estimadores dos parâmetros ou contrastes. O resultado seguinte, cuja demonstração pode ser encontrada em Constantine (1987), exhibe essa relação.

Lema 6.5 *Se d é um delineamento em blocos, com matriz de informação C_d e autovalores não nulos $\lambda_{d1}, \lambda_{d2}, \dots, \lambda_{d,v-1}$, então a variância média dos contrastes elementares é dada por*

$$\binom{v}{2}^{-1} \sum_{i < j} \text{Var}(\hat{\tau}_i - \hat{\tau}_j) = \sigma^2(v - 2) \binom{v}{2}^{-1} \sum_{i=1}^{v-1} \frac{1}{\lambda_{di}}$$

6.4.1 A-otimalidade

Introduziremos a seguir o conceito de A-otimalidade dos delineamentos em blocos em geral para a estimação dos contrastes elementares, estudando depois a A-otimalidade dos delineamentos de tipo S para estimação dos contrastes suplementares.

Definição 6.3 Um delineamento d^* em $\Omega_{v,b,k}$ é dito *A-otimal* se o mínimo da função $f(\lambda(d)) = \sum_{i=1}^{v-1} \frac{1}{\lambda_{di}}$ sobre todo d em $\Omega_{v,b,k}$ é assumido em d^* .

Pelo Lema 6.5, a definição acima é útil quando se tem igual interesse em todas as possíveis comparações entre os tratamentos. No presente contexto, um critério adequado para encontrar delineamentos ótimos para a situação em estudo, é minimizar a média aritmética das variâncias dos contrastes suplementares. Isto é, minimizar o traço de $M_{v-1}^{-1} = L'CL$. Nesse sentido o critério a ser utilizado seria o da A-otimalidade para os contrastes suplementares, também chamado de A-otimalidade para comparar tratamentos com um controle; veja por exemplo Hedayat e Majumdar (1984), Majumdar (1988), Ting e Notz (1988). Gupta (1989) denomina porém de traço-otimalidade ao mesmo conceito.

Assim, utilizaremos a seguinte definição para obter delineamentos A-otimais de tipo S para os contrastes suplementares.

Definição 6.4 Um delineamento d^* em $\Omega_{v,b,k}$ é *A-otimal para os contrastes suplementares sobre uma coleção \mathcal{D} de delineamentos de tipo S em $\Omega_{v,b,k}$* , se

$$\frac{1}{v-1} \sum_{i=1}^{v-1} \text{Var}_{d^*}(\hat{\tau}_i - \hat{\tau}_0) \leq \frac{1}{v-1} \sum_{i=1}^{v-1} \text{Var}_d(\hat{\tau}_i - \hat{\tau}_0), \quad \forall d \in \mathcal{D}.$$

O estudo da otimalidade dos delineamentos de tipo S na estimação dos contrastes suplementares, será restrito a blocos de igual tamanho, onde $v-1$ tratamentos (denotados por $1, 2, \dots, v-1$) serão comparados com o tratamento 0, considerado suplementar. O interesse então, será estimar os contrastes suplementares $\tau_0 - \tau_i$, $i = 1, \dots, v-1$ com máxima eficiência possível usando o critério de A-otimalidade segundo a definição 6.4.

Assim, nosso objetivo é procurar delineamentos próprios de tipo S que minimizem a média aritmética das variâncias dos contrastes suplementares, isto é $\frac{1}{v-1} \sum_{i=1}^{v-1} \text{Var}_d(\hat{\tau}_i - \hat{\tau}_0) = \frac{\sigma^2}{v-1} \sum_{i=1}^{v-1} m_i$, onde m_i denota o i ésimo elemento diagonal de M_{v-1}^{-1} .

Utilizando o resultado dado pela relação 6.3, temos que os m_i para os delineamentos de tipo S têm a seguinte forma

$$m_i = \frac{k}{\alpha_0 + (v-1)\alpha} \left(1 + \frac{\alpha}{\alpha_0}\right), \quad i = 1, \dots, v-1. \quad (6.4)$$

Da relação acima, observa-se que as variâncias $\sigma^2 m_i$, $i = 1, \dots, v-1$, são iguais para cada contraste suplementar. Assim, será suficiente minimizar a quantidade m_i sob a restrição

$$bk^2 = s_0 + (v-1)s + 2(v-1)\alpha_0 + (v-1)(v-2)\alpha. \quad (6.5)$$

O resultado desse problema extremal foi apresentado por Pearce (1960) para o caso ortogonal. Ele encontra-se no seguinte lema.

Lema 6.6 *Um delineamento ortogonal para comparar um tratamento controle contra outros $v-1$ tratamentos não suplementares é A -ótimal se $r_0 = r\sqrt{v-1}$, onde r_0 e r denotam o número de replicações do controle e dos outros tratamentos, respectivamente.*

O resultado correspondente para o caso de delineamentos não ortogonais é o seguinte.

Lema 6.7 *Um delineamento próprio, em blocos não ortogonais e de tipo S é A -ótimal para os contrastes suplementares se as concorrências α_0 e α satisfazem*

$$\alpha_0 = \alpha(1 + \sqrt{v}) \quad (6.6)$$

e

$$\alpha = \frac{bk^2 - (s_0 + (v-1)s)}{(v-1)(2\sqrt{v+v})}. \quad (6.7)$$

Prova. É suficiente minimizar a função

$$f(\alpha, \alpha_0) = \frac{k(\alpha + \alpha_0)}{\alpha_0(\alpha_0 + (v-1)\alpha)}$$

Sob a restrição

$$g(\alpha, \alpha_0) = s_0 + (v-1)s + 2(v-1)\alpha_0 + (v-1)(v-2)\alpha - bk^2 = 0$$

utilizando a técnica dos multiplicadores de Lagrange. Se $\mu = f(\alpha, \alpha_0) + \gamma g(\alpha, \alpha_0)$,

igualando a zero as derivadas parciais de μ e utilizando a restrição resulta o sistema

$$k\alpha_0^2 + 2k\alpha_0\alpha + k(v-1)\alpha^2 - 2\gamma(v-1)(\alpha_0^2 + (v-1)\alpha_0\alpha)^2 = 0 \quad (6.8)$$

$$k(v-2)\alpha_0^2 - \gamma(v-1)(v-2)(\alpha_0^2 + (v-1)\alpha_0\alpha)^2 = 0 \quad (6.9)$$

$$s_0 + (v-1)s + 2(v-1)\alpha_0 + (v-1)(v-2)\alpha = bk^2. \quad (6.10)$$

Multiplicando a primeira destas equações por $\frac{-(v-2)}{2}$ e somando à equação (6.9) resulta a seguinte equação de segundo grau em α_0

$$\frac{k(v-2)}{2}\alpha_0^2 - k(v-2)\alpha_0\alpha - \frac{k}{2}(v-1)(v-2)\alpha^2 = 0. \quad (6.11)$$

