

Análise da Influência de delineamentos em um espaço simplex com efeito de borda no ajuste do modelo Poisson

Wederson L. Ferreira^{1†}, Roberta A. Spigolon², Marcelo A. Cirillo³

¹Docente, IFFarroupilha, Campus Alegrete, Alegrete, RS, Brasil.

²Aluna do curso de Engenharia Agrícola, IFFarroupilha/Unipampa, Campus Alegrete, Alegrete, RS, Brasil. Bolsista da Fapergs. E-mail: robertaaspigolon@gmail.com.

³Docente, UFLA, DES, Lavras, MG, Brasil. E-mail: macufla@gmail.com.

Resumo: Este trabalho se propôs a abordar e avaliar via simulação de dados, os critérios de otimalidade A e D em delineamentos de misturas construídos a partir de um delineamento rotacional, considerando modelo Poisson, explorando a fronteira do zero em partes dos componentes de um simplex e, também, analisar o uso dos termos inversos nesses componentes. Em função da restrição matemática imposta aos delineamentos de mistura, a obtenção da propriedade de rotacionalidade é obtida pela utilização de procedimento algébrico específico, para que sua característica inerente seja preservada, isto é, a variância de predição seja constante para todos os pontos experimentais. No cenário de problemas de misturas, quando a resposta apresenta mudanças extremas, quando parte dos componentes tenderem à fronteira do zero, os modelos usualmente utilizados podem não ser condizentes para lidar com esse fato. Desta forma, a inclusão de termos inversos, associados a esses componentes nos modelos clássicos pode ser uma alternativa mais adequada, porque essas mudanças ocorrem com menor incidência na fronteira dos referidos componentes. Pelos cenários avaliados, constatou-se que a maior precisão do modelo Poisson ao analisar as deviances, estando parte dos componentes de misturas tendendo a fronteira do zero, ocorreu quando utilizou-se os delineamentos D-ótimos com a inclusão dos termos inversos nestes componentes em detrimento do A-ótimo e rotacional. Ficou evidenciado também que na maioria dos cenários avaliados os delineamentos D-ótimos foram os mais robustos, sobretudo na fronteira do zero.

Palavras-chave: Problemas de mistura; Termos inversos; Critérios de otimalidade.

Abstract: It is proposed to evaluate, through simulation of data, the optimality criteria A and D in mixture designs constructed from a rotational design, considering Poisson model, exploring the boundary of zero in parts of the components of a simplex. Due to the mathematical constraint imposed on the mixing designs, obtaining the rotationality property is obtained by the use of specific algebraic procedure, thus preserving the constant prediction variance for all the experimental points. In mixture problem, the predicted response may exhibit extreme changes when part of the components tends to zero, and the models usually used may not be adequate to deal with this fact. In this way, the inclusion of inverse terms associated with these components in the classical models may be a more adequate alternative because these changes occur with a lower incidence in the frontier of said components. By the scenarios evaluated, it was verified that the greater precision of the Poisson model when analyzing the deviances occurred when the D-optimal designs were used with the inclusion of the inverse terms in these components in detriment of the A-optimal and rotational.

Keywords: Mixture problem; Inverse terms; Optimality criteria.

Introdução

Em algumas situações envolvendo problemas de misturas a resposta pode apresentar mudanças extremas, quando parte dos componentes tendem a uma fronteira, geralmente zero, e, neste caso, os modelos usualmente utilizados podem não ser capazes para lidar com esse fato. Uma alternativa foi proposta por Draper e John (1977) no intuito de modelar essas mudanças extremas, com a inclusão de termos inversos nos modelos clássicos, pois, em tese, estas ocorrerão com menor incidência na fronteira dos componentes.

[†]Autor correspondente: wederson.ferreira@iffarroupilha.edu.br.

