

MATERIAL SUPLEMENTAR

Aplicação de programa computacional livre em planejamento de experimentos: um tutorial

Fabíola Manhas Verbi Pereira^a e Edénir Rodrigues Pereira-Filho^{b,*}

^aInstituto de Química, Universidade Estadual Paulista, 14800-060 Araraquara – SP, Brasil

^bDepartamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, 13565-905 São Carlos – SP, Brasil

*e-mail: erpf@ufscar.br

Rotina computacional fabi_efeito

```
function [efeito, porc]=fabi_efeito(X,y,erro_efeito,t);

%Funcao para calcular efeito de planejamento fatorial
%[efeito, porc, erro_efeito]=fabi_efeito(X,y,erro_exp,gl,k,t);
%X=matriz contendo os efeitos que serao calculado
%y=vetor contendo a resposta
%erro_exp=erro experimental. Sera 0 se nao forem feitas replicas
%gl=numero de graus de liberdade utilizados para calcular o erro_exp.
%k=numero de variaveis

%%
[n,m]=size(X);
[o,p]=size(y);

%%
efeito=((inv(X'*X))*(X'*y))^2;
porc=(efeito.^2./(ones(m,1)*sum((efeito).^2)))*100;

%%
figure
bar(porc,'m')
title('Porcentagem Efeitos')
xlabel('Efeitos')
ylabel('%')
grid

%%
A=zeros(m,3);
for i=2:m
    A(i,1)=(i-1)/m;
end
for i=1:m
```

```

    A(i,2)=(i)/m;
end
for i=1:m
    A(i,3)=(A(i,1)+A(i,2))/2;
end
B = norminv(A(:,3));
[C, D]=sort(efeito);

%%
figure
for i=1:m
    plot(C(i),B(i),'sr');
    hold on
    text(C(i),B(i),num2str(D(i)));
end
title('Grafico de probabilidade')
xlabel('Efeitos')
ylabel('z')
grid
linex=[0 0];
liney=[min(B) max(B)];
line(linex,liney,'LineWidth',2, 'Color','b');
E = erro_efeito*t;
linex2=[E E];
liney2=[min(B) max(B)];
line(linex2,liney2,'LineWidth',2, 'Color','r');
linex3=[-E -E];
liney3=[min(B) max(B)];
line(linex3,liney3,'LineWidth',2, 'Color','r');

```

Rotina computacional regression2

```
function [Mod_par,Coef,Pred] = regression2(X,Y,SSPE,DF);

% [Mod_par,Coef,Pred] = regression2(X,Y,SSPE,DF);
% Essa rotina tem como funcao calcular modelos de regressao empregando a
% seguinte equacao:
% Coeficientes (b) = inv(X'X)*X'Y
% Inputs:
% X = matriz com os coeficientes que serao calculados
% Y = resposta que sera modelada (deve ser um vetor)
% SSPE = Soma quadratica do erro puro (Obtida dos experimentos em replicata)
% DF = Grau de liberdade da SSPE
% Outputs:
% Mod_par = matriz (7,4) contendo a tabela Anova (Analysis of Variance)
% SSReg | DF | MSReg | Ftest1
% SSres | DF | MSres
% SSTot | DF | MSTot
% SSPE | DF | MSPE | Ftest2
% SSLoF | DF | MSLoF
% R^2 | R
% R^2max | Rmax
% Coef = coeficientes calculados, coeficientes - intervalo de confianca (IC),
% coeficientes + intervalo de confianca e intervalo de confianca.
% Pred = y previsto, y previsto para coeficiente - IC, y previsto para
% coeficiente + IC.
% A funcao ira perguntar sobre qual variância sera utilizada para o calculo
% do IC.
% Duas opções sao possiveis:
% MQres (Mod_par(2,3)): se o modelo esta bem ajustado ou
% MQLoF (Mod_par(5,3)): se o modelo apresenta falta de ajuste
% Depois o valor de t correspondente devera ser digitado:
% t: pode ser usada a funcao invt do Excel. O intervalo de confianca
% dependera do usuario. O padrao é 95%.

%%
[m,n]=size(X);
clf;

%%
% Calculo dos coeficientes
Coef=(inv(X*X))*(X*Y);
```

```

% Calculo da diagonal principal da inv(X'X)
Var_calc=diag(inv(X'*X));

% Calculo dos valore previstos
Pred = X*Coef;

% Calculo dos residuos
errors = Y-Pred;

%%
% Sum of Squares - Part 1
% Preparacao da Anova

Mod_par(1,1)= sum((Pred-(ones(m,1)*(mean(Y))))).^2); % SSReg
Mod_par(2,1)= sum((errors).^2); % SSres
Mod_par(3,1)= Mod_par(1,1)+Mod_par(2,1); % SSTot
Mod_par(4,1)=SSPE; %SSPE
Mod_par(5,1)=Mod_par(2,1)-SSPE; %SSLof
Mod_par(6,1)= Mod_par(1,1)/Mod_par(3,1); %R^2
Mod_par(7,1)= (Mod_par(3,1)-SSPE)/Mod_par(3,1); %R^2 max
Mod_par(6,2)= Mod_par(6,1)^0.5; %R
Mod_par(7,2)= Mod_par(7,1)^0.5; %R max

% Sum of Squares - Part 2 (graus de liberdade)

Mod_par(1,2)=n-1; %D.F. for SSReg
Mod_par(2,2)=m-n; %D.F. for SSres
Mod_par(3,2)=m-1; %D.F. for SSTot
Mod_par(4,2)=DF; %D.F. for SSPE
Mod_par(5,2)=(m-n)-DF; %D.F. for SSLof

% Mean of Squares

Mod_par(1,3)= Mod_par(1,1)/(n-1); % MSReg
Mod_par(2,3)= Mod_par(2,1)/(m-n); % MSres
Mod_par(3,3)= Mod_par(3,1)/(m-1); % MSTot
Mod_par(4,3)= SSPE/DF; % MSPE
Mod_par(5,3)= Mod_par(5,1)/((m-n)-DF); %MSLof

% F tests

Mod_par(1,4)= Mod_par(1,3)/Mod_par(2,3); % Ftest1
Mod_par(4,4)= Mod_par(5,3)/Mod_par(4,3); % Ftest2

