

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
DE PRODUÇÃO

LUIZ GUSTAVO DIAS LOPES

UMA CONTRIBUIÇÃO PARA ANÁLISE DE COMPONENTES
PRINCIPAIS EM OTIMIZAÇÃO DE MÚLTIPLAS RESPOSTAS SOB
CONDIÇÃO DE INCERTEZA

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: Qualidade e Produto

Orientador: Prof. Anderson Paulo de Paiva, Dr.

Abril de 2011

Itajubá, MG

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
DE PRODUÇÃO

UMA CONTRIBUIÇÃO PARA ANÁLISE DE COMPONENTES
PRINCIPAIS EM OTIMIZAÇÃO DE MÚLTIPLAS RESPOSTAS SOB
CONDIÇÃO DE INCERTEZA

LUIZ GUSTAVO DIAS LOPES

Abril de 2011

Itajubá, MG

Dedicatória

Dedico este trabalho à minha esposa Neli, ao meu filho
Guilherme e à minha mãe Ruth que me incentivaram
integralmente por todo longo percurso de
desenvolvimento deste trabalho.

Agradecimentos

Primeiramente a DEUS, que me alimentou o espírito nos momentos difíceis.

Ao prof. Dr. Anderson Paulo de Paiva, orientador e amigo, pelos dias de dedicação, paciência e competência transmitidas durante todo desenvolvimento deste trabalho.

À minha esposa Neli, companheira inseparável, pelo amor, dedicação e compreensão.

Ao meu filho Guilherme e aos meus irmãos Jorge Luiz, Sheila, Shirlei e Mônica, pela amizade e apoio incondicional.

Aos meus cunhados Marli e Antonio Carlos Zambroni. Sem eles, este momento não teria acontecido.

Aos meus cunhados Sueli e José Gonçalves por todo apoio que sempre pude contar.

Ao amigo Prof. Dr. Pedro Paulo Balestrassi, pela ajuda e apoio em todos os momentos.

Ao irmão e amigo Paulo Henrique Campos, sempre solidário, positivo e incentivador.

Aos professores do IEPG, Prof. Dr. Carlos Henrique e Prof. Dr. João Batista Turrioni, pelo apoio nos momentos difíceis.

Ao Prof. Dr. Carlos Eduardo, coordenador do curso de pós-graduação em Engenharia de Produção, pela amizade e apoio durante todo o curso.

Aos amigos e colegas do IEPG que contribuíram com um gesto ou uma palavra amiga nos momentos difíceis e com isso me deram forças para eu chegar até aqui.

E ao CNPQ, pelo apoio financeiro através do sistema de bolsas.

Resumo

Garantir as características de qualidade de um produto é uma tarefa difícil, especialmente quando a relação entre os fatores e as múltiplas respostas correlacionadas não são totalmente conhecidas. Como a função de transferência das variáveis de resposta correlacionadas pode ser escrita em termos de escores de componentes principais, a variância ou incerteza contida nas respostas originais impede que o verdadeiro comportamento da função de regressão seja bem explicado. Mediante ao exposto, esta pesquisa apresenta um método elaborado para estimar a incerteza total ou a variância experimental, que afeta todas as variáveis de resposta, usando o inverso da incerteza multivariada como diagonal principal de uma matriz de pesos diagonal para ponderar os escores dos componentes principais que são utilizados como substitutos do conjunto de dados originais correlacionados. Além disso, considera-se como extensão dessa abordagem a análise fatorial com rotação Varimax e a ponderação dos escores fatoriais, como alternativa à regressão multivariada. O principal objetivo desta proposta é melhorar a explicação ($R^2_{adj.}$) e a previsão (R^2_{pred}) dos modelos de Componentes Principais, elevando o resultado percentual destas duas métricas ao maior valor possível. Assim que o melhor modelo seja escolhido, uma rotina de otimização baseada no Erro Quadrático Médio Multivariado (EQMM) é aplicada para determinar a solução ótima. Para confirmar a eficiência da proposta foi executada uma simulação utilizando-se como base de dados os experimentos realizados por Salgado Jr. (2010). Os resultados obtidos nesta simulação mostrou que o método matemático desenvolvido é adequado, uma vez que os valores da métrica $R^2_{adj.}$ sempre se deslocaram para patamares superiores, atingindo um percentual de explicação acima de 85%. Numa segunda ratificação da eficiência do método é usado um estudo de caso considerando-se as características de qualidade da rugosidade da superfície no torneamento do aço duro AISI 52100 obtidas com ferramentas de geometria alisadora (Wiper). Os fatores adotados em uma matriz de Arranjo Composto Central (CCD) são a velocidade de corte, o avanço da ferramenta e a profundidade de corte, para um conjunto de cinco métricas de rugosidade altamente correlacionadas (R_a , R_y , R_z , R_q e R_t). Os resultados mostram que a abordagem do EQMM aplicada à otimização do torneamento do aço duro AISI 52100 produz soluções muito perto de todos os alvos previamente estabelecidos. O melhor ponto de ótimo obtido para o modelo bivariado formado pelo conjunto $R_a R_q$, representado pelo Modelo A, é conseguido com $V_c = 216$ m / min, $F_n = 0,13$ mm / rev e $A_p = 0,22$ mm e para o Modelo B, que contempla as cinco respostas, $V_c = 219$ m / min, $F_n = 0,13$ mm / rev e $A_p = 0,22$ mm. Os resultados indicam que os diferentes métodos de modelagem: CP1 (sem peso e sem rotação), WCP1 (com peso e sem rotação), FCP1 (sem peso e com rotação) e WFCP1 (com peso e com rotação), conduzem, aproximadamente, às mesmas respostas previstas no ideal.

Palavras-chave: Mínimos Quadrados Ponderados (MQP), Erro Quadrático Médio Multivariado (EQMM), Metodologia de Superfície de Resposta (MSR), Análise de Componentes Principais (ACP) e Análise Fatorial (AF).

Abstract

Ensure the quality characteristics of a product is a hard task especially when the relationship among factors and the multiple correlated responses is unknown. As the transfer function of correlated response variables may be written in terms of principal component scores, the variance or uncertainty contained in the original responses prevents that the true behavior of the regression function will not be well explained. About this concern this thesis presents a model building strategy to estimate the total uncertainty (or experimental variance) that affects all response variables, using the inverse of multivariate uncertainty as the main diagonal of a diagonal matrix of weights for principal components scores used to replace the original correlated dataset. In addition, an extension of this approach considers the factor analysis with Varimax rotation and weighting for factor scores as alternatives to the multivariate regression. The main objective of this proposal is to improve the explanation of $R^2(\text{adj})$ and the prediction of ($R^2 \text{ pred.}$) of the models making their results as higher as possible. Since the best model is chosen, an optimization routine based on Multivariate Mean Square Error (MMSE) is applied to determine the optimal solution. To confirm the effectiveness of the proposal a simulation was performed using as database the experiments conducted by Salgado Jr. (2010). The results of this simulation showed that the mathematical method developed is adequate, since the value of $R^2(\text{adj})$ always moved to higher levels, reaching rates above 85% of explanation. In a second ratification of the effectiveness of the method a case study of quality characteristics of the surface roughness in the AISI 52100 hard turning obtained with Wiper geometry tools is used. The adopted factors in a CCD array are the Cutting speed, feed rate and depth of cut, for a set of five highly correlated surface roughness metrics (R_a , R_y , R_z , R_q and R_t). The results show that the MMSE approach applied in the optimization of the 52100 hard turning produces solutions very closer to all targets previously established. The best response with optimum obtained for the bivariate model formed by $R_a R_q$ is achieved at $V_c = 216 \text{ m / min}$, $F_n = 0.13 \text{ mm / rev}$ and $A_p = 0.22 \text{ mm}$ and for the set of five metrics is achieved at $V_c = 219 \text{ m / min}$, $F_n = 0.13 \text{ mm / rev}$ and $A_p = 0.22 \text{ mm}$. The results indicate that different modeling methods: PC1 (without weight and without rotation), WPC1(with weight and without rotation) FPC1 (without weight and with rotation) and WFPC1(with weight and with rotation) conduct approximately to the same predicted responses at optimum.

Keywords: Weighted Least Square (WLS), Multivariate Mean Square Error (MMSE), *Response Surface Methodology (RSM)*, *Principal Component Analysis (PCA)* and *Factor Analysis (FA)*.

Lista de Abreviaturas e Siglas

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
ACP	Análise de Componentes Principais ou <i>Principal Component Analysis (PCA)</i>
AF	Análise Fatorial
A _p	Profundidade de Corte
CCC	Arranjo Composto Circunscrito
CCD	Arranjo Composto Central ou <i>Box-Wilson Central Composite Design</i>
CCF	Arranjo de Face Centrada
CCI	Arranjo Composto Inscrito
CE	Região Central
CNC	Comando Numérico Computadorizado
CP	Componente Principal ou <i>Principal Component (PC)</i>
CV	Coefficiente de Variação
DOE	Metodologia de Projetos de Experimentos ou <i>Design of Experiments</i>
EQMM	Erro Quadrático Médio Multivariado ou <i>MMSE</i>
F _n	Avanço de corte
GUM	Guia para Expressão da Incerteza de Medição
LOF	Falta de ajuste ou <i>Lack of Fit</i>
MLPCA	Análise de Componentes Principais por Máxima Verossimilhança
MSR	Metodologia de Superfície de Respostas
MQP	Mínimos Quadrados Ponderados ou <i>Weighted Least Square (WLS)</i>
NBR	Norma Brasileira
OLS	Mínimos Quadrados Ordinários ou <i>Ordinary Least Square</i>
PC	Escore de Componente Principal
PC1	Primeiro Componente Principal (Escore)
R _a	Rugosidade Média Aritmética

R_q	Rugosidade Média Quadrática
R^2	Coefficiente de Determinação
R^2 (adj.)	Coefficiente de Determinação Ajustado
R^2 (Pred.)	Coefficiente de Determinação Previsto
V_c	Velocidade de Corte

Lista de Símbolos

α	Alfa
λ	Autovalor
μ	Média
ρ	Espaço experimental
Π	Produtório
Σ	Somatório
a_p	Profundidade de corte
f_n	Avanço da ferramenta
P	Posição de medição
R_a	Rugosidade média aritmética
R_q	Rugosidade média quadrática
R_t	Rugosidade total
R_y	Rugosidade máxima
R_z	Rugosidade média
s^2	Variância
T	Alvo
V_c	Velocidade de corte

Sumário

1. INTRODUÇÃO	01
1.1 Considerações iniciais	01
1.2 Objetivo	03
1.3 Justificativa	04
1.4 Limitações	04
1.5 Estrutura do trabalho	04
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	06
2.1 Planejamento e Análise de Experimentos (DOE)	06
2.2 Metodologia de Superfície de Resposta	08
2.3 Algoritmos de Estimção de Coeficientes: OLS e WLS	11
2.4 Análise de Componentes Principais	13
2.4.1 Análise de Fatores	17
2.5 Incerteza em Medições	21
2.6 Otimização Não Linear	24
2.7 Considerações finais do capítulo	27
3. ESTRATÉGIA DE PONDERAÇÃO MULTIVARIADA	28
3.1 Desenvolvimento da Proposta	28
3.2 Considerações finais do capítulo	31
4. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO	33
4.1 Base de Dados	33
4.2 Dados Simulados	40
4.3 Resultados e Discussão	42
4.4 Considerações finais do capítulo	49
5. ESTUDO DE CASO AISI 52100 – AÇO HRC	50

5.1 Processo de Torneamento	50
5.2 Máquinas, materiais, ferramentas e instrumento de medição	56
5.3 Arranjo Experimental	60
5.4 Análise de Correlação entre as Respostas	63
5.5 Análise de Componentes Principais	64
5.6 Análise Fatorial	65
5.7 Resultados e Discussão	67
5.8 Otimização	78
5.9 Experimentos de Confirmação	81
5.10 Considerações finais do capítulo	84
6. CONCLUSÕES	85
6.1 Sugestões para trabalhos futuros	86
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	88
8. ANEXOS	92

1. Introdução

1.1. Considerações iniciais

A presença de correlação exerce forte influência na construção de modelos de regressão causando instabilidade e provocando erros em seus coeficientes. Em outras palavras, as equações de regressão não são adequadas para representar as funções objetivo sem considerar a estrutura de variância-covariância (ou correlação) (MONTGOMERY, 2009 e BOX e HUNTER, 1973). Este aspecto da otimização multiobjetivo é explicado pela influência que a correlação exerce sobre as variáveis de resposta, pois de acordo com Caten (1995) a solução global não deve otimizar duas variáveis de resposta em detrimento de outra. Conforme apontado por outros pesquisadores, Chiao e Hamada (2001) e Hair *et al.* (2006) e Yuan *et al.* (2008), analisar as respostas individualmente pode levar a um conflito de ótimo, pois os níveis dos fatores que afetam positivamente uma resposta podem, por outro lado, afetar negativamente a outra.

Wang (2006) confirma que as correlações médias ou altas existentes entre as múltiplas respostas afetam significativamente a qualidade do produto e estas correlações devem ser consideradas quando os problemas de otimização de múltiplas respostas forem resolvidos. McFarland e Mahadevan (2008) afirmam que a forte correlação entre as respostas indica que as variáveis podem ser trabalhadas através de um conjunto reduzido de dados e a metodologia utilizada para redução de dimensionalidade é a Análise de Componentes Principais (ACP), que pode ser usada para explicar a maioria da variabilidade de um conjunto de variáveis correlacionadas.

Tong *et al.* (2005) utilizaram a ACP para simplificar o processo de otimização e resolver problemas de múltiplas respostas e concluíram que, com algumas modificações, isto é, quando se trabalha a ACP associada a uma outra ferramenta, o procedimento é válido. Andrews *et al.* (1996), num trabalho para explicar a relação entre a análise de componentes principais (ACP) e o método de regressão linear, empregaram outros sete métodos para avaliar como tratar os erros de medição. Foram utilizados os métodos: Mínimos quadrados ordinários (OLS), mínimos quadrados ponderados (WLS), método da variância efetiva EVM (do inglês, *Effective Variance Method*), regressão ponderada múltipla (MWR), análise de componentes principais não-ponderada UPCA (do inglês, *Unweighted Principal Component Analysis*) e duas outras formas de análise de componentes principais ponderada denominadas WPCA1 e WPCA2 (do inglês, *Weighted Principal Component Analysis*). O objetivo principal

do estudo foi explicar a relação entre a ACP e a regressão linear e, como objetivo secundário, mostrar que em alguns casos, como o modelo de Análise de Componentes Principais Ponderada (WACP), é possível obter resultados com menores erros e incertezas. O estudo deixou um alerta quanto à presença de erros nas medições que podem afetar a estrutura de dados e conseqüentemente os resultados. Porém, não foi mencionado sobre as possíveis formas de tratar estes dados para evitar que os erros de medição influenciem os componentes principais.

Wentzel e Lohanes (1998) aplicaram um procedimento baseado no método de Análise de Componentes Principais por Máxima Verossimilhança MLPCA (do inglês *Maximum Likelihood Principal Component Analysis*) para incluir a covariância do erro de medição na decomposição multivariada. O método é semelhante à ACP clássica, porém, considera a incerteza de medição no processo dando menor ênfase nas medições com grande variância. Bratchell (1989) empregou uma superfície de resposta de segunda ordem baseada na ACP para representar adequadamente o conjunto de respostas originais num pequeno número de variáveis latentes ou CP's. A abordagem de Bratchell não apresenta alternativas para os casos em que o maior componente principal não é capaz de explicar a maior parte da variância, bem como não indica como os limites de especificação e metas de cada resposta podem ser transformados para o plano de componentes principais. Apesar destas lacunas, o uso da ACP para superar a influência da correlação é muito extenso na área de usinagem, principalmente com arranjos de Taguchi (TZENG e CHEN, 2006 e DUBEY e YADAVA, 2008).

A ACP se tornou uma ferramenta indispensável para a análise multivariada em áreas como a análise exploratória de dados, modelagem, análise de mistura e calibração, mas a principal desvantagem ou inconsistência desta abordagem, é que torna-se implícito os pressupostos sobre os erros de medição os quais são muitas vezes desconsiderados. Isso corrompe a qualidade da informação prestada e pode levar a resultados equivocados (ANDREWS *et al.*, 1996).

Diversos trabalhos de Andrews e Wentzell (1997), Wentzell e Lohanes (1997), Wentzell *et al.* (1998), Martínez, Riu e Rius (2001) e Lahadelma *et al.* (2006) falam da influência dos erros de medição nos componentes principais. Utilizam diversos métodos e chegam a combiná-los na busca por resultados mais confiáveis. Porém, não foi encontrada em nenhum dos trabalhos pesquisados uma sugestão de como evitar que as incertezas contidas nas variáveis originais contaminem as Componentes Principais e as respostas.

A incerteza de medição é um problema que afeta a precisão dos resultados. Pérez (2002) afirma que as incertezas de medição podem afetar tanto as variáveis de resposta quanto as variáveis independentes. Ignorar estas incertezas tornam ineficientes os resultados de modelos obtidos experimentalmente.

Neste contexto, este estudo propõe um método para filtrar a incerteza total e utilizá-la como matriz de peso para ponderar os escores dos componentes principais. O principal objetivo desta proposta é melhorar a explicação dos modelos de regressão através da maximização de seus índices, $R^2(\text{adj})$ e $R^2(\text{pred.})$ dos modelos de Componentes Principais, usando o método dos Mínimos Quadrados Ponderados. Após a correção da incerteza, um método de otimização multi-objetivo, baseado no conceito do Erro Quadrático Médio Multivariado (EQMM), será utilizado para melhorar a solução e as características múltiplas correlacionadas combinando a Análise de Componentes Principais (ACP) e a Metodologia de Superfície de Resposta (MSR).

Para avaliar a boa adequação desta proposta foi realizada uma operação de torneamento do aço endurecido AISI 52100 utilizando-se ferramentas de geometria alisadora (Wiper) CNGA120408 S01525WH.

1.2. Objetivo Geral

Desenvolver um método para estimar a incerteza total ou, variância experimental, que afeta todas as variáveis de resposta, usando o inverso da incerteza multivariada como matriz de peso para ponderar os escores dos componentes principais que são utilizados como substitutos do conjunto original de dados correlacionados.

1.2.1. Objetivos específicos

- Elevar o índice de explicação do modelo maximizando os percentuais de R^2_{adj} e $R^2_{\text{pred.}}$ ao maior valor possível;
- Utilizar a Análise Fatorial (AF) com rotação Varimax para avaliar o incremento na explicação e predição das respostas do modelo;
- Avaliar como a ponderação e a rotação, bem como sua interação, podem influenciar na determinação dos coeficientes de regressão e a sua possível influência no deslocamento do ponto de ótimo.
- Analisar o comportamento do método proposto através de simulação de superfícies de resposta;

- Aplicar o método desenvolvido ao processo de acabamento superficial do aço AISI 52100, usinado com ferramenta de geometria alisadora (WIPER).

1.3. Justificativas

A consideração de que as incertezas de medição que afetam as variáveis originais também contaminam as componentes principais fazendo com que o comportamento da função objetivo não seja bem explicado, já é uma forte justificativa para o desenvolvimento desta abordagem. Entre outras, pode-se destacar:

- Compreensão da influência da estrutura de correlação nas variáveis de resposta que caso seja negligenciada pode levar a pontos de ótimo inapropriado.
- A necessidade do cálculo da incerteza total para construir a matriz de peso e ponderar os escores dos componentes principais;
- O desenvolvimento de um método com capacidade de identificar os parâmetros que atendam às múltiplas respostas sem gerar conflitos;
- A necessidade de se alcançar uma explicação satisfatória do modelo elevando-se os percentuais de R^2 ajustado e R^2 previsto ao maior valor possível;
- Avaliação das melhorias provocadas com a aplicação do método de otimização multi-objetivo, Erro Quadrático Médio Multivariado (EQMM).

1.4. Limitações

Por se tratar de uma dissertação de mestrado, esta pesquisa não tem a intenção de exaurir todas as questões sobre o assunto, pois demandaria tempo superior ao disponível para a elaboração, execução e finalização do trabalho. Sendo assim, as limitações desta pesquisa são:

- Não desenvolver softwares específicos para solução de problemas; apenas serão utilizados os softwares comerciais;
- Os resultados obtidos com a presente abordagem não podem ser extrapolados para diferentes materiais, ferramentas ou máquinas e são válidos apenas para a faixa de níveis adotados.

1.5. Estrutura do trabalho

A estrutura adotada para este trabalho pode ser resumida como se segue.

O capítulo 2 apresentará a revisão bibliográfica dos temas abordados nesta pesquisa, contemplando alguns trabalhos publicados no meio científico.

O capítulo 3 abordará a Estratégia de Ponderação Multivariada que diz respeito ao desenvolvimento do método.

O capítulo 4 abordará uma simulação utilizando como base de dados os experimentos realizados com aço de corte fácil 12L14.

O capítulo 5 apresentará o processo de torneamento, as variáveis de controle e de resposta e uma breve apresentação da máquina, ferramentas e instrumentos utilizados no desenvolvimento desta pesquisa. No que diz respeito à análise dos resultados dos experimentos realizados, esta análise contemplará três etapas: (1) modelagem das variáveis de resposta; (2) otimização do sistema utilizando o método considerado no trabalho e (3) experimento de confirmação do ponto de ótimo indicado pelo método EQMM.

O capítulo 6 apresentará as conclusões deste trabalho baseadas nos resultados obtidos e sugestões para trabalhos futuros.

2. Revisão Bibliográfica

A incerteza é um parâmetro associado ao resultado de uma medição que caracteriza a dispersão dos valores que poderiam ser razoavelmente atribuídos a um mensurando (GUM, 1996). Pérez (2002) alerta que tanto os parâmetros quanto as respostas são afetadas pelas incertezas que podem tornar a análise estatística ineficiente, se estes efeitos não forem considerados.

Segundo Andrews *et al.* (1996) a Análise de Componentes Principais é uma ferramenta amplamente, porém, esta ferramenta incorpora os erros de medição no conjunto de dados originais, levando à resultados enganosos.

Diante dessas advertências, as incertezas em medições não podem ser ignoradas. Para tanto, Andrews *et al.* (1996) e Wentzel e Lohanes (1998) propuseram métodos e técnicas para minimizar ou incorporar os erros de medições que, segundo Pérez (2002), são muitas vezes ignorados por pesquisadores que não consideram as incertezas de medição.

As incertezas em medições não podem ser negligenciadas, muito pelo contrário, devem ser corrigidas ou incorporadas ao procedimento de ajuste do modelo. Com o objetivo de fornecer os valores de medições que representassem a variabilidade do processo de fabricação, Pérez (2002) incorporou a incerteza na avaliação da rugosidade, considerando: a variabilidade associada ao instrumento de medição, a variabilidade das medidas realizadas em uma única peça e a variabilidade associada ao próprio processo de fabricação (por meio da variabilidade existente entre as diferentes peças).

2.1. Planejamento e Análise de Experimentos (DOE)

Projeto de Experimentos, ou simplesmente DOE (do inglês, *Design of Experiments*), é uma metodologia relativamente antiga, desenvolvida por Sir Ronald A. Fisher, entre 1920 e 1930, sendo posteriormente aperfeiçoada por outros importantes pesquisadores como Box, Hunter e Taguchi, dentre outros.

O DOE é uma metodologia de otimização estatística que busca encontrar, através da análise simultânea de vários fatores, os melhores níveis para um conjunto de parâmetros que exerçam influência sobre certo processo. Montgomery (2009) diz que experimento é um teste, ou uma série de testes, no qual são feitas mudanças propositalmente nas variáveis de entrada de

um processo, de modo que se possa observar e identificar mudanças correspondentes na resposta de saída. Os elementos básicos que compõe esta metodologia são:

Fatores controlados: variáveis que podem ser modificadas durante os experimentos para determinar a influência nas saídas.

Fatores não controlados: variáveis que deveriam permanecer constantes durante os experimentos, mas de alguma forma variam alterando as saídas.

Respostas: saídas que deverão ser otimizadas.

Modelo: consiste na equação que relaciona as respostas com as variáveis do processo.

A Figura 2.1 mostra um esboço dos elementos de um processo.

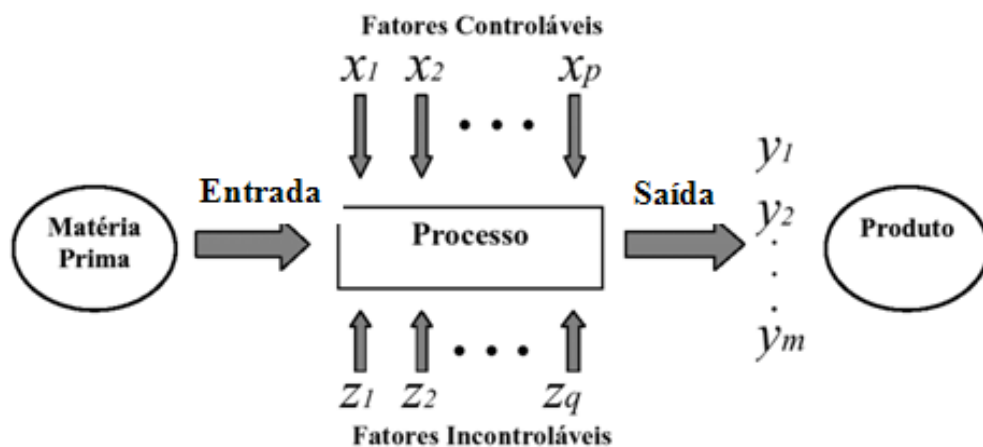


Figura 2.1 – Fatores do processo

A evolução das técnicas de Planejamento e Análise de Experimentos tem sido amplamente aproveitada pelas empresas. Segundo Bryman (1989) a pesquisa experimental adquiriu uma considerável importância na pesquisa organizacional devido, principalmente, a dois fatos: o primeiro deles diz respeito à força desse método de investigação em permitir que o pesquisador faça fortes declarações de causalidade; o segundo, diz respeito à facilidade encontrada pelo pesquisador, em estabelecer relações de causa e efeito, fazendo com que o experimento seja considerado um modelo de delineamento de pesquisa.

Segundo Montgomery (2009) os objetivos do experimento podem incluir:

1. Determinação de quais variáveis são mais influentes na resposta y .

2. Determinação do valor a ser atribuído aos x 's influentes de modo que y esteja perto da exigência nominal.
3. Determinação do valor a ser atribuído aos x 's influentes de modo que a variabilidade em y seja pequena.
4. Determinação do valor a ser atribuído aos x 's influentes de modo que os efeitos das variáveis não-controláveis sejam minimizados.

O arranjo experimental mais comum é o fatorial completo, para o qual o número de experimentos é igual ao número de níveis experimentais elevado ao número de fatores. Neste tipo de procedimento, todas as combinações podem ser testadas e todas as interações, avaliadas.

Este tipo de arranjo cobre todo o espaço experimental. Porém, Montgomery (2009) alerta que uma quantidade muito grande de fatores pode tornar o processo de experimentação inviável, pois à medida que o número de fatores cresce linearmente, o número de experimentos para esses fatores cresce exponencialmente. Como alternativa, para reduzir o número de experimentos, utiliza-se o método de Taguchi para filtrar as variáveis, de forma a estabelecer quais podem ser desconsideradas do processo sem que ocorram interferências na resposta ou o Plackett-Burman que é um arranjo fracionário para avaliar apenas os efeitos principais.

2.2. Metodologia de Superfície de Resposta

De acordo com Box e Draper (1987), Montgomery e Runger (2003) e Montgomery (2009), a Metodologia de Superfície de Resposta (*RSM – Response Surface Methodology*) é uma coleção de técnicas matemáticas e estatísticas que são utilizadas para modelar e analisar problemas nos quais a resposta de interesse é influenciada por muitas variáveis e o objetivo é a otimização desta resposta. Por exemplo, suponha que se deseje encontrar quais os níveis de temperatura (x_1) e pressão (x_2) que maximizem o rendimento (y) de um processo. O processo de rendimento (y) é uma função dos níveis de temperatura e pressão, como segue:

$$Y = f(x_1, x_2) + \varepsilon \quad (2.1)$$

onde ε representa o ruído ou erro observado na resposta y . A superfície representada pela equação $E(Y) = f(X_1, X_2) = \eta$, então a superfície representada por $\eta = f(X_1, X_2)$ é chamada de Superfície de Resposta, conforme representado pela Figura 2.2.

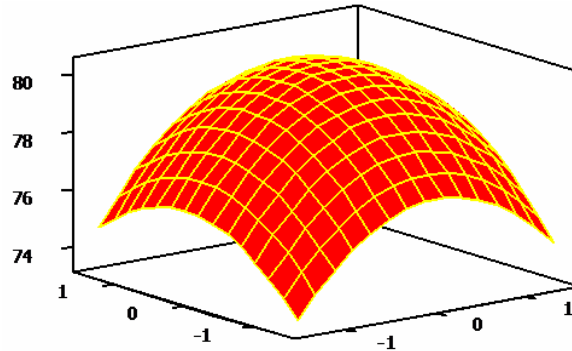


Figura 2.2 – Superfície de resposta

Na maioria dos problemas de superfície de resposta, a relação entre a resposta e as variáveis independentes é desconhecida. Assim, o primeiro passo dentro da metodologia RSM é encontrar uma aproximação adequada para o verdadeiro relacionamento entre y e o conjunto de variáveis. Geralmente, um polinômio de baixa ordem é empregado em alguma região das variáveis independentes. Se a resposta é bem modelada por uma função linear das variáveis independentes, então a próxima função é um modelo de primeira ordem.

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon \quad (2.2)$$

De acordo com Box e Draper (1987), supondo que a resposta esperada $E(Y)$ seja função de K variáveis predictoras x_1, x_2, \dots, x_k , codificadas de tal maneira que o centro da região de interesse é a origem $(0, 0, \dots, 0)$, o relacionamento entre y e as variáveis predictoras pode ser expresso segundo uma expansão em Série de Taylor, tal que:

$$E = (Y) + \eta = \eta_0 + \sum_{i=1}^k \left[\frac{\partial \eta}{\partial x_i} \right]_0 X_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \left[\frac{\partial^2 \eta}{\partial x_i \partial x_j} \right] + \dots \quad (2.3)$$

onde o subscrito zero indica a avaliação na origem.

Se os termos de alta ordem forem ignorados, a expansão produzirá:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i \quad (2.4)$$

Se, em adição, forem mantidos os termos de segunda ordem, a aproximação se tornará:

$$\gamma = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (2.5)$$

Assim, a função aproximada de um *modelo de primeira ordem* pode ser representada:

$$\gamma = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon \quad (2.6)$$

Se houver curvatura no processo, então um polinômio de ordem mais alta deve ser utilizado, tal como um *modelo de segunda ordem*, por exemplo.

$$\gamma = \beta_0 + \sum_{i=1}^{\kappa} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{\kappa} \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (2.7)$$

Segundo Box e Draper (1987) quase todos os problemas de superfície de resposta utilizam um desses dois modelos, ou, em alguns casos, ambos. Contudo, é improvável que um modelo polinomial seja uma aproximação razoável do modelo real em todo o espaço experimental coberto pelas variáveis independentes, mas, pelo menos para uma determinada região, ele funcionará muito bem (MONTGOMERY, 2009).

Os parâmetros (β) do modelo polinomial podem ser estimados utilizando-se o método dos Mínimos Quadrados Ordinários, representados na forma matricial $\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$.

Para casos onde a variância não é constante, pode-se utilizar o método dos mínimos quadrados ponderados (*Weighted Least Squares – WLS*) no qual a diagonal principal de uma matriz de ponderação W pode ser representada pelo inverso do quadrado dos resíduos do modelo ajustado, pelo inverso da incerteza de medição ou pela variância calculada com experimentos replicados (CHO e PARK, 2005).

Geralmente, quando se está em um ponto da superfície de resposta que está distante do ponto de ótimo, a curvatura do sistema é bem pequena, de onde decorre que um modelo de primeira ordem seja adequado para modelar a resposta. O objetivo experimental é, então, caminhar rápida e eficazmente em direção às proximidades da região de ótimo. Uma vez que tal região é encontrada, um modelo mais elaborado deve ser utilizado, tal como o de segunda ordem. Neste estágio, deve-se localizar o ponto de ótimo (PAIVA, 2006).

A Metodologia de Superfície de Respostas tem como finalidade principal determinar as condições operacionais ótimas para o sistema ou determinar uma região do espaço fatorial, em que as especificações operacionais sejam satisfeitas. O termo “ótimo” na metodologia é empregado em sentido especial. Os procedimentos de “subida” da metodologia garantem convergência para somente um ótimo local (PAIVA, 2008). A validação da presença da curvatura no modelo é baseada na análise dos pontos centrais para os fatores codificados.

Deve-se considerar pelo menos tantos pontos centrais quanto forem os k fatores do experimento.

Montgomery (2009) cita alguns arranjos utilizados para a aplicação da superfície de resposta, tais como o arranjo composto central, o arranjo de Box-Behnken, o equiradial, o pequeno arranjo composto e o híbrido. O arranjo composto central (Box-Wilson *Central Composite Design*, ou simplesmente, CCD) é um arranjo amplamente utilizado na prática para ajustar um modelo de superfície de resposta de segunda ordem devido à sua relativa eficiência com respeito ao número de corridas requeridas.

O CCD é uma matriz formada por três conjuntos distintos de elementos experimentais: um conjunto de pontos fatoriais seguindo um arranjo fatorial completo ou fracionado; um conjunto de pontos centrais e, adicionalmente, um conjunto de níveis extras denominados pontos axiais. O número de pontos axiais em um CCD é igual ao dobro do número de fatores e representam seus valores extremos. A distância entre o centro do arranjo (pontos centrais) e um ponto fatorial axial, comumente representada por ρ , depende de certas propriedades desejadas para o experimento e do número de fatores envolvidos (MONTGOMERY, 2009). Em função da localização dos pontos axiais, os arranjos podem ser classificados como circunscritos (CCC), inscritos (CCI) ou de face centrada (CCF). A Figura 2.3 representa as diferentes classificações de um CCD.

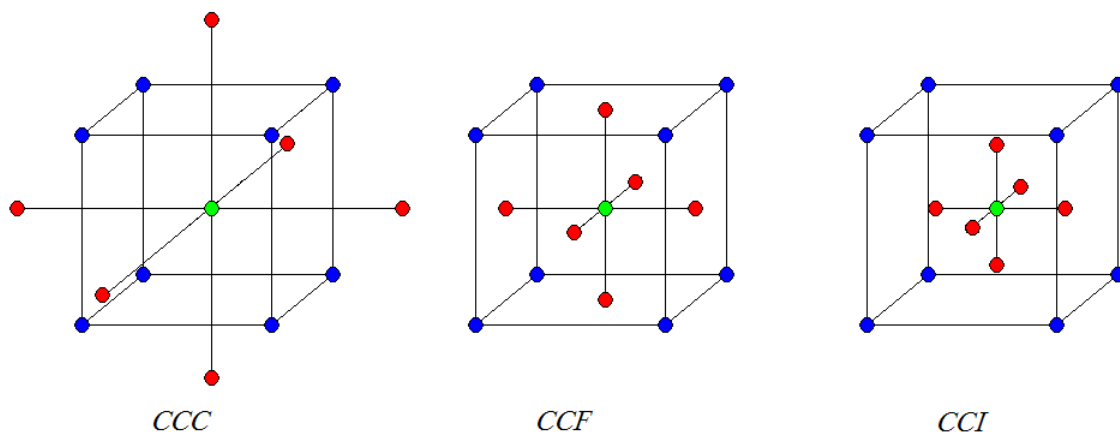


Figura 2.3 – Classificação do CCD

Geralmente, um CCD com k fatores requer 2^k corridas fatoriais, $2k$ corridas axiais e, no mínimo, um ponto central, sendo mais comum a utilização de cinco pontos centrais. A ortogonalidade do arranjo é requisito para a avaliação de quais efeitos (linear, quadrático ou de interação) são significativos. Isso significa que os efeitos de diferentes variáveis podem ser

estimados de maneira independente. Um CCD rotacionável é aproximadamente ortogonal se forem adotados em torno de cinco pontos centrais. Dessa forma, pode-se esperar uma boa estimativa do erro experimental. Rotacionalidade refere-se à variância da resposta predita se manter constante para qualquer ponto experimental ao longo da circunferência de raio (ρ). Segundo Box e Drapper (1987):

$$\rho = (\text{número de experimentos})^{1/4} = (2^k)^{1/4} \quad (2.8)$$

O CCD ajusta-se, quando necessário, em um modelo polinomial de segunda ordem (MONTGOMERY, 2009). Este modelo é adequado, uma vez que muitos processos podem ser aproximados por uma expansão em série de Taylor, truncada em um termo quadrático.

