UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PRODUÇÃO

MÉTODO DE INTERSEÇÃO NORMAL À FRONTEIRA PARA MODELOS QUADRÁTICOS DE ESCORES FATORIAIS ROTACIONADOS

Rodrigo Reis Leite

Itajubá, fevereiro de 2019

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PRODUÇÃO

Rodrigo Reis Leite

MÉTODO DE INTERSEÇÃO NORMAL À FRONTEIRA PARA MODELOS QUADRÁTICOS DE ESCORES FATORIAIS ROTACIONADOS

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção como parte dos requisitos para obtenção do título de **Mestre em Ciências em Engenharia de Produção**.

Área de Concentração: Engenharia de Produção
Orientador: Prof. Dr. Anderson Paulo de Paiva

Itajubá, fevereiro de 2019

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PRODUÇÃO

Rodrigo Reis Leite

MÉTODO DE INTERSEÇÃO NORMAL À FRONTEIRA PARA MODELOS QUADRÁTICOS DE ESCORES FATORIAIS ROTACIONADOS

Dissertação aprovada por banca examinadora em 11 de fevereiro de 2019, conferindo ao autor o título de **Mestre em Ciências em Engenharia de Produção**.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Anderson Paulo de Paiva (Orientador)
Prof.ª Dr.ª Gabriela Belinato (IFSULDEMINAS)
Prof. Dr. José Henrique de Freitas Gomes (UNIFEI)

Itajubá, fevereiro de 2019

DEDICATÓRIA

Aos meus pais, que me ensinaram a sonhar.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter me dado o dom de viver. Junto ao Senhor, tudo é bem mais fácil, tudo é bem mais belo.

Aos meus pais, Francisca e Geraldo, por terem me apoiado em tudo que fiz, pela ajuda nos momentos de fraqueza e pelas congratulações nos momentos de conquista. Com vocês aprendi a sonhar e também que a humildade, respeito e perseverança são grandes virtudes de um ser humano. Minha dívida com vocês será eterna diante de tudo que me proporcionaram até hoje.

À minha amada namorada Gabriela, por ser tão importante na minha vida. Sempre ao meu lado, me apoiando em todos os momentos e sempre demonstrando seu amor. Obrigado pela amizade, companheirismo, paciência, alegrias, amor e por fazer dos meus sonhos nossos sonhos.

Aos meus irmãos Rúbia e Rafael, pela amizade, pelo companheirismo, pelas palavras de coragem e grandes momentos vividos juntos desde a infância. Aos meus sobrinhos Analice, Pedro e Antônio, por irradiar felicidade dentro da nossa família. Aos meus tios, Doralice e Luiz Carlos, por sempre estarem ao meu lado, pelo jeito humilde de nos fazer sorrir e pelas orações dedicadas a mim.

Ao meu orientador, Prof. Anderson Paiva, por me acolher como aluno e orientado. Obrigado pelo apoio, pelo grande saber e experiência que foi transmitido a mim, pelas críticas construtivas nas escritas de artigos nacionais e internacionais e, por fim, por acreditar em meu trabalho durante o mestrado.

Ao Prof. Robson, pela amizade, profissionalismo e oportunidade de trabalharmos juntos ainda durante a minha graduação na UFSJ no desenvolvimento da minha Iniciação Científica que certamente marcou a minha trajetória na vida acadêmica. Agradeço ainda pelos dois artigos que escrevemos juntos publicados em periódicos internacionais de grande expressão.

Aos amigos Diego Jean, Laila Alves e Aline Alvim, pela amizade, pesquisas e estudos realizados e escrita de artigos em anais de eventos e periódicos internacionais.

Ao Prof. e companheiro de pesquisa Fabrício Almeida, pela amizade e participação na escrita de um artigo publicado em periódico internacional.

Aos amigos do GEPE Qualidade, Taynara Incerti, Vinícius Renó, Julio Mosquera e Lucas Guedes pelos estudos e pesquisas realizados e pelos momentos de descontração.

Ao Prof. Paulo Henrique, por ter disponibilizado os dados utilizados em sua Tese que auxiliaram na escrita da presente Dissertação.

Aos professores do programa de pós-graduação em Engenharia de Produção da UNIFEI pelos ensinamentos e experiências compartilhadas.

À UNIFEI, pelo programa de pós-graduação em Engenharia de Produção.

À CAPES, pelo auxílio financeiro.

RESUMO

Diante da necessidade de considerar a estrutura de correlação entre as respostas de um processo para a solução de problemas de otimização multiobjetivo, esta Dissertação tem como proposta o desenvolvimento e aplicação de uma abordagem híbrida de otimização considerando as técnicas de metodologia de superfície de resposta, erro quadrático médio, análise fatorial, e método de interseção normal à fronteira. Com esta nova abordagem é possível reduzir a dimensionalidade de um problema de otimização e ao mesmo tempo levar em consideração a estrutura de covariância entre as respostas correlacionadas. Para tanto, a técnica de estatística multivariada análise fatorial é utilizada para que poucos fatores representem o conjunto original de dados. A partir dos escores fatoriais rotacionados, modelos polinomiais de segunda ordem podem ser encontrados por meio da metodologia de superfície de resposta para cada um dos fatores. Com base nos modelos quadráticos, equações de erro quadrático médio são calculadas para cada um dos fatores com o intuito de aproximar os fatores rotacionados de seus valores alvo enquanto considerando suas contribuições à variância total. Assim, essas equações compõem as funções objetivo não-correlacionadas em um problema de otimização multi-objetivo solucionado pelo método de interseção normal à fronteira. Com o intuito de demonstrar a aplicabilidade da abordagem de otimização proposta, foi considerado o processo de torneamento do aço endurecido AISI H13 com cinco respostas, sendo elas, rugosidade superficial média, rugosidade total, relação entre taxa de remoção de material e força resultante, custo total e tempo total de usinagem. Os dados originais se mostraram adequados à aplicação da análise fatorial. Os modelos quadráticos para os dois fatores sustentabilidade/custo e qualidade apresentaram excelentes valores para os coeficientes de ajuste. Análises multivariadas foram realizados e revelaram as relações entre efeitos principais e interações com os fatores e respostas originais. O método proposto foi capaz de gerar uma fronteira de Pareto com soluções equidistantes, permitindo uma boa exploração da região viável de funções objetivo. As relações levantadas nas análises multivariadas dos efeitos principais foram respeitadas após realização de 21 subproblemas de otimização. As fronteiras de Pareto dos erros quadráticos médios dos fatores rotacionados e não-rotacionados foram comparadas e foi demonstrado estatisticamente por meio do teste *t* pareado e do índice $\xi = Entropia/GPE$ que melhores resultados são obtidos quando utilizando fatores rotacionados pelo método de rotação *varimax*.

Palavras-Chaves: análise fatorial; interseção normal à fronteira; metodologia de superfície de resposta; erro quadrático médio.

ABSTRACT

Given the need to consider the correlation structure between the responses of a process for the solution of multiobjective optimization problems, this Dissertation proposes the development and application of a hybrid optimization approach considering the techniques of response surface methodology, mean square error, factor analysis, and normal boundary intersection method. With this new approach, it is possible to reduce the dimensionality of an optimization problem and concomitantly consider the structure of covariance among correlated responses. For this, the technique of multivariate statistics, factorial analysis, is used so that few factors represent the original set of data. From rotational factor scores, second-order polynomial models can be found by means of the response surface methodology for each of the factors. From the quadratic models, mean square error equations are calculated for each of the factors to approximate the rotated factors of their target values while considering their contributions to the total variance. Thus, these equations compose the uncorrelated objective functions in a multi-objective optimization problem solved by the normal boundary intersection method. To demonstrate the applicability of the proposed optimization approach, it was considered the turning process of the hardened AISI H13 steel with five responses, being the average surface roughness, total roughness, ratio between the material removal rate and the resulting force, total cost and machining time. The original data were adequate for the application of the factor analysis. The quadratic models for the two sustainability/cost and quality factors presented excellent values for the adjustment coefficients. Multivariate analyses were performed and revealed the relationships between major effects and interactions with the original factors and responses. The proposed method could generate a Pareto frontier with equidistant solutions, allowing a good exploration of the feasible region of objective functions. The relationships raised in the multivariate analyses were respected after performing 21 optimization subproblems. The Pareto frontiers of the mean squared errors of the rotated and non-rotated factors were compared, and it was statistically demonstrated by means of the paired *t*-test and the $\xi = Entropy/GPE$ index that best results are obtained when using rotated factors by means of the varimax rotation method.

Keywords: factor analysis; normal boundary intersection; response surface methodology; mean square error.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AISI	*American Iron and Steel Institute* – Instituto americano de ferro e aço
ANOVA	*Analysis of Variance* – Análise de variância
CCD	*Central Composite Design* – Arranjo Composto Central
CHIM	*Convex hull of individual minima* – Casca convexa de mínimos individuais
CP	C*ompromise programming* – Programação de compromisso
DOE	*Design of experiments* – Planejamento de experimentos
FA	*Factor analysis* – Análise fatorial
GPE	*Global percentage error* – Erro percentual global
MMSE	*Multivariate mean square error* – Erro quadrático médio multivariado
MOOP	*Multi-objective optimization problem* – Problema de otimização multi-objetivo
MSA	*Measure of sampling adequacy* – Medida de adequação de amostra
MSE	*Mean square error* – Erro quadrático médio
NBI	*Normal Boundary Intersection* – Interseção Normal à Fronteira
NID	Normal e independentemente distribuído
NNC	*Normalized normal constraint* – Restrição normal normalizada
OLS	*Ordinary Least Squares* – Mínimos quadrados ordinários
PCA	*Principal component analysis* – Análise decomponentes principais
RSM	*Response Surface Methodology* – Metodologia de Superfície de Resposta
WLS	*Weighted least squares* – Mínios quadrados ponderados
WS	*Weighted sum* – Somas ponderadas

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos de metodologia de superfície de resposta

y	Resposta
$x_1, x_2, ..., x_k$	Variáveis de controle
k	Número de variáveis de controle
f	Função de resposta
ε	Erro experimental
σ^2	Variância
$\hat{y}$	Aproximação do modelo de superfície de resposta
β	Coeficientes de regressão
$\mathbf{X}$	Matriz do arranjo experimental
$\boldsymbol{\beta}$	Vetor de coeficientes de regressão
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Vetor de erros experimentais
e	Resíduo
S	Desvio padrão experimental
R^2	Coeficiente de determinação
R^2_{adj}	Coeficiente de determinação ajustado
R^2_{pred}	Coeficiente de determinação para a previsão
α	Nível de significância
n	Número de corridas experimentais
ρ	Distância entre um ponto central e um ponto axial em um arranjo CCD
n_c	Número de pontos centrais
$\hat{\beta}$	Estimativa do coeficiente de regressão
$\hat{\mathbf{b}}$	Vetor com as estimativas dos coeficientes dos termos lineares
$\mathbf{x}$	Vetor com as variáveis de controle
$\hat{\mathbf{B}}$	Matriz simétrica contendo as estimativas dos coeficientes dos termos quadráticos e das interações de segunda ordem
$\mathbf{x}_0$	Ponto estacionário
$\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_k$	Autovalores da matriz $\hat{\mathbf{B}}$
$\mathbf{I}$	Matriz identidade

Símbolos de otimização multi-objetivo

p	Número de funções objetivo
$x_1, x_2, ..., x_k$	Variáveis de controle
k	Número de variáveis de controle
$\mathbf{x}$	Vetor de decisão que contém as variáveis de processo
$\mathbf{F}(\mathbf{x})$	Vetor que contém as p funções objetivo
$f_i(\mathbf{x})$	i-ésima função objetivo
$\mathbf{g}(\mathbf{x})$	Vetor de restrições de desigualdade
$\mathbf{h}(\mathbf{x})$	Vetor de restrições de igualdade
$\mathbb{X}$	Espaço viável de variável de decisão
$\mathbb{Z}$	Espaço viável de função objetivo
$\mathbf{x}^*$	Ponto Pareto ótimo
$\partial\mathbb{Z}$	Fronteira do espaço viável de função objetivo $\mathbb{Z}$
P	Conjunto de pontos não-dominados comumente denominados pontos Pareto ótimos
∂F	Região contida em $\partial\mathbb{Z}$ e constituída por P
$\mathbf{x}^{i*}$	Vetor de variáveis de processo que leve a i-ésima função objetivo ao seu melhor valor
$f_i\,(\mathbf{x}^{i*})$	Melhor valor da i-ésima função objetivo
$F^{\,i*}$	i-ésimo ponto de âncora
F^U	Ponto de utopia
F^N	Ponto de nadir
f_i^N	Pior valor da i-ésima função objetivo
F^{PN}	Ponto de pseudo nadir
f_i^{PN}	Pior valor da i-ésima função objetivo considerando os vetorres de variáveis de processo
$\mathbf{\Phi}$	Matriz *payoff*
n_{sub}	Número de subproblemas de otimização
$\mathbf{w}$	Vetor de pesos
w_i	Peso atribuído à i-ésima função objetivo
$\hat{\mathbf{n}}$	Vetor perpendicular à CHIM e em direção à origem
t	Escalar utilizado na formulação do NBI

δ	Espaçamento uniforme entre dois pesos consecutivos
q	Inverso de δ
$\bar{f}_i(\mathbf{x})$	i-ésima função objetivo normalizada
$\overline{F}^{i*}$	i-ésimo ponto de âncora normalizado
$\overline{F}^{U}$	Ponto de utopia normalizado
$\overline{F}^{PN}$	Ponto de pseudo nadir normalizado
$\bar{f}_i^{PN}$	Pior valor normalizado da i-ésima função objetivo considerando os vetorres de variáveis de processo
$\overline{\mathbf{\Phi}}$	Matriz *payoff* normalizada
$\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{x})$	Vetor que contém as p funções objetivo normalizadas
GPE	Erro percentual global
ξ	Relação entre *Entropia* e *GPE*

Símbolos de análise fatorial

$F_1, F_2, \ldots, F_m$	Fatores comuns ou variáveis latentes
p	Número de respostas ou variáveis originais correlacionadas
m	Número de fatores
ε_i	Erro específico inerente a i-ésima resposta
$y_1, y_2, \ldots, y_p$	Respostas ou variáveis observadas
$\mathbf{y}$	Vetor de variáveis aleatórias observáveis
$\boldsymbol{\mu}$	Vetor de médias
$\mathbf{\Sigma}$	Matriz de covariâncias populacionais
$\mathbf{L}$	Matriz de cargas fatoriais de $\mathbf{\Sigma}$
l_{ij}	Carga fatorial ou medida de influência de y_i no fator comum F_j
$\mathbf{F}$	Vetor aleatório contendo os fatores comuns
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Vetor aleatório de erros (fatores específicos)
$\mathbf{\Psi}$	Matriz de variâncias específicas de $\mathbf{\Sigma}$
ψ_i	Variância específica ou proporção da variância de y_i explicada pelo fator específico ε_i
σ_{ii}	Variância de y_i
h_i^2	Comunalidade ou parte da variância de y_i explicada pelos m fatores comuns

$\mathbf{C}$	Matriz de correlação populacional
$\mathbf{I}$	Matriz identidade
α	Nível de significância
ν	Graus de liberdade
$\mathbf{R}$	Matriz de correlação amostral
n	Número de observações em cada variável observada
r_{ij}	Elementos da matriz **R**
$\mathbf{Q}$	Matriz de correlação anti-imagem
q_{ij}	Elementos da matriz **Q**
$\mathbf{P}_m$	Matriz dos primeiros *m* autovetores normalizados de $\mathbf{\Sigma}$
$\mathbf{\Lambda}_m$	Matriz diagonal dos autovalores de $\mathbf{\Sigma}$
λ_i	Autovalor de $\mathbf{\Sigma}$
$\mathbf{S}$	Matriz de covariâncias amostrais
$\hat{\mathbf{P}}_m$	Matriz dos primeiros *m* autovetores normalizados de **S**
$\hat{\mathbf{\Lambda}}_m$	Matriz diagonal dos autovalores de **S**
$\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \ldots, \hat{\mathbf{e}}_m$	Autovetores normalizados de **S**
$\hat{\lambda}_i$	Autovalor de **S**
$\hat{\mathbf{L}}$	Matriz de cargas fatoriais estimadas a partir de **S**
$\hat{l}_{ij}$	Estimativa da carga fatorial a partir de **S**
$\hat{\mathbf{\Psi}}$	Matriz de variâncias específicas estimadas a partir de **S**
$\hat{\psi}_i$	Estimativa para a variância específica a partir de **S**
s_{ii}	Variância amostral de y_i
$\hat{h}_i^2$	Estimatimativa da *i*-ésima comunalidade
$\hat{\mathbf{L}}^*$	Matriz de cargas fatoriais estimadas a partir de **R**
$\hat{l}_{ij}^*$	Estimativa da carga fatorial a partir de **R**
$\hat{\mathbf{\Psi}}^*$	Matriz de variâncias específicas estimadas a partir de **R**
$\hat{\mathbf{P}}_m^*$	Matriz dos primeiros *m* autovetores normalizados de **R**
$\hat{\mathbf{\Lambda}}_m^*$	Matriz diagonal dos autovalores de **R**
$\hat{\mathbf{e}}_1^*, \hat{\mathbf{e}}_2^*, \ldots, \hat{\mathbf{e}}_m^*$	Autovetores normalizados de **R**

$\hat{\lambda}_i^*$	Autovalor de **S**
$\hat{\psi}_i^*$	Estimativa para a variância específica a partir de **R**
$\hat{h}_i^{*2}$	Estimativa da *i*-ésima comunalidade a partir de **R**
$Var\left(F_j^*\right)=\sum_{i=1}^{p}\hat{l}_{ij}^{*2}$	Proporção da variância total explicada pelo *j*-ésimo fator
$\hat{\mathbf{L}}^{\circ}$	Matriz de cargas fatoriais rotacionadas
$\mathbf{T}$	Matriz ortogonal de transformação
V	Função objetivo a ser maximizada pelo método varimax
$\tilde{l}_{ij}^{\circ}$	Carga fatorial rotacionada e escalonada pela raiz quadrada da *i*-ésima comunalidade
$\hat{\mathbf{F}}$	Vetor de estimativas dos escores fatoriais não-rotacionados utilizando **S**
$\hat{\mathbf{F}}^*$	Vetor de estimativas dos escores fatoriais não-rotacionados utilizando **R**
$\hat{\mathbf{F}}^{\circ}$	Vetor de estimativas dos escores fatoriais rotacionados utilizando **S**
$\hat{\mathbf{F}}^{*\circ}$	Vetor de estimativas dos escores fatoriais rotacionados utilizando **R**

Símbolos de erro quadrático médio

$\hat{y}(\mathbf{x})$	Equação de superfície de resposta para média
$\hat{\sigma}^2(\mathbf{x})$	Equação de superfície de resposta para variância
$\mathbf{x}$	Vetor de variáveis de controle
MSE	Equação de erro quadrático médio
$\zeta_{\hat{y}}$	Valor alvo da média
w_1 e w_2	Pesos atribuídos às equações de média e variância, respectivamente
$MMSE_T$	Função global de erro quadrático médio multivariado
$MMSE_j$	Equação de erro quadrático médio multivariado do *j*-ésimo componente principal
$PC_j(\mathbf{x})$	Modelo polinomial de segunda ordem dos escores de componentes

ζ_{PC_j}	Alvo do *j*-ésimo componente principal
λ_{PC_j}	Autovalor do *j*-ésimo componente principal
$\mathbf{e}_j$	Autovetor inerente ao *j*-ésimo componente principal
$\boldsymbol{\zeta}_{\mathbf{y}_p}$	Vetor que contém os alvos das *p* características de qualidade
$\mathbf{Z}\left(\mathbf{y}_p \mid \boldsymbol{\zeta}_{\mathbf{y}_p}\right)$	Vetor de valores padronizados do conjunto de alvos originais das *p* características de qualidade
$\bar{y}_i$	Média amostral da *i*-ésima resposta
s_{ii}	Variância amostral da *i*-ésima resposta
PC_{escore_j}	Valores dos *n* escores referentes ao *j*-ésimo componente principal
$\mathbf{PC}_{escores}$	Matriz de escores de componentes principais
$\mathbf{E}$	Matriz de autovetores normalizados de **R**

Símbolos do método NBI-MMSE-FA

m	Número de fatores
p	Número de respostas
$F_j(\mathbf{x})$	Modelo polinomial de segunda ordem do *j*-ésimo fator
$\zeta_{F_j(\mathbf{x})}$	Valor alvo calculado através da otimização individual de $F_j(\mathbf{x})$
$\sum_{i=1}^{p} l_{ij}^2$	Contribuição do *j*-ésimo fator à variância total
$MMSE_{F_j}(\mathbf{x})$	Equação de erro quadrático médio multivariado correspondente ao *j*-ésimo fator
$\overline{MMSE_{F_j}}(\mathbf{x})$	Equação padronizada de erro quadrático médio multivariado correspondente ao *j*-ésimo fator
$MMSE_{F_j}(\mathbf{x}^{j*})$	Valor ótimo da *j*-esima função objetivo
$MMSE_{F_j}^{PN}$	Pior valor da *j*-ésima função objetivo

Símbolos das variáveis de controle e respostas analisadas

v_c	Velocidade de corte
f	Taxa de avanço
a_p	Profundidade de corte

R_a	Rugosidade superficial média
R_t	Rugosidade total
MRR/F_r	Relação entre taxa de remoção de material e força resultante
K_p	Custo total de usinagem
T_t	Tempo total de usinagem

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização da pesquisa

Diversos problemas industriais estão ligados diretamente ao encontro de configurações de variáveis de controle que melhorem a *performance* de características de qualidade (VINNING, 1998). Por exemplo, para um processo de torneamento convencional geralmente são consideradas como variáveis de processo: velocidade de corte, taxa de avanço e profundidade de corte. Nesse contexto, vem à tona uma importante questão: Quais as configurações ideais para essas variáveis que sejam capazes de otimizar as características de qualidade desse processo? A resposta para esse tipo de questão depende da estratégia de combinação entre o tipo de planejamento experimental, as técnicas de análise estatística e do método de otimização multi-objetivo.

Otimização multi-objetivo é o processo de otimizar mais do que uma resposta sistematicamente e simultaneamente (MARLER e ARORA, 2004). Problemas de otimização multi-objetivo (do inglês, *multi-objective optimization problems* – MOOPs) são inerentes aos projetos de engenharia, ou seja, eles surgem de uma maneira natural. Em meio à característica natural de existência de um MOOP surge a competição entre as múltiplas respostas (CHIANDUSSI *et al.*, 2012), fazendo com que a solução para esses tipos de problemas não seja única, mas sim um conjunto de soluções ótimas, conhecidas como soluções Pareto ótimas que estão distribuídas em uma região chamada de fronteira de Pareto.

Em processos de usinagem, quando pesquisando a influência dos parâmetros de corte nas respostas, muitos pesquisadores planejam os experimentos de tal forma que somente um parâmetro de corte varie por corrida experimental enquanto os parâmetros remanescentes são mantidos constantes (CHOUDHURY e EL-BARADIE, 1998). Esse tipo de estratégia de experimentação não considera que exista interações entre os parâmetros, que são muito comuns de existirem. Se elas existirem, essa estratégia de variar um parâmetro por vez irá geralmente produzir resultados não satisfatórios (MONTGOMERY, 2017).

As respostas consideradas na presente pesquisa são provenientes do estudo de Campos (2015) que considerou a estratégia de experimentação de variar simultaneamente os parâmetros com o intuito de se construir modelos empíricos para as respostas. Essa estratégia é conhecida como planejamento de experimentos (do inglês, *design of experiments* – DOE) e consiste em planejar experimentos para se realizar a coleta e análise de dados apropriados através de métodos estatísticos, visando modelagem de respostas e conclusões corretas e objetivas

(MONTGOMERY, 2017). A presente pesquisa fará uso da estratégia de experimentação metodologia de superfície de resposta (do inglês, *response surface methodology* – RSM).

RSM foi introduzida por Box e Wilson (1951) e é atualmente um dos planejamentos de experimentos mais utilizados em engenharia. Dentre os arranjos RSM, um dos mais utilizados é o arranjo composto central (do inglês, *central composite design* – CCD) que faz uso da combinação de um arranjo fatorial com a adição de pontos axiais (níveis extremos) e centrais (nível médio) das variáveis de controle com o objetivo de ajustar um modelo de superfície de resposta de segunda ordem (MONTGOMERY, 2017).

Um dos métodos de otimização multi-objetivo mais utilizados é conhecido como método de interseção normal à fronteira (do inglês, *normal boundary intersection* – NBI) proposto por Das e Dennis (1998). O método NBI foi desenvolvido sob a perspectiva de superar as deficiências do método das somas ponderadas que são: pontos (soluções ótimas) nas partes não-convexas da fronteira de Pareto são dificilmente obtidos e uma distribuição uniforme de pesos não garante que pontos sob a fronteira sejam uniformemente distribuídos, fazendo com que a exploração das variáveis de controle não gere ganhos significativos em termos de melhoria de resposta de processo (NAVES *et al*., 2017). Nesse sentido, o método NBI tem se tornado uma opção muito útil para solucionar MOOPs.

Há uma grande quantidade de processos de manufatura cujas respostas são correlacionadas, e assim os modelos matemáticos empíricos que representam as respostas de processos podem apresentar falta de eficiência, gerando resultados inconclusivos quando a análise é univariada (PAIVA, FERREIRA e BALESTRASSI, 2007). Para Chiao e Hamada (2001), a análise e otimização separada de respostas não são satisfatórias, especialmente quando essas respostas são correlacionadas.

Nesse contexto, diversos pesquisadores tentam resolver essa questão através da análise de componentes principais (do inglês, *principal component analysis* – PCA). Entretanto, uma técnica de estatística multivariada mais elaborada e que é considerada uma extensão de PCA é conhecida como análise fatorial (do inglês, *factor analysis* – FA). O objetivo da FA é descrever a estrutura de covariância entre as variáveis de resposta as quais são observáveis, em termos de poucos fatores, os quais são variáveis não-observáveis conhecidas também como variáveis latentes (JOHNSON e WICHERN, 2007).

1.2 Justificativas

O método de otimização NBI é capaz de encontrar uma parte da região limite do espaço viável de função objetivo que contenha o conjunto de pontos Pareto ótimos, além de ser frequentemente utilizado por pesquisadores e demonstrado excelentes resultados. Entretanto, como salienta Costa *et al*. (2016), o NBI tende a falhar quando as funções objetivo apresentam uma estrutura de correlação significativa e quando há objetivos conflitantes, ou seja, quando os sentidos de otimização das respostas são opostos, podendo levar a soluções viáveis, porém, não-realistas. Ademais, quando a correlação entre as funções objetivo são negligenciadas, há uma separação das soluções promovida pelos pesos atribuídos as funções objetivo que não existe na prática.

Paiva *et al*. (2009) propuseram um procedimento para se otimizar de maneira simultânea respostas correlacionadas usando uma abordagem de otimização nomeada por eles como erro quadrático médio multivariado (do inglês, *multivariate mean square error* – MMSE) que combina metodologia de superfície de resposta, análise de componentes principais e erro quadrático médio. O método MMSE é capaz de levar em consideração a estrutura de correlação entre as respostas originais e criar uma função objetivo global ($MMSE_T$) a partir de funções modeladas de componentes principais não-correlacionadas que levam em consideração os alvos das variáveis originais. Otimizando $MMSE_T$, as respostas originais correlacionadas são também otimizadas.

Para superar as deficiências do NBI quando há funções objetivo correlacionadas e objetivos conflitantes, Costa *et al*. (2016) propuseram a combinação do método MMSE com o método NBI com o objetivo de se encontrar uma fronteira de Pareto. Os autores nomearam este método com NBI-MMSE. A primeira diferença entre as abordagens de Paiva *et al*. (2009) e Costa *et al*. (2016) é que no MMSE somente uma solução ótima é encontrada e no NBI-MMSE uma série de soluções Pareto ótimas são encontradas permitindo uma melhor exploração das respostas originais. Uma segunda diferença é que no MMSE os escores de componentes são modelados usando RSM, já no método NBI-MMSE, para cada escore de componente há um índice MMSE associado e assim é o MMSE que é modelado por RSM.

Para Costello e Osborne (2005), FA é preferível à PCA uma vez que FA revela as variáveis latentes que fazem com que as variáveis originais apresentem alto grau de interdependência. Já PCA, segundo os mesmos autores, é somente um método de redução de dados.

O estudo realizado por Costa (2017) constatou que grande maioria dos trabalhos que abordam a otimização de múltiplas respostas do processo de torneamento não levam em consideração a influência da correlação na etapa de modelagem das equações de regressão ou na etapa de otimização. Paiva (2006) e Costa *et al*. (2016a) *apud* Costa (2017) também constataram que a maioria dos métodos de otimização usados para otimizar múltiplas respostas nos processos de soldagem e fresamento não levam em consideração a estrutura de correlação, embora os processos sejam de natureza multivariada.

Após a realização de buscas nas bases de dados *Scopus* e *Web of Sciense*, nenhum trabalho foi encontrado utilizando uma abordagem de otimização que considere de maneira conjunta as técnicas de metodologia de superfície de resposta, erro quadrático médio, análise fatorial e método de interseção normal à fronteira.

Dada a discussão acima, a presente pesquisa apresenta uma abordagem híbrida de otimização multi-objetivo, NBI-MMSE-FA, que combina as técnicas de metodologia de superfície de resposta, análise fatorial, erro quadrático médio e o método de interseção normal à fronteira para modelagem e otimização de múltiplas respostas correlacionadas. Este trabalho considera o processo de torneamento do aço endurecido AISI H13. As respostas consideradas nesta pesquisa foram rugosidade superficial (R_a), rugosidade total (R_t), relação entre taxa de remoção de material e força resultante (MRR/F_r), custo total de usinagem (K_p) e tempo total de usinagem (T_t). Uma vez que um alto grau de interdependência está presente entre as respostas, uma técnica de estatística multivariada pode ser empregada para lidar com a influência da correlação na otimização simultânea das respostas do processo de torneamento do aço endurecido AISI H13.

1.3 Problemática

Sabendo que: 1) há a necessidade de considerar a estrutura de correlação dos dados em problemas de otimização quando utilizando o método NBI; 2) FA é preferível à PCA em subsequentes análises e otimizações; 3) nenhum trabalho foi encontrado nas bases de dados pesquisadas utilizando de maneira simultânea as técnicas RSM, MSE, FA e NBI. Então, os seguintes questionamentos são apresentados:

- Como utilizar análise fatorial juntamente com os métodos de erro quadrático médio e interseção normal à fronteira para solucionar problemas de otimização com múltiplas repostas correlacionadas e modeladas por um arranjo de superfície de resposta?
- Qual o comportamento das respostas originais ao se otimizar as equações de erro quadrático médio de escores fatoriais rotacionados e não-rotacionados?

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo geral

O objetivo geral desta Dissertação é desenvolver uma nova abordagem de otimização multi-objetivo por interseção normal à fronteira baseado na metodologia de superfície de resposta, erro quadrático médio e análise fatorial para que o método de otimização NBI gere soluções Pareto ótimas sem que haja a influência das correlações entre as respostas.

1.4.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos desta pesquisa são:

a) Descrever o relacionamento entre fatores e respostas originais do processo considerado através da análise de cargas fatoriais;

b) Gerar modelos polinomiais de segunda ordem para as respostas e para os escores fatoriais;

c) Gerar as equações de erro quadrático médio multivariado dos escores fatoriais rotacionados;

d) Realizar a otimização multi-objetivo das funções objetivo de erro quadrático médio multivariado que mantém relação com as respostas originais;

e) Comparar as fronteiras de Pareto utilizando a abordagem de otimização proposta para fatores rotacionados e não-rotacionados.

1.5 Metodologia

Esta pesquisa pode ser considerada como tendo natureza aplicada, com objetivos explicativos, com abordagem quantitativa e o método de pesquisa é modelagem.

A natureza da pesquisa é aplicada tendo em vista seu interesse prático no alcance de resultados que possam ser aplicados imediatamente na solução de problemas reais. A pesquisa é explicativa, pois através de análises estatísticas serão geradas e analisadas relações de dependência entre respostas de processo e variáveis de controle. Quanto à abordagem, a pesquisa pode ser classificada como quantitativa, uma vez que usa de recursos e técnicas estatísticas para traduzir em números as informações com o intuito de melhor analisá-las. O método da pesquisa é modelagem, pois, através de experimentos, se visa construir modelos que representem processos a partir de variáveis (MARTINS, MELLO e TURRIONI, 2014).

1.6 Delimitações da pesquisa

A presente pesquisa é delimitada pelos seguintes aspectos:

a) Para reduzir a dimensionalidade do problema de otimização multivariado, somente a análise fatorial foi utilizada;

b) Para otimização das funções objetivo de erro quadrático médio multivariado, somente o método de interseção normal à fronteira foi utilizado.

c) Para mostrar a aplicação da abordagem proposta, foi utilizado um arranjo de superfície de resposta, desenvolvido por Campos (2015), do tipo CCD para o torneamento do aço AISI H13 (54 *HRc*) usinado com a ferramenta de corte CC650WG;

d) Foram consideradas como respostas as variáveis R_a, R_t, MRR/F_r, K_p e T_t.

2 METODOLOGIA DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA

2.1 Definições gerais

RSM foi introduzida por Box e Wilson (1951) e é atualmente um dos planejamentos de experimentos mais utilizados em engenharia quando o objetivo é estabelecer uma relação matemática entre uma resposta de processo e suas variáveis de controle, e consequentemente analisar e otimizar a resposta estudada.