Resolvendo a equação (6.11) em α_0 se obtém (6.6) e substituindo este valor em (6.10) se obtém (6.7)

O seguinte resultado, apresentado por Gupta (1989), é um caso particular do anterior

Lema 6.8 *Se o delineamento é binário, a variância é mínima quando*

$$\alpha_0 = \alpha(1 + \sqrt{v}) \quad (6.12)$$

e

$$\alpha = \frac{bk(k-1)}{(v-1)(v+2\sqrt{v})}. \quad (6.13)$$

6.5 Limite inferior para a variância média

Delineamentos que satisfaçam a relação (6.6), podem não existir. Em tal caso, será bom ter um limite inferior para a variância média dos contrastes suplementares, de utilidade na procura de planos mais eficientes. Um limite deste tipo será fornecido pelo seguinte resultado.

Lema 6.9 *Se d é um delineamento próprio de tipo S dada pela definição 6.1, o limite inferior para a variância média dos contrastes suplementares é dado por*

$$T = \frac{k(v-1)(2 + \sqrt{v})^2}{(bk^2 - (s_0 + (v-1)s))(1 + \sqrt{v})^2} \quad (6.14)$$

Prova. É suficiente substituir os valores dados pelas relações (6.6) e (6.7) na relação (6.4).

Corolário 6.2 *Se o delineamento é binário, o limite inferior do Lema 6.8 é dado por*

$$T = \frac{(v-1)(2+\sqrt{v})^2}{b(k-1)(1+\sqrt{v})^2} \quad (6.15)$$

Prova. É suficiente substituir os valores de (6.12) e (6.13) na relação (6.4).

Pode-se observar que neste caso usando o critério de A-otimalidade, os delineamentos binários são sempre mais eficientes do que os não binários, pois o limite inferior para a variância média é menor no caso binário. Porém, em relação a outros critérios isto não é sempre verdade, veja Shah e Das (1992).

Um delineamento em blocos incompletos equilibrados é o delineamento não ortogonal mais eficiente quando todas as possíveis comparações são de igual importância. Para contrastes suplementares, o delineamento não ortogonal de tipo S mais eficiente, no sentido de ocasionar a mínima perda de eficiência por causa da não ortogonalidade e aquele que satisfaz a Equação (6.15), pois ele produz a menor variância na estimação destes contrastes. Em geral, se os delineamentos de tipo S atingem o limite inferior dado em (6.15), eles serão os mais eficientes na estimação dos contrastes suplementares em relação a qualquer outro delineamento não ortogonal, veja Gupta (1989).

Deixaremos esta discussão apresentando um exemplo para exibir a utilidade desta teoria. O mesmo foi extraído de Pearce (1963). Em nosso caso, tentaremos encontrar por tentativa e erro, diversos delineamentos alternativos para a mesma situação experimental. A otimalidade do delineamento proposto por Pearce será avaliado por comparação com outros delineamentos.

6.6 Exemplo

Existem variedades de maçã que são bienais, de maneira que a etapa do florescimento das árvores acontece em anos alternados. No experimento em questão foi considerada a aplicação de três tipos de pulverizadores no ano de florescimento para observar se a inibição do excesso do florescimento, poderia levar a uma situação futura de florescimento anual. O objetivo do experimento não era comparar os pulverizadores entre si, senão compará-los com o controle. Também desejava-se pulverizar a menor quantidade possível de árvores, para reduzir o prejuízo no caso de não acontecer o efeito esperado. Foi utilizado o seguinte delineamento de tipo S .

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>
<i>O</i>	<i>C</i>	<i>O</i>	<i>A</i>	<i>O</i>	<i>B</i>
<i>O</i>	<i>O</i>	<i>C</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>O</i>
<i>C</i>	<i>O</i>	<i>B</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>A</i>
<i>A</i>	<i>B</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>C</i>	<i>O</i>

Figura 6.1: *Delineamento S1*

Ele possui $\mathbf{r} = (12, 4, 4, 4)$, $b = 6$, $k = 4$, $v = 4$, $s_0 = 24$, $s = 4$, $\alpha_0 = 8$ e $\alpha = 4$, matriz de incidência e matriz de concorrências dadas por

$$N = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } NN' = \begin{pmatrix} 24 & 8 & 8 & 8 \\ 8 & 4 & 2 & 2 \\ 8 & 2 & 4 & 2 \\ 8 & 2 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

e matriz de informação

$$C = \begin{pmatrix} 6 & -2 & -2 & -2 \\ -2 & 3 & -0.5 & -0.5 \\ -2 & -0.5 & 3 & -0.5 \\ -2 & -0.5 & -0.5 & 3 \end{pmatrix}.$$

Assim resultam

$$M = \begin{pmatrix} 3 & -0.5 & -0.5 \\ -0.5 & 3 & -0.5 \\ -0.5 & -0.5 & 3 \end{pmatrix}, \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} 0.357 & 0.071 & 0.071 \\ 0.071 & 0.357 & 0.071 \\ 0.071 & 0.071 & 0.357 \end{pmatrix}$$

A matriz de dispersão M^{-1} dos contrastes suplementares acima, indica que cada contraste será estimado com variância igual a $0.357\sigma^2$. No caso binário, a atribuição de 4 tratamentos a unidades experimentais que formam blocos de tamanho 4 conduz a delineamentos com blocos completos. Por esse motivo, nessa situação inexistem delineamentos binários não ortogonais.

O limite inferior para a variância média é dado por

$$T = \frac{4 \times 3 \times (2 + 2)^2}{(6 \times 4^2 - (24 + 3 \times 4))(1 + 2)^2} = \frac{16}{45} = 0.3556, \quad (6.16)$$

e para saber se é possível construir um delineamento não binário que alcance a variância mínima com as especificações dadas acima, é suficiente calcular os valores de α_0 e α . Como os valores $\alpha = 2.5$ e $\alpha_0 = 7.5$, das concorrências não são inteiros, eles indicam a não existência de um delineamento não binário com blocos de tamanho 4 com $s_0 = 24$ e $s = 4$ atingindo o limite inferior T dado em (6.14). Porém, o delineamento S1 quase atinge esse limite e o delineamento de Pearce parece ser o melhor dentro dos delineamentos de tipo S não binários.