2.3. Algoritmos de Estimação de Coeficientes: OLS e WLS

De acordo com Myers *et al.* (2002), o método dos Mínimos Quadrados Ordinários (*Ordinary Least Squares* – OLS) é tipicamente usado para estimar os coeficientes de regressão num modelo de regressão linear múltipla.

Para estimar os parâmetros (β) do modelo polinomial, Paiva (2006) aconselha a utilização do método OLS, que em forma matricial, pode ser representado como:

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} \quad (2.9)$$

sendo \mathbf{X} a matriz de fatores codificados e \mathbf{Y} a resposta.

Quando os erros ϵ não são correlacionados, mas têm variâncias desiguais a matriz de covariância do ϵ é

$$\sigma^2 \mathbf{V} = \sigma^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{w_1} & & & 0 \\ & \frac{1}{w_1} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \frac{1}{w_n} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

Então, o procedimento de estimação é geralmente chamado de mínimos quadrados ponderados. Seja $\mathbf{W} = \mathbf{V}^{-1}$. Uma vez que \mathbf{V} é uma matriz diagonal, \mathbf{W} também é diagonal com elementos diagonais ou pesos w_1, w_2, \dots, w_n . A equação dos Mínimos Quadrados Ponderados normais pode ser escrita como:

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{Y} \quad (2.11)$$

Neste algoritmo, as observações com grandes variâncias terão um peso menor do que as observações com pequenas variâncias.

Para usar os mínimos quadrados ponderados de forma prática, é preciso conhecer os pesos w_1, w_2, \dots, w_n . As vezes, o conhecimento prévio, a experiência ou as informações baseadas em considerações teóricas básicas podem ser usadas para determinar os pesos. Em outras situações pode-se descobrir empiricamente que a variabilidade na resposta é uma função de um ou mais regressores, e assim, o modelo pode ser adequado para prever a variância de cada observação e, portanto, determinar os pesos. Em alguns casos pode-se ter que estimar o peso, realizar as análises, re-estimar um novo conjunto de pesos com base nesses resultados e, em seguida realizar a análise novamente (MYERS *et al.*, 2002).

Os métodos dos Mínimos Quadrados Ordinários (OLS) e Mínimos Quadrados Ponderados (WLS) são bastante difundidos em diversos trabalhos científicos. Cho e Park (2005) testaram os dois modelos no desenvolvimento da metodologia de Projetos Robustos e concluíram que o método dos Mínimos Quadrados Ordinários pode não ser uma ferramenta eficaz para a obtenção de funções de respostas para média e variância. Eles indicam o uso do método dos Mínimos Quadrados Ponderados, e afirmam que este é mais eficaz que o método OLS para maximizar a eficiência da estimativa dos parâmetros.

2.4. Análise de Componentes Principais

A Análise de Componentes Principais (ACP), segundo Wang e Du (1999), é uma das técnicas mais utilizadas para reduzir dimensionalidade e, de acordo com Johnson e Wichern (2007) também é utilizada para interpretar um conjunto original de dados. Esta técnica estatística também é capaz de reter nas primeiras componentes principais a maioria da informação, resultando em uma perda mínima de informação (MOITA NETO e MOITA, 1998). Supondo-se que \mathcal{Y} é correlacionado com valores escritos em termos de um vetor aleatório $Y^T = [Y_1, Y_2, \dots, Y_p]$ e assumindo que Σ é a matriz de variância-covariância associada a este vetor, então Σ pode ser fatorado em pares de autovalores-autovetores $(\lambda_1, e_1), \dots, (\lambda_p, e_p)$, onde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$, tal que a i -ésima combinação linear não correlacionada pode ser escrita como $PC_i = e_i^T Y = e_{1i} Y_1 + e_{2i} Y_2 + \dots + e_{pi} Y_p$ com $i = 1, 2, \dots, p$. O i -ésimo componente principal pode ser obtido com a maximização desta combinação linear

(JOHNSON e WICHERN, 2007). A quantidade de informação aglutinada nos primeiros eixos da CP é bastante significativa. A interpretação geométrica desses eixos é mostrada na figura 2.4.

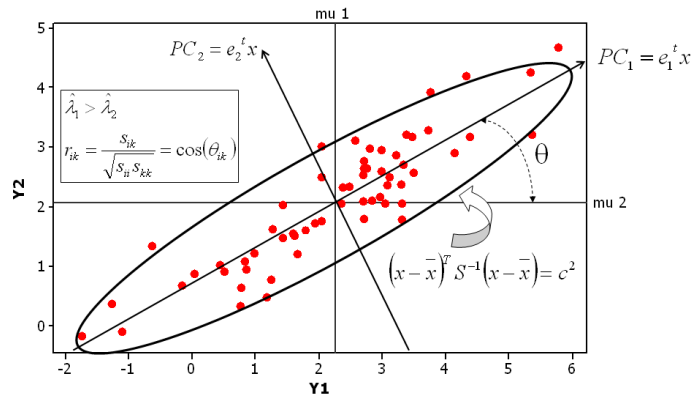


Figura 2.4- Interpretação geométrica dos componentes principais.

Geometricamente, as variáveis das componentes principais CP_1 e CP_2 são os eixos do novo sistema de coordenadas obtido pela rotação do sistema original. Os novos eixos representam as direções de variabilidade máxima. Na Figura 2.5 há duas variáveis originais, x_1 e x_2 , e duas componentes principais CP_1 e CP_2 . A primeira componente principal, CP_1 , responde pela maior parte da variabilidade das duas variáveis originais.

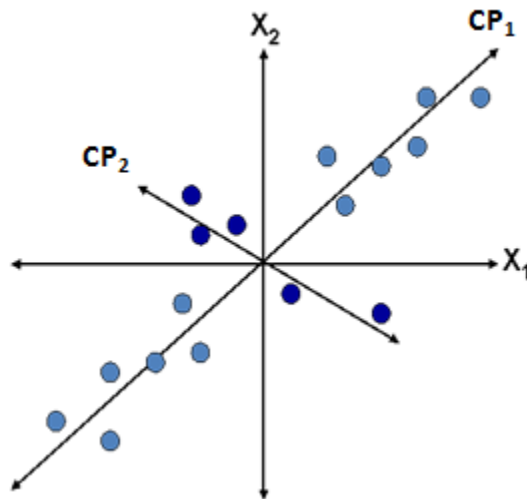


Figura 2.5– Representação gráfica das variáveis originais e as componentes principais - Fonte: Montgomery (2004)

Na Figura 2.6, são ilustradas três variáveis originais do processo. A maior parte da variabilidade ou movimento dessas três variáveis está em um plano, de modo que foram usadas apenas duas componentes principais para descrevê-las. Nesta figura, novamente CP_1 é responsável pela maior parte da variabilidade, mas uma quantidade não trivial é também

devida a segunda componente principal CP_2 . Este é, na verdade, o principal objetivo dos componentes principais: achar o novo conjunto de direções ortogonais que definem a variabilidade máxima dos dados originais, que espera-se, levará a uma descrição do processo requerendo consideravelmente menos variáveis do que as p variáveis originais (MONTGOMERY 2004).

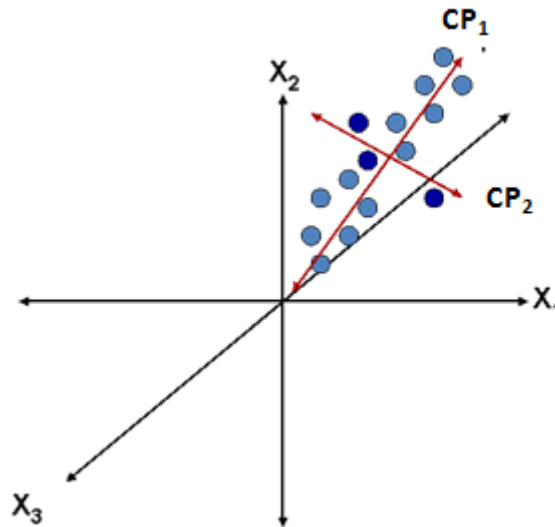


Figura 2.6 – Representação das variáveis do processo - Fonte: Montgomery (2004)

De uma forma geral, afirmam Moita Neto e Moita (1998), os componentes principais k podem substituir as p variáveis originais, em um conjunto menor de dados, pois, é comum obter em apenas 2 ou 3 das primeiras componentes principais mais que 90% das informações necessárias sem que haja prejuízo para o estudo. Isto quer dizer que existe quase tanta informação em k componentes principais que nas p variáveis originais.

Os métodos mais utilizados para estimar o número de componentes principais significantes, são aqueles baseados nos critérios de Kaiser (JOHNSON e WICHERN, 2007). De acordo com esses critérios, o autovalor do componente principal deve ser maior que um para representar o conjunto original. Além disso, a variância acumulada explicada pelos componentes principais deve ser superior a 80%. Estes critérios são adequados quando utilizados com uma matriz de correlação. Caso contrário, a matriz de covariância somente poderá ser utilizada para um conjunto original de respostas escritas em alguma escala.

Geralmente, os parâmetros populacionais de variância-covariância Σ e de correlação ρ , são desconhecidos. Neste caso, a matriz de correlação da amostra R_{ij} e a matriz de variância-covariância da amostra S_{ij} podem ser usadas (JOHNSON e WICHERN, 2007). Se

as variáveis estudadas são consideradas no mesmo sistema de unidades ou se elas são previamente padronizadas, S_{ij} é a escolha mais adequada. Caso contrário, R_{ij} deve ser empregado na fatoração. A matriz de variância-covariância da amostra pode ser escrita como segue:

$$S_{ij} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix}, \text{ com } s_{ii} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2 \quad s_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_i - \bar{y}_i)(y_j - \bar{y}_j) \quad (2.12)$$

Assim, os elementos da matriz de correlação da amostra r_{ij} podem ser obtidos conforme:

$$r_{(y_i, y_j)} = \frac{\text{Cov}(y_i, y_j)}{\sqrt{\text{Var}(y_i) \times \text{Var}(y_j)}} = \frac{\hat{e}_{ij} \sqrt{\hat{\lambda}_i}}{\sqrt{s_{ii}}} = \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii} \times s_{jj}}} \quad i, j = 1, 2, \dots, p \quad (2.13)$$

Segundo Johnson e Wichern (2007) em termos práticos o CP é uma combinação linear não correlacionada, expresso em termos de uma matriz de escores, que pode ser representada tal como a expressão (2.14).

$$CP_k = \mathbf{Z}^T \mathbf{e} = \begin{bmatrix} \left(\frac{x_{11} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{21} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} \right) & \cdots & \left(\frac{x_{p1} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} \right) \\ \left(\frac{x_{12} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{22} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} \right) & \cdots & \left(\frac{x_{p2} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} \right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{x_{1n} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{2n} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} \right) & \cdots & \left(\frac{x_{pn} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} \right) \end{bmatrix}^T \times \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & \cdots & e_{1p} \\ e_{21} & e_{22} & \cdots & e_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{p1} & e_{p2} & \cdots & e_{pp} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

A análise de componentes principais serve como um passo intermediário na investigação e análise dos dados (JOHNSON e WICHERN, 2007). Esta técnica, segundo Moita Neto e Moita (1998), também pode ser usada para julgar a importância das próprias variáveis originais escolhidas, ou seja, as variáveis originais com maior peso (*loadings*) na combinação linear dos primeiros componentes principais são as mais importantes do ponto de vista estatístico.

Segundo Paiva *et al.* (2007) pode-se usar a análise de componentes principais de forma combinada com outras metodologias para se otimizar múltiplas respostas correlacionadas. Num processo de torneamento do aço AISI 52100 foi aplicado um modelo híbrido combinando a análise de componentes principais com a metodologia de superfície de

resposta. Os resultados mostraram a compatibilidade da teoria com a prática, pois conseguiram simultaneamente maximizar a taxa de remoção de material, minimizar os tempos de corte e os custos, enquanto mantinham a qualidade da rugosidade desejada.

Bratchell (1989) utilizou a análise de componentes principais na modelagem de superfície de resposta multivariada e verificou que o método traz luz para solução. Também recomendou a utilização de métodos de rotação das componentes principais para melhorar a explicação dos modelos.

Wang e Du (1999) afirmam que este método é particularmente útil na análise de grandes conjuntos de dados correlacionados. Ribeiro *et al.* (2010) afirmam que uma vez que a correlação entre as múltiplas respostas é detectada, o uso da Análise de Componentes Principais pode ser recomendado e a resposta Y pode ser substituída pelos escores dos primeiros componentes principais.

Yacoub e MacGregor (2004) utilizaram a Análise de Componentes Principais para otimizar um processo químico com sete variáveis de entrada e dez variáveis de resposta altamente correlacionadas. Após a aplicação da ACP, verificou-se que as três primeiras componentes principais armazenavam informações suficientes para representar o conjunto original de dados.

2.4.1. Análise de Fatores

A análise de fatores é uma técnica estatística multivariada. É também uma ferramenta bastante útil e poderosa que atua efetivamente na extração de informações de grandes bases de dados e mantém o sentido de grandes coleções de dados inter-relacionados (HAIR *et al.*, 2006). O principal propósito da análise fatorial é descrever, sempre que possível, as relações de covariâncias entre muitas variáveis em termos de algumas bases subjacentes, mas não observáveis, chamadas de fatores.

Ainda, segundo Hair *et al.* (2006), em termos gerais, a análise fatorial aborda o problema de analisar a estrutura das inter-relações (correlações) entre um grande número de variáveis, definindo um conjunto de dimensões latentes comuns, chamadas de fatores. Uma vez que as dimensões e a explicação de cada variável estejam determinadas, os dois principais usos da análise fatorial – resumo e redução de dados – podem ser conseguidos.

A análise fatorial, de acordo com Johnson e Wichern (2007), pode ser considerada uma extensão da análise de componentes principais. Ambas podem ser vistas como tentativas de aproximar a matriz de covariância Σ . No entanto, a aproximação baseada no modelo de

análise de fatorial é mais elaborada. A principal questão na análise fatorial é se os dados são consistentes com uma estrutura pré-estabelecida. O vetor aleatório \mathbf{X} observável, com p componentes, tem média μ e matriz de covariância Σ . O modelo solicita que o fator \mathbf{X} seja linearmente dependente de algumas variáveis aleatórias não-observáveis, F_1, F_2, \dots, F_m , chamadas de fatores comuns, e p fontes adicionais de variação $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_p$, chamados erros ou, às vezes, fatores específicos. Em particular, o modelo de análise de fatorial é:

$$\begin{aligned} X_1 - \mu_1 &= \ell_{11} F_1 + \ell_{12} F_2 + \dots + \ell_{1m} F_m + \varepsilon_1 \\ X_2 - \mu_2 &= \ell_{21} F_1 + \ell_{22} F_2 + \dots + \ell_{2m} F_m + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ X_p - \mu_p &= \ell_{p1} F_1 + \ell_{p2} F_2 + \dots + \ell_{pm} F_m + \varepsilon_p \end{aligned} \quad (2.15)$$

ou em notação matricial:

$$\underset{(p \times 1)}{\mathbf{X}} = \underset{(p \times 1)}{\boldsymbol{\mu}} + \underset{(p \times m)}{\mathbf{L}} \underset{(m \times 1)}{\mathbf{F}} + \underset{(p \times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (2.16)$$

O coeficiente ℓ_{ij} é chamado de carregamento da i -ésima variável sobre o j -ésimo fator, então a matriz \mathbf{L} é a matriz de carregamento do fator. Nota-se que o i -ésimo fator específico ε_i está associado apenas com a i -ésima resposta X_i . Os p desvios $X_1 - \mu_1, X_2 - \mu_2, \dots, X_p - \mu_p$, são expressos em termos de $p + m$ variáveis aleatórias $F_1, F_2, \dots, F_m, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_p$ que não são observáveis. Isto distingue o modelo de fatores da equação (2.16) do modelo de regressão multivariada na equação (2.17), no qual as variáveis independentes, cuja posição é ocupada por \mathbf{F} na equação (2.16) podem ser observadas. O modelo de regressão linear multivariada é:

$$\underset{(n \times m)}{\mathbf{Y}} = \underset{(n \times (r+1))}{\mathbf{Z}} \underset{((r+1) \times m)}{\boldsymbol{\beta}} + \underset{(n \times m)}{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (2.17)$$

com

$$E(\varepsilon_i) = 0 \text{ e } \text{Cov}(\varepsilon_{(i)}, \varepsilon_{(k)}) = \sigma_{ik} \mathbf{I} \quad i, k = 1, 2, \dots, m$$

no qual r é o número de variáveis independentes no modelo de regressão.

As m observações sobre o j -ésimo ensaio tem matriz de covariância $\Sigma = \{\sigma_{ik}\}$, mas as observações de diferentes experimentos não são correlacionadas. Aqui β e σ_{ik} são parâmetros desconhecidos; a matriz do projeto \mathbf{Z} tem j -ésima linha $[Z_{j0}, Z_{j1}, \dots, Z_{jr}]$.

Com tantas quantidades inobserváveis, uma verificação direta do modelo fatorial de observações em X_1, X_2, \dots, X_p não traz solução. No entanto, com algumas suposições

adicionais sobre os vetores aleatórios \mathbf{F} e $\boldsymbol{\varepsilon}$, o modelo na equação (2.16) implica certas relações de covariância, que podem ser verificadas.

Assumindo que:

$$E(\mathbf{F}) = \mathbf{0}_{(m \times 1)}, \text{Cov}(\mathbf{F}) = E[\mathbf{F}\mathbf{F}'] = \mathbf{I}_{(m \times m)} \quad (2.18)$$

$$E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}_{(p \times 1)}, \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}) = E[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}'] = \boldsymbol{\Psi}_{(p \times p)} = \begin{bmatrix} \psi_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \psi_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \psi_p \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

e que \mathbf{F} e $\boldsymbol{\varepsilon}$ são independentes, então $\text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{F}) = E(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{F}') = \mathbf{0}_{(p \times m)}$

Estes pressupostos e a relação na equação (2.16), constituem o modelo de fatores ortogonais, onde,

μ_i = média da variável i

ε_i = i -ésimo fator específico

F_j = j -ésimo fator comum

L_{ij} = carga da i -ésima variável no j -ésimo fator

Os fatores aleatórios não observáveis \mathbf{F} e $\boldsymbol{\varepsilon}$ satisfazem as seguintes condições :

\mathbf{F} e $\boldsymbol{\varepsilon}$ são independentes

$E(\mathbf{F}) = \mathbf{0}$, $\text{Cov}(\mathbf{F}) = \mathbf{I}$

$E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$, $\text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\Psi}$, onde $\boldsymbol{\Psi}$ é uma matriz diagonal

Todos os fatores de carregamentos obtidos a partir do carregamento inicial por uma transformação ortogonal têm a mesma capacidade de reproduzir a matriz de covariância (ou correlação). A partir da álgebra matricial, sabe-se que uma transformação ortogonal corresponde a uma rotação rígida dos eixos das coordenadas. Por este motivo, uma transformação ortogonal do carregamento fatorial, bem como a transformação implícita dos fatores, é chamada de rotação fatorial (JOHNSON e WICHERN, 2007).

Hair *et al.* (2006) destaca que a rotação fatorial é uma ferramenta muito importante na interpretação dos fatores. Segundo Paes e Santos (2009), a rotação de fatorial é uma técnica para girar os eixos de referência dos fatores, em torno da origem, até alcançar uma posição ideal, apresentando uma perspectiva diferente.

De acordo com Hair *et al.* (2006) o caso mais simples de rotação é uma rotação ortogonal, que na prática, assim como todos os métodos de rotação, o objetivo é simplificar as

linhas e colunas da matriz fatorial para facilitar a interpretação. Por simplificação das linhas entende-se tornar o máximo de valores em cada linha tão próximos de zero quanto possível, isto é, maximizar a carga de uma variável em um único fator e, por simplificação das colunas, significa tornar o máximo de valores em cada coluna tão próximos de zero quanto possível, ou seja, tornar o número de cargas “elevadas” o menor possível.

Há quatro métodos para girar ortogonalmente as cargas fatoriais iniciais encontradas por qualquer um dos componentes principais ou extração de máxima verossimilhança: varimax, quartimax, equimax e orthomax (JOHNSON e WICHERN, 2007).

O Varimax é um método de rotação ortogonal e pretende que, para cada componente principal, existam apenas alguns pesos significativos e todos os outros sejam próximos de zero, isto é, o objetivo é maximizar a variação entre os pesos de cada componente principal, daí o nome Varimax. Este critério se concentra na simplificação das colunas da matriz fatorial (HAIR *et al.*, 2006).

O Quartimax é também um método de rotação ortogonal e pretende simplificar as linhas de uma matriz de pesos, isto é, o seu objetivo é tornar os pesos, de cada variável, elevados para um nº reduzido de componentes e próximos de zero para todas as restantes componentes;

O Equimax é outro método de rotação ortogonal, que pretende ser uma solução de compromisso entre os dois métodos anteriores. Em vez de se concentrar nas linhas ou nas colunas da matriz de pesos, o seu objetivo é simplificar simultaneamente linhas e colunas.

O orthomax é o quarto método de rotação ortogonal, que maximiza um critério com base na variação das cargas.

Depois de efetuada a rotação, torna-se mais simples identificar e interpretar cada componente principal (fator) a partir dos pesos das variáveis que a compõem. Quanto mais próximo de 1 (um) estiver esse peso, mais forte é a associação entre a dita variável e o componente, enquanto que um peso da variável próximo de 0 (zero) permite concluir que pouco contribui para a formação do fator.

Johnson e Wichern (2007) sugerem a utilização do método de rotação Varimax, pois além de preservar a integridade das informações, após a aplicação do método, ele também é capaz de destacar os grupos de coeficientes significativos dos grupos desprezíveis em qualquer coluna da matriz.

Hair *et al.* (2006) informam que o método Varimax é um dos métodos mais comuns de rotação ortogonal, porque o pesquisador simplesmente utiliza a técnica rotacional dada pelo programa de computador e a maioria dos programas tem como padrão de rotação o Varimax. Apesar desta situação, não há razão analítica para favorecer um método rotacional sobre o outro.

2.5. Incerteza em Medições

Incerteza é a falta de conhecimento *a priori* referente ao resultado de uma ação ou ao efeito de uma condição. É um termo utilizado em um vasto número de campos, incluindo estatística, economia, seguros, engenharia e ciências. Ela aplica-se à dificuldade em prever eventos futuros, ou a eventuais erros em medidas físicas já realizadas. A incerteza de uma medida exprime-se por uma faixa de valores que estão provavelmente perto do valor real.

De acordo com o Guia para a Expressão da Incerteza de Medição (GUM, 1996) a palavra incerteza significa dúvida, e, portanto, em seu sentido mais amplo "Incerteza de Medição" significa dúvida sobre a validade do resultado de uma medição, que caracteriza a dispersão dos valores que poderiam razoavelmente ser atribuídos a um mensurando.

Segundo o Guia para a Expressão da Incerteza de Medição existem muitas fontes possíveis de incerteza em uma medição, o que faz do resultado, após a correção dos efeitos sistemáticos reconhecidos, ainda tão somente uma estimativa do valor do mensurado por causa da incerteza proveniente dos efeitos aleatórios e da correção imperfeita do resultado no que diz respeito aos efeitos sistemáticos.

Na prática, de acordo com o Guia, existem muitas fontes possíveis de incerteza em uma medição, incluindo:

- a) definição incompleta do mensurado;
- b) realização imperfeita da definição do mensurado;
- c) amostragem não representativa – a amostra medida pode não representar o mensurado;
- d) conhecimento inadequado dos efeitos das condições ambientais sobre a medição ou medição imperfeita das condições ambientais;
- e) erro de tendência pessoal na leitura de instrumentos analógicos;
- f) resolução finita do instrumento ou limiar de mobilidade;
- g) valores inexatos dos padrões de medição e materiais de referência;

- h) valores inexatos de constantes e de outros parâmetros obtidos de fontes externas e usados no algoritmo de redução de dados;
- i) aproximação e suposições incorporadas ao método e procedimento de medição;
- j) variações nas observações repetidas do mensurado sob condições aparentemente idênticas.

A incerteza pode ser classificada como Incerteza Padrão, Incerteza Padrão Combinada e Incerteza Expandida.

A **Incerteza Padrão** é a incerteza do resultado de uma medição expressa como um desvio padrão. Esta pode ser classificada em Avaliação do Tipo A e Avaliação do Tipo B.

O objetivo da separação por tipo é a para indicar as duas formas diferentes de avaliar as componentes de incerteza e serve apenas para discussão. A classificação não se dispõe a indicar que exista qualquer diferença na natureza dos componentes resultantes dos dois tipos de avaliação. Ambos os tipos de avaliação são baseados em distribuições de probabilidade, e os componentes de incerteza resultante de qualquer tipo são quantificados por variâncias ou desvios padrão.

O procedimento tipo “A” para estimar a incerteza padronizada baseia-se em parâmetros estatísticos, estimados a partir de valores de observações repetitivas do mensurando.

Seja q uma variável aleatória. Sejam q_k (para $k= 1, 2, \dots, n$) n valores obtidos independentemente para a variável q .

Sua média pode ser estimada por:

$$\bar{q} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n q_k \quad (2.20)$$

O desvio padrão experimental da variável q , representado por “s”, é estimado por:

$$s(q) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^n (q_k - \bar{q})^2}{n - 1}} \quad (2.21)$$

Deve ser lembrado que, para que a estimativa de $s(q)$ pela equação (2.21) seja confiável, é necessário envolver um número suficientemente grande de observações independentes (é recomendável pelo menos $n > 10$).

Quando é utilizado o valor médio das indicações, obtido a partir da média de um conjunto de “ m ” indicações de q , o desvio padrão experimental da média de q é estimado por:

$$s(\bar{q}) = \frac{s(q)}{\sqrt{m}} \quad (2.22)$$

Neste caso, a incerteza padrão associada à variável q , representada por $u(q)$, é estimada pelo desvio padrão da média das “ m ” observações efetuadas. Assim:

$$u(q) = s(\bar{q}) \quad (2.23)$$

Quando não são envolvidas médias de indicações, mas apenas um único valor da indicação, a incerteza padrão coincide com o desvio padrão experimental $s(q)$, que já deve ter sido determinado *a priori*.

O número de graus de liberdade envolvidos (ν) na determinação $u(q)$ é dado pelo número de medições independentes efetuadas menos um, isto é:

$$\nu = n - 1 \quad (2.24)$$

Quanto ao método de avaliação do tipo “B”, nem sempre é possível ou economicamente viável quantificar a influência de certas fontes de incertezas em uma medição a partir da análise de observações repetitivas. Entretanto, ainda assim, é necessário estimar a influência de cada fonte de incertezas para estimar a incerteza combinada da medição. A determinação tipo “B” da incerteza padrão de uma fonte de incerteza é realizada por meios não estatísticos. Em geral outras informações conhecidas *a priori* são consideradas: medições anteriores, certificados de calibração, especificações do instrumento, de manuais técnicos e outros certificados e mesmo estimativas baseadas em conhecimentos e experiências anteriores do experimentalista.

A estimativa tipo “B” geralmente depende de grande experiência prática e pode ser tão confiável quanto a do tipo “A”.

Incerteza Padrão Combinada é a incerteza padrão do resultado de uma medição, quando esse resultado é obtido a partir dos valores de uma série de outras quantidades, igual à raiz quadrada positiva de uma soma de termos, os termos sendo os desvios ou covariâncias destas outras quantidades ponderadas de acordo com a forma como o resultado da medição varia com mudanças nestas grandezas.

Quando as grandezas são correlacionadas, a expressão apropriada para a incerteza combinada $u_c^2(y)$ associada com o resultado de uma medição é:

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} \right]^2 u^2(x_i) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} u(x_i, x_j) \quad (2.25)$$

Os termos de coeficientes de correlação são mais fáceis de ser interpretados do que as covariâncias. O termo de covariância da equação (2.25) pode ser escrito como:

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} \right]^2 u^2(x_i) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} u(x_i, x_j) r(x_i, x_j) \quad (2.26)$$

Incerteza Expandida é uma quantidade que define um intervalo sobre o resultado de uma medição que pode ser esperado para compreender uma fração de uma distribuição dos valores que podem ser razoavelmente atribuídos ao mensurando. A incerteza expandida U é obtida pela multiplicação da incerteza padrão combinada $U_c(y)$ por um fator k , dado por:

$$u = k * u_c \quad (2.27)$$

Pérez (2002) desenvolveu modelos que permitiram determinar a qualidade da superfície das peças, obtidas por processos de usinagem, considerando a incerteza devido ao processo e aos instrumentos de medição, usando o inverso da incerteza combinada como diagonal principal da matriz W em um algoritmo do método dos mínimos quadrados ponderados. Ele afirma que diversos pesquisadores, ao desenvolverem os seus modelos, não levam em conta a incerteza nas medições. E esta incerteza faz com que o comportamento da função objetivo não seja bem explicado.

2.6. Otimização Não Linear

Em grande parte dos produtos e processos conhecidos, a qualidade não pode ser avaliada por apenas uma característica funcional do produto (MYERS e MONTGOMERY, 2002). Em se tratando de processos ou produtos que possuam múltiplos atributos de qualidade

(características desejáveis ou exigíveis), é sempre difícil se encontrar um conjunto de parâmetros ótimos para todas as características de interesse a partir da otimização individual de cada função de transferência pré-estabelecida. Além deste tipo de otimização ser de eficácia improvável, as inter-relações entre as várias características podem levar a análise univariada às conclusões equivocadas e sem sentido (WU, 2005; KHURI e CORNELL, 1996).

Paiva *et al.* (2007) dizem que o principal objetivo da otimização é encontrar a melhor combinação possível de fatores - chamados de variáveis de projeto - para otimizar uma dada função objetivo.

Segundo Tong *et al.* (2005) pode-se utilizar a análise de componentes principais para simplificar o processo de otimização. Porém, Bratchell (1989) chama atenção para dois tipos de dificuldades potenciais que ocorrem na otimização de múltiplas respostas baseado em componentes principais. A primeira dificuldade é devido ao conflito de mínimos e máximos de um grupo de variáveis que deve ser simultaneamente maximizado. Esta dificuldade surge quando as variáveis têm cargas iguais e opostas e a otimização do componente principal tem um efeito benéfico para algumas variáveis, mas é uma desvantagem para outras.

A segunda dificuldade levantada por Bratchell (1989) surge quando algumas variáveis são pouco representadas por um componente principal. Otimizar tal componente não leva em consideração a pouca representação da variável e não pode garantir a obtenção de um bom ponto ótimo para estas variáveis. Também pode ocorrer se algumas variáveis dominam o componente principal ou, mais geralmente, se dois grupos de variáveis são aproximadamente ortogonais e representadas por diferentes componentes principais. Estas possíveis dificuldades da ACP levam à conclusão de que quanto mais homogêneos forem os conjuntos de análise, melhor será a representatividade dos componentes principais.

Bratchell (1989) e Tong *et al.* (2005) discutiram a abordagem de múltiplas respostas baseadas na análise direta dos componentes principais para otimização simultânea de processos ou produtos. Liao (2006) propôs a otimização de múltiplas respostas utilizando análise de componentes principais ponderados. Neste caso, o peso que cada componente principal recebe depende da variância que por ele é explicada.

A otimização multivariada baseada no Erro Quadrático Médio Multivariado (EQMM) considera todos os aspectos elencados acima. As múltiplas respostas consideradas em um processo apresentam conflitos de objetivos, levando a otimização individual a um conjunto

de diferentes soluções. Este fato caracteriza um problema de otimização multiobjetivo, e considerando as restrições de desigualdade, pode ser especificado conforme equação abaixo:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_p(\mathbf{x}) \\ \text{Sujeito a:} \quad & g_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (2.28)$$

supondo que $f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_p(\mathbf{x})$ são correlacionados com valores escritos em termos de um vetor aleatório.

O Erro Quadrático Médio Multivariado (EQMM) é um critério multivariado dual de superfície de resposta desenvolvido para substituir a média estimada \hat{y} por um escore de regressão do componente principal estimado (CP_i) e a variância $\hat{\sigma}^2$ pelo respectivo autovalor λ_i (PAIVA *et al.*, 2009). Tendo ζ_{CP_i} como meta para o i -ésimo componente principal, uma formulação para erro quadrático médio multivariado pode ser definida como:

$$EQMM_i = (CP_i - \zeta_{CP_i})^2 + \lambda_i \quad (2.29)$$

Na Eq. (2.29) CP_i é o polinômio de segunda ordem ajustado, ζ_{CP_i} é o valor alvo do i -ésimo componente principal que deve manter uma relação direta com as metas originais do conjunto de dados. Esta relação pode ser elaborada usando a Eq. (2.30):

$$\zeta_{CP_i} = e_i^T \left[Z \left(Y_p \mid \zeta_{Y_p} \right) \right] = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q e_{ij} \left[Z \left(Y_p \mid \zeta_{Y_p} \right) \right] \quad i = 1, 2, \dots, p; \quad j = 1, 2, \dots, q \quad (2.30)$$

Na equação (2.30) e_i são os autovetores associados ao i -ésimo componente principal e ζ_{Y_p} representa o alvo para cada uma das p respostas originais. Com esta transformação pode ser estabelecido um valor coerente para a meta do i -ésimo componente principal, que é compatível com as metas do problema original.

Se for necessário mais de um componente principal, então as funções do EQMM, cujos autovalores são iguais ou superiores a uma unidade, podem ser escritas na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & EQMM_T = \left[\prod_{i=1}^k (EQMM_i \mid \lambda_i \geq 1) \right]^{\binom{1}{k}} = \left\{ \prod_{i=1}^k [(CP_i - \zeta_{PC_i})^2 + \lambda_i \mid \lambda_i \geq 1] \right\}^{\binom{1}{k}} \\ & i = 1, 2, \dots, k; \quad k \leq p \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\text{Sujeito a : } \mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2 \quad (2.32)$$

$$\hat{g}_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (2.33)$$

$$\text{Com : } \zeta_{PC_i} = e_{1i} [Z(Y_1 | \zeta_{Y_1})] + e_{2i} [Z(Y_2 | \zeta_{Y_2})] + \dots + e_{pi} [Z(Y_p | \zeta_{Y_p})] \quad (2.34)$$

$$CP_i = b_{0i} + [\nabla f(\mathbf{x})^T]_i + \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{x}^T [\nabla^2 f(\mathbf{x})] \mathbf{x} \right\}_i \quad i = 1, 2, \dots, p. \quad (2.35)$$

onde Z representa o valor padronizado da i -ésima resposta considerando o seu valor alvo ζ_{Y_i} , tal que $Z(Y_i | \zeta_{Y_i}) = \frac{(Y_i - \mu_{Y_i})}{\sigma_{Y_i}}$. k é o número de fatores e ε é o termo do erro; \mathbf{x} é o parâmetro do vetor, b_0 é o termo constante da regressão, $\nabla f(\mathbf{x})^T$ é o gradiente da função objetivo correspondente aos coeficientes de regressão de primeira ordem e $\nabla^2 f(\mathbf{x})^T$ é a matriz Hessiana, formada pelos termos quadráticos e de interação do modelo estimado de Y .

2.7. Considerações Finais do Capítulo

Neste capítulo foram abordados os principais temas ligados a proposta desta pesquisa, contemplando alguns trabalhos publicados no meio científico. Conforme pode ser constatado, alguns trabalhos abordam a questão da incerteza presente no resultado de uma medição e outros constataam que essas incertezas (variâncias) podem levar a resultados equivocados. Porém, exceto Pérez (2002) que mostrou como corrigir as respostas originais utilizando o inverso da variância como matriz de ponderação, outros autores limitaram-se a advertir que os resultados podem ser enganosos caso as incertezas de medição sejam ignoradas.

O capítulo 3 abordará a Estratégia de Ponderação Multivariada que explica todo processo de desenvolvimento do modelo matemático que tem por objetivo estimar a incerteza total que afeta todas as variáveis de resposta.

3. Estratégia de Ponderação Multivariada

Para desenvolver uma equação adequada para incerteza multivariada que satisfaça os modelos com rotação e sem rotação, faz-se necessário efetuar combinações de algumas equações e testá-las para averiguar se o resultado atingido é compatível com o esperado.

Acreditando-se na importância de informar o roteiro de execução de todo trabalho, este capítulo aborda o desenvolvimento da proposta que tem por finalidade estimar a incerteza total que afeta todas as variáveis de resposta e, através de uma matriz de peso, ponderar os escores de componentes principais que servirão de substitutos do conjunto original de dados correlacionados. Para ilustrar a aplicação do método proposto, é exibido um fluxograma destacando todas as ações importantes que foram executadas para atingir o objetivo do trabalho.

