

DISEÑO DE EXPERIMENTOS BOX-BEHNKEN (3K) Y MATRIZ DOEHLERT

Profa. Dra. Kelly Johana Dussán Medina
kelly.medina@unesp.br



1

Diseño Box-Behnken

- Los diseños de experimentos Box-Behnken son diferentes de los otros diseños de experimentos por la composición central de dos maneras.
- En primero lugar, apenas 3 niveles para cada factor son utilizados.
- En segundo lugar, los diseños Box-Behnken no tienen puntos de vértices. Algunas veces son preferidos por los investigadores porque cuando existen restricciones físicas o económicas, al no tener puntos de vértices, todos los factores están en la región de -1 y +1.
- Los experimentos Box-Behnken son caracterizados por ser un diseño de experimentos con 3 niveles de los factores y por seguir modelos de segunda orden. Este diseño está basado en experimentos con bloques incompletos balanceados. Básicamente, fijamos una de las variables en cero y un factorial 2^2 es realizado con las otras dos variables.

2

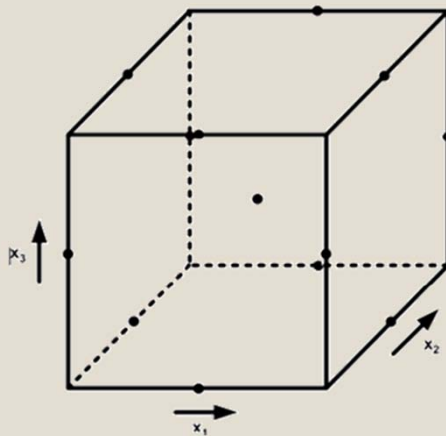
2

Cuando utilizar un experimento Box-Behnken

- En algunos experimentos de superficie de respuesta, necesitamos utilizar factores con 3 niveles (bajo, medio y alto). en este caso los experimentos Box-Behnken son una buena alternativa para los experimentos de composición central.
- Además, existen informaciones suficientes para realizar un el cálculo de la falta de ajuste (*lack of fit*).
- Una otra característica interesante en este tipo de experimento es la simetría de la disposición de los puntos en el cubo. Un experimento Box-Behnken con $k = 3$ puede ser:

3

3



| No. Factores | 3 | 4 | 5 | 6 |
|-----------------------|-------|-------|-------|-------|
| Experimento factorial | 3^3 | 3^4 | 3^5 | 3^6 |
| Repeticiones en el PC | 2 | 2 | 2 | 2 |
| Ensayos Totales | 15 | 27 | 46 | 54 |

| X_1 | X_2 | X_3 |
|-------|-------|-------|
| -1 | -1 | 0 |
| -1 | -1 | 0 |
| -1 | 1 | 0 |
| 1 | -1 | 0 |
| -1 | 1 | 0 |
| 1 | 1 | 0 |
| -1 | 0 | -1 |
| 1 | 0 | -1 |
| -1 | 0 | 1 |
| 1 | 0 | 1 |
| 0 | -1 | -1 |
| 0 | 1 | -1 |
| 0 | -1 | 1 |
| 0 | 1 | 1 |
| 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 |

| X_1 | X_2 | X_3 | X_4 |
|-------|-------|-------|-------|
| -1 | -1 | 0 | 0 |
| 1 | -1 | 0 | 0 |
| -1 | 1 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | -1 | -1 |
| 0 | 0 | 1 | -1 |
| 0 | 0 | -1 | 1 |
| 0 | 0 | 1 | 1 |
| -1 | 0 | 0 | -1 |
| 1 | 0 | 0 | -1 |
| -1 | 0 | 0 | 1 |
| 1 | 0 | 0 | 1 |
| 0 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | 1 | 0 |
| 0 | 1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | 0 |
| 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0 | -1 | 0 | -1 |
| 0 | 1 | 0 | -1 |
| 0 | -1 | 0 | 1 |
| 0 | 1 | 0 | 1 |
| 0 | 0 | 0 | 0 |