Ao se realizar a modelagem estatística é aconselhável sempre optar por delineamentos que usufruam de boas propriedades (ZEN et al., 2015). Em problemas aplicados à área industrial, por exemplo, a rotacionalidade é às vezes requerida, pelo fato de a variância de predição ser constante para todos os pontos experimentais, segundo Atkinson, Donev e Tobias (2007). Outra propriedade desejada é a utilização de delineamentos ótimos, pois os parâmetros do modelo referentes às proporções de mistura podem ser estimados independentemente dos parâmetros referentes às variáveis utilizadas (GOOS; JONES; SYAFITRI, 2016), e ainda, exigirem um número de observação menor que os esquemas usuais do simplex lattice e centroide, usualmente utilizados no contexto de misturas (GOMES; DINIZ, 2002).

Com a restrição matemática da soma das proporções dos componentes ser igual a unidade, a obtenção da propriedade de rotacionalidade para o delineamento utilizado não é um procedimento trivial. Desta forma, Cornell (2002) desenvolveu um procedimento algébrico para obter os componentes de misturas por meio de um delineamento rotacional, de tal modo que sua característica fundamental seja preservada, ou seja, a variância da predição seja constante em todos os ensaios.

É comum que em problemas de misturas a resposta seja um número na escala contínua, entretanto é possível que a mesma seja uma contagem (Nepomucena; Silva; Cirillo, 2013). A contagem surge, por exemplo, quando realiza-se um experimento em que cada ensaio é composto de diferentes proporções de princípios ativos que somam a unidade, e que serão aplicados em um espaço delimitado, com o objetivo de se obter as proporções ideais de tal modo que haja a letalidade eliminando o maior número de organismos, como: animais, plantas, fungos, protozoários, bactérias, entre outros. Sendo assim, uma alternativa para lidar com uma resposta não-normal é a metodologia estatística de modelos lineares generalizados, que amplia a possibilidade de outras distribuições pertencentes a família exponencial para a variável resposta.

Este trabalho tem por objetivo avaliar os critérios de otimalidade A e D em delineamentos de misturas construídos a partir de um conjunto de delineamentos rotacionais, entretanto considerando a resposta como uma contagem e ajustando modelo linear generalizado, explorando a fronteira do zero em partes dos componentes de mistura e analisando o uso dos termos inversos nesses componentes.

Modelos de misturas com termos inversos

O problema de mistura é definido a partir da restrição do tipo $\sum_{i=1}^q x_i = 1$, com $x_i \geq 0$ (DRAPER; JOHN, 1977). Outro fato a ser analisado é quando ocorrem mudanças extremas nas respostas quando um, ou mais, destes componentes de misturas tendem a fronteira do simplex, isto é $f(x_i) \rightarrow \pm\infty$, com $x_i \rightarrow 0$. Neste caso, os modelos usualmente utilizados podem não ser condizentes para lidar com essa situação. Em situações como esta, as variâncias dos erros serão totalmente não homogêneas e no intuito de modelar essas mudanças extremas Draper e John (1977) definiu os seguintes modelos com termos inversos:

$$\eta_1^*(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} x_i^{-1}; \quad (1)$$

$$\eta_2^*(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} x_i^{-1}; \quad (2)$$

$$\eta_3^*(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k \sum_{i=1}^q \beta_{-i} x_i^{-1}. \quad (3)$$

Obtenção de delineamentos de misturas a partir de delineamentos rotacionais

Cornell (2002) apresentou um procedimento algébrico para obter os componentes de mistura por meio de um delineamento rotacional, de tal modo que a sua característica fundamental seja preservada ao ajustar modelos de ordem 1 e 2, ou seja, a variância de predição é mantida constante em todos os pontos. Para isso, supõe-se que não haja interesse em todos os pontos do simplex, mas, sim, em uma sub-região contida no mesmo, denominada de região de interesse, justamente por explorar esta região e verificar se há outras misturas nas imediações das condições habituais que podem produzir um rendimento melhor do que está sendo produzido (CORNELL, 2002).