3.1. Desenvolvimento da Proposta

Da mesma forma que os k componentes principais podem substituir as p variáveis originais, em um conjunto menor de dados, resultando em uma perda mínima de informação (MOITA NETO e MOITA, 1998), as variáveis correlacionadas podem ser substituídas pelos escores de componentes principais sem que haja perda significativa de informações. Esta substituição, conforme demonstrado por Paiva (2006), mostrou-se viável tanto para funções objetivo quanto para restrições. Além dessas possibilidades, a rotação dos eixos representados pelos Componentes Principais (CP) também pode ser usada para melhorar a explicação de variância-covariância.

O modelo básico, de uma equação apropriada da incerteza multivariada para grandezas correlacionadas dos escores de Regressão dos Componentes Principais, pode ser derivado da própria expressão para a incerteza combinada de grandezas correlacionadas, tal que:

$$u_m^2(y) = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} \right]^2 u_c^2(x_i) + 2 \sum_i^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \times \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \times u(x_i) \times u(x_j) \times r(x_i, x_j) \quad (3.1)$$

Considerando que na Análise de Componentes Principais as múltiplas respostas podem ser combinadas na forma de escores de componentes principais, tal como $CP_k = \mathbf{Z}^T \mathbf{E}$ onde \mathbf{Z} pode ser estabelecido como:

$$Z_p = \frac{(x_p - \mu_p)}{\sigma_p} \quad (3.2)$$

Então, aplicando-se a Eq. (3.1) para o caso da ACP, tem-se:

$$y = f(x) = PC_{score} = \sum_{i=1}^p (e_i \times Z_i) = \sum_{i=1}^p \left[e_i \times \left(\frac{x_i - \mu}{\sigma} \right) \right] \quad (3.3)$$

Portanto,

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{e_i}{\sigma} \quad (3.4)$$

Para um par de variáveis, a combinação das equações (3.1) e (3.3) pode ser escritas como:

$$u_m^2(PC) = \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}} \right)^2 u^2(x_i) + \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}} \right)^2 u^2(x_j) + 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}} \right) \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}} \right) \times u(x_i) \times u(x_j) \times r(x_i, x_j) \quad (3.5)$$

onde e_i é o autovetor da matriz de correlação usada na extração dos componentes principais; σ_{x_i} é o desvio padrão dos dados da resposta (coluna) i ; σ_{x_j} é o desvio padrão dos dados da resposta (coluna) j ; $u^2(x_i)$ é a incerteza (ou variância) de cada observação da resposta i ; $u^2(x_j)$ é a incerteza de cada observação da resposta j e $r(x_i, x_j)$ é o coeficiente de correlação entre as respostas x_i e x_j .

A otimização através da ACP pode não produzir resultados satisfatórios em determinadas situações. Bratchell (1989) destaca que algumas dificuldades podem ser resolvidas ou evitadas pelo uso de outras técnicas. Ao aplicar a ACP para modelar e otimizar respostas multivariadas foi observado que em algumas situações a rotação dos componentes principais fornece um meio fácil e acessível de análise e otimização de uma resposta múltipla, que simplifica a interpretação da resposta global e mantém a flexibilidade associada à modelagem linear ou não-linear. A análise fatorial é uma das técnicas que pode melhorar os ajustes. É uma ferramenta matemática para analisar uma ampla variedade de conjuntos de dados, com aplicativos especialmente importantes para o planejamento de experimentos (DOE).

Seguindo a recomendação de Bratchell, extraindo-se os escores usando a análise fatorial e o método de rotação Varimax, a matriz W poderá ser obtida analogamente ao caso

anterior, tal que, a matriz de ponderação será o inverso da incerteza multivariada calculada pela equação (3.6) a seguir

$$u_m^2(FA_{rotated}) = \left(\frac{k_1}{\sigma_{x_1}}\right)^2 u^2(x_i) + \left(\frac{k_2}{\sigma_{x_2}}\right)^2 u^2(x_j) + 2 \times \left(\frac{k_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{k_2}{\sigma_{x_2}}\right) \times u(x_i) \times u(x_j) \times r(x_i, x_j) \quad (3.6)$$

onde k_1 e k_2 são os coeficientes dos fatores obtidos pelo método de rotação Varimax que é aplicado para simplificar a estrutura de dados. De acordo com Johnson e Wichern (2007) este é o método de rotação mais utilizado.

Cho e Park (2005) recomendam o uso do método dos Mínimos Quadrados Ponderados para equilibrar os dados com os pesos que são inversamente proporcionais à variação em cada nível das variáveis explicativas quando a variância não é constante. Através deste método, Pérez (2002) ponderou os regressores da superfície de rugosidade das variáveis de resposta R_a e R_q usando o inverso da incerteza de medição como matriz de ponderação, que é determinada pela equação (3.7),

$$\mathbf{W}_y = \frac{1}{u_y^2} \quad (3.7)$$

onde \mathbf{W}_y é uma matriz diagonal com os seus principais elementos da diagonal e u_y^2 é a incerteza total do processo para cada um dos valores da resposta.

Aplicando-se o método matemático desenvolvido nas equações (3.5) e (3.6), é possível estabelecer a matriz W para aplicar o método WLS (Mínimos Quadrados Ponderados) nos escores dos componentes principais, tais como:

$$\mathbf{W}_{CP} = \frac{1}{u_M^2 CP} \quad (3.8)$$

onde W é adotado como a matriz inversa da variância para CP (componente principal) ou para FCP (componente principal extraído através da análise fatorial rotacionado pelo método Varimax), e u_m^2 é a incerteza total do processo.

Para ilustrar a aplicação do método, a Fig. 3.1 mostra os passos fundamentais na abordagem da proposta usando ACP.

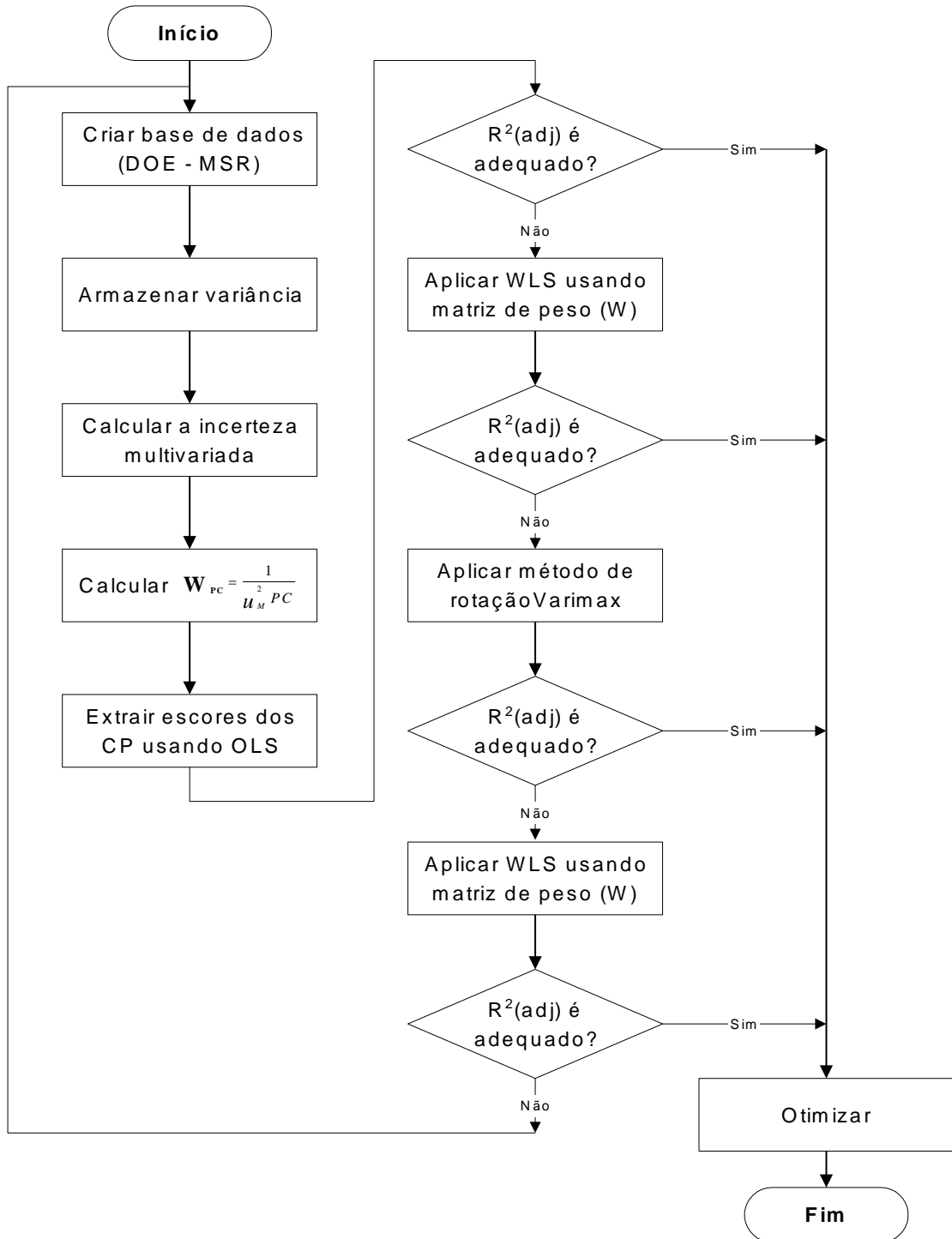


Figura 3.1 - Fluxo de aplicação do modelo WLS – ACP

3.2. Considerações finais do capítulo

Este capítulo abordou o processo de desenvolvimento do modelo matemático que tem por objetivo estimar a incerteza total que afeta todas as variáveis de resposta. Iniciou-se o capítulo com a exposição do modelo básico de uma equação apropriada da incerteza multivariada para grandezas correlacionadas e no final, se chegou ao modelo proposto, que é

a combinação de duas equações. Estabeleceu-se a matriz de peso para aplicação do método WLS e, por fim, foi apresentado o fluxo de aplicação do modelo WLS-ACP.

O capítulo 4 abordará uma simulação computacional do modelo. Para tanto, será utilizado o banco de dados dos experimentos realizados por Salgado Jr. (2010). Estes dados serão alterados através da aplicação de coeficientes de variação (CV) com o intuito de se verificar as oscilações das respostas com variâncias baixas e altas.

4. Simulação Computacional do Modelo

Com o objetivo de testar a eficiência do método desenvolvido, este capítulo apresenta uma simulação que aborda apenas duas respostas (Y_1 e Y_2). Estas respostas, conseqüentemente, geraram escores de componentes principais CP1 e FCP1, sendo este último, os escores de componentes principais obtidos através da análise fatorial.

4.1. Base de Dados

As informações, cedidas e utilizadas nesta simulação, fazem parte da base de dados dos experimentos realizados por Salgado Jr. (2010).

Nestes experimentos, peças do aço ABNT 12L14 com a composição química (1,03% C; 0,23% Si; 0,35% Mn; 1,40% Cr; 0,04% Mo; 0,11% Ni; 0,001% S; 0,01% P) e dimensões de 49 mm x 50 mm, foram usinadas num torno CNC Nardini Logic 175 com velocidade de rotação máxima de 4.000 rpm e potência de 5,5 KW. Logo após o torneamento foi utilizado um rugosímetro MITUTOYO SurfTest SJ-201P para determinar os valores de rugosidade de cada peça.

As ferramentas de corte utilizadas foram metal duro classe ISO P35 revestido com três coberturas (Ti (C, N), Al_2O_3 , TiN), (GC 4035 Sandvik) na geometria ISO SNMG 09 03 04 – PM e o suporte designação ISO DSBNL 1616H 09.

Os parâmetros de usinagem adotados para este experimento, velocidade de corte (V_c), avanço da ferramenta (f_n) e profundidade de corte (a_p) estão descritos na Tabela 4.1.

Variáveis de Controle	Níveis		
	-1,00	0,00	+1,00
Velocidade de Corte (V_c)	220,00	280,00	340,00
Avanço de Ferramenta (f_n)	0,08	0,10	0,12
Profundidade de Corte (a_p)	0,70	0,95	1,20

Tabela 4.1 – Variáveis de controle

Após a execução dos experimentos foi gerado um banco de dados para o desenvolvimento do trabalho. A Tabela 4.2 apresenta o resumo dos valores obtidos para as duas variáveis de respostas, Y_1 e Y_2 , que passam a ser consideradas para efeito de simulação.

Modelos Originais (Salgado Jr., 2010)				
	Y₁	Y₂	ln(Var Y₁)	ln (Var Y₂)
Constante	2,698	12,708	1,003	3,874
<i>Vc</i>	0,087	0,172	0,177	0,119
<i>fn</i>	0,016	-0,254	-0,552	-0,392
<i>ap</i>	0,265	1,418	0,445	0,513
<i>Vc*Vc</i>	-0,104	0,000	0,000	0,000
<i>fn*fn</i>	-0,171	-0,643	-0,433	-0,368
<i>ap*ap</i>	-0,122	-0,511	-0,338	-0,216
<i>Vc*fn</i>	0,000	0,302	0,280	0,168
<i>Vc*ap</i>	0,000	0,000	0,000	0,000
<i>fn*ap</i>	-0,143	-0,518	-0,285	0,000

Tabela 4.2 – Resumo dos valores das variáveis Y₁ e Y₂

A partir deste ponto, os valores obtidos por Salgado Jr. (2010) foram modificados, de forma controlada, para testar a eficiência do modelo. Para avaliar a relação entre a aplicação da ponderação e a ordem de grandeza da variância, as equações das variáveis originais foram majoradas a partir de coeficientes estabelecidos em função dos coeficientes de variação (CV). Mantendo-se a média e variando-se os valores de CV, novas equações de variância foram geradas, usando as constantes empíricas da Tabela 4.3. Os coeficientes de variação aplicados podem ser observados nesta tabela.

CV	k1	k2
5%	-4,00	-0,20
10%	-2,50	0,20
20%	-1,20	0,55
30%	-0,40	0,75
40%	0,20	0,90
50%	1,00	0,98
75%	2,00	1,22

Tabela 4.3- Coeficientes de Variação.

onde CV são os coeficientes de variação utilizados nesta simulação e K1 e K2 representam as constantes que alteram a variância. Estas constantes foram obtidas empiricamente.

Com a aplicação de cada coeficiente de variação, novos valores foram gerados para testar a capacidade do modelo de melhorar os resultados de $R^2(\text{adj})$ e $R^2(\text{pred})$. Para exemplificar o efeito dessas alterações sobre as respostas, a Tabela 4.4 mostra os novos valores resultantes da aplicação do coeficiente de variação (CV) de 5% sobre a constante (b_0). Não foram expostas outras tabelas com os valores resultante da aplicação dos coeficientes de variação de 10%, 20%, 30%, 40%, 50% e 75%, pois isso implicaria em aumentar seis vezes o volume de tabelas, correspondente a quantidade de simulações executadas.

Modelos Alterados [k x f(x)]				
	Y_1	Y_2	$\ln(\text{Var } Y_1)$	$\ln(\text{Var } Y_2)$
Constante	2,698	12,708	-4,013	-0,775
<i>V_c</i>	0,087	0,172	0,177	0,119
<i>f_n</i>	0,016	-0,254	-0,552	-0,392
<i>a_p</i>	0,265	1,418	0,445	0,513
<i>V_c*V_c</i>	-0,104	0,000	0,000	0,000
<i>f_n*f_n</i>	-0,171	-0,643	-0,433	-0,368
<i>a_p*a_p</i>	-0,122	-0,511	-0,338	-0,216
<i>V_c*f_n</i>	0,000	0,302	0,280	0,168
<i>V_c*a_p</i>	0,000	0,000	0,000	0,000
<i>f_n*a_p</i>	-0,143	-0,518	-0,285	0,000

Tabela 4.4 – Resumo dos valores das variáveis Y_1 e Y_2 alterados

A simulação foi realizada a partir do cálculo de valores previstos pelas novas equações de variância, usando a matriz exponencial original como dado de entrada. Porém, neste caso, os pontos centrais que são numericamente iguais, conduziram aos mesmos valores. Isso traria inconsistência à simulação, porque o MSE é calculado como a variância das respostas no ponto central com respostas iguais. Os $R^2(\text{adj})$ seriam máximo com erro zero, o que não serviria para a simulação.

Assim, adotou-se as mesmas variâncias dos pontos centrais das médias (Y_1 e Y_2), simulando os três pontos centrais da equação da variância como uma normal N (valor previsto; variância dos pontos centrais das médias).

Desta forma, foram gerados sete CCDs simulados para expressar os efeitos da aplicação dos coeficientes de variação sobre os valores trabalhados. A Tabela 4.5 mostra os valores resultantes da aplicação do coeficiente de variação (CV) de 5%. Pelos mesmos motivos explicados anteriormente, as outras tabelas com os resultados da aplicação dos

demais CV não serão mostradas neste trabalho, apenas os resultados obtidos. Destacam-se, nesta tabela, os três pontos centrais como chave do modelo, que influenciam diretamente no entendimento do comportamento das variáveis de resposta.

	b_0	V_c	F_n	A_p	V_c^2	F_n^2	A_p^2	$V_c \times F_n$	$V_c \times A_p$	$F_n \times A_p$	Y_1	Y_2
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1,79	10,00
2	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1,96	9,74
3	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1	2,11	9,93
4	1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	2,28	10,87
5	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	2,61	13,87
6	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1	2,78	13,61
7	1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	2,35	11,73
8	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2,53	12,67
9	1	-1,68	0	0	2,83	0	0	0	0	0	2,26	12,42
10	1	1,68	0	0	2,83	0	0	0	0	0	2,55	13,00
11	1	0	-1,68	0	0	2,83	0	0	0	0	2,19	11,32
12	1	0	1,68	0	0	2,83	0	0	0	0	2,24	10,46
13	1	0	0	-1,68	0	0	2,83	0	0	0	1,91	8,88
14	1	0	0	1,68	0	0	2,83	0	0	0	2,80	13,65
15	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2,54	11,84
16	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2,78	13,18
17	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2,98	14,32

Tabela 4.5 – CCD Simulado para CV de 5%

Os reflexos das simulações resultantes da aplicação dos coeficientes de variação (CV) podem ser visualizados nas Figuras de 4.1 a 4.4. Para deixar o trabalho mais leve escolheu-se, de forma aleatória, apresentar somente os gráficos ponderados com os CV de 5%, 20%, 40% e 75%. O comportamento dos 8 pontos fatoriais, 6 pontos axiais e 3 pontos centrais podem ser observados nestas figuras. A Figura 4.1 apresenta o gráfico do Desvio Padrão ponderado com CV = 5%.

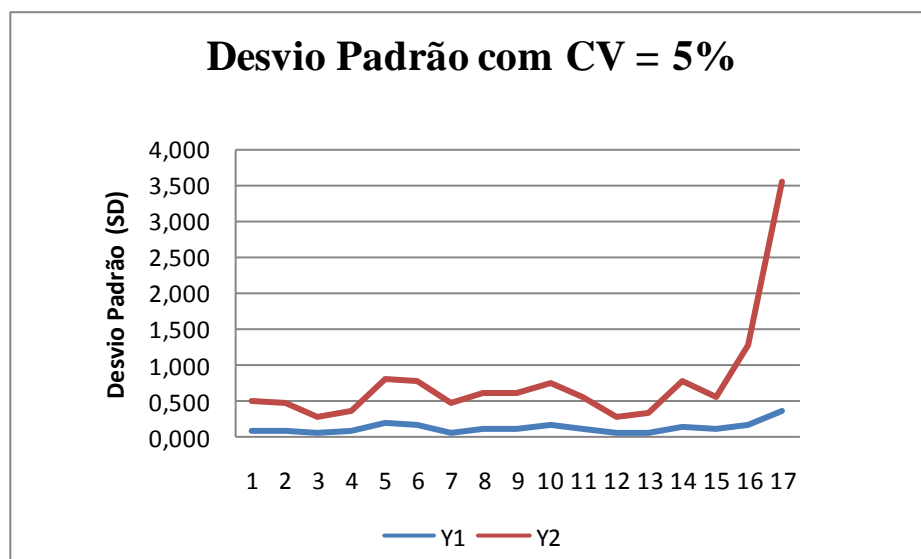


Figura 4.1 - Gráfico do desvio padrão com CV = 5%

A Figura 4.2 apresenta o gráfico do Desvio Padrão ponderado com $CV = 20\%$. Percebe-se que com o aumento do percentual do CV as respostas Y_1 e Y_2 se afastam uma da outra.

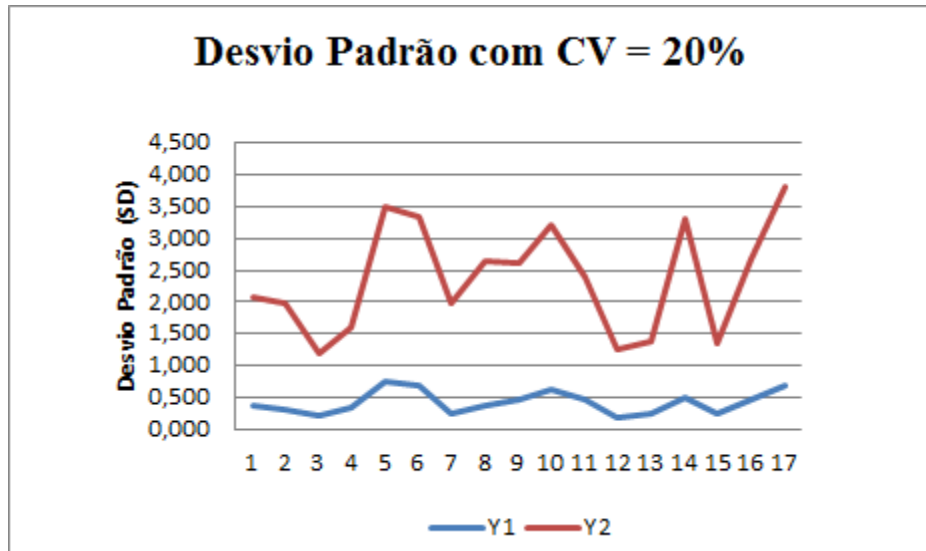


Figura 4.2 - Gráfico do desvio padrão com $CV = 20\%$

A Figura 4.3 apresenta o gráfico do Desvio Padrão ponderado com $CV = 40\%$. O afastamento dos valores das respostas Y_1 e Y_2 tornam-se mais acentuado.

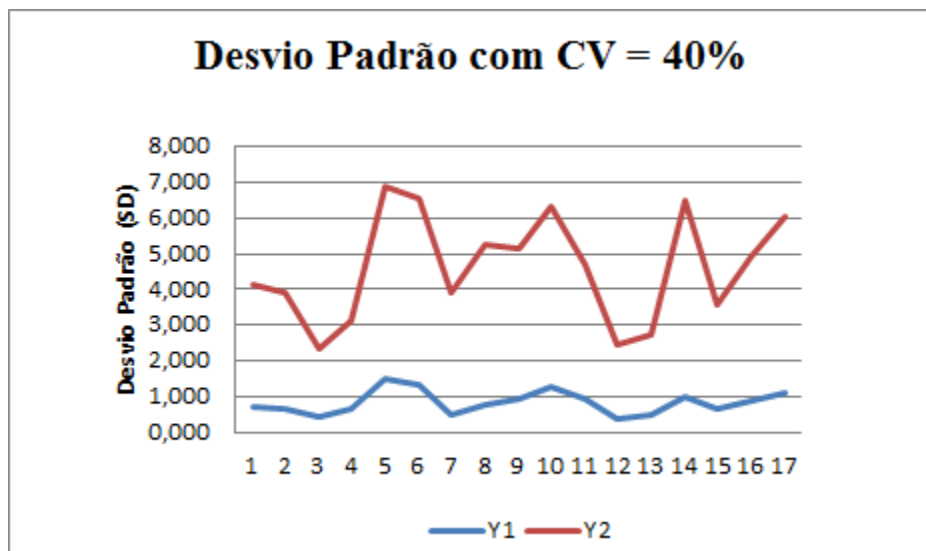


Figura 4.3 - Gráfico do desvio padrão com $CV = 40\%$

Comparando-se a Figura 4.4 com desvios padrão ponderados com CV a 75% e a Figura 4.1 com desvios padrão ponderados com CV a 5% , percebe-se que a distância entre os dois valores tornou-se bastante acentuada. Desta forma, pretende-se testar a robustez do modelo com valores de desvios padrão com menor e maior intensidade.

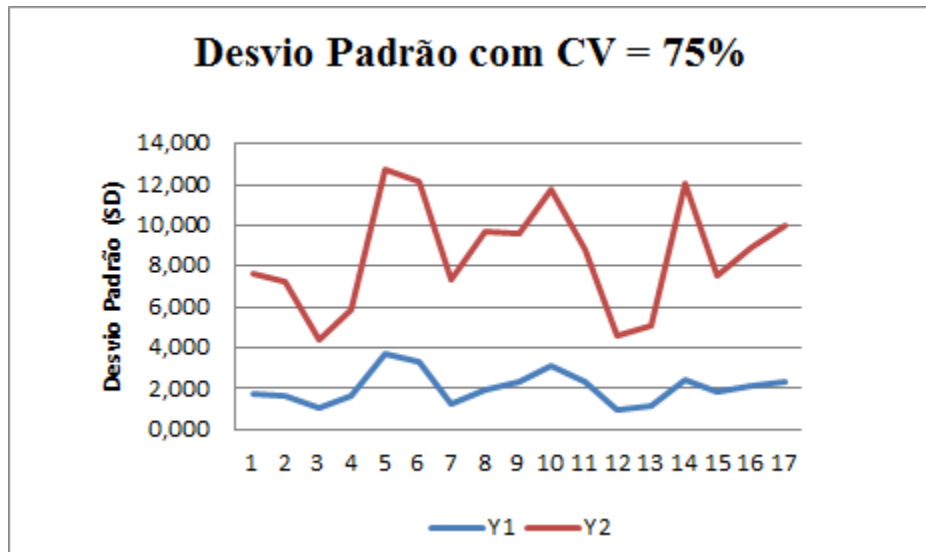


Figura 4.4 - Gráfico do desvio padrão com CV = 75%

Seguindo o mesmo padrão de apresentação dos gráficos de desvio padrão, o próximo conjunto de figuras apresenta os efeitos da aplicação dos CV sobre os pesos. A Figura 4.5 apresenta o gráfico de Pesos ponderados com CV = 5%.

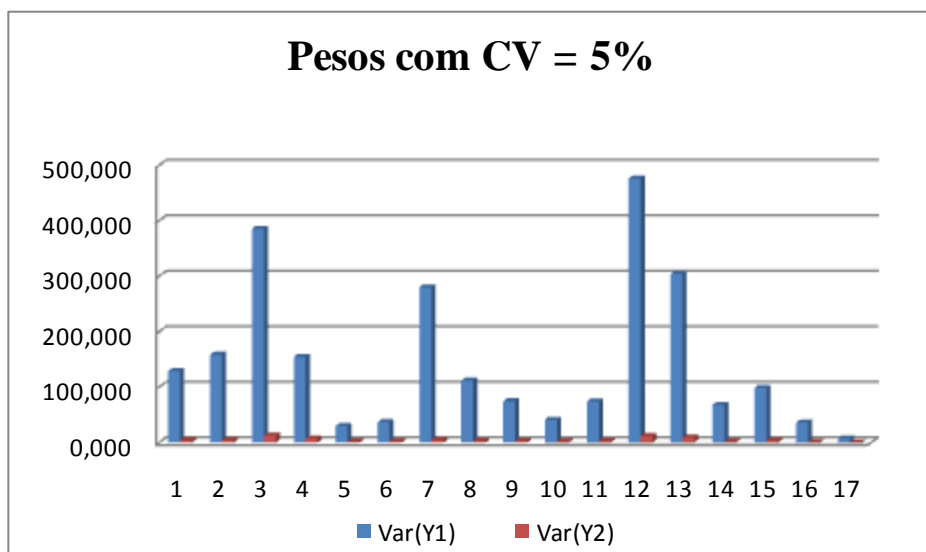


Figura 4.5 - Gráfico do Peso com CV = 5%

Os mesmos reflexos da aplicação dos CV's sobre os desvios padrão podem ser percebidos nos pesos que serão utilizados como matriz de ponderação para os escores de componentes principais. A Figura 4.6 apresenta o gráfico de Pesos ponderados com CV = 20%. Percebe-se que com o aumento do percentual do CV as respostas Y_1 e Y_2 tendem a se afastarem uma da outra, da mesma forma que ocorreu com o desvio padrão.

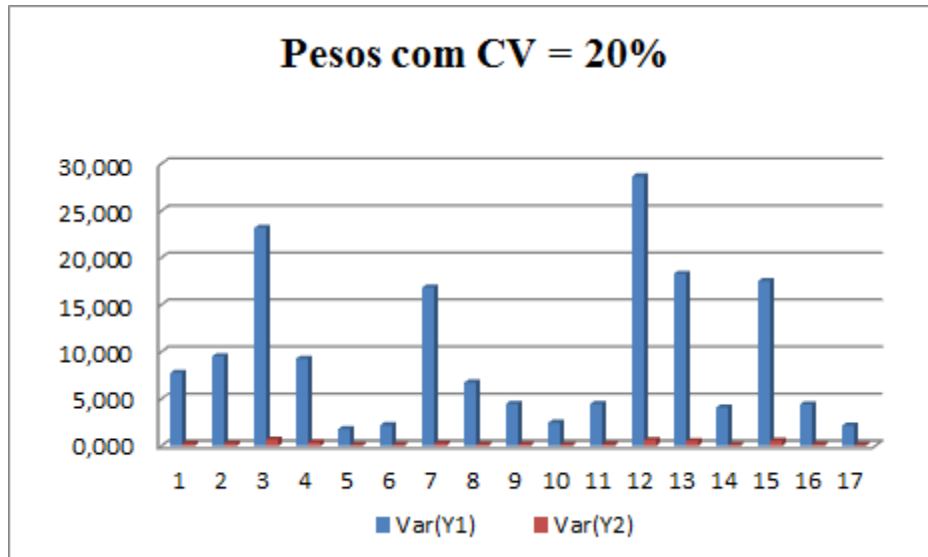


Figura 4.6 - Gráfico do Peso com CV = 20%

A Figura 4.7 apresenta o gráfico de Pesos ponderados com CV = 40%. O afastamento dos valores das respostas Y_1 e Y_2 tornam-se mais acentuado, principalmente nos três pontos centrais.

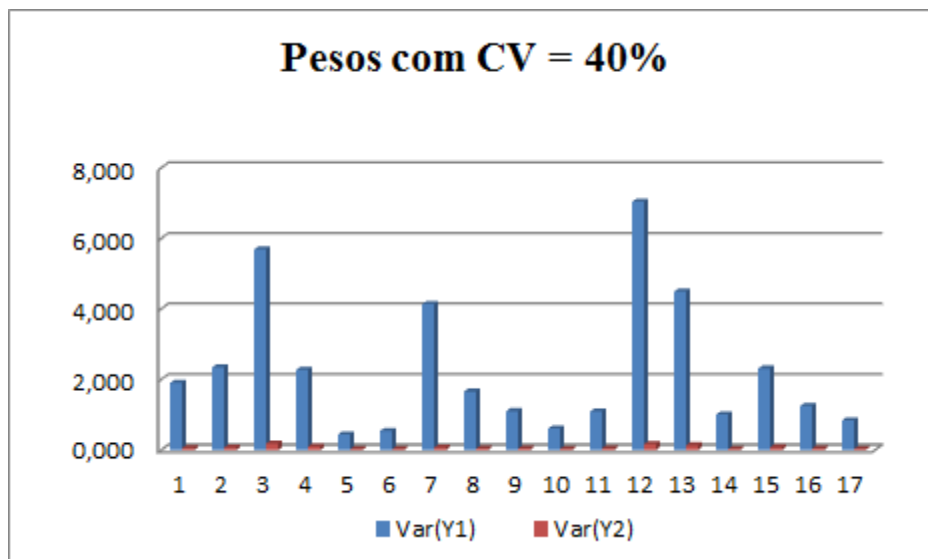


Figura 4.7 - Gráfico do Peso com CV = 40%

Novamente, comparando-se a Figura 4.8 com pesos ponderados com CV de 75% e a Figura 4.5 com pesos ponderados com CV de 5%, percebe-se que a distância entre os dois valores tornou-se bastante acentuada. Portanto, pretende-se testar o comportamento de $R^2(\text{adj})$ e $R^2(\text{pred})$ ponderados com diferentes valores.

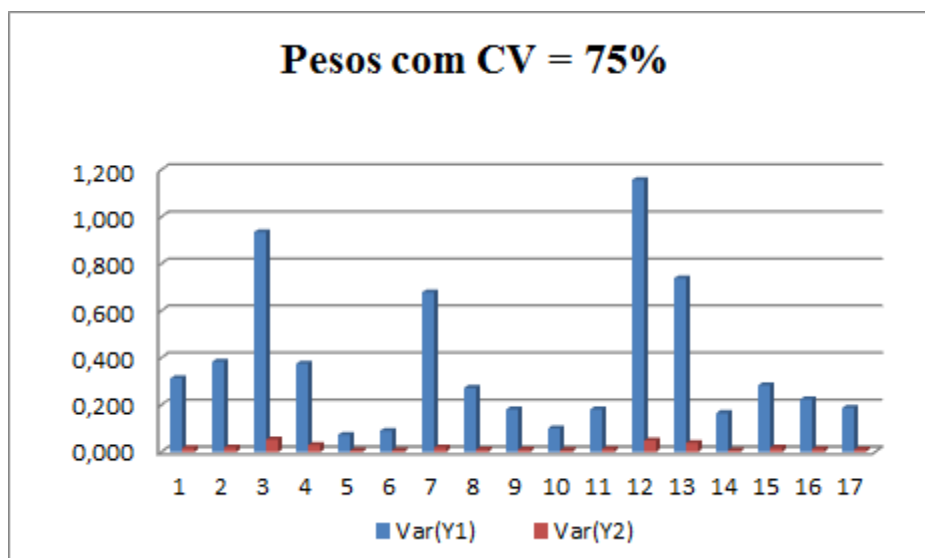


Figura 4.8 - Gráfico do Peso com CV = 75%

4.2. Dados Simulados

No decurso do trabalho, extraíram-se os novos valores para os grupos de rugosidade média, desvio padrão e variância. Os dados resultantes da simulação com aplicação do coeficiente de variação (CV) de 5% estão apresentados na Tabela 4.6.

Rugosidade Média		Desvio Padrão		Variância	
Y_1	Y_2	$SD(Y_1)$	$SD(Y_2)$	$Var(Y_1)$	$Var(Y_2)$
1,79	10,00	0,09	0,49	128,91	4,18
1,96	9,74	0,08	0,47	158,33	4,61
2,11	9,93	0,05	0,28	384,98	12,81
2,28	10,87	0,08	0,37	154,20	7,21
2,61	13,87	0,18	0,82	29,91	1,50
2,78	13,61	0,17	0,78	36,73	1,65
2,35	11,73	0,06	0,47	279,58	4,59
2,53	12,67	0,09	0,62	111,98	2,58
2,26	12,42	0,12	0,61	74,57	2,65
2,55	13,00	0,16	0,75	41,07	1,78
2,19	11,32	0,12	0,56	74,31	3,18
2,24	10,46	0,05	0,29	476,07	11,87
1,91	8,88	0,06	0,33	304,02	9,47
2,80	13,65	0,12	0,77	68,00	1,68
2,71	12,82	0,10	0,54	98,10	3,39
2,78	13,18	0,17	0,91	36,37	1,21
2,98	14,32	0,37	2,04	7,45	0,24

Tabela 4.6 – Valores da Rugosidade Média, Desvio Padrão e Variância

A correlação entre as resposta é um aspecto muito importante que deve ser considerado para o desenvolvimento do trabalho. Através o uso do Software Minitab foi realizado esta análise e observou-se que existe correlação de 0,929 entre as duas respostas com valor $P_value = 0,000$.

Em seguida, com a aplicação da equação (3.5), efetuou-se o cálculo da incerteza multivariada do par de respostas (Y_1 e Y_2) para os componentes principais (U_mCP1). Repetiu-se o procedimento para a identificação da incerteza multivariada dos componentes principais rotacionados (U_mFCP1), aplicando-se a equação (3.6). A Tabela 4.7 exhibe os resultados destes cálculos.

U_mCP1	U_mFCP1
0,15	0,11
0,13	0,11
0,05	0,03
0,10	0,05
0,51	0,21
0,43	0,21
0,10	0,16
0,20	0,23
0,24	0,16
0,40	0,20
0,22	0,11
0,05	0,05
0,06	0,05
0,32	0,33
0,11	0,10
0,51	0,37
2,54	1,90

Tabela 4.7 – Cálculo da Incerteza Multivariada

Através do método matemático desenvolvido foi possível evidenciar as incertezas do processo e gerar os valores que compõe a Tabela 4.7, isto é, a incerteza multivariada total existente nos CP1 e FCP1. Então, aplicando-se a Eq. (3.8) sobre os valores apresentados nesta tabela, foi estabelecida a matriz W para aplicar o método WLS (Mínimos Quadrados Ponderados) sobre os escores dos componentes principais. A matriz W foi adotada como matriz inversa da variância para ponderar os escores dos componentes principais (CP1) e os

escores dos componentes principais rotacionados (FCP1). Os resultados gerados com o emprego da matriz de ponderação (W) podem ser verificados na Tabela 4.8.