4

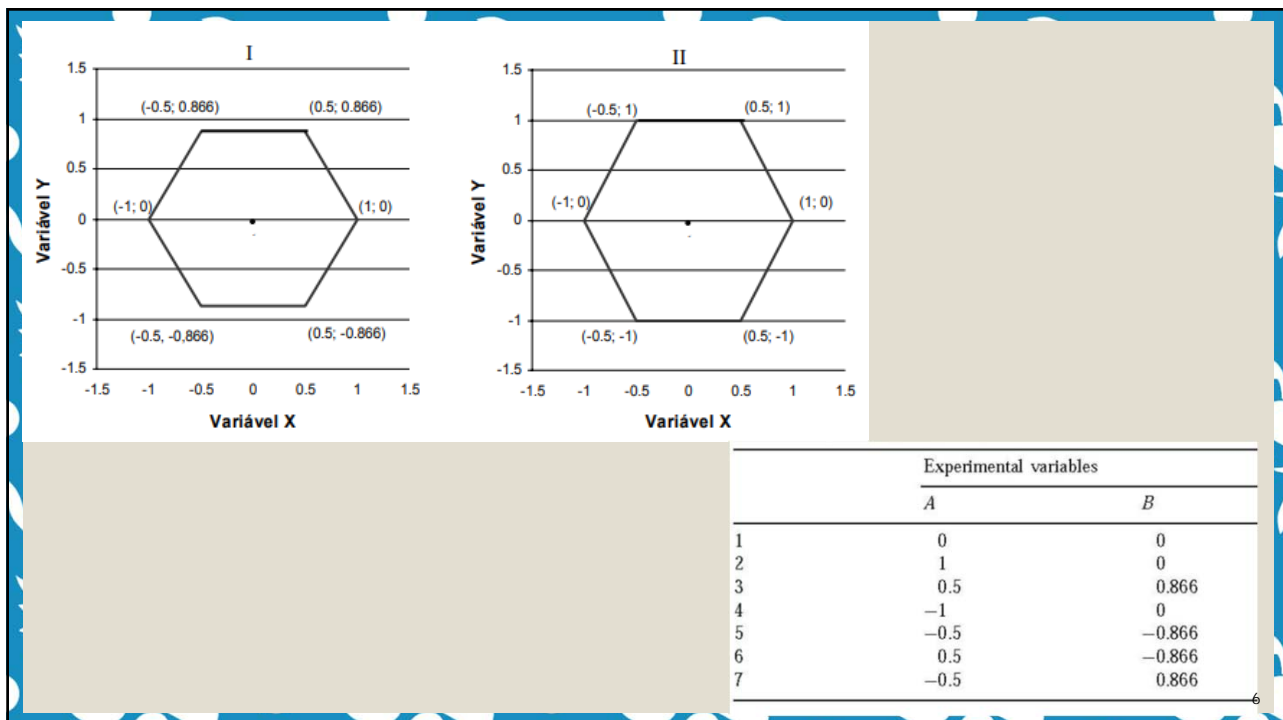
4

Matriz Doehlert

- El experimento utilizando la matriz Doehlert es un sistema de optimización de experimentos de segunda orden que tiene sus puntos distribuidos uniformemente por todo el espacio experimental (Diseño Hexagonal).
- El número de experimentos necesarios (N) corresponde a $N = K^2 + K + C_0$, donde K es el número de variables y C_0 es el número de puntos centrales;
- Las variables tienen cantidades de niveles diferentes.
- En el caso de dos variables se forma un hexágono que, siendo originalmente una figura regular, puede ser levemente deformado con el objetivo de utilizar mejores valores en los experimentos.

5

5



6

- Una importante propiedad de la Matriz Doehlert es el valor codificado que los niveles son testados.
- Con tres variables. por ex.. el número de niveles de una variable es 7. lo que permite avaliar las variables consideradas más importantes. o sea. que presentan efectos más pronunciados en un número mayor de puntos del espacio estudiado.
- Además. este tipo de diseño necesita de pocos experimentos en relación al diseño de experimento compuesto central siendo. por tanto. más eficiente.

7

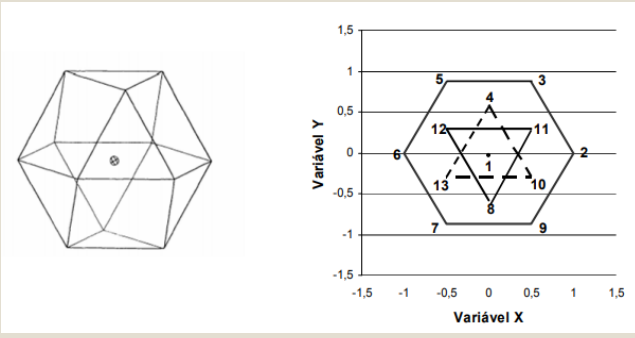
7

- Ese menor número de experimentos para llegar a la región óptima viene de que el dominio es fácilmente explorado por el ajuste de pocos experimentos. ya que el próximo hexágono utiliza puntos experimentales ya explorados por el hexágono anterior.
- La Matriz Doehlert describe un dominio circular para dos variables. esférico para tres y hiperesférico para más de tres variables. lo que acentúa la uniformidad en el espacio que está siendo considerado. A pesar de las matrices no ser ortogonales ni rotacionales. ellas no presentan divergencias significativas que comprometan la calidad necesaria para su uso efectivo.

8

8

- Con tres variables se forma un poliedro con caras cuadradas y triangulares. que puede presentarse apoyado en la cara triangular o en la cara cuadrada generando diferentes proyecciones.



| | Experimental variables | | |
|----|------------------------|--------|--------|
| | A | B | C |
| 1 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 1 | 0 | 0 |
| 3 | 0,5 | 0,866 | 0 |
| 4 | 0,5 | 0,289 | 0,817 |
| 5 | -1 | 0 | 0 |
| 6 | -0,5 | -0,866 | 0 |
| 7 | -0,5 | -0,289 | -0,817 |
| 8 | 0,5 | -0,866 | 0 |
| 9 | 0,5 | -0,289 | -0,817 |
| 10 | -0,5 | 0,866 | 0 |
| 11 | 0 | 0,577 | -0,817 |
| 12 | -0,5 | 0,289 | 0,817 |
| 13 | 0 | -0,577 | 0,817 |

| C_C | -0,817 | 0 | +0,817 | C_A | -1 | -0,5 | 0 | +0,5 | +1 |
|-------|--------|----|--------|-------|----|------|-----|------|-----|
| X_C | 10 | 30 | 50 | X_A | 60 | 120 | 180 | 240 | 300 |

| C_B | -0,866 | -0,577 | -0,289 | 0 | +0,289 | +0,577 | +0,866 |
|-------|--------|--------|--------|---|--------|--------|--------|
| X_B | 2 | 4 | 6 | 8 | 10 | 12 | 14 |

