2
Fundamentos Teóricos – Revisão Bibliográfica

2.1.
Conceitos Básicos de Colorimetria

A colorimetria não é tão conhecida como seria de se esperar, apesar de tratar da cor, um assunto que faz parte do nosso cotidiano e se apresenta em praticamente todas as nossas atividades. É visível a surpresa das pessoas quando tomam conhecimento de que é possível se medir a cor. Pois bem, a cor não só é passível de medição. Com influência marcante na indústria têxtil, a colorimetria é responsável pela geração de milhares de empregos e pela movimentação de vultosas somas em dinheiro.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

2.1.1.
A Cor

A visão é um processo perceptivo. Segundo MCDONALD [1], o olho humano, que atua como um transdutor, capta as radiações eletromagnéticas de comprimento de onda na faixa de 380nm a 760nm e as transforma em impulsos nervosos. Os impulsos dirigem-se ao cérebro, onde são analisados e interpretados como luz.

Devido ao seu peculiar caráter abstrato, a cor pode ser definida de várias formas. Ela é uma característica de objetos que emitem, refletem ou transmitem radiação na faixa visível. É, também, uma sensação criada pela radiação e interpretada ou lembrada pelo homem e alguns seres vivos. Mais precisamente e em consonância com os objetivos dessa dissertação, podemos defini-la, de acordo com HIRSCHLER [2], nos níveis físico, psicofísico e psicométrico.

No nível físico, a luz é a distribuição espectral da radiação emitida, refletida ou transmitida. Nesse contexto, encontramos variáveis como a refletância (R_λ), a dispersão (S_λ) e a absorbância (K_λ), para um determinado valor de comprimento de onda (λ).

No nível psicofísico, a luz é a reação do olho humano provocada pela radiação. Aqui, encontramos os valores triestímulos X, Y e Z e os valores das coordenadas de cromaticidade *x*, *y* e *z*.

No nível psicométrico, ela é a melhor representação do espaço visual em números baseados em medição instrumental. Aqui surgem os sistemas de representação de cor, que traduzem por números as cores dos objetos. Como exemplo, temos as variáveis L*, a*, b* do sistema CIELAB.

Há, também, o nível visual ou perceptual, onde as cores são representadas por sistemas de ordenação e caracterizadas em termos de tonalidade, luminosidade e saturação. Como exemplos, temos o sistema Munsell, o sistema NCS e o sistema Ostwald.

2.1.2. Definições

A colorimetria é definida como a ciência da medição e da avaliação das cores, segundo ZWINKELS [3].

Um parâmetro freqüentemente utilizado em colorimetria é a refletância (R_λ), que representa a relação entre os raios de luz refletidos pelo objeto e os raios de luz refletidos por uma amostra de branco padrão, identicamente iluminados, para os diversos comprimentos de onda do espectro, como afirma MCDONALD [1]. Uma aproximação prática para a amostra de branco padrão é o sulfato de bário e o já obsoleto óxido de magnésio. Modernamente, utiliza-se o teflon (Spectralon, Halon)

Absorbância é a capacidade que tem o objeto de absorver os raios luminosos, segundo KUEHNI [4]. Normalmente, os raios absorvidos são transformados em calor. No caso de corantes fluorescentes, parte dos raios eletromagnéticos absorvidos é convertida em raios com comprimentos de onda maiores. O coeficiente de absorbância é representado por (K).

Ainda segundo KUEHNI [4], dispersão é a capacidade que tem o objeto de mudar a direção dos raios de luz. O coeficiente de dispersão é representado por (S).

Formulação de receita é a determinação da quantidade de corantes ou pigmentos necessária para se matizar (chegar a) uma determinada cor.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

2.1.3.
Fatores Fundamentais

Para que exista a cor, são necessários três fatores fundamentais: a fonte de luz, o objeto e o observador.

Da nossa experiência no cotidiano, percebemos que alguns objetos mudam de cor quando se muda a iluminação. Uma camisa azul, por exemplo, apresenta-se quase preta, quando submetida à iluminação de vapor de sódio. Também, como vimos, a cor é o resultado de uma avaliação subjetiva e, portanto, ela muda de acordo com quem está vendo o objeto. Por último, o próprio objeto, que reflete raios de luz de comprimentos de onda correspondentes à cor apresentada.

Esses fatores são muito importantes porque é neles que está a base da transformação das cores em números.

2.1.4.
Atributos Básicos da Cor

Os atributos básicos da cor são: tonalidade, luminosidade e croma.

Tonalidade é a qualidade da cor que descrevemos como azul, amarelo, vermelho etc. Este é o atributo de mais fácil entendimento porque é baseado na seqüência das cores do espectro.

A luminosidade é a qualidade da cor que descrevemos como claro ou escuro, relacionando-a a um cinza de similar luminosidade.

O croma é a qualidade que está relacionada com a quantidade de cor e descreve a extensão pela qual a cor difere de um cinza de mesma luminosidade.

A figura 1 ilustra as definições acima. Nela, vemos uma mesma tonalidade (vermelho), em três níveis de luminosidade, do claro ao escuro, com croma crescente ao longo de seis colunas.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

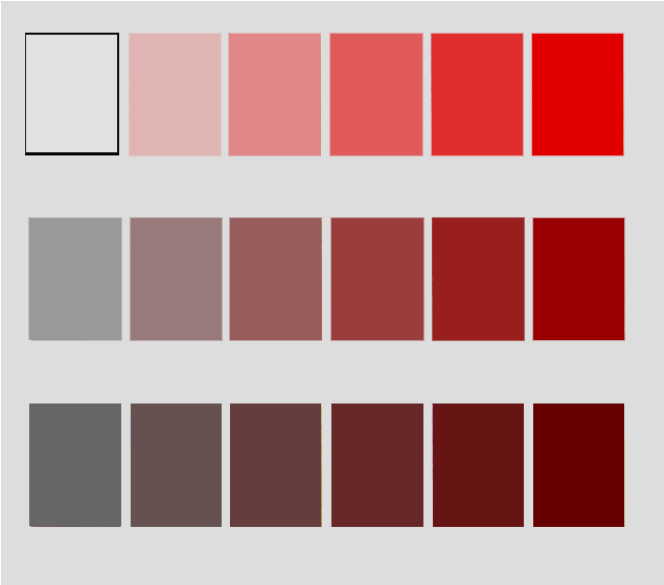

Figura 1 – Exemplo de atributos básicos da cor. Fonte: Hirschler (2003).

2.1.5. Sistemas de Ordenação de Cor

Desde meados do século XVIII, o homem já expressava a sua preocupação em construir um sistema de ordenação de cores, para ultrapassar as dificuldades, nos campos artístico e comercial, que essa ausência provocava. Mas, a dificuldade era muito grande. Como se deveriam agrupar cores diferentes? Quais seriam os critérios de agrupamento? Quantos grupos se poderiam criar? Seguindo o pensamento intuitivo, poder-se-ia criar a família de cores vermelhas, a família de cores azuis, a família de cores amarelas. E, também, a família de cores claras, a família de cores escuras, de cores vivas e de cores fracas.

Mais precisamente em 1766, Moses Harris divulgou o primeiro Sistema Natural de Cores, ordenado segundo as cores "prismáticas": vermelho, amarelo e azul; "intermediárias": laranja, verde e púrpura; e as "compostas": azeitona (laranja mais verde), ardósia (verde mais púrpura) e marrom (laranja mais púrpura).

A partir do início do século XIX, surgiram vários outros sistemas, dentre os quais se destaca o Sistema Munsell.

Este sistema, criado em 1905 pelo artista A. H. Munsell, consiste em uma coleção de páginas de tonalidade constante, com linhas de luminosidade constante e decrescentes para baixo e croma crescente da esquerda para a direita. Ele tem como principais características a estrutura lógica, a conformidade com a

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

percepção visual em termos de diferenças, uma notação não ligada ou limitada por amostras existentes e a possibilidade de seleção de combinações harmônicas. A figura 2 apresenta uma página do Sistema Munsell.

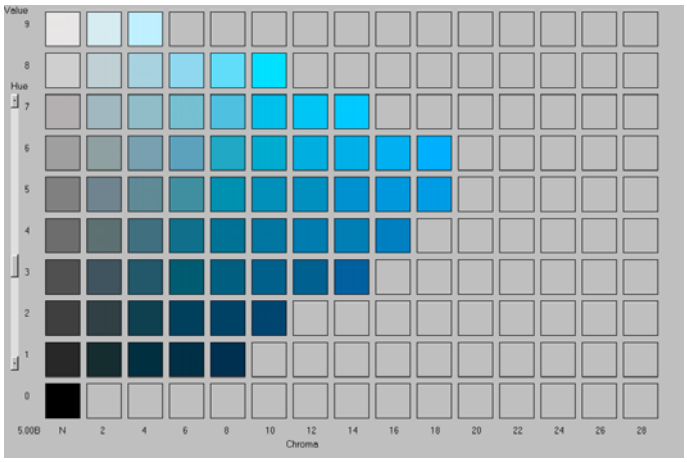

Figura 2 – Sistema Munsell. Página de tonalidade constante 5.0 B. Fonte: Software CMC da GretagMacbeth, www.gretagmacbeth.com.

O uso de sistemas de ordenação de cores para selecionar, medir e comparar cores é muito difundido. De modo geral, eles apresentam as seguintes vantagens:

a) Todos são de fácil entendimento, porque dispõem de amostras reais que podem ser vistas;
b) Todos são fáceis de utilizar. Em muitas circunstâncias, comparações lado a lado são feitas sem nenhuma instrumentação;
c) O número de espaçamento das amostras pode ser adaptado para diferentes aplicações e diferentes arranjos de amostras podem ser usados para diferentes propósitos; e
d) Muitos sistemas de ordenação de cor podem ser calibrados em termos de valores triestímulos CIE, que podem ser obtidos para cores desejadas.

As desvantagens dos sistemas de ordenação de cores são as seguintes:

a) Não há apenas um sistema e não é fácil transferir os resultados de um sistema para outro;
b) Há espaço vazio entres duas amostras consecutivas, o que provoca a necessidade de interpolação na matização de cores e na determinação das suas especificações;

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

c) A comparação visual entre cores e amostras é válida se for feita usando-se um iluminante com a mesma distribuição espectral e mesmo arranjo geométrico, como foi feito para a escolha original e a calibração adotada para o sistema;
d) Diferentes observadores podem acusar pequenas diferenças na mesma cor;
e) Pode haver diferenças entre as amostras que estão sendo efetivamente utilizadas e aquelas que sofreram calibração;
f) Algumas cores podem ficar de fora das amostras disponíveis do sistema; e
g) Muitos sistemas de ordenação de cor não podem ser utilizados para fontes luminosas, a menos que um equipamento auxiliar seja empregado.

