

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

Método de Interseção Normal à fronteira por escores rotacionados
em espaço elíptico de solução

Paulo Roberto Maia

Itajubá
Outubro 2020

Paulo Roberto Maia

**Método de Interseção Normal à fronteira por escores
rotacionados em espaço elíptico de solução**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências em Engenharia de Produção.

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

Orientador: Prof. Dr. Anderson Paulo de Paiva

Itajubá
Outubro 2020

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

Paulo Roberto Maia

Método de Interseção Normal à fronteira por escores rotacionados
em espaço elíptico de solução

Tese submetida para banca examinadora em
10 de Outubro de 2020, como parte de re-
quisito ao título de Doutor em Ciências em
Engenharia de Produção.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Anderson Paulo de Paiva (Orien-
tador)

Prof. Dr. Pedro Paulo Balestrassi

Prof. Dr. João Roberto Ferreira

Prof. Dr. Rogério Santana Peruchi

Prof. Dr. Roberto da Costa Quinino

Itajubá
Outubro 2020

Dedico este trabalho especialmente para minha família, a minha amada esposa Fabiana, aos meus queridos filhos Gabriel, Pedro Paulo, Matias e João e aos amigos, por todo o apoio nesta jornada.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus Pai: princípio e autor de todas as coisas, a Nosso Senhor Jesus Cristo que em sua infinita misericórdia nos salvou, Ele que é o fim último de todo conhecimento e ao Divino Espírito Santo que ilumina toda humanidade, por ter indicado o caminho correto a seguir, por ter dado forças para persistir e por ter aproximado as pessoas que fizeram toda diferença para a condução e conclusão desse trabalho! Deo Gracias! A Santíssima Virgem Maria, a senhora Aparecida Rainha e padroeira do Brasil, que do coração de seu filho Jesus nos traz todas as graças! (Jo 2,5)

Agradeço a minha esposa Fabiana: grande amiga e conselheira, que nunca mediou sacrifícios para me ajudar, por sua paciência e caridade e aos meus filhos Gabriel, Pedro Paulo, Matias e João pela amizade, alegria e motivação constantes, obrigado família por tanto amor! A Dona Teresa; minha boa mãe: por ter me gerado, pelo seu sim a minha vida e de meus dez irmãos, por todos os esforços e renúncias que fez para que eu me graduasse. Aos meus sogros Joaquim e Benedita por me acolherem como a um filho em sua família por me darem a sua bênção e amizade constante!

Aos familiares e amigos (as), compadres, comadres e afilhados (as) e benfeitores que se fizeram presentes em minha vida e especial nesse período, pela acolhida, em especial pelas orações e pelo incentivo para seguir a diante. A Flávia, Juliano e Alice por acolherem com tanto amor os meninos em seu lar e a Maria José (Goda) e Tia Michele pela amizade e valiosa ajuda com as crianças.

Ao Carmelo da Sagrada Família pedacinho do céu onde nos encontramos com A fonte de toda inspiração, as Rev.ma Sr.^a monjas daquele santo lugar por suas orações em favor de minha família e em especial do trabalho aqui apresentado. Ao Rev.mo Mons. José Catarino que ao longo de todos esses anos trouxe a minha casa as bênçãos de Deus e o amor de sua paternidade espiritual. Agradeço também aos amigos padres pelas muitas missas e orações.

Aos meus amigos Professor Rodrigo e Francisco pelo grande incentivo ao meu trabalho e compreensão em todas as horas, em especial nos anos em que foram meus chefes, agradeço também aos colegas professores e aos meus queridos alunos (as) que muito me inspiram!

Agradeço em especial ao professor, amigo e orientador Dr. Anderson Paulo de Paiva que sempre acreditou no meu trabalho, por valorizar meus esforços e compreender os muitos desafios que se colocaram nesse caminho. Conviver com tão generoso e brilhante ser humano, foi um verdadeiro presente! Deus o abençoe ilustríssimo professor!

A todos os professores do programa de pós-graduação que me auxiliaram nesses anos de estudo e pesquisa, por suas valiosas contribuições.

A todos os amigos e colegas do GEPE, pela enriquecedora convivência e aprendizado, pelas alegrias divididas nesse longo período, aos amigos do grupo de pesquisa, Jhon Jairo, Julian, Luiz Gustavo, Paulo Campos, Danielle, Tainara, Lucas, Baldin, Pedro Papandrea, Franco, Gustavo, Fabricio, Aline, Alexandre, Betânia, Simone, Estevão, Tarcísio e todos os que estiveram comigo nesta jornada. Em especial a Vinicius Paes; a minha dupla de defesa; pela feliz parceria, por dividir comigo as lutas que surgiram nessa batalha!