| | Variáveis Experimentais – Matriz Doehlert | | | | | | | | |
|----|---|----------|-------------|----------|----------|-------------|----------|----------|----------|
| | 2 Variáveis | | 3 Variáveis | | | 4 Variáveis | | | |
| | x_{1a} | x_{2a} | x_{1b} | x_{2b} | x_{3b} | x_{1c} | x_{2c} | x_{3c} | x_{4c} |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 0,5 | 0,866 | 0,5 | 0,866 | 0 | 0,5 | 0,866 | 0 | 0 |
| 4 | -1 | 0 | 0,5 | 0,289 | 0,817 | 0,5 | 0,289 | 0,817 | 0 |
| 5 | -0,5 | -0,866 | -1 | 0 | 0 | 0,5 | 0,289 | 0,204 | 0,791 |
| 6 | 0,5 | -0,866 | -0,5 | -0,866 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 |
| 7 | -0,5 | 0,866 | -0,5 | -0,289 | -0,817 | -0,5 | -0,866 | 0 | 0 |
| 8 | | | 0,5 | -0,866 | 0 | -0,5 | -0,289 | -0,817 | 0 |
| 9 | | | 0,5 | -0,289 | -0,817 | -0,5 | -0,289 | -0,204 | -0,791 |
| 10 | | | -0,5 | 0,866 | 0 | 0,5 | -0,866 | 0 | 0 |
| 11 | | | 0 | 0,577 | -0,817 | 0,5 | -0,289 | -0,817 | 0 |
| 12 | | | -0,5 | 0,289 | 0,817 | 0,5 | -0,289 | -0,204 | -0,791 |
| 13 | | | 0 | -0,577 | 0,817 | -0,5 | 0,866 | 0 | 0 |
| 14 | | | | | | 0 | 0,577 | -0,817 | 0 |
| 15 | | | | | | 0 | 0,577 | -0,204 | -0,791 |
| 16 | | | | | | -0,5 | 0,289 | 0,817 | 0 |
| 17 | | | | | | 0 | -0,577 | 0,817 | 0 |
| 18 | | | | | | 0 | 0 | 0,613 | -0,791 |
| 19 | | | | | | -0,5 | 0,289 | 0,204 | 0,791 |
| 20 | | | | | | 0 | -0,577 | 0,204 | 0,791 |
| 21 | | | | | | 0 | 0 | -0,613 | 0,791 |

Diseños de mezclas

11

Como Modelar Mezclas

- En la mayoría de los diseños de experimentos los niveles de los factores son independientes.
- Las propiedades de una mezcla son determinados por las proporciones de sus ingredientes. y no por valores absolutos.

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad i = 1, 2, \dots, p$$

- La suma de las proporciones de los diversos componentes de una mezcla es siempre 100%.

$$x_1 + x_2 + \dots + x_p = 1$$

$$\sum_{i=1}^p x_i = 100\% = 1$$

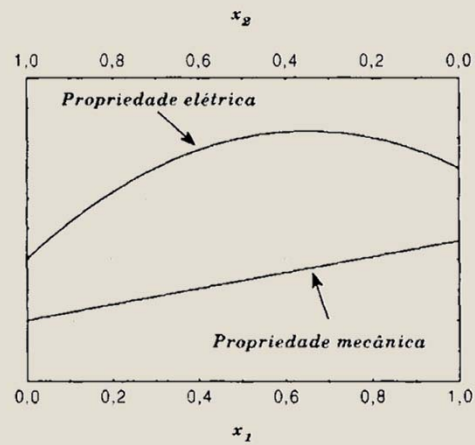
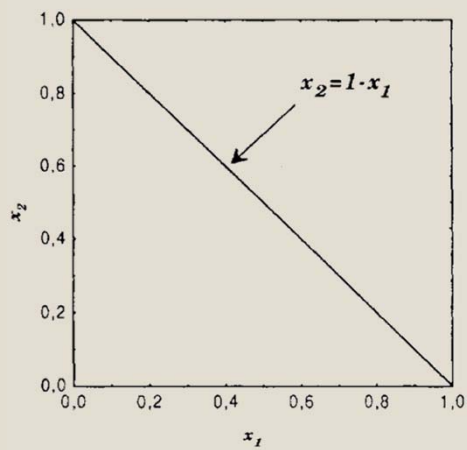
12

12

- Para especificar la composición de la mezcla solo necesitamos fijar las proporciones de $n - 1$ componentes.

$$x_1 + x_2 = 1$$

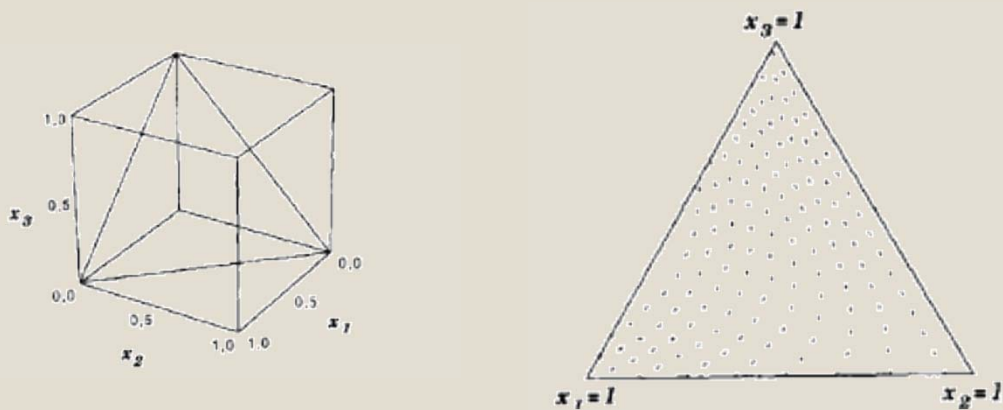
El espacio experimental queda restringido a los puntos de la reta. Siendo unidimensional