2.1.6. Combinação de Luzes ou Pigmentos e Filtros Coloridos

A combinação de luzes coloridas acontece de duas formas diferentes:

- Misturas aditivas de cores; e
- Misturas subtrativas de cores.

As cores primárias da mistura aditiva são o vermelho, o verde e o azul. Esse tipo de mistura acontece, freqüentemente, quando misturamos luzes projetadas. A figura 3 apresenta o resultado das misturas aditivas de luzes coloridas.

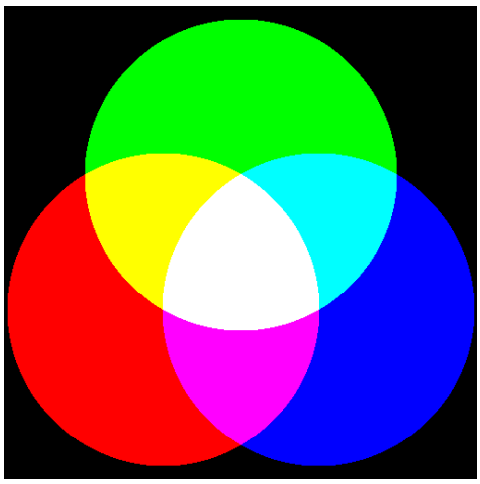

Figura 3 – Mistura aditiva de cores. Fonte: Hirschler (2002).

As cores primárias da mistura subtrativa são o amarelo, o magenta e o ciano. Esse tipo de mistura ocorre, freqüentemente, quando superpomos filtros ou quando efetuamos misturas de tintas (pigmentos). Nesse processo, subtrai-se do branco as cores primárias RGB (vermelho, verde e azul).

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

A figura 4 apresenta o resultado da mistura subtrativa de cores.

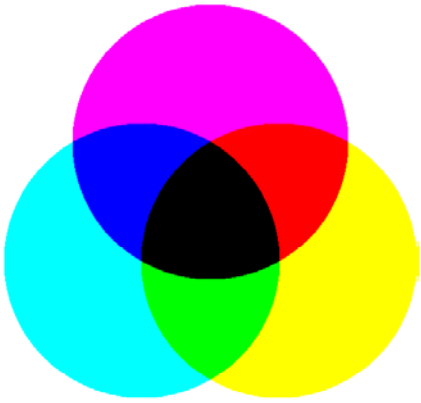

Figura 4 – Mistura subtrativa de cores. Fonte: Hirschler (2002).

2.1.7. O Espectrofotômetro

O espectrofotômetro é um aparelho que apresenta a curva de refletância de uma amostra em função do comprimento de onda. O seu princípio de funcionamento, ilustrado na figura 5, é: uma luz policromática e difusa ilumina a amostra e passa por um prisma ou por uma grade e sofre uma difração. Os componentes monocromáticos, então, atingem detetores espectrais, cada um localizado no ponto correspondente ao seu comprimento de onda. Cada um desses detetores manda, para um processador de sinais, o sinal correspondente à energia relativa recebida e o fator de refletância é, então, registrado e apresentado em forma de gráfico.

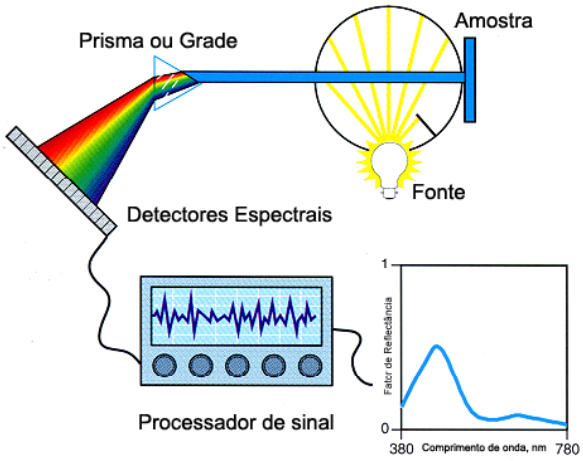

Figura 5 - Diagrama esquemático do espectrofotômetro. Fonte: Berns (2000).

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

Um fator importante na análise de amostras é a geometria do instrumento. Os ângulos pelos quais a amostra é iluminada e observada podem afetar a sua cor. A CIE recomenda quatro diferentes geometrias de instrumentos para a medição de cor. Elas são apresentadas na figura 6.

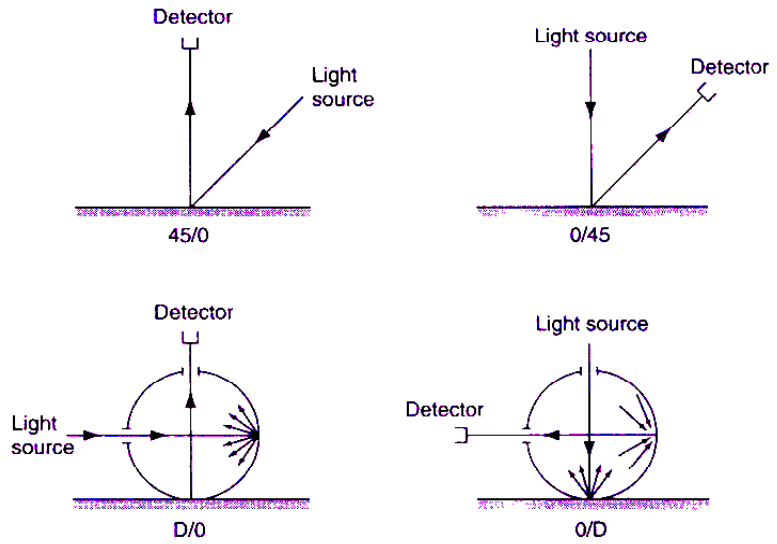

Figura 6 – Geometrias de iluminação e de observação recomendadas pela CIE. Fonte: Judd-Wyszecki.

Na geometria 45/0 (o primeiro algarismo refere-se à iluminação) a amostra é iluminada por um ou mais feixes de luz que fazem um ângulo de $45^o \pm 2^o$, partindo da normal até o plano que contém a amostra. O ângulo entre a direção da visada e a normal ao plano da amostra não pode ser maior que 10^o. O ângulo entre o eixo e qualquer raio do feixe de luz não pode exceder 8^o. Essa mesma restrição deve ser observada no feixe de visada.

Na geometria 0/45 a amostra é iluminada por um feixe cujo eixo não excede em 10^o a normal do plano que a contém. A amostra é vista de um ângulo de $45^o \pm 2^o$ a partir da normal. O ângulo entre o eixo do feixe de luz e qualquer raio de luz não pode ser maior que 8^o. Essa mesma restrição deve ser observada no feixe de visada.

Na geometria Difuso/0^o, a amostra é iluminada de modo difuso por uma esfera de integração. O ângulo entre a normal ao plano da amostra e o eixo do feixe de visada não pode exceder 10^o. A esfera de integração deve ter um diâmetro tal que a área total das suas portas não exceda 10% da sua área de reflexão interna.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

Na geometria 0^o/Difuso, a amostra é iluminada por um feixe cujo eixo não excede em 10^o da normal ao plano que a contém. O fluxo refletido é coletado por uma esfera de integração. O ângulo entre o eixo e qualquer raio do feixe de iluminação não pode exceder de 5^o. A esfera de integração deve ser de um diâmetro tal que a área total de suas portas não exceda em 10% a sua área interna de reflexão.

A tecnologia altamente desenvolvida e aliada à informática permitiu a criação de instrumentos que possibilitam a aplicação prática desses fundamentos teóricos com grande repetitividade. A figura 7 apresenta o diagrama de um espectrofotômetro real.

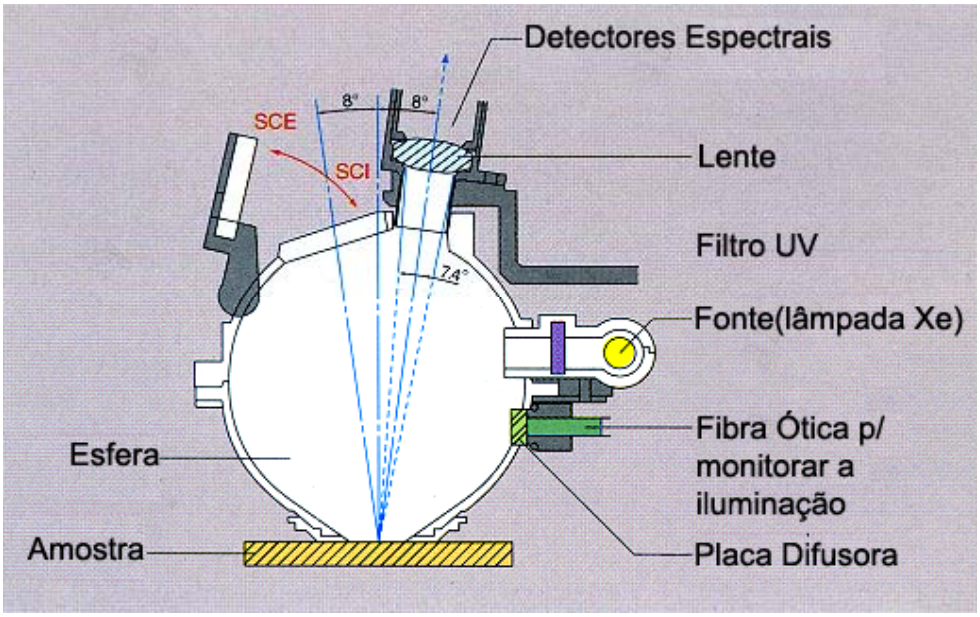

Figura 7 – Diagrama do espectrofotômetro MINOLTA CM-3200d. Fonte: Folheto Minolta www.minolta.com.