Para blocos de tamanho 2, existe um delineamento binário que alcança o limite inferior. Ele é dado por

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>	<i>VII</i>	<i>VIII</i>	<i>IX</i>	<i>X</i>	<i>XI</i>	<i>XII</i>
<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>B</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>B</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>C</i>

Figura 6.2: *Delineamento S2*

Neste caso, $\mathbf{r} = (9, 5, 5, 5)$ $b = 12$, $k = 2$, $v = 4$, $\alpha_0 = 3$, $\alpha = 1$ e a matriz de dispersão dos contrastes suplementares é

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 0.44 & 0.11 & 0.11 \\ 0.11 & 0.44 & 0.11 \\ 0.11 & 0.11 & 0.44 \end{pmatrix}$$

Calculando o limite inferior T dado em (6.15) correspondente a delineamentos binários, próprios em blocos de tamanho 2 e de tipo S resulta $T = 0.44$.

No delineamento $S2$, temos que $V(\hat{\tau}_1 - \hat{\tau}_i) = 0.44\sigma^2$, para $i = 2, 3, 4$, verificando assim que a variância coincide com o limite inferior. Portanto, nenhum outro delineamento não ortogonal (binário ou não) em blocos de tamanho 2, terá menor variância para estimar os contrastes suplementares.

Continuando a pesquisa na busca de delineamentos A-otimais para os contrastes suplementares, vejamos agora se para 24 unidades experimentais em blocos de tamanho 3, existe um delineamento binário do tipo S que atinja o limite inferior T . Calculando as constantes correspondentes obtem-se os valores $\alpha = 2$, $\alpha_0 = 6$ e $T = 0.33$. Neste caso é impossível alocar tratamentos que satisfaçam essas concorrências, mostrando a inexistência de delineamentos binários que atinjam o limite inferior para $b = 8$, $k = 3$ e $v = 4$.

O mesmo raciocínio permite explorar outras situações. Assim por exemplo para $b=9$, $k=3$ e $v = 4$, resultam $\alpha = 2.25$, $\alpha_0 = 6.75$ e $T = 0.296$.

Como as concorrências não são números inteiros, inexistem delineamentos de tipo S atingindo o limite inferior. Porém, pode-se procurar outro delineamento próximo ao limite; o seguinte delineamento é uma possibilidade:

<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>	<i>VI</i>	<i>VII</i>	<i>VIII</i>	<i>IX</i>
<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>	<i>O</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>A</i>	<i>B</i>
<i>B</i>	<i>C</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>C</i>

Figura 6.3: *Delineamento S3*

Neste caso $\mathbf{r} = (9, 6, 6, 6)$, $b = 9$, $k = 3$, $v = 4$, $\alpha_0 = 6$, $\alpha = 3$, com matriz de concorrências e matriz de dispersão

$$NN' = \begin{pmatrix} 9 & 6 & 6 & 6 \\ 6 & 6 & 3 & 3 \\ 6 & 3 & 6 & 3 \\ 6 & 3 & 3 & 6 \end{pmatrix}, \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} 0.3 & 0.1 & 0.1 \\ 0.1 & 0.3 & 0.1 \\ 0.1 & 0.1 & 0.3 \end{pmatrix}$$

Para o delineamento S3, vemos que a variância dos contrastes suplementares está muito próxima ao limite inferior. Também, neste delineamento, o incremento de 3 unidades experimentais reduz a variância em comparação ao delineamento S1.

Em seguida apresentaremos duas tabelas mostrando as variâncias e as eficiências de estimação dos contrastes suplementares para os delineamentos S1, S2 e S3.

Tabela 6.1: Variâncias dos contrastes suplementares para os delineamentos S1, S2 e S3

Contraste	Delineamento		
	S1	S2	S3
	n=24	n=24	n=27
	v=4	v=4	v=4
	b=6	b=12	b=9
	k=4	k=2	k=3
	(a)	(b)	(b)
$l'_1 \hat{\tau}$	$0.357\sigma^2$	$0.444\sigma^2$	$0.300\sigma^2$
$l'_2 \hat{\tau}$	$0.357\sigma^2$	$0.444\sigma^2$	$0.300\sigma^2$
$l'_3 \hat{\tau}$	$0.357\sigma^2$	$0.444\sigma^2$	$0.300\sigma^2$

(a) Delineamento não binário, (b) Delineamento binário.

Na Tabela 6.1 observam-se as variâncias de estimação dos contrastes suplementares para os delineamentos S1, S2 e S3, a primeira correspondendo a um delineamento não binário e as duas últimas a delineamentos binários, apresentando a menor variância o delineamento S3.

Tabela 6.2: *Fatores de eficiência dos contrastes suplementares para os delineamentos S1, S2 e S3*

Contraste	Delineamento		
	S1	S2	S3
	n=24	n=24	n=27
	v=4	v=4	v=4
	b=6	b=12	b=9
	k=4	k=2	k=3
	(a)	(b)	(b)
$l'_1 \hat{\tau}$	0.933	0.70	0.926
$l'_2 \hat{\tau}$	0.933	0.70	0.926
$l'_3 \hat{\tau}$	0.933	0.70	0.926

Na Tabela 6.2, mostram-se as eficiências de estimação dos contrastes suplementares dos delineamentos S1, S2 e S3 . Os mesmos serão os mais eficientes dentro da classe de delineamentos de tipo *S* para blocos da tamanho 2, 3 e 4 respectivamente sendo que o delineamento S2, atinge o limite inferior T. Assim, supondo que o experimentador disponha de poucas unidades experimentais, ele poderá escolher o plano mais conveniente levando em consideração os custos, a variabilidade das unidades experimentais, o material experimental disponível e a eficiência desejada para as comparações de interesse. Esta é precisamente a vantagem de possuir delineamentos alternativos.

Assim, dado um delineamento experimental com valores de v , b e k prefixados, pode-se considerar a variância $[Var(l'_i\hat{\tau})]$ e a eficiência $\frac{[Var(l'_i\hat{\tau})]_O}{[Var(l'_i\hat{\tau})]_A}$ de estimação dos contrastes suplementares $l'_i\tau = \tau_i - \tau_0$ para escolher delineamentos ótimos.