13

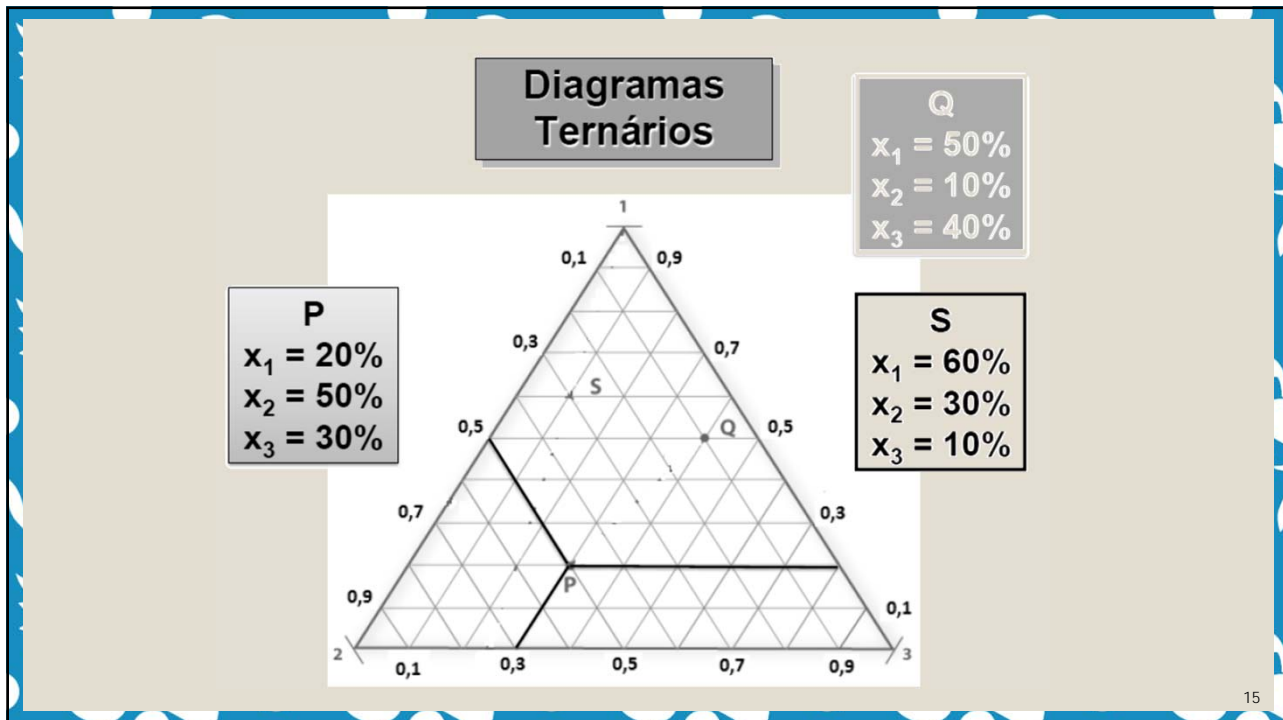
13

- Diagramas Ternarios



14

14



15

El modelo matemático escogido define cual es el diseño más adecuado.
 Los modelos más utilizados son:

- Linear.
- Cuadrático.
- Cúbico completo.
- Cúbico especial.

Existen dos clases principales del diseño de mezcla:

- Diseño simplex-lattice.
- Diseño simplex-centroid.

16

16

Mezcla de los componentes

- El modelo más sencillo para una mezcla de dos componentes es el modelo lineal:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

$$x_1 + x_2 = 1$$

- Los factores x_1 y x_2 no son más independientes y, por tanto, la matriz X^tX es singular.

$$b = (X^tX)^{-1}X^ty$$

17

17

- La restricción de la mezcla puede ser utilizada para producir modelos más fáciles de interpretar.

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

$$x_1 + x_2 = 1$$

$$\hat{y} = b_0(x_1 + x_2) + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

$$\hat{y} = (b_0 + b_1) x_1 + (b_0 + b_2) x_2 = b_1^* x_1 + b_2^* x_2$$

18

18

- El modelo lineal de mezcla para dos componentes tiene apenas dos coeficientes así son necesarios apenas dos experimentos diferentes.
- Los coeficientes del modelo son las propias respuestas para los respectivos componentes puros.
- Es posible aumentar la precisión del modelo haciendo repeticiones de los ensayos.

$$\hat{y} = b_1^* x_1 + b_2^* x_2$$

| X_1 | X_2 |
|-------|-------|
| 0 | 1 |
| 1 | 0 |

19

19

- La ampliación más fácil del modelo lineal es el modelo cuadrático:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12} x_1 x_2$$

$$x_1 + x_2 = 1 \quad x_1^2 = x_1(1 - x_2) \quad x_2^2 = x_2(1 - x_1)$$

$$\hat{y} = b_0(x_1 + x_2) + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{11}x_1(1 - x_2) + b_{22}x_2(1 - x_1) + b_{12} x_1 x_2$$

$$\hat{y} = (b_0 + b_1 + b_{11}) x_1 + (b_0 + b_2 + b_{22}) x_2 + (b_{12} - b_{11} - b_{22}) x_1 x_2$$

$$\hat{y} = b_1^* x_1 + b_2^* x_2 + b_{12}^* x_1 x_2$$

20

20

- El modelo cuadrático de mezcla para dos componentes tiene apenas tres coeficientes.
- El coeficiente de la interacción binaria es obtenido por la sustitución de los valores en el modelo cuadrático.