O resultado da utilização de um espectrofotômetro é a curva de refletância do material sob análise. A figura 8 apresenta exemplos de curvas de refletância de amostras amarela, vermelha e azul.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

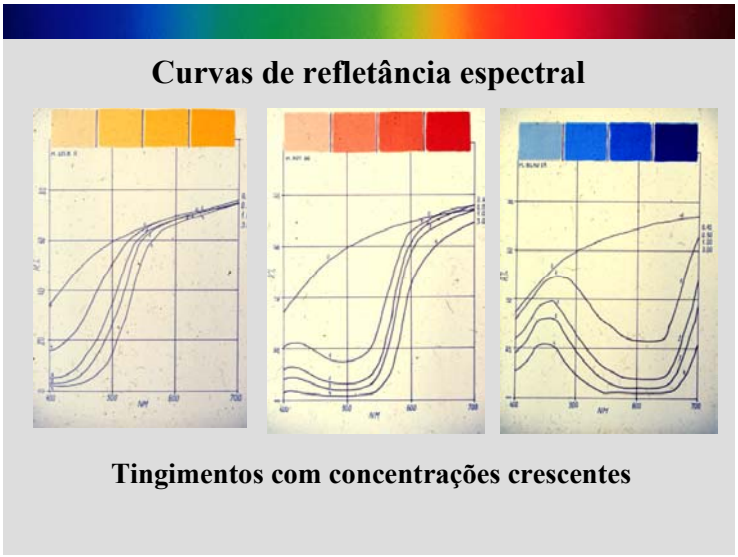

Figura 8 - Curvas de refletância espectral de amostras amarela, vermelha e azul. Fonte: Hirschler (2003).

2.1.8. O Observador Padrão

Como a cor depende do observador, tornou-se necessário padronizar este atributo. Em 1931, criou-se o observador padrão de 2° e, em 1964, criou-se o observador de 10°, como mostram as figuras 9 e 10. Mas, o que significa observador padrão? Significa a definição da sensibilidade do olho humano com a mistura das três cores primárias. Assim sendo, esta definição está embutida nas três curvas apresentadas na figura 11. A padronização do campo visual do observador significa a escolha de duas áreas distintas na retina: a parte central (fóvea), entre um e quatro graus e a parte geral, com campo maior que quatro graus. Para materializá-lo, torna-se constante a distância (d, na figura 9) do olho ao plano e toma-se um ângulo de 2^{o} ou de 10°. A área definida pela base do cone assim formado é o campo visual do observador padrão.

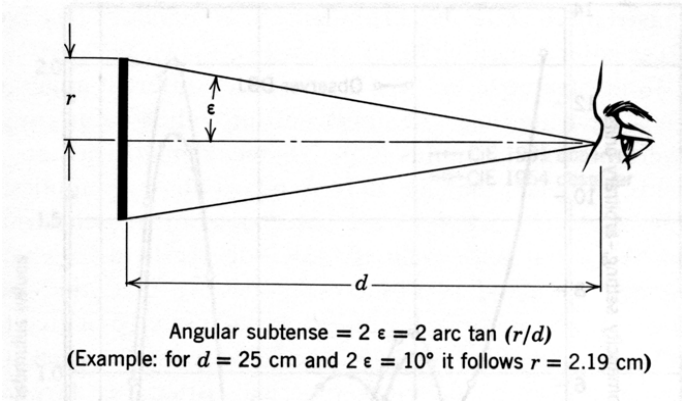

Figura 9 - O observador padrão. Fonte: Judd-Wyszecki.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

A figura 10 mostra os campos visuais para diferentes ângulos.

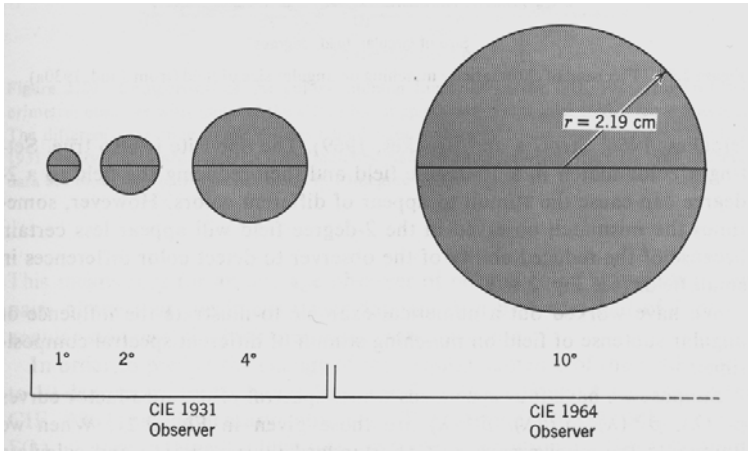

Figura 10 - Campos visuais dos observadores. Fonte: Judd-Wyszecki.

2.1.9.
Valores Espectrais Triestímulos

Como resultado de inúmeros experimentos e após milhares de observações, os pesquisadores chegaram aos valores espectrais triestímulos, obtidos com a padronização do observador, cujos gráficos podem ser vistos na figura 11.

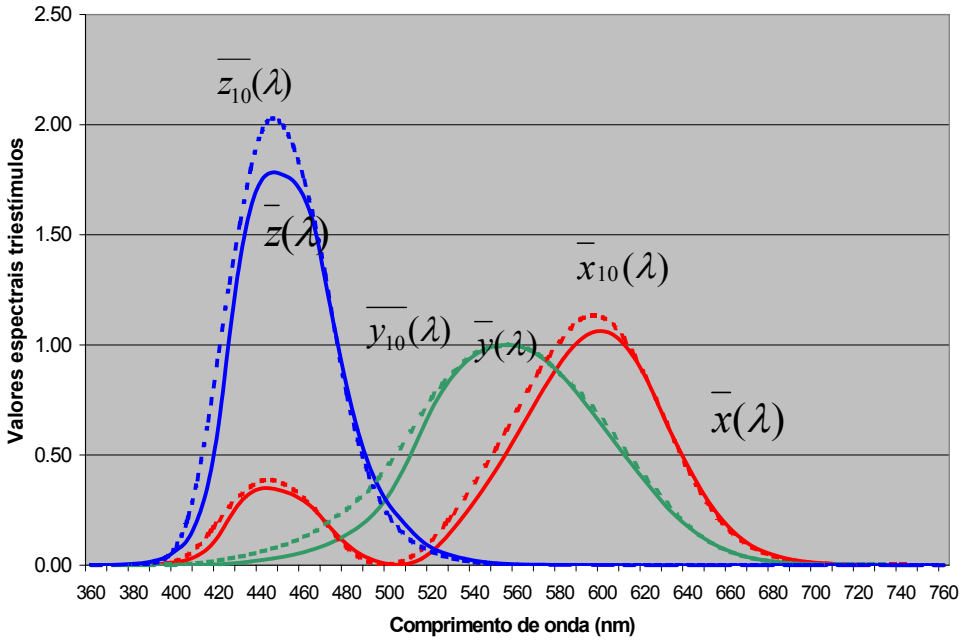

Figura 11 - Valores espectrais triestímulos. Fonte: Dados da Norma CIE/ISO.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

2.1.10. O Iluminante Padrão

Quando o sistema internacional de medição e especificação de cor foi fundado pela CIE, em 1931, percebeu-se que era fundamental a definição de fontes de iluminação padronizadas. Três fontes foram adotadas (iluminantes padrão CIE A, B e C) como aproximações de três condições comuns de iluminação. Embora essas fontes tivessem sido definidas de modo a serem fisicamente reproduzíveis, aproveitou-se a oportunidade para se definir, também, um conjunto de valores numéricos representativos da SPD do iluminante padrão, em intervalos de 10nm, ao longo do espectro visível (de 380 a 720nm).

É importante observar a diferença entre iluminantes padrões, que são definidos em termos de SPD e fontes padrões, que são definidas como emissoras de energia radiante e que têm SPD próxima daquelas dos seus correspondentes iluminantes.

O iluminante padrão A foi criado para representar a iluminação interna artificial (lâmpada de tungstênio). Sua luz é relativamente amarelada, deficiente em azul e rica em comprimentos de onda vermelhos.

O iluminante padrão B foi criado para representar a luz do dia junto com a luz do sol. Do iluminante padrão C esperava-se representar a luz do dia média. Ambos são largamente substituídos pelo iluminante D, introduzido posteriormente.

Estudos sobre a luz do dia e seu espectro, nas décadas de 1950 e 1960, confirmaram que os iluminantes B e C tinham pouca intensidade na região de raios ultravioleta (UV), para serem utilizados na avaliação de agentes causadores de fluorescência. Os estudos confirmaram, também, que suas coordenadas de cor divergiam das coordenadas da luz do dia natural, como se supunha inicialmente.

Em 1963, a CIE encomendou um novo iluminante padrão (o iluminante D), definindo sua distribuição espectral sobre o UV, a luz visível e as proximidades do infravermelho, para representar as várias fases da luz do dia. O iluminante D_{65} foi, então, aceito como um iluminante padrão. Segundo MCDONALD [1], sua SPD é uma boa aproximação da luz do dia.

A figura 12 apresenta quatro tipos diferentes de iluminantes.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

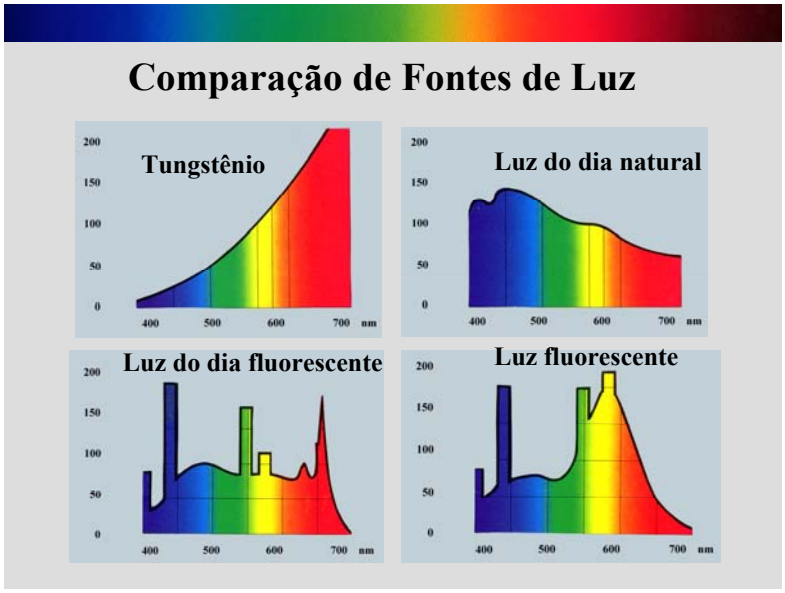

Figura 12 - Diferentes tipos de iluminantes. Fonte: Folheto GretagMacBeth.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

2.1.11. As Cores em Números – O Espaço CIELAB

Os estudiosos perceberam que, padronizando o observador e o iluminante, seria possível, pela composição desses parâmetros com a curva de refletância do objeto, quantificar a cor. Assim, surgiu o sistema CIE de colorimetria, cuja formação dos seus parâmetros X, Y e Z é esquematicamente apresentada na figura 13.