Em geral, não existem delineamentos de tipo S que atinjam o limite inferior dado em (6.15). Neste caso, estes delineamentos podem não ser os mais eficientes. Porém, em muitos casos a diferença nas suas eficiências em relação a outros delineamentos, é mínima. Por isso, um delineamento de tipo S pode ainda ser preferível, devido à estrutura de simetria da matriz de variâncias e covariâncias dos estimadores dos contrastes de interesse e à facilidade em obter estimadores combinados intra-interbloco, veja Constantine (1983). Assim, para muitos propósitos práticos, é suficiente procurar um delineamento eficiente na classe reduzida dos delineamentos de tipo S , veja Hedayat e Majumdar (1984). No caso de se ter um número de tratamentos que não é quadrado perfeito ou se as concorrências não são números inteiros, a técnica do reforço (*reinforcement*, em inglês), inicialmente ideada por Das (1958), pode fornecer resultados aproximados, veja Gupta (1989).

Nos casos onde não existem delineamentos de tipo S , um delineamento eficiente poderá ser obtido utilizando a ideia de módulos (*bricks*, em inglês) proposta por Pearce (1964), veja por exemplo Jones e Eccleston (1980) e Jones (1985).

No próximo capítulo serão feitas as considerações finais deste trabalho.

Capítulo 7

Considerações finais

Nesta dissertação foi feito um estudo dos contrastes em delineamentos conexos em blocos, sendo ele limitado à análise intrabloco e orientado principalmente à construção de delineamentos.

Tentou-se basicamente construir esquemas experimentais para responder com máximo detalhe às perguntas do pesquisador, utilizando os contrastes para especificar o propósito do experimento, procurando satisfazer as expectativas do experimentador em relação à precisão na estimação desses contrastes. A matriz C da análise intrabloco exerce um importante papel nesse estudo, desde que sua estrutura espectral contém informação sobre os contrastes naturais e básicos, enquanto seus elementos exibem as concorrências ponderadas e as quase-replicações dos tratamentos. Por outro lado, o teorema de Gupta (1988a) enunciado no Capítulo 5 mostra que a estrutura da matriz C está também intimamente relacionada com a matriz de dispersão de um conjunto de contrastes estimados. Além disso, explorando esta estrutura pode-se ter informação sobre algumas propriedades desejáveis de um plano experimental como conexidade, ortogonalidade e equilíbrio. Desta forma a Teoria dos Modelos Lineares pode ser vista como um instrumento geral que também pode ser utilizada para obter informações valiosas sobre as potencialidades do plano experimental antes da execução física do experimento.

Quando tratamentos e blocos não são ortogonais, o estudo dos contrastes naturais e básicos fornece uma visão global do alcance e limitações do delineamento ex-

perimental. A partir desse estudo pode-se ter informação sobre os contrastes que serão estimados com eficiência completa e os que terão afetadas suas eficiências. Também, ambos os tipos de contrastes produzem partições da soma de quadrados dos tratamentos em componentes estatisticamente independentes. A decomposição, não será única no caso de existir multiplicidade entre os autovalores da matriz C ou F . Em particular, se todos os autovalores são iguais, (como no caso dos blocos completos aleatorizados ou dos blocos incompletos balanceados), todos os contrastes serão naturais (ou básicos) e qualquer conjunto de $v - 1$ contrastes ortogonais linearmente independentes produzirão uma decomposição da soma de quadrados dos tratamentos. Se ambos os conjuntos de contrastes diferem, a escolha deles dependerá dos objetivos do experimento. Assim, um delineamento deve ser construído de tal maneira que os contrastes de interesse sejam os naturais ou básicos, tentando estimá-los com alta eficiência.

Se o delineamento a ser adotado pertence a alguma das classes estudadas no Capítulo 4, será fácil ter informação sobre precisão e eficiência na estimação de contrastes, utilizando as replicações efetivas e os fatores de eficiência exibidos na tabela 4.1.

Outro método de construção de delineamentos pode ser utilizado quando se procura estimar um conjunto de contrastes com variâncias e covariâncias pré-especificadas pelo experimentador. O teorema demonstrado por Gupta (1988a) explora essa possibilidade. Uma de suas conseqüências mais interessantes é a construção de delineamentos que produzem estimativas independentes de contrastes não ortogonais, como no caso da comparação de vários tratamentos em estudo com um controle, já que nesses casos mesmo delineamentos ortogonais (tais como os blocos completos aleatorizados) falham neste sentido. Este caso encontra-se ilustrado no Exemplo 5.2.

Uma das extensões do resultado de Gupta (1988a) feita neste trabalho, visa ao estudo de delineamentos com blocos para comparar diversos tratamentos com um controle. Esse resultado mostra que toda a informação estatística pertinente, correspondente aos contrastes suplementares, está contida na inversa da sub-matriz M da matriz de informação. Esse resultado foi utilizado no estudo da A-otimalidade dos delineamentos de tipo S para estimar contrastes suplementares, generalizando assim os resultados de Gupta (1989) para delineamentos não binários.

O teorema de Gupta (1988a), oferece também a possibilidade de gerar diversos delineamentos para uma mesma situação experimental, dando ao pesquisador a opção de comparar planos alternativos e escolher o mais conveniente. Porém, existem situações onde é difícil ou impossível encontrar tais planos. Isto indica que não existe

uma relação biunívoca entre delineamentos e matrizes de informação, pois a cada plano experimental pode ser associada somente uma matriz de informação, correspondendo, porém, a cada matriz de informação nenhum, um ou vários planos.

Algumas questões devem ainda ser estudadas. Entre elas pode ser mencionada a pesquisa e implementação de algoritmos para a geração de planos experimentais a partir do conhecimento da matriz de informação, produzidos pela especificação da matriz de dispersão dos contrastes de interesse. Em particular, a procura de planos mais eficientes que satisfaçam esses requerimentos é uma tarefa a ser realizada.

Para que a teoria apresentada no Capítulo 6 seja aplicável em diversas situações práticas, tais como quando o número de tratamentos não é quadrado perfeito ou quando as concorrências não são números inteiros, é necessário também avaliar a qualidade das soluções propostas por Gupta (1989).

Através de todo o trabalho foi feita a formalização da teoria apresentada, incluindo somente as demonstrações que não se encontram na literatura revisada. A utilidade desta teoria na construção dos delineamentos foi ilustrada com ajuda de exemplos adaptados à situação em estudo. Foram exploradas em detalhe diversas possíveis situações nos quais o teorema de Gupta (1988a) pode ser aplicado, gerando-se diversos planos pelo método de tentativa e erro.

Experimentos comparativos são freqüentemente conduzidos para obter informação sobre contrastes particulares, de interesse para o pesquisador. Nesse sentido, a teoria contida neste trabalho pode ser uma ferramenta útil para a construção de planos experimentais realistas, eficientes e compatíveis com o objetivo do experimento. Eles poderão assim fornecer informação relevante para o pesquisador, com a vantagem adicional de admitir avaliações prévias a sua implementação.