$$\hat{y} = b_1^* x_1 + b_2^* x_2 + b_{12}^* x_1 x_2$$

$$b_1^* = y_1 \quad e \quad b_2^* = y_2$$

$$y_{12} = b_1^* \left(\frac{1}{2}\right) + b_2^* \left(\frac{1}{2}\right) + b_{12}^* \left(\frac{1}{4}\right)$$

$$b_{12}^* = 4y_{12} - 2(y_1 + y_2)$$

| X_1 | X_2 |
|-------|-------|
| 0 | 1 |
| 1 | 0 |
| 1/2 | 1/2 |

$$\begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 1/4 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} b_1^* \\ b_2^* \\ b_{12}^* \end{Bmatrix}$$

Forma Matricial

21

21

$$\hat{y} = Xb^*$$

Para el caso de $x_1 = x_2 = 1/2$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 1/4 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} b_1^* \\ b_2^* \\ b_{12}^* \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} b_1^* \\ b_2^* \\ b_{12}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -2 & -2 & 4 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_{12} \end{bmatrix}$$

$$b^* = X^{-1} y$$

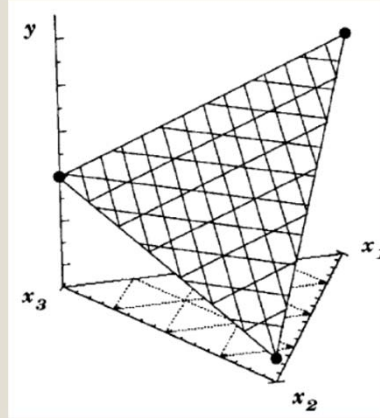
22

22

Mezcla de 3 Componentes

Modelo lineal:

$$\hat{y} = b_1^* x_1 + b_2^* x_2 + b_3^* x_3$$



23

23

◦ Modelo cuadrático:

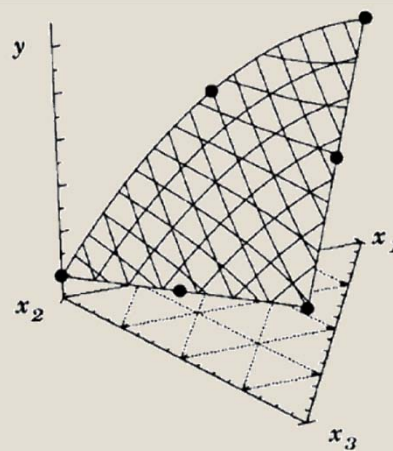
$$\hat{y} = b_1^* x_1 + b_2^* x_2 + b_3^* x_3 + b_{12}^* x_1 x_2 + b_{13}^* x_1 x_3 + b_{23}^* x_2 x_3$$

$$b_{12}^* = 4y_{12} - 2(y_1 + y_2)$$

$$b_{13}^* = 4y_{13} - 2(y_1 + y_3)$$

$$b_{23}^* = 4y_{23} - 2(y_2 + y_3)$$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_{12} \\ y_{13} \\ y_{23} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} b_1^* \\ b_2^* \\ b_3^* \\ b_{12}^* \\ b_{13}^* \\ b_{23}^* \end{pmatrix}$$



24

24

- Modelo cúbico completo (simplex lattice):

$$\hat{y} = b_1^*x_1 + b_2^*x_2 + b_3^*x_3 + b_{12}^*x_1x_2 + b_{13}^*x_1x_3 + b_{23}^*x_2x_3 + d_{12}^*x_1x_2(x_1 - x_2) + d_{13}^*x_1x_3(x_1 - x_3) + d_{23}^*x_2x_3(x_2 - x_3) + b_{123}^*x_1x_2x_3$$

- Modelo cúbico especial (simplex centroide):

$$\hat{y} = b_1^*x_1 + b_2^*x_2 + b_3^*x_3 + b_{12}^*x_1x_2 + b_{13}^*x_1x_3 + b_{23}^*x_2x_3 + b_{123}^*x_1x_2x_3$$

$$b_{123}^* = 27y_{123} - 12(y_{12} + y_{13} + y_{23}) + 3(y_1 + y_2 + y_3)$$

25

25

- Modelos lineares para p componentes

- Linear $\hat{y} = \sum_{i=1}^p \beta_i x_i$  Efeito Principal

- Quadrático $\hat{y} = \sum_{i=1}^p \beta_i x_i + \sum_{i<j}^p \beta_{ij} x_i x_j$  Efeito de Interação Binária

- Cúbico completo $\hat{y} = \sum_{i=1}^p \beta_i x_i + \sum_{i<j}^p \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j}^p \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i<j<k}^p \beta_{ijk} x_i x_j x_k$

 Efeito de Interação Ternária

- Cúbico especial $\hat{y} = \sum_{i=1}^p \beta_i x_i + \sum_{i<j}^p \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}^p \beta_{ijk} x_i x_j x_k$

26

26

Simplex-Lattice

- $\{p, m\}$ Simplex-Lattice: p componentes. con $m + 1$ puntos igualmente espaciados (m es el grado polinomial). Todas las combinaciones posibles de los puntos son utilizadas.

$$x_i = 0, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, 1 \quad i = 1, 2, \dots, p$$

$$\{2, 1\} \rightarrow x_i = 0, 1 \quad i = 1, 2$$

| x_1 | x_2 |
|-------|-------|
| 0 | 1 |
| 1 | 0 |

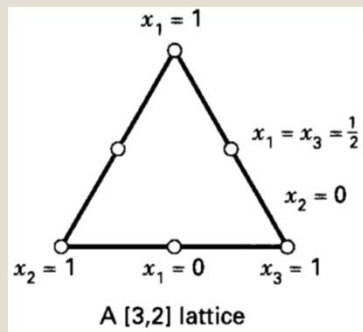
$$\{2, 2\} \rightarrow x_i = 0, \frac{1}{2}, 1 \quad i = 1, 2$$

| x_1 | x_2 |
|---------------|---------------|
| 0 | 1 |
| $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |
| 1 | 0 |

