15
aula

PLANEJAMENTOS FATORIAIS FRACIONÁRIOS

META

Capacitar o aluno a identificar o tipo de problema que pode ser solucionado com os planejamentos fracionários e a aplicá-los.

OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá:
avaliar um dado problema experimental envolvendo muitas variáveis, tomando a decisão de aplicar um planejamento fracionário;
elaborar planejamentos fracionários;
determinar os padrões de mistura de efeitos principais com efeitos de interação;
conseguir interpretar o significado de efeitos principais e interativos, diante dos padrões de mistura determinados anteriormente;
identificar quais as variáveis realmente significativas, quando for o caso, com base no significado dos efeitos.

PRÉ-REQUISITOS

Compreensão das limitações dos planejamentos fatoriais completos frente a números elevados de variáveis.

Tabela 1. Matriz de planejamento experimental segundo planejamento fatorial simples 2^3, com repetição

Experimentos	Níveis das Variáveis		
	Concentração de Íons	Tempo de Agitação	Massa do Trocador
1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1
3	-1	+1	-1
4	+1	+1	-1
5	-1	-1	+1
6	+1	-1	+1
7	-1	+1	+1
8	+1	+1	+1

Matriz de planejamento fatorial fracionário saturada - reprodução (Fonte: http://www.materia.coppe.ufrj.br)

INTRODUÇÃO

Na última aula vimos como é possível realizar a estimativa dos erros quando se faz um planejamento fatorial com um número elevado de ensaios, sem realizar repetições. Como o número de ensaios é função do número *n* de variáveis pela expressão 2^n, a partir de um valor de *n*, mesmo sem a realização de repetições o número de ensaios atinge um valor desfavorável. Por exemplo, ilustramos na última aula um número de ensaios desfavorável incluindo as repetições com um fatorial 2^4, que prevê 16 combinações que repetidas completariam 32 ensaios. Mas para um fatorial 2^5 temos 32 repetições, que já é um número alto demais. O que fazer nesta situação? Será que este é o limite prático da aplicação do método? Por outro lado, no caso do planejamento 2^4, como faríamos para fazer repetições sem ter que realizar o número completo de ensaios? Felizmente há uma saída elegante: a realização de apenas uma parte do planejamento, com prejuízo apenas sobre o cálculo de efeitos de ordens altas, acima de *3*. Os efeitos principais e de ordem *2* podem ser calculados sem problemas.

FATOR	DESCRIÇÃO	NÍVEIS	
		(-)	(+)
F1	Razão em massa NiO/YSZ	30:70	50:50
F2	Razão em massa pó/solvente	40:60	55:45
F3	Granulometria do NiO	Grosseiro	Fino
F4	Razão em massa TX-100/pó	1:200	1:100
F5	Modificador reologico	PVB*	OL**
F6	Razão em massa óleo Pinho/solvente	0:100	1:100

*4% em relação a massa de pó

** 25% em relação a massa do solvente

Fatores e níveis empregados na construção do planejamento fracionário – reprodução (Fonte: http://www.materia.coppe.ufrj.br).

Veremos a seguir casos práticos.

15
aula

Vamos considerar o seguinte problema: precisamos estudar o rendimento de um processo de síntese cujas variáveis que precisam ser avaliadas são temperatura, tempo, tipo do catalisador, pH e concentração do reagente.

FRACIONÁRIOS

ensaio	T (1)	H (2)	C (3)	pH (4)	[A] (5)	% Rend
1	-	-	-	-	+	18
2	+	-	-	-	-	21
3	-	+	-	-	-	43
4	+	+	-	-	+	39
5	-	-	+	-	-	29
6	+	-	+	-	+	23
7	-	+	+	-	+	64
8	+	+	+	-	-	66
9	-	-	-	+	-	34
10	+	-	-	+	+	30
11	-	+	-	+	+	69
12	+	+	-	+	-	67
13	-	-	+	+	+	42
14	+	-	+	+	-	48
15	-	+	+	+	-	100
16	+	+	+	+	+	99

