

## PLANEJAMENTO FATORIAL 2<sup>2</sup>

### META

apresentar ao aluno aspectos fundamentais dos planejamentos fatoriais através da exemplificação com um planejamento 2<sup>2</sup>.

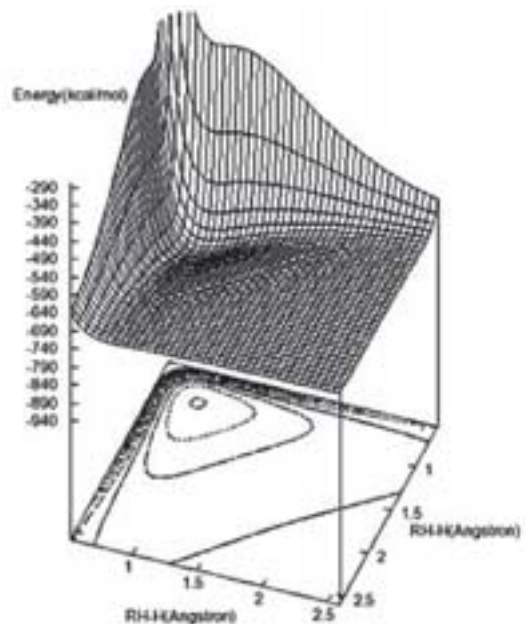
### OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá:

- identificar os tipos de problemas práticos que podem ser solucionados por meio de planejamento fatorial;
- elaborar um planejamento fatorial 2<sup>2</sup>, destacando todas as etapas de seleção de variáveis e de respostas;
- realizar os experimentos em ordem aleatória;
- calcular os erros ns respostas

### PRÉ-REQUISITOS

O aluno deverá, conhecer o planejamento de experimentos feitos na Aula 1.

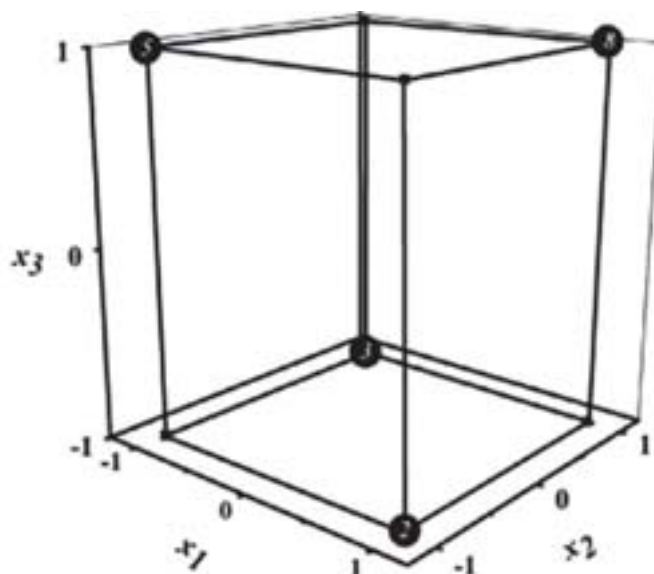


(Fonte: <http://www.unb.br>)

Vamos retornar a algumas discussões que fizemos no início do curso. Imagine que você é um experimentalista e está com o seguinte problema nas mãos: achar as melhores condições experimentais, por exemplo, em termos do

## INTRODUÇÃO

rendimento de um produto, para um processo que depende de várias variáveis como concentração dos materiais de partida, tempo e temperatura. Discutimos bastante acerca disso no início do curso e deixamos como conclusão que de nada adiantaria variar um parâmetro de cada vez e que devemos recorrer aos métodos quimiométricos. É chegada a hora, portanto, de abordarmos tais métodos, começando pelo método conhecido como planejamento fatorial, método que nos permite variar todos os parâmetros ao mesmo tempo e conseguir depois interpretar o efeito de um aumento ou diminuição no nível de cada um. É importante deixar claro que isso não se aplica somente a otimizações de rendimentos, mas a todo e qualquer processo em que se busque uma ou mais respostas (propriedades, medidas etc.) simultâneas e que envolva a variação de diversas variáveis (chamadas aqui de fatores).



Como o próprio nome (planejamento fatorial) diz, planeja-se ou programa-se uma série de experimentos a serem realizados e cujos resultados somente serão analisados ao final de toda a série. Comparando-se este planejamento com o procedimento baseado no senso comum, aquele que destacamos no início do curso e que envolveria a tentativa de otimização de uma variável de cada vez, mantendo-se as demais constantes. Neste último caso, o resultado de cada experimento é usado na elaboração do experimento seguinte.

## EXPERIMENTO

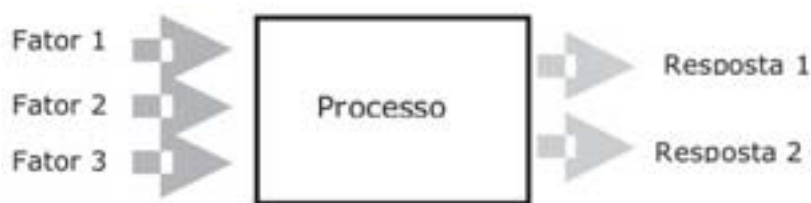
O senso comum poderia nos dar um falso alerta de que um número menor de experimentos poderia ser suficiente para a otimização do processo com o uso do segundo método, mas não há qualquer garantia de que realmente o efeito de cada variável será conhecido procedendo desta maneira. Outro problema com este método é que ele simplesmente ignora o chamado sinergismo entre variáveis ou efeitos de interação, que ocorrem quando um fator estiver em seu nível alto ou baixo, o que potencializa o efeito de outro fator.

