

O TEMPO DE PEGA EM GELATINAS COMERCIAIS: UMA EXPERIÊNCIA DA DISCIPLINA DE QUIMIOMETRIA PARA ESTUDANTES DE GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

Thiago Lucena de Macedo Guedes, Maurity Sanderson de Lima Soares, Luiz Seixas das Neves e Kássio Michell Gomes de Lima*

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 59072-970 Natal – RN, Brasil

Cada conjunto de valores coletados deve ser colocado em uma coluna, de modo que sejam obtidas duas colunas de valores (uma para cada ensaio sob os mesmos níveis dos fatores). O vetor (coluna) resposta, **R**, é obtido pela média dos valores presentes nas duas colunas anteriormente mencionadas. Se as colunas de valores são G2:G9 e H2:H9, por exemplo, a média é obtida pelo comando '=MÉDIA(Gi:Hi)', onde a letra minúscula *i* representa um número arbitrário entre 2 e 9. Vale salientar que, no programa Excel, um vetor de *j* entradas, localizado na coluna A da planilha, é representado por Ai:A(i+j), onde os dois pontos separam as entradas inicial e final do vetor e Ai é a entrada inicial (localizada na coluna A e linha i). O comando '=MÉDIA(Gi:Hi)', assim como todos os comandos do programa, só precisa ser digitado uma vez (para a entrada I2, por exemplo) e o cálculo para um vetor por inteiro é obtido arrastando verticalmente o extremo inferior direito da entrada digitada para as demais entradas do vetor (Figura 1S).

f ₁ =MÉDIA(G2:H2)			
F	G	H	I
Tempo de cura (mins)	1º Tempo de cura (min)	2º Tempo de cura (min)	R - Resposta Média
14:15/11:15	14,25	11,25	12,750
08:45/10:30	8,75	10,50	9,625
15:00/15:15	15,00	15,25	15,125
10:45/11:45	10,75	11,75	11,250
11:15/10:00	11,25	10,00	10,625
11:45/12:45	11,75	12,75	12,250
18:30/18:00	18,50	18,00	18,250
13:00/13:15	13,00	13,25	13,125

Figura 1S

Após a obtenção do vetor resposta (I2:I9, na Figura 1S), o passo seguinte é a obtenção da matriz de coeficientes de contraste, **X**. Uma vez que a mesma é construída por convenção, sua inserção na planilha foi realizada por digitação (Figura 2S).

Como a transposta da matriz **X** é necessária para a realização dos cálculos, a matriz **X^t** deve ser calculada. Para a realização de operações

K	L	M	N	O	P	Q	R
Vetor Média	Vetor B	Vetor C	Vetor D	Interação BC	Interação BD	Interação CD	Vetor Interação BCD
1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
1	-1	1	1	-1	-1	1	-1
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
1	1	-1	1	-1	1	-1	-1
1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
1	1	1	-1	1	-1	-1	-1

Matriz de coeficientes de contraste - X

Figura 2S

*e-mail: kassio@ufrnet.br

matriciais, é necessário pressionar as teclas *shift+control* simultaneamente à tecla *enter* no instante de ativação do comando desejado. Sendo a matriz K2:R9, como na situação apresentada, a transposta é obtida pelo comando '=TRANSPOR(K2:R9)'. Nesse caso, uma tabela com um número de entradas 8:8 (8 colunas e 8 linhas) deve ser selecionada antes da utilização do comando, para só então inseri-lo na caixa de texto de inserção de função e pressionar simultaneamente *shift+control+enter*. A matriz transposta será obtida no espaço 8:8 selecionado. Vale salientar que, para uma matriz arbitrária Ai:Zj, que se estende da coluna A à Z e da linha i à j, a transposta pode ser obtida de forma análoga, desde que uma tabela de dimensões adequadas seja selecionada e o comando seja alterado para '=TRANSPOR(Ai:Zj)'. [na Figura 3S, o comando empregado foi '{=TRANSPOR('Data expose'!K2:R9)}', em decorrência da utilização de várias planilhas para os cálculos, sendo uma delas chamada 'Data expose'].

f ₁ (=TRANSPOR('Data expose'!K2:R9))								
A	B	C	D	E	F	G	H	
Transposta da matriz de coeficientes de contraste - X ^t								
1	1	1	1	1	1	1	1	
3	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
4	-1	1	-1	1	-1	1	-1	
5	1	1	-1	-1	1	1	-1	
6	1	-1	1	-1	-1	1	-1	
7	-1	-1	1	1	1	1	-1	
8	-1	1	1	-1	-1	1	1	
9	1	-1	-1	1	-1	1	1	

Figura 3S

A próxima matriz a ser calculada é o produto de **X^t** por **R**, chamado **p**. Mais uma vez, trata-se de uma operação matricial. Como **X^t** tem 8 linhas e **R** tem apenas uma coluna, o produto dessas suas matrizes, na ordem apresentada, tem dimensões 8:1 (8 linhas e 1 coluna). Uma tabela com essas dimensões deve ser selecionada (um vetor de 8 entradas) e o comando '=MATRIZ.MULT(A2:H9;I2:I9)' digitado, seguido de utilização simultânea das teclas *shift+control+enter*. A tabela A2:H9 representa a matriz I2:I9 representa o vetor resposta. Alguma confusão pode surgir com relação às figuras, uma vez que as colunas F, G e H estão preenchidas diferentemente entre as Figuras 1S e 3S; isso decorre da utilização de planilhas diferentes no trabalho original, mas a semântica dos comandos empregados permanece a mesma.

A partir da matriz produto, **p**, podem-se calcular os diversos efeitos desejados. A primeira entrada de **p** deve ser dividida por 2³ para a obtenção da médias das respostas. As demais entradas devem ser divididas por 2² para a obtenção dos efeitos, sendo a ordem dos efeitos (de cima para baixo) idêntica à ordem empregada

na construção de **X** (da esquerda para a direita): média, efeito de B, efeito de C, efeito de D, efeito da interação BC, efeito da interação BD, efeito da interação CD e efeito da interação BCD.

O próximo passo é o cálculo para a obtenção de $s_{(\text{efeito})}$, que permite obter o valor do limiar de significância para o parâmetro de Student desejado. O vetor diferença, **d**, deve ser calculado a partir das diferenças entre as duas respostas obtidas para cada conjunto de níveis. Sejam os vetores G2:G9 e H2:H9 da Figura 1S, o vetor diferença é obtido de forma similar ao vetor resposta, com a substituição do comando por '=Gi-Hi'. Se o vetor **d** estiver localizado na coluna S, sua transposta pode ser obtida por '=TRANSPOR(S2:S9)',

numa tabela de dimensões 1:8 (por exemplo, L11:S11). A variância de um ensaio é obtida por emprego do comando '=MATRIZ.MULT(S2:S9;L11:S11)/2*2^3'; como se trata de um escalar, não é preciso pressionar nenhuma tecla adicional além do *enter*. Dividindo o resultado por 4, se obtém a variância de um efeito, e o desvio padrão associado é calculado pelo comando '=RAIZ()'. Com os valores do parâmetro de Student desejados, obtidos a partir de uma tabela, limiares de significância para diferentes graus de confiança podem ser calculados, empregando um comando de produto: se $t=1,86$, então o limiar é dado por '=1,86*V1', onde V1 é a localização hipotética do desvio padrão de um efeito.