A definição clássica de RSM compartilhada por vários autores corresponde a um conjunto de técnicas matemáticas e estatísticas para ajuste de modelos empíricos, análise e otimização de respostas de processos, também conhecidas como características de qualidade ou variáveis dependentes (MYERS, MONTGOMERY e ANDERSON-COOK, 2016). Tais características de qualidade, denotadas por y, são influenciadas por k variáveis de processo, também conhecidas como variáveis de entrada, ou variáveis independentes, ou ainda variáveis preditoras e denotadas por x_1, x_2, ..., x_k (MONTGOMERY, 2017).

Em geral, a função de resposta, representando a relação entre uma característica de qualidade e suas variáveis de processo, é desconhecida. Assim, a partir de um experimento planejado pode-se aproximar um modelo matemático de resposta de y em função de suas variáveis de processo x_1, x_2, ..., x_k, tal como exposto na Equação (2.1).

$$y = f\left(x_1, x_2, ..., x_k\right) + \varepsilon \tag{2.1}$$

No modelo matemático representado pela Equação (2.1), f é a função de resposta desconhecida. O erro estatístico ou experimental ε compreende erros de medições das características de qualidade e outras fontes de variabilidade tais como variáveis de ruído (não-controláveis), causas especiais e/ou comuns etc. Assume-se que o erro experimental tenha uma distribuição normal com média zero, variância σ^2 e seja independentemente distribuído, ou seja, $\varepsilon \sim NID(0,\sigma^2)$ (MYERS, MONTGOMERY e ANDERSON-COOK, 2016). Em virtude da presença do erro experimental ε, o modelo de superfície de resposta $\hat{y} = f\left(x_1, x_2, ..., x_k\right)$ é uma aproximação para a resposta medida.

Em estudos clássicos de RSM, o modelo de superfície de resposta $\hat{y} = f\left(x_1, x_2, ..., x_k\right)$ é representado frequentemente por uma função polinomial linear ou quadrática. Logo, a função apresentada na Equação (2.1) pode ser reescrita contento termos lineares, Equação (2.2), e termos quadráticos, Equação (2.3) (MYERS, KHURI e CARTER, 1989).

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \varepsilon \tag{2.2}$$

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{\substack{i=1 \\ i<j}}^{k} \sum_{j=1}^{k} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \tag{2.3}$$

Os coeficientes de regressão β's podem ser estimados pelo método dos mínimos quadrados ordinários (do inglês, *ordinary least squares* – OLS) (MYERS, MONTGOMERY e ANDERSON-COOK, 2016). Em um modelo de regressão linear múltiplo, a Equação (2.2) pode ser reescrita conforme Equação (2.4) supondo que existam n observações na resposta de interesse, y_1, y_2, ..., y_n. Na Equação (2.4), x_{ij} denota o i-ésimo valor da resposta e a j-ésima variável de processo (MONTGOMERY, 2017).

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_j x_{ij} + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, ..., n \tag{2.4}$$

A Equação (2.4) pode ser reescrita em notação matricial conforme Equação (2.5) para que a estimação dos coeficientes β's seja realizada pelo método OLS através da minimização da soma dos quadrados dos erros, ε_i (MONTGOMERY, 2017).

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{2.5}$$

onde

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix},\ \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix},\ \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix},\ \text{e}\ \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}.$$

O estimador de mínimos quadrados de $\boldsymbol{\beta}$ é representado pelo vetor $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ conforme Equação (2.6), ver Montgomery (p. 462–465, 2017) para mais detalhes. A partir da estimativa de $\boldsymbol{\beta}$, o modelo de regressão ajustado pode ser escrito conforme Equação (2.7) em sua forma matricial e Equação (2.8) em sua forma escalar. Dessa maneira, a diferença entre os valores observado e ajustado corresponde ao resíduo, $e_i = y_i - \hat{y}_i$.

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \tag{2.6}$$

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} \tag{2.7}$$

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^{k} \hat{\beta}_j x_{ij} \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{2.8}$$

Para situações onde há presença de curvatura no modelo de superfície de resposta, o modelo quadrático apresentado na Equação (2.3) é o mais utilizado. A estimativa dos coeficientes β's nesse modelo também pode ser realizado pelo método OLS, com devidos ajustes nas seguintes matrizes e vetores:

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1k} & x_{11}^2 & \cdots & x_{1k}^2 & x_{11}x_{12} & \cdots & x_{1(k-1)}x_{1k} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2k} & x_{21}^2 & \cdots & x_{2k}^2 & x_{21}x_{22} & \cdots & x_{2(k-1)}x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nk} & x_{n1}^2 & \cdots & x_{nk}^2 & x_{n1}x_{n2} & \cdots & x_{n(k-1)}x_{nk} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \\ \beta_{11} \\ \vdots \\ \beta_{kk} \\ \beta_{12} \\ \vdots \\ \beta_{(k-1)k} \end{bmatrix}, \quad \text{e}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}.$$

Assim, os coeficientes do modelo quadrático ajustado de superfície de resposta podem ser estimados pela Equação (2.6), levando à Equação (2.9).

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^{k} \hat{\beta}_j x_{ij} + \sum_{j=1}^{k} \hat{\beta}_{jj} x_{ij}^2 + \sum_{\substack{j=1 \\ j<l}}^{k} \sum_{l=1}^{k} \hat{\beta}_{jl} x_{ij} x_{il} \tag{2.9}$$

Após o ajuste de um modelo de superfície de resposta para um conjunto de dados, a significância estatística do mesmo deve ser verificada. Uma técnica estatística para avaliar a qualidade do modelo de regressão ajustado levando em consideração as fontes de variância experimental é conhecida como análise de variância (do inglês, *analysis of variance* – ANOVA) (BEZERRA *et al*., 2008). Para análise do ajuste do modelo aos dados, as estatísticas S, R^2, R^2_{adj} e R^2_{pred} podem ser usadas. A estatística S representa a discrepância entre os valores ajustados dos valores de dados reais; assim, quanto menor for S melhor os dados são descritos pelo modelo. O coeficiente de determinação R^2 representa o quão bem o modelo se ajusta aos dados. R^2_{adj} representa a variação explicada pelo modelo ajustada pelo número de variáveis consideradas visto que R^2 tende a aumentar com a inclusão de variáveis no modelo independentemente de suas significâncias estatísticas. O coeficiente de determinação R^2_{pred} representa a capacidade de previsão do modelo para novas observações.

Além da avaliação de quão bem o modelo se ajusta aos dados, a ANOVA também permite avaliar quais as variáveis de processo são significativas e quais podem ser retiradas do modelo. A hipótese nula é de que não há relação estatística significativa entre a variável de processo e a resposta. Por outro lado, a hipótese alternativa afirma que esta relação é significativa. Para isso, o p-valor, obtido na ANOVA, é comparado com um nível de significância α, geralmente considera-se α = 0,05, indicando que há 5% de risco de se afirmar que há relação estatística quando não existe relação real. Para p-valor $\leq \alpha$, há relação estatisticamente significativa. Para p-valor $> \alpha$, esta relação não existe.

Os planejamentos de experimentos mais comuns para se ajustar modelos de primeiro grau são arranjo fatorial 2^k, arranjo Plackett-Burman e os arranjos *simplex*. Já quando deseja-se ajustar modelos de segundo grau, os mais comuns são os arranjos fatorial 3^k, composto central (do inglês, *central composite design* – CCD) e Box-Behnken (KHURI e MUKHOPADHYAY, 2010).

2.2 Arranjo composto central

O CCD é uma das classes de arranjos de superfície de resposta utilizado para se ajustar modelos de superfície de resposta de segunda ordem, Equação (2.3). Geralmente, a construção de um CCD segue uma estratégia de experimentação sequencial na qual em um primeiro momento um modelo de primeira ordem, Equação (2.2), exibe falta de ajuste (MONTGOMERY, 2017). Por conseguinte, informações adicionais são necessários para que se torne possível a estimação de termos quadráticos, gerando assim um modelo de resposta de segunda ordem (MYERS, KHURI e CARTER, 1989).

O CCD consiste de três partes. Geralmente, a primeira é composta por um arranjo fatorial completo 2^k, com 2^k pontos fatoriais, onde k é o número de variáveis de processo. A segunda corresponde a um arranjo contento pontos axiais que estão a uma distância ρ do centro do CCD, sendo que o número de pontos axiais é determinado por $2k$ e $\rho = 2^{k/4}$. A terceira parte corresponde ao ponto central, sendo que n_c é a quantidade de réplicas neste ponto. Todas as três partes formam um CCD com n corridas experimentais, onde $n = 2^k + 2k + n_c$. As variáveis de processo são geralmente codificadas, sendo que a parte fatorial do CCD é codificada em -1 e $+1$, a parte axial é codificada em $-\rho$ e $+\rho$ e o ponto central é codificado em 0 (BEZERRA *et al*., 2008).

Em um CCD, os pontos fatoriais são utilizados para se realizar a estimação dos parâmetros dos termos lineares e das interações de segunda ordem. Os pontos axiais são necessários para a estimação dos parâmetros dos termos quadráticos. O ponto central e suas réplicas são utilizados para a estimação do erro experimental (MYERS, MONTGOMERY e ANDERSON-COOK, 2016).

Uma importante propriedade dos arranjos compostos centrais é a rotacionalidade a qual garante que a variância do valor previsto permaneça constante em quaisquer pontos que apresentem a mesma distância do ponto central do arranjo. Selecionando um valor para rô de tal forma que $\rho = 2^{k/4}$ garante um CCD rotacionável (MYERS, KHURI e CARTER, 1989). Assim, teoricamente o erro experimental terá uma boa estimativa e o modelo de segunda ordem será capaz de fornecer boas previsões da resposta modelada.

Em função do local onde se encontra os pontos axiais, os arranjos compostos centrais podem ser classificados como: arranjo composto central circunscrito (CCC), sendo a forma original de arranjos compostos centrais; arranjo composto central inscrito (CCI); e arranjo composto central de face centrada (CCF). A Figura 2.1 representa os três tipos de arranjos compostos para três variáveis de processo. Para ilustrar a matriz de um arranjo composto central, a Tabela 2.1 foi construída para duas e três variáveis de processo.

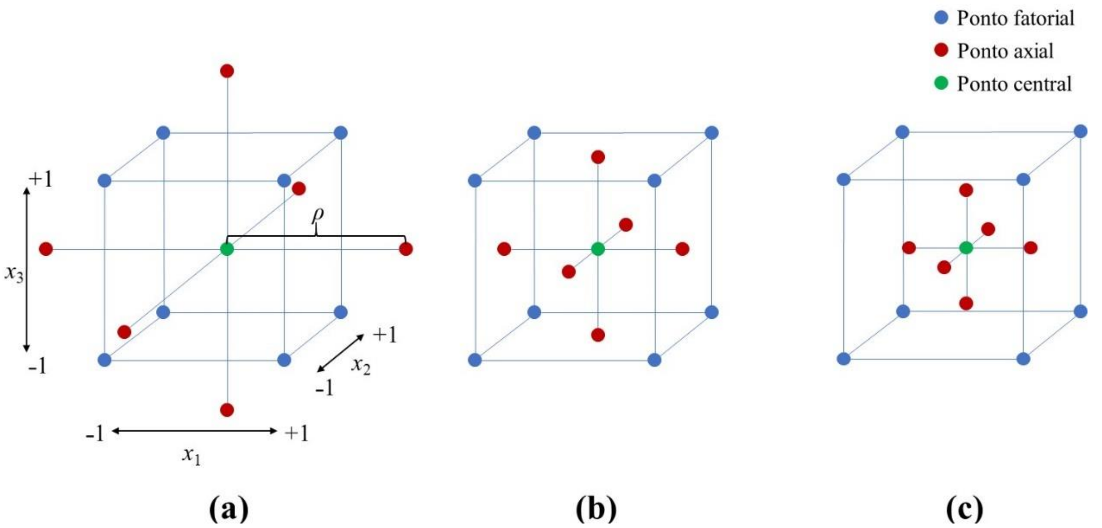

Figura 2.1 – Arranjo composto central (a) circunscrito; (b) face centrada; (c) inscrito

Tabela 2.1 – Matrizes do arranjo composto central para duas e três variáveis de processo

Duas variáveis			Três variáveis			
x_1	x_2		x_1	x_2	x_3	
-1	-1	Arranjo fatorial	-1	-1	-1	Arranjo fatorial
1	-1		1	-1	-1	
-1	1		-1	1	-1	
1	1		1	1	-1	
			-1	-1	1	
0	0	Pontos centrais e suas réplicas	1	-1	1	
⋮	⋮		-1	1	1	
			1	1	1	
-1,414	0	Pontos axiais				
1,414	0		0	0	0	Pontos centrais e suas réplicas
0	-1,414		⋮	⋮	⋮	
0	1,414					
			-1,682	0	0	Pontos axiais
			1,682	0	0	
			0	-1,682	0	
			0	1,682	0	
			0	0	-1,682	
			0	0	1,682	

Fonte: Adaptado de Lundstedt *et al*. (1998)

2.3 Abordagem analítica ao modelo de segunda ordem

Realizar uma abordagem analítica em estudos RSM é conveniente visto que o objetivo final é a otimização de uma resposta estudada. Para tanto, o ponto estacionário e a convexidade da superfície de resposta devem ser conhecidos. Considerando o modelo de superfície de resposta da Equação (2.3), o modelo ajustado pode ser expresso em notação matricial pela Equação (2.10).

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}^{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{b}} + \mathbf{x}^{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} \tag{2.10}$$

onde $\hat{\beta}_0$ é a estimativa da constante do modelo, $\hat{\mathbf{b}}^{\mathbf{T}} = \left\lfloor \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \ldots, \hat{\beta}_k \right\rfloor$ é um vetor com as estimativas dos coeficientes dos termos lineares, $\mathbf{x}^{\mathbf{T}} = \left[x_1, x_2, \ldots, x_k\right]$ é um vetor contendo as variáveis de processo e $\hat{\mathbf{B}}$ é uma matriz simétrica $k \times k$ contendo as estimativas dos coeficientes dos termos quadráticos e das interações de segunda ordem conforme Equação (2.11) (MYERS, MONTGOMERY e ANDESRON-COOK, 2016).

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \cdots & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ & \hat{\beta}_{22} & \cdots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ & & \ddots & \vdots \\ sim. & & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix} \tag{2.11}$$

O ponto estacionário é obtido através da derivação da Equação (2.10), conforme $\left(\partial\hat{y}/\partial x_i\right) = 0$, i = 1, 2, ..., k. Na forma matricial, tem-se a Equação (2.12) (DEL CASTILHO, 2007).

$$\frac{\partial\hat{y}}{\partial\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{b}} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} = 0 \tag{2.12}$$

Isolando o vetor **x** na Equação (2.12), obtém-se o ponto estacionário $\mathbf{x}_0$, conforme Equação (2.13) (DEL CASTILHO, 2007).

$$\mathbf{x}_0 = -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{B}}^{-1}\hat{\mathbf{b}} \tag{2.13}$$

Encontrar o ponto estacionário por si só não implica informação significativa ao pesquisador do ponto de vista de otimização. Desse modo, surgem duas perguntas importantes: "Qual tipo de superfície nós ajustamos? E qual tipo de ponto estacionário nós temos? " (DEL CASTILHO, 2007, p.87, tradução nossa). Para responder a essas perguntas, tem-se a análise de autovalores e autovetores da matriz simétrica $\hat{\mathbf{B}}$, procedimento conhecido como "análise canônica" (DEL CASTILHO, 2007).

A análise canônica é um método para reescrever um modelo quadrático de tal maneira que a nova forma fique mais entendível (BOX e DRAPER, 2007). Para tanto, segundo Myers, Montgomery e Anderson-Cook (2016), o método trabalha com a translação e rotação do sistema de coordenadas, na qual a origem do sistema de resposta original é transladada para o ponto estacionário e os eixos-*x* originais são rotacionados para um novo sistema de eixos, nomeadamente sistema de eixos-*w*, onde haverá k variáveis canônicas w_1, w_2, ..., w_k. Assim, a forma canônica do modelo quadrático é escrita como

$$\hat{y} = y_0 + \sum_{i=1}^{k} \lambda_i w_i^2 \tag{2.14}$$

onde y_0 é a Equação (2.10) estimada no ponto estacionário $\mathbf{x}_0$, e λ_1, λ_2, ..., λ_k são autovalores da matriz $\hat{\mathbf{B}}$ obtidos através da solução do autoproblema escrito na Equação (2.15), onde $\mathbf{I}$ é uma matriz identidade $k \times k$.

$$\left| \hat{\mathbf{B}} - \lambda \mathbf{I} \right| = 0 \tag{2.15}$$

A natureza do ponto estacionário $\mathbf{x}_0$ é caracterizada pelos sinais dos autovalores da matriz $\hat{\mathbf{B}}$, sendo que: se todos os autovalores λ_i apresentarem sinais positivos o modelo quadrático de resposta representa uma superfície convexa e $\mathbf{x}_0$ é um ponto de mínimo; se todos os autovalores λ_i apresentarem sinais negativos o modelo quadrático de resposta representa uma superfície côncava e $\mathbf{x}_0$ é um ponto de máximo; e se os autovalores λ_i tiverem sinais mistos a superfície de resposta é uma sela e $\mathbf{x}_0$ é um ponto de sela (SAMBUCINI, 2012; DEL CASTILHO, 2007).

Conhecer a natureza do ponto estacionário e consequentemente a forma da superfície de resposta do modelo ajustado é indubitavelmente importante do ponto de vista da otimização. De acordo com Del Castilho (2007), em casos onde o sentido de otimização de $\hat{y}$ não corresponde ao sentido de convexidade de sua superfície de resposta ou se a superfície de resposta é uma sela, torna-se necessário fazer uso de uma otimização restrita para que o ponto ótimo, neste caso ótimo local, esteja dentro da região experimental definida pelo planejamento de experimento. Para tal, Hoerl (1964) propôs a utilização de uma restrição em **x** definida pela distância ρ entre o centro e a extremidade do arranjo, Equação (2.16), em problemas de otimização envolvendo modelos polinomiais de segunda ordem tal como o modelo da Equação (2.10). Assim, deseja-se otimizar

$$\begin{aligned} &\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}^{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{b}} + \mathbf{x}^{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} \\ &\text{sujeito à :} \\ &\mathbf{x}^{\mathbf{T}}\mathbf{x} \leq \rho^2 \end{aligned} \tag{2.16}$$

3 OTIMIZAÇÃO MULTI-OBJETIVO

3.1 Problemas de otimização multi-objetivo

Otimização multi-objetivo é o processo de otimizar mais do que uma única resposta sistematicamente e simultaneamente (MARLER e ARORA, 2004). MOOPs são inerentes aos projetos de engenharia, ou seja, eles surgem de uma maneira natural. Em meio à característica natural de existência de um MOOP surge a competição entre as múltiplas respostas (CHIANDUSSI *et al*., 2012), fazendo com que a solução para esses tipos de problemas não seja única, mas sim um conjunto de soluções ótimas.

Em termos práticos, não existe uma única solução que otimize simultaneamente todas as respostas consideradas em um problema de otimização multi-objetivo. Por conseguinte, encontrar soluções que forneçam uma relação de perda/ganho nos diferentes objetivos é essencial (JIA e IRAPETRITOU, 2007) do ponto de vista da engenharia pois, tal relação conhecida como *trade-off* possibilita diferentes opções de escolha para que o tomador de decisões atenda requisitos de processo/produto.

3.2 Preliminares matemáticas

De uma maneira geral, as funções objetivo (respostas de processo) são dependentes do mesmo conjunto de variáveis de processo e são conflitantes entre si. Assim, um conjunto de valores de variáveis de processo que levam ao melhor valor de uma função objetivo não necessariamente implica os melhores valores das outras funções objetivo.

Nesse sentido, um MOOP com um conjunto de $p \geq 2$ funções objetivo a serem otimizadas pode ser formulado conforme o problema na Equação (3.1):

$$\begin{aligned}
&\text{Minimizar} \quad \mathbf{F}(\mathbf{x}) = [\, f_1(\mathbf{x}),\ f_2(\mathbf{x}), \ldots,\ f_p(\mathbf{x})] \\
&\text{sujeito à}: \\
&\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \\
&\mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\
&\mathbf{x} \in \mathbb{X}
\end{aligned} \tag{3.1}$$

onde $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_k]^T \in \mathbb{R}^k$ é o vetor de decisão que contém as variáveis de processo. O vetor de funções $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ mapeia o conjunto $\mathbb{R}^k$ no conjunto $\mathbb{R}^p$, denominados de espaços de variável de decisão e de função objetivo, respectivamente. Assim, $\mathbf{F}(\mathbf{x})$: $\mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^p$ é o vetor que contém as p funções objetivo tal que $f_i(\mathbf{x})$: $\mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^1$ são as funções objetivo individuais, $\forall\, i \in \{1, 2, \ldots, p\}$ (LOGIST e VAN IMPE, 2012). Os vetores $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ e $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ denotam as restrições de desigualdade e igualdade, respectivamente, os quais determinam o subconjunto $\mathbb{X} \subseteq \mathbb{R}^k$, denotado de espaço *viável* de variável de decisão, $\mathbb{X} = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \text{ e } \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0\}$. Cada ponto em $\mathbb{X}$ gera um ponto em $\mathbb{Z} \subseteq \mathbb{R}^p$, chamado de espaço *viável* de função objetivo, $\mathbb{Z} = \{\mathbf{F}(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{X}\}$. Em outras palavras, $\mathbb{Z}$ é imagem de $\mathbb{X}$ através de $\mathbf{F}$, ou seja, $\mathbb{Z} = \mathbf{F}(\mathbb{X})$ (JAIMES, MARTÍNEZ e COELLO, 2009). A Figura 3.1 ilustra as relações entre os espaços viáveis de variável de decisão e função objetivo.

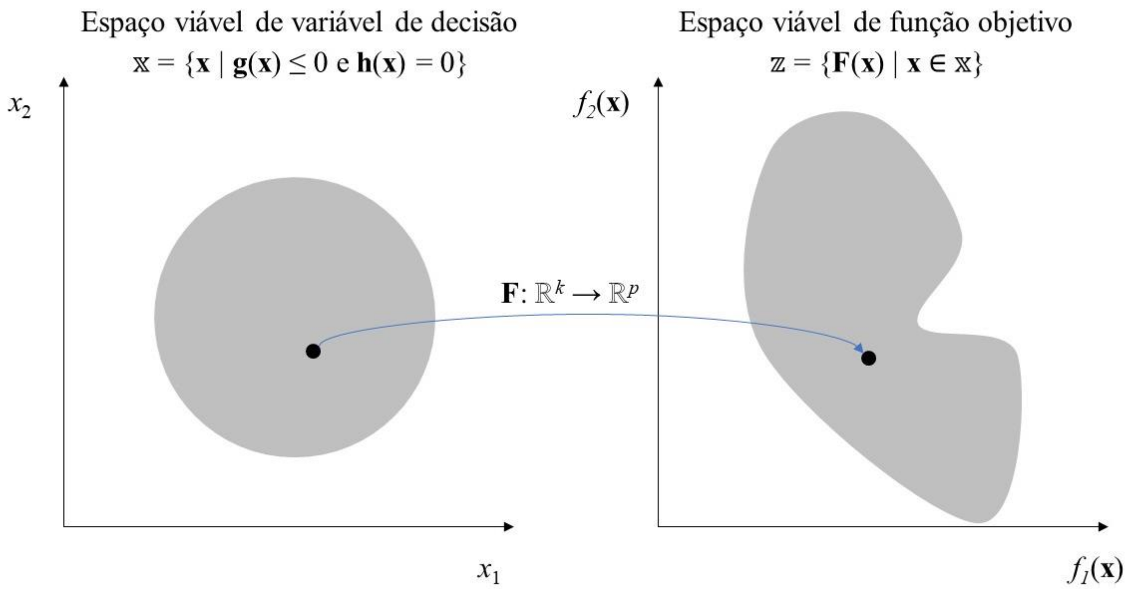

Figura 3.1 – Espaços viáveis de variável de decisão e função objetivo para um MOOP com $k = 2$ e $p = 2$

Associados a todos os problemas de otimização multi-objetivo estão os importantes conceitos definidos a seguir:

Definição 1. *Otimalidade de Pareto:* este é um conceito utilizado para determinar se um ponto pertencente a $\mathbb{X}$ é um ótimo ou não. Segundo Marler e Arora (2004), em problemas de otimização multi-objetivo, tal como o exposto na Equação (3.1), a apresentação formal do conceito é: Um ponto, $\mathbf{x}^* = [x_1^*, x_2^*, \ldots, x_k^*]^T \in \mathbb{X}$, é dito ser um Pareto ótimo se não existir um ponto alternativo, $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_k]^T \in \mathbb{X}$, tal que $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{F}(\mathbf{x}^*)$ e $f_i(\mathbf{x}) < f_i(\mathbf{x}^*)$ para pelo menos uma função objetivo. Em outras palavras, de acordo com Messac, Ismail-Yahaya e Mattson (2003), uma solução de um MOOP, $\mathbf{x}^*$, é dita ser um Pareto ótimo ou uma solução Pareto ótima, se e somente se qualquer melhoria em uma função objetivo resultar em uma deterioração de pelo menos uma das funções objetivo remanescentes.

Definição 2. *Pontos não-dominados e dominados:* um ponto $\mathbf{F}(\mathbf{x}^*) \in \mathbb{Z}$ é dito ser não-dominado se não existir um ponto alternativo, $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \in \mathbb{Z}$, tal que $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{F}(\mathbf{x}^*)$ e $f_i(\mathbf{x}) < f_i(\mathbf{x}^*)$ para pelo menos uma função objetivo. Caso contrário, o ponto $\mathbf{F}(\mathbf{x}^*)$ representando os valores das p funções objetivo é dito ser dominado (LOGIST e VAN IMPE, 2012; MARLER e ARORA, 2004).

Os conceitos de otimalidade e não-dominância de Pareto são intrínsecos. Sendo que otimalidade de Pareto está relacionada ao espaço viável de variável de decisão e não-dominância está relacionada ao espaço viável de função objetivo (MIETTINEN, 1999). Segundo Marler e Arora (2004), um ponto não-dominado em $\mathbb{Z}$ é considerado o mesmo que um ponto Pareto ótimo. Além disso, pontos dominados e não-dominados são frequentemente referenciados como pontos ótimos candidatos, sendo que suas discriminações são estabelecidas conforme as condições definidas anteriormente. A Figura 3.2 apresenta de maneira ilustrativa os conceitos de otimalidade e não-dominância de Pareto.

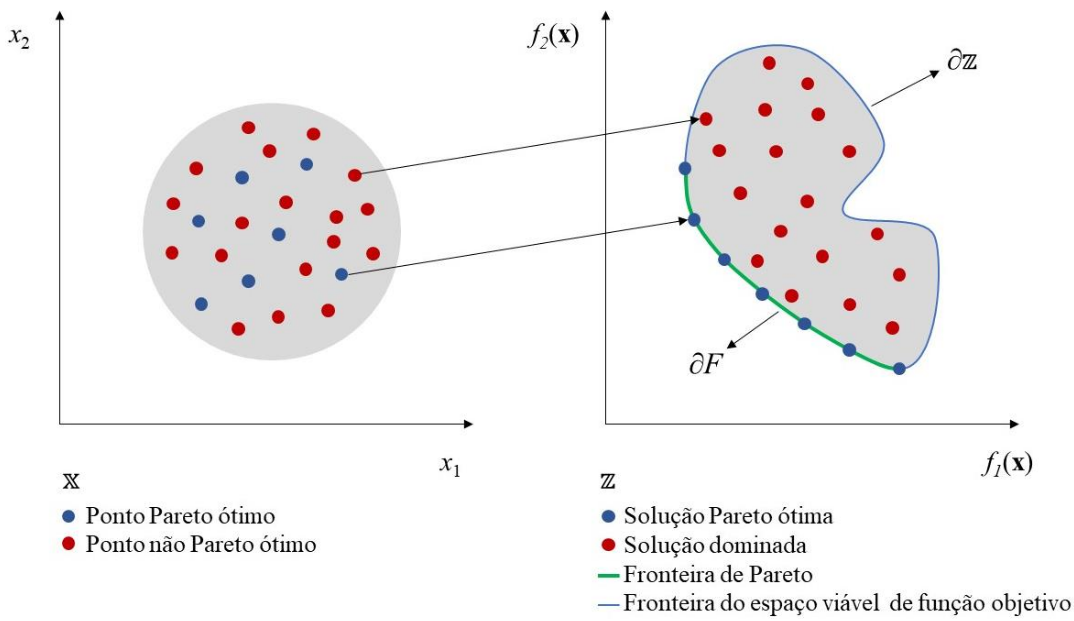

Figura 3.2 – Representação gráfica dos conceitos de otimalidade e não-dominância de Pareto para p = 2

Definição 3. *Fronteira de Pareto:* seja $\partial\mathbb{Z}$ a fronteira do espaço viável de função objetivo $\mathbb{Z}$ e seja P o conjunto de pontos não-dominados comumente denominados pontos Pareto ótimos. Fronteira de Pareto ou ainda conjunto de Pareto, ∂F, refere-se a uma região contida em $\partial\mathbb{Z}$ e constituída por P. De maneira formal, $\partial F = \{P \mid \mathbf{F}(\mathbf{x}) \in \mathbb{Z}\}$.

Definição 4. *Pontos de âncora:* seja $\mathbf{x}^{i*}$ o vetor de variáveis de processo que leve a *i*-ésima função objetivo ao seu mínimo, ou seja, $f_i\,(\mathbf{x}^{i*})$. Assim, segundo Messac e Mattson (2004), como mostrado na Figura 3.3 o ponto de âncora $F^{\,i*}$ será composto pelos valores das p funções objetivo quando a *i*-ésima função objetivo é otimizada individualmente, tal como na Equação (3.2).

$$\begin{aligned}
&\text{Minimizar} \quad f_i(\mathbf{x}) \\
&\text{sujeito à :} \\
&\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \\
&\mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\
&\mathbf{x} \in \mathbb{X}
\end{aligned} \tag{3.2}$$

A solução $\mathbf{x}^{i*}$ obtida no problema de otimização na Equação (3.2) leva a formação do ponto de âncora $F^{\,i*}$, conforme Equação (3.3) (SANCHIS *et al.*, 2008).

$$F^{i*} = \left[f_1\left(\mathbf{x}^{i*}\right),\ f_2\left(\mathbf{x}^{i*}\right), \ldots,\ f_p\left(\mathbf{x}^{i*}\right) \right]^T \tag{3.3}$$

A quantidade de pontos de âncora é determinada pela quantidade de funções objetivo no problema de otimização. Além disso, de acordo com Messac, Ismail-Yahaya e Mattson (2003), a linha que une dois pontos de âncora em casos bi-objetivo é chamada de linha de utopia e para casos com mais de duas funções o plano que une os pontos de âncora é chamado de hiperplano de utopia.

Definição 5. *Ponto de utopia:* o ponto de utopia em um MOOP é único e denotado por F^U, Figura 3.3. Tal ponto, Equação (3.4), é representado pelos melhores valores possíveis de cada função objetivo obtidos pela otimização na Equação (3.2). Geralmente, $F^U \notin \mathbb{Z}$ (MESSAC e MATTSON, 2004).

$$F^{U} = \left[f_1(\mathbf{x}^{1*}), f_2(\mathbf{x}^{2*}), \ldots, f_p(\mathbf{x}^{p*}) \right]^T \tag{3.4}$$

O ponto de utopia é inatingível na maioria dos casos de otimização. Portanto, se torna indubitavelmente necessário a busca por outros pontos mais próximos possíveis de F^U (MARLER e ARORA, 2004) conhecidos e já conceituados anteriormente como pontos Pareto ótimos.