```

```

Mod_par

%%
clf
figure(1) %Mean of Squares (Médias Quadráticas)
subplot(2,2,1)
bar (Mod_par(1,3),'g');
teste1=(Mod_par(1,3))*0.5;
A = num2str(Mod_par(1,3));
text(1,teste1,A);
title('MQ da Regressao - MSReg')
grid
subplot(2,2,2)
bar (Mod_par(2,3),'y');
teste2=(Mod_par(2,3))*0.8;
teste3=(Mod_par(2,3))*0.4;
B = num2str(Mod_par(2,3));
text(1,teste2,B);
E=num2str(tinv(0.975,(Mod_par(2,2)-1)));
text(1,teste3,E);
title('MQ dos residuos - MSres e t')
grid
subplot(2,2,3)
bar (Mod_par(4,3),'r');
teste4=(Mod_par(4,3))*0.5;
C = num2str(Mod_par(4,3));
text(1,teste4,C);
title('MQ do Erro Puro - MSPE')
grid
subplot(2,2,4)
bar (Mod_par(5,3),'m');
teste5=(Mod_par(5,3))*0.8;
teste6=(Mod_par(5,3))*0.4;
D = num2str(Mod_par(5,3));
text(1,teste5,D);
F=num2str(tinv(0.975,(Mod_par(5,2)-1)));
text(1,teste6,F);
title('MQ da Falta de Ajuste - MSLoF e t')
grid

%%
figure(2) %F tests (testes F)
clf

```

```

subplot (1,3,1)
bar (Mod_par(1,4),'b');
title ('Teste F1 (MSReg/MSres)')
grid
subplot (1,3,2)
bar (finv(0.95,Mod_par(1,2),Mod_par(2,2)),'b');
title ('F tabelado')
grid
subplot (1,3,3)
bar(Mod_par(1,4)/(finv(0.95,Mod_par(1,2),Mod_par(2,2))),'b');
title ('Razao Fcalculado/Ftabelado')
linex=[0 2];
liney=[10 10];
line(linex,liney,'LineWidth',2, 'Color','r');
grid

%%%
figure(3) %F tests (Testes F)
subplot (1,3,1)
bar (Mod_par(4,4),'r');
title('Teste F2 (MSLoF/MSPE)')
grid
subplot (1,3,2)
bar (finv(0.95,Mod_par(5,2),Mod_par(4,2)),'r');
title ('F tabelado')
grid
subplot (1,3,3)
bar(Mod_par(4,4)/(finv(0.95,Mod_par(5,2),Mod_par(4,2))),'r');
title ('Razao Fcalculado/Ftabelado')
linex=[0 2];
liney=[1 1];
line(linex,liney,'LineWidth',2, 'Color','r');
grid

%%%
figure(4) % Coeficientes de correlacao (R2 e R2 maximo)
subplot(1,2,1)
bar(Mod_par(6,1),'w')
title('Variacao explicada R^2')
linex=[0 2];
liney=[1 1];
line(linex,liney,'LineWidth',2, 'Color','r');
grid
subplot(1,2,2)

```

```

bar(Mod_par(7,1),'w')
title('Maxima variacao explicavel R^2max')
linex=[0 2];
liney=[1 1];
line(linex,liney,'LineWidth',2, 'Color','r');
grid

%%
Variance=input('Qual variancia voce gostaria de utilizar: MSr, Mod_par(2,3) or MSLoF,
Mod_par(5,3)?')
t=input('Digite o valor de t correspondente')

%%
Coef_e=((Var_calc.*Variance).^0.5)*t;

Coef_L1=Coef-Coef_e;
Coef_L2=Coef+Coef_e;

Pred_L1 = X*Coef_L1;
Pred_L2 = X*Coef_L2;

Coef(:,1)=Coef;
Coef(:,2)=Coef_L1;
Coef(:,3)=Coef_L2;
Coef(:,4)=Coef_e;

%%
Pred(:,1)=Pred;
Pred(:,2)=Pred_L1;
Pred(:,3)=Pred_L2;

%%
figure(5) % Predicted values
clf
plot(Y,Pred(:,1),'ob')
hold on
plot(Y,Pred_L1,'+b')
plot(Y,Pred_L2,'+r')
title('Experimental x Previsto')
xlabel('Experimental')
ylabel('Previsto')
linex=[min(Y) max(Y)];
liney=linex;
line(linex, liney,'LineWidth',2, 'Color','r');