Apêndice A

Neste Apêndice daremos uma lista de resultados matriciais utilizados neste trabalho. Esses resultados e suas demonstrações podem-se encontrar em Roy, Greenberg e Sarhan (1960), Rao (1965), Ouellette (1981), Graybill (1983), Seber (1984), e Noble & Daniel (1988), entre outros.

A1. Determinante

Lema A.1 *Se A é uma matriz de ordem $p \times p$ e $|A| \neq 0$, então*

$$|cA| = c^p |A|.$$

Lema A.2 *Se A e B são duas matrizes de ordem $p \times p$, então*

$$|AB| = |A||B|.$$

Teorema A.1 *Seja a matriz quadrada particionada*

$$A = \begin{pmatrix} E & F \\ G & H \end{pmatrix}.$$

Se a matriz E é não singular, então

$$|A| = |E||H - GE^{-1}F|.$$

Corolário A.1 Se H é não singular e F e G são matrizes nulas, então

$$|A| = |E||H|.$$

Corolário A.2 Seja F de ordem $m \times n$ e G de ordem $n \times m$. Então

$$|I_m - FG| = |I_n - GF|.$$

A2. Matrizes padronizadas

Definição A.1 A matriz $A = (a_{ij})$ de ordem $p \times p$ é chamada matriz circulante se $a_{ij} = a_{1m}$, onde

$$m = \begin{cases} j - i + 1, & \text{se } j \geq i \\ n - (j - i + 1), & j < i \end{cases} \quad i, j = 1, \dots, p.$$

Teorema A.2 Se A é uma matriz circulante, simétrica e de ordem $p \times p$, seus autovalores estão dados por

$$\lambda_j = \sum_{l=1}^{p-1} a_l \cos\left(\frac{2\pi jl}{p}\right), \quad j = 0, 1, \dots, p-1.$$

Corolário A.3 Se $A = \begin{pmatrix} g & & be' \\ be & (c-d)I_{n-1} + d\mathbf{1}_{n-1}\mathbf{1}'_{n-1} \end{pmatrix}$, então

$$|A| = g \left| (c-d)I_{n-1} + \left(\frac{dg-b^2}{g}\right) \mathbf{1}_{n-1}\mathbf{1}'_{n-1} \right|.$$

Teorema A.3 *Seja a matriz B de ordem $k \times k$ definida por*

$$B = (a - b)I_k + b\mathbf{1}_k\mathbf{1}'_k$$

A matriz B tem inversa se e somente se $a \neq b$ e $a \neq -(k - 1)b$. Nesse caso,

$$B^{-1} = \frac{1}{a - b} \left(I_k - \frac{b}{a + (k - 1)b} \mathbf{1}_k\mathbf{1}'_k \right).$$

Teorema A.4 *Se A e B são matrizes de ordem $k \times k$ e*

$$D = \begin{pmatrix} A & B & \cdots & B \\ B & A & \cdots & B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B & B & \cdots & A \end{pmatrix}$$

e D tem dimensão $mk \times mk$, então

$$|D| = |A - B|^{m-1} |A + (m - 1)B|$$

Teorema A.5 *Se A e D são matrizes simétricas e suas inversas existem, então*

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B' & D \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} + FE^{-1}F' & -FE^{-1} \\ -E^{-1}F' & E^{-1} \end{pmatrix}$$

onde $E = D - B'A^{-1}B$ e $F = A^{-1}B$.

Corolário A.4 $\begin{pmatrix} A & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & D \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & D^{-1} \end{pmatrix}.$

A3. Matrizes positivas semidefinidas

Definição A.2 Uma matriz simétrica A é positiva semidefinida se e somente se $\mathbf{x}'A\mathbf{x} \geq 0$ para todo vetor \mathbf{x} .

Teorema A.6 Seja A uma matriz simétrica de ordem $p \times p$. Condições necessárias e suficientes para que A seja positiva semidefinida são

(i) Os autovalores de A são não negativos.

(ii) Existe uma matriz B de ordem $p \times p$ de posto menor o igual que p tal que $A = B'B$.

A4. Matrizes idempotentes

Definição A.3 Uma matriz quadrada A é idempotente se $A^2 = A$.

Lema A.3 Se A é idempotente, então também $I - A$ é idempotente.

Definição A.4 Uma matriz simétrica é idempotente é chamada de matriz de projeção.

A5. Inversas generalizadas

Definição A.5 A g -inversa de uma matriz A de ordem $m \times n$ é a matriz A^- de ordem $n \times m$ tal que

$$AA^-A = A$$

Lema A.4 *Seja A uma matriz simétrica de ordem p . Se A^- é inversa generalizada de A , então $(A^-)'$ é inversa generalizada de A .*

Definição A.6 *A matriz A^+ é a inversa de Moore-Penrose de A se*

$$(i) \quad AA^+A = A$$

$$(ii) \quad A^+AA^+ = A^+$$

$$(iii) \quad (AA^+)' = AA^+$$

$$(iv) \quad (A^+A)' = A^+A$$

Essa inversa existe e é única.

A6. Autovalores e autovetores

Seja A uma matriz quadrada e simétrica de ordem p . Um autovalor de A é um escalar λ tal que $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$, para algum vetor $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. O vetor \mathbf{x} é chamado de autovetor de A .

Teorema A.7 *Uma matriz quadrada de ordem $p \times p$ tem autovalores nulos se e somente se A é singular.*

Lema A.5 *Se A é uma matriz simétrica de ordem p , com autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$. Então*

$$(i) \quad \text{traço}(A) = \sum_{i=1}^p \lambda_i$$

$$(ii) \quad \text{posto}(A) = \text{número de autovalores não nulos.}$$

$$(iii) |A| = \prod_{i=1}^p \lambda_i$$

(iv) se λ_i é autovalor de A , então $k\lambda_i$ é autovalor de kA , $i = 1, \dots, p$

$$(v) (A + kI)\mathbf{x} = (\lambda_i + k)\mathbf{x}$$

$$(vi) A^h \mathbf{x} = \lambda^h \mathbf{x}, \quad h = 1, 2, \dots$$

(vii) Se A é positiva definida, então $\lambda_i > 0$, $i = 1, \dots, p$.

(viii) Se A é positiva semidefinida de posto r , então exatamente r dos autovalores são maiores que zero, e os restantes são nulos.