27

27

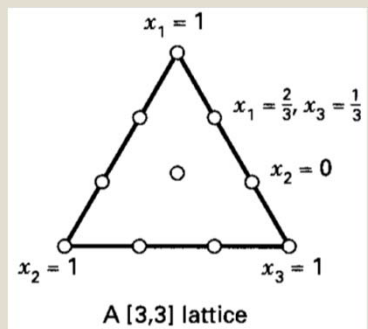
| x_1 | x_2 | x_3 |
|---------------|---------------|---------------|
| 1 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | 0 |
| 0 | 0 | 1 |
| $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | 0 |
| $\frac{1}{2}$ | 0 | $\frac{1}{2}$ |
| 0 | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |



$$\{3, 2\} \rightarrow x_i = 0, \frac{1}{2}, 1 \quad i = 1, 2, 3$$

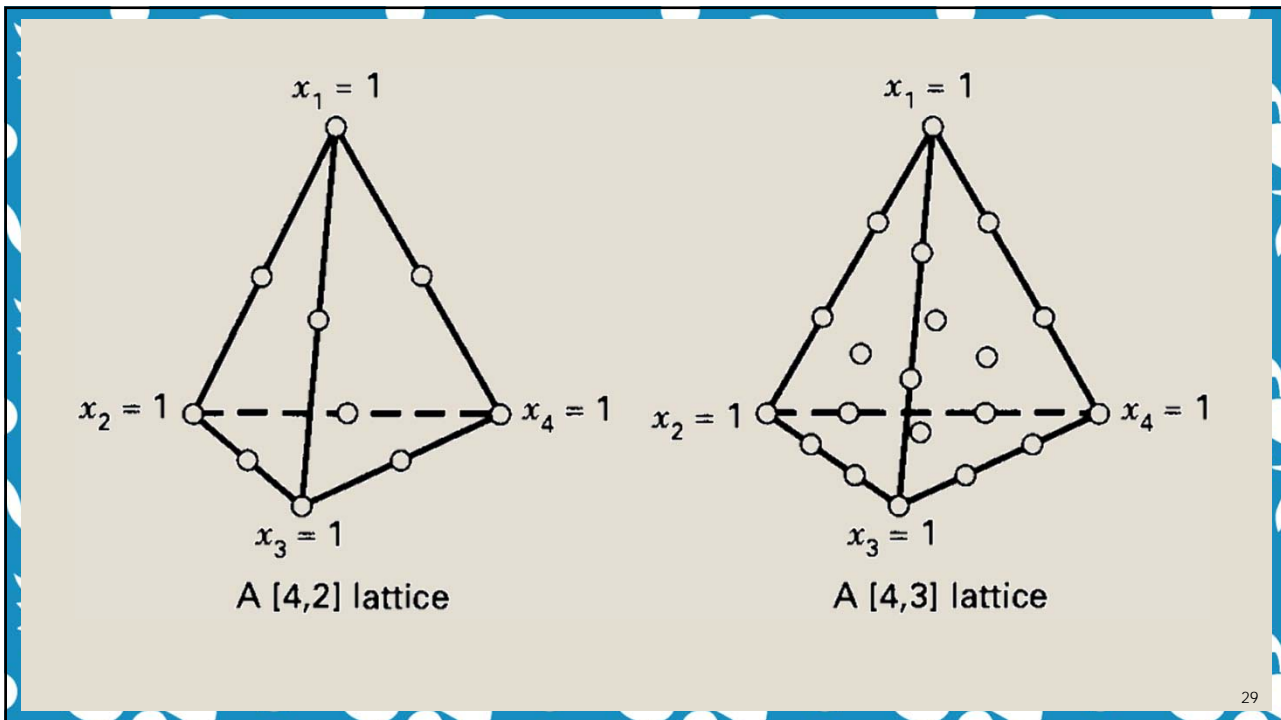
$$\{3, 3\} \rightarrow x_i = 0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1$$

| x_1 | x_2 | x_3 |
|---------------|---------------|---------------|
| 1 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | 0 |
| 0 | 0 | 1 |
| $\frac{1}{3}$ | $\frac{2}{3}$ | 0 |
| $\frac{1}{3}$ | 0 | $\frac{2}{3}$ |
| 0 | $\frac{1}{3}$ | $\frac{2}{3}$ |
| $\frac{2}{3}$ | $\frac{1}{3}$ | 0 |
| $\frac{2}{3}$ | 0 | $\frac{1}{3}$ |
| 0 | $\frac{2}{3}$ | $\frac{1}{3}$ |
| $\frac{1}{3}$ | $\frac{1}{3}$ | $\frac{1}{3}$ |



28

28



29

- La cantidad de ensayos en un diseño simplex-lattice $\{p, m\}$ es:

$$N = \frac{(p + m - 1)!}{m! (p - 1)!}$$

- El diseño simplex-lattice permite la obtención de modelos cúbicos completos.