```



```

legend('Previsto','Previsto para o nivel baixo','Previsto para o nivel alto')
grid

%%
figure(6) %Residues
clf
subplot(1,2,1)
plot(Pred(:,1),errors,'sr')
title('Previsto x Residuo')
xlabel('Previsto')
ylabel('Residuo')
linex=[min(Pred(:,1)) max(Pred(:,1))];
liney=[0 0];
line(linex,liney,'LineWidth',2, 'Color','r');
grid
subplot(1,2,2)
hist(errors)
title('Histograma dos residuos')
xlabel('Residuos')
ylabel('Frequencia')

%%
figure(7) %Coefficients
clf
plot(Coef(:,1),'vk')
hold on
plot(Coef_L1,'+b')
plot(Coef_L2,'+r')
linex=[1 n];
liney=[0 0];
line(linex,liney,'LineWidth',2, 'Color','r');
title('Coeficientes de Regressao')
legend('Coeficientes','Coeficientes - intervalo de confianca','Coeficientes + intervalo de
confianca')
grid

```

Rotina computacional super_fabi

```
function [superficie]=super_fabi(X);
% [superficie]=super_fabi(X);
% Funcao para calcular superficie de resposta e gráfico de contorno
% A matriz X deve conter:
% Coluna 1 = coeficientes na seguinte ordem, b0, b1, b2, b11, b22, b12
% Coluna 2 = Valores codificados da variavel 1
% Coluna 3 = Valores reais da variável 1
% Coluna 4 = Valores codificados da variavel 2
% Coluna 5 = Valores reais da variavel 2

size(X);

A=[X(1,2):((X(2,2)-X(1,2))/100):X(2,2)];
A2=[X(1,3):((X(2,3)-X(1,3))/100):X(2,3)];
B=[X(1,4):((X(2,4)-X(1,4))/100):X(2,4)];
B2=[X(1,5):((X(2,5)-X(1,5))/100):X(2,5)];

[xx,yy]=meshgrid(A,B);

for i=1:101
    for j = 1:101

superficie(i,j)=X(1,1)+X(2,1)*xx(i,j)+X(3,1)*yy(i,j)+X(4,1)*xx(i,j)^2+X(5,1)*yy(i,j)^2+X(6,
1)*xx(i,j)*xx(i,j);
        end
    end

figure
surfc(A2,B2,superficie)

xlabel ('Variavel 1')
ylabel ('Variavel 2')
zlabel ('Resposta')

figure
contourf(A2,B2,superficie)
xlabel ('Variavel 1')
ylabel ('Variavel 2')
colorbar

figure
```

```
mesh(A2,B2,superficie)
xlabel ('Variavel 1')
ylabel ('Variavel 2')
zlabel ('Resposta')
```

Resultados obtidos para o exemplo 1 após a remoção da variável 3:

Tabela 1S. Exemplo 1 após remoção da variável 3

| Experimentos | HCl | | NaBH ₄ | | Intensidade de fluorescência | |
|--------------|------------|--------------|-------------------|--------------|------------------------------|-------|
| | Codificado | Real (mol/L) | Codificado | Real (% m/v) | | |
| 1 e 2 | -1 | 3 | -1 | 1 | 178,4 | 167,5 |
| 3 e 4 | -1 | 3 | 1 | 3 | 225,7 | 218,1 |
| 5 e 6 | 1 | 5 | -1 | 1 | 86,6 | 91,0 |
| 7 e 8 | 1 | 5 | 1 | 3 | 195,6 | 189,2 |
| 9 | 0 | 4 | 0 | 2 | 137,5 | |
| 10 | 0 | 4 | 0 | 2 | 135,7 | |
| 11 | 0 | 4 | 0 | 2 | 137,8 | |

Tabela 2S. Cálculo dos erros experimental e de um efeito

| Experimentos | Intensidade de fluorescência | | Variância | Graus de liberdade |
|--------------|------------------------------|-------|-----------|--------------------|
| 1 e 2 | 178,4 | 167,5 | 59,4 | 1 |
| 3 e 4 | 225,7 | 218,1 | 28,9 | 1 |
| 5 e 6 | 86,6 | 91,0 | 9,7 | 1 |
| 7 e 8 | 195,6 | 189,2 | 20,5 | 1 |
| 9 | 137,5 | | 1,29 | 2 |
| 10 | 135,7 | | | |
| 11 | 137,8 | | | |

Cálculo da variância média:

$$Variância\ média = \frac{59,4 + 28,9 + 9,7 + 20,5 + (2 \times 1,29)}{1 + 1 + 1 + 1 + 2} = 20,0$$