$WCPI$	$WFCPI$
6,83	9,23
7,91	9,36
20,67	28,84
9,85	21,58
1,97	4,74
2,30	4,78
9,98	6,43
4,90	4,44
4,15	6,30
2,52	4,97
4,54	8,83
21,80	21,52
15,75	20,22
3,10	3,04
9,41	10,40
1,95	2,72
0,39	0,53

Tabela 4.8 – Matriz de ponderação para CP1 e FCP1.

4.3. Resultados e Discussão

O primeiro componente principal (CP1) foi obtido com a aplicação da Eq. (2.14). Usando a Análise de Componentes Principais para decompor a estrutura de correlação, pode ser verificado, na Tabela 4.9, que o CP1 explica 96,4% da variação total observada na rugosidade do par de variáveis, com autovalor de 1,929 e os respectivos autovetores de 0,707.

Análise dos Componentes Principais: Y_1; Y_2		
Auto-Análise da matriz de Correlação		
Autovalor	1,929	0,071
Proporção	0,964	0,036
Acumulado	0,964	1,000
Variáveis	PC1	PC2
Y_1	-0,707	0,707
Y_2	0,707	0,707

Tabela 4.9 – Análise de Componentes Principais

Após a preparação dos dados, aplicou-se a metodologia de superfície de resposta (MSR) para analisar o grupo de médias de rugosidade. Por meio do software Minitab® 15 foi gerado um modelo para o par de variáveis Y_1Y_2 . O resultado do $R^2(\text{adj})$ apresentado na Figura 4.9, obtido através do modelo quadrático completo, mostrou-se representativo, pois atingiu o percentual satisfatório para explicar a variabilidade do modelo.

Response Surface Regression: CP1 versus Vc; Fn; Ap

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for CP1

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	1,30817	0,3017	4,336	0,003
Vc	0,25250	0,1417	1,782	0,118
Fn	-0,07560	0,1417	-0,534	0,610
Ap	1,15054	0,1417	8,120	0,000
Vc*Vc	-0,32069	0,1560	-2,056	0,079
Fn*Fn	-0,73322	0,1560	-4,701	0,002
Ap*Ap	-0,57450	0,1560	-3,684	0,008
Vc*Fn	0,12831	0,1851	0,693	0,511
Vc*Ap	0,00000	0,1851	0,000	1,000
Fn*Ap	-0,51620	0,1851	-2,788	0,027

S = 0,523644 PRESS = 4,30796

R-Sq = 93,78% R-Sq(pred) = 86,04% R-Sq(adj) = 85,78%

Analysis of Variance for CP1

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	9	28,9397	28,9397	3,21552	11,73	0,002
Linear	3	19,0269	19,0269	6,34231	23,13	0,001
Square	3	7,6494	7,6494	2,54980	9,30	0,008
Interaction	3	2,2634	2,2634	0,75446	2,75	0,122
Residual Error	7	1,9194	1,9194	0,27420		
Lack-of-Fit	5	0,0011	0,0011	0,00023	0,00	1,000
Pure Error	2	1,9183	1,9183	0,95914		
Total	16	30,8591				

Figura 4.9 – Modelo Quadrático

Assim sendo, foi necessário ponderar os escores de componentes principais (CP1) utilizando-se uma matriz de peso $WCPI$, como inverso da variância. Pérez (2002) usou um modelo semelhante para modelar as resposta de R_a e R_q . Os resultados desta aplicação podem ser observados na Figura 4.10, e a equação de regressão gerada para este modelo pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 WCP1 = & 0,548 + 0,252 Vc - 0,0754 Fn + 1,15 Ap - 0,0667 Vc^2 - 0,471 Fn^2 \\
 & - 0,313 Ap^2 + 0,131 Vc \times Fn - 0,0006 Vc \times Ap - 0,516 Fn \times Ap
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

Regression Analysis: CP1 versus Vc.; Fn.; ...

Weighted analysis using weights in WPC1 - 0,05

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,5481	0,1913	2,87	0,024
Vc.	0,25213	0,08437	2,99	0,020
Fn.	-0,07536	0,07227	-1,04	0,332
Ap.	1,15031	0,07823	14,70	0,000
Vc2	-0,06666	0,09467	-0,70	0,504
Fn2	-0,47113	0,08389	-5,62	0,001
Ap2	-0,31349	0,08815	-3,56	0,009
Vc*Fn	0,13100	0,08937	1,47	0,186
Vc*Ap	-0,00058	0,09167	-0,01	0,995
Fn*Ap	-0,51557	0,09525	-5,41	0,001

S = 0,658010 R-Sq = 97,9% **R-Sq(adj) = 95,3%**
 PRESS = 3,61713 **R-Sq(pred) = 97,54%**

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	9	143,783	15,976	36,90	0,000
Residual Error	7	3,031	0,433		
Lack of Fit	5	0,016	0,003	0,00	1,000
Pure Error	2	3,015	1,508		
Total	16	146,814			

Figura 4.10 – Modelo quadrático gerado pela MSR

Conforme pode ser observado, houve uma melhoria significativa nos resultados do $R^2(\text{adj})$ e R^2_{previsto} . Os valores passaram de 85,78% e 86,04% para 95,30% e 97,54%, respectivamente, no modelo com ponderação. Isso representa um crescimento de 9,52 e 11,54 pontos percentuais (p.p.). Analisando o LOF (do inglês *lack of fit*), percebe-se que o modelo é adequado, pois apresenta *P-Value* maior ou igual a 0,05. A Figura 4.11 apresenta os gráficos de superfície de resposta construídos a partir dos valores gerados para os escores de CP1.

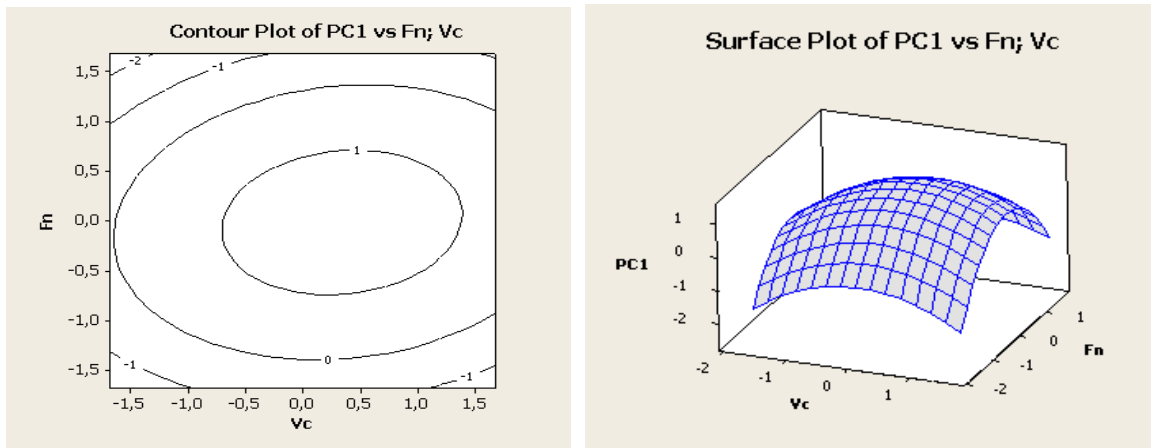


Figura 4.11 – Superfície de resposta e gráfico de contorno para CP1

Bratchell (1989) afirma que a rotação dos componentes principais pode apresentar fatores com capacidade de serem facilmente interpretados. Para testar os efeitos da rotação sobre o modelo, uma análise fatorial multivariada foi aplicada. O método de extração dos dados foi a análise de componentes principais e o tipo de rotação foi o Varimax.

Os resultados obtidos nesta tentativa de melhorar a performance do R^2 (adj) e R^2 previsto através da rotação dos dados estão apresentados na Figura 4.12.

Response Surface Regression: FCP1 versus Vc; Fn; Ap

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for FCP1

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,043112	0,2146	0,201	0,847
Vc	-0,153089	0,1008	-1,519	0,173
Fn	-0,410536	0,1008	-4,073	0,005
Ap	0,733885	0,1008	7,282	0,000
Vc*Vc	0,374070	0,1109	3,372	0,012
Fn*Fn	-0,193433	0,1109	-1,744	0,125
Ap*Ap	-0,234303	0,1109	-2,112	0,073
Vc*Fn	0,405085	0,1317	3,076	0,018
Vc*Ap	-0,000000	0,1317	-0,000	1,000
Fn*Ap	-0,062935	0,1317	-0,478	0,647

S = 0,372453 PRESS = 2,18014

R-Sq = 93,93% **R-Sq(pred) = 86,37%** **R-Sq(adj) = 86,13%**

Analysis of Variance for FCP1

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	9	15,0290	15,02895	1,66988	12,04	0,002
Linear	3	9,9772	9,97720	3,32573	23,97	0,000
Square	3	3,7073	3,70732	1,23577	8,91	0,009
Interaction	3	1,3444	1,34444	0,44815	3,23	0,091
Residual Error	7	0,9710	0,97105	0,13872		
Lack-of-Fit	5	0,0007	0,00072	0,00014	0,00	1,000
Pure Error	2	0,9703	0,97033	0,48517		
Total	16	16,0000				

Figura 4.12 – Modelo quadrático gerado pela MSR


Pode-se confirmar através dos resultados apresentados na Figura 4.12 que a sugestão de Bratchell surtiu efeito positivo, porém, não muito significativo. Com a aplicação da análise fatorial com rotação Varimax, girou-se os eixos de referência em torno da origem até alcançar uma posição ideal, apresentando uma perspectiva diferente. Através desta nova perspectiva o valor do coeficiente de determinação ajustado (R^2 (adj)) foi elevado para 86,13% enquanto que o valor do R^2 previsto foi para 86,37%. A análise de *LOF* continua indicando que o modelo é adequado, pois apresenta (P -Value $\geq 0,05$).

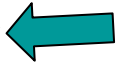
Apesar dos bons resultados aferidos com a recomendação de Bratchell, testou-se a possibilidade de melhorar ainda mais os valores apresentados anteriormente. Sendo assim, foi necessário ponderar os escores de componentes principais rotacionados (FCP1) utilizando-se uma matriz de peso *WFCP1*, como inverso da variância. Os resultados desta ponderação podem ser observados na Figura 4.13.

Regression Analysis: FCP1 versus Vc.; Fn.; ...

Weighted analysis using weights in WPC1FA - 0,05

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-0,4082	0,1703	-2,40	0,048
Vc.	-0,15312	0,06805	-2,25	0,059
Fn.	-0,41041	0,05684	-7,22	0,000
Ap.	0,73403	0,06865	10,69	0,000
Vc2	0,52652	0,07966	6,61	0,000
Fn2	-0,03841	0,07192	-0,53	0,610
Ap2	-0,07966	0,07909	-1,01	0,347
Vc*Fn	0,40552	0,07438	5,45	0,001
Vc*Ap	0,00003	0,08006	0,00	1,000
Fn*Ap	-0,06130	0,07744	-0,79	0,455

S = 0,647223 R-Sq = 98,1% **R-Sq(adj) = 95,6%** 

PRESS = 3,38469 **R-Sq(pred) = 97,78%** 

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	9	149,604	16,623	39,68	0,000
Residual Error	7	2,932	0,419		
Lack of Fit	5	0,005	0,001	0,00	1,000
Pure Error	2	2,928	1,464		
Total	16	152,536			

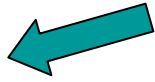


Figura 4.13 – Modelo quadrático gerado pela MSR

A nova equação de regressão é:

$$\begin{aligned} WFCP1 = & -0,408 - 0,153 Vc - 0,410 Fn + 0,734 Ap + 0,527 Vc^2 - 0,0384 Fn^2 \\ & - 0,0797 Ap^2 + 0,406 Vc \times Fn + 0,0000 Vc \times Ap - 0,0613 Fn \times Ap \end{aligned} \quad (4.2)$$

Conforme pode ser constatado na Figura 4.13, o modelo desenvolvido é capaz de transformar um resultado bom em um resultado muito bom, pelo fato de ter conseguido elevar o percentual de explicação do modelo, representado por $R^2(\text{adj})$, de 86,13% para 95,6% e do R^2 previsto de 86,37% para 97,78%. Analisando-se pelo aspecto de ajuste do modelo, percebe-se que o modelo é adequado, pois o *LOF* apresenta *P-Value* $\geq 0,05$.

A Figura 4.14 apresenta os gráficos de superfície de resposta construído a partir dos valores gerados para os escores dos componentes principais rotacionados.

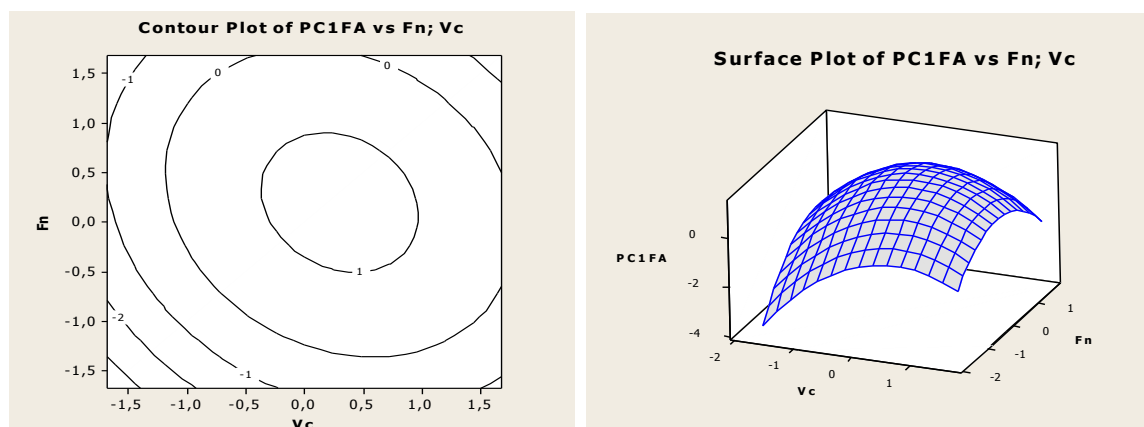


Figura 4.14 – Superfície de resposta e gráfico de contorno do Primeiro Componente Principal com rotação Varimax.

Os resultados dos R^2 [$R^2(\text{adj})$ e $R^2(\text{pred})$] mostraram-se sensíveis às alterações das variâncias majoradas a partir dos coeficientes de variação descritos na Tabela 4.3. Os modelos ponderados sem rotação (CP1) e com rotação (FCP1) apresentaram os melhores resultados, conforme pode ser observado na Tabela 4.10,

Modelos / Ponderação		Original	5%	10%	20%	30%	40%	50%	75%
CP1 (sem rotação)	R^2 (Adj)	85,78%	95,30%	92,80%	88,20%	87,90%	87,90%	87,90%	88,10%
	R^2 Pred.	86,04%	97,54%	96,36%	*	*	*	*	*
FCP1 (com rotação)	R^2 (Adj)	86,13%	95,60%	92,00%	90,20%	89,90%	89,80%	89,50%	89,30%
	R^2 Pred.	86,37%	97,78%	96,37%	*	*	*	*	*

Tabela 4.10 – Resultados de $R^2(\text{adj})$ e R^2 previsto.

Observa-se também nesta tabela que a partir do coeficiente de variação de 10%, aplicado sobre a variância, os valores dos R^2 mostraram uma tendência de queda. Ao analisar os resultados verificou-se que, apesar da redução dos percentuais, todos os valores permaneceram acima de 87%. Nesta análise, destacou-se a robustez do modelo FCP1 (com rotação Varimax e ponderação) que se manteve acima de 89%. Bratchell (1989) recomendou a rotação dos componentes principais para melhorar a explicação dos modelos. Isto ficou comprovado através desta simulação, na qual o modelo rotacionado e ponderado apresentou a melhor explicação. Estes resultados podem ser visualizados na Figura 4.15.

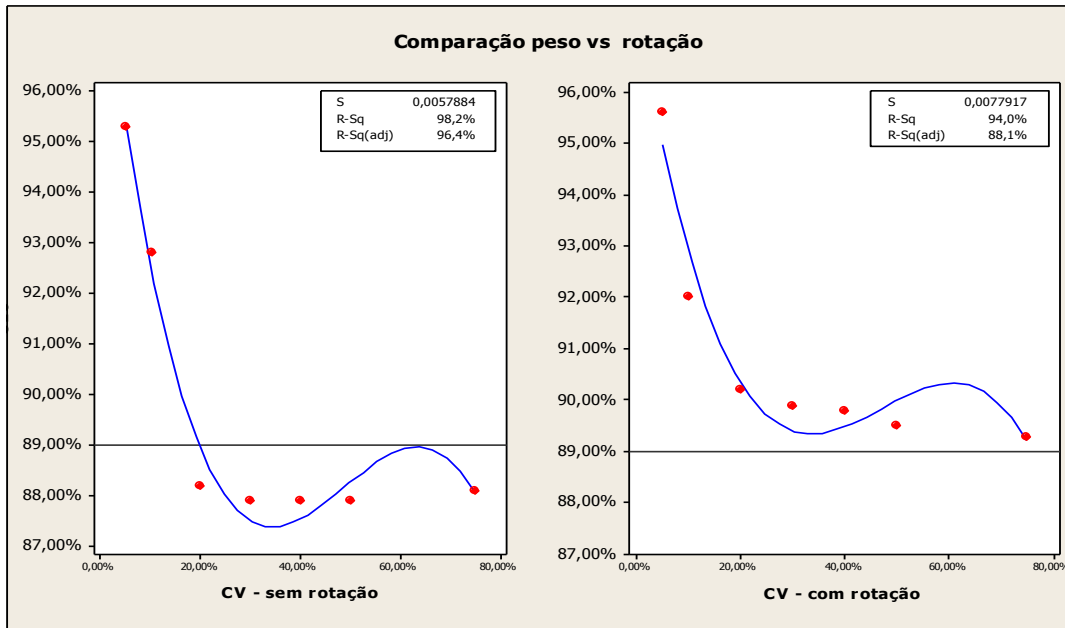


Figura 4.15 – Resultado dos modelos na comparação Peso VS. Rotação

Para testar se as médias dos modelos são iguais, foi realizado o *Paired T-Teste*. O resultado apresentado na Figura 4.16 mostra um P-Value $\geq 0,05$, comprovando que os valores são diferentes. Outra informação exposta nesta figura é a sobreposição das linhas indicando os resultados dos modelos ponderados, isto é, com peso e sem rotação (CP1) e com rotação e peso (FCP1). Conforme mencionado anteriormente, o modelo FCP1 é mais robusto, pois manteve o percentual de explicação do modelo acima de 89%.

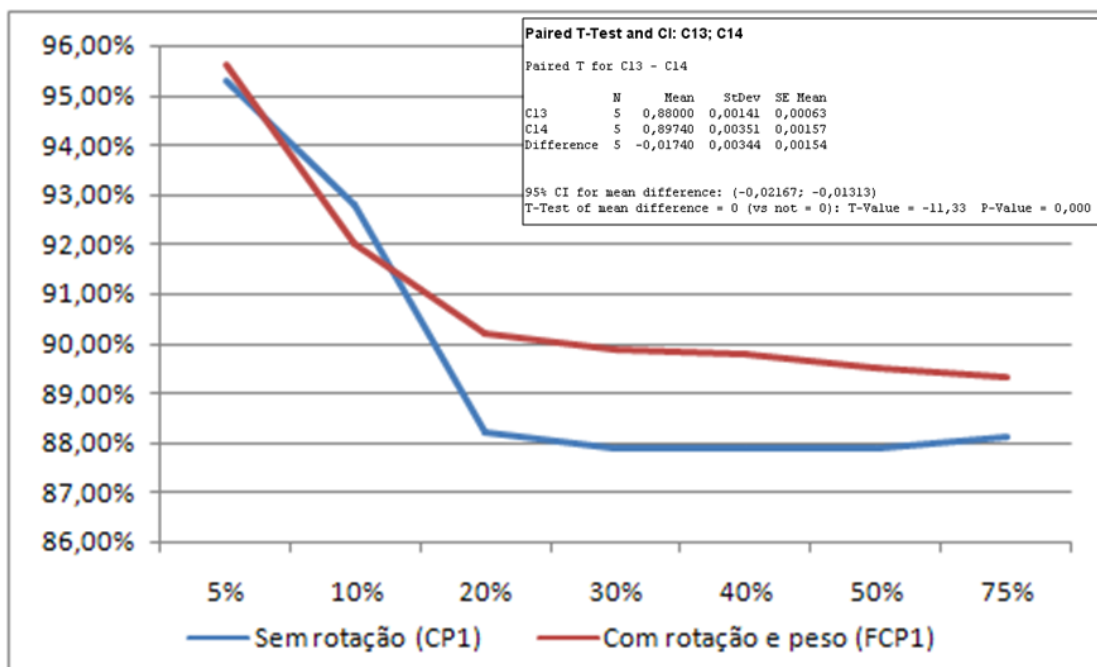


Figura 4.16 – Resultado dos modelos - Peso VS. Rotação

4.4. Considerações finais do capítulo

Diante do exposto neste capítulo, é possível verificar que os resultados obtidos nesta simulação são satisfatórios para este grupo de análise. O método matemático desenvolvido se mostrou adequado, uma vez que os resultados das métricas $R^2(\text{adj})$ e $R^2(\text{Pred})$ sempre se deslocaram para patamares superiores, atingindo percentuais de explicação e de previsibilidade acima de 85%. O método recomendado por Bratchell (1989) mostrou robustez, pois conseguiu manter os melhores resultados para variância acima de 10%.

O capítulo 5 apresentará o estudo de caso do aço AISI 52100 com dureza 50 HRC e a análise dos resultados obtidos através dos experimentos. Será apresentado também, antes do estudo de caso, o processo de torneamento, as máquinas, materiais e instrumentos utilizados neste estudo, bem como, o arranjo experimental e algumas análises.

5. Estudo de caso AISI 52100 – aço 50 HRC

Este estudo tem por objetivo averiguar a eficiência do método desenvolvido para filtrar as incertezas que afetam as variáveis de resposta utilizando como base de testes o processo de torneamento do aço ABNT 52100 endurecido. Para atingir o objetivo desta seção, utilizou-se a metodologia de projeto de experimentos e os valores mensurados para as variáveis de resposta R_a (rugosidade média aritmética), R_y (rugosidade máxima), R_z (rugosidade média), R_q (rugosidade média quadrática) e R_t (rugosidade total) para iniciar uma análise dos resultados que demonstre a robustez do projeto.

No entanto, antes de entrar no cerne da questão que envolve o estudo de caso do aço AISI 52100, este capítulo abordará toda parte inerente ao planejamento do experimento que envolve o processo de torneamento, o material utilizado, o modelo de experimento adotado, destacando-se as variáveis de controle e as variáveis de resposta consideradas para este trabalho e também, as máquinas, ferramentas e instrumentos utilizados na realização dos experimentos e na coleta de dados. Em seguida, aborda-se a execução dos experimentos e as análises.

A análise dos resultados foi dividida em três etapas: a primeira trata do processo de modelagem de todas as variáveis de resposta medidas ou calculadas para este trabalho. Procura-se, nesta etapa, representar matematicamente um par de variáveis de resposta ($R_a R_q$) e em seguida todas as cinco respostas (R_a, R_y, R_z, R_q, R_t). Deste modo, foram utilizadas a metodologia de superfície de resposta (MSR) e o método de mínimos quadrados ponderados. A segunda parte da análise trata do processo de otimização das variáveis de resposta. Portanto, o método (EQMM) foi aplicado e seus resultados comparados aos obtidos pelo método desenvolvido. Por fim, a terceira etapa trata do experimento de confirmação que foi executado para verificar se o ponto de ótimo indicado pelo método desenvolvido realmente obtém os valores esperados para as variáveis de resposta conforme previsto pelo modelo adotado.

5.1. Processo de Torneamento

O torneamento é um processo mecânico de usinagem destinado à obtenção de superfícies de revolução com auxílio de uma ou mais ferramentas monocortantes. Para tanto, a peça gira em torno do eixo principal de rotação da máquina e a ferramenta se desloca simultaneamente segundo uma trajetória coplanar com o referido eixo (ABNT – NBR 6175 TB 83, 1971). O corte normalmente contínuo e o movimento simultâneo da peça e da

ferramenta são características marcantes do processo de torneamento, diferenciando-o dos demais processos de usinagem. A Figura 5.1 mostra uma representação do esquema do processo de torneamento.

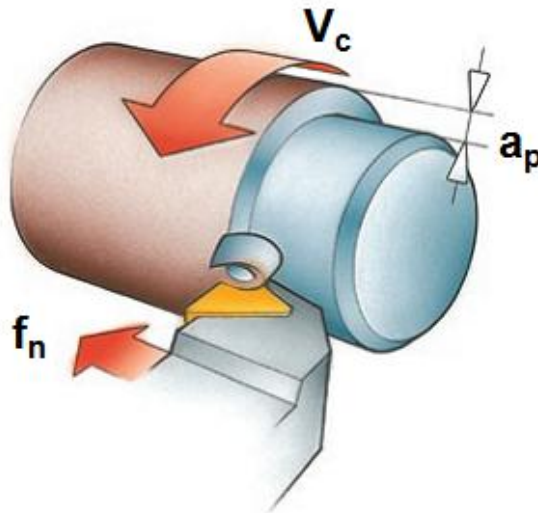


Figura 5.1 – Representação esquemática do processo de torneamento

Fonte: Catálogo Sandvik

As operações de torneamento podem ser classificadas quanto à forma da trajetória da ferramenta em torneamento retilíneo ou torneamento curvilíneo. Também podem ser classificadas quanto à finalidade do processo de usinagem em torneamento de desbaste e torneamento de acabamento. O processo de torneamento do aço duro ABNT 52100 pode ser visualizado através da Figura 5.2.

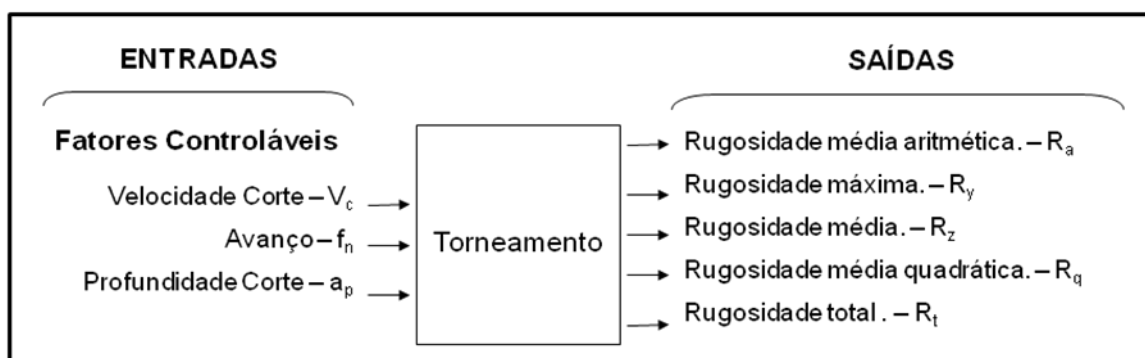


Figura 5.2 – Representação do processo de torneamento do aço duro ABNT 52100

As variáveis de controle adotadas para o processo de torneamento são os parâmetros de usinagem, a saber, velocidade de corte (V_c), avanço da ferramenta (f_n) e profundidade de corte (a_p). Estas variáveis são reconhecidamente as mais importantes uma vez que

influenciam fortemente o processo de torneamento de uma maneira geral, o acabamento superficial do produto e o desgaste de ferramenta.

A velocidade de corte (v_c) é a taxa na qual a superfície não cortada da peça passa pela aresta de corte da ferramenta, expressa normalmente em m/min. O avanço da ferramenta (f_n) é a distância percorrida pela ferramenta em cada revolução da peça. Esta variável é expressa em mm/rev. A profundidade de corte (a_p) expressa em mm, é a espessura ou profundidade de penetração da ferramenta medida perpendicularmente ao plano de trabalho. A escolha da faixa a ser utilizada para os parâmetros de usinagem durante a execução do trabalho depende de diversos fatores, entre eles o tipo de material a ser usinado, a máquina disponível para o trabalho e a ferramenta de corte selecionada. Os valores destes parâmetros de usinagem estão descritos na Tabela 5.1.

Parâmetros	Níveis				
	-1,68	-1,00	0,00	1,00	1,68
Velocidade de corte (m/min)	186,40	200,00	220,00	240,00	253,60
Avanço da ferramenta (mm/rev)	0,13	0,20	0,30	0,40	0,47
Profundidade de corte (mm)	0,10	0,15	0,23	0,30	0,35

Tabela 5.1. Parâmetros das variáveis de controle

As variáveis de resposta ou saídas adotadas para este trabalho são as variáveis que representam o acabamento superficial da peça no processo de manufatura. O acabamento superficial é fundamental onde houver exigências quanto a desgaste, atrito, corrosão, aparência, resistência à fadiga, transmissão de calor, propriedades óticas, escoamento de fluídos e superfícies de medição tais como blocos-padrão, micrômetros e paquímetros. O acabamento superficial é medido através da rugosidade superficial, a qual é expressa em micrometros (μm). A rugosidade superficial obtida varia diretamente em função do conjunto máquina-ferramenta adotado no processo de fabricação, bem como em função dos parâmetros de usinagem escolhidos.

No Brasil, os conceitos de rugosidade superficial são definidos pela norma ABNT NBR 6405/1988. Existem dois sistemas básicos de medição da rugosidade superficial da peça, a saber, o da linha média e o da envolvente. O sistema adotado pelas normas brasileiras é o sistema de medição da linha média ou sistema M. Neste sistema de medição todas as

grandezas são definidas a partir de uma linha de referência, a linha média. A linha média é definida como uma linha disposta paralelamente à direção geral do perfil, dentro do percurso de medição, de tal modo que a soma das áreas superiores, compreendida entre ela e o perfil efetivo, seja igual à soma das áreas inferiores. A Figura 5.3 exemplifica a definição da linha média.

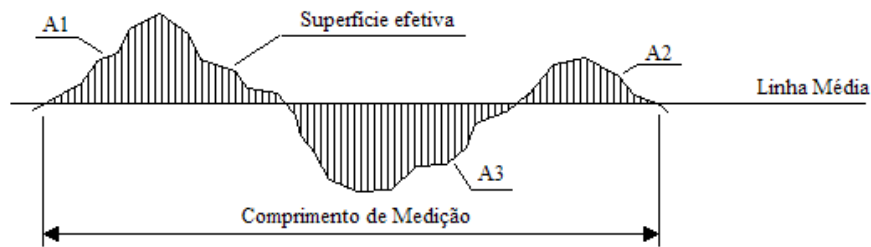


Figura 5.3 – Regra para definição da linha média

Fonte: Salgado Jr. (2010)

$$A_1 + A_2 = A_3 \quad (5.1)$$

Foram escolhidas as medidas de rugosidade superficial R_a , R_y , R_z , R_q e R_t para também compor a análise deste trabalho. Estas variáveis são diferentes formas de medir a rugosidade de uma superfície e suas principais características serão detalhadas a seguir.

- Rugosidade Média Aritmética (R_a)

É a média aritmética dos valores absolutos das ordenadas dos afastamentos dos pontos do perfil de rugosidade, em relação à linha média, dentro do comprimento de medição (l_m). A Figura 5.4 representa a forma de cálculo da rugosidade média aritmética (R_a).

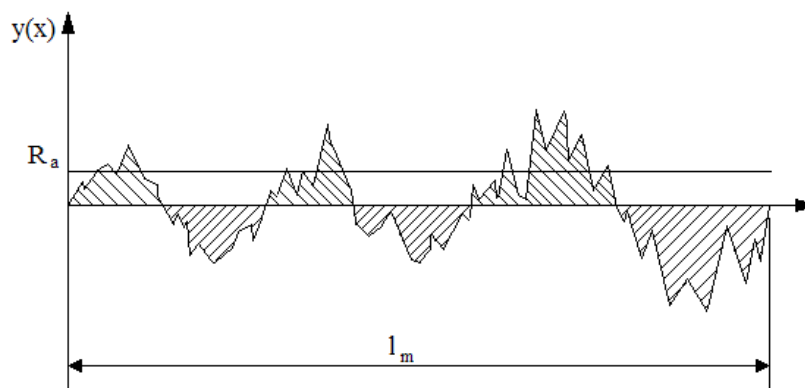


Figura 5.4 – Representação do cálculo de R_a

Fonte: Salgado Jr. (2010)

R_a pode ser calculada através da equação:

$$R_a = \frac{1}{l_m} \int_0^{l_m} |\gamma_i| dx \quad (5.2)$$

O parâmetro R_a é amplamente utilizado, sendo aplicável na maioria dos processos de fabricação. Porém, somente o parâmetro R_a não é capaz de descrever totalmente uma superfície. Sua desvantagem é evidenciada quando um vale ou pico não típico é detectado na superfície, porém não interfere no cálculo do valor médio, mantendo praticamente oculto o defeito. Por este motivo é aconselhável, para determinadas aplicações, usar outro parâmetro de rugosidade.

- Rugosidade Média Quadrática (R_q)

É o valor médio quadrático de todos os desvios do perfil de rugosidade em relação à linha média, dentro do comprimento de medição l_m . É um parâmetro muito similar ao R_a . A Figura 5.5 representa a forma de cálculo de R_q .

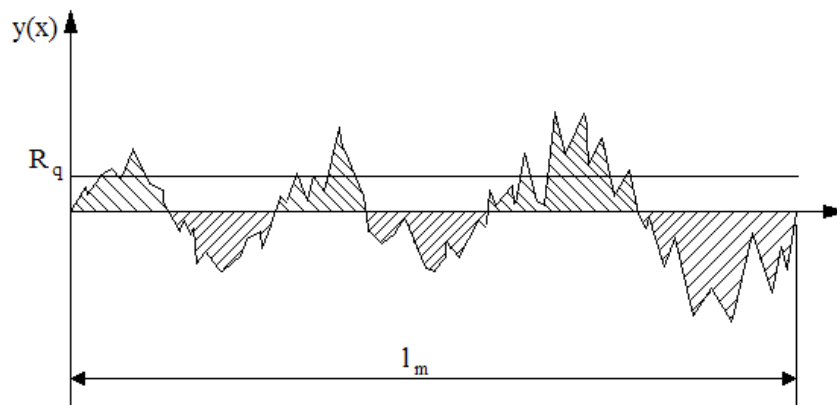


Figura 5.5 – Representação do cálculo de R_q

Fonte: Salgado Jr. (2010)

A rugosidade média quadrática (R_q) pode ser definida pela equação abaixo:

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{l_m} \int_0^{l_m} y_i^2 dx} \quad (5.3)$$

Ou, aproximadamente pode ser considerada como:

$$R_q \approx 1,11 \text{ a } 1,25 R_a \quad (5.4)$$

- Rugosidade Máxima (R_y)

É o maior valor das rugosidades parciais (Z_i) dentre as obtidas nos diversos comprimentos de amostragem (l_e) que se apresentam no comprimento de medição (l_m). Como exemplo, considere a Figura 5.6. Entre cinco comprimentos de amostragem consecutivos, o maior valor da rugosidade parcial Z_i ocorre no segundo *cut-off*. Neste caso, $R_y = Z_2$.

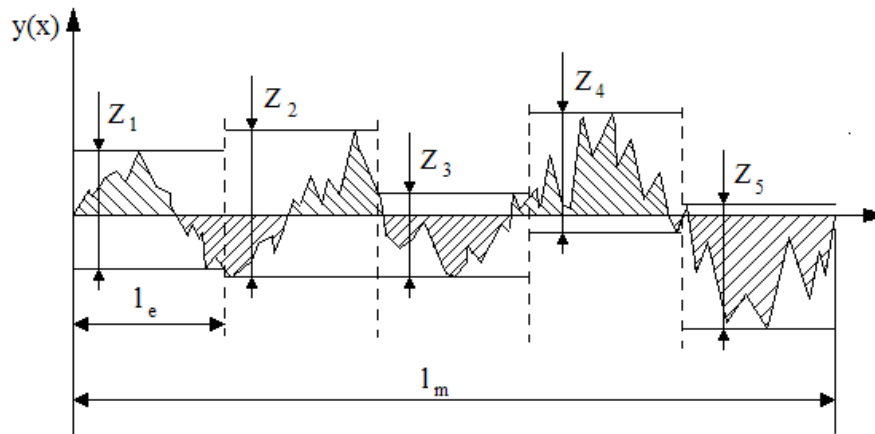


Figura 5.6 – Representação do cálculo de R_y e R_z

Fonte: Salgado Jr. (2010)

O parâmetro R_y tem grande aceitação uma vez que informa sobre a máxima deterioração da superfície vertical da peça e fornece informações complementares ao parâmetro R_a . Individualmente, o parâmetro R_y também não apresenta informação suficiente a respeito da superfície, uma vez que diversas formas de rugosidade podem apresentar o mesmo valor de R_y .