Teorema A.8 (Decomposição Espectral) Qualquer matriz simétrica $A_{p \times p}$ pode ser decomposta como

$$A = \Gamma \Lambda \Gamma' = \sum_i \lambda_i \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i'$$

onde Λ é uma matriz diagonal de autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ de A e Γ é uma matriz ortogonal cujas colunas são os autovetores $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p$ com $\mathbf{x}_i' \mathbf{x}_j = 1$ se $i = j$ e $\mathbf{x}_i' \mathbf{x}_j = 0$ se $i \neq j$.

Corolário A.5 Se A é não singular sua inversa é $A^{-1} = \sum_i \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i'$. Os autovetores satisfazem $\sum_i \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i' = I_p$.

Corolário A.6 Se A é dada por $A = \sum_i^p \lambda_i \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i'$, onde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r$ ($r < p$) são os autovalores não nulos, então a inversa generalizada de Moore-Penrose é dada por

$$A^+ = \sum_i^r \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i'$$

e a g -inversa de A é

$$A^- = \sum_i^r \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i' + \sum_{i=r+1}^p \frac{1}{\alpha_i} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i'$$

onde $\alpha_{r+1}, \alpha_{r+2}, \dots, \alpha_p$ são constantes arbitrárias.

Lema A.6 Se A é uma matriz simétrica de ordem p , então seus autovalores são reais.

Lema A.7 Seja A uma matriz simétrica de ordem p . Se $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ ($\lambda \neq 0$), então

$$\mathbf{x}' A^- A = \mathbf{x}'.$$

Apêndice B

Neste Apêndice daremos uma lista de comandos utilizados para o cálculo de diversas quantidades tais como variâncias e fatores de eficiência dos contrastes, inversas generalizadas, autovalores e autovetores das matrizes de informação e outras operações matriciais. Eles correspondem aos módulos IML e CM dos pacotes estatísticos SAS e SOC respectivamente.

LISTA DE COMANDOS

SAS	SOC	TAREFA
matriz1+matriz2	matriz1+matriz2	Soma matrizes da mesma dimensão.
matriz1-matriz2	matriz1-matriz2	Subtrai matrizes da mesma dimensão.
matriz1`	matriz1'	Inverte a posição dos elementos das linhas e colunas e vice-versa.
matriz1*matriz2	matriz1*matriz2	Calcula o produto matricial entre matrizes compatíveis.
matriz1##r	matriz1#r	Eleva cada elemento da matriz ao valor especificado.
matriz1**r	matriz1↑r	Eleva uma matriz quadrada ao valor especificado.
EIGEN(matriz)	AUTO(matriz)	Calcula os autovalores e os autovetores de uma matriz simétrica.
EIGVAL(matriz)		Calcula os autovalores de uma matriz sim
EIGVEC(matriz)		Calcula os autovetores de uma matriz sim
DET(matriz)	DET(matriz)	Calcula o determinante de uma matriz qu
TRACE(matriz)	TRACO(matriz)	Calcula o traço de uma matriz quadrada.
	VDIAG(matriz)	Constroe um vetor a partir da diagonal principal de uma matriz quadrada.
DIAG(vetor)	DIAG(vetor)	Constroe uma matriz diagonal a partir de um vetor.
DIAG(matriz)	DIAG(matriz)	Constroe uma matriz diagonal a partir do elementos diagonais de uma matriz quad.
I(n)	IDENT(n)	Cria uma matriz identidade com dimensão definida pelo valor do argumento.
INV(matriz)	INV(matriz)	Calcula a inversa de uma matriz quadrada não singular.
GINV(matriz)	INVP(matriz)	Calcula a g-inversa de uma matriz retangular $m \times n$ com $m \geq n$.

LISTA DE NOTAÇÕES

A seguir são listadas as notações utilizadas neste trabalho, indicando-se também a página onde a notação é introduzida.

Símbolo	Significado
d	Delineamento ou plano experimental, p. 11
n	Número de unidades experimentais, p. 11
v	Número de tratamentos, p. 11
b	Número de blocos, p. 11
k	Tamanho do bloco para delineamentos próprios, p. 13
k_j	Tamanho do bloco j , p. 12
r	Número de replicações para delineamentos equi-replicados, p. 13
r_i	Número de replicações do tratamento i , p. 12
\mathbf{Y}	Vetor coluna aleatório de n observações, p. 11
\mathbf{y}	Vetor coluna formado pelos valores observados de \mathbf{Y} , p. 14
$\mathbf{1}_n$	Vetor coluna de dimensão n , com todos seus elementos iguais a 1, p. 11
σ^2	Variância das perturbações aleatórias, p. 11
D	Matriz do delineamento para blocos, p. 11
d_{ij}	(i,j) -ésimo elemento de D , p. 12
Δ	Matriz do delineamento para tratamentos, p. 12
δ_{ij}	(i,j) -ésimo elemento de Δ , p. 12
β	Vetor coluna de dimensão b formado pelos parâmetros dos blocos, p. 11
τ	Vetor coluna de dimensão v formado pelos parâmetros dos tratamentos, p. 11
$\hat{\tau}$	Vetor que estima o vetor τ dos tratamentos, p. 28

Continuação

Símbolo	Significado
ε	Vetor coluna de n perturbações aleatórias, p. 11
\mathbf{k}	Vetor de tamanhos dos blocos, p. 12
\mathbf{r}	Vetor de replicações dos tratamentos, p. 12
\mathbf{k}^δ	Vetor \mathbf{k} escrito como uma matriz diagonal, p. 12
\mathbf{r}^δ	Vetor \mathbf{r} escrito como uma matriz diagonal, p. 12
$\mathbf{r}^{-\delta}$	Inversa de \mathbf{r}^δ , p. 12
$\mathbf{k}^{-\delta}$	Inversa de \mathbf{k}^δ , p. 12
N	Matriz de incidência do delineamento, p. 13
n_{ij}	(i, j) -ésimo elemento de N , p.13
NN'	Matriz de concorrências dos tratamentos, p. 14
B	Total dos blocos, p. 14
T	Total dos tratamentos, p. 14
G	Total geral das observações, p. 14
Q	Vetor de totais ajustados dos tratamentos, p. 16
C	Matriz de informação do delineamento, p. 16
c_{ij}	(i, j) -ésimo elemento de C , p. 18
C	Matriz de Kirchhoff, p. 20
$G(d)$	Grafo associado ao delineamento d , p. 20
C^-	Inversa generalizada de C , p. 25
C^+	Inversa generalizada de Moore-Penrose de C , p. 26
Φ	Matriz de projeção, p. 27
Ω	Inversa generalizada de Tocher, p. 25
Ξ	Inversa generalizada de Pearce, p. 26
F	Matriz ponderada de C , p. 40
F^+	Inversa generalizada de Moore-Penrose da matriz F , p. 41
ϵ_i	i -ésimo autovalor da matriz F , p. 40
p_i	i -ésimo autovetor da matriz F , p. 40
λ_i	i -ésimo autovalor da matriz C , p. 30