Cálculo do número de graus de liberdade total:

$$\text{Graus de liberdade total} = 1 + 1 + 1 + 1 + 2 = 6$$

Cálculo do erro experimental:

$$\text{Erro experimental} = \sqrt{\text{Variância experimental}} = \sqrt{20,0} = 4,47$$

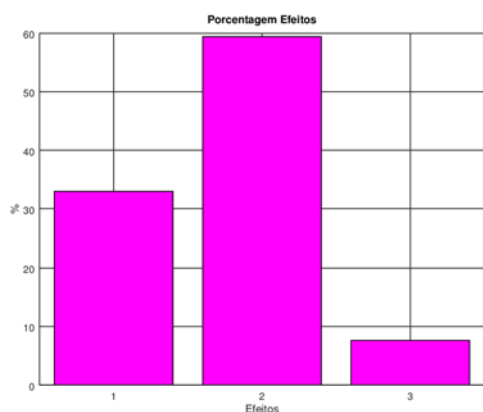
Cálculo do erro de um efeito:

$$\text{Erro de um efeito} = \frac{2 \times 4,47}{\sqrt{(2 + 2 + 2 + 2 + 3) \times 2^2}} = 1,34$$

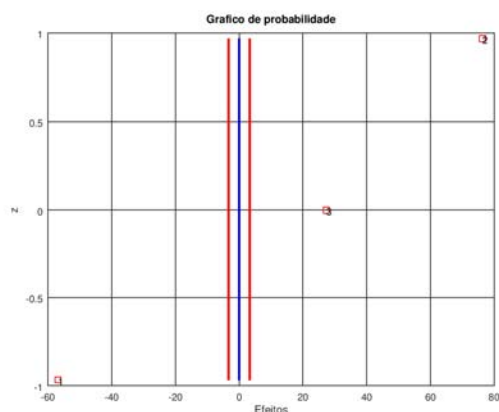
Valor de t para 6 graus de liberdade = 2,447

Linha de comando resultante:

```
[efeito2, porc2]=fabi_efeito(X2,y2,1.34,2.447);
```



(a)

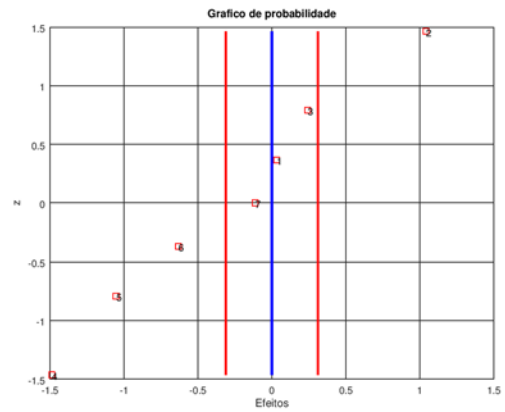
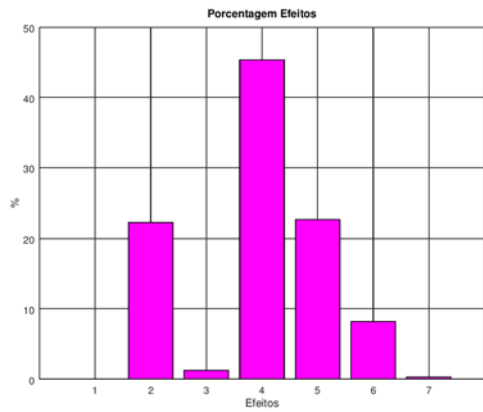


(b)

Figura 1S. Porcentagem relativa dos efeitos calculados (a) e o gráfico de probabilidade (b) para o exemplo 1 após exclusão da variável 3

Resultados para a segunda resposta do exemplo 2:

[efeito2, porc2]=fabi_efeito(X,y2,0.072,4.3025);

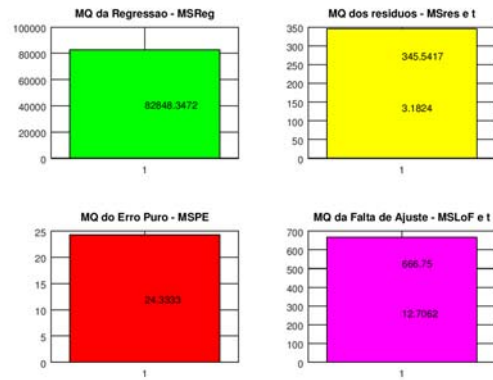


(a)

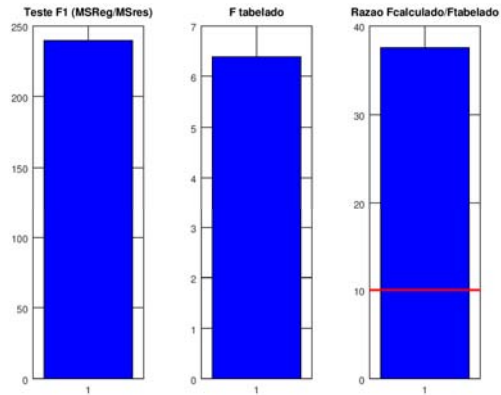
(b)