30

30

Simplex-Centroid

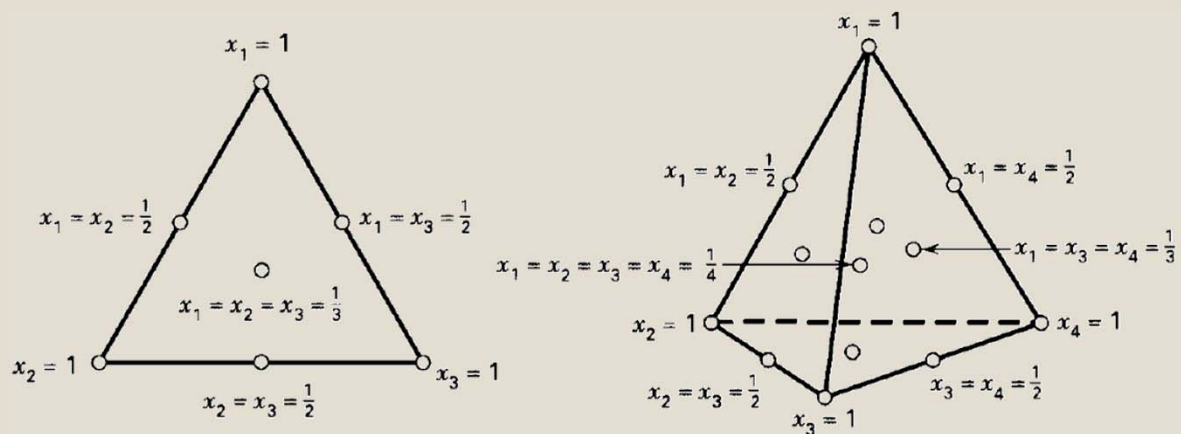
- Es una alternativa al diseño simplex-lattice que permite la construcción de modelos cúbicos especiales.
- Un diseño simplex-centroid para p componentes tiene $2^p - 1$ ensayos.

| Componentes | Formulações | |
|-------------|-----------------|------------------|
| | Simplex-lattice | Simplex-centroid |
| 3 | 10 | 7 |
| 4 | 20 | 15 |

31

31

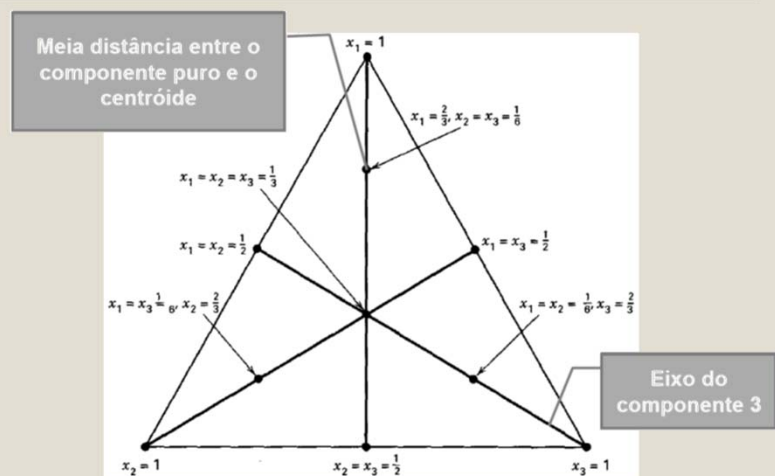
- El diseño es compuesto por:



32

32

- Para diseños del tipo simplex a mayoría de los puntos experimentales están en el contorno de la región experimental y envuelven apenas $p-1$ componentes.
- Es recomendable la utilización de puntos internos (axiales) a más del centroide.



33

33

- La construcción de modelos de mezclas es un caso particular de ajuste por mínimos cuadrados.
- La significancia estadística de estos modelos debe ser avaliada con un análisis de variancia.
- Un modelo con más parámetros explicará una suma cuadrática mayor.
- Al adicionar un término un grado de libertad del residuo es transferido para la regresión.
- El teste F indica se la ampliación del modelo es necesaria.

34

34

Evaluación de los modelos

- Podemos usar o teste F. para comparar la reducción en los residuos causada por la ampliación del modelo con la media cuadrática residual del modelo más extenso.
- Si el teste no es significativo. es porque no valió la pena introducir más parámetros.
- Considerando el caso general de dos modelos cualquiera. I e II. donde II tiene "d" parámetros a más do que I.
- El modelo I deja una suma cuadrática residual $SQ_{r.I}$. que es reducida a $SQ_{r.II}$. cuando los "d" términos adicionales son introducidos. La relación de interés será:

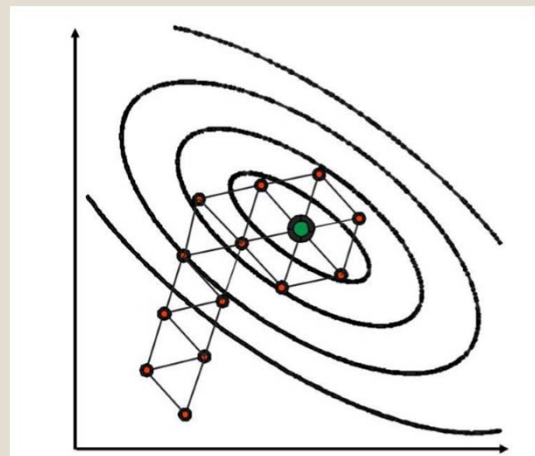
$$F = \frac{(SQ_{r.I} - SQ_{r.II})/d}{MQ_{r.II}}$$

35

35

Optimización Simplex

- El primero simplex es determinado haciendo un número de experimentos igual al número de factores más un.
- El nuevo simplex es formado rechazando el vértice correspondiente a la peor respuesta y substituyendo por la reflexión en la hiperface definida por los vértices restantes.
- Cuando el vértice reflectado tenga la peor de las respuestas del nuevo simplex. debemos rechazar el segundo peor vértice.
- Si el mismo vértice de mantuvo en p+1 simplex. antes de construir el próximo simplex debemos determinar nuevamente la respuesta correspondiente a este vértice.