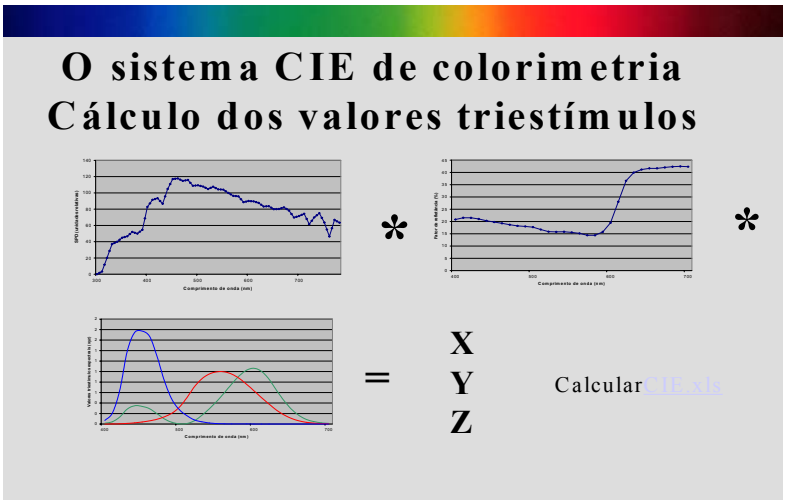

Figura 13 - Valores triestímulos **X**, **Y** e **Z.** Fonte: Hirschler (2003).

O cálculo dos valores triestímulos é feito por meio das seguintes fórmulas:

$$X = k\sum S_\lambda R_\lambda \bar{x}_\lambda \Delta_\lambda \quad (1)$$

$$Y = k\sum S_\lambda R_\lambda \bar{y}_\lambda \Delta_\lambda \quad (2)$$

$$Z = k\sum S_\lambda R_\lambda \bar{z}_\lambda \Delta_\lambda \quad (3)$$

$$k = \frac{100}{\sum_\lambda S_\lambda \bar{y}_\lambda \Delta_\lambda} \quad (4)$$

onde

X, Y e Z	são os valores triestímulos;
S_λ	é a SPD do iluminante padrão*;
R_λ	é o fator de refletância;
$\bar{x}_\lambda, \bar{y}_\lambda, \bar{z}_\lambda$	são as funções triestímulos espectrais (observador padrão);
Δ_λ	é o intervalo de comprimento de onda; e
k	é o fator de normalização (Y=100 para o branco ideal, para qualquer combinação de iluminante/observador).

É difícil relacionar os valores triestímulos de uma amostra com a sua cor. Uma das razões é que a cor não depende somente dos valores triestímulos. Ela depende, também, de cores circunjacentes e do estado de adaptação dos olhos. Mesmo desprezando esses fatores, a natureza tridimensional da cor provoca um tal grau de dificuldade que é melhor simplificá-la, considerando-se apenas uma ou duas dimensões de cada vez. Cedo concluiu-se que a escolha dos fundamentos do sistema CIE deveria prever algumas facilidades que levassem a resultados facilmente tratáveis na conclusão do sistema. Uma das conseqüências foi que o valor triestímulo Y representa a luminosidade da amostra.

Para representar as outras duas dimensões da cor, emprega-se a definição de coordenadas de cromaticidade (*x*, *y* e *z*) e faz-se o gráfico de *y* versus *x*.

Os valores das coordenadas de cromaticidade em função dos valores triestímulos são:

* Infelizmente, na literatura, há duplicidade do uso de alguns símbolos. Por exemplo, $S_\square$ é usado também como o símbolo do coeficiente de dispersão e k como o símbolo do coeficiente unitário de absorbância. É preciso tomar bastante cuidado para evitar confusão.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

$$x = \frac{X}{X+Y+Z} \qquad y = \frac{Y}{X+Y+Z} \qquad z = \frac{Z}{X+Y+Z} \tag{5}$$

Nas equações acima vemos que $x+y+z=1$ para todas as cores. Por essa razão, é necessário ter apenas duas das coordenadas de cromaticidade para se construir um gráfico bidimensional. Pode-se observar também que X e Z podem ser facilmente calculados a partir de x, y e Y. Conseqüentemente, tem-se uma especificação aceitável. Considerações dos valores de Y e o gráfico y versus x devem cobrir todas as possíveis cores. O gráfico assim construído é chamado de Diagrama de Cromaticidade e um exemplo é mostrado na figura 14.

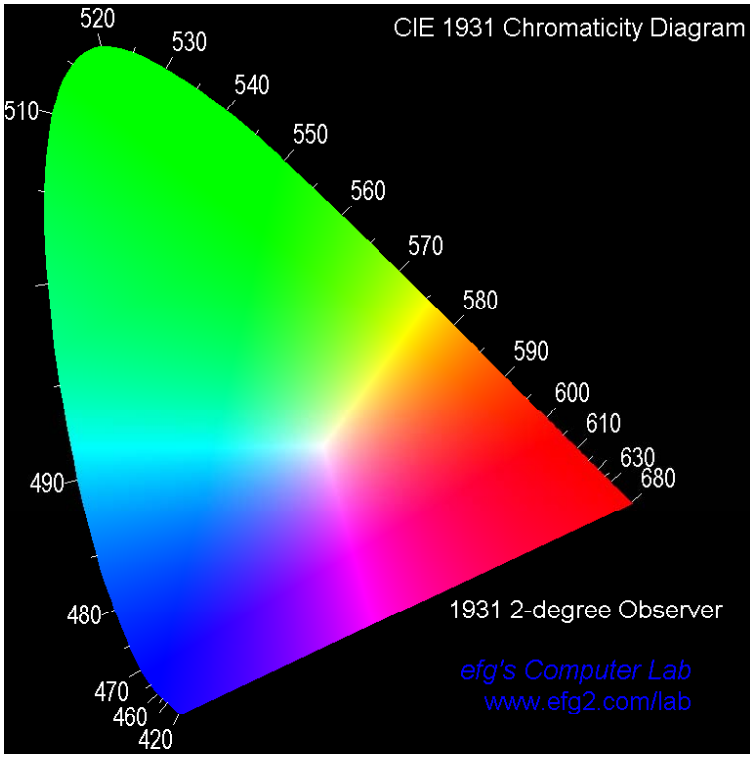

Figura 14 - Diagrama de cromaticidade. Fonte: Software da efg's Computer Lab. www.efg2.com/lab.

Esse espaço de cores apresenta um inconveniente: a distâncias iguais não correspondem diferenças iguais de cores. Se o diagrama fosse visualmente uniforme, as linhas de tonalidade constante seriam retas e as cores de croma constante formariam círculos concêntricos, o que não ocorre na prática. Para

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

superar essas dificuldades, foi criado o espaço CIELAB, cuja disposição é apresentada na figura 15.

Da figura, observamos que o espaço CIELAB é composto de três eixos. O vertical, que representa a luminosidade e varia de 100 (branco) a zero (preto). O eixo a varia de +a (vermelho) a –a (verde), assumindo valores para cores de objetos reais de, aproximadamente, –170 a +110. O eixo b varia de +b (amarelo) a –b (azul), assumindo valores para cores de objetos reais de cerca de –110 a +160.

A definição exata das coordenadas CIELAB em função dos valores triestímulos é a seguinte:

$$L^* = 116\left[f\left(Y/Y_n\right) - 16/116\right] \tag{6}$$

$$a^* = 500\left[f\left(X/X_n\right) - f\left(Y/Y_n\right)\right] \tag{7}$$

$$b^* = 200\left[f\left(Y/Y_n\right) - f\left(Z/Z_n\right)\right] \tag{8}$$

onde:

$$f\left(X/X_n\right) = \left(X/X_n\right)^{1/3} \text{ para } X/X_n > 0{,}008856 \tag{9}$$
$$\text{ou } 7{,}787\left(X/X_n\right) + 16/116\text{, caso contrário}$$

$$f\left(Y/Y_n\right) = \left(Y/Y_n\right)^{1/3} \text{ para } Y/Y_n > 0{,}008856 \tag{10}$$
$$\text{ou } 7{,}787\left(Y/Y_n\right) + 16/116\text{, caso contrário}$$

$$f\left(Z/Z_n\right) = \left(Z/Z_n\right)^{1/3} \text{ para } Z/Z_n > 0{,}008856 \tag{11}$$
$$\text{ou } 7{,}787\left(Z/Z_n\right) + 16/116\text{, caso contrário}$$

A diferença de cor entre dois estímulos – do padrão e da amostra – pode ser quantificada no diagrama L* a* b*.

Sabendo-se que:

$$\Delta L^* = L^*_{amostra} - L^*_{padrão} \tag{12}$$

$$\Delta a^* = a^*_{amostra} - a^*_{padrão} \tag{13}$$

$$\Delta b^* = b^*_{amostra} - b^*_{padrão} \tag{14}$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

A distância entre as duas posições é definida pela fórmula:

$$\Delta E^{*}_{ab} = \sqrt{(\Delta L^{*})^2 + (\Delta a^{*})^2 + (\Delta b^{*})^2} \qquad (15)$$

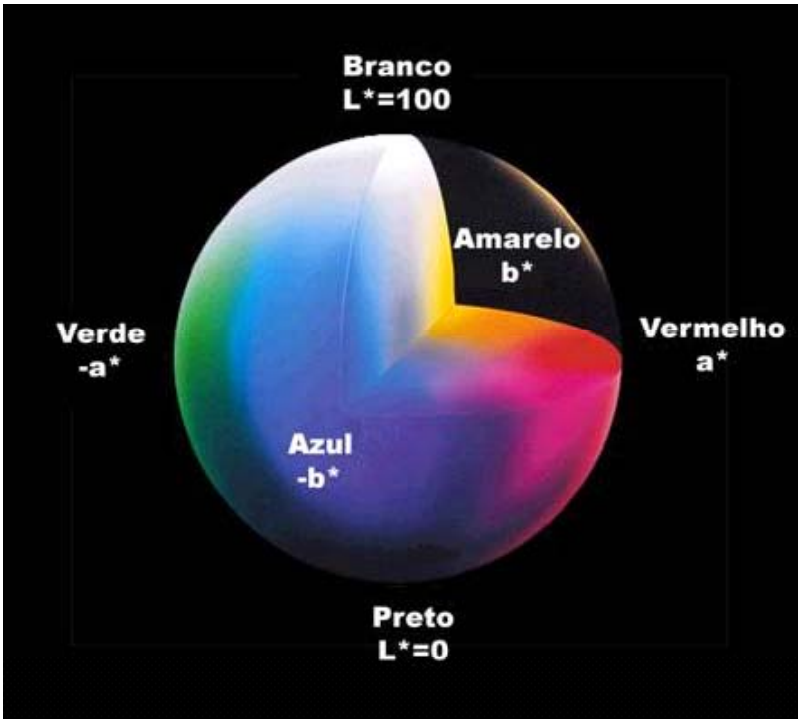

Figura 15- O espaço CIELAB. Fonte: Folheto Minolta. www.minolta.com.