Continuação

Símbolo	Significado
u_i	i -ésimo autovetor da matriz C , p. 30
β	Concorrência ponderada, p. 55
α	Concorrência não ponderada, p. 57
R	Replicação efetiva, p. 34
$ef(c'\tau)$	Fator de eficiência do contraste $c'\tau$, p. 35
L	Matriz de coeficientes de contrastes, p. 80
$\sigma^2 M^{-1}$	Matriz de dispersão de $L\hat{\tau}$, p. 80
m_i	i -ésimo elemento diagonal de M^{-1} , p. 117
$\Omega_{v,b,k}$	Família de delineamentos em b blocos de tamanho k e v tratamentos, p. 116
T	Limite inferior da variância média dos contrastes suplementares, p. 120

Bibliografia

- [1] ATIQULLAH, M. (1961). On a property of balanced designs. *Biometrika* 48, 215-218.
- [2] BAILEY, R. A. (1991). Strata for randomized experiments. *J. Roy. Statist. Soc. B* 53, 27-78.
- [3] BECHHOFFER, R. E. & TAMHANE, A. C. (1981). Incomplete block designs for comparing treatments with a control: general theory. *Technometrics* 23, 45-57.
- [4] BOX, J. F. (1980). R. A. Fisher and the design of experiments. *Amer. Statist.* 34, 1-7.
- [5] CALIŃSKI, T. (1971). On some desirable patterns in block designs. *Biometrics* 27, 275-292.
- [6] CALIŃSKI, T. (1977). On the notion of balance in block designs. Em: *Recent Developments in Statistics*, J. R. Barra *et al.* (Eds). North Holland: New York, 365-374.
- [7] CHAKRABARTI, M. C. (1962). *Mathematics of Design and Analysis of Experiments*. London, Asia Publishing House.
- [8] CHAKRABARTI, M. C. (1964). Lecture No. 4: Balance. In: *Design of Experiments Summer Course (advanced) for Statisticians*, Lecture Notes No. 1, Calcutta: Indian Statistical Institute, 23-30.
- [9] COCHRAN, W. G. & COX, G. M. (1957). *Experimental Designs*. 2nd Edition, New York, John Wiley.
- [10] CONSTANTINE, G. M. (1983). On the trace efficiency for control of reinforced balanced incomplete block designs. *J. Roy. Statist. Soc. B* 45, 31-36.
- [11] CONSTANTINE G. M. (1987). *Combinatorial Theory and Statistical Design*. New York, John Wiley.

- [12] DAS, M. N. (1958). On reinforced incomplete block designs. *J. Ind. Soc. Agric. Statist.* 10, 73-77.
- [13] DAVID, H. A. (1982). Cyclic designs. Em: *Encyclopedia of Statistical Sciences*, 2. Johnson, N. L. & Kotz, S. (Eds). New York, John Wiley.
- [14] DEY, A. (1986). *Theory of Block Designs*. New York, John Wiley.
- [15] GRAYBILL, F. A. (1983). *Matrices with Applications in Statistics*. Wadsworth, Inc., Belmont-California.
- [16] GREENBERG, B. G. & SARHAN, A. E. (1959). Matrix inversion, its interest and application in analysis of data. *J. Amer. Statist. Ass.* 54, 755-766.
- [17] GUPTA, S. C. (1988a). On the property of balance and the pattern of C-Matrix in block designs. *Commun. Statist. Theory Meth.* 17, 3125-3135.
- [18] GUPTA, S. C. (1988b). Precision of estimation of the treatment contrasts and the intra-block matrix of block designs. *Biom. J.* 30, 451-460.
- [19] GUPTA, S. C. (1989). Efficient designs for comparing test treatments with a control. *Biometrika* 76, 783-787.
- [20] HEALY, M. J. R. (1968). Multiple regression with a singular matrix. *Appl. Statist.* 17, 110-117.
- [21] HEDAYAT, A. & FEDERER, W.T. (1974). Pairwise and variance balanced incomplete block designs, *Ann. Inst. Stat. Math.* 26, 331-338.
- [22] HEDAYAT, A. S. & MAJUMDAR, D. (1984). A-optimal incomplete block designs for control-test treatment comparisons. *Technometrics* 26, 363-370.
- [23] HEDAYAT, A. S. & MAJUMDAR, D. (1985). Families of A-optimal block designs for comparing test treatments with a control. *Ann. Statist.* 13, 757-767.
- [24] HEDAYAT, A. S., JACROUX, M. & MAJUMDAR, D. (1988). Optimal designs for comparing test treatments with controls (with discussion). *Statist. Sci.* 3, 462-491.
- [25] HOBLYN, T. N., PEARCE, S.C. & FREEMAN, G. H. (1954). Some considerations in the design of successive experiments in fruit plantations. *Biometrics* 10, 503-515.
- [26] JOHN, J. A. (1987). *Cyclic Designs*. London-New York, Chapman and Hall.
- [27] JOHN, P. W. M. (1964). Balanced designs with unequal numbers of replicates. *Ann. Math. Statist.* 35, 897-899.

- [28] JONES, B. & ECCLESTON, J. A. (1980). Exchange and interchange procedures to search for optimal designs. *J. Roy. Statist. Soc. B* 42, 238-243.
- [29] JONES, B. (1985). Using bricks to build block designs. *J. Roy. Statist. Soc. B* 47, 349-356.
- [30] JONES, R. M. (1959). On a property of incomplete blocks. *J. Roy. Statist. Soc. B* 21, 172-179.
- [31] KAGEYAMA, S. (1976). Constructions of balanced block designs. *Utilitas Math.* 9, 209-229.
- [32] KIEFER, J. (1958). On the nonrandomized optimality and randomized nonoptimality of symmetrical designs. *Am. Math. Statist.* 29, 675-699.
- [33] KIEFER, J. (1959). Optimum experimental design. *J. Roy. Statist. Soc. B* 21, 272-319.
- [34] KIEFER, J. (1971). The role of symmetry and approximation in exact design optimality. *Statistical Decision Theory and Related Topics*. New York, Gupta S., Yackel J, (Eds). 109-118.
- [35] KIEFER, J. (1974). General Equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Ann. Statist.* 2, 849-879.
- [36] KIEFER, J. (1985). *Collected papers III: Design of Experiments*. New York, Springer.
- [37] KULSHRESHTHA, A. C., DEY, A. & SAHA, G. M. (1972). Balanced designs with unequal replications and unequal block sizes. *Ann. Math. Statist.* 43, 1342-1345.
- [38] MAJUMDAR, D. & NOTZ, W. (1983). Optimal incomplete block designs for comparing treatments with a control. *Ann. Statist.* 11, 258-266.
- [39] MAJUMDAR, D. (1988). Optimal block designs for comparing new treatments with a standard treatment. In: *Optimal Design and Analysis of Experiments*, Amsterdam: North-Holland. Y. Dodge, V. V. Fedorov and H. P. Wynn (Eds.), 15-27.
- [40] MEAD, R. (1990). The non-orthogonal design of experiments. *J. Roy. Statist. Soc. A* 153, 151-201.
- [41] NAIR, K. R. & RAO, C. R. (1948). Confounding in asymmetrical factorial experiments. *J. Roy. Statist. Soc. B* 10, 109-131.
- [42] NOBLE, B. & DANIEL, J. W. (1988). *Applied Linear Algebra*. New Jersey, Prentice-Hall, Inc.