Figura 2S. Porcentagem relativa dos efeitos calculados (a) e o gráfico de probabilidade (b) para a segunda resposta do exemplo 2

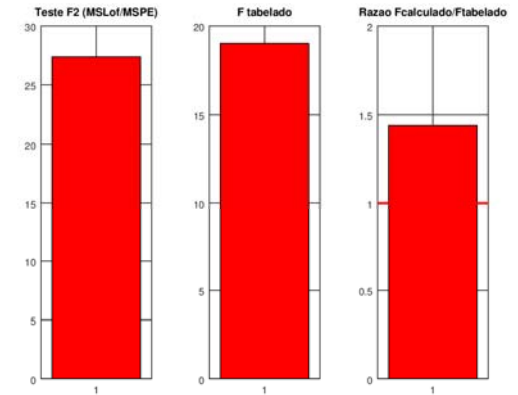
Resultados para o exemplo 3 recalculado:



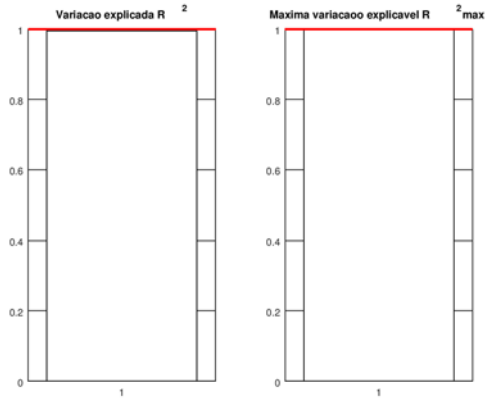
(a)



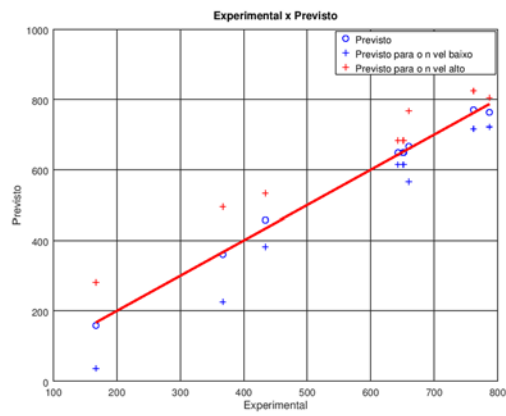
(b)



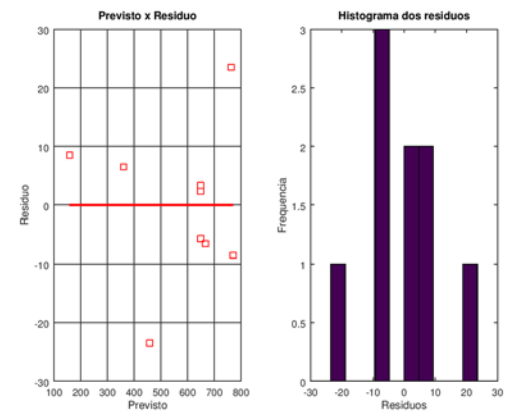
(c)



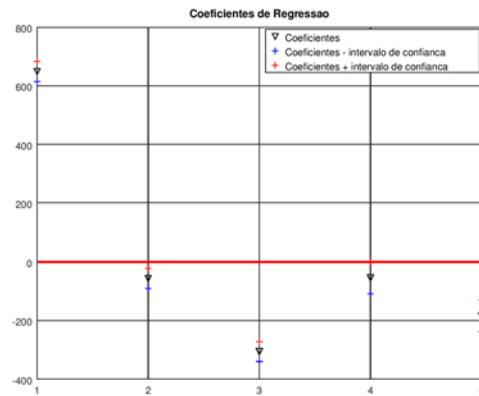
(d)



(e)



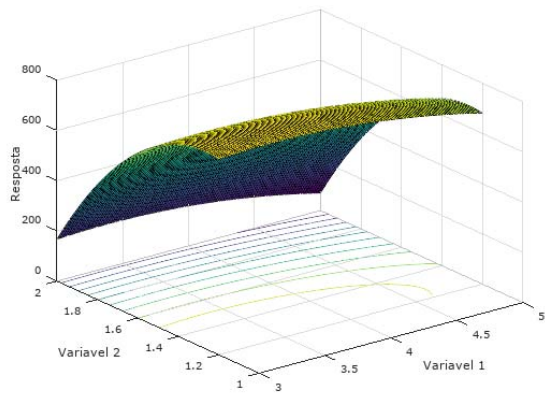
(f)