2.1.12. Tolerâncias Industriais

A tolerância industrial, que surge da comparação entre a cor padrão, ou seja, aquela que se deseja reproduzir, e a cor obtida pela tentativa de reprodução, pode ser definida por meio de um elipsóide, cujos eixos são os valores de Δa^{*} e Δb^{*}. Como a representação é feita no plano, o eixo da luminosidade é apresentado em separado, aparecendo como uma barra vertical, ao lado da elipse. A figura 16 mostra um exemplo de elipse de tolerância.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

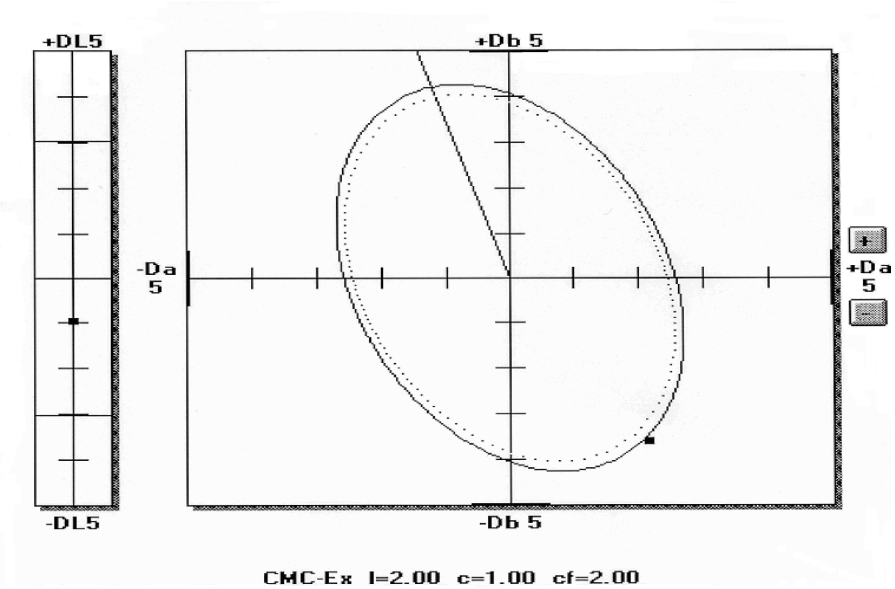

Figura 16 - Elipse de tolerância. Fonte: Hirschler (2003).

O tamanho da elipse é definido pelo fator comercial. Se ela for muito grande, o produto terá um preço baixo, mas as reclamações dos clientes serão muitas. Por outro lado, se ela for muito pequena, teremos um produto de alta qualidade, porém com um alto custo. A figura 17 ilustra duas situações decorrentes da submissão de amostras ao espectrofotômetro.

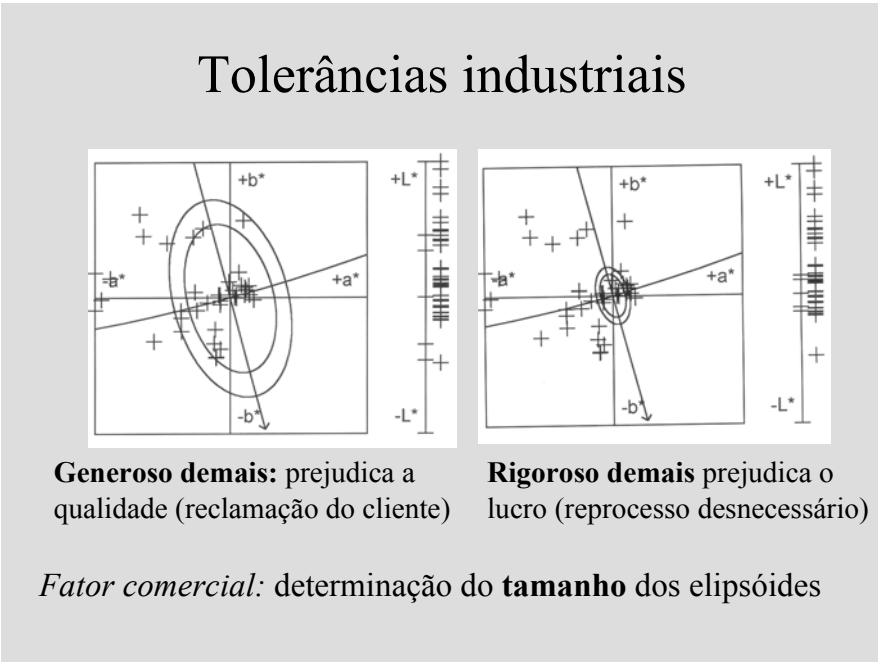

Figura 17 - Determinação do tamanho dos elipsóides da tolerância industrial. Fonte: Hirschler (2003).

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

2.2.
Interação da Luz com Materiais Opacos

2.2.1.
A Teoria de Kubelka-Munk

A cor de um material opaco é função de suas propriedades de absorção e de dispersão da luz visível. Enquanto a dispersão modifica a direção dos raios luminosos, a absorção converte-os em calor. Uma relativamente simples teoria foi desenvolvida, em 1939, por KUBELKA, MUNK [5]. A figura 18 ilustra a explicação que é dada por KUEHNI [4].

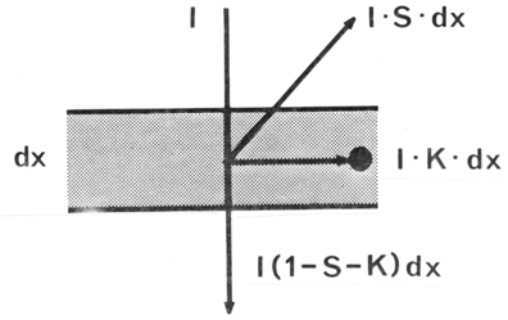

Figura 18 – O modelo simplificado de Kubelka e Munk. Fonte: Kuehni (1975).

O feixe incidente de luz I penetra em uma camada colorida de material opaco, de espessura *dx*. As frações parcialmente absorvidas (*I . K . dx*), parcialmente dispersas (*I . S . dx*) e parcialmente transmitidas [*I*(*1-K-S).dx*] são proporcionais ao fluxo I e à espessura da camada *dx*. O fator de refletância espectral R de um filme de espessura *x* colocado sobre um fundo de refletância R_G é dado pela seguinte equação geral:

$$R = \frac{1 - R_G\left(a - b\coth bSx\right)}{a - R_G + b\coth bSx} \tag{16}$$

onde:

R_G é o fator de refletância espetral do fundo;

K é o coeficiente de absorção;

S é o coeficiente de dispersão;

$\coth bSx$ é a cotangente hiperbólica de bSx ; e

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

$$a = 1 + K/S \tag{17}$$

$$b = \left(a^2 - 1\right)^{1/2} \tag{18}$$

Para uma camada de espessura "infinita", isto é, aquela em que toda a luz é refletida ou absorvida, temos:

$$R_\infty = 1 + (K/S) - \left[(K/S)^2 + 2K/S\right]^{1/2} \tag{19}$$

Resolvendo para K/S, temos a equação familiar de Kubelka-Munk

$$K/S = \left(1 - R^2\right)/2R \tag{20}$$

ALLEN, GOLDFINGER [6] criticaram o modelo de Kubelka e Munk, alegando que ele não se ajusta bem a substratos têxteis, porque é baseado em cálculos aplicados a camadas contínuas (pigmento em um veículo de resina), o que não é o caso de substratos têxteis. No entanto, não se sabe de aplicações práticas do modelo Allen-Goldfinger. Todos os softwares atuais de formulação de receitas usam a teoria Kubelka e Munk.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

2.2.2. Refletância e Concentração de Substratos Têxteis

Segundo KUEHNI [4], o valor de (K/S) e, conseqüentemente, da refletância, depende, além do substrato, da concentração dos corantes. Nesse aspecto, há duas abordagens para a formulação de cores:

A matização dos valores triestímulos

$$(X_S, Y_S, Z_S) = (X_M, Y_M, Z_M) \tag{21}$$

onde X_S, Y_S, Z_S são os valores triestímulos do padrão e X_M, Y_M, Z_M são os valores a serem matizados, e:

A matização espectrofotométrica do tipo

$$R_i^S = R_i^M \tag{22}$$

onde R_i^S é o fator de refletância do padrão no comprimento de onda *i* e R_i^M é o fator de refletância do matiz no comprimento de onda *i*.

A relação entre os valores triestímulos e as concentrações dos corantes para uma fórmula com três corantes é a seguinte:

$$\begin{aligned} X_{STD} &= G_1(c_1, c_2, c_3) \\ Y_{STD} &= G_2(c_1, c_2, c_3) \\ Z_{STD} &= G_3(c_1, c_2, c_3) \end{aligned} \tag{23}$$

onde $X_{STD}, Y_{STD}, Z_{STD}$ são os valores triestímulos do padrão, G_1, G_2, G_3 são funções não-lineares de concentração dos corantes e c_1, c_2, c_3 são as concentrações dos corantes 1, 2 e 3.

Se essas equações fossem lineares, elas poderiam ser resolvidas para a concentração desconhecida do corante c_i, mas isso não ocorre. As dificuldades que se apresentam são muitas e a resolução com o auxílio de computador é melhorada com um método interativo. A interação melhora a solução em vários degraus, até se chegar ao limite desejado. As concentrações dos corantes são adequadamente ajustadas até que os valores triestímulos calculados para aquelas concentrações estejam em conformidade com os valores triestímulos dos padrões. O critério para se encerrar a interação é, por exemplo, a diferença calculada de cor ou a mudança das concentrações das soluções iniciais.