Trago a todos no coração! Obrigado!

A Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI), à secretaria do IEPG. E finalmente a FAPEMIG, CNPq e CAPES pelo apoio e incentivo à pesquisa brasileira.

*"Com efeito, de tal modo Deus amou o mundo,
que deu seu Filho único para que todo o que nele crer
não pereça mas tenha a vida eterna."
(Jo 3,13-17)*

RESUMO

Vários fatores afetam a performance do Método de Intersecção Normal à Fronteira quando empregado na otimização de múltiplas superfícies de resposta. Tais fatores causam descontinuidades no conjunto de soluções Pareto-ótimas, instabilidade na detecção de soluções em espaço contínuo e a inversão dos sentidos originais de relacionamento entre as diversas funções objetivo. Após um extenso período de pesquisa, três causas fundamentais para estas inconsistências foram detectadas: (a) a presença de correlação entre as funções objetivo bem como sua negligência, (b) a definição de pontos de ancoragem, de utopia e de Nadir fora das regiões de confiança associados aos dados experimentais causada pela etapa de otimização individual e (c), a natureza dos pontos de inicialização do algoritmo gradiente usado para encontrar as soluções do problema multiobjetivo em cada vetor de peso desejado. Para minimizar a influência destes fatores, o método original foi modificado para permitir a inclusão de restrições elípticas baseadas na distância quadrática multivariada, além de substituir as funções objetivo originais por outras funções independentes – obtidas por superfícies de resposta de escores rotacionados de fator com ângulos de rotação diversificados. Para melhorar a estabilidade na busca e localização das soluções viáveis para cada peso de interesse, utilizou-se um processo de inicialização difusa, na qual uma matriz de soluções iniciais viáveis foram testadas a priori. Para todos os testes, a qualidade das soluções obtidas foi avaliada calculando-se a distância de Mahalanobis para os diversos vetores de solução. Esta proposta foi testada com conjuntos bi e multidimensionais associados ao processo de torneamento do aço endurecido H13 e os resultados foram extremamente satisfatórios. Durante a realização de simulações com os modelos experimentais obtidos, identificou-se que o surgimento de estruturas de correlação entre funções objetivo estocásticas deve-se, em grande parte, a uma relação entre as amplitudes atribuídas às variáveis de decisão dentro dos arranjos experimentais.

Palavras-chaves: Otimização Multivariada, Limite Normal de Intersecção, Análise Fatorial

ABSTRACT

Several factors affect the performance of the Normal Border Intersection Method (NBI) when employed in the optimization of multiple response surfaces. Such factors cause discontinuities in the Pareto-optimal solution set, instability in the detection of solutions in continuous space and the inversion of the original sense of relationship between the various objective functions. After an extensive research period, three fundamental causes for these inconsistencies were detected: (a) the presence of correlation between objective functions as well as their neglect, (b) the definition of anchor points, utopia and Nadir outside the regions. of confidence associated with the experimental data caused by the individual optimization step and (c) the nature of the initialization points of the gradient algorithm used to find the solutions of the multiobjective problem in each desired weight vector. To minimize the influence of these factors, the original method was modified to allow for the inclusion of elliptic constraints based on multivariate quadratic distance, and to replace the original objective functions with other independent functions - obtained by response surfaces of rotating factor scores with angles of diversified rotation. To improve the stability in finding and finding viable solutions for each weight of interest, we used a diffuse initialization process in which a matrix of viable initial solutions were tested a priori. For all tests, the quality of the obtained solutions was evaluated by calculating the Mahalanobis distance for the various solution vectors. This proposal was tested with two- and multi-dimensional assemblies associated with the H13 hardened steel turning process and the results were extremely satisfactory. During simulations with the experimental models obtained, it was identified that the emergence of correlation structures between stochastic objective functions is due, in large part, to a relationship between the amplitudes attributed to the decision variables within the experimental arrangements. Such simulations emphasize that natural correlations can become stronger depending on the amplitudes chosen for the input variable levels.