Definição 6. *Pontos de nadir e pseudo nadir:* ponto de nadir é aquele formado simultaneamente pelos piores valores das p funções objetivo, conforme Equação (3.5), onde f_i^N é calculada através da Equação (3.6) (MESSAC e MATTSON, 2004).

$$F^{N} = \left[f_1^{N}, f_2^{N}, \ldots, f_p^{N} \right]^T \tag{3.5}$$

$$\begin{aligned} &\text{Maximizar} \quad f_i(\mathbf{x}) \\ &\text{sujeito à :} \\ &\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \\ &\mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ &\mathbf{x} \in \mathbb{X} \end{aligned} \tag{3.6}$$

Pode ser dito que F^N é inatingível e dessa maneira surge o ponto de pseudo nadir F^{PN}, Equação (3.7), no qual combina os piores valores das funções objetivo dos pontos de âncora, conforme Equação (3.8) (PEREIRA *et al.*, 2017). Na Figura 3.3 pode-se observar a descrição gráfica dos pontos de nadir e pseudo nadir.

$$F^{PN} = \left[f_1^{PN}, f_2^{PN}, \ldots, f_p^{PN} \right]^T \tag{3.7}$$

$$f_p^{PN} = MÁX \left\{ f_p(\mathbf{x}^{1*}), f_p(\mathbf{x}^{2*}), \ldots, f_p(\mathbf{x}^{p*}) \right\} \tag{3.8}$$

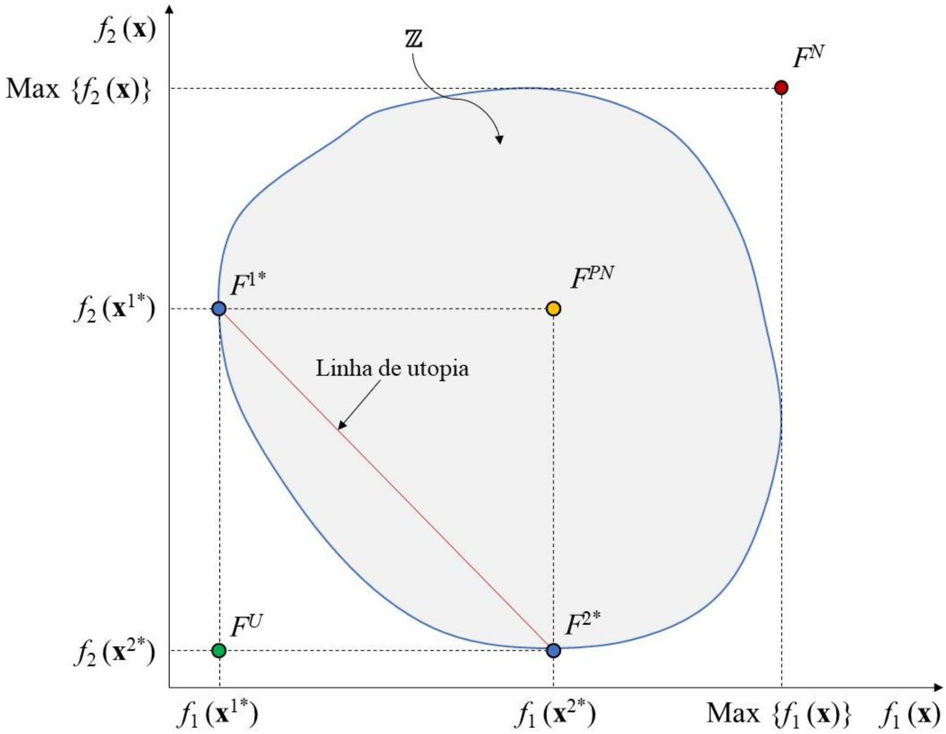

Figura 3.3 – Representação da linha de utopia e pontos de âncora, utopia, nadir e pseudo nadir para $p = 2$

Para solucionar problemas de otimização com múltiplas respostas não-lineares, pode-se utilizar o algoritmo de busca conhecido como gradiente reduzido generalizado (do inglês, *generalized reduced gradient* – GRG) que foi desenvolvido por Lasdon *et al*. (1978) e apresenta como característica essencial uma adequada convergência global, principalmente quando a rotina de otimização se inicia com as respostas próximas de suas soluções.

3.3 Métodos para solução de MOOPs

Atualmente, há diversos métodos presentes na literatura para solução de MOOPs. Uma das abordagens para geração de soluções de Pareto consiste em variar constantemente o conjunto de pesos escalares inerentes às funções objetivo. Por conseguinte, cada variação do conjunto de pesos corresponde à geração de uma solução Pareto ótima. Espera-se que variando o conjunto de pesos numéricos igualmente distribuídos irá resultar em uma boa exploração do espaço de função objetivo, ou seja, espera-se que essa estratégia gere pontos Pareto ótimos igualmente distribuídos sobre a fronteira de Pareto (MESSAC, ISMAIL-YAHAYA e MATTSON, 2003).

Alguns dos métodos mais conhecidos atualmente que adotam a estratégia mencionada acima são o NBI (DAS e DENNIS, 1998), método da restrição normal normalizado (do inglês, *normalized normal constraint* – NNC) (MESSAC, ISMAIL-YAHAYA e MATTSON, 2003), método das somas ponderadas (do inglês, *weighted sum* – WS) e método de programação de compromisso (do inglês, *compromise programming* – CP) (CHEN *et al*., 1999).

Visto que o presente trabalho utilizará o NBI como método para solução de um MOOP, somente o mesmo será detalhado na seção seguinte.

3.4 Método da interseção normal à fronteira

O método NBI foi proposto por Das e Dennis (1998) e tem como objetivo gerar a fronteira de Pareto em MOOPs não lineares, ou seja, o NBI é capaz de encontrar uma parte da região limite do espaço viável de função objetivo que contenha o conjunto de pontos Pareto ótimos.

Seja $\mathbf{\Phi}$ a matriz *payoff* $p \times p$ com a i-ésima coluna definida pela diferença entre o i-ésimo ponto de âncora e o ponto de utopia, ou seja, $F^{i*} - F^U$, conforme Equação (3.9). Então, o conjunto de pontos que formam a linha de utopia ($p = 2$) ou plano de utopia ($p \geq 3$) é referenciado como $\{\mathbf{\Phi w}_k \mid \mathbf{w}_k \in \mathbb{R}^m;\ \sum_{i=1}^{p} w_{ik} = 1,\ w_{ik} \geq 0,\ \forall k = 1, \ldots, n_{sub}\}$, onde n_{sub} é o número de subproblemas de otimização a serem resolvidos. Das e Dennis (1998) referenciaram o conjunto de pontos $\mathbf{\Phi w}_k$ como CHIM (*convex hull of individual minima* – casca convexa de mínimos individuais). A Figura 3.4 ilustra o conjunto de pontos sobre a CHIM.

$$
\begin{aligned}
\mathbf{\Phi} &= \begin{bmatrix} f_1\left(\mathbf{x}^{1*}\right) - f_1\left(\mathbf{x}^{1*}\right) & \cdots & f_1\left(\mathbf{x}^{p*}\right) - f_1\left(\mathbf{x}^{1*}\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_p\left(\mathbf{x}^{1*}\right) - f_p\left(\mathbf{x}^{p*}\right) & \cdots & f_p\left(\mathbf{x}^{p*}\right) - f_p\left(\mathbf{x}^{p*}\right) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 & \cdots & f_1\left(\mathbf{x}^{p*}\right) - f_1\left(\mathbf{x}^{1*}\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_p\left(\mathbf{x}^{1*}\right) - f_p\left(\mathbf{x}^{p*}\right) & \cdots & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{3.9}
$$

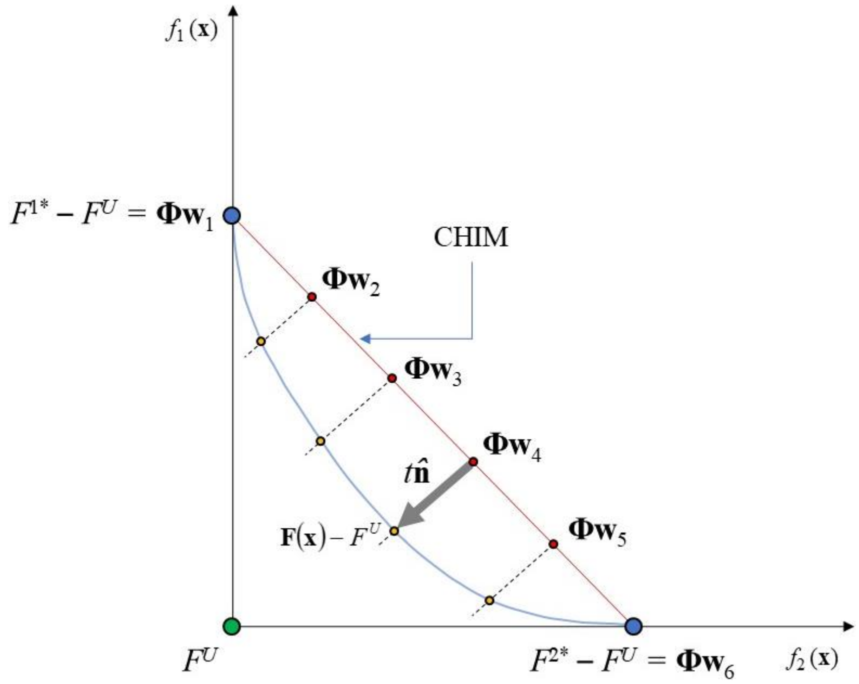

Figura 3.4 – Representação gráfica do método NBI para p = 2

O método NBI determina uma parte da fronteira $\partial\mathbb{Z}$ que contém os pontos Pareto ótimos, ou seja, ∂F. O princípio deste método é de que um ponto ótimo é encontrado na interseção entre a fronteira $\partial\mathbb{Z}$ e um vetor normal a partir de um ponto $\mathbf{\Phi w}_k$ de CHIM e direcionado ao ponto de origem F^U. Esse ponto é não-dominado, ou seja, Pareto ótimo se as condições estabelecidas na Definição 2 da Seção anterior forem satisfeitas.

Sabendo que uma combinação convexa é uma combinação linear de pontos na qual todas as coordenadas são não-negativas e a soma delas equivale a uma unidade, então um ponto $\mathbf{\Phi w}_k$ sob CHIM é obtido através de uma ponderação convexa $\mathbf{w}_k = [w_{1k}, \ldots, w_{pk}]^T$. Segundo Stehr, Graeb e Antreich (2007), o princípio do método NBI de que a partir de um vetor perpendicular à CHIM um ponto em $\partial\mathbb{Z}$ é encontrado estabelece a relação entre pesos e pontos de que uma distribuição uniforme de pesos gera uma boa distribuição de pontos ótimos candidatos. Segundo Messac e Mattson (2004), a distribuição uniforme de pontos ótimos candidatos sob a fronteira de Pareto facilita o processo de escolha pela melhor configuração de variáveis de processo visto que o tomador de decisões pode examinar toda a gama de pontos ótimos candidatos.

A uniformidade de pontos ótimos candidatos é garantida por um vetor $\hat{\mathbf{n}} = -\mathbf{\Phi e}$ perpendicular à CHIM e em direção à origem. A multiplicação por –1 é utilizada para garantir que o vetor aponte para a origem e o vetor $\mathbf{e}$ é um vetor coluna de todos 1. O conjunto de pontos sob o vetor normal à CHIM é representado por $\mathbf{\Phi w}_k + t\hat{\mathbf{n}}$, onde t é um escalar. Assim, a interseção entre esse conjunto de pontos e $\partial\mathbb{Z}$ será uma solução para o subproblema de otimização representado na Equação (3.10) (DAS e DENNIS, 1998).

$$\begin{aligned} &(\mathrm{NBI_w}) \quad Max_{(x,t)}\ t \\ &\text{sujeito à :} \\ &\mathbf{\Phi w}_k + t\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) - F^U; \quad \forall k = 1, \dots, n_{sub} \\ &\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \\ &\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\ &\mathbf{x} \in \mathbb{X} \end{aligned} \tag{3.10}$$

A fronteira de Pareto ∂F é encontrada resolvendo o subproblema de otimização $\mathrm{NBI_w}$ para vários vetores **w**. O número de subproblemas n_{sub} a serem calculados em um MOOP é encontrado de acordo com a Equação (3.11), onde p é o número de funções objetivo e $q = 1/\delta$, sendo que δ é o espaçamento uniforme entre dois pesos consecutivos (DAS e DENNIS, 1998).

$$n_{sub} = \binom{p+q-1}{q} \tag{3.11}$$

Os pesos (w_i) de cada função objetivo são gerados através de um arranjo *simplex lattice* $\{p, q\}$ (PEREIRA *et al*., 2017). A Figura 3.5 representa um *simplex lattice* para {3, 5}, ou seja, $p = 3$ e $\delta = 0{,}2$ com $n_{sub} = 21$.

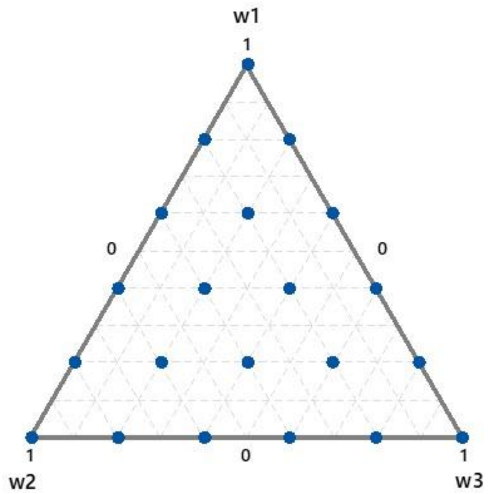

Figura 3.5 – Gráfico *simplex desing* {3, 5}

Das e Dennis (1998) provaram que o vetor $\hat{\mathbf{n}}$ faz com que o ponto ótimo candidato encontrado em NBI_w por uma certa ponderação convexa $\mathbf{w}_k$ seja independente das escalas relativas às funções objetivo. Entretanto, a medida que as escalas das funções objetivo ficam mais distintas, os pontos Pareto ótimos ficam mais distantes de cada um. Por conseguinte, mais esforço computacional é exigido visto que mais iterações são necessárias quando resolvendo um subproblema a partir do ponto ótimo do subproblema vizinho.

Para diminuir os esforços computacionais quando utilizando o NBI para funções objetivo com escalas muito discrepantes, um procedimento de normalização pode ser empregado para encontrar os pontos de âncora, utopia e pseudo nadir bem como a matriz *payoff* no espaço normalizado. A Equação (3.12) apresenta a normalização da *i*-ésima função objetivo.

$$\bar{f}_i(\mathbf{x}) = \frac{f_i(\mathbf{x}) - f_i(\mathbf{x}^{i*})}{f_i^{PN} - f_i(\mathbf{x}^{i*})} \tag{3.12}$$

A partir da normalização individual de cada função objetivo, os p pontos de âncora normalizados podem ser calculados conforme Equação (3.13).

$$\begin{aligned} \bar{F}^{i*} &= \left[\bar{f}_1(\mathbf{x}^{i*}), \ldots, \bar{f}_p(\mathbf{x}^{i*})\right]^T \\ &= \left[\frac{f_1(\mathbf{x}^{i*}) - f_i(\mathbf{x}^{i*})}{f_i^{PN} - f_i(\mathbf{x}^{i*})}, \ldots, \frac{f_p(\mathbf{x}^{i*}) - f_i(\mathbf{x}^{i*})}{f_i^{PN} - f_i(\mathbf{x}^{i*})}\right]^T \end{aligned} \tag{3.13}$$

O ponto de utopia no espaço normalizado é representado pela Equação (3.14).

$$\begin{aligned} F^{U} &= \left[\bar{f}_1(\mathbf{x}^{1*}), \ldots, \bar{f}_p(\mathbf{x}^{p*})\right]^T \\ &= \left[\frac{f_1(\mathbf{x}^{i*}) - f_i(\mathbf{x}^{i*})}{f_i^{PN} - f_i(\mathbf{x}^{i*})}, \ldots, \frac{f_p(\mathbf{x}^{i*}) - f_i(\mathbf{x}^{i*})}{f_i^{PN} - f_i(\mathbf{x}^{i*})}\right]^T \end{aligned} \tag{3.14}$$

O ponto pseudo nadir normalizado é representado pela Equação (3.15), onde $\bar{f}_i^{PN} = MÁX\left\{\bar{f}_i(\mathbf{x}^{1*}), \ldots, \bar{f}_i(\mathbf{x}^{p*})\right\}$.

$$\bar{F}^{PN} = \left[\bar{f}_1^{PN}, \ldots, \bar{f}_p^{PN}\right]^T \tag{3.15}$$

A matriz *payoff* normalizada está representa na Equação (3.16).

$$\bar{\mathbf{\Phi}} = \begin{bmatrix} \bar{f}_1(\mathbf{x}^{1*}) & \cdots & \bar{f}_1(\mathbf{x}^{p*}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{f}_p(\mathbf{x}^{1*}) & \cdots & \bar{f}_p(\mathbf{x}^{p*}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{f_1(\mathbf{x}^{1*}) - f_1(\mathbf{x}^{1*})}{f_1^{PN} - f_1(\mathbf{x}^{1*})} & \cdots & \frac{f_1(\mathbf{x}^{p*}) - f_1(\mathbf{x}^{p*})}{f_1^{PN} - f_1(\mathbf{x}^{p*})} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{f_p(\mathbf{x}^{1*}) - f_p(\mathbf{x}^{1*})}{f_p^{PN} - f_p(\mathbf{x}^{1*})} & \cdots & \frac{f_p(\mathbf{x}^{p*}) - f_p(\mathbf{x}^{p*})}{f_p^{PN} - f_p(\mathbf{x}^{p*})} \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} 0 & \cdots & \frac{f_1(\mathbf{x}^{p*}) - f_1(\mathbf{x}^{p*})}{f_1^{PN} - f_1(\mathbf{x}^{p*})} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{f_p(\mathbf{x}^{1*}) - f_p(\mathbf{x}^{1*})}{f_p^{PN} - f_p(\mathbf{x}^{1*})} & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{3.16}$$

Portanto, a formulação original do NBI, Equação (3.10), pode ser reescrita conforme o subproblema NBI$_w$ proposto na Equação (3.17). A Figura 3.6 ilustra o método NBI para o espaço normalizado de função objetivo.

$$\begin{aligned} &(\text{NBI}_\text{w}) \quad Max_{(x,t)}\ t \\ &\text{sujeito à :} \\ &\bar{\mathbf{\Phi}}\mathbf{w}_k + t\hat{\mathbf{n}} = \bar{\mathbf{F}}(\mathbf{x}); \quad \forall k = 1, \ldots, n_{sub} \\ &\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \\ &\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\ &\mathbf{x} \in \mathbb{X} \end{aligned} \tag{3.17}$$

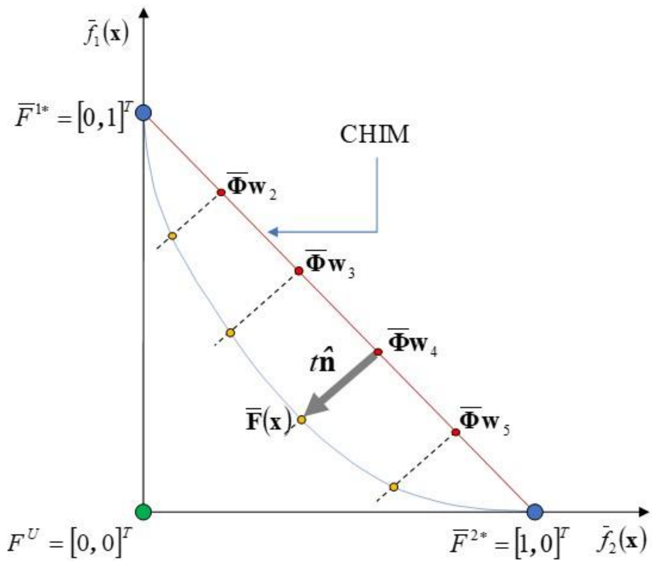

Figura 3.6 – Representação gráfica do método NBI para p = 2 no espaço normalizado de função objetivo

3.5 Erro percentual global e entropia

Em problemas de otimização multi-objetivo é uma prática comum ranquear as soluções Pareto ótimas ou então escolher a melhor solução entre as Pareto ótimas. Para cumprir esse objetivo diversas técnicas de tomadas de decisões multi-objetivo considerando um critério matemático podem ser utilizadas. Dentre essas técnicas está uma métrica desenvolvida por Rocha *et al*. (2015) que combina o índice de erro percentual global (do inglês, *global percentage error* – GPE) e o índice de Entropia de Shanon (SHANON, 1948). O índice *GPE* é um índice de erro que avalia a distância entre um valor ótimo de uma resposta e seu valor alvo. O índice de entropia de Shanon é usado para diversificar os pesos da otimização multi-objetivo.

Os índices *GPE* e *Entropia* podem ser calculados conforme Equações (3.24) e (3.25),

$$GPE = \sum_{i=1}^{p} \left| \frac{y_i^*}{T_i} - 1 \right| \qquad (3.24)$$

$$\begin{aligned} &Entropia = -\sum_{i=1}^{p} w_i \ln(w_i) \\ &\text{sujeito à} : 0 \le w_i \le 1 \end{aligned} \qquad (3.25)$$

onde y^*_i é o valor ótimo da *i*-ésima resposta correspondente a uma solução Pareto ótima, T_i é o valor alvo da *i*-ésima resposta e w_i é o peso atribuído à função objetivo. Assim, a melhor solução entre as soluções Pareto ótimas é escolhida quando o valor da relação *Entropia*/*GPE* for máximo (ROCHA *et al*., 2015), conforme Equação (3.26).

$$\xi = \frac{Entropia}{GPE} \qquad (3.26)$$

4 ANÁLISE FATORIAL

No estudo de um determinado assunto onde se tem como propósito seu entendimento aprofundado, muitas vezes se torna necessária a consideração de várias variáveis de resposta. Geralmente, essas variáveis são correlacionadas entre si, o que gera a necessidade do uso de técnicas estatísticas para gerenciar essas variáveis de tal forma a agrupá-las, criando assim uma nova medida para representá-las.

A análise de fatores, ou análise fatorial, é uma técnica estatística multivariada que agrupa múltiplas variáveis correlacionadas em grupos de fatores. De acordo com Johnson e Wichern (2007), o objetivo da FA é descrever a estrutura de covariância entre as variáveis de resposta $y_1, y_2, \ldots, y_p$, as quais são observáveis, em termos de poucos fatores $f_1, f_2, \ldots, f_m$ $(m < p)$, os quais são variáveis não-observáveis conhecidas também como variáveis latentes. Em outras palavras, Rencher (2002) afirmou que a FA tem como objetivo reduzir a repetição de informações entre as variáveis através do uso de um número menor de variáveis latentes.

Na Figura 4.1, observa-se uma simples ilustração do agrupamento de variáveis observadas e os fatores que representam cada grupo.

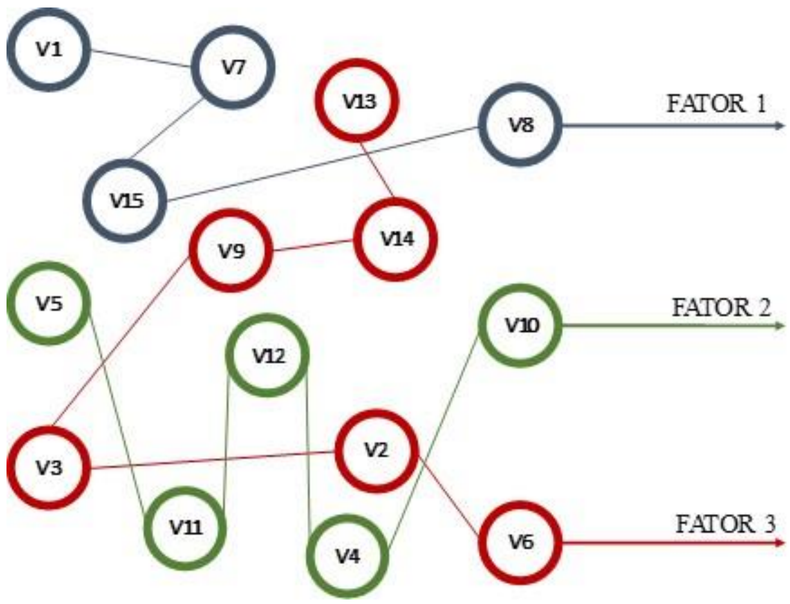

Figura 4.1 – Ilustração de agrupamento de variáveis através da FA

Em um modelo fatorial, cada variável observável é linearmente dependente de fatores comuns e de um único fator específico. O fator específico é uma variável aleatória e tem como objetivo explicar a porção da variância de determinada variável original não explicada pelos fatores comuns (FERREIRA, 2011). Existem dois tipos de modelo fatorial: ortogonal e oblíquo.

O primeiro modelo exige que os fatores comuns sejam não-correlacionados. Por outro lado, o modelo oblíquo permite que os fatores comuns sejam correlacionados. Nesse sentido, com intuito de manter a independência entre fatores para realizar otimização multi-objetivo dos mesmos, na presente pesquisa será detalhado a seguir o modelo fatorial ortogonal.

4.1 Modelo fatorial ortogonal

O modelo fatorial ortogonal expressa que cada variável aleatória y_i, i = 1, 2, …, p, é linearmente dependente de p fatores comuns f_j, j =1, 2, …, m ($m < p$) e de um único fator específico ou erro ε_i. Os fatores comuns e o fator específico têm a característica de serem não-observáveis. O modelo fatorial pode ser escrito em sua forma matricial conforme Equação (4.1):

$$\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu} = \mathbf{LF} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{4.1}$$

onde $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \ldots, y_p]^T$ é um vetor de variáveis aleatórias observáveis com vetor de média $\boldsymbol{\mu}$ e matriz de covariância $\boldsymbol{\Sigma}$. A matriz

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & \cdots & l_{1m} \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & l_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{p1} & l_{p2} & \cdots & l_{pm} \end{bmatrix}$$

é conhecida como matriz de cargas fatoriais, $\mathbf{F} = [F_1, F_2, \ldots, F_m]^T$ é um vetor aleatório contendo os fatores comuns e $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_p]^T$ é um vetor aleatório de erros (fatores específicos).

A Equação (4.1) pode ser expressada em um sistema de equações, conforme Equação (4.2):

$$\begin{aligned} y_1 - \mu_1 &= l_{11}F_1 + l_{12}F_2 + \ldots + l_{1m}F_m + \varepsilon_1 \\ y_2 - \mu_2 &= l_{21}F_1 + l_{22}F_2 + \ldots + l_{2m}F_m + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ y_p - \mu_p &= l_{p1}F_1 + l_{p2}F_2 + \ldots + l_{pm}F_m + \varepsilon_p \end{aligned} \tag{4.2}$$

onde os coeficientes l_{ij} são chamados de cargas fatoriais que servem como medidas de influência de y_i no fator comum F_j (RENCHER, 2002).

Assume-se que:

$$E(\mathbf{F}) = \mathbf{0} \tag{4.3}$$

$$Cov(\mathbf{F}) = E\left(\mathbf{F}\mathbf{F}^T\right) = \mathbf{I} \tag{4.4}$$

$$E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0} \tag{4.5}$$

$$Cov(\boldsymbol{\varepsilon}) = E\left(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\right) = \boldsymbol{\Psi} = \begin{bmatrix} \psi_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \psi_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \psi_p \end{bmatrix} \tag{4.6}$$

onde ψ_i é chamada de variância específica que é a proporção da variância de y_i explicada pelo fator específico ε_i. Além disso,

$$Cov(\mathbf{F}, \boldsymbol{\varepsilon}) = E\left(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{F}^T\right) = \mathbf{0} \tag{4.7}$$

indicando que as variáveis latentes F_j e ε_i são independentes, $i = 1, 2, \ldots, p$ e $j = 1, 2, \ldots, m$.

O modelo fatorial ortogonal é constituído pela relação na Equação (4.1) e pelas assunções nas Equações (4.3–4.7). Segundo Rencher (2002), a análise fatorial tem como ênfase expressar $\boldsymbol{\Sigma}$ em termos de $\mathbf{L}$ e $\boldsymbol{\Psi}$. Assim,

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T + \boldsymbol{\Psi} \tag{4.8}$$

De fato, considerando as assunções nas Equações (4.4), (4.6) e (4.7):

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\Sigma} = Cov(\mathbf{y}) &= E\left[(\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon})+(\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon})^T\right] \\
&= E\left[\mathbf{LF}(\mathbf{LF})^T + \mathbf{LF}\boldsymbol{\varepsilon}^T + \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{LF})^T + \boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\right] \\
&= \mathbf{L}E\left(\mathbf{FF}^T\right)\mathbf{L}^T + \mathbf{L}E\left(\mathbf{F}\boldsymbol{\varepsilon}^T\right) + E\left(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{F}^T\right)\mathbf{L}^T + E\left(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\right) \\
&= \mathbf{LL}^T + \boldsymbol{\Psi}
\end{aligned}
\tag{4.9}
$$

Da Equação (4.8), tem-se a partição da variância de y_i em duas componentes chamadas comunalidade e variância específica, conforme Equação (4.10):

$$
\begin{aligned}
\sigma_{ii} &= Var(y_i) = \left(l_{i1}^2 + l_{i2}^2 + \cdots + l_{im}^2\right) + \psi_i \\
&= h_i^2 + \psi_i \\
&= \text{comunalidade} + \text{variância específica}
\end{aligned}
\tag{4.10}
$$

onde h_i^2 é uma parte da variância de y_i explicada pelos fatores comuns e conhecida como comunalidade, e ψ_i é a variância específica correspondente a uma parte da variância de y_i explicada pelo fator específico ε_i (RENCHER, 2002).

Além disso, considerando as Equações (4.4) e (4.7), tem-se que:

$$
Cov(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = E[(\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{F}^T] = E(\mathbf{LFF}^T) + E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T) = \mathbf{L} \tag{4.11}
$$

Por conseguinte, sabe-se que:

$$
Cov(y_i, F_j) = l_{ij} \tag{4.12}
$$

Da Equação (4.12), infere-se que l_{ij} é uma medida que mostra a influência de cada variável y_i no fator F_j. Assim, cargas elevadas em valor absoluto indicam forte associação entre variável observada e fator comum.

De acordo com Ferreira (2011), a análise fatorial tem o objetivo de estimar **L** e $\boldsymbol{\Psi}$ para obter uma aproximação de $\boldsymbol{\Sigma}$ bem como obter os escores dos fatores comuns **F**. Ainda segundo ou autor, dada a estrutura da matriz $\boldsymbol{\Psi}$, os fatores específicos não contribuem para as covariâncias das variáveis observáveis. Portanto, as conclusões são feitas baseadas nos fatores comuns.

Existem diversos métodos para estimar as matrizes **L** e $\boldsymbol{\Psi}$. Esses são chamados de métodos de extração de fatores. Alguns desses são componentes principais, mínimos quadrados ponderados, mínimos quadrados generalizados, máxima verossimilhança e fatores principais (COSTELLO e OSBORNE, 2005).

De acordo com Johnson e Wichern (2007), os métodos de extração de fatores mais populares são o método de componentes principais e o método de máxima verossimilhança. O primeiro não exige uma distribuição de probabilidade específica das variáveis observáveis. Já o método de máxima verossimilhança exige que os dados sigam uma distribuição normal multivariada. Assim, será detalhado a seguir o método de componentes principais.

4.2 Adequação da aplicação do modelo fatorial

Para que a análise fatorial seja passível de aplicação, é necessário que as variáveis observadas y_1, y_2, …, y_p sejam correlacionadas. Nesse contexto, dois testes são comumente utilizados para se analisar um conjunto de dados, são eles teste de esfericidade de Bartlett e estatística de Kaiser-Meyer-Olkin.

4.2.1 Teste de esfericidade de Bartlett

De acordo com Rencher (2002), o teste de esfericidade de Bartlett testa se a matriz de correlação populacional **C** é estatisticamente igual a uma matriz identidade **I**. O teste de esfericidade de Bartlett assume que o vetor aleatório $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \ldots, y_p]^T$ tem distribuição normal multivariada. Testa-se a hipótese nula H_o: **C** = **I** contra a hipótese alternativa H_1: $\mathbf{C} \neq \mathbf{I}$. A estatística de teste $\chi^2_{\alpha;\nu}$ é uma variável aleatória com distribuição qui-quadrado com $\nu = p(p-1)/2$ graus de liberdade, onde p é a quantidade de variáveis de resposta. A estatística é

$$\chi^2 = -\left[n - 1 - \frac{(2p+5)}{6} \right] \ln |\mathbf{R}| \tag{4.13}$$

onde $|\mathbf{R}|$ é a determinante da matriz de correlação amostral e n é a quantidade de observações em cada varável. Desse modo, considerando um nível de significância α, não se aceita H_o quando $\chi^2 > \chi^2_{\alpha;[p(p-1)/2]}$.

O teste de esfericidade de Bartlett parte da assunção de que o conjunto de dados originais vem de uma população normal multivariada. Nesse sentido, um teste que pode ser utilizado para verificar tal assunção é o teste de normalidade multivariada de Mardia. Mardia (1970) sugeriu duas estatísticas para detectar a não-normalidade em uma configuração multivariada, são elas: *skewness* e *kurtosis*. Para que os dados amostrais sejam provenientes de uma população multivariada normal, ambos as estatísticas *skewness* e *kurtosis* de Mardia devem ser estatisticamente significativas. A estatística *skewness* está associada a simetria de uma distribuição e a estatística de *kurtosis* está associada as caldas da distribuição, indicando a presença ou ausência de *outliers*.

4.2.2 Estatística de Kaiser-Meyer-Olkin

Kaiser (1970) propôs uma medida para avaliar a adequação dos dados à aplicação da análise fatorial chamada de medida de adequação de amostra (do inglês, *measure of sampling adequacy* – MSA), definida conforme Equação (4.14),

$$\text{MSA} = \frac{\sum_{i \neq j} r_{ij}^2}{\sum_{i \neq j} r_{ij}^2 + \sum_{i \neq j} q_{ij}^2} \tag{4.14}$$

r_{ij} e q_{ij} são os elementos na posição (i, j) das matrizes de correlação amostral $\mathbf{R}$ e da matriz de correlação anti-imagem $\mathbf{Q}$, respectivamente, sendo $\mathbf{Q} = \mathbf{D}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{D}$, com $\mathbf{D} = \left[\left(\text{diag}\mathbf{R}^{-1} \right)^{1/2} \right]^{-1}$. Assim, a medida MSA varia de 0 a 1, sendo valores acima 0,5 aceitáveis (RENCHER, 2002).

4.3 Método de componentes principais para estimação de cargas

O método de componentes principais se baseia na decomposição espectral da matriz de covariância $\mathbf{\Sigma}$ para a estimação da matriz de cargas fatoriais $\mathbf{L}$ e da matriz de variâncias específicas $\mathbf{\Psi}$. O nome desse método de extração gera muita confusão entre análise fatorial e análise de componentes principais. Entretanto, não há cálculo de componentes principais quando utilizando componentes principais como método de estimação de cargas fatoriais e variâncias específicas. A origem do nome está ligada ao fato de que nesse método as cargas fatoriais são relacionadas aos pares de autovalores-autovetores da matriz $\mathbf{\Sigma}$ (RENCHER, 2002).