- [43] OUELLETTE, D. V. (1981). Schur complements and statistics. *Linear Algebra and its Applications* 36, 187-231.
- [44] PATERSON, L. (1983). Circuits and efficiency in incomplete block designs. *Biometrika* 70, 215-225.
- [45] PEARCE, S. C. (1960). Supplemented balance. *Biometrika* 47, 263-271.
- [46] PEARCE, S. C. (1963). The use and classification of non-orthogonal designs (with discussion). *J. Roy. Statist. Soc. A* 126, 353-377.
- [47] PEARCE, S. C. (1964). Experimenting with blocks of natural size. *Biometrics* 20, 699-706.
- [48] PEARCE, S. C. (1970). The efficiency of block designs in general, *Biometrika* 57, 339-346.
- [49] PEARCE, S. C., CALIŃSKI, T. & MARSHALL, T. F. de C. (1974). The basic contrasts of an experimental design with special reference to the analysis of data, *Biometrika* 61, 449-460.
- [50] PEARCE, S. C. (1975). Optimality of design in plot experiments. *Proc. 8th Intern. Biometric Conference*. Constanta, Romania, 23-30.
- [51] PEARCE, S. C. (1976a). Concurrences and quasi-replications: An alternative approach to precision in designed experiments, *Biom. J.* 18, 105-116.
- [52] PEARCE, S.C. (1976b). Experimental design and designing of experiments, *Math. Scientist*. 1, 89-97.
- [53] PEARCE, S. C. (1976c). *Field Experimentation with Fruit Trees and other Perennial Plants*. Technical Communication No. 23 (revised). London, Commonwealth Agricultural Bureaux.
- [54] PEARCE, S. C. (1982). The treatment sum of squares. *Utilitas Math.* 21 B, 123-139.
- [55] PEARCE, S. C. (1983a). *The Agricultural Field Experiment - A Statistical Examination of Theory and Practice*. Chichester, John Wiley.
- [56] PEARCE, S. C. (1983b). The monstrous regiment of mathematicians. *The Statistician*, 32, 375-378.
- [57] PEARCE, S. C. (1986). Experimental design: the first sixty years. *Tropical Agriculture (Trinidad)* 63, 95-100.
- [58] PEARCE, S. C., CLARKE, G. M. & DYKE, G. V. (1988). *A Manual of Crop Experimentation*. London, Charles Griffin & Company LTD.

- [59] PREECE, D. A. (1977). Orthogonality and designs: a terminological muddle, *Utilitas Math.* 12, 201-233.
- [60] PREECE, D. A. (1982a). The design and analysis of experiments: what has gone wrong? *Utilitas Math.* 21 A, 201-244.
- [61] PREECE, D. A. (1982b). Balance and designs: another terminological tangle, *Utilitas Math.* 21 C, 85-186.
- [62] PREECE, D. A. (1990). R. A. Fisher and experimental design: A review. *Biometrics* 46, 925-935.
- [63] PURI, P. D. & NIGAM, A. K. (1975). On patterns of efficiency-balanced designs. *J. Roy. Statist. Soc. B* 37, 457-458.
- [64] RAGHAVARAO, D. (1962). On balanced unequal block designs, *Biometrika* 49, 561-562.
- [65] RAGHAVARAO, D. (1971). *Constructions and Combinatorial Problems in Design of Experiments*. New York, John Wiley.
- [66] RAO, V. R. (1958). A note on balanced designs. *Ann. Math. Statist.* 29, 290-294.
- [67] RAO, C. R. (1965). *Linear Statistical Inference and its Applications*. New York, John Wiley.
- [68] ROY, S. N. & SARHAN, A. E. (1956). On inverting a class patterned matrices. *Biometrika* 43, 227-231.
- [69] ROY, S. N., GREENBERG, B. G. & SARHAN, A. E. (1960). Evaluation of determinants, characteristic equations and their roots for a class of patterned matrices. *J. Roy. Statist. Soc. B* 22, 348-359.
- [70] SEBER, G. A. (1984). *Multivariate Observations*. New York, John Wiley.
- [71] STUFKEN, J. (1991). Bayes A-optimal and efficient block designs for comparing test treatments with a standard treatment. *Commun. Statist. Theor. Meth.* 20, 3849-3862.
- [72] TING, C. P. & NOTZ, W. (1988). A-optimal complete block designs for treatment-control comparisons. Em: *Optimal Design and Analysis of Experiments*, Amsterdam: North-Holland. Y. Dodge, V. V. Fedorov and H. P. Wynn (Eds.), 29-37.
- [73] TOCHER, K. D. (1952). The design and analysis of block experiments (with discussion). *J. Roy. Statist. Soc. B* 14, 45-100.

- [74] SHAH, K. R., DAS, A. (1992). Binary designs are not always the best. *Can. J. Statist.* 20, 347-351.
- [75] WILLIAMS, E. R. (1975). Efficiency-balanced designs. *Biometrika* 62, 686-689.
- [76] YATES, F. (1933). The principles of orthogonality and confounding in replicated experiments. *J. Agric. Sci.* 23, 108-145.
- [77] YATES, F. (1964). Sir Ronald Fisher and the design of experiments. *Biometrics* 20, 307-321.
- [78] YATES, F. (1975). The early history of experimental design. *A Survey of Statistical Design and Linear Models*. North-Holland: Amsterdam, J. N. Srivastava (Ed.), 581-592.