- Rugosidade Média (R_z)

Corresponde à média aritmética dos cinco valores de rugosidade superficial. Considerando a Figura 5.6 acima como exemplo, o cálculo do parâmetro R_z é realizado utilizando a equação abaixo. Este parâmetro informa a distribuição média da superfície vertical e define muito bem a superfície em perfis periódicos.

$$R_z = \frac{Z_1 + Z_2 + Z_3 + Z_4 + Z_5}{5} \quad (5.5)$$

- Rugosidade Total (R_t)

Corresponde à distância vertical entre o pico mais alto e o vale mais profundo no

comprimento de medição (l_m), independentemente dos valores de rugosidade parcial (Z_i). A Figura 5.7 representa o cálculo da variável R_t . O parâmetro R_t tem o mesmo emprego do parâmetro R_y , porém com maior rigidez, uma vez que considera o comprimento de amostragem igual ao comprimento de medição.

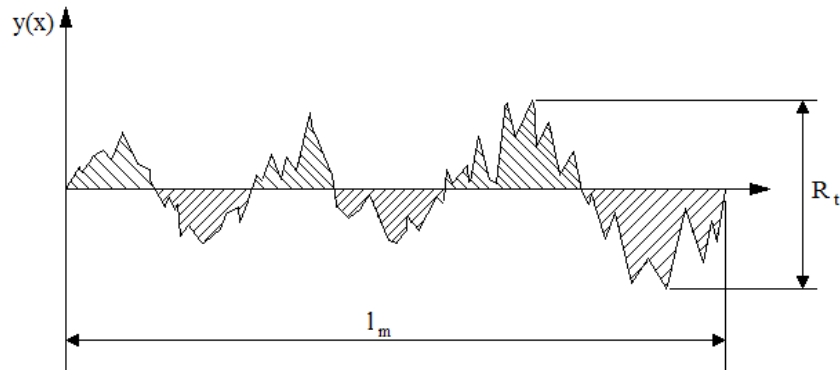


Figura 5.7 – Representação do cálculo de R_t

Fonte: Salgado Jr. (2010)

5.2. Máquina, materiais, ferramentas e instrumento de medição

Os experimentos foram realizados em um torno CNC Nardini Logic 175 com velocidade de rotação máxima de 4.000 rpm e potência de 5,5 kW, torre com oito posições e torque máximo de 200 Kgf.m. conforme Figura 5.8.



Figura 5.8 – Torno CNC Nardini

Os corpos de prova utilizados no processo de torneamento foram feitos com dimensões de 49 mm de diâmetro e 50 mm de comprimento. Todas as peças foram temperadas e revenidas na faixa de 180-250 °C. Após esse tratamento térmico, a dureza das peças ficou entre 49 e 52 HRC, até uma profundidade de três milímetros abaixo da superfície.

O material das peças utilizadas foi o aço ABNT 52100, com a composição química descrita na Tabela 5.2.

C	Si	Mn	Cr	Mo	Ni	S	P
1,03%	0,23%	0,35%	1,40%	0,04%	0,11%	0,00%	0,01%

Tabela 5.2 - Composição do aço ABNT 52100



Figura 5.9 - Corpos de prova do aço ABNT 52100

Para que os corpos de prova, apresentados na Figura 5.9, estivessem no seu estado temperado e revenido de acordo com as especificações, foi realizado o tratamento térmico nas dependências da Imbel – Indústria Bélica - de acordo com a fases a seguir:

- Pré-aquecimento por duas horas, à temperatura de 500 °C,
- Aquecimento por quarenta minutos, a 830 °C,
- Resfriamento por trinta minutos (martêmpera a 180 °C),
- Resfriamento ao ar até 80 °C,
- Revenimento por duas horas a 200 °C,
- Resfriamento ao ar até aproximadamente 30°C,
- Revenimento por duas horas a 200 °C,
- Resfriamento ao ar.

Com este tratamento térmico, os corpos de prova passaram a apresentar dureza média e profundidade de acordo com as especificações mencionadas anteriormente.

Quanto a ferramenta de corte, foi utilizada a ferramenta de cerâmica mista com geometria alisadora (*wiper*), com as seguintes características: Cerâmica mista ($Al_2O_3 + TiC$)

classe Sandvik Coromant CC 650 recoberta com uma camada de Nitreto de Titânio (TiN); Geometria ISO CNGA 12 04 08 S01525WH, com geometria *wiper*. Esta ferramenta é indicada para operações de acabamento em aços endurecidos, ferro fundido, ferros fundidos endurecidos e superligas resistentes ao calor, onde a combinação de resistência ao desgaste e boas propriedades térmicas são necessárias. A particularidade desta ferramenta é a geometria diferenciada no raio de ponta, que possibilita acabamentos melhores para um mesmo avanço e igual para avanços superiores. Como se vê na Figura 5.10.

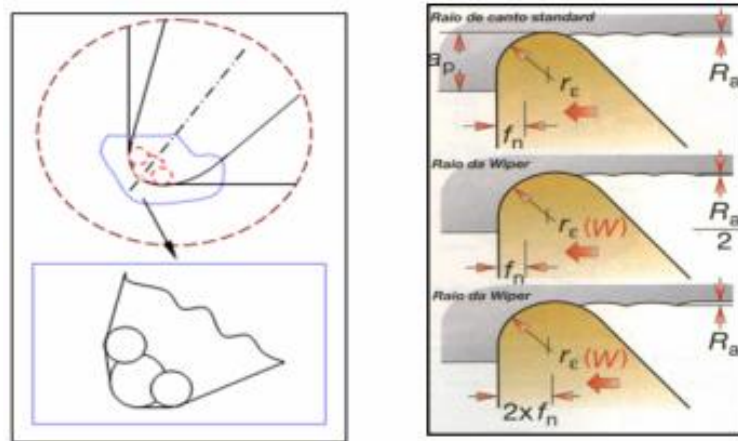


Figura 5.10 - Geometria do raio de ponta para ferramentas alisadora (Sandvik, 2010)

Segundo Pereira (2006) existe uma diferença muito grande de qualidade entre as peças usinadas com ferramenta de geometria alisadora e as peças usinadas com ferramenta convencional, principalmente diante da possibilidade de se utilizar avanços maiores. Nas análises de Pereira (2006) foi verificado que a rugosidade de R_a , utilizando-se ferramenta de geometria alisadora, os valores se mantiveram praticamente estáveis até o avanço de 0,30 mm/v e, a partir desse ponto verificou-se uma tendência ascendente da rugosidade. Porém, para os corpos de prova usinados com ferramenta convencional, os valores de rugosidade são diretamente proporcionais ao aumento do avanço, numa escala bastante ascendente até 0,30 mm/v, conforme pode ser verificado na Figura 5.11.

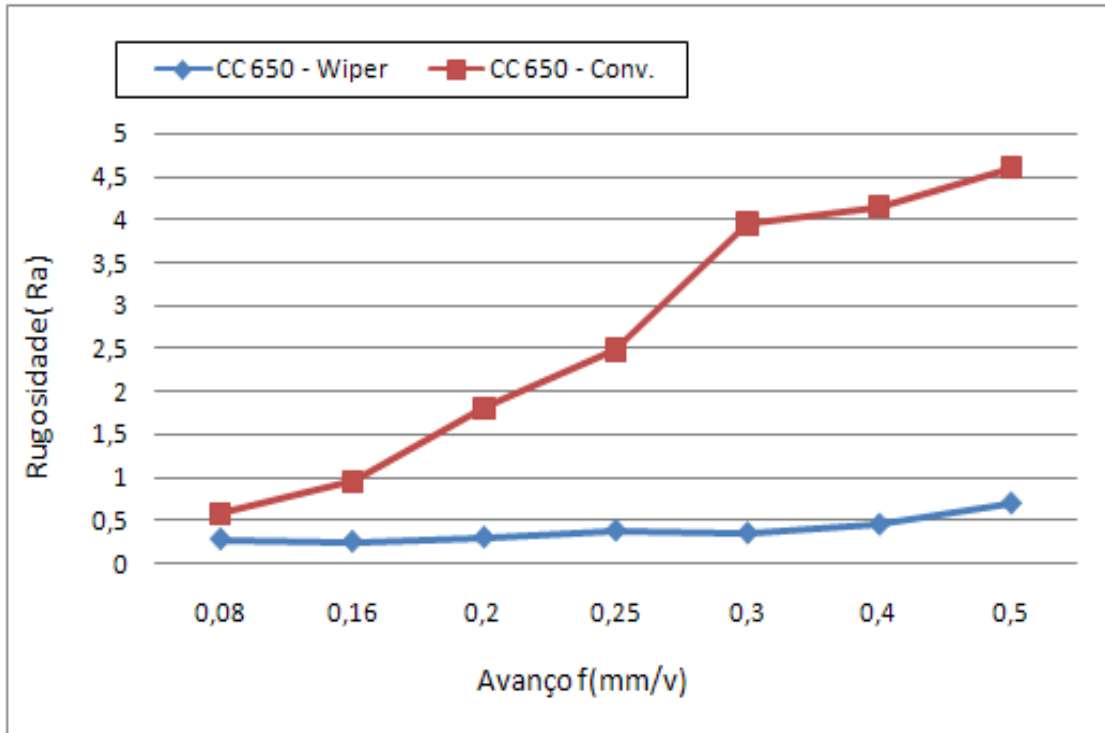


Fig. 5.11 – Rugosidade Ra ($V_c = 150$ m/min, $a_p = 0,2$ mm, ferramenta convencional e ferramenta alisadora), Adaptado de Salles (2004).

Durante a execução dos experimentos, algumas ferramentas sofreram pequenos danos, como lascamento, devido principalmente à alta velocidade e maior avanço. Situação parecida é confirmada por Noordin, Affandi e Hendriko (2008), que constataram que a vida da ferramenta, em seus experimentos, foi afetada pelos mesmos motivos. Portanto, eles preconizam que uma combinação de baixos parâmetros de corte é a melhor solução para tornar as ferramentas de cerâmica revestida durar mais tempo e, simultaneamente, gerar acabamento fino.

O uso de pastilhas Wiper aumenta a produtividade e mantém a rugosidade da superfície a menor possível. Essa característica particular pode ser utilizada para eliminar operações de retificação, o que representa uma grande vantagem para os fabricantes. A Figura 5.12 representa o processo de torneamento, do aço temperado AISI 52100 com pastilhas Wiper, realizado no Laboratório da Automação da Manufatura (LAM) da Universidade Federal de Engenharia de Itajubá. A máquina utilizada, conforme já mencionado neste trabalho, foi um Torno Nardini Logic 175 com comando numericamente computadorizado.

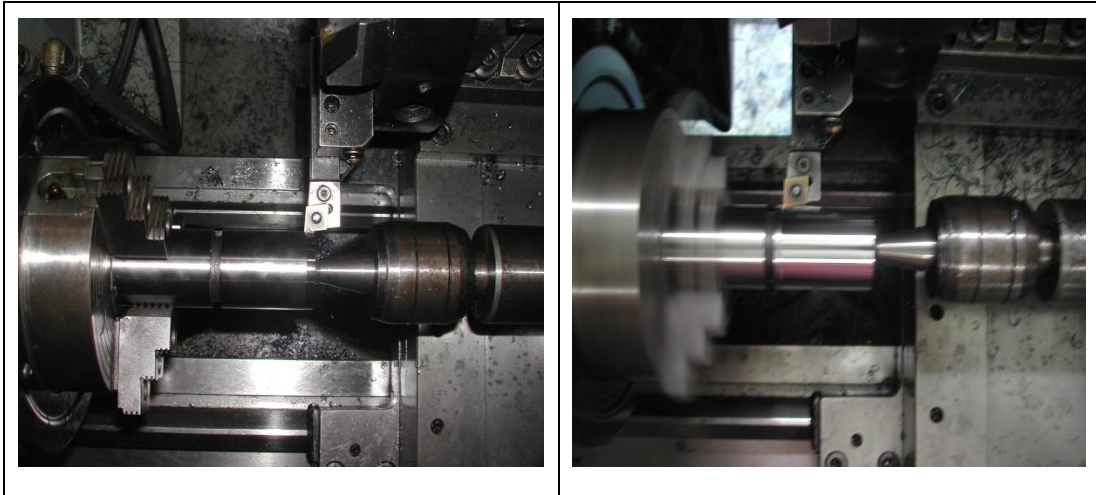


Fig. 5.12 – Processo de torneamento do aço 52100 com pastilha Wiper.

Logo após o torneamento dos corpos de prova, utilizou-se um rugosímetro MITUTOYO Surftest SJ-201P para determinar os valores de rugosidade de cada peça. Os valores medidos para as variáveis de resposta R_a , R_y , R_z , R_q e R_t foram lidos diretamente na tela do *laptop* e registrados em planilha eletrônica. Esta facilidade foi possível devido à instalação de um software fornecido pela Mitutoyo que permitiu a interface do aparelho com o computador. Este rugosímetro, apresentado na Figura 5.13, é periodicamente calibrado pelo laboratório de metrologia da Universidade Federal de Itajubá.



Figura 5.13 – Rugosímetro utilizado na leitura das medições.

5.3. Arranjo Experimental

Os experimentos para este trabalho foram executados de acordo com um arranjo do tipo CCD construído conforme planejamento apresentado na Tabela 5.1. Este arranjo é composto por 8 pontos fatoriais, 6 pontos axiais e 5 pontos centrais e considera $\rho = 1,682$. Na mesma tabela, $CP1^A$ corresponde aos escores do primeiro componente principal do par de variáveis $R_a R_q$, assim como, $CP1^B$ corresponde aos escores do primeiro componente principal

Os experimentos foram executados conforme planejamento descrito na página anterior e gerou um banco de dados para o desenvolvimento do trabalho. Os 19 corpos de prova do aço AISI 52100 com dureza 50 HRC e dimensões de 49 mm de diâmetro e 50 mm de comprimento foram usinados em um torno CNC Nardini Logic.

Em cada corpo de prova foram realizadas medições em 4 pontos distintos na região central da peça com alinhamento distantes 90° entre si. Em cada ponto foram realizadas 3 repetições na medição. Considerando-se as cinco respostas (R_a , R_y , R_z , R_q , R_t) foram realizadas, no total, 1.140 medições.

Após a execução dos experimentos foi gerado um banco de dados para o desenvolvimento do trabalho. A Tabela 5.4 apresenta o resumo dos valores obtidos para as variáveis de resposta, R_a , R_y , R_z , R_q , R_t . Os componentes principais $CP1^A$ e $CP1^B$, que representam os escores de componentes principais para o par de variáveis R_aR_q e os escores de componentes principais para as cinco respostas, respectivamente, foram obtidos com a aplicação da Eq. (2.14).

Conforme pode ser observado, na mesma tabela, os resultados do $R^2(\text{adj})$ atingiu valores acima de 80% somente para as respostas R_y , R_t e $CP1^B$, isto é, 82,68%, 84,46% e 81,02%, respectivamente. As demais respostas ficaram com os valores abaixo de 76%. Isto significa que a variância existente entre as variáveis de resposta estão com baixo percentual de explicação.

Os valores do $R^2(\text{pred})$, que demonstram o grau de previsibilidade do modelo, estão todos abaixo de 50%. Isto caracteriza uma oportunidade para se testar a capacidade do método em deslocar o valor desta métrica, assim como também do $R^2(\text{adj})$, para patamares superiores, garantindo um percentual satisfatório de explicação e de previsibilidade dos modelos em todas as respostas.

Ainda na Tabela 5.4, o *LOF* ou Falta de Ajuste (do inglês *lack-of-fit*) apresenta valores que variam de 0,003 a 0,620. Este índice, usado em regressão e DOE, avalia o ajuste do modelo. Quando o seu *p-value* é superior ao nível de significância, isto é 5%, há evidências de que o modelo explica adequadamente a variação da resposta, mostrando que não há falta de ajuste (MONTGOMERY, 2009).

Pârametros			Respostas					Componentes Principais	
Vc	Fn	d	R _a	R _y	R _z	R _q	R _t	CPI ^A	CPI ^B
-1	-1	-1	0,15	0,97	0,85	0,19	0,99	-2,09	-3,29
+1	-1	-1	0,22	1,13	1,07	0,26	1,16	-1,31	-2,38
-1	+1	-1	0,39	2,65	2,11	0,53	2,67	1,06	2,04
+1	+1	-1	0,38	2,34	1,87	0,50	2,42	0,90	1,35
-1	-1	+1	0,18	1,15	0,99	0,23	1,17	-1,73	-2,70
+1	-1	+1	0,17	1,09	1,00	0,22	1,13	-1,81	-2,80
-1	+1	+1	0,36	2,22	1,75	0,46	2,39	0,57	0,93
+1	+1	+1	0,41	2,65	2,09	0,53	2,73	1,25	2,18
-1,68	0	0	0,37	2,04	1,84	0,47	2,07	0,71	0,78
1,68	0	0	0,36	2,20	1,95	0,48	2,23	0,64	1,05
0	-1,68	0	0,10	0,74	0,63	0,12	0,79	-2,79	-4,20
0	1,68	0	0,53	3,46	2,48	0,68	3,52	2,76	4,53
0	0	-1,68	0,35	1,93	1,71	0,42	1,98	0,31	0,29
0	0	1,68	0,42	2,36	2,12	0,52	2,43	1,23	1,81
0	0	0	0,30	2,02	1,82	0,40	2,05	-0,10	0,22
0	0	0	0,29	2,15	1,73	0,39	2,19	-0,21	0,26
0	0	0	0,31	1,77	1,61	0,60	1,70	0,88	0,25
0	0	0	0,29	1,86	1,60	0,36	1,92	-0,36	-0,33
0	0	0	0,32	1,88	1,60	0,42	1,98	0,10	0,02
S			0,05	0,28	0,24	0,09	0,27	0,72	0,96
R ² ajustado			74,99%	82,68%	75,61%	65,23%	84,46%	73,57%	81,02%
R ² previsto			5,67%	38,92%	10,40%	20,40%	48,84%	14,81%	28,03%
P-Value LOF			0,003	0,062	0,022	0,620	0,132	0,149	0,004

Tabela 5.4 - Resumo de valores obtidos para todas as variáveis de resposta.

5.4. Análise de Correlação entre as Respostas

A estrutura de correlação entre as variáveis de resposta é um aspecto muito importante para o desenvolvimento deste trabalho e não pode ser negligenciada. Através do uso do software Minitab[®] foi possível observar que existe forte correlação entre as variáveis de resposta que compõem o conjunto de dados. Todos os valores estão próximos de um (1) e apresentam $P\text{-value} \leq 0,05$. Box *et al.* (1973) observam que quando ocorrem estes tipos de dependências, a análise multivariada pode ser uma escolha viável. A Tabela 5.5 mostra os resultados desta análise.

Respostas				
	Ra	Ry	Rz	Rq
Ry	0,968 0,000			
Rz	0,976 0,000	0,975 0,000		
Rq	0,946 0,000	0,915 0,000	0,936 0,000	
Rt	0,967 0,000	0,998 0,000	0,97 0,000	0,901 0,000

Tabela 5.5 - Análise de Correlação entre a respostas.

5.5. Análise de Componentes Principais

Na sequência, foi realizada uma análise dos componentes principais com o objetivo de verificar se é possível obter nas primeiras componentes principais mais de 90% das informações necessárias para o desenvolvimento do trabalho. Como pode ser observado na Tabela 5.6 o primeiro componente principal para o par de variáveis ($R_a R_q$), $CP1^A$, conseguiu explicar 97,3% da variância acumulada. Para $CP1^B$, que representa o conjunto de respostas ($R_a R_y R_z R_q R_t$), obteve-se o resultado 96,4% da variância acumulada. De acordo com Johnson e Wichern (2007), baseados nos critérios de Kaiser, o autovalor do componente principal deve ser maior que um para representar o conjunto original e, além disso, a variância acumulada explicada pelos componentes principais deve ser superior a 80%. Desse modo, o primeiro componente principal de cada conjunto de resposta é capaz de representar a superfície de respostas em estudo, não sendo necessário utilizar o segundo componente principal.

CP	CP1^A (RaRq)		CP1^B (Ra.Ry.Rz. Rq. Rt)				
Autovalor	1.946	0,054	4.821	0,123	0,031	0,024	0,001
Proporção	0,973	0,027	0,964	0,025	0,006	0,005	0,000
Acumulado	0,973	1,000	0,964	0,989	0,995	1,000	1,000
Variáveis	CP1	CP2	CP1	CP2	CP3	CP4	CP5
Ra	0,707	0,707	0,451	-0,075	-0,525	-0,711	0,101
Ry			0,451	0,36	0,388	0,062	0,716
Rz			0,451	0,05	-0,564	0,687	-0,063
Rq	0,707	-0,707	0,436	-0,811	0,375	0,075	-0,076
Rt			0,449	0,451	0,34	-0,111	-0,684

Tabela 5.6 - Análise de Componentes Principais

5.6. Análise Fatorial

A Tabela 5.7 apresenta a variância experimental conseguida com as medições da rugosidade da superfície da cada corpo de prova para cada variável de resposta.

Var R_a	Var R_y	Var R_z	Var R_q	Var R_t
0,0002	0,0232	0,0107	0,0004	0,0186
0,0010	0,0076	0,0097	0,0009	0,0065
0,0003	0,0533	0,0058	0,0001	0,0455
0,0004	0,0247	0,0217	0,0012	0,0287
0,0003	0,0059	0,0815	0,0004	0,0045
0,0004	0,0052	0,0060	0,0006	0,0063
0,0006	0,0119	0,0274	0,0009	0,0227
0,0006	0,0391	0,0150	0,0010	0,0302
0,0009	0,0191	0,0075	0,0012	0,0165
0,0004	0,0577	0,0197	0,0013	0,0503
0,0000	0,0015	0,0008	0,0000	0,0040
0,0016	0,0278	0,0584	0,0020	0,0176
0,0009	0,0102	0,0162	0,0007	0,0039
0,0010	0,0568	0,0480	0,0020	0,0485
0,0012	0,0413	0,0293	0,0018	0,0393
0,0010	0,0567	0,0010	0,0008	0,0467
0,0003	0,0034	0,0013	0,2239	0,1719
0,0005	0,0249	0,0056	0,0007	0,0098
0,0003	0,0074	0,0222	0,0006	0,0349

Tabela 5.7 - Variância Experimental

Para dar prosseguimento ao trabalho foi necessário calcular a incerteza multivariada do par de respostas ($R_a R_q$) e do conjunto das cinco respostas ($R_a R_y R_z R_q R_t$). Com a aplicação da equação (3.5) obteve-se o resultado da incerteza multivariada para o componente principal representado por U_{mCP1}^A e para calcular a incerteza multivariada representada por U_{mCP1}^B , foi utilizada a equação (5.8) que é uma versão expandida para contemplar as cinco variáveis de resposta.

Para a identificação da incerteza multivariada dos componentes principais rotacionados, U_{mFCP1}^A o procedimento acima foi repetido aplicando-se a equação (3.6). Para U_{mFCP1}^B adotou-se o mesmo algoritmo, no qual os autovetores da equação (5.8) foram substituídos por K , sendo K_1, K_2, \dots, K_n , os coeficientes dos fatores obtidos através da análise fatorial com o modelo de rotação Varimax. A Tabela 5.8 exhibe os resultados destes cálculos.

$U^2_{mCP1^A}$	$U^2_{mFCP1^A}$	$U^2_{mCP1^B}$	$U^2_{mFCP1^B}$
0,031	0,017	0,153	0,081
0,115	0,028	0,168	0,012
0,030	0,018	0,217	0,284
0,084	0,081	0,273	0,066
0,040	0,013	0,227	0,032
0,058	0,024	0,101	0,010
0,092	0,029	0,256	0,046
0,094	0,040	0,293	0,098
0,128	0,035	0,224	0,029
0,087	0,093	0,372	0,170
0,004	0,002	0,018	0,010
0,221	0,063	0,497	0,046
0,102	0,026	0,177	0,012
0,169	0,097	0,562	0,146
0,176	0,063	0,455	0,097
0,114	0,028	0,285	0,156
5,495	59,906	3,107	13,892
0,071	0,024	0,160	0,033
0,052	0,024	0,204	0,070

Tabela 5.8 – Cálculo da Incerteza Multivariada

O objetivo do modelo matemático desenvolvido é filtrar as incertezas do processo que afetam as variáveis de resposta e conseqüentemente contaminam as componentes principais. Os resultados expressos na Tabela 5.8 representam os valores da incerteza multivariada total existentes nos $CP1^A$, $FCP1^A$, $CP1^B$ e $FCP1^B$. Então, aplicando-se a Eq. (3.8) sobre os valores apresentados nesta tabela, foram estabelecidas as matrizes W para aplicar o método WLS (Mínimos Quadrados Ponderados) sobre os escores dos componentes principais.

A matriz W foi adotada como matriz inversa da variância para ponderar os escores dos componentes principais $CP1^A$ e $CP1^B$ e os escores dos componentes principais rotacionados $FCP1^A$ e $FCP1^B$. Os resultados gerados com o emprego da matriz de ponderação (W) podem ser verificados na Tabela 5.9.

WCP1 ^A	WFPC1 ^A	WCP1 ^B	WFPC1 ^B
31,827	58,129	6,550	12,405
8,663	35,363	5,959	81,421
33,670	56,995	4,611	3,518
11,965	12,341	3,658	15,134
24,697	74,514	4,401	31,489
17,231	40,865	9,906	104,410
10,904	34,586	3,913	21,583
10,669	25,288	3,410	10,207
7,806	28,459	4,461	34,057
11,486	10,776	2,685	5,872
236,266	580,988	57,110	97,520
4,532	15,964	2,013	21,822
9,789	38,956	5,658	83,568
5,928	10,290	1,781	6,847
5,695	15,922	2,196	10,339
8,774	35,403	3,504	6,401
0,182	0,017	0,322	0,072
14,024	42,291	6,232	30,193
19,164	42,008	4,894	14,275

Tabela 5.9 – Cálculo do peso

5.7. Resultados e Discussão

Nesta seção serão analisados e discutidos os resultados correspondentes aos escores do primeiro componente principal do par de variáveis $R_a R_q$ identificado como $CP1^A$ e, também, os escores do primeiro componente principal das cinco variáveis de resposta $R_a R_y R_z R_q R_t$ representados por $CP1^B$. Esta definição pode ser claramente visualizada na Tabela 5.6.

5.7.1. Análise e Resultados para $CP1^A$

Após a extração e preparação dos dados aplicou-se a metodologia de superfície de resposta (MSR), utilizando-se o software Minitab[®] 15, para gerar as informações expostas na Figura 5.15.

Response Surface Regression: CP1^A versus Vc; F; Ap

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for PCRaRq

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,09630	0,3204	0,301	0,771
Vc	0,08011	0,1941	0,413	0,689
F	1,46742	0,1941	7,561	0,000
Ap	0,09188	0,1941	0,473	0,647
VcxVc	0,02474	0,1941	0,127	0,901
FxF	-0,21746	0,1941	-1,120	0,292
ApxAp	0,05873	0,1941	0,303	0,769
VcxF	-0,02198	0,2536	-0,087	0,933
VcxAp	-0,00010	0,2536	-0,000	1,000
FxAp	0,00076	0,2536	0,003	0,998

S = 0,717246 PRESS = 29,8449

R-Sq = 86,78% **R-Sq(pred) = 14,81%** **R-Sq(adj) = 73,57%**

Analysis of Variance for CP1^A

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	9	30,4034	30,4034	3,37816	6,57	0,005
Linear	3	29,6105	29,6105	9,87017	19,19	0,000
Square	3	0,7890	0,7890	0,26301	0,51	0,684
Interaction	3	0,0039	0,0039	0,00129	0,00	1,000
Residual Error	9	4,6300	4,6300	0,51444		
Lack-of-Fit	5	3,6756	3,6756	0,73513	3,08	0,149
Pure Error	4	0,9543	0,9543	0,23858		
Total	18	35,0334				


Figura 5.15 – Modelo quadrático gerado pela MSR para a variável CP1^A


Conforme pode ser observado na Figura 5.15 o resultado para $R^2(\text{adj})$ e $R^2(\text{pred})$, obtidos através do modelo quadrático completo, não foram representativos, pois não conseguiram atingir um percentual satisfatório para explicar a variabilidade do modelo e o erro de previsão. Sendo assim, o modelo precisa ser ajustado para que o percentual de explicação justifique sua relação com uma ou mais variáveis preditoras. Para tanto, os escores de componentes principais (CP1^A) foram ponderados por uma matriz de peso $W(\text{CP1}^A)$, que é o inverso da variância. Num estudo sobre a qualidade das peças no processo de usinagem, Pérez (2002) modelou as respostas de R_a e R_q , usando como matriz de peso o inverso da incerteza (variância) das respostas originais. Neste trabalho, conforme mencionado anteriormente, utiliza-se o inverso da incerteza multivariada. Os resultados da ponderação de CP1^A podem ser observados na Figura 5.16.

Regression Analysis: CP1^A versus Vc.; Fn; ...

Weighted analysis using weights in WPC1^A

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-0,0737	0,2907	-0,25	0,806
Vc	0,1345	0,1476	0,91	0,386
Fn	1,3862	0,1480	9,37	0,000
Ap	0,0392	0,1569	0,25	0,808
Vc2	0,0464	0,1696	0,27	0,790
Fn2	-0,1451	0,1386	-1,05	0,323
Ap2	0,0189	0,1775	0,11	0,917
VcxFn	-0,0669	0,1811	-0,37	0,720
VcxAp	-0,0682	0,1802	-0,38	0,714
FnxAp	-0,0015	0,1762	-0,01	0,994

S = 2,01361 R-Sq = 96,9% **R-Sq(adj) = 93,7%** 

PRESS = 40,8220 **R-Sq(pred) = 96,49%** 

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	9	1127,94	125,33	30,91	0,000
Residual Error	9	36,49	4,05		
Lack of Fit	5	34,46	6,89	13,60	0,013
Pure Error	4	2,03	0,51		
Total	18	1164,43			

Figura 5.16 – Análise de regressão para CP1^A ponderada pela matriz de peso W(CP1^A)

De acordo com o resultado mostrado na tabela 5.16, o R²(adj) atingiu o valor de 93,7%, representando um incremento de 20,13 p.p. em relação ao estudo sem ponderação enquanto que o valor do R²(pred) subiu de 14,81% para 96,49%, um incremento de 81,68 p.p. Isso confirma que o modelo é capaz de expor as incertezas do processo e consegue, através da utilização de uma matriz de ponderação como inverso da incerteza, melhorar a explicação do modelo. Assim, a equação de regressão do modelo ponderado pode ser escrita conforme eq. (5.6).

$$\begin{aligned} \text{CP1}^A = & -0,074 + 0,135 \text{ Vc} + 1,390 \text{ Fn} + 0,039 \text{ Ap} + 0,046 \text{ Vc}^2 - 0,145 \text{ Fn}^2 \\ & + 0,019 \text{ Ap}^2 - 0,067 \text{ Vc} \times \text{Fn} - 0,068 \text{ Vc} \times \text{Ap} - 0,001 \text{ Fn} \times \text{Ap} \end{aligned} \quad (5.6)$$

Seguindo a recomendação de Bratchell (1989), que afirma que a rotação dos componentes principais pode propiciar uma visão diferente facilitando a interpretação dos fatores, foram extraídos novos valores para o par de variáveis R_aR_q. Para tanto, aplicou-se uma análise fatorial multivariada. O método de extração dos dados foi a análise de componentes principais e o tipo de rotação foi o Varimax. Assim, os escores dos componentes principais rotacionados para o par de variáveis de resposta passou a ser representado por

FCP1^A. A Figura 5.17 mostra os resultados obtidos com a aplicação do método recomendado por Bratchell.

Response Surface Regression: FCP1^A versus Vc; F; Ap

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for FCP1^A

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,540635	0,4599	1,176	0,270
Vc	0,025371	0,2786	0,091	0,929
F	0,669158	0,2786	2,402	0,040
Ap	0,064486	0,2786	0,231	0,822
Vc*Vc	-0,162842	0,2787	-0,584	0,573
F*F	-0,305855	0,2787	-1,098	0,301
Ap*Ap	-0,283458	0,2787	-1,017	0,336
Vc*F	-0,007403	0,3640	-0,020	0,984
Vc*Ap	0,045488	0,3640	0,125	0,903
F*Ap	-0,101463	0,3640	-0,279	0,787

S = 1,02961 PRESS = 17,1867

R-Sq = 47,00%

R-Sq(pred) = 4,52% R-Sq(adj) = 0,00%

Analysis of Variance for FCP1^A

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	9	8,4592	8,45916	0,93991	0,89	0,570
Linear	3	6,1807	6,18075	2,06025	1,94	0,193
Square	3	2,1791	2,17907	0,72636	0,69	0,583
Interaction	3	0,0994	0,09935	0,03312	0,03	0,992
Residual Error	9	9,5408	9,54084	1,06009		
Lack-of-Fit	5	0,3614	0,36139	0,07228	0,03	0,999
Pure Error	4	9,1794	9,17945	2,29486		
Total	18	18,0000				

Figura 5.17 – Modelo quadrático gerado pela MSR para a variável FCP1^A

O objetivo de melhorar as respostas do modelo não foi alcançado, pois o valor de R²(adj) foi reduzido para zero e o R²(pred) apresentou um valor bastante reduzido, conforme pode ser observado na Figura 5.17.

O resultado negativo deste modelo abre espaço para testar a eficiência do modelo matemático desenvolvido. Os escores de FCP1^A foram ponderados pela matriz W(FCP1^A) que representa o inverso da incerteza multivariada dos componentes principais rotacionados (U_mFCP1^A). Assim, a equação de regressão do modelo ponderado pode ser escrita conforme eq. (5.7).

$$\begin{aligned} \text{FCP1}^A = & -0,181 + 0,007 Vc + 0,672 Fn - 0,002 Ap. + 0,054 Vc^2 - 0,002Fn^2 \\ & - 0,093 Ap^2 - 0,003 Vc \times Fn + 0,021 Vc \times Ap - 0,128 Fn \times Ap \end{aligned} \quad (5.7)$$

Deste modo, os resultados desta aplicação estão apresentados na figura 5.18.

Regression Analysis: FCP1^A versus Vc.; Fn; ...

Weighted analysis using weights in WFPC1^A

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-0,1810	0,1118	-1,62	0,140
Vc.	0,00742	0,06939	0,11	0,917
Fn	0,67162	0,06105	11,00	0,000
Ap.	-0,00185	0,06706	-0,03	0,979
Vc2	0,05435	0,07352	0,74	0,479
Fn2	-0,00174	0,05503	-0,03	0,975
Ap2	-0,09326	0,06916	-1,35	0,210
VcxFn	-0,00340	0,07721	-0,04	0,966
VcxAp	0,02127	0,07499	0,28	0,783
FnxAp	-0,12797	0,07414	-1,73	0,118

S = 1,30370 R-Sq = 97,0% **R-Sq(adj) = 94,0%** 


PRESS = 15,8980 **R-Sq(pred) = 96,90%** 

Figura 5.18 – Análise de regressão para FCP1^A ponderada pela matriz de peso W(FCP1^A)

O resultado apresentado na Figura 5.18 confirma a capacidade do método em filtrar as incertezas do processo. Esta afirmação está sustentada pelo percentual de 94% de explicação obtido para o $R^2(\text{ad})$ e pelo percentual de 96,90% obtido para o $R^2(\text{pred})$. A combinação do método com a rotação dos componentes principais, além de elevar o percentual do coeficiente de determinação ajustado, manteve a análise de Falta de Ajuste (LOF) com $P\text{-Value} \geq 0,05$, o que indica que o modelo é adequado. Esta análise pode ser observada na Tabela 5.10.