Seja *m* a quantidade de fatores selecionados e *p* a quantidade de variáveis observáveis onde $m < p$. Assim, $\mathbf{P}_m = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_m]$ é uma matriz ($p \times m$) dos primeiros *m* autovetores normalizados de $\mathbf{\Sigma}$ e $\mathbf{\Lambda}_m = [\lambda_i]$ uma matriz diagonal ($m \times m$) dos autovalores de $\mathbf{\Sigma}$, sendo que ambas as matrizes são obtidas a partir da decomposição espectral de $\mathbf{\Sigma}$. De fato, $\mathbf{\Sigma} = \mathbf{P}_m \mathbf{\Lambda}_m \mathbf{P}_m^T = \mathbf{P}_m \mathbf{\Lambda}_m^{1/2} \mathbf{\Lambda}_m^{1/2} \mathbf{P}_m^T = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$. A matriz $\mathbf{L}$ é definida conforme Equação (4.15) (FERREIRA, 2011):

$$\mathbf{L} = \mathbf{P}_m \mathbf{\Lambda}_m^{1/2} = \left[\sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1, \sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2, \ldots, \sqrt{\lambda_m}\mathbf{e}_m\right] \tag{4.15}$$

A matriz $\mathbf{\Sigma}$ pode ser expressa parcialmente segundo a Equação (4.16) visto que a contribuição dos últimos $p - m$ pares de autovalores-autovetores de $\mathbf{\Sigma}$ não é levada em consideração.

$$\mathbf{\Sigma} \cong \mathbf{L}\mathbf{L}^T \tag{4.16}$$

A contribuição dos fatores específicos também é negligenciada na representação de $\mathbf{\Sigma}$. Assim, essa contribuição pode ser incorporada no modelo conforme Equação (4.17).

$$\mathbf{\Sigma} \cong \mathbf{L}\mathbf{L}^T + \mathbf{\Psi} \tag{4.17}$$

Tendo a representação da matriz de cargas fatoriais $\mathbf{L}$, Equação (4.15), resta a representação da matriz de variâncias específicas $\mathbf{\Psi}$, Equação (4.18).

$$\mathbf{\Psi} = diag\left(\mathbf{\Sigma} - \mathbf{L}\mathbf{L}^T\right) \tag{4.18}$$

Assim, sabe-se que $\psi_i = \sigma_{ii} - \sum_{j=1}^{m} l_{ij}^2$, $i = 1, 2, \ldots, p$.

As representações nas Equações (4.15) e (4.18) são relacionadas à aproximação da matriz de covariância populacional. Assim, dada uma amostra aleatória de tamanho *n*, a matriz $\mathbf{\Sigma}$ pode ser estimada pela matriz de covariância amostral $\mathbf{S} = \hat{\mathbf{P}}_m \hat{\mathbf{\Lambda}}_m \hat{\mathbf{P}}_m^T$, sendo *m* a quantidade de fatores selecionados e *p* a quantidade de variáveis observáveis, $m < p$, $\hat{\mathbf{P}}_m = [\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \ldots, \hat{\mathbf{e}}_m]$ é uma matriz ($p \times m$) dos primeiros *m* autovetores normalizados de $\mathbf{S}$ e $\hat{\mathbf{\Lambda}}_m = [\hat{\lambda}_i]$ é uma matriz diagonal (*m*

$\times$ m) dos autovalores de **S** (FERREIRA, 2011). O modelo resultante pode ser expresso conforme Equação (4.20):

$$\mathbf{S} \cong \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}^T + \hat{\mathbf{\Psi}} \tag{4.20}$$

onde

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{P}}_m \hat{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2} = \left[\sqrt{\hat{\lambda}_1}\hat{\mathbf{e}}_1, \sqrt{\hat{\lambda}_2}\hat{\mathbf{e}}_2, \ldots, \sqrt{\hat{\lambda}_m}\hat{\mathbf{e}}_m \right] \tag{4.21}$$

A estimativa da matriz de variâncias específicas é

$$\hat{\mathbf{\Psi}} = diag\left(\mathbf{S} - \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}^T\right) \tag{4.22}$$

sendo que a estimativa para a variância específica é $\hat{\psi}_i = s_{ii} - \sum_{j=1}^{m} \hat{l}_{ij}^2$, i = 1, 2, …, p. A estimativa da i-ésima comunalidade é $\hat{h}_i^2 = \sum_{j=1}^{p} \hat{l}_{ij}^2$.

A contribuição do j-ésimo fator à variância total é expressa conforme Equação (4.23):

$$Var\left(F_j\right) = \sum_{i=1}^{p} \hat{l}_{ij}^2 = \hat{\lambda}_j \tag{4.23}$$

Dessa maneira, a proporção da variância total atribuída ao j-ésimo fator pode ser expressa conforme Equação (4.24):

$$\text{Proporção}\left(\sum_i s_{ii} \mid F_j\right) = \frac{\sum_{i=1}^{p} \hat{l}_{ij}^2}{tr(\mathbf{S})} = \frac{\hat{\lambda}_j}{tr(\mathbf{S})} \tag{4.24}$$

Uma vez que as escalas de variáveis observáveis são geralmente diferentes, é comum modelar a matriz de correlações amostrais **R** de variáveis padronizadas em vez da matriz de covariância **S**. Assim, através dos autovalores e autovetores de **R**, as estimativas das cargas fatoriais e variâncias específicas podem ser obtidas (JOHNSON e WICHERN, 2007). Segundo Rencher (2002), a matriz **R** gera melhores resultados do que **S** em análise fatorial. Assim, o modelo que representa a matriz **R** pode ser expresso conforme Equação (4.25),

$$\mathbf{R} \cong \hat{\mathbf{L}}^{*}\hat{\mathbf{L}}^{*T} + \hat{\mathbf{\Psi}}^{*} \tag{4.25}$$

sendo que o sobrescrito "*" é utilizado para diferenciar as matrizes de cargas fatoriais e variâncias específicas obtidas para representar **S** e **R**. Assim, segundo Ferreira (2011), dadas amostras aleatórias de tamanho n de p variáveis observáveis e considerando m fatores comuns, $m < p$, as matrizes de cargas fatoriais e variâncias específicas são estimadas, respectivamente, conforme Equações (4.26) e (4.27),

$$\hat{\mathbf{L}}^{*} = \hat{\mathbf{P}}_{m}^{*}\hat{\mathbf{\Lambda}}_{m}^{*1/2} = \left[\sqrt{\hat{\lambda}_{1}^{*}}\hat{\mathbf{e}}_{1}^{*}, \sqrt{\hat{\lambda}_{2}^{*}}\hat{\mathbf{e}}_{2}^{*}, \ldots, \sqrt{\hat{\lambda}_{m}^{*}}\hat{\mathbf{e}}_{m}^{*}\right] \tag{4.26}$$

onde a matriz $p \times m$ de autovetores normalizados de **R** é $\hat{\mathbf{P}}_{m}^{*} = \left[\hat{\mathbf{e}}_{1}^{*}, \hat{\mathbf{e}}_{2}^{*}, \ldots, \hat{\mathbf{e}}_{m}^{*}\right]$ e a matriz diagonal $m \times m$ de autovalores de **R** é $\hat{\mathbf{\Lambda}}_{m}^{*} = \left\lfloor \hat{\lambda}_{i}^{*} \right\rfloor$,

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{\Psi}}^{*} = \operatorname{diag}\left(\mathbf{R} - \hat{\mathbf{L}}^{*}\hat{\mathbf{L}}^{*T}\right) &= \begin{bmatrix} 1-\hat{h}_{1}^{*2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1-\hat{h}_{2}^{*2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1-\hat{h}_{p}^{*2} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 1-\sum_{j=1}^{m}\hat{l}_{1j}^{*2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1-\sum_{j=1}^{m}\hat{l}_{2j}^{*2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1-\sum_{j=1}^{m}\hat{l}_{pj}^{*2} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Assim, a estimativa da variância específica é $\hat{\psi}_{i}^{*} = 1 - \sum_{j=1}^{m}\hat{l}_{ij}^{*2}$, $i = 1, 2, \ldots, p$. A estimativa da i-ésima comunalidade é $\hat{h}_{i}^{*2} = \sum_{j=1}^{m}\hat{l}_{ij}^{*2}$. A contribuição do j-ésimo fator à variância total é expressa conforme Equação (4.28),

$$Var\left(F_{j}^{*}\right) = \sum_{i=1}^{p}\hat{l}_{ij}^{*2} = \hat{\lambda}_{j}^{*} \tag{4.28}$$

e a proporção da variância total atribuída ao j-ésimo fator pode ser expressa conforme Equação (4.29),

$$\text{Proporção}\left(\sum_i s_{ii} \mid F_j^*\right) = \frac{\sum_{i=1}^{p} \hat{l}_{ij}^{*2}}{tr(\mathbf{R})} = \frac{\hat{\lambda}_j^*}{m} \tag{4.29}$$

4.4 Número de fatores

Uma decisão importante a ser tomada quando utilizando análise de fatores é o número m de fatores comuns que se devem ser retidos, de tal forma que $m < p$, onde p é a quantidade de variáveis observadas. Existem alguns critérios para se escolher m baseados nos autovalores $\hat{\lambda}_i$ da matriz de covariância **S** (ou $\hat{\lambda}_i^*$ da matriz de correlação **R**).

Rencher (2002) propõe os seguintes critérios:

a) **Critério da percentagem de variância total explicada**: m deve ser igual a quantidade de autovalores suficientes para uma variância acumulada de no mínimo 80% da variância total tr (**S**) ou tr (**R**);
b) **Critério de Kaiser**: m deve ser igual ao número de autovalores maiores que a média dos mesmos, $\hat{\lambda}_i^* \geq 1$ quando utilizando **R**;
c) ***Scree plot***: utilizar o *scree plot*, que é um gráfico de $\hat{\lambda}_i$ (ou $\hat{\lambda}_i^*$) versus i, para procurar por uma grande diferença entre grandes e pequenos autovalores.

4.5 Rotação

As cargas fatoriais estimadas pelos métodos de extração nem sempre permitem determinar os fatores, ou seja, através da análise das cargas fatoriais nem sempre é possível identificar com clareza qual o fator a que cada variável observável se associa.

Segundo Johnson e Wichern (2007), um padrão de cargas fatoriais desejável seria aquele onde cada variável tenha elevada carga em um único fator comum e cargas moderadas e pequenas nos fatores comuns remanescentes. Entretanto, essa estrutura ideal de cargas fatoriais nem é sempre possível de ser obtida. Desse modo, de acordo com Ferreira (2011), é uma prática usual rotacionar as cargas fatoriais originais. Para Costello e Osborne (2005), o objetivo da rotação das cargas fatoriais originais é obter uma estrutura de dados mais simples e clara, ou seja, mais facilmente interpretável.

Geometricamente, rotacionar as cargas fatoriais está relacionado à rotação dos sistemas de eixos formados aos pares pelos *p* fatores comuns (JOHNSON e WICHERN, 2007). Algebricamente, a matriz $\hat{\mathbf{L}}$ ou $\hat{\mathbf{L}}^*$ do modelo pode ser rotacionada de tal modo que as cargas fatoriais rotacionadas terão a mesma habilidade de reproduzir a matriz de covariância **S** (ou correlação **R**), além de satisfazer todas as assunções do modelo (RENCHER, 2002).

Se $\hat{\mathbf{L}}$ pode ser rotacionada de tal forma que $\hat{\mathbf{L}}^{\circ} = \hat{\mathbf{L}}\mathbf{T}$, onde $\hat{\mathbf{L}}^{\circ}$ é uma matriz $p \times m$ de cargas fatoriais rotacionadas e **T** é uma matriz ortogonal, então, desde que $\mathbf{T}\mathbf{T}^T = \mathbf{I}$, a estimativa da matriz de covariância **S** permanece inalterada usando cargas rotacionadas ou não (RENCHER, 2002). De fato,

$$\mathbf{S} \cong \hat{\mathbf{L}}^{\circ}\hat{\mathbf{L}}^{\circ T} + \hat{\mathbf{\Psi}} = \hat{\mathbf{L}}\mathbf{T}\mathbf{T}^T\hat{\mathbf{L}}^T + \hat{\mathbf{\Psi}} = \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}^T + \hat{\mathbf{\Psi}} \tag{4.30}$$

Além disso, as estimativas das variâncias específicas $\hat{\psi}_i$ e das comunalidades $\hat{h}_i^2$ também permanecem inalteradas (JOHNSON e WICHERN, 2007).

Há uma variedade de tipos de rotação. Os métodos de rotação podem ser ortogonais e oblíquos. Métodos ortogonais produzem fatores não-correlacionados e os métodos oblíquos produzem fatores correlacionados. Dentro dos métodos ortogonais encontram-se a rotação *varimax*, mais comumente utilizada, *quartimax* e *equimax*. Dentro os oblíquos destacam-se o *oblimin*, *quatimin* e *promax* (COSTELLO e OSBORNE, 2005).

O método *varimax* seleciona uma matriz ortogonal **T** que maximize a função objetivo

$$V = \frac{1}{p}\sum_{j=1}^{m}\left[\sum_{i=1}^{p}\tilde{l}_{ij}^{\circ 4} - \left(\sum_{i=1}^{p}\tilde{l}_{ij}^{\circ 2}\right)^2 \Big/ p\right] \tag{4.31}$$

onde $\tilde{l}_{ij}^{\circ} = \hat{l}_{ij}^{\circ} \Big/ \sqrt{\hat{h}_i^2}$ é a carga fatorial rotacionada e escalonada pela raiz quadrada da *i*-ésima comunalidade (JOHNSON e WICHER, 2007). Assim, as $p \times m$ variáveis preditoras $\hat{l}_{ij}^{\circ}$ da função objetivo *V* serão as estimativas das cargas fatoriais rotacionadas.

4.6 Escores fatoriais

Através da análise fatorial pretende-se gerar variáveis não-correlacionadas (fatores comuns) que representem o conjunto original de variáveis correlacionadas. Quando o propósito é utilizar os fatores comuns para se realizar subsequentes análises, então é uma prática comum obter uma estimativa desses fatores para cada unidade amostral (FERREIRA, 2011). Nesse sentido, escores de fatores são valores estimados de fatores comuns aleatórios não-observados (JOHNSON e WICHER, 2007).

Dois potenciais usos para os escores de fatores são: "(1) o comportamento das observações em termos dos fatores pode ser de interesse e (2) pode-se desejar usar os escores fatoriais como entrada para outra análise…" (RENCHER, 2002, p. 438, tradução nossa).

Para realizar a estimação dos escores fatoriais existem alguns métodos tais como o método dos mínimos quadrados ponderados ou não-ponderados (ordinários) e o método da regressão. Se o método de componentes principais é utilizado para estimar as cargas fatoriais, então é comum utilizar o método dos mínimos quadrados ordinários para estimação dos escores fatoriais (JOHNSON e WICHER, 2007).

No método dos mínimos quadrados ordinários, segundo Johnson e Wicher (2007), os escores de fatores são estimados a partir da minimização da soma dos quadrados dos resíduos do modelo fatorial $\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu}=\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon}$, Eq. (4.1), onde o vetor de resíduos é $\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu}-\mathbf{LF}$. Assim, a função a ser minimizada é

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T\boldsymbol{\varepsilon}=(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu}-\mathbf{LF})^T(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu}-\mathbf{LF}) \qquad (4.32)$$

de tal forma que se tomar a derivada parcial de primeira ordem da Equação (4.32) em relação a **F** e igualar a zero tem-se a matriz de estimativas de escores fatoriais

$$\hat{\mathbf{F}}=(\mathbf{y}-\bar{\mathbf{y}})\left[\hat{\mathbf{L}}\left(\hat{\mathbf{L}}^T\hat{\mathbf{L}}\right)^{-1}\right] \qquad (4.33)$$

onde $\hat{\mathbf{F}}$ é uma matriz $n \times m$ de escores fatoriais de **S**, n é a quantidade de observações em cada variável, m é a quantidade de fatores comuns, $\hat{\mathbf{L}}$ é uma matriz $p \times m$ de cargas fatoriais de **S**, p é a quantidade de variáveis observadas, **y** é uma matriz $n \times p$ de variáveis observadas e $\bar{\mathbf{y}}$ é um vetor $n \times 1$ de médias de **y**.

Se a matriz de correlação amostral **R** for utilizada, a matriz $n \times p$ de variáveis padronizadas **Z** deve ser considerada,

$$\hat{\mathbf{F}}^* = \mathbf{Z}\left[\hat{\mathbf{L}}^*\left(\hat{\mathbf{L}}^{*T}\hat{\mathbf{L}}^*\right)^{-1}\right] \tag{4.34}$$

onde $\hat{\mathbf{F}}^*$ e $\hat{\mathbf{L}}^*$ são, respectivamente, uma matriz de escores fatoriais estimados e uma matriz de cargas fatoriais estimadas de **R**. Se as cargas fatorias rotacionadas forem usadas nas Equações (4.33) e (4.34), $\hat{\mathbf{F}}$ e $\hat{\mathbf{F}}^*$ devem ser substituídos por $\hat{\mathbf{F}}^\circ$ e $\hat{\mathbf{F}}^{*\circ}$, onde o sobrescrito "o" indica que cargas fatoriais rotacionadas estão sendo consideradas.

4.7 Diferenças entre análise fatorial e análise de componentes principais

Ambas técnicas de estatística multivariada FA e PCA têm o objetivo de redução de dimensionalidade. Uma vez que essas técnicas compartilham esse mesmo objetivo, vários pesquisadores confundem essas duas técnicas. Alguns pesquisadores até discutem PCA como um outro tipo de FA. Porém, as diferenças entre elas fazem com que esses confundimentos não sejam passíveis de discussão (RENCHER, 2002). O mesmo autor elenca cinco principais diferenças entre FA e PCA as quais estão resumidas na Tabela 4.1.

Quadro 4.1 – Diferenças entre FA e PCA

Análise fatorial	**Análise de componentes principais**
Respostas originais são combinações lineares de fatores.	Componentes principais são combinações lineares de variáveis originais.
Tentativa de explicar as covariâncias.	Ênfase em explicar a variância total $\sum_i s_{ii}$
Requer assunções.	Não requer assunções.
Fatores não são únicos, ou seja, estão sujeitos a rotação.	Componentes principais são únicos.
As estimativas dos escores fatoriais mudam de acordo com o número de fatores selecionados.	As estimativas de escores de componentes principais são independentes do número de componentes principais selecionados.

4.8 Análise hierárquica de *clusters*

Diante da complexa natureza das relações multivariadas entre variáveis de resposta há a necessidade da utilização de procedimentos exploratórios. Nesse contexto, análise fatorial e agrupamentos (*clusters*) de variáveis de respostas podem ser utilizados em conjunto como uma maneira para avaliar a dimensionalidade, identificar *outliers* e sugerir hipóteses de relações (JOHNSON e WICHER, 2007).

Técnicas de análise hierárquica de clusters têm suas origens em uma série de sucessivas fusões e divisões. Tais técnicas começam com objetos individuais, inicialmente construindo uma quantidade de *clusters* igual a de objetos. Os objetos com maior similaridade são primeiramente agrupados e mesclados de acordo com suas similaridades. Com a diminuição da similaridade, os subgrupos formam um único *cluster* (JOHNSON e WICHER, 2007).

Diversos métodos hierárquicos são utilizados para formar *clusters*, dentre eles: conexão simples, média das distâncias, conexão total e Ward, utilizado neste artigo. O método de Ward utiliza procedimentos de agrupamento hierárquico para minimizar a “perda de informação” ao unir dois grupos, considerando um aumento em um critério de soma de quadrados de erros. Os resultados do método de Ward podem ser exibidos em um dendrograma, um diagrama bidimensional que ilustra as fusões ou divisões feitas em níveis sucessivos (JOHNSON e WICHER, 2007).

5 ERRO QUADRÁTICO MÉDIO

Em processos de manufatura, quando trabalhando com melhoria de processos, dois objetivos são concomitantemente desejados: a otimização do valor esperado de uma característica de qualidade e a minimização de sua variância. Compartilhando esses dois propósitos, pesquisadores como Lin e Tu (1995) utilizaram a abordagem do erro quadrático médio (do inglês, *mean square error* – MSE) para a otimização de média e variância de maneira simultânea.

Lin e Tu (1995) inicialmente propuseram a abordagem de MSE no contexto de planejamentos de experimentos para a otimização das equações de superfície de resposta para média $[\hat{y}(\mathbf{x})]$ e variância $[\hat{\sigma}^2(\mathbf{x})]$ de uma determinada característica de qualidade, conforme Equação (5.1):

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} \quad MSE = \left[\hat{y}(\mathbf{x}) - \zeta_{\hat{y}}\right]^2 + \hat{\sigma}^2(\mathbf{x}) \\ &\text{sujeito à:} \quad \mathbf{x}^T\mathbf{x} \le \rho^2 \end{aligned} \tag{5.1}$$

onde o valor médio da característica de qualidade é aproximada ao seu valor alvo $(\zeta_{\hat{y}})$ ao mesmo tempo em que sua variância é reduzida por meio de valores ótimos das variáveis preditoras que compõem o vetor **x**.

Lin e Tu (1995) ainda propuseram uma forma alternativa de se calcular o valor da equação *MSE* através da ponderação do viés e variância, objetivando assim, a geração de várias configurações de operação.

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} \quad MSE_w = w_1\left[\hat{y}(\mathbf{x}) - \zeta_{\hat{y}}\right]^2 + w_2\hat{\sigma}^2(\mathbf{x}) \\ &\textit{sujeito à:} \quad \mathbf{x}^T\mathbf{x} \le \rho^2 \end{aligned} \tag{5.2}$$

onde w_1 e w_2 são pesos (constantes) pré-especificados. Assim, $w_1 = w_2 = 1$ resultaria na formulação original do MSE representada na Equação (5.1).

Técnicas de otimização multi-objetivo têm um importante papel em processos de manufatura. Nesse contexto, otimizar várias características de qualidade simultaneamente é desejado ao invés de otimizar uma única característica (ANTONY, 2000).

Considerando a natureza de múltiplas respostas em processos de manufatura e frequentemente a presença de correlação entre elas, a abordagem univariada para o MSE pode ser ineficiente. Segundo Chiao e Hamada (2001) e WU (2004), realizar otimizações de diferentes respostas separadamente e especialmente se essas respostas são correlacionadas não é satisfatório. Nesse sentido, Paiva *et al*. (2009) propuseram o erro quadrático médio multivariado (do inglês, *multivariate mean square error* – MMSE), combinando conceitos de erro quadrático médio, metodologia de superfície de resposta e análise de componentes principais, considerando a estrutura de correlação entre as múltiplas respostas.

Para Paiva *et al*. (2009), em processos de manufatura, um ou mais componentes principais são suficientes para representar a estrutura de correlação do conjunto de dados original. Assim, os autores propuseram a minimização de uma função global $MMSE_T$ formada pelo produtório de coeficientes iterativos representados pelas m funções $MMSE$ com autovalores maiores do que uma unidade, conforme Equação (5.3):

$$\begin{aligned}
\text{Minimizar} \quad MMSE_T &= \left[\prod_{j=1}^{m}\left(MMSE_j \mid \lambda_{PC_j} \geq 1\right)\right]^{\left(\frac{1}{m}\right)} \\
&= \left\{\prod_{j=1}^{m}\left(PC_j(\mathbf{x}) - \zeta_{PC_j}\right)^2 + \lambda_{PC_j} \mid \lambda_{PC_j} \geq 1\right\}^{\left(\frac{1}{m}\right)} \qquad (5.3) \\
& j = 1, \ldots, m \\
& m \leq p \\
& \text{sujeito à}: \quad \mathbf{x}^T\mathbf{x} \leq \rho^2
\end{aligned}$$

em que,

$$PC_j(\mathbf{x}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k}\beta_i x_i + \sum_{i=1}^{k}\beta_{ii}x_i^2 + \sum_{\substack{i=1 \\ i<j}}^{k}\sum_{j=1}^{k}\beta_{ij}x_i x_j + \varepsilon \qquad (5.4)$$

$$\zeta_{PC_j} = \mathbf{e}_j^T\left\lfloor \mathbf{Z}\left(\mathbf{y}_p \mid \zeta_{\mathbf{y}_p}\right)\right\rfloor, \quad j = 1, \ldots, m \qquad (5.5)$$

onde m é o número de componentes principais, p é o número de características de qualidade analisadas, $MMSE_j$ é a equação de erro quadrático médio multivariado do j-ésimo componente principal, $PC_j(\mathbf{x})$ é o modelo polinomial de segunda ordem dos escores definido conforme Equação (5.4), ζ_{PC_j} e λ_{PC_j} são o alvo e o autovalor do j-ésimo componente principal, respectivamente. Conforme os autores, o alvo ζ_{PC_j} deve ser intrínseco aos alvos das características de qualidade e determinado conforme Equação (5.5). O vetor $\mathbf{e}_j$ representa o autovetor $p \times 1$ inerente ao j-ésimo componente principal, $\boldsymbol{\zeta}_{\mathbf{y}_p}$ é vetor que contém os alvos das p características de qualidade e, por conseguinte, $\mathbf{Z}\left(\mathbf{y}_p \mid \boldsymbol{\zeta}_{\mathbf{y}_p}\right)$ descreve um vetor $p \times 1$ de valores padronizados do conjunto de alvos originais das p características de qualidade e calculado conforme Equação (5.6):

$$\mathbf{Z}\left(\mathbf{y}_p \mid \boldsymbol{\zeta}_{\mathbf{y}_p}\right) = \begin{bmatrix} \dfrac{\zeta_{y_1} - \bar{y}_1}{\sqrt{s_{11}}} \\ \vdots \\ \dfrac{\zeta_{y_p} - \bar{y}_p}{\sqrt{s_{pp}}} \end{bmatrix} \tag{5.6}$$

onde $\bar{y}_i$ e s_{ii} são a média e variância experimentais das respostas, respectivamente, sendo $i = 1, \ldots, p$.

Nessa abordagem, Equação (5.3), o autovalor é considerado como uma medida de variância no erro quadrático médio visto que ele representa a variabilidade do conjunto original de dados que é explicada pelo componente principal. Para mostrar a rotina de otimização do método proposto, Paiva *et al*. (2009) utilizaram um arranjo experimental CCD para modelagem e otimização do processo de torneamento do aço AISI 52100 endurecido levando em consideração a estrutura de correlação entre as características de qualidade: Tempo de vida (T), rugosidade superficial (R_a), tempo de corte (C_t), custo total (K_p), tempo total de ciclo de torneamento (T_t), e taxa de remoção de material (MRR).

Costa *et al*. (2016) utilizaram a ideia proposta por Paiva *et al*. (2009) para o MMSE com algumas modificações. No método proposto por Costa *et al*. (2016), os autores propuseram que o índice *MMSE*, Equação (5.7), fosse calculado para cada escore de componente principal, ou seja, cada configuração do arranjo experimental gera um *MMSE* correspondente ao seu componente principal. Na Equação (5.7), o subscrito j representa a j-ésimo índice *MMSE* para o j-ésimo componente principal. O alvo ζ_{PC_j} para o j-ésimo componente principal é calculado conforme proposto por Paiva *et al*. (2009), Equação (5.5). PC_{escore_j} correspondem aos valores dos n escores referentes ao j-ésimo componente principal que podem ser extraídos da j-ésima coluna da matriz $\mathbf{PC}_{escores}$ na qual é calculada pela Equação (5.8).

$$MMSE_j = \left[PC_{escore_j} - \zeta_{PC_j}\right]^2 + \lambda_{PC_j} \quad (5.7)$$

$$\mathbf{PC}_{escores} = \mathbf{ZE} = \begin{bmatrix} \left(\dfrac{y_{11}-\bar{y}_1}{\sqrt{s_{11}}}\right) & \cdots & \left(\dfrac{y_{p1}-\bar{y}_p}{\sqrt{s_{pp}}}\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\dfrac{y_{1n}-\bar{y}_1}{\sqrt{s_{11}}}\right) & \cdots & \left(\dfrac{y_{pp}-\bar{y}_p}{\sqrt{s_{pp}}}\right) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} e_{11} & \cdots & e_{m1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{1p} & \cdots & e_{mp} \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

Na abordagem proposta por Paiva *et al*. (2009), os escores dos componentes principais são modelados por superfície de resposta. Já na abordagem proposta por Costa *et al*. (2016), os índices *MMSE* é que são modelados por superfície de resposta considerando a matriz de arranjo experimental que gerou as respostas originais, conforme Equação (5.9). Assim, um problema de otimização não linear é construído com as funções objetivo *MMSE*, sendo que a quantidade de funções objetivo será igual à quantidade de componentes principais selecionados.

$$MMSE_j(\mathbf{x}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k}\beta_i x_i + \sum_{i=1}^{k}\beta_{ii}x_i^2 + \sum_{\substack{i=1 \\ i<j}}^{k}\sum_{j=1}^{k}\beta_{ij}x_i x_j + \varepsilon \quad (5.9)$$

O método proposto por Paiva *et al*. (2009) e modificado por Costa *et al*. (2016) apresenta algumas vantagens, sendo elas: o conjunto de respostas originais correlacionadas sofre uma transformação para um conjunto de componentes não correlacionados; o número de funções objetivo pode ser reduzido em relação ao número de respostas originais, o que pode reduzir tempo de otimização bem como esforço computacional; o sentido de otimização das funções objetivo é normalizado, evitando o problema de conflito entre os sinais dos autovetores e do sentido de otimização das respostas originais; os alvos das respostas originais podem ser transformados em escore de componente principal, correspondendo ao alvo do mesmo; a metodologia de superfície de resposta é utilizada para estimar equações multivariadas.

Costa *et al*. (2016) ainda combinaram os conceitos de MMSE com o método NBI para a otimização do processo de fresamento de topo do aço AISI 1045, criando assim uma abordagem híbrida chamada NBI-MMSE. O problema de otimização proposto pelos autores, levando em consideração dois componentes principais, é representado pela Equação (5.10):

$$(\mathrm{NBI_w}) \qquad Min_{(\mathbf{x})}\ \bar{f}_2(\mathbf{x}) = \left[\frac{MMSE_2(\mathbf{x}) - MMSE_2(\mathbf{x}^{2*})}{MMSE_2^{PN} - MMSE_2(\mathbf{x}^{2*})}\right]$$

sujeito à :

$$\left[\frac{MMSE_1(\mathbf{x}) - MMSE_1(\mathbf{x}^{1*})}{MMSE_1^{PN} - MMSE(\mathbf{x}^{1*})}\right] - \left[\frac{MMSE_2(\mathbf{x}) - MMSE_2(\mathbf{x}^{2*})}{MMSE_2^{PN} - MMSE_2(\mathbf{x}^{2*})}\right] + 2w_{1k} = 0$$
$$\mathbf{x}^T\mathbf{x} \le \rho^2$$
$$\forall k = 1, \ldots, n_{sub} \tag{5.10}$$

onde $\bar{f}_2(\mathbf{x})$ é a equação normalizada de $MMSE_2(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}$ é o vetor que contém as variáveis de processo, $MMSE_1(\mathbf{x}^{1*})$ e $MMSE_2(\mathbf{x}^{2*})$ são os valores de utopia obtidos através da otimização individual de cada função *MMSE* da Equação (5.9), $MMSE_1^{PN}$ e $MMSE_2^{PN}$ são os valores de pseudo nadir, w_{1k} é o peso atribuído à função objetivo $MMSE_1(\mathbf{x})$ e n_{sub} é a quantidade de subproblemas de otimização.

6 MÉTODO NBI-MMSE-FA

A informação contida em um conjunto original de p respostas correlacionadas pode ser descrita em um conjunto menor de m variáveis latentes (fatores) usando a técnica multivariada de análise fatoriais, sendo $m < p$, onde a quantidade de fatores dependerá da força da estrutura de correlação.

Para cada variável latente não-correlacionada com as remanescentes, um modelo de segunda ordem pode ser ajustado usando a metodologia de superfície de resposta. O valor alvo de cada um desses fatores pode ser estabelecido através da otimização individual do modelo polinomial de segunda ordem de cada fator, sendo que o sentido de otimização da equação polinomial dependerá das respostas as quais cada fator representa.

Um índice de erro quadrático médio pode ser associado a cada fator com o intuito de aproximar o fator de seu valor alvo enquanto considerando sua contribuição à variação total. Portanto, a equação do erro quadrático médio de cada fator corresponderá a uma função multi-objetivo e manterá a relação com as respostas originais. Assim, otimizando as m equações de erro quadrático médio dos fatores, as p variáveis originais correlacionadas serão otimizadas. Através da adição de algumas restrições, o problema de otimização multi-objetivo está completo e pode ser inicializado.

Para efeito de se obter uma boa representação visual do índice de erro quadrático médio multivariado, os sobrescritos que indicam o uso da matriz de correlação amostral **R** e escores rotacionados serão omitidos nas formulações. Entretanto, as formulações podem ser utilizadas quando considerando a matriz **S** ou **R** e os escores podem ser rotacionados ou não. Na presente Dissertação, a matriz **R** será usada e os escores utilizados para modelagem dos fatores serão rotacionados.

Matematicamente, a equação de erro quadrático médio multivariado associado aos escores de fatores rotacionados pode ser apresentada conforme Equação (6.1),

$$\begin{aligned} &MMSE_{F_j}(\mathbf{x}) = [F_j(\mathbf{x}) - \zeta_{F_j(\mathbf{x})}]^2 + \sum_{i=1}^{p} l_{ij}^2 \\ &j = 1, 2, \ldots, m \end{aligned} \qquad (6.1)$$

onde p é a quantidade de fatores, $MMSE_{F_j}(\mathbf{x})$ é a equação de erro quadrático médio multivariado correspondente ao j-ésimo fator, $F_j(\mathbf{x})$ é o modelo polinomial de segunda ordem do *j*-ésimo fator obtido através do uso de um arranjo CCD. $\zeta_{F_j(\mathbf{x})}$ é o valor alvo calculado através da otimização individual de $F_j(\mathbf{x})$ levando em consideração a restrição de espaço experimental $\mathbf{x}^T\mathbf{x} \le \rho^2$. $\sum_{i=1}^{p} l_{ij}^2$ é a variância do *j*-ésimo fator, conforme Equação (4.28). Em outras palavras, esse somatório de cargas fatoriais é a contribuição do *j*-ésimo fator à variância total. O sentido de otimização das equações de erro quadrático médio dos fatores será sempre de minimização uma vez que o objetivo é reduzir o viés enquanto levando em consideração a variância.