Vamos ver a seguir, em detalhes, como funciona este planejamento.

## COMO PLANEJAR?

Para a aplicação de planejamentos fatoriais a um dado processo, inicialmente é necessário que se determine os fatores ou variáveis e também as respostas de interesse. Portanto, algum conhecimento prévio sobre o processo é essencial. No tocante às respostas, elas constituem o próprio objetivo do planejamento experimental e podem ser tanto quantitativas como qualitativas: por exemplo, é possível desejar que o produto tenha um certo valor de área superficial (resposta numérica) ou uma resposta qualitativa como a uniformidade de tamanhos de partícula.

O esquema abaixo resume de forma simplificada a elaboração de um planejamento fatorial.



Depois de definirmos quais fatores (variáveis) serão estudados e quais as respostas desejadas (e que podem ser avaliadas a partir daquele planejamento), definimos os níveis em que cada fator deve ser estudado. Estes níveis podem ser os valores das variáveis, por exemplo, temperatura, ou também podem ser qualitativos: dois catalisadores, duas bases diferentes (NaOH ou  $\text{NH}_4\text{OH}$ ).

No que concerne a estes níveis, nos planejamentos fatoriais normalmente estipulam dois níveis para cada variável, ou seja, dois valores numéricos ou dois níveis qualitativos. Os experimentos são planejados de acordo com todas as possíveis combinações dos níveis dos fatores, de modo que para  $k$  fatores a serem estudados em dois níveis, o número total de experimentos ou ensaios será  $2^k$ .

### Exemplo

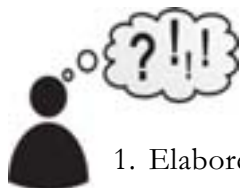
- Objetivo: maximizar o rendimento
- Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ): nível (-) 40 e nível (+) 80 $^{\circ}\text{C}$
- Catalisador: nível (-) A e nível (+) B

Assim, teremos um planejamento  $2^2$ , com dois fatores sendo estudados em 2 níveis e 4 ensaios, que deverão ser realizados em duplicata. Constrói-se uma tabela como a da próxima página, em que os ensaios são numerados (veja a primeira coluna).

Os fatores também são numerados. No caso, a temperatura foi o fator 1 e o tipo de catalisador foi o fator 2. Nas colunas que relacionam o número dos fatores com o número dos ensaios, fazemos as combinações de níveis (sinais - e +) para cada ensaio da seguinte forma: no primeiro fator, alternamos sinais negativos e positivos um a um: - + - +; para o segundo fator, alternamos os sinais 2 a 2: - - + +; e se tivéssemos mais fatores, os sinais correspondentes seriam alternados 4 a 4 (- - - + + + +), 8 a 8 e assim por diante, como veremos nas próximas aulas. Veja que isto garante que todas as combinações possíveis de variáveis sejam feitas. Outro cuidado a ser tomado é que os ensaios devem ser realizados em uma ordem totalmente aleatória. Por sorteio, por exemplo. Isto minimiza a ocorrência de certos erros atípicos.

	Fatores		(-)		(+)
	1: Temperatura		40		80
	2: Catalisador		A		B
Ensaio	1	2	Rendimento (%)		Média
1	-	-	57	61	59
2	+	-	92	88	90
3	-	+	55	53	54
4	+	+	66	70	68

Nas demais colunas, adicionamos os valores das respostas resultantes dos ensaios, em duplicatas autênticas, ou seja, repetindo-se realmente todas as etapas, e o valor médio obtido. A realização dos ensaios em duplicata garante que se possa estimar os erros experimentais, avaliando a significância estatística dos valores obtidos. Isto é muito importante porque, como veremos na próxima aula, o cálculo dos efeitos de cada variável precisa ser confiável.



## ATIVIDADES

1. Elabore um planejamento experimental, do tipo fatorial  $2^2$ , para o seguinte problema. Uma substância química com atividade farmacológica é extraída de uma determinada planta. Isto pode ser feito com dois tipos de solvente, com ou sem aquecimento, ou seja, à temperatura ambiente e na temperatura de ebulição de cada solvente (cujos valores não vêm ao caso, você só precisa observar que o solvente entrou em ebulição). Estes fatores podem influenciar a quantidade extraída para uma mesma massa de planta usada na extração e também o grau de pureza, pois outras substâncias podem ser extraídas junto. Responda às seguintes questões e elabore um planejamento fatorial.

- Quais são os fatores?
- Quais serão os níveis de cada fator?
- Qual(is) a(s) resposta(s) desejada (s)?