Define-se o vetor $x_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0q})'$ o centroide da região elipsoidal de interesse, que pode coincidir com o centroide do simplex e seja também $h = (h_1, h_2, \dots, h_q)'$, em que x_{0i} corresponde ao centro do intervalo de interesse para a combinação i , e $2h_i$ representa a extensão ou amplitude do intervalo simétrico de interesse para a combinação i . Logo, no caso geral de q -componentes, uma região elipsoidal é expressa como:

$$\sum_{i=1}^q \left(\frac{x_i - x_{0i}}{h_i} \right)^2 \leq 1. \quad (4)$$

O ponto $(x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0q})$ encontra-se, naturalmente, estritamente dentro do simplex e, por conseguinte, a condição $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$ é também forçada sobre x_{0i} , que é $x_{01} + x_{02} + \dots + x_{0q} = 1$.

Para a formulação de um conjunto de componentes de misturas a partir de variáveis que formam um delineamento rotacional, o procedimento mencionado acima, proposto por Cornell (2002), considera o delineamento dado por:

$$X = D_w T_1' H + [x_0']. \quad (5)$$

Se o delineamento em W ($W = [1 \ D_w]$) é rotacional, a escolha adequada de T_1 , de T ortogonal, pode ser usada sem afetar a variância de predição da resposta em W , uma vez que a magnitude desta variância de predição é uma função apenas da distância a partir do centro do delineamento para onde o ponto w está localizado e não uma função de direção (CORNELL, 2002). A construção desse delineamento X é verificada nos seguintes passos:

i) Obtenção da matriz D_w :

Assumindo $q - 1$ variáveis, o delineamento composto central, com n_0 pontos centrais, a matriz de delineamento resultante é dada por:

$$\mathbf{D}_w = \begin{bmatrix} \pm c & \pm c & \cdots & \pm c \\ \pm c & \pm c & \cdots & \pm c \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \pm c & \pm c & \cdots & \pm c \\ \hline -g & 0 & \cdots & 0 \\ g & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -g & & 0 \\ 0 & g & & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & -g \\ 0 & 0 & & g \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \mathbf{D}_1 \\ \\ \\ \mathbf{D}_2 \\ \\ \\ \mathbf{D}_3 \end{matrix} \quad (6)$$

A matriz \mathbf{D}_w corresponde a uma combinação de delineamentos, de modo que as dimensões de cada delineamento são especificadas pelo número de componentes q , pontos centrais n_0 e $M = 2^{q-1}$ (CORNELL, 2002). Desta forma, obter-se-á a matriz \mathbf{D}_1 de dimensão $(M \times (q - 1))$, \mathbf{D}_2 de dimensão $2(q - 1) \times (q - 1)$ e a matriz \mathbf{D}_3 de dimensão $n_0 \times (q - 1)$. Pelas pautações ensejadas anteriormente conclui-se que a dimensão de \mathbf{D}_w será $(M + 2(q - 1) + n_0) \times (q - 1)$.

A rotacionalidade é garantida por considerar $g = \sqrt[4]{M}c$, em que $M = 2^{q-1}$ e para o procedimento em questão c é obtido da seguinte forma:

$$c = \frac{\rho^*}{\sqrt{q - 1}}, \text{ sendo (7)}$$

$\rho^* = \min_{1 \leq i \leq q} \rho_i$ e ρ_i especificado por:

$$\rho_i = x_{0i} \left(\frac{1}{h_i^2} + \frac{1}{a - h_i^2} \right)^{\frac{1}{2}} ; i = 1, 2, \dots, q, \text{ e } a = \sum_{i=1}^q h_i^2.$$

Logo, ρ^* é o raio da esfera maior, sendo essa caracterizada pela região estendida de interesse no espaço do delineamento (CORNELL, 2002).

ii) Obtenção da matriz \mathbf{T}_1 :

A matriz será uma partição da matriz ortogonal $\mathbf{T} = [\mathbf{T}_1 \ T_2]$, para obter a matriz T_2 será definido a quantidade

$$\tilde{h}_i = \frac{h_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^q h_i^2}}, \quad (8)$$

que definirá o vetor T_2 com dimensão $(q \times 1)$, como segue:

$$T_2 = \tilde{h} = \begin{bmatrix} \tilde{h}_1 \\ \tilde{h}_2 \\ \vdots \\ \tilde{h}_q \end{bmatrix}. \quad (9)$$