Desde que os escores dos fatores são obtidos pela Equação (4.34), um modelo polinomial de segunda ordem para cada fator pode ser obtido usando o método OLS, conforme Equação (6.2),

$$F_j(\mathbf{x}) = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^{k}\hat{\beta}_i x_i + \sum_{i=1}^{k}\hat{\beta}_{ii} x_i^2 + \sum_{\substack{i=1 \\ i<l}}^{k}\sum_{l=1}^{k}\hat{\beta}_{il} x_i x_l \tag{6.2}$$

onde $\hat{\beta}_0$ é a estimativa da constante do modelo, *k* é a quantidade de variáveis de controle, $\hat{\beta}$ é coeficiente polinomial e *x* representa cada variável de controle.

Considerando o método de otimização NBI, um problema de otimização bi-objetivo resolvido pela abordagem NBI-MMSE-FA pode ser formulado conforme Equação (6.3),

$$\begin{aligned}
&(\text{NBI}_{\text{w}}) \quad \text{Min} \quad [\overline{MMSE}_{F_2}(\mathbf{x})] \\
&\text{sujeito à :} \\
&\quad \overline{MMSE}_{F_1}(\mathbf{x}) - \overline{MMSE}_{F_2}(\mathbf{x}) + 2w_{1k} = 0 \\
&\quad \mathbf{x}^T\mathbf{x} \le \rho^2 \\
&\quad \forall k = 1, \ldots, n_{sub}
\end{aligned} \tag{6.3}$$

onde $\overline{MMSE}_{F_j}(\mathbf{x})$ é a forma normalizada da função objetivo e é definida conforme Equação (6.4),

$$\overline{MMSE_{F_j}}(\mathbf{x}) = \frac{MMSE_{F_j} - MMSE_{F_j}(\mathbf{x}^{j*})}{MMSE_{F_j}^{PN} - MMSE_{F_j}(\mathbf{x}^{j*})}, \quad j = 1, 2 \tag{6.4}$$

onde $MMSE_{F_j}(\mathbf{x}^{j*})$ é o valor ótimo da *j*-esima função objetivo obtido por meio da minimização da Equação (6.1) levando em consideração a restrição de espaço experimental $\mathbf{x}^T\mathbf{x} \leq \rho^2$. O vetor de solução $\mathbf{x}^{j*}$ contém os valores das variáveis de controle que otimizam a função objetivo $MMSE_{F_j}(\mathbf{x})$. $MMSE_{F_j}^{PN}$ é o pior valor da *j*-ésima função objetivo, ou seja, $MMSE_{F_1}^{PN} = MMSE_{F_1}(\mathbf{x}^{2*})$ e $MMSE_{F_2}^{PN} = MMSE_{F_2}(\mathbf{x}^{1*})$.

O método NBI-MMSE-FA caracteriza-se como um método de otimização multi-objetivo multivariado, pois combina os métodos de interseção normal à fronteira e erro quadrático médio e a técnica de estatística multivariada análise fatorial. Assim, a principal contribuição do método NBI-MMSE-FA está relacionada a geração de soluções ótimas das respostas originais que sejam viáveis e reais na prática em problemas de otimização com várias respostas de processo correlacionadas e modeladas por arranjos de superfície de resposta.

As funções objetivo $\overline{MMSE_{F_j}}(\mathbf{x})$ no problema de otimização multi-objetivo mantém relações diretas com as respostas originais do processo devido à aplicação da análise fatorial. Assim, o processo de otimização, mesmo otimizando as *m* funções $\overline{MMSE_{F_j}}(\mathbf{x})$, irá otimizar as *p* respostas originais do processo.

O procedimento para realização do método NBI-MMSE-FA é mostrado na Figura 6.1 e será detalhado a seguir para replicação e melhor entendimento através das seguintes etapas:

Etapa 1 – Construir o arranjo experimental: uma matriz de arranjo CCD deve ser construída considerando as variáveis de controle. Medir, calcular e armazenar as respostas do processo.

Etapa 2 – Definir os modelos quadráticos das respostas originais: um modelo polinomial de segunda ordem, Equação (2.9), deve ser calculado para cada resposta do processo utilizando o método de estimação OLS ou o método de mínimos quadrados ponderados (do inglês – *weighted least squares* – WLS).

Etapa 3 – Testar a adequação dos dados à aplicação da análise fatorial: antes de conduzir a FA é indispensável testar a adequação dos dados à sua aplicação. Para isso, pode-se realizar o teste de esfericidade de Bartlett e calcular a estatística de Kaise-Meyer-Olkin, os quais estão detalhados na Subseção 4.2. Aceitando a hipótese alternativa de que há correlação entre as respostas e sendo o índice MSA ≥ 0,5, a FA pode ser conduzida.

Etapa 4 – Realizar a análise fatorial:

Etapa 4.1 – Calcular as matrizes de cargas fatoriais e variâncias específicas: as cargas fatoriais e as variâncias específicas devem ser estimadas utilizando algum método de estimação, tais como o método de componentes principais ou o método da máxima verossimilhança. Na presente pesquisa o método de componentes principais foi utilizado e o mesmo está detalhado na Subseção 4.3.

Etapa 4.2 – Calcular o número de fatores: o número de fatores *m* deve ser calculado considerando o critério da percentagem de variância total explicada, o critério de Kaiser e o *scree plot*, todos detalhados na Subseção 4.4.

Etapa 4.3 – Rotacionar os fatores: rotacionar os fatores significa rotacionar as cargas fatoriais estimadas na Etapa 4.1. Na presente Dissertação, o método *varimax* foi utilizado e o mesmo está detalhado na Subseção 4.5.

Etapa 4.4 – Estimar os escores fatoriais: os escores fatoriais devem ser estimados para que os fatores (variáveis latentes) sejam modelados e subsequentemente otimizados. Para isso, alguns métodos podem ser utilizados tais como o dos mínimos quadrados ponderados ou ordinários e o método de regressão. Na presente pesquisa o método dos mínimos quadrados ordinários foi utilizado e o mesmo está detalhado na Subseção 4.6.

Etapa 5 – Definir os modelos quadráticos para os fatores rotacionados: a partir dos escores estimados para cada um dos *m* fatores, um modelo polinomial de segunda ordem, $F_j(\mathbf{x})$, pode ser ajustado para cada fator utilizando o método OLS ou WLS considerando o arranjo CCD construído na Etapa 1, conforme Equação (6.2).

Etapa 6 – Definir as equações de erro quadrático médio multivariado para cada fator: a partir das *m* equações polinomiais $F_j(\mathbf{x})$, $j = 1, 2, \ldots, m$, *m* equações de erro quadrático médio multivariado, $MMSE_{F_j}(\mathbf{x})$, devem ser estabelecidas conforme Equação (6.1) e as mesmas serão as funções objetivo do problema de otimização.

Etapa 7 – Definir os pontos de utopia e pseudo nadir: calcular os melhores valores $MMSE_{F_j}(\mathbf{x}^{j*})$ através do problema de otimização restrito $\text{Min}_{\mathbf{x}^T\mathbf{x}\le\rho^2}\ \{MMSE_{F_j}(\mathbf{x})\}$. O vetor de solução $\mathbf{x}^{j*} = [x_1^{j*}, x_2^{j*}, \ldots, x_k^{j*}]^T$ contém os valores das *k* variáveis de controle que otimiza a *j*-ésima equação $MMSE_{F_j}(\mathbf{x})$. Os *m* melhores valores irão compor o ponto de utopia $F^U = [MMSE_{F_1}(\mathbf{x}^{1*}), MMSE_{F_2}(\mathbf{x}^{2*}), \ldots, MMSE_{F_m}(\mathbf{x}^{m*})]^T$. O ponto de pseudo nadir será

$$F^{PN} = [MMSE_{F_1}^{PN}, MMSE_{F_2}^{PN}, \ldots, MMSE_{F_m}^{PN}]^T \text{ , onde}$$

$$MMSE_{F_j}^{PN} = MÁX \; \{MMSE_{F_j}(\mathbf{x}^{1*}), MMSE_{F_j}(\mathbf{x}^{2*}), \ldots, MMSE_{F_j}(\mathbf{x}^{m*})\}.$$

Etapa 8 – Normalização da matriz *payoff* e das funções objetivo: obter a matriz *payoff* no espaço normalizado, conforme Equação (3.16), a partir dos pontos de utopia e pseudo nadir obtidos na Etapa 7. As funções objetivo no problema de otimização também devem ser normalizadas segundo a Equação (6.4), gerando assim $\overline{MMSE_{F_j}}(\mathbf{x})$.

Etapa 9 – Definir o número de subproblemas de otimização: antes de realizar o método NBI-MMSE-FA, o número de subproblemas de otimização deve ser calculado conforme Equação (3.11). Na presente Dissertação, o número de funções objetivo p = 2 e o espaçamento uniforme entre dois pesos consecutivos δ = 0,05, o que resulta em número de subproblemas de otimização n_{sub} = 21.

Etapa 10 – Conduzir o método NBI-MMSE-FA: de forma iterativa, o método NBI-MMSE-FA deve ser realizado, conforme Equação (6.3), considerando diferentes pesos definidos na Etapa 9. Para encontrar as soluções ótimas, o algoritmo GRG pode ser utilizado. Construir a fronteira de Pareto contendo as soluções Pareto ótimas considerando as funções normalizadas $\overline{MMSE_{F_j}}(\mathbf{x})$.

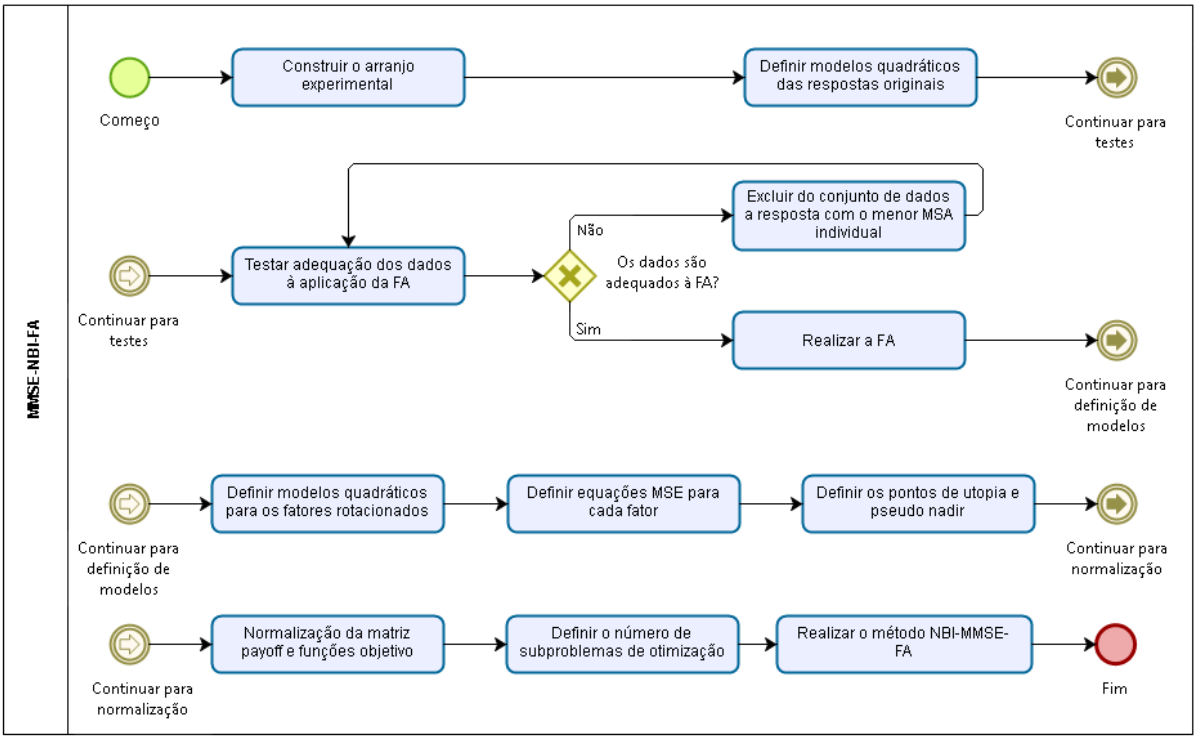

Figura 6.1 – Procedimento para realização do método NBI-MMSE-FA

6.1.1 Desenvolvimento algébrico do método NBI

Na literatura, encontra-se frequentemente a formulação do método NBI na versão vetorial e matricial, tal como nas Equações (3.10) e (3.17). Ressalva-se alguns estudos como em Costa *et al*. (2016) e Naves *et al*. (2017), onde a formulação do método NBI foi apresentada de maneira algébrica para apenas duas funções objetivo. Para casos com $p \geq 3$, o desenvolvimento algébrico do método NBI ainda não foi apresentado. Portanto, para preencher essa lacuna presente na literatura bem como facilitar o entendimento e aplicação do método NBI para casos com p funções objetivo, a formulação algébrica do método será demonstrada a seguir.

Primeiramente, o subproblema de otimização na Equação (3.17) pode ser reescrito em termo de minimização de $-t$, tal como na Equação (6.5).

$$\begin{aligned}
&(\mathrm{NBI_w}) \quad Min_{(x,t)} \; -t \\
&\text{sujeito à :} \\
&\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{x}) - \overline{\mathbf{\Phi}}\mathbf{w}_k - t\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{0}; \quad \forall k = 1, \ldots, n_{sub} \\
&\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \\
&\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\
&\mathbf{x} \in \mathbb{X}
\end{aligned} \tag{6.5}$$

A restrição $\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{x}) - \overline{\mathbf{\Phi}}\mathbf{w}_k - t\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{0}$ pode ser reescrita em termos de variáveis, conforme Equação (6.6).

$$\begin{aligned}
&\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{x}) - \overline{\mathbf{\Phi}}\mathbf{w}_k - t\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{0} \\
&\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{x}) - \overline{\mathbf{\Phi}}\mathbf{w}_k - t(-\overline{\mathbf{\Phi}}\mathbf{e}) = \mathbf{0} \quad \leftrightarrow \quad \overline{\mathbf{F}}(\mathbf{x}) - \overline{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{w}_k - t\mathbf{e}) = \mathbf{0} \\
&\begin{bmatrix} \bar{f}_1(\mathbf{x}) \\ \bar{f}_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \bar{f}_p(\mathbf{x}) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) & \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) & \cdots & \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*p}) \\ \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) & \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) & \vdots & \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*p}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) & \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) & \cdots & \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p}) \end{bmatrix} \times \left\{ \begin{bmatrix} w_{1k} \\ w_{2k} \\ \vdots \\ w_{pk} \end{bmatrix} - t \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \right\} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\begin{bmatrix} \bar{f}_1(\mathbf{x}) \\ \bar{f}_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \bar{f}_p(\mathbf{x}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) & -\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) & \cdots & -\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*p}) \\ -\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) & -\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) & \vdots & -\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*p}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) & -\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) & \cdots & -\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p}) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} w_{1k} - t \\ w_{2k} - t \\ \vdots \\ w_{pk} - t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\begin{bmatrix} \bar{f}_1(\mathbf{x}) - \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) \cdot (w_{1k} - t) - \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) \cdot (w_{2k} - t) - \cdots - \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*p}) \cdot (w_{pk} - t) \\ \bar{f}_2(\mathbf{x}) - \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) \cdot (w_{1k} - t) - \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) \cdot (w_{2k} - t) - \cdots - \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*p}) \cdot (w_{pk} - t) \\ \vdots \\ \bar{f}_p(\mathbf{x}) - \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) \cdot (w_{1k} - t) - \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) \cdot (w_{2k} - t) - \cdots - \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p}) \cdot (w_{pk} - t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{6.6}$$

A partir da Equação (6.6), restrição do NBI ainda em sua forma matricial, pode-se extrair um sistema algébrico de *p* equações, conforme Equações (6.7 – 6.9).

$$\begin{bmatrix} \bar{f}_1(\mathbf{x}) - w_{1k}\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k}\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk}\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*p}) + t\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) + t\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + t\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*p}) \\ \bar{f}_2(\mathbf{x}) - w_{1k}\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k}\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk}\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*p}) + t\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) + t\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + t\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*p}) \\ \vdots \\ \bar{f}_p(\mathbf{x}) - w_{1k}\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k}\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk}\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p}) + t\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) + t\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + t\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\frac{\bar{f}_1(\mathbf{x}) - w_{1k}\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k}\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk}\cdot\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*p})}{\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*p})} = -t \tag{6.7}$$

$$\frac{\bar{f}_2(\mathbf{x}) - w_{1k}\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k}\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk}\cdot\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*p})}{\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*p})} = -t \tag{6.8}$$

$$\vdots$$

$$\frac{\bar{f}_p(\mathbf{x}) - w_{1k}\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k}\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk}\cdot\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p})}{\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p})} = -t \tag{6.9}$$

As $p - 1$ restrições do método NBI são obtidas igualando a Equação (6.9) com as $p - 1$ equações anteriores provenientes da Equação (6.6). Portanto, o método NBI tem sua formulação algébrica para $p = 3$ representada pela Equação (6.10), onde o escalar $-t$ na Equação (6.5) é substituído pela Equação (6.9). Para MOOPs com $p > 3$, a formulação a ser usada está na Equação (6.10). É importante destacar que a formulação abaixo é restrita a funções objetivo com sentido de otimização de minimização. Dessa maneira, um tratamento adequado das funções objetivo deve ser feito caso as mesmas possuam sentidos de otimização divergentes.

$$
\begin{aligned}
&(\mathrm{NBI_w}) \quad Min_{(x,t)} \left[\frac{\bar{f}_3(\mathbf{x}) - w_{1k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*2}) - w_{3k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*3})}{\bar{f}_3(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*2}) + \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*3})} \right] \\
&\text{sujeito à :} \\
&\frac{\bar{f}_1(\mathbf{x}) - w_{1k} \cdot \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k} \cdot \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) - w_{3k} \cdot \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*3})}{\bar{f}_1(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*2}) + \bar{f}_1(\mathbf{x}^{*3})} \\
&- \left[\frac{\bar{f}_3(\mathbf{x}) - w_{1k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*2}) - w_{3k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*3})}{\bar{f}_3(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*2}) + \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*3})} \right] = 0 \\
&\frac{\bar{f}_2(\mathbf{x}) - w_{1k} \cdot \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k} \cdot \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) - w_{3k} \cdot \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*3})}{\bar{f}_2(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*2}) + \bar{f}_2(\mathbf{x}^{*3})} \\
&- \left[\frac{\bar{f}_3(\mathbf{x}) - w_{1k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*2}) - w_{3k} \cdot \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*3})}{\bar{f}_3(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*2}) + \bar{f}_3(\mathbf{x}^{*3})} \right] = 0 \\
&\forall k = 1, \ldots, n_{sub} \\
&\mathbf{g}(\mathbf{x}) \le \mathbf{0} \\
&\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\
&\mathbf{x} \in \mathbb{X}
\end{aligned}
\tag{6.10}
$$

$$
\begin{aligned}
&(\mathrm{NBI_w}) \quad Min_{(x,t)} \left[\frac{\bar{f}_p(\mathbf{x}) - w_{1k} \cdot \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k} \cdot \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk} \cdot \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p})}{\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p})} \right] \\
&\text{sujeito à :} \\
&\frac{\bar{f}_i(\mathbf{x}) - w_{1k} \cdot \bar{f}_i(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k} \cdot \bar{f}_i(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk} \cdot \bar{f}_i(\mathbf{x}^{*p})}{\bar{f}_i(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_i(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + \bar{f}_i(\mathbf{x}^{*p})} \\
&- \left[\frac{\bar{f}_p(\mathbf{x}) - w_{1k} \cdot \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) - w_{2k} \cdot \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) - \cdots - w_{pk} \cdot \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p})}{\bar{f}_p(\mathbf{x}^{*1}) + \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*2}) + \cdots + \bar{f}_p(\mathbf{x}^{*p})} \right] = 0 \\
&\forall i = 1, \ldots, p-1; \forall k = 1, \ldots, n_{sub} \\
&\mathbf{g}(\mathbf{x}) \le \mathbf{0} \\
&\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\
&\mathbf{x} \in \mathbb{X}
\end{aligned}
\tag{6.11}
$$

A formulação exposta na Equação (6.11) pode ser utilizada na abordagem de otimização proposta nessa pesquisa, NBI-MMSE-FA, onde as funções objetivo $\bar{f}_i(\mathbf{x})$ devem ser substituídas pelas equações de erro quadrático médio dos fatores $\overline{MMSE_{F_j}}(\mathbf{x})$.

7 MÉTODO DE PESQUISA

Como abordado na Seção 1.5, o método de pesquisa desse trabalho caracteriza-se como modelagem. Desta forma, este capítulo é dedicado ao planejamento experimental utilizado para se realizar a modelagem das respostas de processo consideradas bem como a modelagem dos escores fatoriais.

Para mostrar a aplicação da abordagem de otimização multivariada NBI-MMSE-FA proposta, será considerado o processo de torneamento do aço AISI H13 com respostas advindas de um arranjo de superfície de resposta do tipo CCD presentes no trabalho de Campos (2015).

Os experimentos de torneamento foram conduzidos em corpos de prova do aço AISI H13 endurecido (54 *HRc*). As peças possuíam dimensões de 53 mm de diâmetro e 100 mm de comprimento. A composição química do aço AISI H13 pode ser consultada na Tabela 7.1. Foi usado um Centro de Torneamento MHP Kingsbury com faixa de rotação entre 4 e 4500 RPM, motor do eixo-árvore com 18 kW, torre porta-ferramentas com 12 posições, diâmetro da placa de 200 mm. O porta ferramentas utilizado foi ISO DCLNL-2020K-12 com χ_r de 95º. As ferramentas de corte utilizadas e consideradas na presente Dissertação foram insertos cerâmicos de geometria *Wiper*, classe CC650, código ISO CNGA120408 T01020, com composição 70% Al2O3 + Ti [22,5% C, 7,5% N] (CAMPOS, 2015).

Tabela 7.1 – Composição química do aço AISI H13

Elemento	C	Mn	Si	Cr	V	Mo
% em peso	0,37 – 0,42	0,20 – 0,50	0,80 – 1,20	5,00 – 5,50	0,80 – 1,20	1,20 – 1,75

Fonte: Adaptado de Campos (2015)

As variáveis de controle foram velocidade de corte v_c [m/min], taxa de avanço f [mm/rev] e profundidade de corte a_p [mm]. A Tabela 7.2 apresenta os níveis codificados e decodificados para cada uma dessas variáveis.

As respostas levadas em consideração neste estudo foram: rugosidade superficial média R_a [μm]; rugosidade total R_t [μm]; relação MRR/F_r [cm³/(N×min)] que é a relação entre taxa de remoção de material (MRR) e força resultante (F_r); custo total de usinagem K_p [US$]; e tempo total de usinagem T_t [min]. As respostas e seus sentidos de otimização estão resumidos na Tabela 7.3.

Tabela 7.2 – Níveis das variáveis de controle

Níveis codificados	Variáveis de controle		
	v_c [m/min]	f [mm/rev]	a_p [mm]
-1,682	57,39	0,05	0,09
-1	100,00	0,10	0,15
0	162,50	0,16	0,24
1	225,00	0,22	0,33
1,682	267,61	0,26	0,39

Fonte: Adaptado de Campos (2015)

Tabela 7.3 – Respostas analisadas e otimizadas

Resposta	Unidade	Objetivo
R_a	μm	Minimizar
R_t	μm	Minimizar
MRR/F_r	cm³/(N×min)	Maximizar
K_p	US$	Minimizar
T_t	min	Minimizar

Para a mediação das rugosidades foi utilizado um rugosímetro de agulha Hommeltester-T 1000 levando em consideração a norma ISO 4287/1 para realização das medições. Para a medição das forças de usinagem foi utilizado um dinamômetro piezoelétrico Kistler 9121, amplificador de carga Kistler 5019 e sistema de aquisição de dados “Dynoware Software Data Acquisition”. Os cálculos das variáveis *MRR*, K_p e T_t podem ser consultados no trabalho de Campos (2015).

Nesta pesquisa, os seguintes softwares foram usados para modelagens, testes, análises e otimizações: *Microsoft Excel*®, *Minitab*® e *RStudio*®.

Para realizar o planejamento e a análise dos experimentos foi considerado um arranjo CCD com 19 corridas experimentais, sendo $2^3 = 8$ pontos fatoriais com $k = 3$ variáveis de controle, $n_c = 5$ pontos centrais e $2 \times 3 = 6$ pontos axiais. Os pontos fatoriais são importantes para estimar os efeitos principais das variáveis e os efeitos das interações entre as variáveis. Os pontos axiais foram conduzidos para estimar os efeitos quadráticos das variáveis. O ponto central foi replicado e conduzido para estimar o erro experimental e suportar as inferências sobre os efeitos estimados. A distância axial para este arranjo é $\rho = 2^{3/4} = 1{,}682$, que é o raio da restrição esférica das variáveis de controle consideradas no problema de otimização. O arranjo com as respostas medidas e calculadas é mostrado na Tabela 7.4. Para realização dos testes de hipóteses, foi considerado um nível de significância $\alpha = 0{,}05$.

Tabela 7.4 – Matriz experimental

Ordem padrão	Variáveis codificadas			Variáveis decodificadas			Respostas				
	v_c	f	a_p	v_c	f	a_p	R_a	R_t	MRR/F_r	K_p	T_t
1	-1	-1	-1	100,00	0,10	0,15	0,45	2,78	0,004	2,42	2,16
2	1	-1	-1	225,00	0,10	0,15	0,54	3,63	0,014	1,50	1,30
3	-1	1	-1	100,00	0,22	0,15	0,98	4,58	0,008	1,87	1,30
4	1	1	-1	225,00	0,22	0,15	1,22	5,15	0,031	1,23	0,91
5	-1	-1	1	100,00	0,10	0,33	0,55	3,64	0,007	2,93	2,16
6	1	-1	1	225,00	0,10	0,33	0,62	3,76	0,030	1,72	1,31
7	-1	1	1	100,00	0,22	0,33	0,93	4,78	0,016	2,25	1,30
8	1	1	1	225,00	0,22	0,33	0,89	4,18	0,067	1,10	0,91
9	-1,682	0	0	57,39	0,16	0,24	0,67	3,85	0,005	3,10	2,28
10	1,682	0	0	267,61	0,16	0,24	1,16	4,92	0,046	1,16	0,97
11	0	-1,682	0	162,50	0,05	0,24	0,31	1,87	0,007	2,70	2,29
12	0	1,682	0	162,50	0,26	0,24	1,25	5,22	0,029	1,39	0,96
13	0	0	-1,682	162,50	0,16	0,09	0,91	4,56	0,007	1,42	1,19
14	0	0	1,682	162,50	0,16	0,39	0,72	3,10	0,028	1,81	1,19
15	0	0	0	162,50	0,16	0,24	0,31	1,64	0,019	1,82	1,20
16	0	0	0	162,50	0,16	0,24	0,32	1,87	0,019	1,80	1,20
17	0	0	0	162,50	0,16	0,24	0,35	1,89	0,019	1,84	1,20
18	0	0	0	162,50	0,16	0,24	0,32	1,86	0,019	1,80	1,20
19	0	0	0	162,50	0,16	0,24	0,34	1,87	0,019	1,78	1,20

Fonte: Adaptado de Campos (2015)

8 APLICAÇÃO E RESULTADOS

Nesta Seção, as 10 etapas detalhadas na Subseção 7.1 para aplicação do método NBI-MMSE-FA serão mostradas e os resultados serão detalhados. A construção do arranjo experimental, Etapa 1, já foi descrita na Subseção 7.2.

8.1 Modelos quadráticos das respostas do processo

Para realizar a modelagem das respostas R_a, R_t, MRR/F_r, K_p e T_t e para se obter a significância dos termos nos modelos, foram utilizados o método de estatística paramétrica ANOVA e o método de regressão OLS. Daqui em diante, os modelos de segunda ordem e as variáveis de controle serão apresentadas em unidades codificadas. Quando os mesmos foram apresentados em unidades decodificadas, uma observação será escrita.

Os modelos polinomiais de segunda ordem estão apresentados nas Equações (8.1 – 8.5), respectivamente.

$$\begin{aligned} R_a(\mathbf{x}) &= 0{,}332 + 0{,}087v_c + 0{,}252f - 0{,}038a_p + 0{,}187v_c^2 + 0{,}140f^2 + 0{,}152a_p^2 \\ &+ 0{,}005v_c \times f - 0{,}038v_c \times a_p - 0{,}070f \times a_p \end{aligned} \tag{8.1}$$

$$\begin{aligned} R_t(\mathbf{x}) &= 1{,}825 + 0{,}201v_c + 0{,}770f - 0{,}164a_p + 0{,}908v_c^2 + 0{,}611f^2 + 0{,}712a_p^2 \\ &- 0{,}125v_c \times f - 0{,}238v_c \times a_p - 0{,}220f \times a_p \end{aligned} \tag{8.2}$$

$$\begin{aligned} MRR/F_r(\mathbf{x}) &= 1{,}89\times10^{-2} + 1{,}29\times10^{-2}v_c + 7{,}62\times10^{-3}f + 7{,}20\times10^{-3}a_p \\ &+ 2{,}66\times10^{-3}v_c^2 + 1{,}12\times10^{-5}f^2 - 1{,}66\times10^{-4}a_p^2 + 5{,}13\times10^{-3}v_c \times f \\ &+ 5{,}13\times10^{-3}v_c \times a_p + 3{,}13\times10^{-3}f \times a_p \end{aligned} \tag{8.3}$$

$$\begin{aligned} K_p(\mathbf{x}) &= 1{,}807 - 0{,}527v_c - 0{,}317f + 0{,}120a_p + 0{,}101v_c^2 + 0{,}073f^2 - 0{,}080a_p^2 \\ &+ 0{,}043v_c \times f - 0{,}098v_c \times a_p - 0{,}060f \times a_p \end{aligned} \tag{8.4}$$

$$\begin{aligned} T_t(\mathbf{x}) &= 1{,}1989 - 0{,}3430v_c - 0{,}3484f + 0{,}0003a_p + 0{,}1342v_c^2 + 0{,}1359f^2 \\ &- 0{,}0174a_p^2 + 0{,}1186v_c \times f + 0{,}0005v_c \times a_p - 0{,}0002f \times a_p \end{aligned} \tag{8.5}$$

A Tabela 8.1 mostra os coeficientes de cada modelo. Nessa tabela, os valores dos coeficientes em negrito representam as variáveis de controle que são estatisticamente significativas para as respostas. Para todas as respostas, os coeficientes de ajustes R^2 e R^2_{adj} foram todos superiores a 90%, confirmando alta explicação da variabilidade dos dados. Os termos não significativos não foram removidos uma vez que suas ausências nos modelos não levaram a grandes melhorias nos coeficientes de ajuste.

Tabela 8.1 – Coeficientes de regressão dos modelos das respostas analisadas

Termo	R_a	R_t	MRR/F_r	K_p	T_t
β_0	**0,332**	**1,825**	**1,89×10^{-2}**	**1,807**	**1,1989**
v_c	**0,087**	0,201	**1,29×10^{-2}**	**-0,527**	**-0,3430**
f	**0,252**	**0,770**	**7,62×10^{-3}**	**-0,317**	**-0,3484**
a_p	-0,038	-0,164	**7,20×10^{-3}**	**0,120**	0,0003
v_c^2	**0,187**	**0,908**	**2,66×10^{-3}**	**0,101**	**0,1342**
f^2	**0,140**	**0,611**	1,12×10^{-5}	**0,073**	**0,1359**
a_p^2	**0,152**	**0,712**	-1,66×10^{-4}	**-0,080**	-0,0174
$v_c \times f$	0,005	-0,125	**5,13×10^{-3}**	0,043	**0,1186**
$v_c \times a_p$	-0,038	-0,238	**5,13×10^{-3}**	**-0,098**	0,0005
$f \times a_p$	-0,070	-0,220	**3,13×10^{-3}**	-0,060	-0,0002
R^2	95,8%	95,3%	98,6%	98,4%	98,4%
R^2_{adj}	91,5%	90,5%	97,2%	96,8%	96,8%
S (erro padrão)	0,096	0,395	0,003	0,103	0,084

Nota: Coeficientes em negrito são estatisticamente significativos (α = 0,05).

A Tabela 8.2 apresenta a análise canônica dos modelos polinomiais das respostas do processo. Observando os sinais dos autovalores, ambas equações $R_a(\mathbf{x})$ e $R_t(\mathbf{x})$ representam superfícies de resposta convexas e seus pontos estacionários são de mínima resposta, as equações $MRR/F_r(\mathbf{x})$, $K_p(\mathbf{x})$ e $T_t(\mathbf{x})$ representam superfícies de resposta com pontos estacionários sendo pontos de sela.