36

36

Ejemplo

Para estudiar los efectos del solvente sobre una reacción, los investigadores utilizaron 16 mezclas ternarias de agua, etanol y acetona. Las mezclas fueron preparadas en las composiciones especificadas por el diseño hexagonal. Como respuesta, se midió la concentración a través de la absorbancia registrada a 623 nm. Todos los ensayos fueron realizados duplicados.

| Ensayos | X ₁ | X ₂ | X ₃ | Absorbancia | |
|---------|----------------|----------------|----------------|-------------|-------|
| 1 | 0.667 | 0.000 | 0.333 | 0.411 | 0.412 |
| 2 | 0.333 | 0.667 | 0.000 | 0.612 | 0.607 |
| 3 | 0.000 | 0.333 | 0.667 | 0.614 | 0.605 |
| 4 | 0.667 | 0.333 | 0.000 | 0.451 | 0.45 |
| 5 | 0.000 | 0.667 | 0.333 | 0.693 | 0.688 |
| 6 | 0.333 | 0.000 | 0.667 | 0.456 | 0.464 |
| 7 | 0.555 | 0.222 | 0.222 | 0.461 | 0.455 |
| 8 | 0.222 | 0.555 | 0.222 | 0.608 | 0.605 |
| 9 | 0.222 | 0.222 | 0.555 | 0.521 | 0.531 |
| 10 | 0.111 | 0.444 | 0.444 | 0.607 | 0.615 |
| 11 | 0.444 | 0.111 | 0.444 | 0.468 | 0.457 |
| 12 | 0.444 | 0.444 | 0.111 | 0.52 | 0.524 |
| 13 | 0.333 | 0.333 | 0.333 | 0.533 | 0.534 |
| 14 | 0.778 | 0.111 | 0.111 | 0.412 | 0.403 |
| 15 | 0.111 | 0.111 | 0.778 | 0.528 | 0.519 |
| 16 | 0.111 | 0.778 | 0.111 | 0.682 | 0.699 |

37

37

Ajustando los datos a los modelos lineal, cuadrático y cúbico especial. Llegamos:

$$\hat{y} = 0.322x_1 + 0.754x_2 + 0.531x_3$$

$$\hat{y} = 0.357x_1 + 0.791x_2 + 0.518x_3 - 0.205x_1x_2 - 0.012x_1x_3 - 0.017x_2x_3$$

$$\hat{y} = 0.355x_1 + 0.789x_2 + 0.516x_3 - 0.194x_1x_2 - 0.001x_1x_3 - 0.006x_2x_3 - 0.051x_1x_2x_3$$

38

38

| Modelo Linear | | | | | | | | |
|-------------------|---------|-----|---------|-------------|------------|---------------|----------|---------------|
| Fonte de variação | SQ | G.L | MQ | F calculado | F tabelado | Teste | p-value | Teste |
| Regressão | 0.24905 | 2 | 0.12452 | 1046.77 | 3.328 | Significativo | 9.23E-28 | Significativo |
| Resíduos | 0.00345 | 29 | 0.00012 | | | | | |
| Falta de Ajuste | 0.00295 | 13 | 0.00023 | 7.30 | 2.397 | Significativo | 1.76E-04 | Significativo |
| Erro Puro | 0.00050 | 16 | 0.00003 | | | | | |
| Total | 0.25286 | 31 | | | | | | |

| | |
|--------------------|--------|
| R ² | 98.49% |
| R ² adj | 98.39% |
| %max variação | 99.80% |

$$F = \frac{(0.00345 - 0.00103)/1}{0.00004} = 60.5 \quad F_{1.26} = 7.72 \text{ (99\% de confiança)} \quad \text{Significativo}$$

| Modelo Quadrático | | | | | | | | |
|-------------------|---------|-----|---------|-------------|------------|-------------------|----------|-------------------|
| Fonte de variação | SQ | G.L | MQ | F calculado | F tabelado | Teste | p-value | Teste |
| Regressão | 0.25240 | 5 | 0.05048 | 1279.72 | 2.587 | Significativo | 3.14E-30 | Significativo |
| Resíduos | 0.00103 | 26 | 0.00004 | | | | | |
| Falta de Ajuste | 0.00053 | 10 | 0.00005 | 1.70 | 2.494 | Não Significativo | 1.66E-01 | Não significativo |
| Erro Puro | 0.00050 | 16 | 0.00003 | | | | | |
| Total | 0.25286 | 31 | | | | | | |

| | |
|--------------------|--------|
| R ² | 99.82% |
| R ² adj | 99.78% |
| %max variação | 99.80% |

$$F = \frac{(0.001026 - 0.001023)/1}{0.00004} = 0.075 \quad F_{1.25} = 7.77 \text{ (99\% de confiança)} \quad \text{Não Significativo}$$

| Modelo Cúbico | | | | | | | | |
|-------------------|---------|-----|---------|-------------|------------|-------------------|----------|-------------------|
| Fonte de variação | SQ | G.L | MQ | F calculado | F tabelado | Teste | p-value | Teste |
| Regressão | 0.25240 | 6 | 0.04207 | 1028.48 | 2.490 | Significativo | 1.15E-28 | Significativo |
| Resíduos | 0.00102 | 25 | 0.00004 | | | | | |
| Falta de Ajuste | 0.00053 | 9 | 0.00006 | 1.88 | 2.538 | Não Significativo | 1.30E-01 | Não significativo |
| Erro Puro | 0.00050 | 16 | 0.00003 | | | | | |
| Total | 0.25286 | 31 | | | | | | |

| | |
|--------------------|--------|
| R ² | 99.82% |
| R ² adj | 99.78% |
| %max variação | 99.80% |

39