Com essas especificações os elementos da matriz T_1 , de dimensão $(q \times q - 1)$, são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{cases} t_{11} = -h_2 \\ t_{21} = h_1 \\ t_{i1} = 0, i = 3, 4, \dots, q \end{cases}; \begin{cases} t_{12} = -h_1 h_3 \\ t_{22} = -h_2 h_3 \\ t_{32} = h_1^2 + h_2^2 \\ t_{i2} = 0, i > 3 \end{cases}; \begin{cases} t_{13} = -h_1 h_4 \\ t_{23} = -h_2 h_4 \\ t_{33} = -h_2 h_4 \\ t_{43} = h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 \\ t_{i3} = 0, i > 4. \end{cases}.$$

Com essa formulação $T'T = I$, pois T deverá ser ortogonal no contexto deste procedimento (CORNELL, 2002).

iii) Obtenção da matriz H :

A matriz H será uma matriz diagonal formada pelos elementos do vetor h . Logo, a dimensão da matriz será $q \times q$.

iv) Obtenção da matriz $[x'_0]$:

A matriz $[x'_0]$ é uma matriz na qual suas linhas são todas iguais e iguais ao vetor x'_0 , sua dimensão será $(M + 2(q - 1) + n_0) \times q$. Isto é:

$$[x'_0] = \begin{bmatrix} x'_0 \\ x'_0 \\ \vdots \\ x'_0 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Critérios de delineamentos ótimos

A partir da teoria de delineamentos ótimos é possível planejar experimentos que proporcionem a máxima informação a respeito de aspectos que se deseja investigar, cujo objetivo é garantir planejamentos eficientes especificados *a priori* (ATKINSON; DONEV; TOBIAS, 2007). Os critérios de otimalidade para delineamentos, segundo estes autores, são denotados por $\Psi\{\mathbf{M}(\xi)\}$ e são funções da matriz de informação $\mathbf{X}'\mathbf{X}$, ou de sua inversa, do delineamento ξ e influenciam as medidas de precisão das estimativas dos parâmetros do modelo ora assumido. Assim, um critério de classificação que minimiza $\Psi\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\}$ é dito delineamento ótimo, como, por exemplo, o A-ótimo e D-ótimo.

D-ótimo

Um delineamento D-ótimo, segundo Atkinson, Donev e Tobias (2007), é definido por

$$\Psi\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\} = \det(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}.$$

Ou de forma equivalente por $D = \Psi\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\} = \det(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \tilde{\lambda}^{-p}$, em que $\tilde{\lambda}$ é a média geométrica dos autovalores de $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ e p é a quantidade de parâmetros a ser estimada no modelo adotado (BOX; DRAPER, 2007). A matriz de variâncias e covariâncias dos parâmetros desconhecidos do modelo assumido é proporcional assintoticamente ao inverso da matriz de informação e visa minimizar o volume da região de confiança multidimensional (elipsoide) do vetor de estimativas desse vetor de parâmetros, tornando as regiões de confiança com menores volumes.

A-ótimo

Um delineamento A-ótimo, segundo Atkinson, Donev e Tobias (2007), é definido por

$$\Psi \{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\} = \text{tr} (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \sum \lambda_i, \quad (11)$$

em que λ_i é cada autovalor de $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$. Esse critério minimiza o traço da matriz de variâncias e covariâncias, ou seja, minimiza a soma das variâncias ou equivalentemente a variância média (BOX; DRAPER, 2007).

Um dos principais métodos a serem empregados na geração de um delineamento A e D-ótimo é o método do tipo *Exchange* (TYAGI; SHUKLA; KULKARNI, 2016). Em síntese, esse método consiste em gerar um delineamento inicial, de modo que a matriz de informação seja não singular e utilizar algum procedimento iterativo, no qual os pesos inicialmente atribuídos são atualizados e novos delineamentos são gerados e comparados através de uma função aplicada à matriz de informação $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ que caracterize o critério A ou D-ótimo assumido (CUERVO; GOOS; SÖRENSEN, 2016).