Source	DF	SS	MS	F	P
Regressão	9,000	497,576	55,286	32,530	0,000
Erro residual	9,000	15,297	1,700		
Falta de ajuste	5,000	9,492	1,898	1,310	0,409
Erro puro	4,000	5,804	1,451		
Total	18,000	512,872			

Tabela 5.10 – Análise da Falta de ajuste

5.7.2. Análise e Resultados para CP1^B

Esta análise abrange um conjunto de dados que envolve todas as variáveis de resposta contempladas neste estudo, isto é R_a ; R_y ; R_z ; R_q ; R_t . O que motiva esta análise é investigar se o modelo matemático desenvolvido para duas respostas proporciona o mesmo efeito para cinco respostas. Sendo assim, a equação (3.5) desenvolvida para evidenciar a incerteza multivariada de um par de respostas ($U^2_mCP1^A$) foi expandida para as cinco respostas ($U^2_mCP1^B$). Esta modificação pode ser visualizada na equação (5.8).

$$\begin{aligned}
u_m^2(PC_{1R_aR_yR_zR_qR_t}) &= \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right)^2 u^2(x_1) + \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right)^2 u^2(x_2) + \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right)^2 u^2(x_3) + \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right)^2 u^2(x_4) + \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right)^2 u^2(x_5) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right) u(x_1) \times u(x_2) \times r(x_1, x_2) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right) u(x_1) \times u(x_3) \times r(x_1, x_3) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right) u(x_1) \times u(x_4) \times r(x_1, x_4) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right) u(x_1) \times u(x_5) \times r(x_1, x_5) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right) \times \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right) u(x_2) \times u(x_3) \times r(x_2, x_3) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right) \times \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right) u(x_2) \times u(x_4) \times r(x_2, x_4) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right) \times \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right) u(x_2) \times u(x_5) \times r(x_2, x_5) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right) \times \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right) u(x_3) \times u(x_4) \times r(x_3, x_4) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right) \times \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right) u(x_3) \times u(x_5) \times r(x_3, x_5) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right) \times \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right) u(x_4) \times u(x_5) \times r(x_4, x_5)
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Para calcular a incerteza multivariada para os escores obtidos através da análise fatorial com rotação, os autovetores da equação (5.8) devem ser substituídos por K , sendo K_1, K_2, \dots, K_n , os coeficientes dos fatores obtidos por rotação Varimax.

A Figura 5.19 exibe os resultados para $CP1^B$ obtidos através da Metodologia de Superfície de Resposta.

Response Surface Regression: $PC1^B$ versus Vc; Fn; Ap

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for $PC1^B$

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,13390	0,4273	0,313	0,761
Vc	0,13223	0,2589	0,511	0,622
Fn	2,36985	0,2589	9,155	0,000
Ap	0,17857	0,2589	0,690	0,508
Vc*Vc	0,01045	0,2589	0,040	0,969
Fn*Fn	-0,25479	0,2589	-0,984	0,351
Ap*Ap	0,05805	0,2589	0,224	0,828
Vc*Fn	-0,03171	0,3382	-0,094	0,927
Vc*Ap	0,11627	0,3382	0,344	0,739
Fn*Ap	-0,05608	0,3382	-0,166	0,872

S = 0,956655 PRESS = 62,4599

R-Sq = 90,51%

R-Sq(pred) = 28,03% R-Sq(adj) = 81,02%

Analysis of Variance for $PC1^B$

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	9	78,5465	78,5465	8,7274	9,54	0,001
Linear	3	77,3738	77,3738	25,7913	28,18	0,000
Square	3	1,0313	1,0313	0,3438	0,38	0,773
Interaction	3	0,1414	0,1414	0,0471	0,05	0,984
Residual Error	9	8,2367	8,2367	0,9152		
Lack-of-Fit	5	7,9852	7,9852	1,5970	25,40	0,004
Pure Error	4	0,2515	0,2515	0,0629		
Total	18	86,7832				

Figura 5.19 – Modelo quadrático gerado pela MSR para a variável $CP1^B$

Sem aplicar a ponderação nos escores de componentes principais, pode-se notar que o coeficiente de determinação ajustado, $R^2(\text{adj})$, consegue explicar 81,02% da variabilidade do modelo, mas o $R^2(\text{pred})$ apresenta apenas 28,03% de previsibilidade. Todavia, se existe incerteza nas variáveis originais, haverá também nas componentes principais impedindo que o valor do coeficiente de determinação ajustado atinja valores mais altos.

Sendo assim, para determinar a incerteza multivariada embutida nos experimentos realizados, a equação (5.8) foi aplicada para destacar estes dados. Por meio destes valores foi possível determinar a matriz de ponderação, $W(CP1^B)$, que é o inverso da incerteza multivariada utilizada para ponderar os escores de $CP1^B$. Os resultados conseguidos com a ponderação de $CP1^B$ podem ser observados na Figura 5.20.

Regression Analysis: PC1^B versus Vc.; Fn.; ...

Weighted analysis using weights in WPC1^B

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,0299	0,4356	0,07	0,947
Vc.	0,0767	0,2376	0,32	0,754
Fn.	2,2809	0,2290	9,96	0,000
Ap.	0,0013	0,2430	0,01	0,996
Vc*Vc	0,0171	0,2522	0,07	0,948
Fn*Fn	-0,1638	0,2126	-0,77	0,461
Ap*Ap	-0,0631	0,2549	-0,25	0,810
Vc*Fn	-0,0047	0,2898	-0,02	0,987
Vc*Ap	-0,0280	0,2835	-0,10	0,923
Fn*Ap	-0,0356	0,2906	-0,12	0,905

S = 1,80668 R-Sq = 96,2% **R-Sq (adj) = 92,4%**

PRESS = 41,5857 **R-Sq (pred) = 94,64%**

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	9	746,229	82,914	25,40	0,000
Residual Error	9	29,377	3,264		
Lack of Fit	5	28,353	5,671	22,15	0,005
Pure Error	4	1,024	0,256		
Total	18	775,606			

Figura 5.20 – Análise de regressão para CP1^B ponderada pela matriz de peso W(CP1^B)

Comparando-se as Figuras 5.19 e 5.20 constata-se que o valor de R²(adj) passou de 81,02% para 92,4%, representando um crescimento de 11,02 pontos percentuais. O mesmo ocorre, de forma mais acentuada, com o R²(Pred.) que passou de 28,03% para 94,64%. Portanto, a utilização de uma matriz de peso para ponderar os escores dos componentes principais favorece um ajuste melhor, elevando o percentual de explicação do modelo. A equação de regressão do modelo ponderado pode ser escrita conforme equação (5.9).

$$\begin{aligned}
 \text{CP1}^{\text{B}} = & 0,030 + 0,077 \text{ Vc} + 2,28 \text{ Fn} + 0,001 \text{ Ap} + 0,017 \text{ Vc}^2 - 0,164 \text{ Fn}^2 \\
 & - 0,063 \text{ Ap}^2 - 0,005 \text{ Vc} \times \text{Fn} - 0,028 \text{ Vc} \times \text{Ap} - 0,036 \text{ Fn} \times \text{Ap}
 \end{aligned}
 \tag{5.9}$$

Diante da expectativa de melhorar ainda mais os resultados alcançados, decidiu-se seguir a recomendação de Bratchell e utilizar o método de rotação dos componentes principais para tentar melhorar a explicação dos modelos. Sendo assim, uma Análise Fatorial Multivariada com rotação Varimax foi aplicada para extrair os escores componentes principais das cinco variáveis de resposta que passou a ser representado por **FCP1^B**. Em

seguida, aplicou-se a metodologia de superfície de resposta (MSR), para analisar $FCP1^B$. Os resultados desta aplicação estão expostos na Figura 5.21.

Response Surface Regression: $FCP1^B$ versus Vc; Fn; Ap

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for $FCP1^B$

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-0,181599	0,3869	-0,469	0,650
Vc	0,043139	0,2343	0,184	0,858
Fn	0,874071	0,2343	3,730	0,005
Ap	0,092678	0,2343	0,395	0,702
Vc*Vc	0,009882	0,2344	0,042	0,967
Fn*Fn	0,179274	0,2344	0,765	0,464
Ap*Ap	0,063491	0,2344	0,271	0,793
Vc*Fn	0,005011	0,3062	0,016	0,987
Vc*Ap	0,155837	0,3062	0,509	0,623
Fn*Ap	-0,042370	0,3062	-0,138	0,893

S = 0,866042 PRESS = 14,4934

R-Sq = 62,50% **R-Sq(pred) = 19,48%** **R-Sq(adj) = 25,00%**

Analysis of Variance for $PC1BF$

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	9	11,2497	11,2497	1,24997	1,67	0,229
Linear	3	10,5765	10,5765	3,52551	4,70	0,031
Square	3	0,4644	0,4644	0,15478	0,21	0,889
Interaction	3	0,2088	0,2088	0,06961	0,09	0,962
Residual Error	9	6,7503	6,7503	0,75003		
Lack-of-Fit	5	0,6180	0,6180	0,12360	0,08	0,992
Pure Error	4	6,1323	6,1323	1,53306		
Total	18	18,0000				


Figura 5.21 – Modelo quadrático gerado pela MSR para a variável $FCP1^B$

Conforme pode ser observado, o resultado obtido para $R^2(\text{adj})$ com a rotação dos escores dos componentes principais explica apenas 25% da variabilidade do modelo e o $R^2(\text{pred})$ atingiu apenas 19,48%. A partir destes resultados percebe-se a existência de muita incerteza (variância) no modelo. Portanto, torna-se claro a necessidade de se conhecer as incertezas contidas no processo e utilizá-las, conforme indicado por Pérez (2002), como matriz de peso para ponderar os escores do componente principal. Então, os escores do componente principal rotacionado ($FCP1^B$) foram ponderados pela matriz de peso $W(FCP1^B)$, como inverso da variância. Os resultados desta ponderação podem ser observados na Figura 5.22.

Regression Analysis: FCPC1^B versus Vc.; Fn.; ...

Weighted analysis using weights in WFCP1^B

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,2632	0,1523	1,73	0,118
Vc.	-0,01161	0,07716	-0,15	0,884
Fn.	0,86454	0,06452	13,40	0,000
Ap.	0,02947	0,07552	0,39	0,705
Vc*Vc	-0,18831	0,07901	-2,38	0,041
Fn*Fn	0,05374	0,06991	0,77	0,462
Ap*Ap	-0,10354	0,07354	-1,41	0,193
Vc*Fn	0,06768	0,09914	0,68	0,512
Vc*Ap	0,11500	0,08676	1,33	0,218
Fn*Ap	-0,00134	0,09766	-0,01	0,989

S = 1,19448 R-Sq = 96,2% **R-Sq(adj) = 92,4%** 


PRESS = 13,6250 **R-Sq(pred) = 95,98%** 

Figura 5.22 – Análise de regressão para FCPC1^B ponderada pela matriz de peso

Com a aplicação do modelo matemático sobre o conjunto de dados rotacionados, foi possível elevar o percentual de explicação do coeficiente de determinação ajustado, $R^2(\text{adj})$, de 25% para 92,4%, assim como, também elevar o percentual do $R^2(\text{pred})$ de 19,48% para 95,98%. Esta combinação propiciou não só uma boa explicação da variabilidade do modelo, mas também, manteve a análise da Falta de Ajuste (*LOF*) com $P\text{-Value} \geq 0,05$, o que indica que o modelo é adequado. O resultado desta análise pode ser observado na Tabela 5.11.

Source	DF	SS	MS	F	P
Regressão	9	326,011	36,223	25,390	0,000
Erro residual	9	12,841	1,427		
Falta de ajuste	5	8,055	1,611	1,350	0,398
Erro puro	4	4,786	1,196		
Total	18	338,852			

Tabela 5.11 – Análise da Falta de Ajuste

A equação de regressão do modelo ponderado pode ser escrita conforme equação (5.10).

$$\begin{aligned} \text{FCP1}^{\text{B}} = & 0,263 - 0,012 Vc + 0,865 Fn + 0,030 Ap - 0,188 Vc^2 + 0,054 Fn^2 \\ & - 0,104 Ap^2 + 0,068 Vc \times Fn + 0,115 Vc \times Ap - 0,001 Fn \times Ap \end{aligned} \quad (5.10)$$

Para resumir e comparar os resultados obtidos nos dois conjuntos de dados CP1^A e CP1^B, utilizou-se um modelo fatorial completo, como pode ser visto na Tabela 5.12. Com esta abordagem, pode-se analisar a influência da presença ou ausência dos pesos ou rotação sobre a propriedade de explicação dos modelos. Considerando os casos "A" e "B" como duas repetições de planejamento fatorial completo 2², obteve-se os seguintes resultados.

Método	Peso	Rotação	R² adj.	R² pred.
CP1 ^A	Sem	Sem	73,57%	14,81%
WCP1 ^A	Com	Sem	93,70%	96,49%
FCP1 ^A	Sem	Com	0,00%	4,52%
WFCP1 ^A	Com	Com	94,00%	96,90%
CP1 ^B	Sem	Sem	81,02%	28,03%
WCP1 ^B	Com	Sem	92,40%	94,64%
FCP1 ^B	Sem	Com	25,00%	19,48%
WFCP1 ^B	Com	Com	92,40%	96,01%

Tabela 5.12 – Resumo dos resultados

A Figura 5.23 mostra o gráfico de Pareto e *Factorial Plot*. Nesta análise, conforme pode ser observado, a matriz de peso proposta pelo método de ponderação multivariada é mais importante para melhorar a explicação do modelo que a rotação Varimax. Mesmo que o fator de rotação e sua interação com a ponderação seja significativo, pode-se observar que o nível que maximiza R² adj é obtido sem rotação para este caso. Assim, embora esta conclusão não possa ser extrapolada ou generalizada para outros modelos, neste caso específico, seguiremos com a fase de otimização usando apenas o modelo ponderado dos escores dos componentes principais (WCP1^A) para avaliar a eficiência da abordagem de otimização EQMM (Erro Quadrático Médio Multivariado).

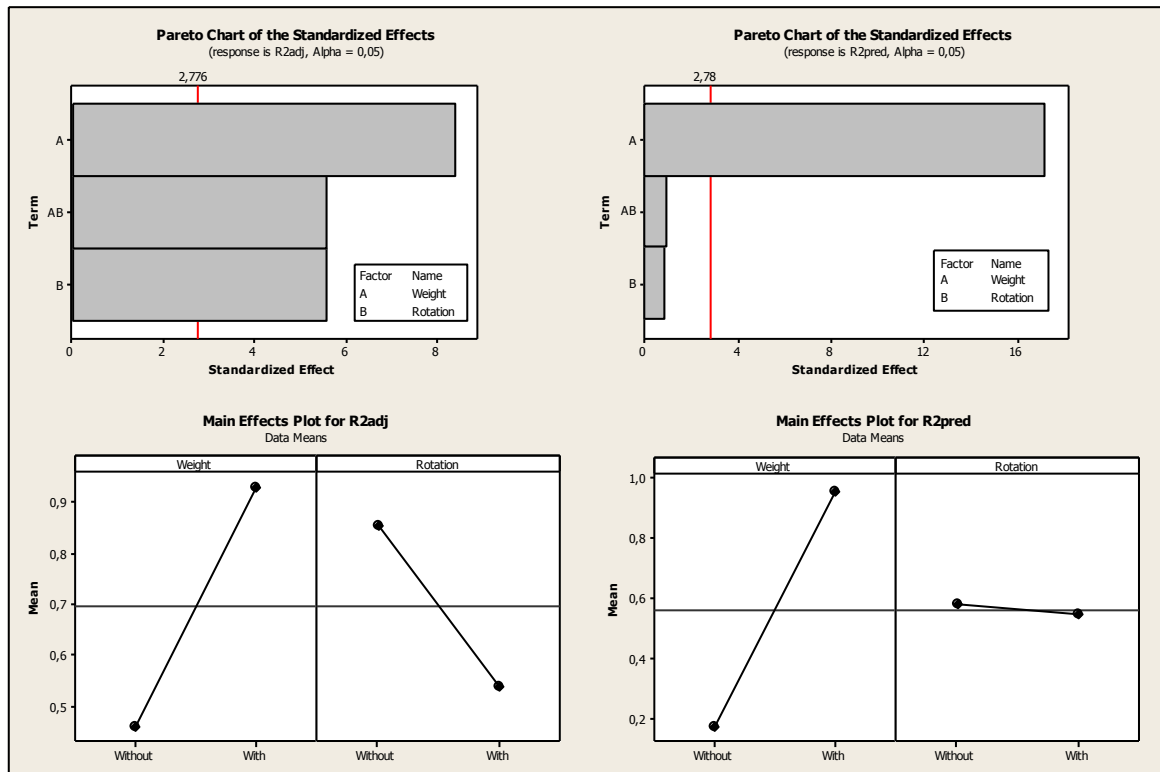


Figura 5.23– Análise Estatística da influência do peso e Rotação em R^2 adj e R^2 pred.

5.8. Otimização

Após a escolha do modelo que melhor representa a estratégia do método desenvolvido, iniciou-se a fase de análise que trata do processo de otimização das variáveis de resposta. O aplicativo Solver do software Excel[®] foi utilizado para resolver o problema que trata da otimização através do EQMM. Este tipo de otimização, baseada no conceito do Erro Quadrático Médio Multivariado, é capaz de descobrir a melhor combinação para atender todas as metas estabelecidas para um conjunto de respostas correlacionadas. Os coeficientes das cinco variáveis de resposta e dos componentes principais $CP1^A$ e $CP1^B$, extraídos do software Minitab[®] 15, foram utilizados para gerar a tabela de dados para aplicação do EQMM. Assim, a equação (5.11) foi aplicada na otimização das respostas das variáveis de resposta.

$$\text{Minimizar } EQMM_i = (PC_i - \zeta_{PC_i})^2 + \lambda_i \quad (5.11)$$

$$\text{Sujeito a : } \mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2$$

A partir dos coeficientes mostrados na Tabela 5.13 foi possível identificar a rugosidade prevista e os pontos de ótimo codificados e decodificados que compõe a Tabela 5.15.

	R_a	R_q	R_y	R_z	R_t	WCP1 ^A	WCP1 ^B
Constante	0,3054	0,4362	1,9484	1,6830	1,9808	-0,0737	0,0299
Vc	0,0065	0,0079	0,0359	0,0382	0,0359	0,1345	0,0767
Fn	0,1138	0,1521	0,7386	0,5129	0,7581	1,3862	2,2809
Ap	0,0066	0,0103	0,0540	0,0453	0,0677	0,0392	0,0013
Vc ^z	0,0063	-0,0034	-0,0113	0,0084	-0,0090	0,0464	0,0171
Fn ²	-0,0117	-0,0297	-0,0180	-0,1110	-0,0092	-0,1451	-0,1638
Ap ^z	0,0123	-0,0046	-0,0029	0,0171	0,0100	0,0189	-0,0631
Vc×Fn	-0,0018	-0,0022	0,0018	-0,0167	-0,0059	-0,0669	-0,0047
Vc×Ap	-0,0011	0,0016	0,0645	0,0473	0,0470	-0,0682	-0,0280
Fn×Ap	0,0026	-0,0034	-0,0309	-0,0291	-0,0151	-0,0015	-0,0356

Tabela 5.13 – Coeficientes estimados para o modelo quadrático completo

As metas de rugosidade foram definidas usando-se como base os resultados das medições aferidas para as respostas R_a , R_q , R_y , R_z e R_t , mostrado na Tabela 5.4. Sobre o melhor resultado conseguido durante o processo de usinagem, que diz respeito ao décimo primeiro experimento, foi determinado uma meta de redução de 20%.

	R_a	R_q	R_y	R_z	R_t
Média	0,310	0,409	1,925	1,622	1,975
Desv. Padrão	0,108	0,149	0,678	0,494	0,692
Alvo	0,075	0,095	0,59	0,51	0,63
Escore	-2,181	-2,107	-1,970	-2,250	-1,943

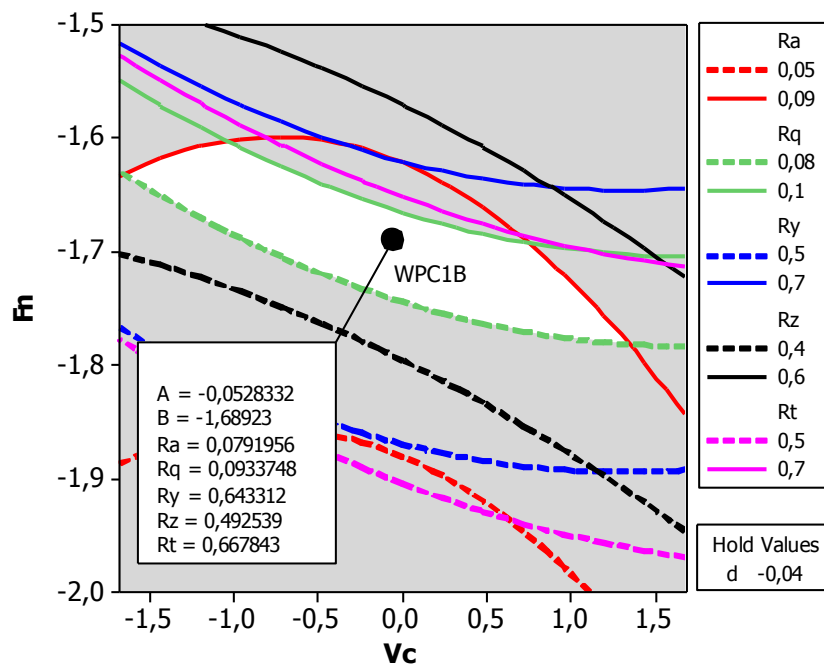
Tabela 5.14 – Definição das Metas de Rugosidade

De acordo com a Tabela 5.14, as metas para as rugosidade da superfície (ζ_{y_i}) são, respectivamente, 0,075, 0,095, 0,590, 0,510 e 0,630. Padronizando esses valores e usando os respectivos autovetores da Tabela 5.3, é possível calcular as metas para os componentes principais (ζ_{PC_i}). Assim, para o caso A $\zeta_{PC_1^A} = -3.032$ e para o caso B $\zeta_{PC_1^B} = -4.678$. A Tabela 5.15 mostra os resultados da otimização do EQMM considerando os componentes principais sem ponderação e as equações de regressão dos componentes principais com ponderação.

Modelo	PARÂMETROS ÓTIMOS						RESPOSTA PREVISTA NO PONTO DE ÓTIMO					
	R ² (adj)	R ² (pred)	Valores	Vc	f	Ap	Valores Alvo	Ra	Rq	Ry	Rz	Rt
							0,08	0,10	0,59	0,51	0,63	
CP1 ^a	73,57%	14,81%	Cod.	-0,09	-1,68	-0,06	Previsto	0,08	0,10	0,65	0,50	0,67
			Decod.	218,30	0,13	0,22	% Erro	7,33%	0,32%	9,90%	-2,37%	6,78%
WCP1 ^a	93,70%	96,49%	Cod.	-0,20	-1,67	-0,05	Previsto	0,08	0,10	0,65	0,50	0,68
			Decod.	215,90	0,13	0,22	% Erro	8,13%	1,58%	10,83%	-1,84%	7,35%
CP1 ^b	81,02%	28,03%	Cod.	-0,09	-1,68	-0,13	Previsto	0,08	0,10	0,64	0,50	0,67
			Decod.	218,30	0,13	0,22	% Erro	8,13%	0,11%	9,31%	-2,84%	6,35%
WCP1 ^b	92,40%	96,64%	Cod.	-0,05	-1,68	-0,04	Previsto	0,08	0,10	0,65	0,50	0,67
			Decod.	219,00	0,13	0,22	% Erro	7,33%	0,53%	10,20%	-1,92%	7,08%

Tabela 5.15 – Resultados da Otimização através do EQMM

Os resultados apresentados na Tabela 5.15 indicam que diferentes métodos de modelagem conduzem à previsões bem próximas de respostas ótimas, sem diferença significativa entre os resultados obtidos com o EQMM. No entanto, os escores dos componentes principais ponderados (WCP1^A e WCP1^B) apresentaram maior R² previsto. Então, é possível concluir que as soluções obtidas com as equações de regressão ponderada dos componentes principais, atingiram as metas propostas, através da abordagem do Erro Quadrático Médio Multivariado que mantém o maior nível de previsibilidade. Essas soluções (para o caso de A e B) são preferíveis, pois são mais consistentes e asseguram que os resultados da otimização serão reproduzidos nas situações práticas industriais. A Figura 5.24 mostra a sobreposição das cinco equações de rugosidade correlacionadas com os respectivos limites superiores e inferiores. A figura também apresenta a solução obtida com a aplicação da rotina de otimização através do EQMM para a função objetivo WCP1^B.

Figura 5.24 – Contour Plot do EQMM para função objetivo WCP1^B.

5.9. Experimentos de Confirmação

Os experimentos de confirmação foram realizados com o objetivo de verificar se os pontos de ótimo apontados pelo procedimento experimental empregado são realmente atingíveis. Para tanto, planejou-se realizar dez experimentos de confirmação para identificação da rugosidade superficial para R_a e R_q .

Os parâmetros adotados para estes experimentos podem ser notados na Tabela 5.16, a qual exibe, além dos parâmetros apontados pelo EQMM, os valores previstos para as respostas R_a e R_q .

Ponto de Ótimo Indicado - EQMM			Ponto de Ótimo Adotado			Valores Previstos	
Vc	F	Ap	Vc	F	Ap	R_a	R_q
215,91	0,13	0,22	216,00	0,13	0,22	0,08	0,10

Tabela 5.16 – Resultado do EQMM para as respostas em análise

Os ensaios foram repetidos para uma determinada condição ótima cujos valores dos parâmetros foram identificados pelo método de otimização EQMM.

Em cada corpo de prova, após o torneamento, ocorreram doze medições no centro da peça. Isto é, foram tomadas três medições em cada um dos quatro pontos da peça, distantes 90° entre si, conforme exemplificado na Figura 5.14 da seção 5.3.

Dando continuidade ao procedimento experimental foram usinados dez corpos de prova e as medições foram realizadas utilizando um rugosímetro Mitutoyo SurfTest SJ-201P. Este procedimento gerou um banco de dados com seiscentos valores, porém, devido ao tamanho da planilha, os mesmos foram resumidos e apenas as médias foram disponibilizadas conforme mostrado na Tabela 5.17.

Número do Experimento	Médias				
	R_a	R_y	R_z	R_q	R_t
1	0,12	0,81	0,74	0,15	0,84
2	0,12	0,77	0,68	0,14	0,79
3	0,11	0,76	0,68	0,14	0,79
4	0,10	0,76	0,69	0,13	0,78
5	0,10	0,76	0,70	0,13	0,82
6	0,12	0,75	0,67	0,15	0,79
7	0,13	0,78	0,71	0,15	0,80
8	0,10	0,61	0,58	0,12	0,66
9	0,10	0,73	0,64	0,13	0,74
10	0,11	0,73	0,66	0,13	0,79
Média	0,11	0,75	0,68	0,14	0,78

Tabela 5.17 – Rugosidade Média para as cinco respostas

Regression Analysis: Ra versus C13; C14; ...

Weighted analysis using weights in wra

The regression equation is

$$Ra = 0,309 + 0,0117 C13 + 0,106 C14 + 0,0057 C15 + 0,0027 C16 - 0,0134 C17 + 0,0035 C18 - 0,0071 C19 - 0,0062 C20 + 0,0041 C21$$

Predicted Values for New Observations

New Obs	Fit	SE Fit	95% CI	95% PI
1	0,085	0,012	(0,059; 0,111)	(-4,467; 4,638)
2	0,085	0,012	(0,059; 0,111)	(-4,467; 4,638)

Figura 5.25 – Análise do Intervalo de Confiança de Ra

Regression Analysis: Rq versus C13; C14; ...

Weighted analysis using weights in wRq

The regression equation is

$$Rq = 0,395 + 0,0123 C13 + 0,146 C14 + 0,0006 C15 + 0,0065 C16 - 0,0119 C17 - 0,0006 C18 - 0,0042 C19 - 0,0059 C20 - 0,0056 C21$$

Predicted Values for New Observations

New Obs	Fit	SE Fit	95% CI	95% PI
1	0,109	0,014	(0,076; 0,141)	(-4,316; 4,533)
2	0,109	0,014	(0,076; 0,141)	(-4,316; 4,533)

Figura 5.26 – Análise do Intervalo de Confiança de Rq

Diante do exposto nas Figuras 5.25 e 5.26 é possível verificar que os resultados obtidos nos experimentos de confirmação são satisfatórios para as respostas em análise. Observando-se as Figuras 5.27 e 5.28 percebe-se que todas as respostas posicionaram-se dentro do intervalo de confiança, com destaque para os valores obtidos para Ry, Rz e Rt.

One-way ANOVA: Var Ra; Var Ry; Var Rz; Var Rq; Var Rt

Source	DF	SS	MS	F	P
Factor	4	0,011034	0,002759	2,82	0,030
Error	90	0,088046	0,000978		
Total	94	0,099080			

S = 0,03128 R-Sq = 11,14% R-Sq(adj) = 7,19%

Level	N	Mean	StDev	Individual 95% CIs For Mean Based on Pooled StDev
Var Ra	19	0,00063	0,00041	(-----*-----)
Var Ry	19	0,02514	0,01997	(-----*-----)
Var Rz	19	0,02041	0,02142	(-----*-----)
Var Rq	19	0,01266	0,05116	(-----*-----)
Var Rt	19	0,03192	0,03764	(-----*-----)

Figura 5.27 – Análise do Intervalo de Confiança de todas as variáveis

Predicted Values for New Observations (R_y)

New Obs	Fit	SE Fit	95% CI	95% PI
1	0,756	0,076	(0,584; 0,927)	(-3,418; 4,930)

Predicted Values for New Observations (R_t)

New Obs	Fit	SE Fit	95% CI	95% PI
1	0,766	0,099	(0,542; 0,991)	(-2,976; 4,509)

Predicted Values for New Observations (R_z)

New Obs	Fit	SE Fit	95% CI	95% PI
1	0,625	0,060	(0,488; 0,762)	(-3,649; 4,899)

Figura 5.28 – Intervalo de Confiança de R_y, R_t e R_z

As figuras analisadas nesta seção mostram a eficiência do método matemático adotado que conseguiu prever o comportamento de todas as variáveis de resposta. Esta afirmação pode ser verificada através da comparação entre os valores previstos pelo modelo e o posicionamento das médias obtidas nos experimentos de confirmação, dentro dos limites dos intervalos de confiança, conforme mostrado na Tabela 5.18.

Previsão do Modelo		Experimentos de Confirmação			Valores Previstos	
Alvos		Médias	Limite inferior	Limite superior	Modelo Perez	Modelo Proposto
R _a	0,075	0,110	0,059	0,111	0,090	0,081
R _y	0,590	0,746	0,584	0,927	0,757	0,654
R _z	0,510	0,675	0,488	0,762	0,627	0,501
R _q	0,095	0,137	0,076	0,141	0,114	0,097
R _t	0,630	0,780	0,542	0,991	0,763	0,676

Tabela 5.18 – Previsão do modelo VS resultados dos experimentos

Todas as variáveis de resposta posicionaram-se dentro do intervalo de confiança. No entanto, para os três parâmetros R_y; R_z e R_t, que são mais sensíveis à dispersão por se basearem na amplitude, o método se mostrou mais eficiente.

O Teste Pareado com IC 95% foi aplicado para comparar o Modelo de Pérez e o Modelo Proposto. Este teste mostrou um $P\text{-value} = 0,054$, então pode-se concluir que ambos os métodos conduzem a resultados iguais. Mas a vantagem do modelo proposto é trabalhar

com componentes principais, enquanto que o Modelo de Pérez trabalha com respostas individuais.

5.10. Considerações finais do capítulo

Este capítulo abordou o estudo de caso do aço AISI 52100 abrangendo o desenvolvimento do estudo, os experimentos e a aplicação do modelo matemático proposto. Conforme foi observado, os resultados alcançados com a aplicação do modelo matemático destacam a sua aplicabilidade, pois foi capaz de melhorar o percentual de explicação e o percentual de previsibilidade em todos os modelos apresentados. O método de otimização também se mostrou capaz de indicar um ponto de ótimo realista, uma vez que todas variáveis analisadas ficaram dentro do intervalo de confiança.

6. Conclusão

Esta pesquisa apresentou um modelo estratégico para estimar a incerteza total que afeta todas as variáveis de resposta, usando o inverso da incerteza multivariada como matriz de ponderação para os escores dos componentes principais que são utilizados como substitutos do conjunto original de dados correlacionados. O principal objetivo desta proposta é alcançar uma explicação satisfatória para variância do modelo, elevando o percentual do coeficiente de determinação ajustado, $R^2(\text{adj})$, ao maior nível possível e conseqüentemente, reduzir o erro de previsão do modelo. Destaca-se a seguir algumas conclusões extraídas das seções anteriores de acordo com os resultados alcançados:

A matriz de peso apresenta forte influência sobre o modelo e eleva o resultado do $R^2(\text{adj})$ a nível satisfatório, isto é, acima de 80%. Por outro lado, a matriz de peso não reduz o erro de previsão (S) conforme esperado, mas conduz a uma melhoria da previsibilidade evidenciada a partir de maiores valores obtidos para R^2 previsto.

Seguindo a recomendação de Bratchell uma Análise Fatorial com rotação Varimax foi aplicada no conjunto de dados. Em ambos os casos, FCP1^A que representa os escores dos componentes principais para as variáveis de resposta $R_a R_q$ e FCP1^B que representa os escores dos componentes principais para as variáveis de resposta R_a ; R_y ; R_z ; R_q ; R_t , o resultado do $R^2(\text{adj})$ permaneceu abaixo do valor considerado satisfatório para explicar a variabilidade do modelo. A Análise Fatorial não se mostrou capaz de melhorar este resultado, conforme esperado. Todavia, quando FCP1^A e FCP1^B foram ponderados pela matriz de peso, os resultados de $R^2(\text{adj})$ atingiram os valores de 94% e 92,4% respectivamente. Outra situação que merece destaque é que este modelo se mostrou mais robusto para variâncias mais altas. Além disso, a Análise Fatorial com rotação Varimax manteve o *P-value* para o *lack-of-fit* acima dos 5%.

Considerando os resultados da otimização, foi possível observar que a abordagem do EQMM aplicada na otimização do torneamento do aço AISI 52100 endurecido produziu soluções muito próximas de todos os alvos. O ponto de ótimo para o modelo **A** ($R_a R_q$) é conseguido com $V_c = 216 \text{ m / min}$, $F_n = 0,13 \text{ mm / rev}$ e $A_p = 0,22 \text{ mm}$ e para o modelo **B**, que contempla as cinco respostas, $V_c = 219 \text{ m / min}$, $F_n = 0,13 \text{ mm / rev}$ e $A_p = 0,22 \text{ mm}$. Os resultados indicam que os diferentes métodos de modelagem produzem respostas ótimas bem próximas uma das outras, sem diferença significativa entre os resultados obtidos com o EQMM. No entanto, os escores dos componentes principais ponderados (WCP1^A e WCP1^B)

apresentaram maior R^2 previsto, sugerindo que as equações de regressão ponderada dos componentes principais atingiram as metas propostas, através da abordagem do Erro Quadrático Médio Multivariado, que mantém o maior nível de previsibilidade. Estas soluções são preferíveis porque são mais consistentes, assegurando que os resultados da otimização serão reproduzidas no contexto industrial.

Os experimentos de confirmação evidenciaram que o método matemático desenvolvido para ponderar os escores dos componentes principais, usando a matriz inversa da variância como matriz de peso, é eficiente. Através dos altos ajustes conseguidos para o R^2 garantiu-se que é possível prever o comportamento das variáveis de resposta. Os experimentos também evidenciaram que para as métricas R_y , R_z e R_t , que são mais sensíveis à dispersão por se basearem na amplitude, o método se mostrou mais eficiente.

É importante ressaltar que a qualidade dos resultados obtidos com a presente abordagem não pode ser extrapolada para diferentes materiais, ferramentas ou máquinas e são válidos para a faixa dos níveis adotados. No entanto, devido aos resultados alcançados, pode-se recomendá-lo na otimização de processos de manufatura.

6.1. Sugestões para trabalhos futuros

Este trabalho focou o desenvolvimento de um método para estimar a incerteza total ou, variância experimental, que afeta todas as variáveis de resposta, usando o inverso da incerteza multivariada como matriz de peso para ponderar os escores dos componentes principais, tendo como base de estudos os resultados do processo de torneamento do aço AISI 52100 - 50HRC. Todavia, com o intuito de aprimorar o método ou identificar as limitações a serem suprimidas, outros aspectos podem ser considerados em trabalhos futuros, tais como:

- Ajustar o modelo para o tratamento de dados com baixa correlação e simular alguns níveis para avaliar os resultados;
- Verificar se com a aplicação de outros métodos de rotação, conforme aconselhado por Bratchell, consegue-se melhores resultados para a explicação do modelo;
- Utilizar materiais com durezas diferentes e testar se existe limitação do modelo em relação a esta especificação;
- Averiguar a aplicabilidade do modelo em outros processos de manufatura, ampliando o histórico de aplicação e aumentando o conhecimento a respeito do modelo desenvolvido;

- Contemplar as variáveis não controláveis no trabalho e avaliar qual o percentual de ruído presente na incerteza total.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDREWS, D.T, *et al* (1996), *Comments on the relationship between principal components analysis and weighted linear regression for bivariate data sets*. **Chemometrics and Intelligent Laboratory System**.