Em um determinado comprimento de onda, por outro lado, a absorção espectral (ou absorção e dispersão) de um raio de luz incidente sobre um objeto colorido pode ser expressa pelas seguintes fórmulas:
Uma constante (aplica-se no caso de substratos têxteis ou papel, onde o corante não tem dispersão (S_i=0)) :

$$F(R) = F_{SUB} + \sum_{i=1}^{m} b_i c_i \tag{24}$$

Duas constantes:

$$F(R) = \frac{K_{SUB} + \sum K_i c_i}{S_{SUB} + \sum S_i c_i} \tag{25}$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

onde:

$F(R)$ é o valor da função interface de correção aditiva (K/S)

F_{SUB} é o valor da função aditiva do substrato

b_i é o valor específico da função aditiva do corante *i*, isto é, o valor K/S de um corante em um dado comprimento de onda dividido pela sua concentração:

$$b = \frac{(K/S)_i - (K/S)_{SUB}}{c_i} \quad (26)$$

c_i é a concentração do corante *i*

m é o número de corantes na fórmula

K_{SUB} é a constante de absorção espectral do substrato

S_{SUB} é a constante de dispersão espectral do substrato

K_i é a constante de absorção espectral do corante *i*

S_i é a constante de dispersão espectral do corante *i*

A equação se aplica a todo comprimento de onda. Um sistema de 16 equações simultâneas pode ser formado, no qual as concentrações dos corantes são desconhecidas. Essas equações podem ser resolvidas pela técnica dos mínimos quadrados e as concentrações dos corantes são encontradas de modo que as diferenças entre os fatores de refletância padrão e o matiz são minimizadas.

2.3. Incerteza de Medição e Repetitividade de Tingimentos Têxteis

Além das incertezas do equipamento de medição, existem as incertezas provenientes do processo têxtil. Dentre várias, destacam-se a temperatura, o peso do substrato e a concentração de corantes e produtos químicos. Essa concentração de corantes nos leva à formulação de receitas, que trata de matização de cores, combinação de corantes e cálculo de receitas, provocando a seguinte pergunta: qual é o controle necessário dos corantes para que o resultado fique dentro da tolerância?

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

O efeito da correção do processo, da receita ou de ambos é levar os resultados das medições para dentro da elipse de tolerância, sem alterar-lhe o tamanho.

A repetitividade de tingimentos têxteis foi estudada e apresentada por SUMNER [7]. Esse artigo apresenta os efeitos de variações aleatórias em todo o processo de tingimento, considerados em termos de diferenças visuais entre o padrão e a amostra e a chance da amostra situar-se dentro do limite de tolerância na primeira tentativa.

Para se produzir a fibra têxtil e convertê-la em um artigo vendável, é necessário um grande esforço em termos de processo e de tratamento. Há um grande número de fatores que podem determinar a aceitabilidade do produto final. Se todos os processos fossem exatamente formulados e precisamente conduzidos, o produto final seria perfeitamente reproduzível e perfeitamente correto. Contudo, isso nunca acontece, porque cada processo é submetido a erros associados aos equipamentos e técnicas usadas e, conseqüentemente, o produto final terá sempre uma variação em qualidade. A experiência de alguns funcionários mais antigos conduz a qualidade do produto final a um nível tal que ele termina se encaixando nos limites de tolerância. Porém, isso não significa que cada estágio não deve ser cuidadosamente conduzido porque, mesmo estando cada um dentro de limites aceitáveis de tolerância, em um processo multiestágio como a manufatura e a conversão de materiais têxteis, o resultado final pode ser totalmente inaceitável, pela adição dos efeitos dos erros de cada estágio.

Em qualquer estágio do processo, os erros podem ser divididos em dois grupos: aqueles que não estão sob o controle exercido sobre o particular processo e os que estão. Com relação ao processo de tingimento, os primeiros são fatores tais como a qualidade e o grau de preparação do substrato e a reprodutibilidade e a heterogeneidade dos corantes disponíveis enquanto que os últimos são todas as variáveis diretamente associadas à aplicação do corante. Ainda, os erros de operação do processo de tingimento podem ser divididos em dois grupos. Primeiro, o dos erros sistemáticos. São erros persistentes, de magnitude constante, que não resultam em baixa reprodutibilidade mas provocam uma tendência no resultado do processo. Exemplo típico é um termômetro mal posicionado que sempre fornece *t* graus a menos. O segundo grupo é o dos erros aleatórios, que produzem os maiores problemas associados à baixa reprodutibilidade em

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

tingimentos. Eles ocorrem de maneira imprevista, por grande variedade de razões. Podem ser positivos ou negativos e não produzem tendência no resultado final. São difíceis de isolar porque não é fácil determinar qual é o resultado correto, por comparação. Para um grande número de repetições, ele tende a zero, mas isso não ajuda o colorista, porque a avaliação é efetuada sobre cada tingimento realizado.

Com uma receita bem formulada, o efeito visual de qualquer erro será notado quando a primeira amostra for preparada. A tarefa do colorista será, então, fazer ajustes ou reprocessar. É economicamente desejável que a quantidade de correções seja mínima, o que significa que o processo deve ser bem controlado a fim de produzir a maior proporção possível de primeiras amostras aceitáveis.

O trabalho de Sumner foi conduzido por meio do desenvolvimento de um procedimento experimental de modo que a máxima exatidão e a máxima reprodutibilidade pudessem ser encontradas. A seguir, foi introduzido erro em uma variável de cada vez e o efeito final no tingimento foi medido e registrado. Todo o cuidado foi tomado para que não fossem cometidos erros de procedimento ou de material que provocassem distorções no resultado final. O estudo foi realizado em dois tipos de tingimento: o reativo e o disperso.

Para o tingimento reativo, foram estudadas as seguintes variáveis: concentração de cloreto de sódio, concentração de carbonato de sódio, tempo de tingimento antes da adição do álcali, tempo de tingimento depois da adição do álcali, temperatura do tingimento antes da adição do álcali, temperatura do tingimento depois da adição do álcali, peso do tecido, volume do banho e concentração dos corantes.

Para o tingimento disperso, foram estudadas as seguintes variáveis: concentração de ácido acético, concentração de matexil DA-AC, concentração de silcolax 501, tempo de tingimento, temperatura de tingimento, peso do tecido, volume do banho e concentração dos corantes.

Os resultados foram computados em coordenadas do sistema de cor ANLAB, cujo símbolo é ΔE_{ANLAB} e que fornece números parecidos com os do sistema de cor CIELAB.

$$\Delta E_{ANLAB} = \sqrt{(\Delta H)^2 + (\Delta B)^2 + (\Delta S)^2} \qquad (27)$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

onde ΔH, ΔB e ΔS são as diferenças em tonalidade ("hue"), luminosidade ("brightness") e croma ("saturation") no sistema ANLAB.

Antes do estudo das variações deliberadas das condições de tingimento, foi constatado que as técnicas experimentais a serem usadas realmente levariam a resultados de reprodutibilidade. Se não, quão exata seria a reprodutibilidade a ser efetivamente obtida.

Após a realização dos banhos programados, concluiu-se que o valor mais provável de erro de reprodutibilidade foi de 0,27 unidades ANLAB. Observou-se que uma variação de ± 10 % na concentração do corante provocava uma variação de 1,8 unidades ANLAB e que esse valor de ΔE pode ser associado a uma variação total de reprodutibilidade de $\pm 1{,}5\%$, admitindo-se que o valor de ΔE é uma função linear da exatidão experimental.

Considerando-se o cuidado e esmero com que a técnica experimental foi planejada e conduzida, o valor de $\pm 1{,}5\%$ pode ser considerado exagerado. Fazendo uma análise mais detalhada dos resultados dos banhos e computando a incerteza total como na fórmula a seguir,

$$\text{Incerteza total} = \sqrt{\sum \left(componentes_de_incerteza\right)^2} \qquad (28)$$

encontra-se o valor de $\pm 0{,}19$ unidades ANLAB. Este valor pode ser reduzido a aproximadamente $\pm 1\%$ e é, presumivelmente, o resultado de variáveis como erro do operador, mudança da qualidade do tecido e a exatidão na qual as amostras representativas de tingimentos puderam ser obtidas.

Por fim, foi constatado que, das variáveis sujeitas a variações deliberadas, o tempo, a temperatura, a adição de produtos químicos e auxiliares e o volume do banho não produzem maiores efeitos no resultado final. As variáveis cujos erros produziram maiores efeitos foram o peso do substrato a ser tingido e a concentração dos corantes.

Em conclusão, o tingimento é um processo com elevado número de variáveis e erros em alguma delas ou em todas podem produzir resultados inaceitáveis. Há um potencial enorme de desenvolvimento no controle de algumas das mais importantes variáveis do processo.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

2.4. Ferramentas Estatísticas na Colorimetria

Por estar envolvida com grandezas de duas ou de três dimensões, a colorimetria trabalha com a estatística multivariada. Para o desenvolvimento do estudo que fundamentou essa dissertação, foram utilizados os recursos de testes de hipótese e de construção de elipses de incerteza, concomitantemente com o emprego de técnicas de modelagem e de simulação, como geração de números aleatórios para a obtenção da função de distribuição de probabilidade normal.

2.4.1. Organização dos Dados – Estatística Descritiva

Segundo JOHNSON, WICHERN [8], a análise multivariada surge quando um pesquisador, procurando entender um fenômeno físico ou social, seleciona um número $p \geq 1$ de variáveis ou de características para registrar. Os valores dessas variáveis são todos registrados para cada distinto item, pessoa ou unidade experimental.

Usa-se a notação x_{jk} para indicar o valor particular da k-ésima variável que é observada no j-ésimo item ou tentativa. Assim,

x_{jk} = valor da k-ésima variável do j-ésimo item

Consequentemente, n medições de p variáveis podem ser dispostas da seguinte maneira:

	Variável 1	Variável 2	...	Variável k	...	Variável p
Item 1	x_{11}	x_{12}	...	x_{1k}	...	x_{1p}
Item 2	x_{21}	x_{22}	...	x_{2k}	...	x_{2p}
...	...	...	...	...	...	...
Item j	x_{j1}	x_{j2}	...	x_{jk}	...	x_{jp}
...	...	...	...	...	...	...
Item n	x_{n1}	x_{n2}	...	x_{nk}	...	x_{np}

Ou podem, também, ser apresentadas como uma matriz retangular, **X**, com n linhas e p colunas.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} & \dots & x_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{j1} & x_{j2} & \dots & x_{jk} & \dots & x_{jp} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}$$

É difícil a visualização de informações importantes de uma amostra composta de um grande número de dados. Muitas informações podem ser avaliadas pelo cálculo de alguns números, conhecidos como estatística descritiva. Por exemplo, a média aritmética ou média da amostra é uma estatística descritiva que fornece uma medida de localização, isto é, o valor central de um conjunto de números. A média dos quadrados das distâncias de todos os números à média dá uma medida da dispersão ou variação dos números.