Material e métodos

Após a obtenção de um conjunto de delineamento rotacionais que contemplam o efeito de borda no segundo e terceiro, este em menor intensidade, componentes tendendo à fronteira do zero, controlada em diferentes distâncias, procedeu-se à obtenção dos respectivos delineamento D-ótimo e A-ótimo, por meio de algoritmos exchange. Com os objetivos propostos ajustando os modelos, foram definidos os Modelos Lineares generalizados, MLGs, com preditor η_4 (12), com termo inverso no primeiro componente e o preditor η_5 (12) também com termos inversos no segundo e terceiro componentes:

$$\eta_4 = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 + \beta_{-1} x_1^{-1} \quad (12)$$

e

$$\eta_5 = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 + \beta_{-1} x_1^{-1} + \beta_{-2} x_2^{-1} + \beta_{-3} x_3^{-1} \quad (13)$$

Dado $\mu > 0$, usou-se a função de ligação canônica $\eta = \log \mu$. E para gerar um vetor de valores da distribuição de Poisson, com vetor de médias $= \mu$, será considerada a função $u = e^{x'\beta}$. Para formar o preditor linear $x'\beta$, x' será a matriz \mathbf{X}_{TI} (matriz do delineamento acrescida dos termos inversos) e $\beta = (0,41; 0,99; 5,75; 0,02; 0,003; 0,0001)$ e, assim, a cada simulação um novo vetor distinto de valores será gerado. Segue o resumo na tabela 1.

Tabela 1 – Resumo dos cenários avaliados no procedimento Monte Carlo.

Efeito de borda	Modelo ajustado	Delineamento usado
Presença	Poisson	Rotacional
		D-ótimo
		A-ótimo
Ausência (*)	Poisson	Rotacional
		D-ótimo
		A-ótimo

* Componente x_i de mistura com a restrição, obrigatória, $x_i < 0,05$.

Para todos os cenários (Tabela 1), foram realizadas 1.000 simulações, das quais se obteve a distribuição empírica das Deviances por meio de rotinas computacionais elaboradas no software R (R CORE TEAM, 2018).

Sigmae, Alfenas, v.8, n.2, p. 612-620, 2019.

64ª Reunião da Região Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria (RBRAS).

18º Simpósio de Estatística Aplicada à Experimentação Agronômica (SEAGRO).

Resultados e discussão

Os cenários de resultados apresentados sequencialmente são provenientes dos ajustes de dois modelos Poisson, considerando presença e ausência efeito de borda dos componentes de misturas nos preditores η_4 (12) e η_5 (13), ressaltando-se que apenas os valores, sobretudo o segundo, do segundo e terceiro componentes de misturas tenderam à fronteira do zero.

Assim, com a finalidade de analisar a influência do uso dos termos inversos, especificamente nos componentes de misturas que tenderam à fronteira do zero sobre da precisão das estimativas das Deviances, oriundas do ajuste dos modelos Poisson, foram considerados os delineamentos Rotacionais, A-ótimos e D-ótimos para o modelo linear normal, cujos resultados estão evidenciados nas Figuras 1 e 2.

Em relação a presença do efeito de borda em parte dos componentes de misturas, Figura 1, os resultados simulados evidenciaram que ao considerar o primeiro modelo Poisson, preditor η_4 (12), houve diferenças no que tange a distribuição empírica descritiva das Deviances obtidas, considerando-se os três perfis característicos de delineamentos. Observa-se menor dispersão dos valores das Deviances quando se compara o perfil característico de ser D-ótimo com os demais, assim como assimetria dos dados nos três cenários de delineamentos avaliados. A mediana foi aproximadamente igual ao A-ótimo e D-ótimo e levemente superior a do rotacional.