Tabela 8.2 – Análise canônica dos modelos das respostas

Modelo		$R_a(\mathbf{x})$	$R_t(\mathbf{x})$	$MRR/F_r(\mathbf{x})$	$K_p(\mathbf{x})$	$T_t(\mathbf{x})$
Autovalores da matriz hessiana	λ_1	0,201	0,964	5,75×10^{-3}	0,129	0,194
	λ_2	0,169	0,761	-1,69×10^{-3}	-0,095	0,076
	λ_3	0,109	0,505	-1,55×10^{-3}	0,061	-0,017
Ponto estacionário	$\mathbf{x}_0$	Mínimo	Mínimo	Sela	Sela	Sela

8.2 Testes para avaliar a adequação dos dados à aplicação da análise fatorial

Antes de testar os dados analisados do processo de torneamento do aço AISI H13, é fundamental entender a relação entre as respostas analisadas. A Tabela 8.3 mostra os coeficientes de correlação de Pearson entre as respostas e seus respectivos *p*-valores. Nessa tabela, observa-se que as respostas de rugosidade são fortemente correlacionadas entre si. As respostas MRR/F_r, K_p e T_t também apresentam uma forte estrutura de correlação entre elas.

Tabela 8.3 – Coeficientes de correlação de Pearson entre as respostas analisadas

	R_a	R_t	MRR/F_r	K_p
R_t	0,951			
	***0,000**			
MRR/F_r	0,415	0,288		
	*0,077	*0,232		
K_p	-0,455	-0,310	-0,699	
	*0,051	*0,196	***0,001**	
T_t	-0,424	-0,263	-0,658	0,924
	*0,070	*0,277	***0,002**	***0,000**

Nota: *p-valor. Valores em negrito correspondem às correlações estatisticamente significativas.

Antes de realizar a análise fatorial é necessário testar se o conjunto das respostas analisadas é adequado para a aplicação da técnica de estatística multivariada. Primeiramente, foi realizado o teste de normalidade multivariada de Mardia no *software RStudio*®, uma vez que o teste de esfericidade de Bartlett assume que o vetor aleatório **y** = [R_a, R_t, MRR/F_r, K_p, T_t], que contém as respostas analisadas, segue distribuição multivariada normal. A Tabela 8.4 mostra que o vetor **y** não segue uma distribuição multivariada normal uma vez que a medida de *skewness* não foi significativa, sendo seu *p*-valor < 0,05. A medida de simetria *skewness* não foi significativa, isso significa que houve falta de simetria na distribuição multivariada do conjunto de respostas; uma distribuição normal multivariada é simétrica. A medida *kurtosis* foi estatisticamente significativa, isso significa que as caldas da distribuição são leves ou há falta de *outliers*. Uma vez que o conjunto de dados não vem de uma população multivariada normal, o teste de esfericidade de Bartlett não foi utilizado.

Tabela 8.4 – Teste de normalidade multivariada de Mardia

	p-valor	Resultado
Mardia *skewness*	0,022	Não
Mardia *kurtosis*	0,341	Sim
Normalidade multivariada	-	Não

Uma outra estatística que pode ser usada para testar a adequação dos dados à aplicação da FA é a estatística de Kaiser-Meyer-Olkin. Assim, a partir da matriz de correlação amostral **R**, Equação (8.6), foi possível calcular a matriz anti-imagem **Q**, Equação (8.7). Ambas as matrizes foram utilizadas para o cálculo do índice MSA.

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1{,}000 & 0{,}951 & 0{,}415 & -0{,}455 & -0{,}424 \\ 0{,}951 & 1{,}000 & 0{,}288 & -0{,}310 & -0{,}263 \\ 0{,}415 & 0{,}288 & 1{,}000 & -0{,}699 & -0{,}658 \\ -0{,}455 & -0{,}310 & -0{,}699 & 1{,}000 & 0{,}924 \\ -0{,}424 & -0{,}263 & -0{,}658 & 0{,}924 & 1{,}000 \end{bmatrix} \tag{8.6}$$

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 1{,}000 & -0{,}960 & -0{,}172 & -0{,}032 & 0{,}254 \\ -0{,}960 & 1{,}000 & 0{,}136 & 0{,}070 & -0{,}263 \\ -0{,}172 & 0{,}136 & 1{,}000 & 0{,}296 & 0{,}006 \\ -0{,}032 & 0{,}070 & 0{,}296 & 1{,}000 & -0{,}840 \\ 0{,}254 & -0{,}263 & 0{,}006 & -0{,}840 & 1{,}000 \end{bmatrix} \tag{8.7}$$

A Tabela 8.5 mostra que o índice MSA geral foi de 0,65, o que indica um bom grau de adequação dos dados à aplicação da análise fatorial. Ainda nessa tabela observa-se o valor de MSA para cada resposta, sendo todos eles superiores a 0,5, indicando que todas as respostas analisadas do torneamento do aço AISI H13 contribuem significativamente para a aplicação da análise fatorial.

Tabela 8.5 – Índice MSA geral e das respostas analisadas

	R_a	R_t	MRR/F_r	K_p	T_t	Geral
MSA	0,59	0,53	0,90	0,67	0,65	0,65

8.3 Análise fatorial aplicada no processo de torneamento do aço AISI H13

Como foi constatado anteriormente, o vetor **y** com as respostas analisadas do processo não foi considerado normalmente distribuído, logo não faz sentido usar o método da máxima verossimilhança para estimar as cargas fatoriais e as variâncias específicas. Por conseguinte, será utilizado apenas o método dos componentes principais para estimação das matrizes de cargas fatoriais e variâncias específicas. Para tal, a matriz de correlação amostral **R** foi utilizada. Para realização da análise fatorial, o *software Minitab*® foi utilizado.

Primeiramente, observando a Tabela 8.6, o método de extração de componentes principais revelou que o número *m* de fatores a serem retidos é igual a 2, uma vez que pelo critério de Kaiser os autovalores da matriz **R** maiores que 1 correspondem ao primeiro e segundo fatores. Além disso, a porcentagem acumulada de variância que os dois primeiros fatores explicam em relação à variância total é maior do que 80% (mínimo desejado), sendo igual a 89,9%.

Tabela 8.6 – Autovalores e porcentagem acumulativa de variância

	Fator 1	Fator 2	Fator 3	Fator 4	Fator 5
Autovalor	3,172	1,324	0,398	0,075	0,032
% de variância	63,4%	26,5%	8,0%	1,5%	0,6%
% acumulativa de variância	63,4%	89,9%	97,9%	99,4%	100,0%

Para auxiliar e confirmar o número de fatores que devem ser retidos, foi utilizado o *scree plot*, Figura 8.1. Verifica-se nessa figura que o número de fatores retidos deve ser igual a 2. Assim, todos os três critérios concordam que *m* = 2.

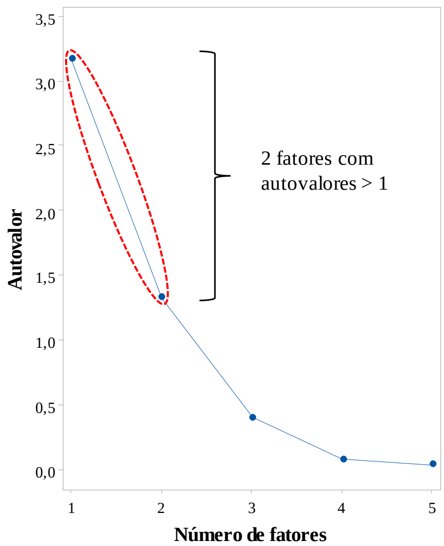

Figura 8.1 – *Scree plot*

A Figura 8.2 apresenta o dendrograma de Ward para o conjunto de respostas analisadas considerando 2 blocos de variáveis, uma vez que m = 2. Para a construção do dendrograma foi considerado Ward como método de ligação e correlação absoluta como medida de similaridade. Nesse diagrama bidimensional observa-se que um grupo de respostas é formado pelas respostas de rugosidade e apresenta uma alta similaridade de aproximadamente 95%. O outro bloco de repostas é formado por MRR/F_r, K_p e T_t, com similaridade moderada de aproximadamente 60%. Embora o nível de similaridade para esse bloco de respostas seja moderado, suas correlações são estatisticamente significativas conforme observadas na Tabela 8.3.

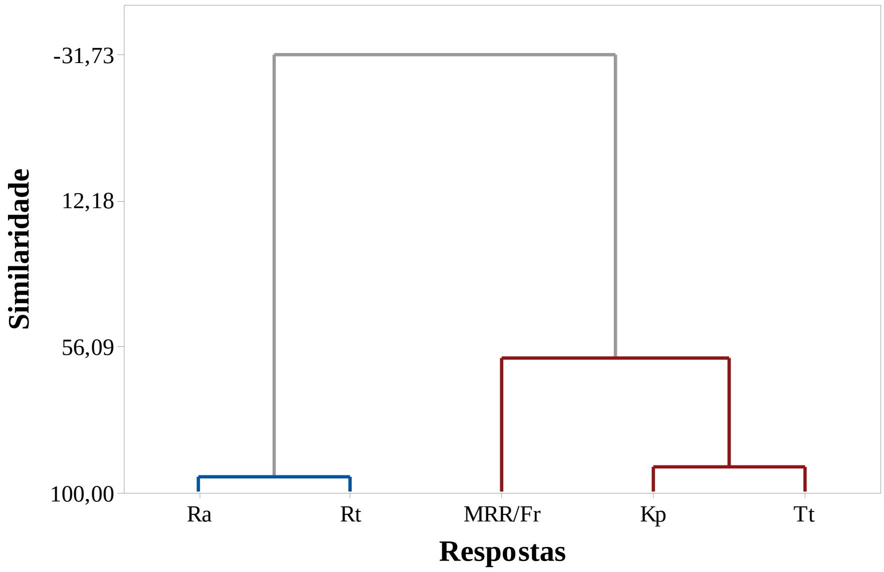

Figura 8.2 – Dendrograma de Ward para R_a, R_t, MRR/F_r, K_p e T_t

O próximo passo é a estimação das cargas fatoriais e variâncias específicas através do método de componentes principais. A Tabela 8.7 apresenta as cargas fatoriais não-rotacionadas, comunalidades e variâncias específicas. Nessa tabela, observa-se que a interpretação dos fatores se torna confusa uma vez que a carga fatorial de R_a, l_{11} = 0,79, associa essa resposta ao primeiro fator. Entretanto, como foi observado na matriz de correlação amostral **R**, Equação 8.6, e no dendrograma de Ward, Figura 8.2, sabe-se que as respostas de rugosidade são pertencentes a um mesmo *cluster* de resposta. Além disso, a diferença entre as cargas fatoriais l_{21} e l_{22}, referentes a resposta R_t, é muito pequena, o que pode gerar insegurança em associar R_t ao fator 1 (F_1) ou ao fator 2 (F_2). Uma outra questão importante a se destacar é o fato de que a diferença entre as porcentagens de variâncias atribuídas a cada fator é muito grande, sendo que parte da variância total atribuída a F_1 é de 63,4% e a atribuída a F_2 é de 26,5%; o desejado é que a diferença entre essas porcentagens não seja tão grande para que subsequentes análises e otimizações não favoreçam mais um bloco de resposta em relação ao outro bloco. Sendo assim, foi utilizado o método de rotação *varimax* para a geração de cargas fatoriais rotacionadas.

Tabela 8.7 – Cargas fatoriais não-rotacionadas, comunalidades e variâncias específicas

Resposta	F_1	F_2	Comunalidade	Variância específica
R_a	0,79 (l_{11})	-0,59 (l_{12})	0,98	0,02
R_t	0,68 (l_{21})	-0,72 (l_{22})	0,98	0,02
MRR/F_r	0,78 (l_{31})	0,32 (l_{32})	0,71	0,29
K_p	-0,87 (l_{41})	-0,40 (l_{42})	0,92	0,08
T_t	-0,84 (l_{51})	-0,43 (l_{52})	0,90	0,10
Variância	3,17	1,32	4,50	0,50
% de variância	63,4%	26,5%	89,9%	10,1%

As cargas fatoriais rotacionadas pelo método *varimax* estão apresentadas na Tabela 8.8. Nessa tabela, verifica-se que a rotação dos eixos fatoriais distinguiu de maneira eficiente os dois blocos de resposta já previstos na matriz **R** e no dendrogama de Ward, facilitando assim a interpretação das cargas fatoriais. Desse modo, as altas cargas fatoriais l_{31} = 0,82, l_{41} = -0,94 e l_{51} = -0,93 associam as respostas MRR/F_r, K_p e T_t ao primeiro fator e as cargas fatoriais l_{12} = -0,95 e l_{22} = -0,99 associam as respostas R_a e R_t ao segundo fator.

Tabela 8.8 – Cargas fatoriais rotacionadas, comunalidades e variâncias específicas

Resposta	F_1	F_2	Comunalidade	Variância específica
R_a	0,29 (l_{11})	**-0,95** (l_{12})	0,98	0,02
R_t	0,12 (l_{21})	**-0,99** (l_{22})	0,98	0,02
MRR/F_r	**0,82** (l_{31})	-0,20 (l_{32})	0,71	0,29
K_p	**-0,94** (l_{41})	0,19 (l_{42})	0,92	0,08
T_t	**-0,93** (l_{51})	0,15 (l_{52})	0,90	0,10
Variância	2,53	1,97	4,50	0,50
% de variância	50,5%	39,4%	89,9%	10,1%

As comunalidades referentes às respostas de rugosidade, custo total e tempo total de usinagem foram altas, acima de 0,9, o que significa que grande parte da variância de cada resposta é explicada pelos dois fatores. A comunalidade referente a MRR/F_r foi de 0,71, razoavelmente alta. Entretanto, nenhuma preocupação em relação a isso deve ser despendida uma vez que a diferença entre as cargas l_{31} e l_{32} é grande e o índice individual de MSA para essa resposta foi de 0,9 $\gg$ 0,5, indicando que essa resposta é extremamente importante para a análise fatorial. Ademais, com a rotação das cargas fatoriais, a diferença entre as porcentagens de variância que os dois fatores explicam diminuiu; antes da rotação a diferença era de 37% e depois foi de 11%.

A correlação entre as respostas analisadas e o sentido de otimização de cada uma também devem ser analisadas em conjunto com as cargas fatoriais rotacionadas. A análise fatorial manteve os sinais de correlação dentro de cada bloco de respostas em relação às correlações estatisticamente significativas. A resposta MRR/F_r possui correlação negativa com K_p e T_t: ao observar os sinais das cargas fatoriais referentes a essas respostas, conclui-se que a relação linear entre F_1 e essas respostas manteve os sinais de correlação entre elas. O mesmo é observado para as respostas R_a e R_t: a correlação entre elas é positiva e a relação linear entre F_2 e essas respostas manteve o sinal de correlação entre elas.

Ao direcionar atenção para a otimização dos fatores, observou-se que a análise fatorial também manteve relação com o sentido de otimização das respostas analisadas. Assim, ao maximizar F_1, MRR/F_r será maximizada e K_p e T_t serão minimizados. Ao maximizar F_2, ambas as respostas R_a e R_t serão minimizadas, o que está em consonância com as informações da Tabela 7.3.

Um nome sugestivo para o segundo fator é qualidade uma vez que o mesmo é constituído pelas respostas de rugosidade que definem o acabamento superficial das peças usinadas. Para o primeiro fator, um nome sugestivo é sustentabilidade/custo uma vez que a relação MRR/F_r e T_t estão relacionadas à sustentabilidade e K_p ao custo do processo de torneamento do aço AISI H13. Em resumo, as 5 variáveis de resposta originais passam a constituir apenas 2 fatores relacionados à qualidade e sustentabilidade/custo.

A Tabela 8.9 apresenta o arranjo CCD com os escores fatoriais rotacionados obtidos através do método dos mínimos quadrados ordinários, uma vez que o método de componentes principais foi utilizado para estimação das cargas fatoriais.

Com o intuito de analisar a correlação entre as respostas analisadas e fatores rotacionados, a Tabela 8.10 foi criada. Nessa tabela observa-se que as respostas de rugosidade possuem correlação alta com o fator qualidade e as respostas MRR/F_r, K_p e T_t possuem correlação alta com o fator sustentabilidade/custo. Observa-se também que os fatores não são correlacionados entre si visto que a rotação *varimax* faz com que os eixos fatoriais sejam ortogonais. Essa característica de não dependência entre os fatores rotacionados é muito importante para que o método de otimização NBI não favoreça um bloco de respostas mais do que o outro bloco. A Figura 8.3 reforça as informações contidas na Tabela 8.10 através do dendrograma de Ward por correlação absoluta para as respostas analisadas e os fatores rotacionados. O *cluster* de resposta qualidade apresentou uma similaridade de aproximadamente 93% e o *cluster* sustentabilidade/custo apresentou similaridade de aproximadamente 62%.

Tabela 8.9 – CCD com os escores fatoriais rotacionados

Ordem padrão	Variáveis codificadas			Fatores rotacionados	
	v_c	f	a_p	F_1	F_2
1	-1	-1	-1	-1,31	0,33
2	1	-1	-1	0,19	0,17
3	-1	1	-1	-0,40	-1,00
4	1	1	-1	0,78	-1,38
5	-1	-1	1	-1,72	-0,27
6	1	-1	1	0,35	0,01
7	-1	1	1	-0,50	-1,04
8	1	1	1	1,83	-0,30
9	-1,682	0	0	-2,03	-0,60
10	1,682	0	0	1,15	-1,13
11	0	-1,682	0	-1,42	0,89
12	0	1,682	0	0,56	-1,49
13	0	0	-1,682	0,00	-0,81
14	0	0	1,682	0,40	0,15
15	0	0	0	0,44	1,40
16	0	0	0	0,43	1,29
17	0	0	0	0,39	1,23
18	0	0	0	0,43	1,29
19	0	0	0	0,44	1,26

Tabela 8.10 – Coeficientes de correlação de Pearson entre as respostas analisadas e os fatores rotacionados

	R_a	R_t	MRR/F_r	K_p	T_t	F_1
F_1	0,290	0,119	0,820	-0,939	-0,935	
	*0,228	*0,627	***0,000**	***0,000**	***0,000**	
F_2	-0,947	-0,985	-0,198	0,195	0,153	0,000
	***0,000**	***0,000**	*0,417	*0,424	*0,532	*1,000

Nota: *p-valor. Valores em negrito correspondem às correlações estatisticamente significativas.

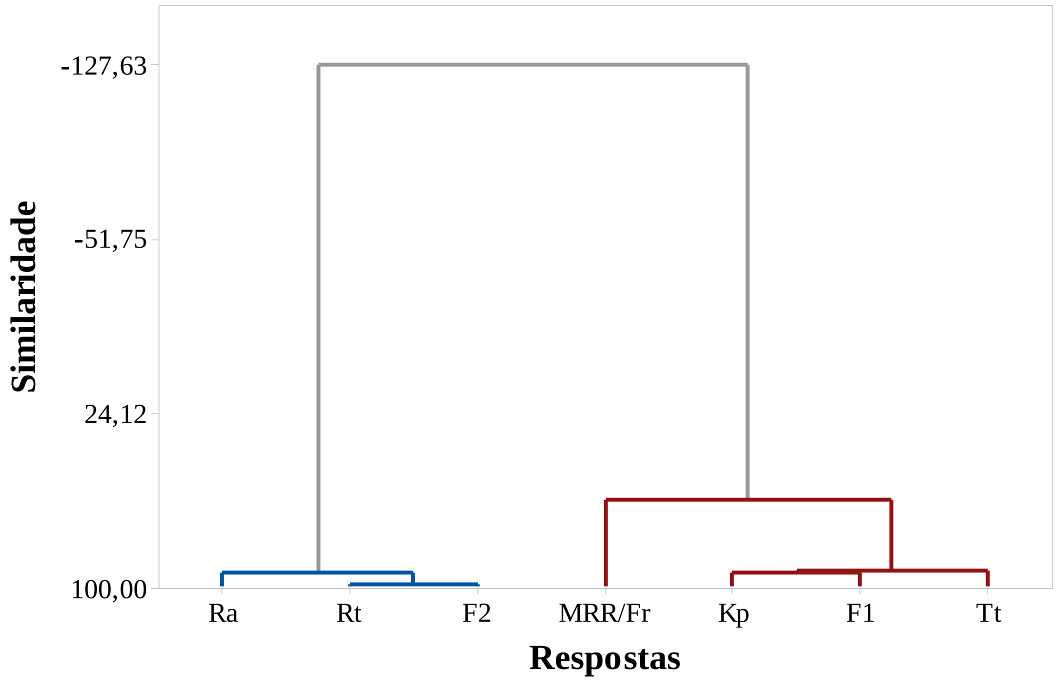

Figura 8.3 – Dendrograma de Ward para as respostas e os fatores rotacionados

8.4 Modelos quadráticos dos fatores rotacionados

Os modelos polinomiais de segunda ordem dos fatores rotacionados, $F_1(\mathbf{x})$ e $F_2(\mathbf{x})$, foram também obtidos através do método de regressão OLS e são apresentados nas Equações (8.8) e (8.9), respectivamente. A Tabela 8.11 apresenta os coeficientes dos termos de cada modelo matemático.

Para o modelo $F_1(\mathbf{x})$, somente os coeficientes do termo quadrático a_p^2 e da interação $v_c \times f$ não foram significativos. Para $F_2(\mathbf{x})$, os coeficientes não significativos foram os referentes a v_c, a_p, $v_c \times f$ e $v_c \times a_p$. Ambos os modelos matemáticos para os fatores rotacionados foram capazes de explicar a variabilidade dos dados, com R^2_{adj} superiores a 92%. Os dois modelos matemáticos também apresentaram curvatura estatisticamente significativa, permitindo otimizar os fatores qualidade e sustentabilidade/custo. Finalmente, os resíduos foram testados e suas normalidades forma confirmadas.

$$\begin{aligned} F_1(\mathbf{x}) &= 0{,}420 + 0{,}908 v_c + 0{,}553 f + 0{,}100 a_p - 0{,}271 v_c^2 - 0{,}267 f^2 - 0{,}046 a_p^2 \\ &- 0{,}008 v_c \times f + 0{,}215 v_c \times a_p + 0{,}149 f \times a_p \end{aligned} \qquad (8.8)$$

$$F_2(\mathbf{x}) = 1{,}287 - 0{,}030v_c - 0{,}583f + 0{,}139a_p - 0{,}727v_c^2 - 0{,}527f^2 - 0{,}536a_p^2$$
$$0{,}032v_c \times f + 0{,}194v_c \times a_p + 0{,}225f \times a_p \tag{8.9}$$

Tabela 8.11 – Coeficientes de regressão dos modelos dos fatores rotacionados

Termo	F_1	F_2
β_0	**0,420**	**1,287**
v_c	**0,908**	-0,030
f	**0,553**	**-0,583**
a_p	**0,100**	0,139
v_c^2	**-0,271**	**-0,727**
f^2	**-0,267**	**-0,527**
a_p^2	-0,046	**-0,536**
$v_c \times f$	-0,008	0,032
$v_c \times a_p$	**0,215**	0,194
$f \times a_p$	**0,149**	**0,225**
R^2	99,1%	96,2%
R^2_{adj}	98,2%	92,4%
S (erro padrão)	0,133	0,276
Curvatura (*p*-valor)	0,000	0,000
Resíduos (*p*-valor)	0,330	0,370

Nota: Coeficientes em negrito são estatisticamente significativos (α = 0,05).

Tabela 8.12 – Análise canônica dos modelos das respostas

Modelo		$F_1(\mathbf{x})$	$F_2(\mathbf{x})$
Autovalores da matriz hessiana	λ_1	-0,333	-0,772
	λ_2	-0,265	-0,619
	λ_3	0,014	-0,399
Ponto estacionário	$\mathbf{x}_0$	Sela	Máximo

A análise canônica dos modelos dos fatores rotacionados, Tabela 8.12, indicou que o ponto estacionário do modelo de $F_1(\mathbf{x})$ é um ponto de sela, uma vez que os autovalores apresentam sinais mistos e o ponto estacionário do modelo de $F_2(\mathbf{x})$ é um ponto de máximo, visto que os autovalores são negativos. Dessa maneira, a otimização envolvendo o erro quadrático médio dos fatores rotacionados deve conter restrição de espaço experimental para garantir que as soluções ótimas estejam dentro da região experimental referente às variáveis de controle v_c, f e

a_p. Para observação de certas regiões de curvatura, os modelos matemáticos das Equações (8.8) e (8.9) foram representados graficamente e podem ser vistos na Figura 8.4.

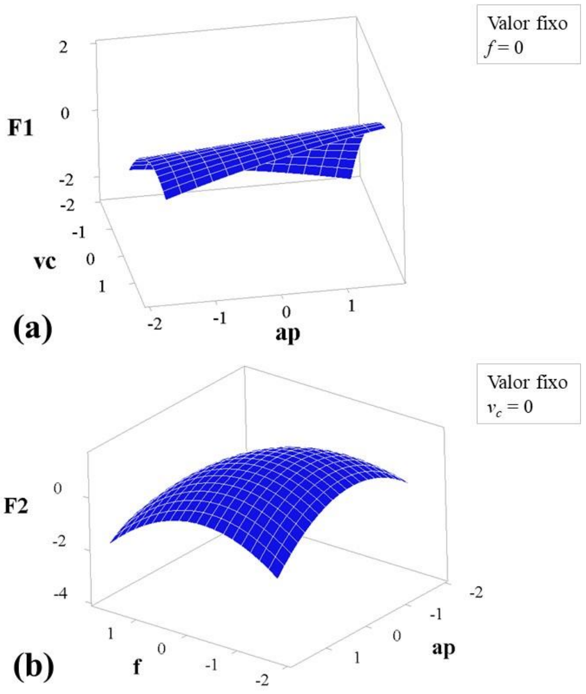

Figura 8.4 – Gráficos de superfícies de resposta: (a) $F_1(\mathbf{x})$ e (b) $F_2(\mathbf{x})$

8.4.1 Análise dos efeitos principais e das interações sobre F_1

Para auxiliar na observação das relações entre o fator sustentabilidade/custo e as variáveis de controle (v_c, f e a_p) e suas interações é importante considerar a Tabela 8.11, que mostra os coeficientes significativos, e também a Tabela 8.8, que mostra as relações entre as respostas originais e os fatores através do sinal e magnitude das cargas fatoriais.

A Figura 8.5 mostra o gráfico dos efeitos principais sobre o fator sustentabilidade/custo. Nessa figura observam-se os efeitos dos termos lineares e quadráticos de maneira conjunta sobre $F_1(\mathbf{x})$. Como é possível observar nessa figura, a variável v_c possui maior efeito sobre esse fator seguida das variáveis f e a_p. Em todos os casos, à medida que os valores das variáveis aumentam o valor $F_1(\mathbf{x})$ também aumenta.

Analisando a Figura 8.5 juntamente com a Tabela 8.8, é possível realizar uma análise multivariada dos efeitos principais sobre as respostas originais $MRR/F_r(\mathbf{x})$, $K_p(\mathbf{x})$ e $T_t(\mathbf{x})$. De uma maneira multivariada, à medida que os níveis de v_c, f e a_p aumentam o valor da relação $MRR/F_r(\mathbf{x})$ tende a aumentar uma vez que o sinal da carga fatorial l_{31} é positivo. Por outro lado, a medida que os níveis de v_c, f e a_p aumentam, as respostas $K_p(\mathbf{x})$ e $T_t(\mathbf{x})$ tendem a diminuir uma vez que os sinais das cargas fatoriais l_{41} e l_{42} são ambos negativos. De uma maneira geral, pode-se dizer que aumentando os níveis das variáveis v_c, f e a_p, a sustentabilidade do processo de torneamento do aço AISI H13 irá melhorar visto que os valores das respostas $MRR/F_r(\mathbf{x})$ e $T_t(\mathbf{x})$ tendem a aumentar e diminuir, respectivamente, bem como o custo será melhorado tendo em vista a tendência de diminuição de $K_p(\mathbf{x})$.

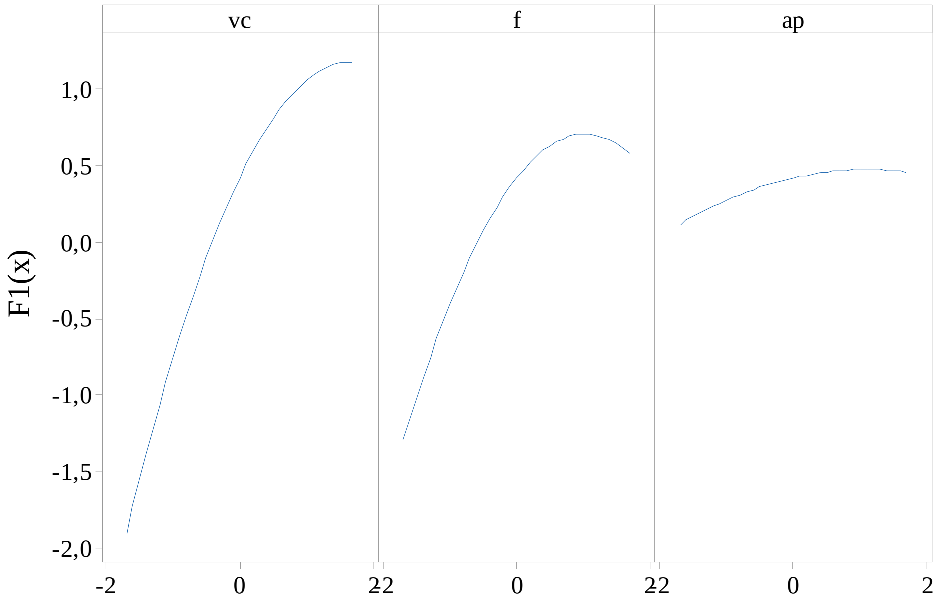

Figura 8.5 – Efeitos principais sobre $F_1(\mathbf{x})$

A Figura 8.6 mostra o gráfico dos efeitos das interações sobre o fator sustentabilidade/custo. Nessa figura observa-se que, visualmente, somente a interação $v_c \times f$ não é significativa uma vez que as três linhas não se cruzam. Essa informação pode ser confirmada na Tabela 8.11. Assim, a análise da relação entre essa interação e o fator $F_1(\mathbf{x})$ não foi realizada. Como é possível observar, a medida que os níveis de v_c e de a_p aumentam em conjunto o valor do fator sustentabilidade/custo também aumenta. Para a interação $f \times a_p$ o mesmo fenômeno é observado.

Realizando uma análise multivariada, tendo como auxílio a Tabela 8.8, é possível inferir que à medida que os níveis de v_c e a_p aumentam simultaneamente, o valor da relação $MRR/F_r(\mathbf{x})$ tende a aumentar visto que o sinal de l_{31} é positivo. Em relação a interação entre f e a_p a mesma análise pode ser realizada para $MRR/F_r(\mathbf{x})$. As respostas de $K_p(\mathbf{x})$ e $T_t(\mathbf{x})$ tendem a diminuir à medida que os níveis de cada variável nas interações $v_c \times a_p$ e $f \times a_p$ aumentam simultaneamente uma vez que os sinais das cargas fatoriais l_{41} e l_{51} são ambos negativos. Em outras palavras, a sustentabilidade e o custo do processo de torneamento do aço AISI H13 são melhorados à medida que os níveis das variáveis nas interações $v_c \times a_p$ e $f \times a_p$ aumentam de maneira simultânea.

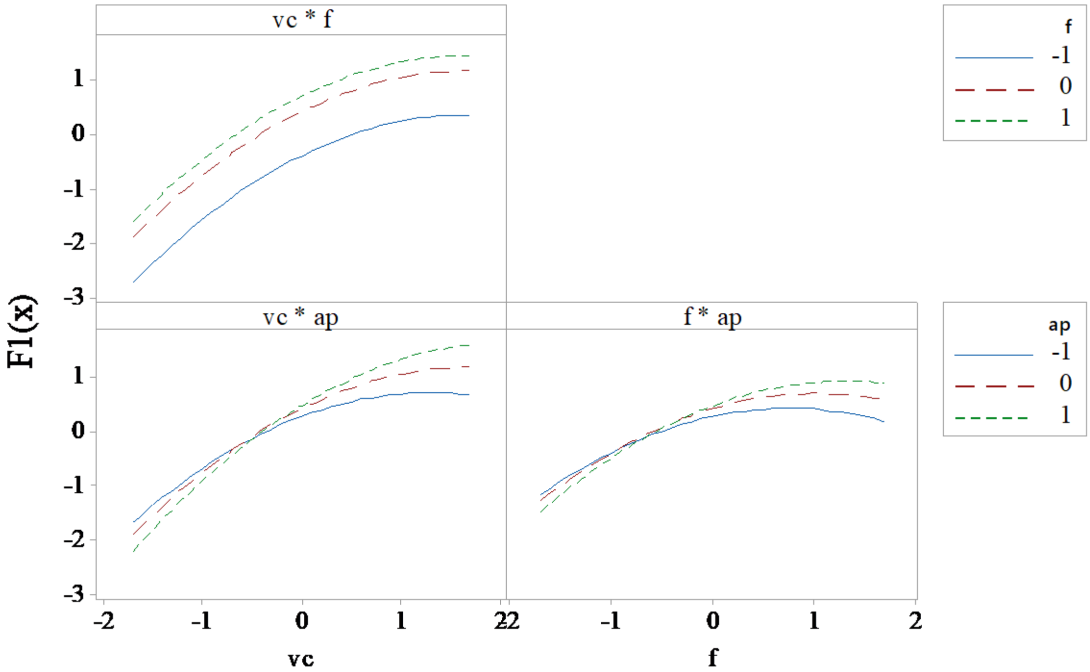

Figura 8.6 – Efeitos das interações sobre $F_1(\mathbf{x})$

8.4.2 Análise dos efeitos principais e das interações sobre F_2

A Figura 8.7 apresenta o gráfico dos efeitos principais sobre o fator qualidade. Nessa figura observa-se que os termos quadráticos exercem forte influência sobre $F_2(\mathbf{x})$. De uma maneira geral, a qualidade do processo de torneamento do aço AISI H13 tende a ser melhorada quando as variáveis de controle v_c, f e a_p estiverem com seus valores próximos dos níveis que configuram o ponto central do CCD considerado.