Seja x_{11}, x_{21}, ..., x_{n1} n medidas da primeira variável. A média aritmética dessas medições é:

$$\bar{x}_1 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_{j1} \tag{29}$$

A média da amostra pode ser calculada das n medições de cada uma das p variáveis, ou seja, haverá p médias amostrais:

$$\bar{x}_k = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_{jk} \qquad k=1, 2, ..., p \tag{30}$$

A medida da dispersão é dada pela variância da amostra, definida para n medições da primeira variável como:

$$s_1^2 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \left(x_{j1} - \bar{x}_k\right)^2 \tag{31}$$

onde $\bar{x}_1$ é a média da amostra dos x_{j1}. Em geral, para p variáveis, tem-se:

$$s_k^2 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \left(x_{jk} - \bar{x}_k\right)^2 \quad k=1, 2, \dots, p \tag{32}$$

Alguns autores definem a variância da amostra com o quociente n-1, em vez de n. Há razões teóricas para isso, que é particularmente apropriado quando o

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

número de medições, *n*, é pequeno. Essas duas versões da variância da amostra serão indicadas pela apresentação da expressão apropriada.

Embora a notação s^2 seja tradicionalmente utilizada para indicar a variância da amostra, eventualmente serão consideradas matrizes de quantidades nas quais as variâncias das amostras aparecem na diagonal principal. Nessa situação, é conveniente usar duplo subscrito no símbolo da variância, para indicar a sua posição na matriz. Portanto, a notação s_{kk} representa a variância das medições da i-ésima variável. A notação será:

$$s_k^2 = s_{kk} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(x_{jk} - \bar{x}_k\right)^2 \qquad k = 1, 2, ..., p \tag{33}$$

Considerando-se *n* pares de medições de cada uma das variáveis 1 e 2:

$$\begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{21} \\ x_{22} \end{bmatrix}, ..., \begin{bmatrix} x_{n1} \\ x_{n2} \end{bmatrix} \tag{34}$$

isto é, x_{j1} e x_{j2} são observações da j-ésima tentativa. A medida da associação linear entre as medições das variáveis 1 e 2 é dada pela covariância da amostra

$$s_{12} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(x_{j1} - \bar{x}_1\right)\left(x_{j2} - \bar{x}_2\right) \tag{35}$$

ou o produto médio dos desvios de suas respectivas médias. Se grandes valores de uma variável são observados em conjunto com grandes valores da outra variável, ou se pequenos valores ocorrem juntos, então s_{12} será positiva. Se grandes valores de uma variável ocorrem em conjunto com pequenos valores da outra variável, s_{12} será negativa. Se não houver associação particular entre as duas variáveis, s_{12} será aproximadamente zero.

A covariância da amostra

$$s_{ik} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(x_{ji} - \bar{x}_i\right)\left(x_{jk} - \bar{x}_k\right) \qquad i = 1, 2, ..., p \; k = 1, 2, ..., p \tag{36}$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

mede a associação entre a i-ésima e a k-ésima variável. Note-se que a covariância reduz-se à variância da amostra quando *i* = *k*. E, também, $s_{ik} = s_{ki}$ para todo *i* e *k*.

A última estatística descritiva a ser considerada é o coeficiente de correlação da amostra. Ele é a medida da associação linear entre duas variáveis que não são dependentes nas suas unidades de medição. O coeficiente de correlação da amostra para as i-ésimas e as k-ésimas variáveis é definido assim:

$$r_{ik} = \frac{s_{ik}}{\sqrt{s_{ii}}\sqrt{s_{kk}}} = \frac{\sum_{j=1}^{n}\left(x_{ji} - \bar{x}_i\right)\left(x_{jk} - \bar{x}_k\right)}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n}\left(x_{ji} - \bar{x}_i\right)^2}\sqrt{\sum_{j=1}^{n}\left(x_{jk} - \bar{x}_k\right)^2}} \tag{37}$$

para *i* = 1, 2, ..., *p* e *k* = 1, 2, ..., *p*. Note-se que $r_{ik} = r_{ki}$ para todo *i* e *k*.

O coeficiente de correlação da amostra é a versão padronizada da covariância da amostra, onde os produtos das raízes quadradas das variâncias da amostra estabelecem a padronização. Note que r_{ik} tem o mesmo valor quando *n* ou *n* – 1 é escolhido para quociente de s_{ii}, s_{kk} ou s_{ik}.

As estatísticas descritivas de *n* medições em *p* variáveis podem ser organizadas em matrizes.

Média da amostra

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \cdots \\ \bar{x}_n \end{bmatrix} \tag{38}$$

Variância e Covariância da amostra

$$\mathbf{S_n} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix} \tag{39}$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

Correlação da amostra $$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & r_{12} & \ldots & r_{1p} \\ r_{21} & 1 & \ldots & r_{2p} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ r_{p1} & r_{p2} & \ldots & 1 \end{bmatrix} \quad (40)$$

2.4.2. A Distribuição Amostral de $\overline{X}$ e de S

A tentativa de assumir que $\mathbf{X_1}$, $\mathbf{X_2}$, ..., $\mathbf{X_n}$ constituem uma amostra aleatória de uma população normal com média μ e covariância Σ determina completamente a distribuição amostral de $\overline{X}$ e de **S**. Apresentam-se, a seguir, os resultados de distribuições amostrais de $\overline{X}$ e de **S** fazendo-se um paralelo com as conclusões da distribuição univariada.

No caso univariado (p = 1), sabe-se que $\overline{X}$ é normal com média μ (média da população) e variância

$$\frac{1}{n}\sigma^2 = \frac{\text{var}\,iância_da_população}{tamanho_da_amostra} \quad (41)$$

O resultado do caso multivariado $(p \geq 2)$ é análogo, no qual $\overline{X}$ tem uma distribuição normal com média μ e matriz de covariância $\frac{1}{n}\Sigma$.

Para a variância da amostra, $(n-1)^2 s^2 = \sum_{j=1}^{n}\left(X_j - \overline{X}\right)^2$ é distribuída como uma σ^2 vezes a variável qui-quadrada com n – 1 graus de liberdade. Por outro lado, essa qui-quadrada é a distribuição da soma dos quadrados de independentes variáveis aleatórias normais padrão. Isto é, $(n-1)s^2$ é distribuída como $\sigma^2\left(Z_1^2 + \ldots + Z_{n-1}^2\right) = \left(\sigma Z_{n-1}\right)^2 + \ldots + \left(\sigma Z_{n-1}\right)^2$. Os termos individuais σZ_i são independentemente distribuídos como $N\left(0, \sigma^2\right)$. É dessa forma que se faz a generalização da distribuição amostral básica para a matriz de covariância da amostra. Resumindo:

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

Sejam $\mathbf{X_1}$, $\mathbf{X_2}$, ..., $\mathbf{X_n}$ amostras aleatórias de uma distribuição normal *p*-variada com média μ e matriz de covariância Σ. Então:

1. $\overline{X}$ é distribuída como uma $N\left(\mu,\left(\frac{1}{n}\right)\Sigma\right)$;
2. $(n-1)S$ é distribuída como uma matriz aleatória de Wishart com $n-1$ graus de liberdade; e
3. $\overline{X}$ e S são independentes.

Devido ao fato de Σ ser desconhecida, a distribuição de $\overline{X}$ não pode ser usada para se fazer inferências sobre μ. Contudo, S fornece informações independentes sobre Σ e a distribuição de S não depende de μ. Este fato permite a construção de estatísticas para se fazer inferências sobre μ.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

2.4.3. Regiões de Confiança e Comparações Simultâneas de Médias

Voltando à teoria univariada, vamos verificar se um determinado valor μ_0 é plausível de ser o valor da média μ da população. Do ponto de vista do teste de hipótese, o problema pode ser formulado do seguinte modo:

$$H_0 : \mu = \mu_0 \qquad \text{e} \qquad H_1 : \mu \neq \mu_0 \tag{42}$$

onde H_0 é a hipótese nula e H_1 é a hipótese alternativa. Se $\mathbf{X_1}$, $\mathbf{X_2}$, ..., $\mathbf{X_n}$ representam amostras aleatórias de uma população normal, então o teste estatístico apropriado é

$$t = \frac{\left(\overline{X} - \mu_0\right)}{s/\sqrt{n}} \text{ onde } \overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} X_j \text{ e } s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}\left(X_i - \overline{X}\right)^2 \tag{43}$$

Este teste estatístico tem uma distribuição *t* de student com n – 1 graus de liberdade. Rejeita-se H_0 se o valor calculado for maior que o valor tabelado.

Rejeitar H_0 quando $|t|$ é grande é equivalente a rejeitar H_0 quando seu quadrado

$$t^2 = \frac{(\overline{X} - \mu_0)^2}{s^2/n} = n(\overline{X} - \mu_0)(s^2)^{-1}(\overline{X} - \mu_0) \tag{44}$$

é grande. A variável t^2, na equação anterior, é o quadrado da distância da média amostral $\overline{X}$ ao valor sob teste μ_0. As unidades de distâncias são expressas em termos de $s/\sqrt{n}$ ou desvios-padrões estimados de $\overline{X}$. Uma vez que $\overline{X}$ e s^2 são observados, o teste vem a ser: rejeitar H_0 em favor de H_1, no nível de significância α, se

$$n(\overline{x} - \mu_0)(s^2)^{-1}(\overline{x} - \mu_0) > t^2_{n-1}(\alpha/2) \tag{45}$$

onde $t_{n-1}(\alpha/2)$ representa o $100(\alpha/2)$-ésimo percentil da distribuição *t* com *n*-1 graus de liberdade.