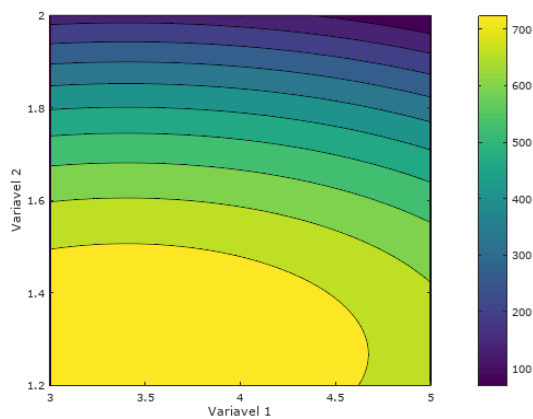
(g)

Figura 3S. Gráficos dos valores de média quadráticas (a), teste F para MQR e MQr (b), teste F para MQFaJ e MQEP (c), coeficientes de regressão (d), gráficos dos valores experimental versus previsto (e), previsto versus resíduo e histograma dos resíduos (f) e coeficientes de regressão (g) para o exemplo 3 recalculado

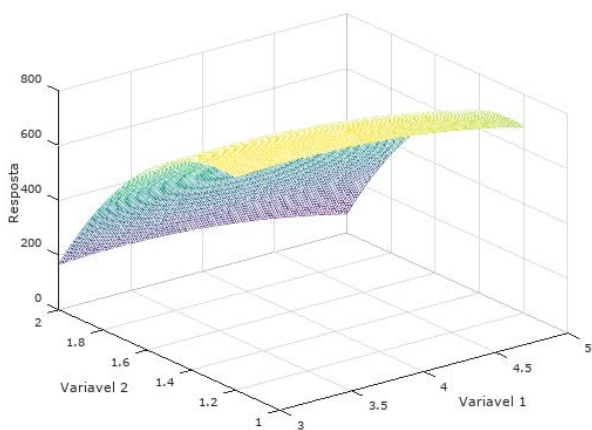
Superfície de resposta e gráfico de contorno para o Exemplo 3 – Gráficos obtidos no Octave



(a)



(b)

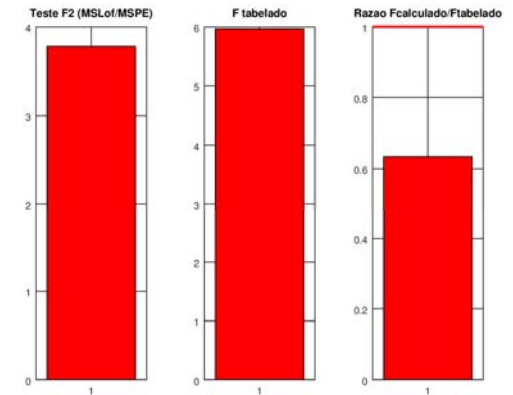
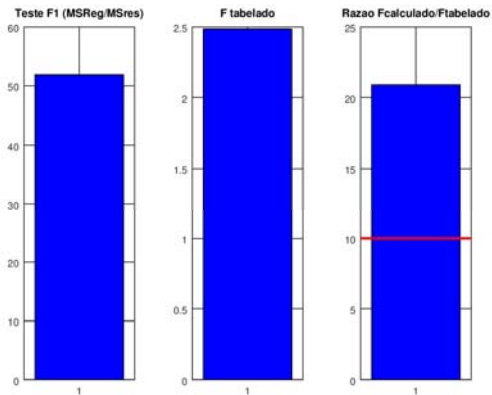
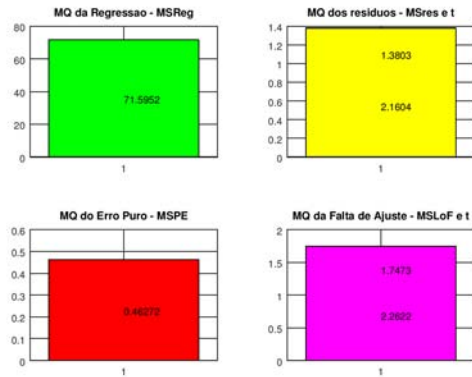


(c)

Figura 4S. Superfície de resposta utilizando `surfc` (a), gráfico de contorno (b) e superfície de resposta utilizando `mesh` (c) para o Exemplo 3

Exemplo 4, primeiro modelo calculado:

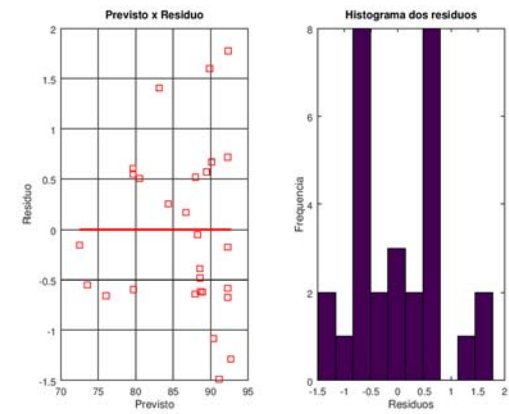
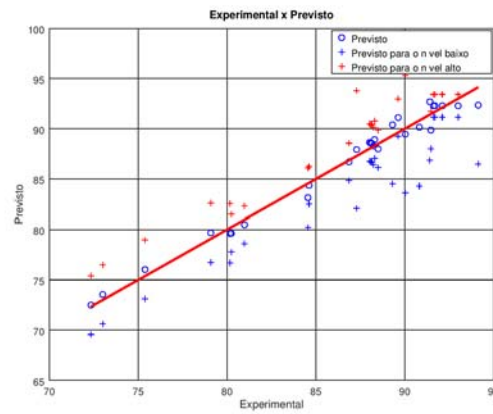
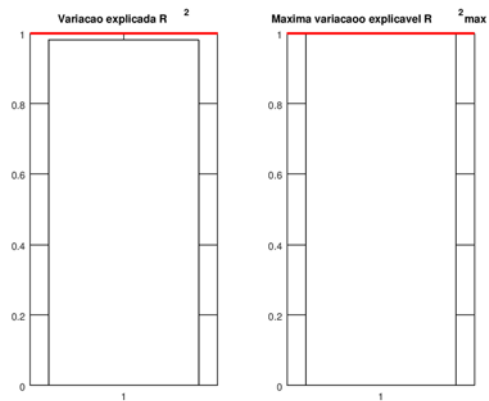
Linha de comando: `[Mod_par,Coef,Pred] = regression2(X,y,1.85,4);`



(a)

(b)

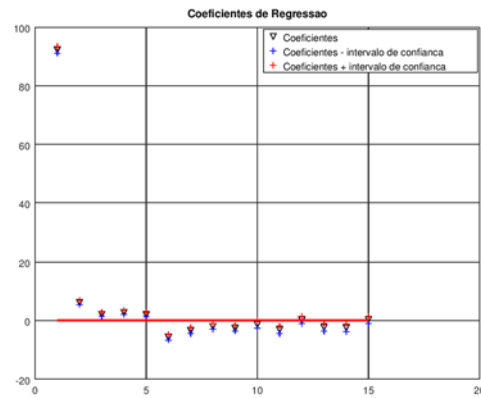
(c)



(d)

(e)

(f)

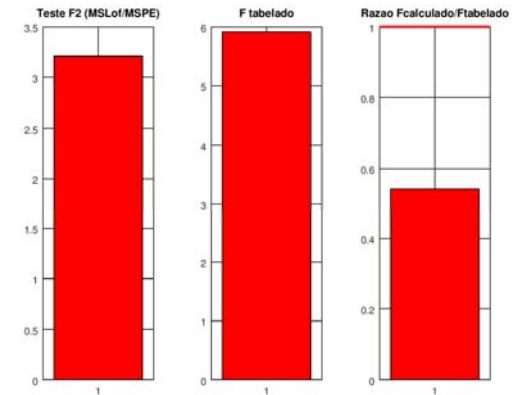
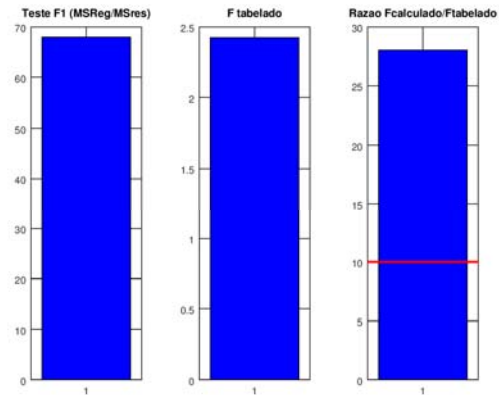
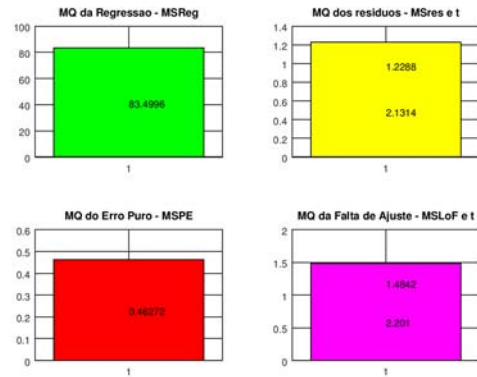


(g)

Figura 5S. Gráficos dos valores de médias quadráticas (a), teste F para MQR e MQR (b), teste F para MQFaJ e MQEP (c), coeficientes de regressão (d), gráficos dos valores experimental versus previsto (e), previsto versus resíduo e histograma dos resíduos (f) e coeficientes de regressão (g) para o primeiro modelo do exemplo 4

Exemplo 4, modelo recalculado:

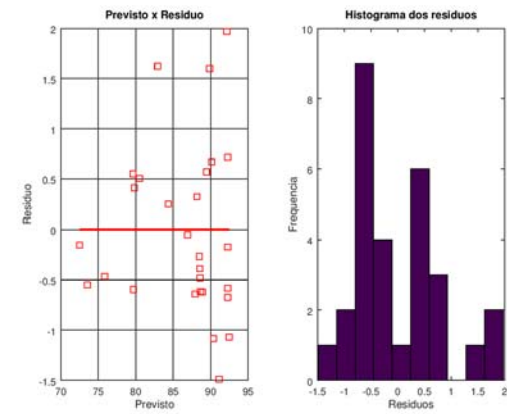
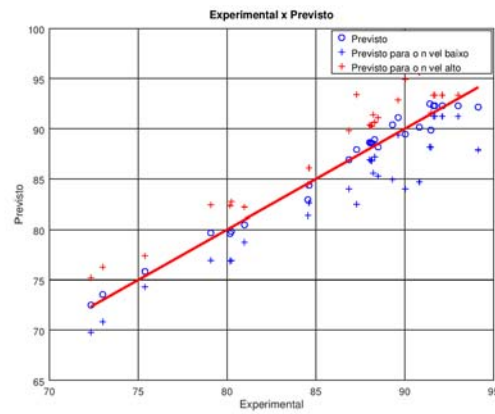
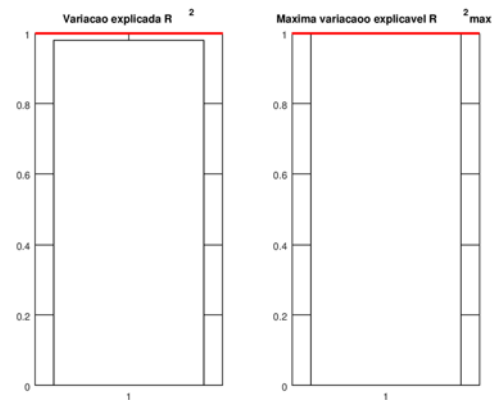
Linha de comando: `[Mod_par,Coef,Pred] = regression2(X(:,[1:11,13,14]),y,1.85,4);`



(a)

(b)

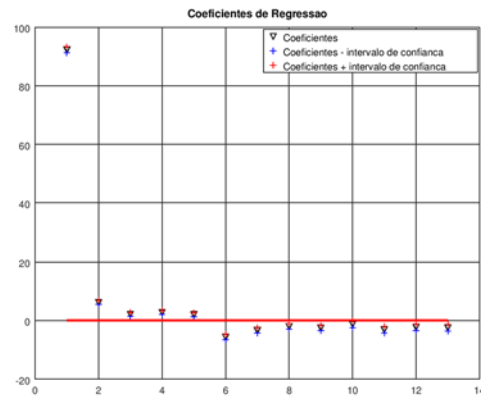
(c)



(d)

(e)

(f)



(g)

Figura 6S. Gráficos dos valores de médias quadráticas (a), teste F para MQR e MQr (b), teste F para MQFaJ e MQEP (c), coeficientes de regressão (d), gráficos dos valores experimental versus previsto (e), previsto versus resíduo e histograma dos resíduos (f) e coeficientes de regressão (g) para o modelo recalculado do exemplo 4

Cálculo da derivada parcial

Derivada parcial da seguinte equação:

$$Resposta = 92,28 + 6,17v_1 + 2,14v_2 + 2,79v_3 + 1,99v_4 - 5,70v_1^2 - 3,41v_2^2 - 2,00v_3^2 - 2,58v_4^2 - 1,32v_1v_2 - 3,15v_1v_3 - 2,34v_2v_3 - 2,49v_2v_4$$

$\pm 0,73$ $\pm 0,45$ $\pm 0,45$ $\pm 0,45$ $\pm 0,45$ $\pm 0,65$ $\pm 0,65$ $\pm 0,65$ $\pm 0,65$ $\pm 0,82$ $\pm 0,82$ $\pm 0,82$ $\pm 0,82$ $\pm 0,82$

$$\frac{dy}{dv_1} = 6,17 - 11,39v_1 - 1,33v_2 - 3,15v_3$$

$$\frac{dy}{dv_2} = 2,14 - 1,33v_1 - 6,82v_2 - 2,34v_3 - 2,49v_4$$

$$\frac{dy}{dv_3} = 2,79 - 3,15v_1 - 2,34v_2 - 3,99v_3$$

$$\frac{dy}{dv_4} = 1,99 - 2,49v_2 - 5,17v_4$$

Isolando as incógnitas e estabelecendo um sistema:

$$\begin{aligned} -6,17 &= -11,39v_1 - 1,33v_2 - 3,15v_3 \\ -2,14 &= -1,33v_1 - 6,82v_2 - 2,34v_3 - 2,49v_4 \\ -2,79 &= -3,15v_1 - 2,34v_2 - 3,99v_3 \\ -1,99 &= -2,49v_2 - 5,17v_4 \end{aligned}$$

Assim teremos:

$$\begin{array}{c} \text{Incógnitas} \\ v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{array} = \textit{inversa} \begin{array}{cccc} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \\ -11,39 & -1,33 & -3,15 & 0 \\ -1,33 & -6,82 & -2,34 & -2,49 \\ -3,15 & -2,34 & -3,99 & 0 \\ 0 & -2,49 & 0 & -5,17 \end{array} \times \begin{array}{c} y \\ -6,17 \\ -2,14 \\ -2,79 \\ -1,99 \end{array} = \begin{array}{c} \text{Coeficientes} \\ 0,44 \\ -0,05 \\ 0,38 \\ 0,41 \end{array}$$



This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License.