Combinando as informações contidas na Figura 8.7 com as da Tabela 8.8 foi possível realizar uma análise multivariada dos efeitos principais sobre as respostas R_a e R_t. Assim, considerando a região de espaço experimental e que ambas as cargas fatoriais l_{12} e l_{22} apresentam sinais negativos, os valores das rugosidades diminuem quando v_c, f e a_p aumentam a partir de seus níveis inferiores até as proximidades de seus valores centrais e decrescem a medida que as variáveis v_c, f e a_p aumentam a partir das proximidades de seus valores centrais até seus níveis superiores.

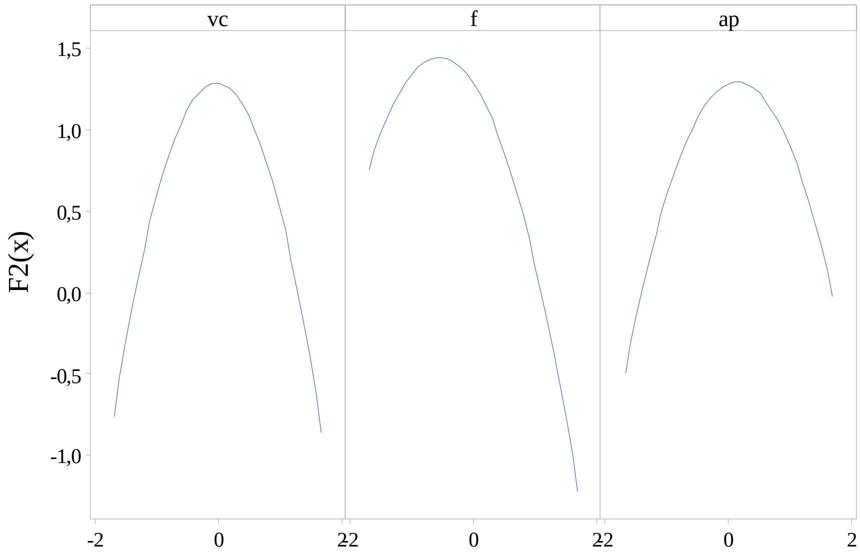

Figura 8.7 – Efeitos principais sobre $F_2(\mathbf{x})$

A Figura 8.8 mostra os efeitos das interações sobre o fator qualidade. A única interação significativa e que será feita uma análise foi a interação $f \times a_p$. Assim, observa-se nessa figura que, considerando somente essa interação, a qualidade do processo é melhorada quando a_p é configurado próxima ao seu nível central e f é configurada entre seus níveis fatorial inferior e central.

Assim, considerando as informações da Tabela 8.8, infere-se que as respostas de rugosidade R_a e R_t tendem a ser mínimas quando f e a_p são configuradas próximas de seus valores centrais uma vez que as cargas fatoriais l_{12} e l_{22} apresentam sinais negativos.

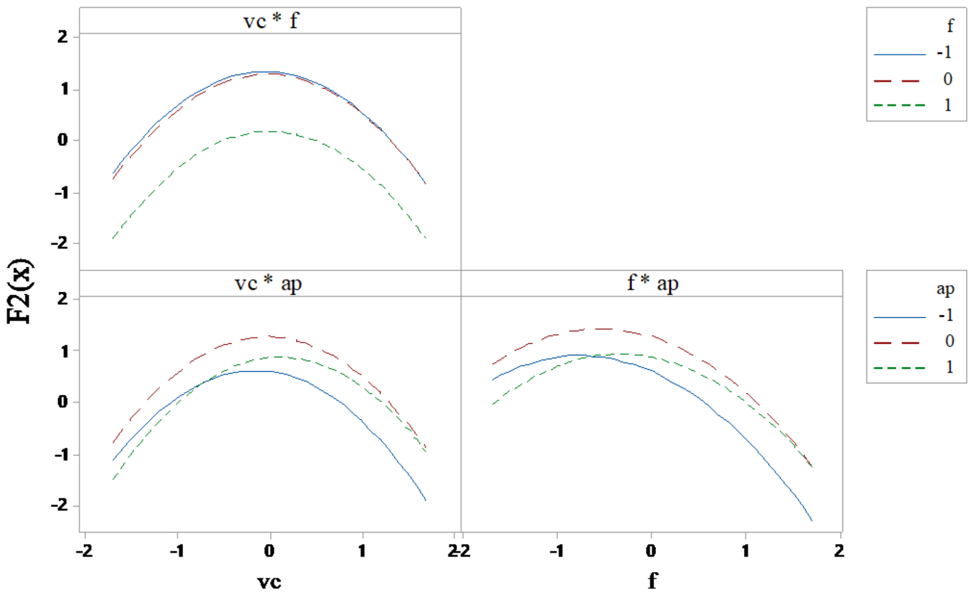

Figura 8.8 – Efeitos das interações sobre $F_2(\mathbf{x})$

8.5 Equações de erro quadrático médio dos fatores

Os valores alvo das equações das respostas originais e das equações dos fatores rotacionados foram definidos através da otimização individual de cada equação levando em consideração seus sentidos de otimização e a restrição de espaço experimental. Os problemas de otimização individuais que resultaram nos valores alvos são mostrados na Tabela 8.13.

Tabela 8.13 – Valores alvo das equações das respostas originais e dos fatores rotacionados

Referência	Problema de otimização	Resultado
Equação (8.1)	$\text{Min} \quad [R_a(\mathbf{x})]$	$\zeta_{R_a(\mathbf{x})} = 0{,}207$
Equação (8.2)	$\text{Min} \quad [R_t(\mathbf{x})]$	$\zeta_{R_t(\mathbf{x})} = 1{,}561$
Equação (8.3)	$\text{Max} \quad [MRR/F_r(\mathbf{x})]$	$\zeta_{MRR/F_r(\mathbf{x})} = 6{,}311 \times 10^{-2}$
Equação (8.4)	$\text{Min} \quad [K_p(\mathbf{x})]$	$\zeta_{K_p(\mathbf{x})} = 1{,}051$
Equação (8.5)	$\text{Min} \quad [T_t(\mathbf{x})]$	$\zeta_{T_t(\mathbf{x})} = 0{,}867$
Equação (8.8)	$\text{Max} \quad [F_1(\mathbf{x})]$	$\zeta_{F_1(\mathbf{x})} = 1{,}766$
Equação (8.9)	$\text{Max} \quad [F_2(\mathbf{x})]$	$\zeta_{F_2(\mathbf{x})} = 1{,}449$

Nota: Todas as otimizações foram sujeitas à restrição $v_c^2 + f^2 + a_p^2 \leq 2{,}828$

A partir dos valores alvos, as equações de erro quadrático médio dos fatores rotacionados podem ser definidas conforme Equações (8.10) e (8.11). Essas equações serão funções objetivo no problema de otimização multi-objetivo solucionado pelo método NBI.

$$MMSE_{F_1}(\mathbf{x}) = [F_1(\mathbf{x}) - \zeta_{F_1(\mathbf{x})}]^2 + \sum_{i=1}^{5} l_{i1}^2 \tag{8.10}$$

$$MMSE_{F_2}(\mathbf{x}) = [F_2(\mathbf{x}) - \zeta_{F_2(\mathbf{x})}]^2 + \sum_{i=1}^{5} l_{i2}^2 \tag{8.11}$$

8.6 Pontos de utopia e pseudo nadir das equações de erro quadrático médio

Através dos problemas de otimização restritos, $\text{Min}_{\mathbf{x}^T\mathbf{x}\le\rho^2}\{MMSE_{F_1}(\mathbf{x})\}$ e $\text{Min}_{\mathbf{x}^T\mathbf{x}\le\rho^2}\{MMSE_{F_2}(\mathbf{x})\}$, os valores mínimos das funções objetivo foram $MMSE_{F_1}(\mathbf{x}^{1*})=2{,}527$ e $MMSE_{F_2}(\mathbf{x}^{2*})=1{,}968$. Os piores valores das funções objetivo foram $MMSE_{F_1}(\mathbf{x}^{2*})=5{,}615$ e $MMSE_{F_2}(\mathbf{x}^{1*})=5{,}465$. A Tabela 8.14 resume os valores encontrados para as funções objetivo e para as respostas originais em $\mathbf{x}^{1*}$ e $\mathbf{x}^{2*}$. Dessa maneira, os pontos de utopia e pseudo nadir são, respectivamente, $MMSE^U$ = [2,527; 1,968]^T e $MMSE^{PN}$ = [5,615; 5,465]^T.

Tabela 8.14 – Resultados das otimizações individuais das funções objetivo de erro quadrático médio dos fatores rotacionados

	$MMSE_{F1}$	$MMSE_{F2}$	MRR/F_r	K_p	T_t	R_a	R_t
	-	-	cm³/(N×min)	US$	min	μm	μm
$\mathbf{x}^{1*}$	2,527	5,465	6,245×10^{-2}	1,06	0,886	0,969	4,178
$\mathbf{x}^{2*}$	5,615	1,968	1,453×10^{-2}	2,02	1,444	0,233	1,580

8.7 Normalização da matriz *payoff* e das funções objetivo

A matriz *payoff* **Φ** é composta pelas coordenadas dos pontos de utopia e pseudo nadir. Assim, **Φ** é representada pela Equação (8.12).

$$\mathbf{\Phi}=\begin{bmatrix}2{,}527 & 5{,}465\\ 5{,}615 & 1{,}968\end{bmatrix} \tag{8.12}$$

A partir das Equações (8.13) e (8.14), a matriz **Φ** pode ser normalizada bem como as funções objetivo do problema de otimização.

$$\overline{MMSE_{F_1}}(\mathbf{x})=\frac{MMSE_{F_1}(\mathbf{x})-MMSE_{F_1}(\mathbf{x}^{1*})}{MMSE_{F_1}(\mathbf{x}^{2*})-MMSE_{F_1}(\mathbf{x}^{1*})} \tag{8.13}$$

$$\overline{MMSE_{F_2}}(\mathbf{x}) = \frac{MMSE_{F_2}(\mathbf{x}) - MMSE_{F_2}(\mathbf{x}^{2*})}{MMSE_{F_2}(\mathbf{x}^{1*}) - MMSE_{F_2}(\mathbf{x}^{2*})} \tag{8.14}$$

A matriz *payoff* normalizada pode ser então obtida e é apresentada na Equação (8.15).

$$\overline{\mathbf{\Phi}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{8.15}$$

8.8 Solução do problema de otimização com fatores rotacionados

Considerando pesos consecutivos com incremento δ = 0,05, 21 subproblemas de otimização foram realizados, conforme Equação (6.4), para a otimização concomitante das funções objetivo $MMSE_{F1}(\mathbf{x})$ e $MMSE_{F2}(\mathrm{x})$ e consequente a otimização das respostas originais $MRR/F_r(\mathbf{x})$, $K_p(\mathbf{x})$, $Tt(\mathbf{x})$, $Ra(\mathbf{x})$ e $Rt(\mathbf{x})$. Para resolver os 21 subproblemas, o algoritmo de otimização GRG do software *Microsoft Excel®* foi utilizado.

A Tabela 8.15 mostra os resultados obtidos pela otimização.

A Figura 8.9 mostra as soluções Pareto ótimas inerentes às funções objetivo consideradas no problema de otimização. Observa-se nessa figura que em ambos os espaços de soluções houve uma boa uniformidade dos pontos sobre a fronteira de Pareto, o que permitiu uma boa exploração das regiões viáveis de solução. Além disso, destaca-se que não houve solução dominada entre as soluções viáveis.

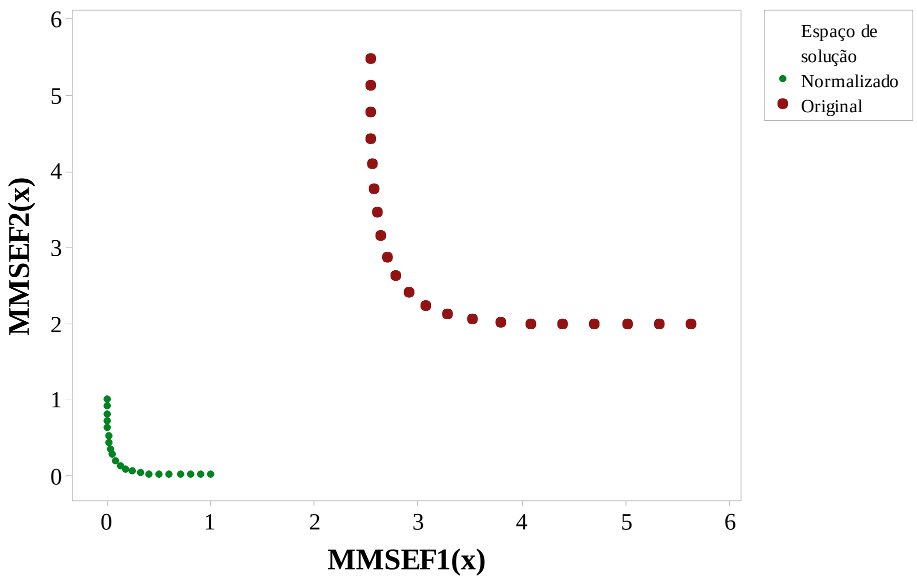

Figura 8.9 – Soluções Pareto ótimas obtidas através do método NBI-MMSE-FA com fatores rotacionados

Tabela 8.15 – Resultados da otimização usando o método NBI-MMSE-FA com fatores rotacionados

n_{sub}	w_1	w_2	$\mathbf{x}^T\mathbf{x}$	v_c	f	a_p	v_c	f	a_p	$MMSE_{F1}$	$MMSE_{F2}$	F_1	F_2	MRR/F_r	K_p	T_t	R_a	R_t
-	-	-	-	-	-	-	m/min	mm/ver	mm	-	-	-	-	cm³/(N×min)	US$	min	µm	µm
1	1,00	0,00	2,828	1,184	0,730	0,946	236,485	0,209	0,481	2,527	5,465	1,766	-0,421	$6{,}246\times10^{-2}$	1,060	0,887	0,969	4,179
2	0,95	0,05	2,828	1,124	0,662	1,062	232,728	0,205	0,511	2,528	5,116	1,757	-0,325	$6{,}140\times10^{-2}$	1,074	0,881	0,934	4,073
3	0,90	0,10	2,758	1,066	0,596	1,126	229,134	0,201	0,527	2,529	4,768	1,722	-0,224	$5{,}963\times10^{-2}$	1,100	0,881	0,897	3,952
4	0,85	0,15	2,549	1,031	0,567	1,080	226,912	0,199	0,515	2,536	4,425	1,676	-0,119	$5{,}755\times10^{-2}$	1,130	0,884	0,862	3,811
5	0,80	0,20	2,326	0,994	0,536	1,025	224,606	0,197	0,501	2,547	4,089	1,625	-0,007	$5{,}533\times10^{-2}$	1,163	0,889	0,825	3,661
6	0,75	0,25	2,092	0,954	0,501	0,965	222,135	0,195	0,486	2,566	3,761	1,569	0,110	$5{,}293\times10^{-2}$	1,198	0,895	0,785	3,502
7	0,70	0,30	1,848	0,911	0,460	0,898	219,412	0,193	0,469	2,595	3,443	1,507	0,234	$5{,}034\times10^{-2}$	1,236	0,903	0,742	3,334
8	0,65	0,35	1,596	0,860	0,414	0,827	216,274	0,190	0,451	2,637	3,141	1,436	0,366	$4{,}753\times10^{-2}$	1,279	0,913	0,697	3,156
9	0,60	0,40	1,336	0,803	0,361	0,749	212,710	0,187	0,431	2,696	2,859	1,355	0,505	$4{,}446\times10^{-2}$	1,326	0,927	0,648	2,968
10	0,55	0,45	1,074	0,738	0,298	0,663	208,636	0,183	0,409	2,781	2,605	1,262	0,651	$4{,}112\times10^{-2}$	1,379	0,946	0,596	2,769
11	0,50	0,50	0,818	0,664	0,226	0,572	203,990	0,179	0,386	2,900	2,390	1,156	0,800	$3{,}756\times10^{-2}$	1,437	0,971	0,541	2,566
12	0,45	0,55	0,586	0,581	0,143	0,477	198,840	0,174	0,362	3,060	2,222	1,036	0,945	$3{,}388\times10^{-2}$	1,502	1,004	0,486	2,365
13	0,40	0,60	0,396	0,494	0,054	0,385	193,376	0,168	0,338	3,266	2,106	0,906	1,078	$3{,}028\times10^{-2}$	1,570	1,045	0,434	2,179
14	0,35	0,65	0,259	0,407	-0,039	0,303	187,928	0,163	0,317	3,513	2,035	0,773	1,190	$2{,}700\times10^{-2}$	1,638	1,092	0,387	2,019
15	0,30	0,70	0,176	0,325	-0,129	0,232	182,782	0,157	0,299	3,789	1,998	0,643	1,277	$2{,}416\times10^{-2}$	1,704	1,143	0,348	1,891
16	0,25	0,75	0,138	0,249	-0,214	0,174	178,088	0,152	0,284	4,082	1,980	0,519	1,341	$2{,}177\times10^{-2}$	1,767	1,196	0,316	1,793
17	0,20	0,80	0,134	0,182	-0,292	0,127	173,856	0,147	0,272	4,384	1,972	0,404	1,386	$1{,}979\times10^{-2}$	1,825	1,248	0,291	1,719
18	0,15	0,85	0,155	0,121	-0,364	0,089	170,059	0,143	0,263	4,690	1,969	0,296	1,416	$1{,}813\times10^{-2}$	1,878	1,299	0,271	1,665
19	0,10	0,90	0,193	0,066	-0,430	0,057	166,633	0,139	0,255	4,998	1,968	0,194	1,435	$1{,}673\times10^{-2}$	1,929	1,348	0,255	1,626
20	0,05	0,95	0,243	0,016	-0,492	0,031	163,523	0,135	0,248	5,307	1,968	0,099	1,446	$1{,}554\times10^{-2}$	1,976	1,397	0,243	1,598
21	0,00	1,00	0,303	-0,029	-0,549	0,009	160,677	0,132	0,242	5,615	1,968	0,009	1,449	$1{,}451\times10^{-2}$	2,020	1,443	0,233	1,580

Ao observar os valores da expressão matricial $\mathbf{x}^T\mathbf{x}$ na Tabela 8.15, verificou-se que as variáveis de controle caíram dentro da região de espaço experimental ρ^2 uma vez que nenhum dos valores foi superior a 2,828.

Ao observar as Figuras 8.10 e 8.11, que mostra graficamente os valores dos fatores rotacionados e das respostas originais em relação às configurações das variáveis de controle, pode-se validar as informações apresentadas na Subseção 8.4.2 através das análises multivariadas a respeito das relações entre os efeitos principais das variáveis sobre as respostas analisadas. Na Figura 8.10 observa-se que à medida que os valores das variáveis de controle aumentam, melhores resultados são observados para as respostas que compõem o fator sustentabilidade/custo. Por outro lado, observando a Figura 8.11, verificou-se que os resultados das respostas que compõem o fator qualidade melhoram para níveis de v_c e a_p próximos de seus valores centrais e níveis de f entre seus valores centrais e próximos a -0,5.

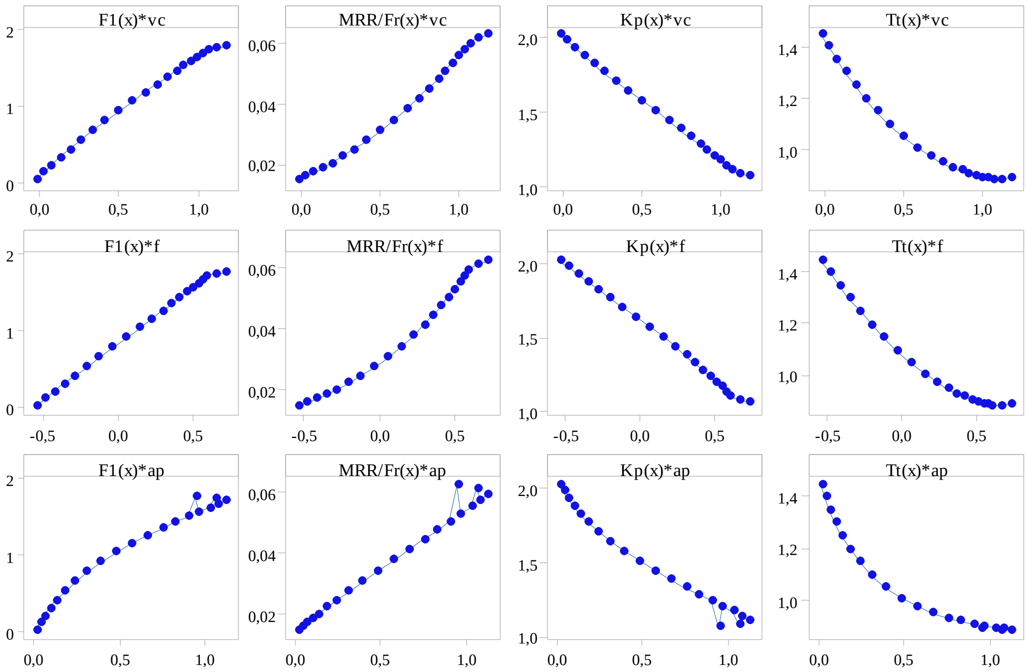

Figura 8.10 – Fator sustentabilidade/custo e respostas originais *versus* variáveis de controle

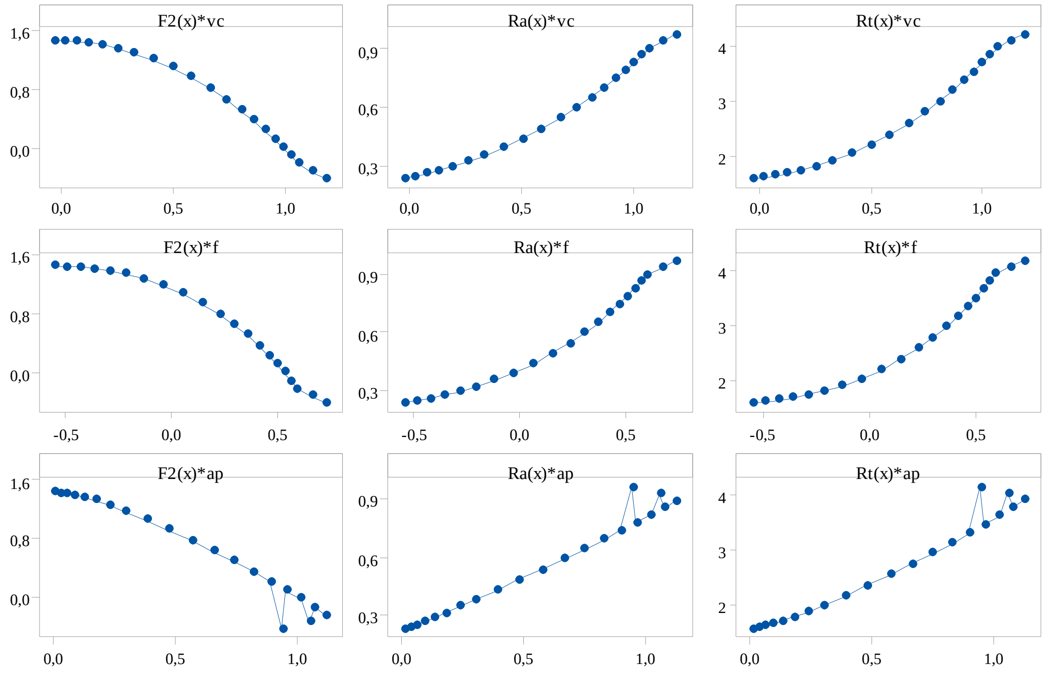

Figura 8.11 – Fator qualidade e respostas originais *versus* variáveis de controle

8.9 Comparação das fronteiras de Pareto dos erros quadráticos médios dos fatores rotacionados e não-rotacionados

Com o intuito de mostrar que optar por rotacionar as cargas fatoriais é a melhor estratégia em termos de melhores resultados das respostas originais, será demonstrado a seguir a comparação entre os resultados obtidos usando o método NBI-MMSE-FA com fatores rotacionados pelo método *varimax* e fatores não-rotacionados. Em relação ao método de estimação das cargas fatoriais, não foram comparados os resultados da presente pesquisa com resultados advindos da aplicação do NBI-MMSE-FA com o método de estimação de máxima verossimilhança, uma vez que esse método assume que os dados originais seguem uma distribuição normal multivariada, o que não foi observado para o conjunto de dados analisados.

Para a comparação das fronteiras de Pareto, a estratégia de escolha da melhor solução Pareto ótima foi a do valor máximo da relação $\xi = Entropia/GPE$. Uma vez que as soluções Pareto ótimas utilizando o método NBI-MMSE-FA com fatores rotacionados já foram encontradas, resta calcular essas soluções aplicando o método com fatores não rotacionados.

A Tabela 8.7 apresenta as cargas fatoriais não-rotacionadas. Os escores fatoriais não-rotacionados são apresentados na Tabela 8.16 juntamente com o arranjo CCD.

Tabela 8.16 – CCD com os escores fatoriais não-rotacionados

Ordem padrão	Variáveis codificadas			Fatores não-rotacionados	
	v_c	f	a_p	F_1	F_2
1	-1	-1	-1	-1,25	-0,51
2	1	-1	-1	0,05	0,25
3	-1	1	-1	0,27	-1,04
4	1	1	-1	1,44	-0,65
5	-1	-1	1	-1,23	-1,23
6	1	-1	1	0,27	0,21
7	-1	1	1	0,21	-1,13
8	1	1	1	1,65	0,84
9	-1,682	0	0	-1,28	-1,68
10	1,682	0	0	1,59	-0,24
11	0	-1,682	0	-1,67	-0,12
12	0	1,682	0	1,34	-0,87
13	0	0	-1,682	0,48	-0,65
14	0	0	1,682	0,23	0,36
15	0	0	0	-0,47	1,39
16	0	0	0	-0,41	1,29
17	0	0	0	-0,41	1,22
18	0	0	0	-0,42	1,30
19	0	0	0	-0,39	1,27

Através da Tabela 8.7 e da Figura 8.12, verifica-se que o primeiro fator não-rotacionado representa as respostas MRR/F_r, K_p e T_t. Já o segundo fator não-rotacionado representa R_a e R_t.

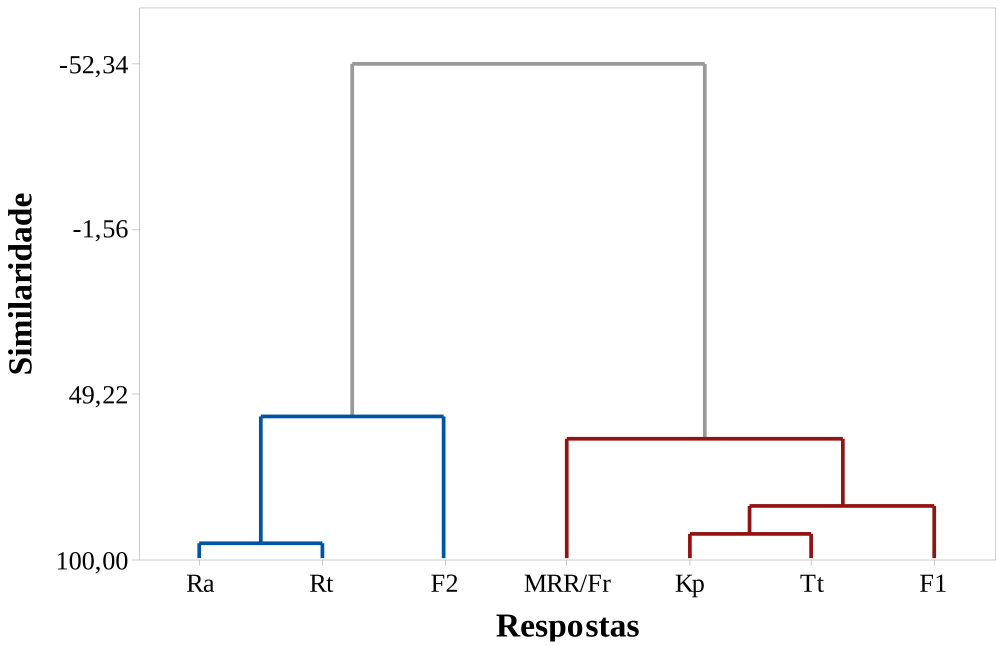

Figura 8.12 – Dendrograma de Ward para as respostas e os fatores não-rotacionados

Os coeficientes de regressão que compõem os modelos quadráticos dos fatores não-rotacionados podem ser observados na Tabela 8.17.

Tabela 8.17 – Coeficientes de regressão dos modelos dos fatores não-rotacionados

Termo	F_1	F_2
β_0	**-0,421**	**1,286**
v_c	**0,750**	0,512
f	**0,790**	-0,145
a_p	-0,001	**0,171**
v_c^2	**0,210**	**-0,747**
f^2	0,095	**-0,583**
a_p^2	**0,280**	**-0,459**
$v_c \times f$	-0,025	0,022
$v_c \times a_p$	0,059	**0,284**
$f \times a_p$	-0,012	**0,270**
R^2	98,5%	96,8%
R^2_{adj}	97,0%	93,6%
S (erro padrão)	0,172	0,253
Curvatura (*p*-valor)	0,000	0,000
Resíduos (*p*-valor)	0,643	0,329

Nota: Coeficientes em negrito são estatisticamente significativos (α = 0,05).

Os alvos das respostas originais e dos fatores não-rotacionados podem ser vistos na Tabela 8.18. As equações de erro quadrático médio para os dois fatores foram calculadas considerando os valores alvo dos fatores na Tabela 8.18 e da contribuição da variância de cada fator à variância total que estão na Tabela 8.7.

Os resultados das otimizações individuais das equações de erro quadrático médio dos fatores não-rotacionados estão apresentados na Tabela 8.19. Comparando os resultados da Tabela 8.14 com os da Tabela 8.19 já se pode dizer que utilizando fatores rotacionados pelo método *varimax* gera melhores valores individuais para as respostas originais do que utilizando fatores não-rotacionados. Entretanto, uma análise estatística mais aprofundada comparando as fronteiras de Pareto deve ser realizada para fatores rotacionados e não rotacionados.

Tabela 8.18 – Valores alvo das equações das respostas originais e dos fatores não-rotacionados

Problema de otimização	Resultado
Min $[R_a(\mathbf{x})]$	$\zeta_{R_a(\mathbf{x})} = 0{,}207$
Min $[R_t(\mathbf{x})]$	$\zeta_{R_t(\mathbf{x})} = 1{,}561$
Max $[MRR / F_r(\mathbf{x})]$	$\zeta_{MRR/F_r(\mathbf{x})} = 6{,}311\times10^{-2}$
Min $[K_p(\mathbf{x})]$	$\zeta_{K_p(\mathbf{x})} = 1{,}051$
Min $[T_t(\mathbf{x})]$	$\zeta_{T_t(\mathbf{x})} = 0{,}867$
Max $[F_1(\mathbf{x})]$	$\zeta_{F_1(\mathbf{x})} = 1{,}835$
Max $[F_2(\mathbf{x})]$	$\zeta_{F_2(\mathbf{x})} = 1{,}417$

Nota: Todas as otimizações foram sujeitas a restrição $v_c^2 + f^2 + a_p^2 \leq 2{,}828$

Tabela 8.19 – Resultados das otimizações individuais das funções objetivo de erro quadrático médio dos fatores não-rotacionados

	$MMSE_{F1}$	$MMSE_{F2}$	MRR/F_r	K_p	T_t	R_a	R_t
	-	-	cm³/(N×min)	US$	min	μm	μm
$\mathbf{x}^{1*}$	3,172	3,189	$5{,}836\times10^{-2}$	1,080	0,927	1,161	4,852
$\mathbf{x}^{2*}$	6,904	1,324	$2{,}666\times10^{-2}$	1,646	1,098	0,382	2,003

A Tabela 8.20 mostra os resultados das otimizações das funções objetivo de erro quadrático médio dos dois fatores não-rotacionados utilizando o método NBI-MMSE-FA.

Para o cálculo da relação ξ = *Entropia*/*GPE* foram considerados os alvos das variáveis originais obtidos pela otimização individual de cada uma que estão em ambas as Tabelas 8.13 e 8.18. Os índices *GPE*, Entropia e ξ estão apresentados na Tabela 8.21. Nessa tabela, considerando o índice ξ = *Entropia*/*GPE*, todos os 21 valores são maiores para fatores rotacionados do que para fatores não-rotacionados. A Figura 8.13 apresenta de maneira ilustrativa a diferença entre os valores desse índice. Entretanto, para se afirmar que tal comparação pode ser realizada, as medidas $\xi_{\text{(Rotação varimax)}}$ e $\xi_{\text{(Sem rotação)}}$ devem ser estatisticamente diferentes para os dois casos.