Se H_0 não é rejeitada, conclui-se que μ_0 é um valor plausível para média da população normal. Há outros valores de μ que também são plausíveis de ser a média da população? A resposta é sim. De fato, há um conjunto de valores aptos a serem a média da população normal. Da correspondência entre regiões de aceitação de testes $H_0 : \mu = \mu_0$ versus $H_1 : \mu \neq \mu_0$ e os intervalos de confiança para μ, temos

$$\{\text{Não rejeitar } H_0 : \mu = \mu_0 \text{ no nível } \alpha\} \qquad \text{ou} \qquad \left|\frac{\overline{x} - \mu_0}{s/\sqrt{n}}\right| \leq t_{n-1}(\alpha/2)$$

é equivalente a

$$\{\mu_0 \text{ cai no } 100(1-\alpha)\% \text{ intervalo de confiança } \overline{x} \pm t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s}{\sqrt{n}}\}$$

ou

$$\overline{x} - t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s}{\sqrt{n}} \leq \mu_0 \leq \overline{x} + t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s}{\sqrt{n}} \tag{46}$$

O intervalo de confiança consiste de todos os valores μ_0 que não serão rejeitados pelo teste $H_0 : \mu = \mu_0$ no nível α.

Antes da amostra ser selecionada, o $100(1-\alpha)\%$ intervalo de confiança da fórmula anterior é um intervalo aleatório, porque os seus extremos dependem das

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

variáveis aleatórias $\overline{X}$ e de s. A probabilidade de que o intervalo contenha μ é de 1- α. Dentre todos os números contidos nesses intervalos independentes, aproximadamente $100(1-\alpha)\%$ deles conterão μ.

Considere-se, agora, o problema de se determinar se um dado vetor $p \times 1$, μ_0, é um valor plausível para a média de uma distribuição normal multivariada. Procedendo por analogia com o desenvolvimento univariado apresentado, temos:

$$T^2 = \left(\overline{X} - \mu_0\right)' \left(\frac{1}{n} S\right)^{-1} \left(\overline{X} - \mu_0\right) = n\left(\overline{X} - \mu_0\right)' S^{-1} \left(\overline{X} - \mu_0\right) \tag{47}$$

onde $\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} X_j$ $\quad S = \frac{1}{(n-1)}\sum_{j=1}^{n}\left(X_j - \overline{X}\right)\left(X_j - \overline{X}\right)'$ $\quad$ e $\quad \mu_0 = \begin{bmatrix} \mu_{10} \\ \mu_{20} \\ \mu_{p0} \end{bmatrix}$

A estatística T^2 é chamada T^2 de Hotelling em homenagem a Harold Hotelling, pioneiro em análise multivariada.

Se a distância estatística observada T^2 é muito grande, isto é, se $\bar{x}$ estiver muito longe de μ_0, a hipótese $H_0 : \mu = \mu_0$ é rejeitada. Isso faz com que não seja necessário construir uma tabela especialmente para o cálculo dessa estatística. Isso é possível porque

$$T^2 \text{ é distribuída como } \frac{(n-1)p}{(n-p)} F_{p,n-p} \tag{48}$$

onde $F_{p,n-p}$ é uma variável aleatória da distribuição F com *p* e *n-p* graus de liberdade.

Resumindo, temos:

Sejam $\mathbf{X_1}$, $\mathbf{X_2}$, ..., $\mathbf{X_n}$ amostras aleatórias de uma população $N_p(\mu, \Sigma)$. Então, com

$$\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} X_j \qquad \text{e} \qquad S = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}\left(X_j - \overline{X}\right)\left(X_j - \overline{X}\right)',$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

$$\alpha = P\left[T^2 > \frac{(n-1)p}{(n-p)} F_{p,n-p(\alpha)} \right] = P\left[n(\bar{X}-\mu)' S^{-1}(\bar{X}-\mu) > \frac{(n-1)p}{(n-p)} F_{p,n-p}(\alpha) \right] \quad (49)$$

Aqui, $F_{p,n-p}(\alpha)$ é o (100α)-ésimo percentil superior da distribuição $F_{p,n-p}$.

Estendendo o conceito de intervalo de confiança para variáveis multivariadas, encontramos a região de confiança. Seja θ um vetor dos parâmetros de uma população desconhecida e Θ o conjunto de todos os valores possíveis de θ. A região de confiança é a região dos prováveis valores de θ. Essa região é determinada pelos dados representados por $R(X)$, onde $X = [X_1,...,X_n]'$ é a matriz de dados.

A região $R(X)$ é dita ser a $100(1-\alpha)$ % região de confiança se, antes da amostra ser selecionada,

$$P\ [R(X) \text{ representar } \theta\ ] = 1\text{-}\alpha \quad (50)$$

A probabilidade é calculada sob o verdadeiro, porém desconhecido, valor de θ.
A região de confiança de $100(1-\alpha)$% para a média de uma distribuição normal p-dimensional é o elipsóide determinado por todo μ tal que:

$$n(\bar{x}-\mu)' S^{-1}(\bar{x}-\mu) \le \frac{p(n-1)}{(n-p)} F_{p,n-p}(\alpha) \quad (51)$$

onde $\bar{X} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} X_j$, $S = \frac{1}{(n-1)}\sum_{j=1}^{n}(X_j - \bar{X})(X_j - \bar{X})'$ e $x_1, x_2, ..., x_n$ são as observações amostrais.

2.4.4. Elipses de Confiança

Para o caso bivariado, podemos construir duas diferentes elipses de confiança, segundo a CARLETON UNIVERSITY [9]. Uma é a elipse de confiança para a média da população, que apresenta a região onde, com um grau de confiança α, está situada a média da população. A outra é a elipse de predição, que apresenta a região onde, com um grau de confiança α, estará uma nova observação.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

Sejam $\overline{X}$ e S a média amostral e a matriz de covariância de uma amostra aleatória normal bivariada, de tamanho *n*, com média μ e matriz de covariância Σ. A variável $\overline{X}-\mu$ tem distribuição normal com média 0 e covariância $\frac{1}{n}\Sigma$ e é independente de S. A elipse de confiança para μ é baseada na estatística T^2 de Hotelling e a elipse com $100(1-\alpha)\%$ grau de confiança é definida por:

$$\left(\overline{X}-\mu\right)' S^{-1}\left(\overline{X}-\mu\right)=\frac{2(n-1)}{n(n-2)}F_{2,n-2}(1-\alpha) \tag{52}$$

onde $F_{2,n-2}(1-\alpha)$ é o valor tabelado de uma distribuição F com graus de liberdade iguais a 2 e a *n*-2.

A elipse de confiança de predição é a região para predição de novas observações da população. Ela é, também, a região que contém uma específica porcentagem da população.

Seja X uma variável aleatória de uma nova observação. A variável $X-\overline{X}$ tem distribuição normal bivariada com média 0 e covariância $\left(1+\frac{1}{n}\right)\Sigma$ e é independente de S. A elipse com $100(1-\alpha)\%$ grau de confiança é dada pela equação:

$$\left(\overline{X}-\mu\right)' S^{-1}\left(\overline{X}-\mu\right)=\frac{2(n+1)(n-1)}{n(n-2)}F_{2,n-2}(1-\alpha) \tag{53}$$

A família de elipses gerada por diferentes valores da distribuição F tem um centro comum, que é a média amostral e eixos maiores e menores comuns. As elipses indicam, graficamente, a correlação entre duas variáveis. Quando os eixos das variáveis são padronizados, pela divisão das variáveis pelos seus respectivos desvios-padrões, a razão entre os dois eixos reflete a correlação entre as duas variáveis. A razão de raio unitário entre o eixo maior e o eixo menor corresponde a um círculo de confiança e indica que as variáveis não são correlacionadas.

A figura 19 apresenta as elipses de aceitação (maior) e da média (menor) de uma amostra com as seguintes características:

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} 7{,}58 \\ 8{,}15 \end{bmatrix} \qquad S = \begin{bmatrix} 2{,}33 & 1{,}64 \\ 1{,}64 & 1{,}55 \end{bmatrix} \qquad \text{Coeficiente de Correlação=0,87}$$

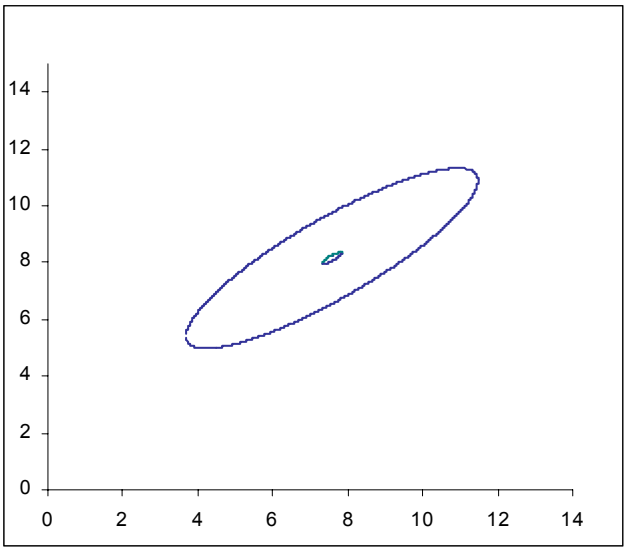

Figura 19 – Elipses de aceitação (maior) e da média. Fonte: autor

Da mesma forma que construímos elipses de aceitação e da média para variáveis de duas dimensões, é possível, também, construir elipsóides de aceitação e da média, para variáveis tridimensionais. A figura 20 mostra um elipsóide de aceitação.

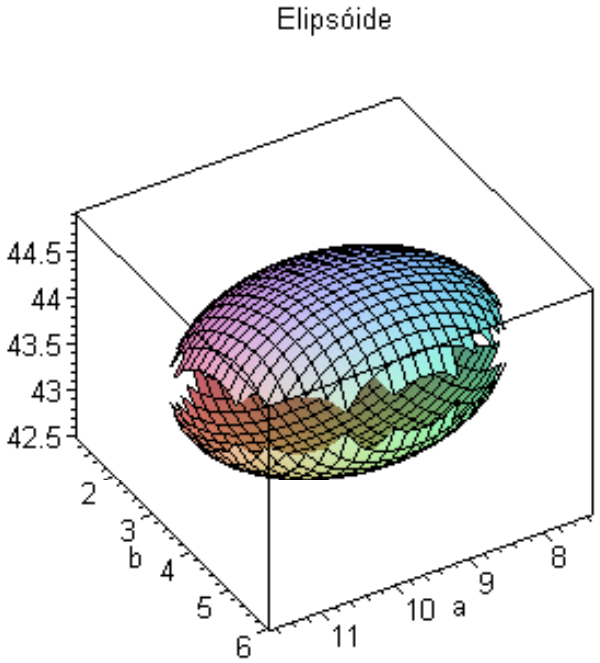

Figura 20 – Elipsóide de aceitação. Fonte: autor

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0212153/CE