O cálculo dos efeitos é feito de forma idêntica aos casos anteriores, bastando criar a matriz dos coeficientes de contraste (usando os mesmos sinais da tabela do planejamento). Em seguida, multiplicamos cada coluna pelos valores das respostas e dividimos o resultado por 8. Para este caso, os resultados são mostrados a seguir:

Efeito:		
1 = -3,07	**12** = -0,39	**24** = 7,57
2 = 37,84	**13** = 1,00	**25** = 1,86
3 = 18,81	**14** = 0,39	**34** = 3,42
4 = 23,23	**15** = 0,04	**35** = -0,91
5 = -3,07	**23** = 8,87	**45** = 0,91

Precisamos ter cuidado com a interpretação dos efeitos, pois, como se trata de um planejamento fracionário empregado a fim de se realizar um número de ensaios inferior ao planejamento completo, algum preço forçosamente terá de ser pago em termos de informações disponíveis. Por exemplo, o efeito principal da quinta variável é obtido usando a mesma combinação de sinais das quatro primeiras colunas, o que também seria utilizado para o cálculo do efeito de interação entre as primeiras quatro variáveis. Opa... e agora? Como podemos interpretar este efeito? Adicionalmente podemos imaginar que outras "coincidências" do tipo também podem existir e vamos demonstrar que realmente existem.

Na realidade, vamos mostrar a seguir que se trata de uma mistura do efeito principal da variável *5* com os efeitos de interação de ordem *4*. Já vimos que podemos representar os efeitos de interação como produtos de colunas correspondentes aos sinais de cada variável. Por exemplo:

Efeito de interação entre a variável **1** e a variável **2** = **12**

Usando esta lógica, podemos dizer que o efeito principal da variável 5 é igual ao produto das colunas das variáveis 1, 2, 3 e 4:

$$\mathbf{1234 = 5}$$

Para chegarmos a todas as relações de coincidências, ou na terminologia de Quimiometria, aos padrões de confundimento e, no nosso objetivo final, que é mostrar como interpretar estes efeitos, precisamos agora aplicar algumas propriedades conhecidas de multiplicações de colunas de sinais (oriundas de uma álgebra muito simples).

Primeiramente, sabemos que se multiplicarmos uma coluna qualquer por ela mesma, obteremos uma coluna de sinais positivos que chamaremos de identidade **I**, ou seja:

$$\mathbf{11} = \mathbf{22} = \mathbf{33} = \mathbf{44} = \mathbf{55} = \mathbf{I}$$

Em seguida vamos lembrar que a multiplicação é comutativa e associativa, ou seja, que a ordem dos fatores não altera o produto e que, se tivermos mais de dois fatores, podemos multiplicar o resultado do produto de dois deles pelos demais, ou seja:

$$\mathbf{1234} = \mathbf{1}(\mathbf{234}) = \mathbf{3421} = \mathbf{2341} = \mathbf{2}(\mathbf{31})\mathbf{4} = ...$$

Finalmente, vamos lembrar que podemos também multiplicar ambos os lados de uma igualdade por um mesmo fator sem alterar o resultado. Vamos usar todas estas propriedades algébricas para obter os padrões de confundimento (a palavra soa estranha, mas é utilizada no jargão estatístico), partindo do único deles que conhecemos automaticamente e que foi criado na elaboração do fatorial fracionário, ou seja, **5** = **1234**. Por exemplo, vamos escrever uma seqüência qualquer de multiplicações de sinais, onde apareça o número 5:

$$\mathbf{1235} = ?$$

Podemos substituir 5 por 1234:

$$\mathbf{1235} = \mathbf{123}(\mathbf{1234})$$

Agora, usando a propriedade comutativa, vamos aproximar os números idênticos:

$$\mathbf{1235} = \mathbf{1122334}$$

ATIVIDADES

O aluno deverá realizar estas demonstrações utilizado o procedimento ilustrado para as colunas 4 e 5. Analogamente, se fizermos multiplicações de três colunas, obteremos as duas que faltam:

123 = 234513451245

123 = 112233444555 = 45

Obs.: não é possível chegar as relações desejadas neste caso, partindo de multiplicações duplas, pois chegaremos apenas à identidade!