Ainda pela Figura 1, entretanto analisando o ajuste do segundo modelo Poisson, preditor η_5 (13), percebeu-se nitidamente que houve diferenças significativas e relevantes acerca da dispersão da distribuição assimétrica das Deviances nos três perfis de delineamentos avaliados. Veementemente, constata-se que essa dispersão foi regressiva e considerável entre os perfis característicos rotacionais, A-ótimos e D-ótimos, respectivamente.

No contexto de ausência de efeito de borda em parte dos componentes, Figura 2, ao ajustar o primeiro modelo Poisson, preditor η_4 (12), pôde-se perceber uma assimetria e menor dispersão dos valores quando comparados os perfis característicos dos delineamentos D-ótimos com o rotacionais e A-ótimos, assim como a mediana também foi inferior nesse delineamento. Ao se considerar o modelo 2, preditor η_5 (13), ainda pela Figura 2, percebe-se que as observações anteriores permanecem praticamente inalteradas ao comparar o delineamento D-ótimo com os demais.

Observa-se, também, que a presença do efeito de borda impactou no surgimento de uma parcela de valores para as Deviances que alterou, inclusive, a escala das Figuras 1 e 2.

Em síntese, é perceptível empiricamente que o uso de pelo menos um dos termos inversos nos componentes de mistura que tenderam à fronteira do zero nos preditores dos modelos, possuem alta relevância utilizando os delineamentos com a característica de serem D-ótimo e, em menor grau, rotacional e o A-ótimo para o modelo linear normal, respectivamente, ao analisar a precisão das deviances. E indiferente ao uso dos termos inversos nos componentes que tenderam à fronteira do zero, havendo ausência de efeito de borda nos componentes, isto em todos os perfis de delineamentos estudados. Sendo assim, a performance do ajuste do modelo Poisson ao analisar as suas Deviances, destacou-se positivamente ao considerar o delineamento D-ótimo, possuindo, ainda, maior destaque e superior robustez ao considerar o uso dos termos inversos em todos os componentes de misturas, que tenderam, ou não, na fronteira do zero.

Zhang et al. (2005) ao estudar a eficiência dos delineamentos D-ótimos e A-ótimo em misturas, mostrou que o D-ótimo tem alta eficiência em termos do A-otimalidade e vice-versa. Com três componentes, o D-ótimo foi mais eficiente, não contrapondo o estudo realizado.

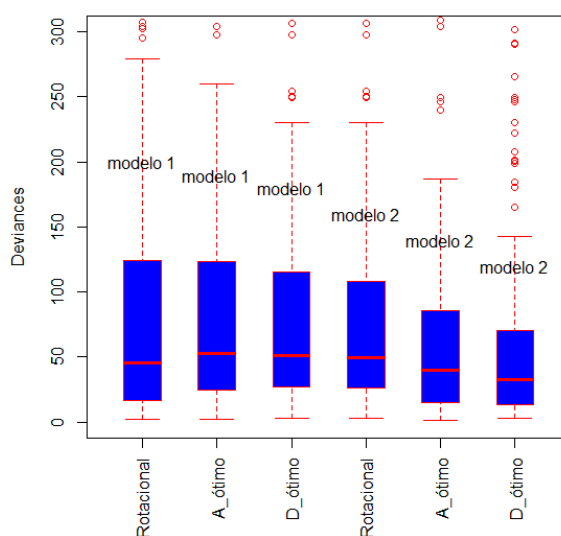


Figura 1 – Box-plot para comparação das Deviances no ajuste de 2 modelos de mistura Poisson, utilizando as propriedades de Rotacionalidade, A-ótimo e D-ótimo para os modelos normais com presença de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.