2. Construa a matriz de planejamento:

	Fatores	(-)	(+)
	1:		
	2:		
Ensaio			

## ESTIMATIVAS DOS ERROS

Para estimarmos o erro na resposta obtida a partir da duplicata de um dado ensaio, ou seja, para uma combinação de níveis específica, calculamos a variância. Por exemplo, para o ensaio 2: 92 e 88 (média 90), a variância será.

$$\text{Variância: } [(92-90)^2 + (88-90)^2] / 1 = 8$$

Em seguida, calculamos a variância dos demais ensaios e depois a variância conjunta, que será:

$$s^2 = \frac{(1 \times 8) + (1 \times 8) + (1 \times 2) + (1 \times 8)}{1 + 1 + 1 + 1} = 6,5$$

A soma no denominador (1+1+1+1) decorre do fato de que, como cada experimento foi realizado apenas 2 vezes, a variância de cada um tem apenas 1 grau de liberdade. Assim, se chamarmos o número de graus de liberdade de  $n$  e a variância em cada ensaio de  $s^2$ , a variância conjunta será, de forma geral.

$$s^2 = (\sum ns^2) / \sum n$$

O erro experimental é estimado fazendo-se a raiz quadrada da variância conjunta:

$$s \text{ (resposta)} = 2,55$$



## ATIVIDADES

As observações abaixo foram realizadas em repetições autênticas dos diferentes ensaios. Faça uma estimativa conjunta do erro experimental associada a essas observações.

Ensaio		Observações			
1	12	15	11		
2	20	24	22		
3	18	18	16	19	
4	40	37	39		
5	25	23	24		

Podemos concluir a partir, do que foi ESTUDADO nesta aula, que a elaboração de um planejamento fatorial requer que se tenha algum conhecimento prévio, ou pelo menos indicações de quais podem ser as variáveis importantes de que todas devem ser estudadas em dois níveis distintos, origi-

## CONCLUSÃO

nando uma série de  $2^n$  ensaios que envolvam a combinação de todas as variáveis, em todos os níveis. Isto garante que, como não conhecemos o efeito das variáveis, que nenhuma delas está sendo privilegiada indevidamente. Vimos que os ensaios devem ser realizados em duplicata, em princípio, para que se tenha acesso ao erro associado à resposta.



## RESUMO



A partir desta aula, retomamos algumas discussões que fizemos no início do curso, relativas ao planejamento de experimentos. Na primeira aula, dissemos que pode ser muito perigoso e errado estudar o papel de uma variável de cada vez, quando precisamos otimizar as condições de realização de um dado processo que envolve várias variáveis, deixando claro que devemos recorrer aos métodos quimiométricos. Finalmente, nesta aula, começamos a estudar os métodos de planejamento experimental que nos permitem otimizar processos e avaliar o papel de variáveis com segurança. Começamos, assim, o estudo do método conhecido como planejamento fatorial, que nos permite variar todos os parâmetros ao mesmo tempo e conseguir depois interpretar o efeito de um aumento ou diminuição no nível de cada um. Para a aplicação de planejamentos fatoriais a um dado processo, inicialmente é necessário que se determine os fatores ou variáveis e também as respostas de interesse. Portanto, algum conhecimento prévio sobre o processo é essencial. No que concerne às respostas, elas constituem o próprio objetivo do planejamento experimental e podem ser tanto quantitativas quanto qualitativas. Em um planejamento fatorial, estudamos 2 fatores em 2 valores ou níveis cada, realizando um total de 2<sup>n</sup> ensaios ou experimentos, que devem, além disso, ser realizados em duplicata, para a estimativa dos erros. Isto garante que combinemos todos os fatores em todos os níveis possíveis, para saber se há interações entre os fatores. Os planejamentos fatoriais nos mostram como podemos estar errados ao tentar descobrir qual o melhor valor de uma variável, fixando-se as outras. Como podemos saber se as demais foram fixadas em seu melhor valor? E também se as variáveis não apresentam efeitos de sinergismo? Finalmente, podemos estimar o erro na resposta. Definindo o número de graus de liberdade de  $n$  e a variância em cada ensaio de  $s^2$ , a variância conjunta será de forma geral:  $s^2 = (\sum ns^2)/\sum n$ , sendo  $s$  o erro.

## CATALISADORES

Catalisador é uma substância que faz variar a velocidade de uma reação química sem que ele próprio sofra uma variação química permanente no processo. Os catalisadores são bastante comuns e muitas reações que ocorrem em nosso organismo, na atmosfera, nos oceanos e na indústria ocorrem com a ajuda de catalisadores.

## PRÓXIMA AULA



Na próxima aula, estudaremos como calcular os efeitos principais das variáveis e os efeitos de interação, para realizar a interpretação completa dos resultados.

## REFERÊNCIAS

- BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I. E.; BRUNS, R. E. **Planejamento e otimização de experimentos**. Campinas: Editora da Unicamp, 1995.
- BOX, G. E. P.; HUNTER, W. G.; HUNTER, J. S. **Statistics for experimenters. An introduction to design, data analysis and model building**. New York: Wiley, 1978.
- BUSSAB, W. O.; MORETIN, P. A. **Estatística básica**. São Paulo: Atual, 1985.