Portanto, podemos escrever as seguintes relações triplas:

123 = 45
124 = 35
125 = 34
134 = 25
135 = 24
145 = 23
234 = 15
235 = 14
245 = 13
345 = 12

Relação entre colunas	Contrastes	Estimativas
1 = 2345	Efeito 1 = 1 = 2345	Efeito 1 = -3,07
2 = 1345	Efeito 2 = 2 = 1345	Efeito 2 = 37,84 *
3 = 1245	Efeito 3 = 3 = 1245	Efeito 3 = 18,88 *
4 = 1235	Efeito 4 = 4 = 1235	Efeito 4 = 23,23 *
5 = 1234	Efeito 5 = 5 = 1234	Efeito 5 = -3,07
12 = 345	Efeito 12 = 12 = 345	Efeito 12 = -0,39
13 = 245	Efeito 13 = 13 = 245	Efeito 13 = 1,00
14 = 235	Efeito 14 = 14 = 235	Efeito 14 = 0,39
15 = 234	Efeito 15 = 15 = 234	Efeito 15 = 0,04
23 = 145	Efeito 23 = 23 = 145	Efeito 23 = 8,07 *
24 = 135	Efeito 24 = 24 = 135	Efeito 24 = 7,57 *
25 = 134	Efeito 25 = 25 = 13	Efeito 25 = 1,86
34 = 125	Efeito 34 = 34 = 125	Efeito 34 = 3,42
35 = 124	Efeito 35 = 35 = 124	Efeito 35 = -0,91
45 = 123	Efeito 45 = 45 = 123	Efeito 45 = 0,91
1 = 12345	Média M = M =1/2(12345)	Média M = 49,39

Obs.: os efeitos marcados com (*) são mais significativos (veja explicação a seguir).

Observando-se os valores dos efeitos e supondo-se que os efeitos de interação de três ou mais fatores sejam desprezíveis, podemos concluir que são significativos os efeitos principais dos fatores **2**, **3** e **4**, bem como as interações **23** e **24**. Portanto, todos os contrastes envolvendo os fatores **1** e **5** aparentemente podem ser considerados desprezíveis (nos valores estudados, nada podendo ser concluído a respeito de faixas de valores diferentes para as variáveis). Isto significa que estas variáveis podem ser excluídas do estudo e o resultado disso é que podemos tratar os dados como um fatorial 2^3 com repetições. Muitas vezes não é este o caso, de modo que poderíamos estar frente a uma situação em que todas as variáveis seriam significativas e a interpretação dos efeitos deveria incluir a todas. Na realidade, o que se ilustra com este estudo de caso é que outra possível utilidade dos planejamentos fatoriais é a triagem de variáveis significativas.

ATIVIDADES

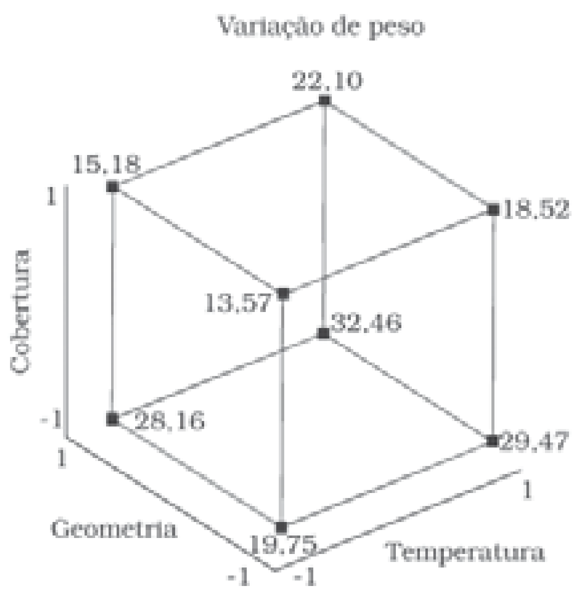
Num planejamento fatorial fracionário de 6 fatores, os efeitos principais estariam confundidos com que tipo de interação? E as interações de dois fatores?

COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

Para resolver, o aluno deverá utilizar um procedimento idêntico ao mostrado para o caso de um planejamento fatorial fracionário de 5 fatores.

CONCLUSÃO

Como conclusões desta aula, podemos destacar inicialmente que quando estamos frente a um problema experimental que envolve um número de variáveis elevado demais para que possamos aplicar um planejamento fatorial completo, uma possibilidade é a realização de um planejamento fracionário. Concluímos também que a interpretação dos resultados deste tipo de planejamento deve ser cuidadosa, pois os efeitos calculados ocorrem "misturados" entre si. Assim, para que possam ser interpretados corretamente, é necessário determinar quais efeitos ocorrem misturados, obtendo-se as expressões que representam os padrões de confundimento. Contudo, uma vez que se tome os devidos cuidados, este tipo de planejamento é uma ferramenta extremamente útil, podendo inclusive permitir que façamos uma triagem de variáveis significativas.



Média da variação de peso em função da temperatura – reprodução (Fonte: http://www.scielo.br).

RESUMO

Deparamo-nos com o problema de ter que estudar o rendimento de um processo de síntese cujas variáveis que precisam ser avaliadas são temperatura, tempo, tipo do catalisador, pH e concentração do reagente. Sabemos que se fôssemos resolver este problema através de um planejamento fatorial completo, teríamos que realizar 32 ensaios que, em duplicata, se transformariam em uma seqüência de 64 ensaios. Neste caso, a alternativa que podemos aplicar é a realização de uma chamada fração do planejamento completo, mais conhecida como planejamento fatorial fracionário, que envolve 2^{5-1} ensaios.

A elaboração deste tipo de planejamento é feita construindo-se a tabela de planejamento de forma análoga a um planejamento completo até a quarta variável. Na quinta delas, ao invés de seguirmos o procedimento usual, fazemos com que os sinais presentes nesta coluna não sejam independentes, mas que representem o produto das 4 primeiras colunas, de modo que ficamos apenas com 16 linhas, cada uma correspondendo a um ensaio. Após a realização dos ensaios em ordem aleatória, calculamos os efeitos seguindo o procedimento já conhecido. Precisamos ter cuidado com a interpretação dos efeitos, pois, como se trata de um planejamento fracionário empregado a fim de se realizar um número de ensaios inferior ao planejamento completo, algum preço forçosamente terá de ser pago em termos de informações disponíveis. Por exemplo, o efeito principal da quinta variável é obtido usando a mesma combinação de sinais das quatro primeiras colunas, o que também seria utilizado para o cálculo do efeito de interação entre as primeiras quatro variáveis: **1234 = 5.**

Usando propriedades conhecidas da multiplicação (comutação e associação), chegamos a relações que representam padrões de mistura dos efeitos, que nos permitiram verificar que os efeitos principais são misturados a efeitos de ordem 4 (muito menos significativos), o que não prejudica sua interpretação.

CONCENTRAÇÃO MOLAR

A concentração molar de $H^+(aq)$ é utilizada para estabelecer uma escala que vai de 0 a 14, e que é definida por:

$$pH = -\log[H^+]$$

Neste caso, para uma solução neutra, o valor de pH é igual a 7,0, sendo que valores abaixo de 7,0 representam concentrações de íons $H^+(aq)$ em excesso em relação aos íons OH^- e estão associados a meios ácidos. Valores de pH acima de 7,0 representam meios com excesso de íons OH^-, associados a meios básicos ou alcalinos.

PRÓXIMA AULA

Após termos estudado os métodos mais comuns de planejamento experimental, na próxima aula passaremos a uma nova etapa de nosso estudo de quimiometria, relativa à construção de modelos empíricos por meio de regressão.

REFERÊNCIAS

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: Ed. Atual, 1985.

BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I. E.; BRUNS. R. E. **Planejamento e otimização de experimentos**. Campinas Editora da Unicamp, 1995.