ANDREWS, D.T, WENTZELL P.D, (1997), *Application of maximum likelihood principal component analysis: incomplete data sets and calibration transfer*. **Analytica Chimica ACTA**

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR 6175: Processos Mecânicos de Usinagem. Rio de Janeiro, 1971, 19p.

BOX,G.E.P.; HUNTER, W.G.; MACGREGOR, J.F. and ERJAVEC, J. *Some problems associated with the analysis of multiresponse data*, **Technometrics** 15 (1) (1973), pp. 33-51.

BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. (1987). *Empirical model-building and response surfaces*. New York, Wiley. (Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics).

BRATCHELL, N. (1989), *Multivariate Response Surface Modelling by Principal Components Analysis*. **Journal of Chemometrics**, v 3, pp. 579-588.

BRYMAN, A.; (1989), *Research Methods and Organization Studies*, Unwin Hyman Ltd, 283p.

CATEN, C. S. (1995). *Método de otimização de produtos e processos medidos por múltiplas características de qualidade* – Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-graduação em Engenharia de Produção, Porto Alegre, RS.

CHIAO, H.; and HAMADA, M. (2001) Analyzing experiments with correlated multiple responses. **J Qual Technol** 33(4):451–465

CHO B.R.. PARK C. (2005), Robust design modeling and optimization with unbalanced data, **Computers & Industrial Engineering** 48 173–180

DUBEY, A.K. and YADAVA, V., (2008), *Multi-objective optimization of Nd:YAG laser cutting of nickel-based superalloy sheet using orthogonal array with principal component analysis*, **Optics and Laser in Engineering** 46 (2) pp. 124-132.

GUM, *Guia para a Expressão da Incerteza de Medição*, segunda edição, 1996.

HAIR Jr., J.F. *et al*. *Multivariate Data Analysis*. 6th ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2006. 899 p.

JOHNSON, R. A., WICHERN, D. W. (2007), *Applied Multivariate Statistical Analysis*, New Jersey: Prentice-Hall, Inc., 6th ed., 773p.

KHURI, A. I., CORNELL, J. A. *Response surfaces: designs and analyse*. Marcel Dekker Inc, 2 ed, New York, USA, 510p., 1996.

- LAHDELMA, R., MAKKONEN, S., SALMINEN, P., (2006), Two ways to handle dependent uncertainties in multi-criteria decision problems, **The international Journal of Management Science**.
- LIAO, H. C. (2006), Multi-response optimization using weighted principal component. **International Journal Adv. Manuf. Technol**, n. 27, pp. 720-725.
- MARTÍNEZ, A., RIU, J., RIUS, F. X. (2001), Multiple analytical method comparison using maximum likelihood principal component analysis and linear regression with errors in both axes, **Analytica Chimica ACTA**
- MCFARLAND, J. and MAHADEVAN, S. (2008) *Error and variability characterization in structural dynamics modeling*, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 197 2621-2631
- MOITA NETO J. M. E MOITA G. C. (1998) *An Introduction Analysis Exploratory Multivariate Data* Departamento de Química - Universidade Federal do Piauí - 64.049-550 - Teresina – PI, p. 466 - 469
- MONTGOMERY, D. C. (2004), *Introdução ao Controle Estatístico da Qualidade*, John Wiley & Sons, 4 ed., 513p.
- MONTGOMERY, D. C. (2009), *Design and Analysis of Experiments*, John Wiley & Sons, 7th ed., New York, 699p.
- MONTGOMERY, D. C., RUNGER, G. C. (2003), *Applied Statistics and Probability for Engineers*, John Wiley & Sons, 3 ed., 822p.
- MYERS, R.H., MONTGOMERY, D.C. and VINING, G.G., *Generalized Linear Models with Applications in Engineering and the Sciences*, Wiley Series in Probability and Statistics, New York (2002).
- MYERS, R.H., MONTGOMERY, D. C., (2002), *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, John Wiley & Sons, 2 ed., 798p.
- MYER V.R. (2007), Measurement uncertainty - **Journal of Chromatography A**, 1158 (2007) 15–24
- NOORDIN, M. Y., AFFANDI M. Z. e HENDRIKO, D. KURNIAWAN, (2008), Hard turning of cold work tool steel using wiper ceramic tool, **Journal Mekanikal**, June 2008, No. 25, 92 – 105 - Faculty of Mechanical Engineering, Universiti Teknologi Malaysia,
- PAES, A. N. e SANTOS, C.S.A., (2009), As estatísticas de nascimento e os fatores maternos e da criança nas microrregiões do Nordeste brasileiro: uma investigação usando análise fatorial, **Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Brasil**.
- PAIVA, A. P. (2004). *Estudo da Minimização de Erro nas Medições de Concentração de Emulsões por Titração Karl-Fischer Utilizando-se Projetos de Experimento* – Dissertação de Mestrado, Itajubá, Universidade Federal de Itajubá – UNIFEI, 196 p.
- PAIVA, A. P. (2006). *Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de Componentes Principais em Otimização de Processos de Manufatura com Múltiplas Respostas*

Correlacionadas – Tese de Doutorado, Itajubá, Universidade Federal de Itajubá – UNIFEI, 257 p.

PAIVA, A. P. *et al* (2007). *A multivariate hybrid approach applied to AISI 52100 hardened steel turning optimization*, **Journal of Materials Processing Technology** 189 (2007) 26–35

PAIVA, A. P. *et al* (2009). *A multivariate mean square error optimization of AISI 52100 hardened steel turning*, **Internacional Journal of Advanced Manufacturing Technology**, DOI 10.1007/s00170-008-1745-5

PAIVA, E. J. (2008). *Otimização de Processos de Manufatura com Múltiplas Respostas Baseadas em Índice de Capacidade* – Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Itajubá, Instituto de Engenharia de Produção, Itajubá, MG.

PEREIRA, J. C. C. (2006), *Determinação de Modelos de Vida de Ferramenta e Rugosidade no Torneamento do Aço ABNT 52100 Endurecido Utilizando a Metodologia de Superfície de Resposta (DOE)*. Dissertação de Mestrado, Itajubá, Universidade Federal de Itajubá – UNIFEI, 158 p.

PÉREZ, L.C. J. (2002) *Surface roughness modelling considering uncertainty in measurements* **International Journal of Production Research**, 1366-588X, Volume 40, Issue 10, , Pages 2245 – 2268

RIBEIRO, J.S., TEÓFILO, R.F., AUGUSTO, F. e FERREIR, M. M.C., Simultaneous optimization of the microextraction of coffee volatiles using response surface methodology and principal component analysis, **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, 102 (2010) 45–52

SALES, G. T. (2004). *Torneamento do aço ASTM 300M endurecido com ferramentas de cerâmica e PCBN com geometria “Wiper”*, Dissertação de mestrado, Itajubá, Universidade Federal de Itajubá – UNIFEI, 117 p.

SALGADO JR. A. G.(2010) *Otimização de Múltiplos Duais Correlacionados no Processo de Torneamento do Aço de Corte Fácil ABNT 12114*, M.Sc., Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Itajubá, Instituto de Engenharia de Produção, Itajubá, MG.

TONG, L.I., WANG, C.H., CHEN H. C., (2005) *Optimization of multiple responses using principal component analysis and technique for order preference by similarity to ideal solution*, **Internacional Journal of Advanced Manufacturing Technology** 27: 407–414

TZENG, Y-F. and CHEN, F-C., (2006), *Multiobjective process optimization for turning of tool steels*, **International Journal of Machining and Machinability of Materials** 1 (1) pp. 76-93.

WANG, C.H. (2006) Dynamic multi-response optimization using principal component analysis and multiple criteria evaluation of the grey relation model, **International Journal Adv Manufactory Technology**, DOI 10.1007/s00170-005-0365-6 32: 617–624.

WANG, F.K. e DU, T.C.T. (1999), Using principal component analysis in process performance for multivariate data, **Internacional Journal of Management Science**, Omega 28 (2000) 185-194

WENTZELL, P. D *et al.* (1997), Maximum likelihood principal component analysis. **Journal of Chemometrics** vol.11, 330-366

WENTZELL, P. D., LOHNES, M.T, (1998), Maximum likelihood principal component analysis with correlated measurement errors: theoretical and practical considerations. **Chemometrics and Intelligent Laboratory System.**

WU, F. C. Optimization of correlated multiple quality characteristics using desirability function. **Quality Engineering**, v. 17, n. 1, pp. 119-126, 2005.

YACOUB, F., MacGREGOR, J. F. (2004), “Product Optimization and Control in the Latent Variable Space of Nonlinear PLS Models”, **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v 70, pp. 63-74.

YUAN, J.; WANG, K.; YU, T. and FANG, M. (2008), Reliable multi-objective optimization of high-speed WEDM process based on Gaussian process regression, **International Journal of Machine Tools & Manufacture** 48 (2008), pp. 47-60.

ANEXOS

ANEXO A – Artigo em inglês – em submissão

A multivariate surface roughness modeling and optimization under uncertainty conditions

Luiz Gustavo D. Lopes^a, Anderson Paulo de Paiva^a, Luiz Fernando Barca^b, João Roberto Ferreira^a and Pedro Paulo Balestrassi^c

^a Industrial Engineering Institute, Federal University of Itajuba, Itajuba, Brazil

^b Mechanical Engineering Institute, Federal University of Itajuba, Itajuba, Brazil

^c Industrial Engineering Institute, University of Tennessee, Knoxville, TE, USA.

Abstract: Ensure the quality characteristics of a product is a hard task especially when the relationship among factors and the multiple correlated responses are unknown. As the transfer function of correlated response variables may be written in terms of principal component scores, the variance or uncertainty contained in the original responses prevents that the true behavior of the regression function will not be well explained. About this concern this paper presents a model building strategy to estimate the total uncertainty (or experimental variance) that affects all response variables, using the inverse of multivariate uncertainty as weighting matrix for principal components scores used to replace the original correlated dataset. In addition, an extension of this approach considers the factor analysis with Varimax rotation and weighting for factor scores as alternatives to the multivariate regression. The main objective of this proposal is to achieve a satisfactory model explanation, making predicted R^2 (R^2 pred.) as higher as possible. Since the best model is chosen, an optimization routine based on Multivariate Mean Square Error (MMSE) is applied to determine the optimal solution. To confirm the effectiveness of the proposal a case study of quality characteristics of the surface roughness in the AISI 52100 hard turning obtained with Wiper geometry tools is used. The adopted factors in a CCD array are the Cutting speed, feed rate and depth of cut, for a set of five highly correlated surface roughness metrics (R_a , R_y , R_z , R_q and R_t). The results show that the MMSE approach applied in the optimization of the 52100 hard turning produces solutions very closer to all targets with optimum at $V_c=219$ m/min, $F_n=0,13$ mm/rev and $d=0,22$ mm. The results indicate that different modeling methods conduct approximately to the same predicted responses at optimum, but the multivariate weighted response surfaces (WPC1^b) presented the highest predictability.

Keywords: Weighted Least Square (WLS), Multivariate Mean Square Error (MMSE), Response Surface Methodology (RSM), Principal Component Analysis (PCA) and Factor Analysis (FA).

1. Introduction

The presence of correlation greatly influences the model building tasks causing its instability and provoking errors in the regression coefficients. In other words, the regression equations are not adequate to represent the objective functions without considering the variance-covariance (or correlation) structure [1-6]. The later aspect of the multiobjective optimization is the influence of the correlation among the responses over the global solution. As pointed out by many researchers [14, 15-16], the individual analyses of each response may lead to a conflicting optimum, since the factor levels that improve one response can, otherwise, degrade another.

Wang [3] confirms that median or high correlations existing among multiple responses significantly affect the product quality and these correlations must be considered when resolving the optimizing problem of multiple responses. Similarly, McFarland and Mahadevan [2] affirmed that large correlation suggest that the parameters can be characterized using a reduced set of variables and the standard method for finding such a reduced set is principal component analysis (PCA).

Tong *et al.* [4] used the PCA to simplify the optimization process and multi-response problems and concluded that the procedure is valid with some modifications. Wentzel and Lohanes [18] applied a procedure based on the method of maximum likelihood principal component analysis MLPCA to include measurement error covariance in multivariate decomposition. The method is similar to conventional PCA, but it considers the measurement uncertainty in the process placing less emphasis on measurements with large variance. Bratchell [10] employed a second-order response surface based on PCA to adequately represent the original set of responses in a small number of latent variables. The Bratchell's approach do not present alternatives for the cases where the largest principal component is not able to explain the most part of variance as well as do not indicate how the specification limits and targets of each response could be transformed to the plane of principal components. In spite of these gaps, the use of PCA's to overcome the correlation influence is very extensive in the machining literature, mainly associated with Taguchi designs [11-12].

PCA has become an indispensable tool for multivariate analysis in areas such as exploratory data analysis, modeling, mixture analysis, and calibration, but the major weakness of this approach, is that it makes implicit assumptions about measurement errors which are often incorrect. This corrupts the quality of information provided and may lead to erroneous results [9].

The measurement uncertainty is a problem that affects the results accuracy. Pérez [5] affirms that the measurement uncertainties can both affect the response variables and the independent variables. Ignoring these uncertainties makes inefficient the results obtained through any design of experiments.

In this context, this study proposes a model building approach to estimate the total measurement uncertainty that affects all response variables, using the inverse of multivariate uncertainty as weighting matrix for principal components scores used to replace the set of correlated variables in a set of uncorrelated ones. The main objective of this proposal is to achieve a satisfactory variance explanation, making the prediction R^2 as higher as possible. After the uncertainty correction, a multi-objective optimization method – based on the concept of Multivariate Mean Square Error (MMSE) – was used to improve the multiple correlated characteristics combining PCA and RSM.

To illustrate the proposal, Wiper CNGA120408 S01525WH inserts were used in a AISI 52100 hardened steel turning operation.

2. Development of the method

Correlated variables can always be replaced by principal components scores without significant loss of information. Additionally, the rotation of axes which PC's representing can also be used to improve the variance-covariance explanation.

Then, to develop a WPCR (Weighted Principal Component Regression) method using the uncertainty of measurements or the experimental variance and evaluate how the weighting and rotation can influence the determination of the regression coefficients, this approach combines Principal Component Analysis (PCA), Factor Analysis (FA) and Weighted Least Square (WLS) in the model building task.

The Principal Component Analysis (PCA) - is one of the most widely applied tools used to summarize common patterns of variation among variables. This statistical technique is also able to retain meaningful information in the early PCA axes. Supposed that

$f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_p(\mathbf{x})$ are correlated with values written in terms of a random vector $Y^T = [Y_1, Y_2, \dots, Y_p]$. Assuming that Σ is the variance-covariance matrix associated to this vector then Σ can be factorized in pairs of eigenvalues-eigenvectors $(\lambda_i, e_i), \dots \geq (\lambda_p, e_p)$, where $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$, such as the i^{th} uncorrelated linear combination may be stated as $PC_i = e_i^T Y = e_{i1}Y_1 + e_{i2}Y_2 + \dots + e_{ip}Y_p$ with $i = 1, 2, \dots, p$. The i^{th} principal component can be obtained as maximization of this linear combination [13]. This statistical technique is called Principal Component Analysis (PCA), one of the most widely applied tools to summarize common patterns of variation among variables retaining meaningful information in the early PCA axes. The geometric interpretation of these axes is shown in Fig. 1.

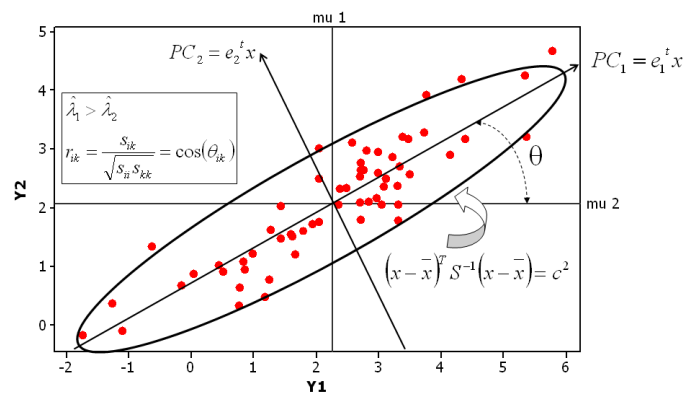


Fig. 1. Geometric interpretation of principal components.

Generally, as the parameters Σ e ρ are unknown the sample correlation matrix R_{ij} and the sample variance-covariance matrix S_{ij} may be used [13]. If the variables studied are taken in the same system of units or if they are previously standardized, S_{ij} is a more appropriate choice. Otherwise, R_{ij} must be employed in the factorization. The sample variance-covariance matrix can be written as follows:

$$S_{ij} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix}, \text{ with } s_{ii} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2 \quad s_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_i - \bar{y}_i)(y_j - \bar{y}_j) \quad (1)$$

Then, the elements of sample correlation matrix R_{ij} can be obtained as:

$$r_{(y_i, y_j)} = \frac{\text{Cov}(y_i, y_j)}{\sqrt{\text{Var}(y_i) \times \text{Var}(y_j)}} = \frac{\hat{e}_{ij} \sqrt{\hat{\lambda}_i}}{\sqrt{s_{ii}}} = \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii} \times s_{jj}}} \quad i, j = 1, 2, \dots, p \quad (2)$$

In practical terms, PC is an uncorrelated linear combination expressed in terms of a score matrix, defined as [13]

$$PC_k = \mathbf{Z}^T \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \left(\frac{x_{11} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{21} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} \right) & \dots & \left(\frac{x_{p1} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} \right) \\ \left(\frac{x_{12} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{22} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} \right) & \dots & \left(\frac{x_{p2} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} \right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{x_{1n} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{2n} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} \right) & \dots & \left(\frac{x_{pn} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} \right) \end{bmatrix}^T \times \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1p} \\ e_{21} & e_{22} & \dots & e_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{1p} & e_{2p} & \dots & e_{pp} \end{bmatrix} \quad (3)$$

Factor analysis is a multivariate statistical technique very useful and powerful tool for effectively extracting information from large databases and makes sense of large collections of interrelated data [16].

According Johnson and Wichern [13] the observable random vector \mathbf{x} , with p components, has mean μ and covariance matrix Σ . The factor model postulates that \mathbf{x} is linearly dependent upon a few un-observable random variables F_1, F_2, \dots, F_m , called common factors, and p additional sources of variation $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_p$, called errors or, sometimes, specific factors. In particular, the factor analysis model is,

$$\begin{aligned} X_1 - \mu_1 &= \ell_{11} F_1 + \ell_{12} F_2 + \dots + \ell_{1m} F_m + \varepsilon_1 \\ X_2 - \mu_2 &= \ell_{21} F_1 + \ell_{22} F_2 + \dots + \ell_{2m} F_m + \varepsilon_2 \\ &\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\ X_p - \mu_p &= \ell_{p1} F_1 + \ell_{p2} F_2 + \dots + \ell_{pm} F_m + \varepsilon_p \end{aligned} \quad (4)$$

or in matrix notation,

$$\underset{(p \times 1)}{\mathbf{X}} = \boldsymbol{\mu} + \underset{(p \times m)}{\mathbf{L}} \underset{(m \times 1)}{\mathbf{F}} + \underset{(p \times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (5)$$

The coefficient ℓ_{ij} is called the *loading* of the i th variable on the j th factor, so the matrix L is the *matrix of factor loadings*. Note that the i th specific factor ε_i is associated only with the i th response X_i . The p deviations $X_1 - \mu_1, X_2 - \mu_2, \dots, X_p - \mu_p$, are expressed in terms of $p + m$ random variables $F_1, F_2, \dots, F_m, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_p$ which are unobservable. This distinguishes the factor model of equation (5) from the multivariate regression model in equation (6), in which the independent variables whose position is occupied by \mathbf{F} in equation (5) can be observed.

The multivariate linear regression model is,

$$\underset{(n \times m)}{Y} = \underset{(n \times (r+1))}{Z} \underset{((r+1) \times m)}{\beta} + \underset{(n \times m)}{\varepsilon}$$

With (6)

$$E(\varepsilon_i) = 0 \text{ and } \text{Cov}(\varepsilon_{(i)}, \varepsilon_{(k)}) = \sigma_{ik} \mathbf{I} \quad i, k = 1, 2, \dots, m$$

The m observations on the j th trial have covariance matrix $\Sigma = \{\sigma_{ik}\}$, but observations from different trials are uncorrelated. Here β and σ_{ik} are unknown parameters; the design matrix \mathbf{Z} has j^{th} row $[Z_{j0}, Z_{j1}, \dots, Z_{jr}]$.

With so many unobservable quantities, a direct verification of the factor model from observations on X_1, X_2, \dots, X_p is hopeless. However, with some additional assumptions about the random vectors \mathbf{F} and ε , the model in equation (5) implies certain covariance relationships, which can be checked.

We assume that

$$E(F) = \underset{(m \times 1)}{0}, \text{Cov}(F) = E[FF'] = \underset{(m \times m)}{\mathbf{I}} \quad (7)$$

$$E(\varepsilon) = \underset{(p \times 1)}{0}, \text{Cov}(\varepsilon) = E[\varepsilon\varepsilon'] = \underset{(p \times p)}{\Psi} = \begin{bmatrix} \psi_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \psi_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \psi_r \end{bmatrix} \quad (8)$$

and that \mathbf{F} and ε are independent, so $\text{Cov}(\varepsilon, F) = E(\varepsilon, F') = \underset{(p \times m)}{0}$

These assumptions and the relation in equation (5) constitute the orthogonal factor model, where,

μ_i = mean of variable i

ε_i = i th specific factor

F_j = j th common factor

L_{ij} = loading of the i th variable on the j th factor

The unobservable random vectors F and ε satisfy the following conditions :

F and ε are independent

$E(F) = 0$, $\text{Cov}(F) = I$

$E(\varepsilon) = 0$, $\text{Cov}(\varepsilon) = \Psi$, where Ψ is a diagonal matrix

2.1. Multivariate Uncertainty for PC score regression

To develop an appropriate equation for the multivariate uncertainty for correlated quantities the basic model can be written as

$$u_m^2(y) = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} \right]^2 u_c^2(x_i) + 2 \sum_i^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \times \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \times u(x_i) \times u(x_j) \times r(x_i, x_j) \quad (9)$$

Considering that in the PCA, the multiple responses can be combined in the form of principal component scores, such as $PC_k = \mathbf{Z}^T \mathbf{E}$, where \mathbf{Z} can be established as:

$$Z_p = \frac{(x_{ip} - \mu_p)}{\sigma_p} \quad (10)$$

Then, applying Eq. (9) to the case of Principal Component Analysis (PCA), we have:

$$y = f(x) = PC_{score} = \sum_{i=1}^p (e_i \times Z_i) = \sum_{i=1}^p \left[e_i \times \left(\frac{x_i - \mu}{\sigma} \right) \right] \quad (11)$$

where

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{e_i}{\sigma} \quad (12)$$

Finally, the combination of equations (9) and (11) can be written as:

$$u_m^2(PC) = \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}} \right)^2 u^2(x_1) + \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}} \right)^2 u^2(x_2) + 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}} \right) \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}} \right) \times u(x_1) \times u(x_2) \times r(x_1, x_2) \quad (13)$$

Where e_i is eigenvector of the correlation matrix used in the extraction of principal components; σ_{x_i} is the standard deviation of the response data (column) i ; σ_{x_j} is the standard deviation of the response data (column) j ; $u^2(x_i)$ is the uncertainty (or variance) of each observation response i ; $u^2(x_j)$ is the uncertainty of each observation of the response j and $r(x_i, x_j)$ is the coefficient of correlation between x_i and x_j responses.

2.2. Multivariate Uncertainty for PC score obtained by Factor Analysis

The optimization by PCA can not always produce satisfactory results. Bratchell [10] points out that some difficulties can be resolved or avoided by using other techniques. Using the principal component analysis to model and optimize multivariate response was observed that in some situation the rotation of the principal components provides an easy and accessible means of analyzing and optimizing a multivariate response which simplifies interpretation of the overall response and retains the flexibility associated with linear or non-linear modeling. Factor analysis is one of techniques that can improve the adjustments. It is a mathematical tool for examining a wide range of data sets, with applications especially important to the design of experiments (DOE).

Following Bratchell's recommendation, the component scores were obtained by factor analysis, so that the weighted matrix will be the inverse of multivariate uncertainty calculated using the equation below,

$$u_m^2(FA_{rotated}) = \left(\frac{k_1}{\sigma_{x_1}}\right)^2 u^2(x_i) + \left(\frac{k_2}{\sigma_{x_2}}\right)^2 u^2(x_j) + 2 \times \left(\frac{k_1}{\sigma_{x_i}}\right) \times \left(\frac{k_2}{\sigma_{x_j}}\right) \times u(x_i) \times u(x_j) \times r(x_i, x_j) \quad (14)$$

where k_1 and k_2 are the coefficients of the factors obtained by Varimax rotation. Rotation is applied to simplify the data structure and according Johnson and Wichern [13] varimax rotation is the most common choice.

2.3. Weighted Least Squares

When the errors ε are uncorrelated but have unequal variances so that the covariance matrix of ε is

$$\sigma^2 \mathbf{V} = \sigma^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{w_1} & & 0 \\ & \frac{1}{w_1} & \\ & & \ddots \\ 0 & & & \frac{1}{w_n} \end{bmatrix} \quad (15)$$

Say, the estimation procedure is usually called weighted least squares. Let $\mathbf{W}=\mathbf{V}^{-1}$. Since \mathbf{V} is a diagonal matrix, \mathbf{W} is also diagonal with diagonal elements or weights w_1, w_2, \dots, w_n . The weighted least squares normal equations are

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{Y} \quad (16)$$

which is the weighted least squares estimator. The observation with large variances will have smaller weights than observations with small variances [7].

To use weighted least squares in a practical sense, we must know the weights w_1, w_2, \dots, w_n . Sometimes prior knowledge or experience or information based on underlying theoretical considerations can be used to determine the weights. In order situations we may find empirically that the variability in the response is a function of one or more regressors, and so a model may be fit to predict the variance of each observation and hence determine the weights. In some cases we may have to estimate the weights, perform the analysis, re-estimate a new set of weights based on these results, and then perform the analysis again [7].

Cho and Park [17] recommend the use of Weighted Least Squares method to balance the data with weights that are inversely proportional to the variance at each level of the explanatory variables when the variance is not constant. Through this method, Pérez [5] weighted the regressors of surface roughness for R_a and R_q using the inverse of the measurement uncertainty as weighting matrix, which is determined in the following equation,

$$\mathbf{W}_y = \frac{1}{u_y^2} \quad (17)$$

where \mathbf{W}_y is a diagonal array with its main diagonal elements and u^2 is the total uncertainty of the process for each of the response values.

Applying the mathematical method developed in equation (13 and 14) is possible to establish the W matrix to apply the WLS (weighted least square) method on principal component scores, such as:

$$\mathbf{W}_{pc} = \frac{1}{u_M^2 PC} \quad (18)$$

where W matrix is adopted as variance inverse of PC or PC rotated and U_m is the total uncertainty of the process.

To explain the method application Fig. 2 shows the fundamental steps in the proposed approach using PCA.

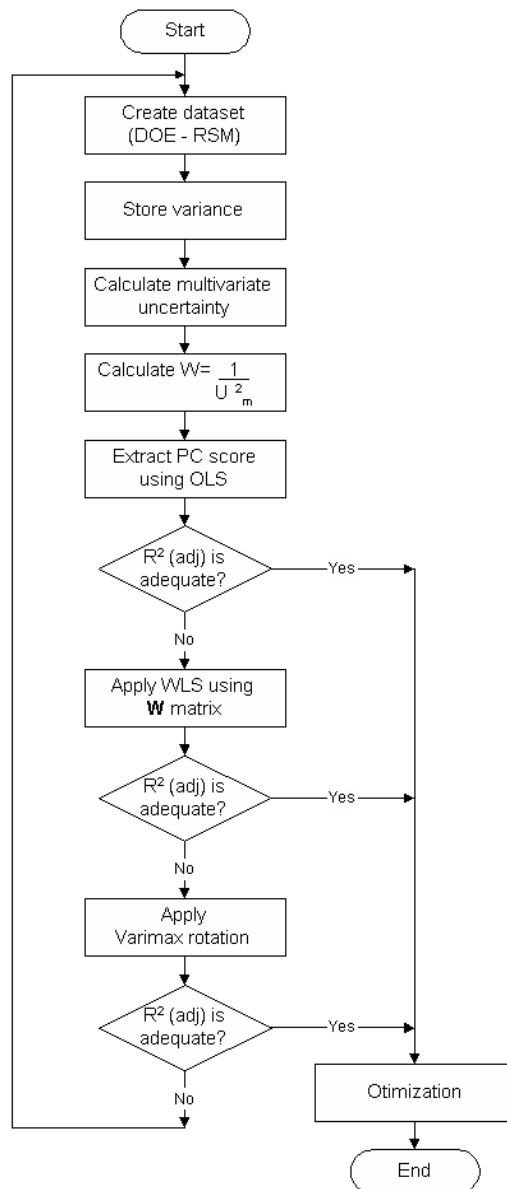


Fig. 2. Flow of searching for WLS models.

3. Optimization

This section discusses the application of Multivariate optimization based in MMSE. Under various circumstances the multiple responses considered in a process present conflict of objectives, with individually optimization leading to different solution sets. This fact characterizes a multiobjective optimization problem, and also considering inequality constraints, can be stated as Eq. (19):

$$\begin{aligned} & \text{Minimize} && f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_p(\mathbf{x}) \\ & \text{Subject to :} && g_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (19)$$

Supposed that $f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_p(\mathbf{x})$ are correlated with values written in terms of a random vector $Y^T = [Y_1, Y_2, \dots, Y_p]$. Assuming that Σ is the variance-covariance matrix associated to this vector then Σ can be factorized in pairs of eigenvalues-eigenvectors $(\lambda_i, e_i), \dots, (\lambda_p, e_p)$, where $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$, such as the i^{th} uncorrelated linear combination may be stated as $PC_i = e_i^T Y = e_{i1}Y_1 + e_{i2}Y_2 + \dots + e_{ip}Y_p$ with $i = 1, 2, \dots, p$.

Multivariate Mean Square Error (MMSE) is a multivariate dual response surface criteria developed replacing the estimated mean \hat{y} by an estimated principal component score regression (PC_i) and the variance $\hat{\sigma}^2$ by the respective eigenvalue λ_i [8]. Taking ζ_{PC_i} as the target for the i -th principal component, a multivariate mean square error formulation can be defined as:

$$MMSE_i = (PC_i - \zeta_{PC_i})^2 + \lambda_i \quad (20)$$

In Eq. (20) PC_i is the fitted second-order polynomial, ζ_{PC_i} is the target value of the i -th principal component that must keep a straightforward relation with the targets of the original data set. This relationship may be establish using Eq. (21) such as:

$$\zeta_{PC_i} = e_i^T [Z(Y_p | \zeta_{Y_p})] = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q e_{ij} [Z(Y_p | \zeta_{Y_p})] \quad i = 1, 2, \dots, p; \quad j = 1, 2, \dots, q \quad (21)$$

In the Eq. (21) e_i are the eigenvectors associated to the i -th principal component and ζ_{Y_p} represents the target for each of the p original responses. With this transformation, it can

be established a coherent value for the target of the i -th principal component, that is compatible with the targets of the original problem.

If more than one principal component is needed, then the MMSE functions whose eigenvalues are equal or greater than the unity, may be written in following form:

$$\text{Minimize} \quad MMSE_T = \left[\prod_{i=1}^k (MMSE_i | \lambda_i \geq 1) \right]^{\left(\frac{1}{k}\right)} = \left\{ \prod_{i=1}^k [(PC_i - \zeta_{PC_i})^2 + \lambda_i | \lambda_i \geq 1] \right\}^{\left(\frac{1}{k}\right)} \quad (22)$$

$i = 1, 2, \dots, k; \quad k \leq p$

$$\text{Subject to : } \mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2 \quad (23)$$

$$\hat{g}_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (24)$$

$$\text{With :} \quad \zeta_{PC_i} = e_{1i} [Z(Y_1 | \zeta_{Y_1})] + e_{2i} [Z(Y_2 | \zeta_{Y_2})] + \dots + e_{pi} [Z(Y_p | \zeta_{Y_p})] \quad (25)$$

$$PC_i = b_{0i} + [\nabla f(\mathbf{x})^T]_i + \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{x}^T [\nabla^2 f(\mathbf{x})] \mathbf{x} \right\}_i \quad i = 1, 2, \dots, p. \quad (26)$$

Where Z represents the standardized value of the i -th response considering its target value ζ_{Y_i} , such that $Z(Y_i | \zeta_{Y_i}) = \frac{[Y_i - \mu_{Y_i}]}{(\sigma_{Y_i})}$. k is the number of factors and ε is the error term; \mathbf{x} is the vector of parameters, b_0 is the regression constant term, $\nabla f(\mathbf{x})^T$ is the gradient of the objective function corresponding to the first-order regression coefficients and $\nabla^2 f(\mathbf{x})^T$ is the Hessian matrix, formed by the quadratic and interaction terms of the estimated model of Y .

4. Experimental procedure

To accomplish with the goals of this paper, dry turning tests were conducted on a CNC lathe with maximum rotational speed of 4000 rpm and power of 5,5 kW. The work pieces used in the turning process were made with dimensions of $\emptyset 49\text{mm} \times 50\text{ mm}$. All of them were quenched and tempered. After this heat treatment, their hardness was between 49 and 52 HRC, up to a depth of 3mm below the surface. The work piece material was AISI 52100 steel, with the following chemical composition: 1.03% C; 0.23% Si; 0.35% Mn; 1.40% Cr; 0.04%

Mo; 0.11% Ni; 0.001% S; 0.01%. The Wiper mixed ceramic (Al₂O₃ + TiC) inserts (CNGA 120408 S01525WH) coated with a very thin layer of titanium nitride (TiN) we used in the experiment. The WIPER inserts represent a new technology on turning operations, mainly by their new type of nose configuration. Depending on the machining parameters, this insert is capable of generating a better surface finish at a much higher feed. Therefore, the use of Wiper inserts increases the productivity, keeping the surface roughness as lower as possible. This particular characteristic can be used to eliminate grinding operations, which represents a great advantage to the manufacturers. Fig. 3 represents the turning process of AISI 52100 hardened steel with Wiper inserts used in this experimental study.

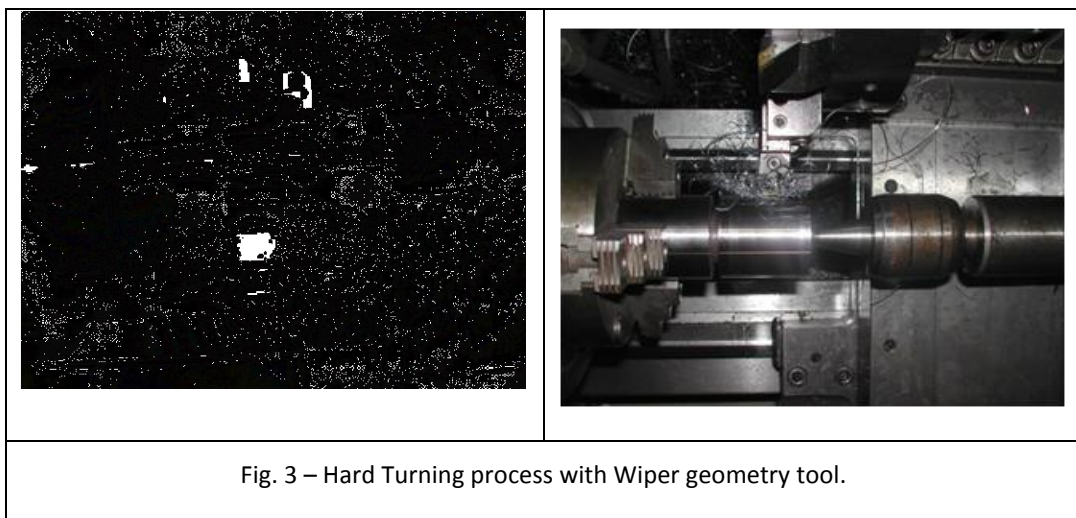


Fig. 3 – Hard Turning process with Wiper geometry tool.

Adopting this experimental condition, the work pieces were machined using the range of parameters defined in Table 1.

Table 1. Levels of the variables for the experiment.