Tabela 8.20 – Resultados da otimização usando o método NBI-MMSE-FA com fatores não-rotacionados

n_{sub}	w_1	w_2	$\mathbf{x}^T\mathbf{x}$	v_c	f	a_p	v_c	f	a_p	$MMSE_{F1}$	$MMSE_{F2}$	F_1	F_2	MRR/F_r	K_p	T_t	R_a	R_t
-	-	-	-	-	-	-	m/min	mm/rev	mm	-	-	-	-	cm³/(N×min)	US$	min	μm	μm
1	1,00	0,00	2,828	1,353	0,986	0,161	247,080	0,219	0,281	3,172	3,189	1,835	0,051	$5{,}836\times10^{-2}$	1,080	0,927	1,161	4,851
2	0,95	0,05	2,828	1,354	0,969	0,240	247,104	0,218	0,301	3,172	3,002	1,834	0,121	$5{,}947\times10^{-2}$	1,074	0,925	1,145	4,789
3	0,90	0,10	2,828	1,351	0,947	0,324	246,966	0,217	0,323	3,172	2,816	1,830	0,195	$6{,}051\times10^{-2}$	1,068	0,923	1,127	4,723
4	0,85	0,15	2,828	1,338	0,931	0,414	246,122	0,216	0,346	3,172	2,629	1,822	0,274	$6{,}142\times10^{-2}$	1,062	0,919	1,107	4,648
5	0,80	0,20	2,828	1,324	0,902	0,511	245,272	0,214	0,370	3,172	2,443	1,808	0,359	$6{,}221\times10^{-2}$	1,057	0,914	1,084	4,566
6	0,75	0,25	2,828	1,300	0,870	0,619	243,729	0,212	0,398	3,174	2,258	1,787	0,451	$6{,}279\times10^{-2}$	1,053	0,908	1,058	4,472
7	0,70	0,30	2,828	1,263	0,827	0,742	241,414	0,210	0,429	3,178	2,073	1,755	0,551	$6{,}307\times10^{-2}$	1,051	0,900	1,026	4,363
8	0,65	0,35	2,828	1,204	0,766	0,890	237,751	0,206	0,467	3,190	1,892	1,701	0,663	$6{,}277\times10^{-2}$	1,056	0,890	0,986	4,230
9	0,60	0,40	2,828	1,110	0,656	1,079	231,905	0,199	0,515	3,227	1,725	1,599	0,784	$6{,}119\times10^{-2}$	1,077	0,880	0,929	4,057
10	0,55	0,45	2,545	1,029	0,567	1,079	226,804	0,194	0,515	3,344	1,597	1,420	0,895	$5{,}750\times10^{-2}$	1,131	0,884	0,861	3,807
11	0,50	0,50	2,167	0,968	0,512	0,984	222,971	0,191	0,491	3,527	1,502	1,239	0,995	$5{,}372\times10^{-2}$	1,187	0,893	0,798	3,554
12	0,45	0,55	1,824	0,906	0,456	0,892	219,099	0,187	0,467	3,765	1,434	1,065	1,085	$5{,}008\times10^{-2}$	1,241	0,904	0,738	3,317
13	0,40	0,60	1,517	0,844	0,399	0,804	215,241	0,184	0,445	4,047	1,389	0,899	1,163	$4{,}662\times10^{-2}$	1,293	0,917	0,682	3,100
14	0,35	0,65	1,249	0,783	0,341	0,721	211,432	0,180	0,424	4,362	1,359	0,744	1,229	$4{,}339\times10^{-2}$	1,343	0,933	0,631	2,903
15	0,30	0,70	1,018	0,723	0,284	0,644	207,698	0,177	0,404	4,700	1,342	0,599	1,283	$4{,}038\times10^{-2}$	1,391	0,951	0,584	2,726
16	0,25	0,75	0,822	0,665	0,227	0,573	204,058	0,174	0,386	5,054	1,332	0,463	1,327	$3{,}761\times10^{-2}$	1,436	0,971	0,542	2,568
17	0,20	0,80	0,656	0,608	0,170	0,507	200,522	0,170	0,369	5,418	1,327	0,337	1,361	$3{,}505\times10^{-2}$	1,481	0,993	0,503	2,427
18	0,15	0,85	0,519	0,553	0,115	0,447	197,083	0,167	0,354	5,786	1,325	0,218	1,387	$3{,}269\times10^{-2}$	1,523	1,016	0,469	2,302
19	0,10	0,90	0,407	0,500	0,060	0,391	193,741	0,164	0,340	6,158	1,324	0,107	1,404	$3{,}052\times10^{-2}$	1,565	1,042	0,437	2,190
20	0,05	0,95	0,317	0,448	0,005	0,341	190,495	0,160	0,327	6,531	1,324	0,002	1,414	$2{,}851\times10^{-2}$	1,606	1,069	0,408	2,091
21	0,00	1,00	0,247	0,397	-0,049	0,294	187,321	0,157	0,315	6,904	1,324	-0,097	1,417	$2{,}666\times10^{-2}$	1,646	1,098	0,382	2,003

Tabela 8.21 – Índices de *Entropia*, *GPE* e ξ = *Entropia*/*GPE*

n_{sub}	*Entropia* [a]	*GPE* total		ξ	
		Rotação varimax	Sem rotação	Rotação varimax	Sem rotação
1	0,000	5,399	6,889	0,000	0,000
2	0,199	5,188	6,746	0,038	0,029
3	0,325	4,985	6,592	0,065	0,049
4	0,423	4,789	6,424	0,088	0,066
5	0,500	4,584	6,238	0,109	0,080
6	0,562	4,368	6,029	0,129	0,093
7	0,611	4,142	5,790	0,147	0,105
8	0,647	3,905	5,508	0,166	0,118
9	0,673	3,658	5,160	0,184	0,130
10	0,688	3,404	4,785	0,202	0,144
11	0,693	3,151	4,438	0,220	0,156
12	0,688	2,913	4,119	0,236	0,167
13	0,673	2,709	3,831	0,248	0,176
14	0,647	2,554	3,574	**0,254**	0,181
15	0,611	2,450	3,349	0,249	**0,182**
16	0,562	2,392	3,154	0,235	0,178
17	0,500	2,370	2,986	0,211	0,168
18	0,423	2,375	2,842	0,178	0,149
19	0,325	2,401	2,722	0,135	0,119
20	0,199	2,443	2,621	0,081	0,076
21	0,000	2,496	2,540	0,000	0,000

Nota: Índices em negrito correspondem aos valores máximos.

[a] Os índices de *Entropia* são os mesmos para os fatores rotacionados e não-rotacionados, pois eles dependem somente dos pesos atribuídos às funções objetivo.

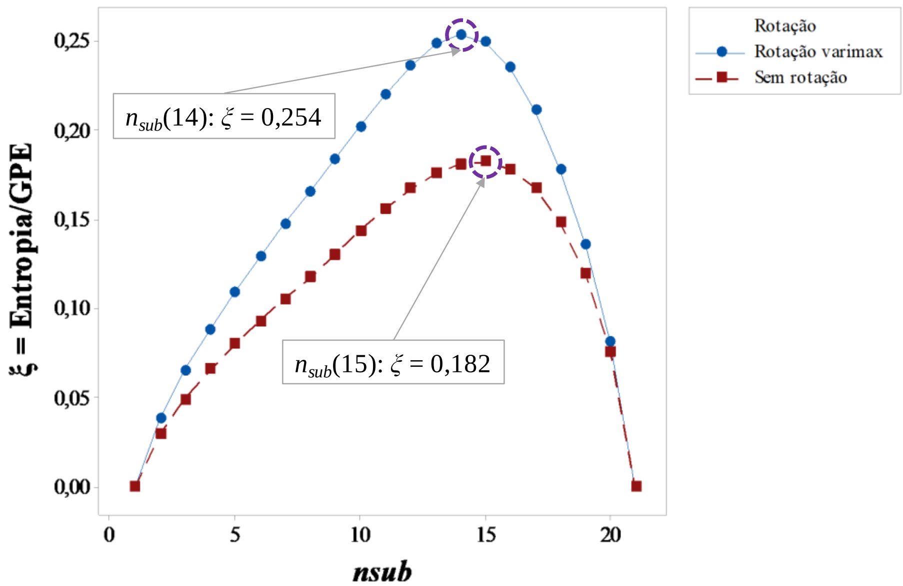

Figura 8.13 – ξ = *Entropia*/*GPE* para as soluções das respostas originais

Para testar se há diferença entre os valores das medidas $\xi_{(\text{Rotação varimax})}$ e $\xi_{(\text{Sem rotação})}$, foi utilizado o teste *t* pareado. As quatro principais assunções para esse teste foram atendidas uma vez que: as variáveis dependentes são contínuas; as observações são dependentes do mesmo método de otimização; as variáveis são normalmente distribuídas; e as variáveis dependentes não contêm *outliers*. As normalidades das variáveis foram comprovadas uma vez que *p*-valor = 0,287 para $\xi_{(\text{Rotação varimax})}$ e *p*-valor= 0,175 para $\xi_{(\text{Sem rotação})}$, ou seja, ambos maiores que o nível de significância α = 0,05. Para se testar a presença de *outliers*, o teste de Grubb foi utilizado e constatou-se a ausência de *outliers*, conforme Tabela 8.22.

Tabela 8.22 – Teste de Grubb para os índices $\xi_{(\text{Rotação varimax})}$ e $\xi_{(\text{Sem rotação})}$

Variável	N	Média	Desv. Pad.	Mín.	Máx.	G	*p*-valor
$\xi_{(\text{Rotação varimax})}$	21	0,151	0,082	0,000	0,254	1,850	1,000
$\xi_{(\text{Sem rotação})}$	21	0,113	0,059	0,000	0,182	1,910	0,994

Atendidas as assunções do teste *t* pareado, o mesmo foi realizado. Na Tabela 8.23 observa-se que a estimativa da diferença da média da população de ξ é de 0,039. Assim, há uma confiança de 95% de que a diferença da média da população está entre 0,027 e 0,050. Essa diferença é estatisticamente significativa uma vez que o *p*-valor = 0,000 é menor que o nível de significância α = 0,05, conforme apresentado na Tabela 8.24. Assim, conclui-se que a diferença entre as médias da população é diferente de 0. Além disso, como a diferença entre as médias é positiva, afirma-se que o índice $\xi_{(\text{Rotação varimax})}$ = *Entropia*/*GPE* é maior do que o índice $\xi_{(\text{Sem rotação})}$ = *Entropia*/*GPE*.

Tabela 8.23 – Estimação para a diferença pareada do índice ξ = Entropia/GPE

Média	Desv. pad.	IC 95% para μ_diferença
0,039	0,025	(0,027; 0,050)

Nota: μ_diferença é a média de [$\xi_{(\text{Rotação varimax})}$ - $\xi_{(\text{Sem rotação})}$]

Tabela 8.24 – Teste *t* pareado para a diferença das médias de ξ = Entropia/GPE

t-valor	*p*-valor
7,160	0,000

H_0: μ_diferença = 0

H_1: μ_diferença $\neq$ 0

Portanto, pode-se concluir que o método NBI-MMSE-FA gerou melhores resultados para as respostas originais quando adotando a estratégia de rotação dos fatores pelo método *varimax* uma vez que os valores dos índices da relação ξ = *Entropia*/*GPE* são estatisticamente maiores quando usando fatores rotacionados pelo método *varimax* do que quando usando fatores não-rotacionados. De uma maneira geral, os valores otimizados das respostas originais se aproximaram mais de seus valores alvos quando utilizando o método NBI-MMSE-FA com fatores rotacionados do que quando utilizando o método com fatores não-rotacionados porque ao rotacionar os eixos fatoriais o método varimax maximizou a dispersão dos quadrados das cargas fatoriais em cada fator. Assim, cargas fatoriais com maiores e menores valores absolutos foram referentes as cargas rotacionadas, o que permitiu que as respostas fossem altamente "carregadas" pelos dois fatores rotacionados. Por conseguinte, tendo cargas fatoriais com maiores valores absolutos faz com os escores fatoriais rotacionados de um fator representem mais um grupo de resposta do que o outro grupo representado pelos seus respectivos escores fatoriais. Então, ao otimizar as equações de MSE dos fatores rotacionados, as cargas fatoriais funcionaram como uma maneira de ponderação das respostas originais, fazendo com que essas respostas se aproximassem mais de seus valores alvos quando utilizando cargas fatoriais rotacionadas pelo método varimax.

Uma vez que as cargas fatoriais não-rotacionadas são somente uma ponderação dos autovetores de **R** ou **S** pela raiz quadrada do autovalor, os resultados obtidos utilizando PCA e FA com fatores não-rotacionados serão semelhantes do ponto de vista das Fronteiras de Pareto e dos valores ótimos das respostas originais. Assim, conclui-se também que a abordagem proposta neste estudo, NBI-MMSE-FA, supera a abordagem NBI-MMSE-PCA em relação a maiores índices ξ = *Entropia*/*GPE*, ou seja, a abordagem utilizando a modelagem de escores de componentes principais para formação das equações de erro quadrático médio.

A Figura 8.14 mostra o gráfico de contornos sobrepostos referentes aos modelos quadráticos das respostas originais e dos fatores rotacionados. Nessa figura, destaca-se o ponto ótimo selecionado onde há o valor máximo da relação $\xi_{(\text{Rotação varimax})}$ = *Entropia*/*GPE*.

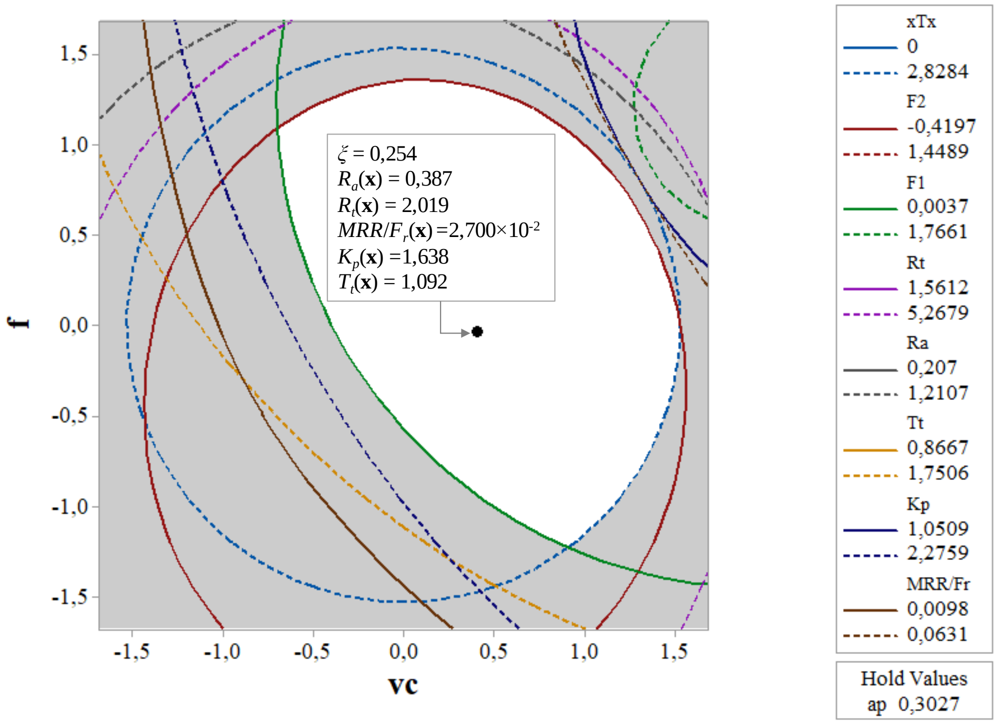

Figura 8.14 – Gráfico de contornos para as respostas originais e fatores rotacionados

9 CONCLUSÕES

A presente pesquisa apresentou o desenvolvimento e aplicação de uma nova abordagem para solucionar problemas de otimização com múltiplas respostas correlacionadas. A nova abordagem de otimização, nomeada aqui como NBI-MMSE-FA, considerou a combinação das técnicas de metodologia de superfície de resposta, erro quadrático médio, análise fatorial e método de interseção normal à fronteira. Para mostrar a aplicação da nova abordagem de otimização multivariada, foi considerado o processo de torneamento do aço endurecido AISI H13 com múltiplas respostas correlacionadas, sendo elas, rugosidade média R_a, rugosidade total R_t, relação entre taxa de remoção de material e força resultante MRR/F_r, custo total K_p e tempo total de usinagem T_t.

A partir dos resultados apresentados através da aplicação do método NBI-MMSE-FA, são apresentadas as seguintes conclusões:

1. Os modelos quadráticos empíricos desenvolvidos para as respostas analisadas são de grande confiabilidade uma vez que seus coeficientes de ajustes R^2 e R^2_{adj} são todos superiores a 90%;
2. O conjunto de respostas se mostrou adequado à aplicação da análise fatorial uma vez que o índice MSA geral foi de 0,65 e os valores individuais de MSA referentes a cada resposta foram superiores a 0,5. O teste de esfericidade de Bartlett não foi utilizado, pois o teste de Mardia revelou que os dados originais não seguiram uma distribuição normal multivariada;
3. A porcentagem de variação total explicada por 2 fatores foi de 89,9%. Além disso, o *scree plot* confirmou que para representar as respostas originais somente 2 fatores foram necessários;
4. As cargas fatoriais rotacionadas pelo método *varimax* revelaram as relações entre fatores e respostas originais. Assim, observou-se que o primeiro fator se associa às respostas $MRR/F_r(\mathbf{x})$, $K_p(\mathbf{x})$ e $T_t(x)$, formando assim um *cluster* de resposta nomeado como fator sustentabilidade/custo. O segundo fator se associa às respostas $R_a(\mathbf{x})$ e $R_t(\mathbf{x})$, formando o fator qualidade;
5. A análise fatorial com rotação *varimax* manteve as correlações entre as respostas e o sentido de otimização das mesmas, fatos esses observados nos sinais das cargas fatoriais rotacionadas;
6. Os modelos quadráticos dos fatores rotacionados apresentaram bons valores para os coeficientes de ajustes, sendo R^2 e R^2_{adj} superiores a 92%;

7. A análise multivariada revelou as relações entre os efeitos principais e interações sobre as respostas originais;
8. As equações de erro quadrático médio dos fatores rotacionados foram utilizadas para aproximar os fatores de seus valores alvos. O melhor valor da equação de erro quadrático médio para o fator sustentabilidade/custo é inerente a MRR/F_r = 6,245×10^{-2} N×min, K_p = US$ 1,06, T_t = 0,886 min, R_a = 0,969 μm e R_t = 4,178 μm. Os valores das respostas inerentes ao melhor valor da equação de erro quadrático médio do fator qualidade são MRR/F_r = 1,453×10^{-2} N×min, K_p = US$ 2,02, T_t = 1,444 min, R_a = 0,233 μm e R_t = 1,580 μm;
9. As soluções Pareto ótimas geradas pelo método NBI-MMSE-FA apresentaram visualmente boa uniformidade, permitindo boa exploração da região de solução viável e, por conseguinte, boa exploração das respostas originais analisadas;
10. As relações entre efeitos principais e respostas originais constatadas nas análises multivariadas foram confirmadas na prática após otimização multivariada utilizando a abordagem proposta nesta pesquisa;
11. Por meio da comparação entre as fronteiras de Pareto dos erros quadráticos médios dos fatores rotacionados e não-rotacionados constatou-se estatisticamente e graficamente que a melhor estratégia, do ponto de vista de maior valor da relação $\xi = Entropia/GPE$, foi optar por rotacionar os eixos fatoriais em contrapartida aos eixos não-rotacionados.

9.1 Contribuições do trabalho

A principal contribuição desta pesquisa consiste no desenvolvimento de uma abordagem de otimização para problemas com múltiplas respostas correlacionadas levando em consideração, principalmente, o erro quadrático médio e análise fatorial. Vários pontos positivos podem ser destacados:

1. Desenvolvimento algébrico do método NBI para mais do que duas funções objetivo;
2. Análise multivariada das relações entre efeitos principais e interações com as respostas originais correlacionadas e fatores rotacionados;
3. Boa capacidade dos fatores rotacionados em agrupar respostas de contextos semelhantes como qualidade, sustentabilidade e custo;

4. Utilização do teste estatístico *t* pareado para comparações de soluções Pareto ótimas uma vez que não foi observado na literatura a utilização de tal método para atingir o objetivo de comparação;
5. Comparação entre os valores das respostas originais encontradas através da aplicação do método NBI-MMSE-FA com fatores rotacionados e não-rotacionados.

9.2 Sugestões para trabalhos futuros

As sugestões para trabalhos futuros advém das diversidades de métodos utilizados dentro da análise fatorial para extração e rotação de cargas fatoriais bem como dos métodos de estimação de escores fatoriais. Assim, como sugestões destacam-se estudos para comparações das soluções Pareto ótimas obtidas através do método NBI-MMSE-FA para:

1. Fatores cujas cargas fatoriais são estimadas por outros métodos de extração tais como máxima verossimilhança, mínimos quadrados ponderados, mínimos quadrados generalizados e fatores principais;
2. Fatores rotacionados por outros métodos de rotação tais como os métodos *quartimax* e *equimax*;
3. Fatores cujos escores fatoriais são estimados por outros métodos de estimação tais como mínimos quadrados ponderados e método da regressão.

REFERÊNCIAS

ANTONY, J. Multi-response optimization in industrial experiments using Taguchi's quality loss function and principal component analysis. **Quality and Reliability Engineering International**, v. 16, n. 1, p. 3–8, 2000.

BEZERRA, M. A.; SANTELLI, R. E.; OLIVEIRA, E. P.; VILLAR, L. S.; ESCALEIRA, L. A. Response surface methodology (RSM) as a tool for optimization in analytical chemistry. **Talanta**, n. 76, p. 965-977, 2008.

BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. **Response surfaces, mixtures, and ridge analyses**. 2 ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2007.

BOX, G. E. P.; WILSON, K. B. On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. **Journal of the Royal Statistical Society**, v. 13, n. 1, p. 1-45, 1951.

CAMPOS, P. H. S. Metodologia DEA-OTS: uma contribuição para a seleção ótima de ferramentas no torneamento do aço ABNT H13 endurecido. [s.l.] Universidade Federal e Itajubá, 2015.

CHEN, W.; WIECEK, M. M.; ZHANG, J. Quality utility – a compromise programming approach to robust design. **Journal of Mechanical Design**, v. 121, n. 2, p. 179-187, 1999.

CHENG, S. W.; WU, C. F. J. Factor screening and response surface exploration. **Statistica Sinica**, v. 11, p. 553-604, 2001.

CHIANDUSSI, G.; CODEGONE, M.; FERRERO, S. VARESIO, F. E. Comparison of multi-objective optimization methodologies for engineering applications. **Computers & Mathematics with Applications**, v. 63, n. 5, p. 912-942, 2012.

CHIAO, C.-H.; HAMADA, M. Analyzing Experiments with Correlated Multiple Responses. **Journal of Quality Technology**, v. 33, n. 4, p. 451–465, 2001.

CHOUDHURY, I. A.; EL-BARADIE, M. A. Tool-life prediction model by design of experiments for turning high strength steel (290 BHN). **Journal of Materials Processing Technology**, v. 77, n. 1–3, p. 319-326, 1998.

COSTA, D. M. D. Método NBI-EQMM com restrições multivariadas para otimização do processo de torneamento duro. [s.1] Universidade Federal de Itajubá, 2017, p. 239.

COSTA, D. M. D.; BRITO, T. G.; PAIVA, A. P.; LEME, R. C.; BALESTRASSI, P. P. A normal boundary intersection with multivariate mean square error approach for dry end milling process optimization of the AISI 1045 steel. **Journal of Cleaner Production**, v. 135, p. 1658-1672, 2016.

COSTELLO, A. B.; OSBORNE, J. W. Best Practices in Exploratory Factor Analysis: Four Recommendations for Getting the Most From Your Analysis. **Practical Assessment Research & Evaluation**, v. 10, n. 7, p. 1-9, 2005.

DAS, I.; DENNIS, J. E. Normal-Boundary Intersection: A New Method for Generating the Pareto Surface in Nonlinear Multicriteria Optimization Problems. **SIAM Journal on Optimization**, v. 8, n. 3, p. 631–657, 1998.

DEL CASTILLO, E. **Process optimization: a statistical approach**. New York: Springer, 2007.

FERREIRA, D. F. **Estatística multivariada**. 2ª ed. Ed. UFLA, 2011.

GOOS, P.; JONES, B. **Optimal Design of Experiments**: a case study approach. Chichester: John Wiley & Sons, 2011.

HOERL, A. E. Ridge analysis. **Chemical Engineering Progress Symposium Series**, 60, p. 67-77, 1964.

JAIMES, A. L.; MARTÍNEZ, S. Z.; COELLO, C. A. C. **An introduction to multiobjective optimization techniques**. Nova Science Publishers, 2009.

JIA, Z.; IERAPETRITOU, M. G. Generate Pareto optimal solutions of scheduling problems using normal boundary intersection technique. **Computers and Chemical Engineering**, v. 31, n. 4, p. 268–280, 2007.

JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W. **Applied Multivariate Statistical Analysis**. 6ª ed. Prentice Hall, 2007.

KHURI, A. I.; MUKHOPADHYAY, S. Response surface methodology. Wiley Interdisciplinary Reviews: **Computational Statistics**, v. 2, n. 2, p. 128-149, 2010.

LASDON, L. S.; WAREN, A. D.; JAIN, A.; RATNER, M. Design and Testing of a Generalized Reduced Gradient Code for Nonlinear Programming. **ACM Transactions on Mathematical Software**, v. 4, n. 1, p. 34-50, 1978.

LIN, D. K. J.; TU, W. Dual response surface optimization. **Journal of Quality Technology**, n. 27, p. 34–39, 1995.

LOGIST, F.; VAN IMPE, J. Novel insights for multi-objective optimization in engineering using normal boundary intersection and (enhanced) normalized normal constraint. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 45, n. 3, p. 417-431, 2012.

LUNDSTEDT, T.; SEIFERT, E.; ABRAMO, L.; THELIN, B.; NYSTROM, A.; PERTENSEN, J.; BERGMAN, R. Experimental design and optimization. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 42, p. 3-40, 1998.

MARDIA, K. V. Measures of multivariate skewness and kurtosis with applications. **Biometrika**, v. 57, n. 3, p. 519-530, 1970.

MARLER, R. T.; ARORA, J. S. Survey of multi-objective optimization methods for engineering. **Structural and multidisciplinary optimization**, v. 395, n. 26, p. 369–395, 2004.

MARTINS, R. A.; MELLO, C. H. P.; TURRIONI, J. B. **Guia para elaboração de monografia e TCC em Engenharia de Produção**. São Paulo: Atlas, 2014.

MESSAC, A.; ISMAIL-YAHAYA, A.; MATTSON, C. A. The normalized normal constraint method for generating the Pareto frontier. **Structural and multidisciplinary optimization**, v. 25, n. 2, p. 86-98, 2003.

MESSAC, A.; MATTSON, C. A. Normal constraint method with guarantee of even representation of complete Pareto frontier. **AIAA journal**, v. 42, n. 10, p. 2101-2111, 2004.

MIETTINEN K. **Nonlinear multiobjective optimization**. 1 ed. Boston: Kluwer Academic Publishers, 1999.

MONTGOMERY, D. C. **Design and analysis of experiments**. 9 ed. John Wiley & Sons, 2017.

MYERS, R. H.; KURI, A. I.; CARTER, Walter H. Response surface methodology: 1966-1988. **Technometrics**, v. 31, n. 2, p. 137-157, 1989.

MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. **Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments**. 4 ed. John Wiley & Sons, 2016.

NAVES, F. L.; PAULA, T. I.; BALESTRASSI, P. P; BRAGA, W. L. M; SAWHNEY, R. S.; PAIVA, A. P. Multivariate Normal Boundary Intersection based on rotated factor scores: A multiobjective optimization method for methyl orange treatment. **Journal of Cleaner Production**, v. 143, p. 413-439, 2017.

PAIVA, A. P. de. Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de Componentes Principais em Otimização de Processos de Manufatura com Múltiplas Respostas Correlacionadas. [s.1] Universidade Federal de Itajubá, 2006, p. 257.

PAIVA, A. P.; FERREIRA, J. R.; BALESTRASSI, P. P. A multivariate hybrid approach applied to AISI 52100 hardened steel turning optimization. **Journal of Materials Processing Technology**, v. 189, p. 26–35, 2007.

PAIVA, A. P.; PAIVA, E. J.; FERREIRA, J. R.; BALESTRASSI, P. P.; COSTA, S. C. A multivariate mean square error optimization of AISI 52100 hardened steel turning. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v. 43, n. 7-8, p. 631–643, 2009.

PEREIRA, R. B. D.; LEITE, R. R.; ALVIM, A. C.; PAIVA, A. P.; FERREIRA, J. R.; DAVIM, J. P. Multi-objective robust optimization of the sustainable helical milling process of the aluminum alloy Al 7075 using the augmented-enhanced normalized normal constraint method. **Journal of Cleaner Production**, v. 152, p. 474-496, 2017.

RENCHER, A. C. **Methods of multivariate analysis**. 2 ed. JOHN WILEY & SONS, 2002.

ROCHA, L. C. S.; PAIVA, A. P.; BALESTRASSI, P. P.; SEVERINO, G.; ROTELA JÚNIOR, P. Entropy-Based Weighting for Multiobjective Optimization: An Application on Vertical Turning. **Mathematical Problems in Engineering**, v. 2015, p. 1-15, 2015.

SAMBUCINI, V. Confidence regions for the stationary point of a quadratic response surface based on the asymptotic distribution of its MLE. **Statistics and Computing**, v. 22, n. 3, p. 739-751, 2012.

SANCHIS, J.; MARTINEZ, M.; BLASCO, X.; SALCEDO, J. V. A new perspective on multiobjective optimization by enhanced normalized normal constraint method. **Structural and multidisciplinary optimization**, v. 36, n. 5, p. 537-546, 2008.

SHANON, C. E. A mathematical theory of communication. **The Bell System Technical Journal**, v. 27, n. 3, p. 379-423, 1948.

STEHR, G.; GRAEB, H. E.; ANTREICH, K. J. Analog Performance Space Exploration by Normal-Boundary Intersection and by Fourier–Motzkin Elimination. **IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems**, v. 26, n. 10, p. 1733-1748, 2007.

VINNING, G. G. A Compromise Approach to Multiresponse Optimization. **Journal of Quality Technology**, v. 30, n. 4, p. 309-313, 1998.

WU, F.-C. Optimization of Correlated Multiple Quality Characteristics Using Desirability Function. **Quality Engineering**, v. 17, n. 1, p. 119–126, 2004.

APÊNDICES

Apêndice A. Artigos publicados em periódicos

ALMEIDA, F.; PAULA, T. I.; LEITE, R. R.; GOMES, G. F.; GOMES, J. H. F.; PAIVA, A. P.; BALESTRASSI, P. P. A multivariate GR&R approach to variability evaluation of measuring instruments in resistance spot welding process. **Journal of Manufacturing Processes**, v. 36, p. 465-479, 2018. DOI: 10.1016/j.jmapro.2018.10.030

PEREIRA, R. B. D.; LEITE, R. R.; ALVIM, A. C.; PAIVA, A. P.; BALESTRASSI, P. P.; FERREIRA, J. R.; DAVIM, J. P. Multivariate robust modeling and optimization of cutting forces of the helical milling process of the aluminum alloy Al 7075. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v. 95, n. 5-8, p. 2691-2715, 2018. DOI: 10.1007/s00170-017-1398-3

PEREIRA, R. B. D.; LEITE, R. R.; ALVIM, A. C.; PAIVA, A. P.; FERREIRA, J. R.; DAVIM, J. P. Multiobjective robust optimization of the sustainable helical milling process of the aluminum alloy Al 7075 using the augmented-enhanced normalized normal constraint method. **Journal of Cleaner Production**, v. 152, p. 474-496, 2017. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.03.121

LEITE, R. R.; TEIXEIRA, K. S.; JÚNIOR, W. T. S.; CALIARI, J. C. S.; PAIVA, A. P. Diminuição do tempo de análise química de amostras em uma empresa siderúrgica utilizando grupo de melhoria contínua. **GEPROS. Gestão da Produção, Operações e Sistemas**, v. 13, n. 4, p. 168-193, 2018. DOI: 10.15675/gepros.v13i4.1996

Apêndice B. Artigos publicados em anais de congressos

LEITE, R. R.; MELO, D. J.; CARVALHO, H.; OLIVEIRA, L. G.; PAIVA, A. P. Aplicação de métodos de balanceamento de linha em uma empresa do setor alimentício. **In:** XXXVIII Encontro Nacional de Engenharia de Produção, 2018, Maceió, AL. A Engenharia de Produção e suas contribuições para o desenvolvimento do Brasil, 2018. DOI: 10.14488/ENEGEP2018_TN_STO_258_479_36359

GASPAR JÚNIOR, F. C.; ALMEIDA, F. A.; LEITE, R. R.; BELINATO, G.; GOMES, J. H. F. Otimização de um processo de torneamento interno de buchas de ferro fundido nodular em uma empresa do setor de autopeças. **In:** XXXVIII Encontro Nacional de Engenharia de Produção, 2018, Maceió, AL. A Engenharia de Produção e suas contribuições para o

desenvolvimento do Brasil, 2018. DOI: 10.14488/ENEGEP2018_TN_WPG_263_512_35422

OLIVEIRA, L. G.; MARTINS, Y. S.; LEITE, R. R.; CAMPOS, P. H. S.; LACERDA, J. C.. Panorama de abordagens da gestão de projetos em P&D: contexto atual e direcionamentos futuros. **In:** XXXVIII Encontro Nacional de Engenharia de Produção, 2018, Maceió, AL. A Engenharia de Produção e suas contribuições para o desenvolvimento do Brasil, 2018. DOI: 10.14488/ENEGEP2018_TN_STO_265_523_35070

MELO, D. J; LEITE, R. R.; SILVA, L. A.; SILVA, K. O. A. N.; MONTEVECHI, J. A. B. Aplicação da programação linear para atendimento de demanda e otimização de recursos em uma empresa de autopeças. **In:** XXXVII Encontro Nacional de Engenharia de Produção, 2017, Joinville, SC. A Engenharia de Produção e as novas tecnologias produtivas: indústria 4.0, manufatura aditiva e outras abordagens avançadas de produção, 2017. DOI: 10.14488/ENEGEP2017_TN_STO_243_410_33560