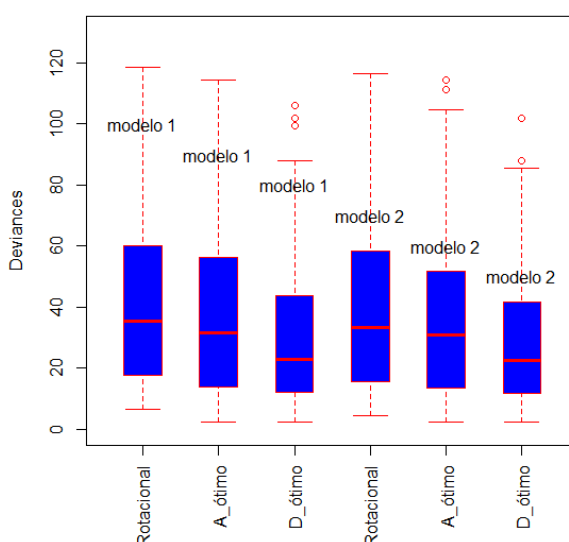


Figura 2 – Box-plot para comparação das Deviances no ajuste de 2 modelos de mistura Poisson, utilizando as propriedades de Rotacionalidade, A-ótimo e D-ótimo para os modelos normais com ausência de efeito de borda em parte dos componentes de misturas.

Conclusões

A maior precisão do modelo do Poisson ao analisar as suas Deviances ocorreu quando utilizou-se os delineamentos D-ótimos com a inclusão dos termos inversos e parte dos componentes de mistura estando na fronteira do zero.

Os delineamentos mais robustos na fronteira do zero dos componentes de misturas foram os D-ótimos.

Referencias Bibliográficas

ATKINSON, A. C.; DONEV, A. N.; TOBIAS, R. D. *Optimum experimental designs with SAS*. Oxford: Oxford University Press, 2007. 511 p.

BOX, G. E. P.; DRAPER, N.R. *Response Surfaces, Mixtures, and Ridge Analyses*. 2rd ed. New York: John Wiley and Sons, 2007. 880 p.

CORNELL, J. A. *Experiments with mixtures: designs, models, and the analysis of mixture data*. 3rd ed. New York: Wiley, 2002. 649 p.

CUERVO, P.; GOOS, P.; SÖRENSEN, K. Optimal design of large-scale screening experiments: a critical look at the coordinate-exchange algorithm. *Statistics and Computing*, v. 26, n. 1, p. 15-28, 2016.

DRAPER, N. R.; JOHN, R. C. S. A mixtures model with inverse terms. *Technometrics*, Washington, v. 19, n. 1, p. 37-47, 1977.

GOMES, P. L. S.; DINIZ, C. A. R. Eficiência de delineamentos quase-ótimos em experimentos com misturas. *Revista de Matemática e Estatística*, v. 20, n. 1, p. 195-206., 2002.

GOOS, P.; JONES, B.; SYAFITRI, U. Optimal Design of Mixture Experiments. *Journal of the American Statistical Association*, v. 111, n. 514, p. 899-911, 2016.

Nepomucena, T. M.; Silva, A. M.; Cirillo, M. A. Modelos ridge em planejamentos de misturas: uma aplicação na extração da polpa de pequi. *Química Nova*, v.36, n.1,p. 159-164, 2013.

ZEN, N. I. M.; GANI, S. S. A.; SHAMSUDIN, R.; MASOUMI, H. R. The use of d-optimal mixture design in optimizing development of Okara tablet formulation as a dietary supplement. *The Scientific World Journal*, v. 2015, p. 1-7, 2015.

ZHANG, C. Q. et al. Optimal designs for an additive quadratic mixture model involving the amount of mixture. *Statistica Sinica*, New York, v. 15, p. 165-176, 2005.

R Core Team (2018). R: A language and environment for statistical computing. *R Foundation for Statistical Computing*, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>.

TYAGI, S.; SHUKLA, N.; & KULKARNI, S. Optimal design of fixture layout in a multi-station assembly using highly optimized tolerance inspired heuristic. *Applied Mathematical Modelling*, V. 40, p. 11-12, 2016.

Sigmae, Alfenas, v.8, n.2, p. 612-620, 2019.

64^a Reunião da Região Brasileira da Sociedade Internacional de Biometria (RBRAS).
18^o Simpósio de Estatística Aplicada à Experimentação Agronômica (SEAGRO).