Parameters	Levels				
Coded Units	-1.682	-1	0	1	1.682
Cutting speed (m/min)	186.4	200	220	240	253.6
Feed rate (mm/rev)	0.132	0.20	0.30	0.40	0.468
Depth of cut (mm)	0.099	0.15	0.225	0.30	0.351

A sequential set of experimental runs was established using a CCD built according to the design shown in Table 2. The following surface roughness parameters were assessed experimental design responses using a Mitutoyo portable roughness meter model SurfTest 201 set to a cut-off length of 0.25 mm: arithmetic average surface roughness (R_a), maximum

surface roughness (R_y), root mean square roughness (R_q), ten point height (R_z) and maximum peak to valley (R_t). After turning each part, the surface roughness was measured at four positions at the centre of the workpiece. An average of three measurements was taken for each position by rotating the part 90° after measuring its roughness. The mean values of these measurements are represented in Table 2. In the same table, $PC1^A$ correspond to the scores of the first principal component of R_aR_q and $PC1^B$ represent the scores of the first principal component of $R_aR_yR_zR_qR_t$, both extracted from the correlation matrix of the respective dataset. The detailed procedure of the principal component analysis is shown on table 4.

Table 2. Parameters and Responses measured

<i>hining Parameters</i>		Responses					PCA Scores		FA Scores	
F_n	d	R_a	R_y	R_z	R_q	R_t	$PC1^A$	$PC1^B$	$FPC1^A$	$FPC1^B$
-1	-1	0.15	0.97	0.85	0.19	0.99	-2.09	-3.29	-1.11	-0.97
-1	-1	0.22	1.13	1.07	0.26	1.16	-1.31	-2.38	-1.02	-1.05
+1	-1	0.39	2.65	2.11	0.53	2.67	1.06	2.04	0.67	1.08
+1	-1	0.38	2.34	1.87	0.50	2.42	0.90	1.35	0.33	0.46
-1	+1	0.18	1.15	0.99	0.23	1.17	-1.73	-2.70	-0.82	-0.79
-1	+1	0.17	1.09	1.00	0.22	1.13	-1.81	-2.80	-0.95	-0.81
+1	+1	0.36	2.22	1.75	0.46	2.39	0.57	0.93	0.16	0.52
+1	+1	0.41	2.65	2.09	0.53	2.73	1.25	2.18	0.39	1.08
0	0	0.37	2.04	1.84	0.47	2.07	0.71	0.78	0.05	-0.19
0	0	0.36	2.20	1.95	0.48	2.23	0.64	1.05	0.34	0.26
-1.68	0	0.10	0.74	0.63	0.12	0.79	-2.79	-4.20	-1.30	-1.03
1.68	0	0.53	3.46	2.48	0.68	3.52	2.76	4.53	0.88	2.05
0	-1.68	0.35	1.93	1.71	0.42	1.98	0.31	0.29	-0.43	-0.05
0	1.68	0.42	2.36	2.12	0.52	2.43	1.23	1.81	0.14	0.42
0	0	0.30	2.02	1.82	0.40	2.05	-0.10	0.22	0.12	0.36
0	0	0.29	2.15	1.73	0.39	2.19	-0.21	0.26	-0.11	0.85
0	0	0.31	1.77	1.61	0.60	1.70	0.88	0.25	3.22	-2.32
0	0	0.29	1.86	1.60	0.36	1.92	-0.36	-0.33	-0.47	0.26
0	0	0.32	1.88	1.60	0.42	1.98	0.10	0.02	-0.09	-0.12
Mean	μ	0.310	0.409	1.925	1.622	1.975	0.000	0.000		
SD	σ	0.108	0.149	0.678	0.494	0.692				
Target	(ζ_{y_i})	0.075	0.095	0.59	0.51	0.63	-3.032	-4.687		
Z	$Z(Y_i \zeta_{y_i})$	-2.181	-2.107	-1.970	-2.250	-1.943	-	-		

Table 3 represents the experimental variance obtained with the four measurements of each metric of surface roughness.

Table 3. Experimental Variances and multivariate weights.

ar Ra	Var Ry	Var Rz	Var Rq	Var Rt	W(PC1 ^A)	W(PC1 ^B)	WPC1 ^B F	WPC1 ^A F
0002	0.0232	0.0107	0.0004	0.0186	31.8272	6.5503	58.12865	12.40494
0010	0.0076	0.0097	0.0009	0.0065	8.6627	5.9594	35.36257	81.42054
0003	0.0533	0.0058	0.0001	0.0455	33.6697	4.6105	56.99478	3.517637
0004	0.0247	0.0217	0.0012	0.0287	11.9647	3.6576	12.34147	15.13378
0003	0.0059	0.0815	0.0004	0.0045	24.6972	4.4011	74.51362	31.48883
0004	0.0052	0.0060	0.0006	0.0063	17.2311	9.9061	40.86533	104.4103
0006	0.0119	0.0274	0.0009	0.0227	10.9044	3.9134	34.58623	21.58304
0006	0.0391	0.0150	0.0010	0.0302	10.6690	3.4098	25.28757	10.20686
0009	0.0191	0.0075	0.0012	0.0165	7.8056	4.4605	28.45866	34.05698
0004	0.0577	0.0197	0.0013	0.0503	11.4857	2.6853	10.77569	5.872338
0000	0.0015	0.0008	0.0000	0.0040	236.2661	57.1103	580.9875	97.51999
0016	0.0278	0.0584	0.0020	0.0176	4.5319	2.0128	15.9641	21.82228
0009	0.0102	0.0162	0.0007	0.0039	9.7889	5.6581	38.95572	83.56822
0010	0.0568	0.0480	0.0020	0.0485	5.9276	1.7805	10.29008	6.847434
0012	0.0413	0.0293	0.0018	0.0393	5.6953	2.1960	15.92233	10.33892
0010	0.0567	0.0010	0.0008	0.0467	8.7744	3.5038	35.40306	6.400632
0003	0.0034	0.0013	0.2239	0.1719	0.1820	0.3218	0.016693	0.071986
0005	0.0249	0.0056	0.0007	0.0098	14.0235	6.2319	42.29087	30.1927
0003	0.0074	0.0222	0.0006	0.0349	19.1635	4.8936	42.00797	14.27545

5. Results and discussion

Applying equation (3), the scores of the first principal component (PC1) were obtained as can be seen in Table 2. Using the Principal Component Analysis (PCA) to decompose the correlation structure, it can be verified that the first principal component (PC1^A) explains 97.3 % of the total variation observed in the two surface roughness responses, with an eigenvalue equals to 1.946 and respective eigenvectors. Working with a set of data for five surface roughness responses (R_a ; R_y ; R_z ; R_q ; R_t), PC1^B explains 96.4 % of the total variation with the largest eigenvalue equals to 4.821 and respective eigenvectors listed in Table 4. This multivariate analysis was done with Minitab 15.0 but it is also available in many statistical packages.

Table 4. Principal Component Analysis for **PC1^A** and **PC1^B**

Eigenanalysis of the Correlation Matrix							
PC	PC1 ^A (Ra, Rq)		PC1 ^B (Ra, Ry, Rz, Rq, Rt)				
Eigenvalue	1.946	0.054	4.821	0.123	0.031	0.024	0.001
Proportion	0.973	0.027	0.964	0.025	0.006	0.005	0.000
Cumulative	0.973	1.000	0.964	0.989	0.995	1.000	1.000
Variable	PC1	PC2	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
Ra	0.707	0.707	0.451	-0.075	-0.525	-0.711	0.101
Ry			0.451	0.360	0.388	0.062	0.716
Rz			0.451	0.050	-0.564	0.687	-0.063
Rq	0.707	-0.707	0.436	-0.811	0.375	0.075	-0.076
Rt			0.449	0.451	0.340	-0.111	-0.684

5.1. Analysis and results for **PC1^A**

Table 5 shows the results for **PC1^A** ($R_a R_q$) obtained from the Analyze Response Surface Design and Regression Analysis. The value of R-Sq (adj) in the unweighted matrix it is below of 75%. The model needs to be increased to explain its relationship with one or more predictor variables. Then, to determinate the multivariate uncertainty involved in the experiment, equation (13) was applied to calculate the total uncertainty of **PC1^A**. The regressors were weighted using the weight matrix (**WPC1^A**), as shown in equation (18). Pérez [5] used a similar model to modeling the response values of R_a and R_q .

Table 5. Response Surface Regression and Regression Analysis: **PC1^A** \times V_c , F_n and d

Unweighted Estimated Regression Coefficients for PC1 ^A					Weighted analysis using weights in WPC1 ^A			
Term	Coef	SE Coef	T	P	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0.096	0.320	0.301	0.771	-0.074	0.291	-0.250	0.806
V_c	0.080	0.194	0.413	0.689	0.135	0.148	0.910	0.386
F_n	1.467	0.194	7.561	0.000	1.386	0.148	9.370	0.000
d	0.092	0.194	0.473	0.647	0.039	0.157	0.250	0.808
V_c^2	0.025	0.194	0.127	0.901	0.046	0.169	0.270	0.790
F_n^2	-0.217	0.194	-1.120	0.292	-0.145	0.139	-1.050	0.323
d^2	0.059	0.194	0.303	0.769	0.019	0.178	0.110	0.917
$V_c \times F_n$	-0.022	0.254	-0.087	0.933	-0.067	0.181	-0.370	0.720
$V_c \times d$	-0.001	0.254	0.000	1.000	-0.068	0.180	-0.380	0.714
$F_n \times d$	0.001	0.254	0.003	0.998	-0.002	0.176	-0.010	0.994
S = 0.72	R-Sq = 86.78%	R-Sq(adj) = 73.57%			S = 2.014	R-Sq = 96.9%	R-Sq(adj) = 93.7%	

The equation for **PC1^A** unweighted is

$$\mathbf{PC1^A} = 0.096 + 0.080 V_c + 1.467 F_n + 0.092 d + 0.025 V_c^2 - 0.217 F_n^2 \quad (27)$$

$$+ 0.059 d^2 - 0.022 Vc \times Fn - 0.001 Vc \times d + 0.001 Fn \times d$$

The result on Table 5 (WPC1^A) shows that the mathematical model through the use of a weighted matrix can filter the uncertainty and thereby raise the value of R-Sq (adj). Now it's possible to explain 93.70% of the variability in PC1^A. It means an improvement of 20.13%. The regression equation for PC1^A weighted is

$$\begin{aligned} \mathbf{WPC1^A} = & -0.074 + 0.135 Vc + 1.386 fn + 0.039 d + 0.046 Vc^2 - 0.145 Fn^2 \\ & + 0.019 d^2 - 0.067 Vc \times Fn - 0.068 Vc \times d - 0.002 Fn \times d \end{aligned} \quad (28)$$

As can be seen in both equations, feed (Fn) is the only one significant effect on the surface roughness set of data.

Bratchell [10] affirms that in some situations rotation of the principal components may provide factors which can be interpreted physically. In order to investigate the rotation effect over the model, a multivariate factor analysis was carried out. The method of extraction is principal components and type of rotation is Varimax. The results attained are demonstrated in Table 6, where PC1^{AF} means Factor Analysis of principal component with Varimax rotation.

Table 6. Response Surface Regression and Regression Analysis: PC1^{AF} × Vc, Fn and d

Unweighted Estimated Regression Coefficients for PC1 ^{AF}					Weighted analysis using weights in WPC1 ^{AF}			
Term	Coef	SE Coef	T	P	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0.541	0.459	1.176	0.270	-0.181	0.112	-1.620	0.140
Vc	0.025	0.279	0.091	0.929	0.007	0.069	0.110	0.917
Fn	0.669	0.279	2.402	0.040	0.672	0.061	11.000	0.000
d	0.065	0.279	0.231	0.822	-0.002	0.067	-0.030	0.979
Vc ²	-0.163	0.279	-0.584	0.573	0.054	0.074	0.740	0.479
Fn ²	-0.306	0.279	-1.098	0.301	-0.002	0.055	-0.030	0.975
d ²	-0.283	0.279	-1.017	0.336	-0.093	0.069	-1.350	0.210
Vc × Fn	-0.007	0.364	-0.020	0.984	-0.003	0.077	-0.040	0.966
Vc × d	0.045	0.364	0.125	0.903	0.021	0.075	0.280	0.783
Fn × d	-0.101	0.364	-0.279	0.787	-0.128	0.074	-1.730	0.118
S = 1.03 R-Sq = 47% R-Sq(adj) = 0.00%					S = 1.30 R-Sq = 97.0% R-Sq(adj) = 94.0%			

Throughout Factor Analysis with varimax rotation the result of R-Sq (adj) was not improved as it was expected. The results of this analysis are exposed in the following equation:

$$\mathbf{PC1^A F} = 0.541 + 0.025 Vc + 0.669 Fn + 0.065 d - 0.163 Vc^2 - 0.306 Fn^2 \quad (29)$$

$$- 0.283 d^2 - 0.007 Vc \times Fn + 0.045 Vc \times d - 0.101 Fn \times d$$

To obtain a better explanation of the model, the regressors were pondering with a weighted matrix (WPC1^AF). The results are exposed in Table 5.

Now the model is capable to explain 94.0% of the variability in PC1^AF and the Lack of Fit, as can be seen in table 6 is over than 0,05.

Table 7. Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	9	497.576	55.286	32.530	0.000
Residual Error	9	15.297	1.700		
Lack of Fit	5	9.492	1.898	1.310	0.409
Pure Error	4	5.804	1.451		
Total	18	512.872			

Then using the actual variables the regression equation can be written as:

$$\begin{aligned} \mathbf{WPC1^A F} = & - 0.181 + 0.007 Vc + 0.672 Fn - 0.002 d + 0.054 Vc^2 - 0.002 Fn^2 \\ & - 0.093 d^2 - 0.003 Vc \times Fn + 0.021 Vc \times d - 0.128 Fn \times d \end{aligned} \quad (30)$$

5.2. Analysis and results for PC1^B (R_a; R_y; R_z; R_q; R_t)

To investigate if the mathematical model works with more than a pair of response, equation (13) was extended from $u_m^2 PC_1(R_a, R_q)$ to $u_m^2 PC_1(R_a; R_y; R_z; R_q; R_t)$. All response variables were come up to the new equation and then the total multivariate uncertainty can be written as:

$$\begin{aligned}
u_m^2(PC_{1RaRyRzRqRr}) &= \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right)^2 u^2(x_1) + \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right)^2 u^2(x_2) + \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right)^2 u^2(x_3) + \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right)^2 u^2(x_4) + \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right)^2 u^2(x_5) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right) u(x_1) \times u(x_2) \times r(x_1, x_2) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right) u(x_1) \times u(x_3) \times r(x_1, x_3) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right) u(x_1) \times u(x_4) \times r(x_1, x_4) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_1}{\sigma_{x_1}}\right) \times \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right) u(x_1) \times u(x_5) \times r(x_1, x_5) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right) \times \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right) u(x_2) \times u(x_3) \times r(x_2, x_3) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right) \times \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right) u(x_2) \times u(x_4) \times r(x_2, x_4) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_2}{\sigma_{x_2}}\right) \times \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right) u(x_2) \times u(x_5) \times r(x_2, x_5) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right) \times \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right) u(x_3) \times u(x_4) \times r(x_3, x_4) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_3}{\sigma_{x_3}}\right) \times \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right) u(x_3) \times u(x_5) \times r(x_3, x_5) \\
&+ 2 \times \left(\frac{e_4}{\sigma_{x_4}}\right) \times \left(\frac{e_5}{\sigma_{x_5}}\right) u(x_4) \times u(x_5) \times r(x_4, x_5)
\end{aligned} \tag{31}$$

When equation (31) is used to calculate the total multivariate uncertainty for the scores obtained with rotation in factor analysis (PC1^BF), e_i is substituted by k_i . Where k_i is the coefficient of the factor obtained by Varimax Rotation.

Table 8 shows the results for PC1^B obtained from the Analyze Response Surface Design and Regression Analysis. The unweighted matrix shows a percentage for R-Sq (adj) above of 80%.

Table 8. Response Surface Regression and Regression Analysis: PC1^B × Vc, Fn and d

Unweighted Estimated Regression Coefficients for PC1 ^B					Weighted analysis using weights in WPC1 ^B			
Term	Coef	SE Coef	T	P	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0.134	0.427	0.313	0.761	0.030	0.436	0.070	0.947
Vc	0.132	0.259	0.511	0.622	0.077	0.238	0.320	0.754
Fn	2.370	0.2589	9.155	0.000	2.281	0.229	9.960	0.000
d	0.179	0.2589	0.690	0.508	0.001	0.243	0.010	0.996
Vc ²	0.010	0.2589	0.040	0.969	0.017	0.252	0.070	0.948
Fn ²	-0.255	0.2589	-0.984	0.351	-0.164	0.213	-0.770	0.461
d ²	0.058	0.2589	0.224	0.828	-0.063	0.255	-0.250	0.810
Vc×Fn	-0.032	0.338	-0.094	0.927	-0.005	0.290	-0.020	0.987
Vc×d	0.116	0.338	0.344	0.739	-0.028	0.284	-0.100	0.923
Fn×d	-0.056	0.338	-0.166	0.872	-0.036	0.291	-0.120	0.905
S = 0.96 R-Sq = 90.51% R-Sq(adj) = 81.02%					S = 1.81 R-Sq = 96.2% R-Sq(adj) = 92.4%			

The equation for PC1^B unweighted is

$$\begin{aligned} \text{PC1}^{\text{B}} = & 0.134 + 0.132 \text{ Vc} + 2.370 \text{ Fn} + 0.179 \text{ d} + 0.010 \text{ Vc}^2 - 0.255 \text{ Fn}^2 \\ & + 0.058 \text{ d}^2 - 0.032 \text{ Vc} \times \text{Fn} + 0.116 \text{ Vc} \times \text{d} - 0.056 \text{ Fn} \times \text{d} \end{aligned} \quad (32)$$

To determinate the multivariate uncertainty involved in the experiment, equation (31) was applied to calculate the total uncertainty for PC1^B. The regressors were weighted using the weight matrix (WPC1^B) as shown in equation (18). The results can be observed in Table 8, where R-Sq (adj) improved from 81.02% to 92.4%.

The regression equation with actual variables can be writing as:

$$\begin{aligned} \text{WPC1}^{\text{B}} = & 0.030 + 0.077 \text{ Vc} + 2.28 \text{ Fn} + 0.001 \text{ d} + 0.017 \text{ Vc}^2 - 0.164 \text{ Fn}^2 \\ & - 0.063 \text{ d}^2 - 0.005 \text{ Vc} \times \text{Fn} - 0.028 \text{ Vc} \times \text{d} - 0.036 \text{ Fn} \times \text{d} \end{aligned} \quad (33)$$

To investigate the rotation effect over the model, as for Bratchell's suggestion, the multivariate factor analysis was carried out. The additional **F** to PC1^B means the first principal component with factor analysis and varimax rotation. The results shown in Table 8 unweighted matrix to PC1^BF are worse than the results extracted without factor analysis with varimax rotation. But when the regressors were weighted by a weight matrix, the results obtained got better. As can be notice in the Table 9, the R-Sq (adj) improved from 25.00% to 92.4%.

Table 9. Response Surface Regression and Regression Analysis: $PC1^B F \times Vc, f$ and d

Unweighted Estimated Regression Coefficients for $PC1^B F$					Weighted analysis using weights in $WPC1^B F$			
Term	Coef	SE Coef	T	P	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-0.182	0.387	-0.469	0.650	0.263	0.152	1.730	0.118
Vc	0.043	0.234	0.184	0.858	-0.012	0.077	-0.150	0.884
F_n	0.874	0.234	3.730	0.005	0.865	0.065	13.400	0.000
d	0.093	0.234	0.395	0.702	0.029	0.076	0.390	0.705
Vc^2	0.010	0.234	0.042	0.967	-0.188	0.079	-2.380	0.041
F_n^2	0.179	0.234	0.765	0.464	0.054	0.070	0.770	0.462
d^2	0.063	0.234	0.271	0.793	-0.104	0.074	-1.410	0.193
$Vc \times F_n$	0.005	0.306	0.016	0.987	0.068	0.099	0.680	0.512
$Vc \times d$	0.156	0.306	0.509	0.623	0.115	0.087	1.330	0.218
$F_n \times d$	-0.042	0.306	-0.138	0.893	-0.001	0.098	-0.010	0.989
S = 0.87 R-Sq = 62.50% R-Sq(adj) = 25.00%					S = 1.19 R-Sq = 96.2% R-Sq(adj) = 92.4%			

The equation for $PC1^B F$ unweighted is

$$PC1^B F = -0.182 + 0.043 Vc + 0.874 F_n + 0.093 d + 0.010 Vc^2 + 0.179 F_n^2 + 0.063 d^2 + 0.005 Vc \times F_n + 0.156 Vc \times d - 0.042 F_n \times d \quad (34)$$

Once weighted the regression equation with actual variables can be writing as:

$$WPC1^B F = 0.263 - 0.012 Vc + 0.865 F_n + 0.029 d - 0.188 Vc^2 + 0.054 F_n^2 - 0.104 d^2 + 0.068 Vc \times F_n + 0.115 Vc \times d - 0.001 F_n \times d \quad (35)$$

The Lack of Fit, as can be seen in Table 10 is over than 0,05.

Table 10. Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	9	326.011	36.223	25.390	0.000
Residual Error	9	12.841	1.427		
Lack of Fit	5	8.055	1.611	1.350	0.398
Pure Error	4	4.786	1.196		
Total	18	338.852			

To assess and compare the efficiency of each model (normal, weighted or rotated) we will use the predicted R^2 coefficient (R^2 pred.). This coefficient indicates how well the model predicts responses for new observations, as generally are the values of the optimum. Larger values of predicted R^2 suggest models of greater predictive ability. The predicted R^2 can be calculated as:

$$R^2(\text{pred.}) = \frac{\sum_{i=1}^n \left(\frac{e_i}{1-h_i} \right)^2}{1 - \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (36)$$

Where y_i is the i^{th} observed response value, \bar{y} is the mean response, n is the number of experiments or observations, e_i is the i^{th} residual and h_i is the i^{th} diagonal element of $\mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$. \mathbf{X} is the matrix of predictors.

For summarize and compare the results obtained in the two case studies, we will use a full factorial design, as can be seen in the Table 11. With this approach we can analyze the influence of the presence or absence of the weights or rotation over the explanation property of the models. Considering the cases ‘‘A’’ and ‘‘B’’ as two replicates of 2^2 full factorial design, we obtain the following results.

Table 11. Summary of results.

Method	Weight	Rotation	R ² adj.	R ² pred.
PC1 ^a	Without	Without	73.57%	14.81%
WPC1 ^a	With	Without	93.70%	96.49%
PC1F ^a	Without	With	3.80%	6.97%
WPC1F ^a	With	With	92.90%	95.90%
PC1 ^b	Without	Without	81.01%	28.03%
WPC1 ^b	With	Without	92.40%	94.64%
PC1F ^b	Without	With	25.00%	19.48%
WPC1F ^b	With	With	93.20%	96.01%

The **fig. 4** shows the Pareto and Factorial plots. It is clear that in both cases (for adjusted or predicted R²) that for a 5% significance level the presence of proposed multivariate weighting strategy is more important to a good explanation and predictability of the models than the Varimax rotation. Even though the rotation factor and its interaction with the weighting is significative, we can observe that the level which maximizes R² adj is obtained without rotation for this case. So, although this conclusion can not be extrapolated or generalized to other models, in this specific case we will follow with the optimization phase using only normal or weighted principal component response surface to assess the efficiency of MMSE optimization approach.

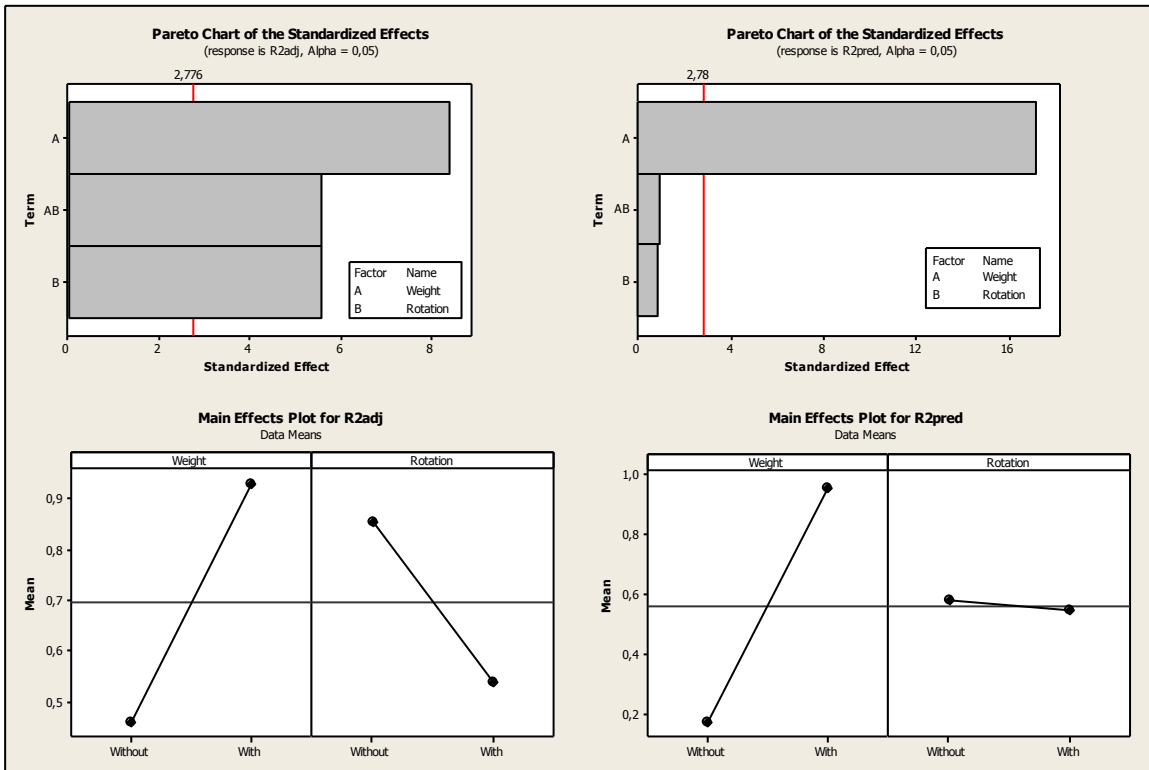


Fig. 4 – Statistical analysis of the influence of weights and rotation in R² adj and R² pred.

5.3. Optimization

The optimization based on the concept of Multivariate Mean Square Error is capable of finding out the best combination to attend all the established targets for a correlated set of responses. The equation (37) was applied to optimize the variables responses for Ra; Ry; Rz; Rq and Rt.

$$\text{Minimize } MMSE_i = (PC_i - \zeta_{PC_i})^2 + \lambda_i \tag{37}$$

$$\text{Subject to : } \mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2$$

According to Table 2, the targets for the surface roughness (ζ_{y_i}) are, respectively, 0.075, 0.095, 0.590, 0.510 and 0.630. Standardizing these values and using the respective eigenvectors (Table 4), it is possible to calculate the targets for the principal

components (ζ_{PC_i}). So, for case A, $\zeta_{PC_1^A} = -3.032$ and for case B, $\zeta_{PC_1^B} = -4.678$. Table 12 shows the MMSE optimization's results taking into consideration the normal and weighted principal component regression equations.

Table 12. Optimization results.

Method	R ² Pred.	Optimum parameters			Predicted Responses at optimum				
		Vc	f	ap	Ra	Rq	Ry	Rz	Rt
					0.075⁽¹⁾	0.095	0.590	0.510	0.630
PC1 ^a	14.81%	-0.086	-1.679	-0.063	0.0805	0.0953	0.6484	0.4979	0.6727
		218.3 ⁽²⁾	0.132	0.220	6.8% ⁽³⁾	0.3%	9.0%	-2.4%	6.3%
WPC1 ^a	96.49%	-0.204	-1.669	-0.048	0.0811	0.0965	0.6539	0.5006	0.6763
		215.9	0.133	0.221	7.5%	1.6%	9.8%	-1.9%	6.8%
PC1 ^b	28.03%	-0.087	-1.675	-0.128	0.0811	0.0951	0.6449	0.4955	0.6700
		218.3	0.133	0.215	7.5%	0.1%	8.5%	-2.9%	6.0%
WPC1 ^b	94.64%	-0.050	-1.681	-0.040	0.0805	0.0955	0.6502	0.5002	0.6746
		219.0	0.132	0.222	6.9%	0.6%	9.3%	-2.0%	6.6%

⁽¹⁾ Response Targets; ⁽²⁾ Uncoded units; ⁽³⁾ Percentual Error of optimization method.

The results shown in Table 12 indicate that different modeling methods conduct approximately to the same predicted responses at optimum, without significant difference between results obtained with MMSE. However, the multivariate weighted response surfaces (WPC1^a, WPC1^b) presented higher predicted R^2 . Then, it is possible to conclude that the solutions obtained with the weighted principal component regression equations achieve the proposed targets through multivariate mean square error approach while keeps the highest predictability. These solutions (for case *a* and *b*) are preferable because they are more consistent and they ensure that the optimization results will be reproduced in the industrial practical situations. Fig. 5 shows the overlaid of the five correlated surface roughness equations with their respective upper and lower bounds. The figure also presents the solution obtained with the application of MMSE optimization routine to the objective function WPC1^b.

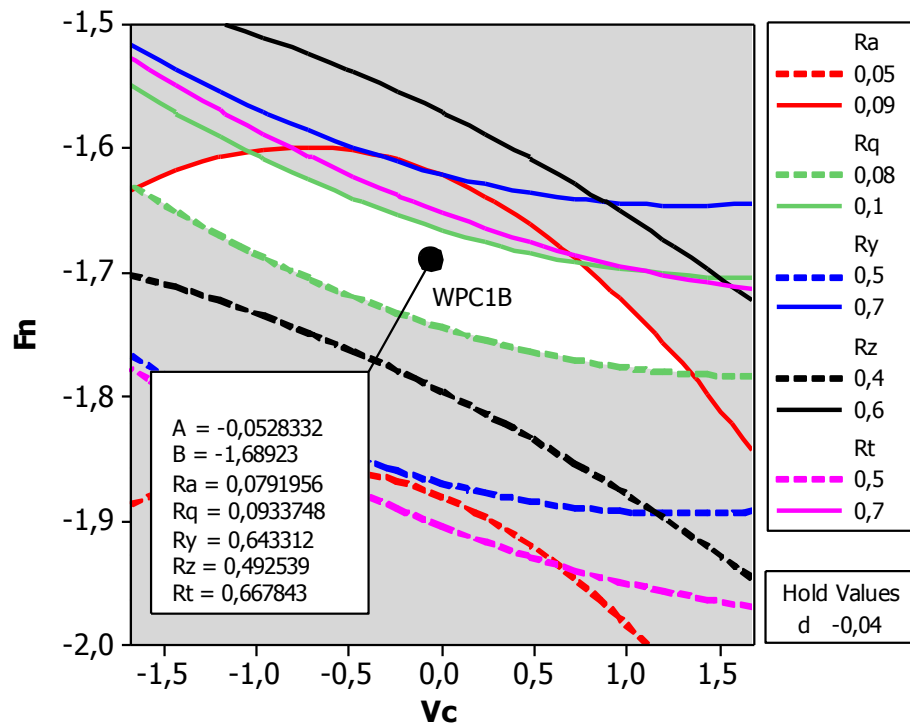


Fig. 5 – Overlaid Contour plot showing the MMSE optimum obtained with WPC1^B case.

6. Conclusions

This paper presented a model building strategy to estimate the total uncertainty that affects all response variables, using the inverse of multivariate uncertainty as weighting matrix for principal components scores used to replace the original correlated dataset. The main objective of this proposal is to achieve a satisfactory variance explanation, making $R^2(\text{adj})$ and $R^2(\text{pred})$ as higher as possible and consequently, reducing the predictive error of the model. Some conclusions can be drawn from the previous sections results:

The weight matrix represents strong influence over the model and raise the result of $R\text{-Sq}(\text{adj})$ to satisfactory level, over 80%. On the other hand, the weight matrix does not reduce the prediction error (S) such as expected, but conducted to a better predictability, mainly evidenced from the larger values of the obtained predicted R^2 .

Following Bratchell's recommendation a Factorial Analysis with varimax rotation was applied to the data. In both case to PC1^AF and PC1^BF the results of $R^2(\text{adj})$ and $R^2(\text{pred})$ were low. The Factorial Analysis showed itself to be not capable of improve these particular results such as expected. But when PC1^AF and PC1^BF were weighting with weight matrix, the results

of R-Sq(adj) achieved 94% and 92,4% respectively. Besides, the factorial analysis with varimax rotation keeps the p-value of the lack-of-fit over 5%.

Considering the optimization results it was possible to observe that the MMSE approach applied in the optimization of the 52100 hard turning produced very close solutions to all the targets. The best point for case A is achieved with $V_c=216$ m/min, $F_n=0,13$ mm/rev and $d=0,22$ mm and for case B, $V_c=219$ m/min, $F_n=0,13$ mm/rev and $d=0,22$ mm. The results indicate that different modeling methods conduct approximately to the same predicted responses at optimum, without significant difference between results obtained with MMSE. However, the multivariate weighted response surfaces (WPC1^a, WPC1^b) presented higher predicted R^2 , suggesting that the weighted principal component regression equations achieve the proposed targets through multivariate mean square error approach while keeps the highest predictability. These solutions are preferable because they are more consistent, ensuring that the optimization results will be reproduced in the industrial context.

7. Acknowledgement

The authors would like to express their gratitude to FAPEMIG through project TEC APQ-01562-08, and also to CAPES and CNPq for their support in this research.

References

- [1] D.C. Montgomery, Design and Analysis of Experiments, 7th ed., John Wiley & Sons, New York (2009).
- [2] J. Mcfarland and S. Mahadevan (2008) Error and variability characterization in structural dynamics modeling, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 197 2621-2631
- [3] C.H. wang (2006) Dynamic multi-response optimization using principal component analysis and multiple criteria evaluation of the grey relation model, International Journal Adv Manufactory Technology, DOI 10.1007/s00170-005-0365-6 32: 617–624.
- [4] L.I. Tong, C.H. Wang and H.C.Chen, (2005), Optimization of multiple responses using principal component analysis and technique for order preference by similarity to ideal solution, International Journal Adv. Manuf. Techno.l 27: 407–414.

- [5] L.C.J Pérez, (2002), Surface roughness modeling considering uncertainty in measurements, *International Journal of Production Research*, 1366-588X, Volume 40, Issue 10, , Pages 2245 – 2268.
- [6] G.E.P. Box, W.G. Hunter, J.F. MacGregor and J. Erjavec, Some problems associated with the analysis of multiresponse data, ***Technometrics*** 15 (1) (1973), pp. 33-51.
- [7] R.H. Myers, D.C. Montgomery and G.G. Vining, *Generalized Linear Models with Applications in Engineering and the Sciences*, Wiley Series in Probability and Statistics, New York (2002).
- [8] A.P. Paiva, E.J. Paiva, J.F. Ferreira, P.P. Balestrassi and S.C. Costa, (2009). A multivariate mean square error optimization of AISI 52100 hardened steel turning, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 43, 631-643.
- [9] D.T. Andrews et al. (1996), Comments on the relationship between principal components analysis and weighted linear regression for bivariate data sets, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 34 231-244.
- [10] N. Bratchell, Multivariate response surface modeling by principal components analysis, *Journal of Chemometrics* 3 (1989), pp. 579–588.
- [11] Y-F. Tzeng and F-C. Chen, Multiobjective process optimization for turning of tool steels, *International Journal of Machining and Machinability of Materials* 1 (1) (2006), pp. 76-93.
- [12] A.K. Dubey, V. Yadava, Multi-objective optimization of Nd:YAG laser cutting of nickel-based superalloy sheet using orthogonal array with principal component analysis, *Optics and Laser in Engineering* 46 (2) (2008), pp. 124-132.
- [13] R.A. Johnson and D. Wichern, *Applied Multivariate Statistical Analysis* (sixth ed.), Prentice-Hall, New Jersey (2007).
- [14] J. Yuan, K. Wang, T. Yu and M. Fang, (2008), Reliable multi-objective optimization of high-speed WEDM process based on Gaussian process regression, *International Journal of Machine Tools & Manufacture* 48 (2008), pp. 47-60.
- [15] H. Chiao and M. Hamada (2001) Analyzing experiments with correlated multiple responses. *J Qual Technol* 33(4):451–465
- [16] J.F. Hair, R.L. Tatham, R.Anderson, W. Black, *Multivariate Data Analysis*, 5th ed., Prentice – Hall, Inc. (1998).
- [17] B.R. Cho and C. Park (2005), Robust design modeling and optimization with unbalanced data, *Computers & Industrial Engineering* 48 173–180.

[18] P.D. Wentzell and M.T. Lohnes, (1998), Maximum likelihood principal component analysis with correlated measurement errors: theoretical and practical considerations, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 45, 1999, 65–85.