Keywords: Multivariate Optimization, Normal Boundary Intersection, FactorAnalysis

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 – Sequência natural da RSM	10
Figura 2.2 – CCD para três fatores	12
Figura 2.3 – Interpretação geométrica dos autovalores	16
Figura 2.4 – Coordenadas de $P_1(x_1, y_1)$	17
Figura 2.5 – Rotação de $P_1(x_1, X_2)$	18
Figura 2.6 – Construção da elipse a partir de duas circunferências	19
Figura 2.7 – Construção da fronteira sem restrição elíptica	21
Figura 2.8 – Elipse de distância constante centrada em \bar{x} , com $\hat{\lambda}_1 > \hat{\lambda}_1$	24
Figura 2.9 – Elipse de distância constante centrada em \bar{x} , com $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_1$	25
Figura 2.10 – Pontos de máximo e mínimo de uma função	39
Figura 2.11 – Etapas na execução do algoritmo genético	43
Figura 2.12 – Limitações do método das somas ponderadas	50
Figura 2.13 – Convexidade da restrição $g(x)$: (a) contorno e (b) superfície	51
Figura 2.14 – Fronteira de Pareto obtidas pelos métodos: (a) soma ponderada e (b) NBI	52
Figura 3.1 – Representação gráfica da função Rosenbrock	57
Figura 3.2 – Visão geral da abordagem proposta	58
Figura 3.3 – Fronteira de Pareto esperada	60
Figura 3.4 – Construção da Fronteira com restrição Elíptica	61
Figura 3.5 – Intervalos de confiança de Bonferroni x Hotelling	64
Figura 4.1 – % de explicação dos autovalores para os métodos de extração por ACP e Verossimilhança	67
Figura 4.2 – Análise Hierárquica de Cluster para funções de Rosenbrock	71
Figura 4.3 – Escores dos fatores com suas cargas fatoriais e matriz Payoff Φ	72
Figura 4.4 – Fronteira de Pareto para as Funções de Teste com algoritmo GRG	74
Figura 4.5 – Fronteira de Pareto para as Funções de Teste com algoritmo GRG	74
Figura 4.6 – Fronteira de Pareto para as Funções de Teste com algoritmo GA	75
Figura 4.7 – Fronteiras com pontos descontínuos	79
Figura 4.8 – Algoritmo para corrigir ponto de partida	80
Figura 4.9 – $MMSE_1 \times MMSE_2$ com rotinas de inicialização do GRG	80
Figura 4.10 – Gráfico de contorno sobreposto para as oito respostas com os resultados de $MMSE_1$ com $MMSE_2$ e variação de f e ap	81
Figura 4.11 – Gráfico de contorno sobreposto para as oito respostas com os resultados de $MMSE_1$ com $MMSE_2$ e variação de Vc e ap	82

Figura 4.12–Gráfico de contorno sobreposto para as oito respostas com os resultados de $MMSE_1$ com $MMSE_2$ e variação de f e Vc	82
Figura 4.13–Elipse de confiança de Bonferroni com a Fronteira $MMSE_1 \times MMSE_2$	83
Figura 4.14–Análise das fronteiras khuri para T x MRR	84
Figura 4.15–Fronteiras com restrição de khuri para respostas TxMRR, TxKp, TxRa, TxRt, TxMRR e TxFr	85
Figura 4.16–Fronteiras com restrição de khuri para respostas TxECC, TtxKp, TtxRa, TtxRt, TtxMRR e TtxFr	86
Figura 4.17–Fronteiras com restrição de khuri para respostas TtxECC, KpxRa, KpxRt, KpxMRR, KpxFr e KpxECC	87
Figura 4.18–Fronteiras com restrição de khuri para respostas RaxRt, RaxMRR, RaxFr, RaxECC, RtxMRR e RtxFr	88
Figura 4.19–Fronteiras com restrição de khuri para respostas RtxECC, MRRxFr, MRRxECC e FrxECC	89
Figura 4.20–Fronteiras $MMSE_1 \times MMSE_2$ Ortomax sem algoritmo GRG_R	91
Figura 4.21–Fronteiras $MMSE_1 \times MMSE_2$ Ortomax com algoritmo GRG_R	91
Figura 4.22–fronteiras ortomax elipse	92
Figura 4.23–Autovalores para os métodos de extração por ACP e Verossimilhança	93
Figura 4.24–Cargas fatoriais por método de extração	95
Figura 4.25–Análise Hierárquica de Cluster das respostas com os fatores	99
Figura 4.26–Fronteiras $MMSET_1 \times MMSET_2$ com vários pontos de Nadir	100
Figura 4.27–Fronteira NBI pelos métodos de extração ACP e Verossimilhança com agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$	101
Figura 4.28–Fronteira NBI pelos métodos de extração ACP e Verossimilhança com agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$	102
Figura 4.29–Fronteira NBI não rotacionada com dois fatores pelos métodos de extração por ACP e Verossimilhança	103
Figura 4.30–Elipse de confiança para método de extração por ACP e Verossimilhança, agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$	105
Figura 4.31–Elipse de confiança para método de extração por ACP e Verossimilhança, agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$	106

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Características fundamentais das principais técnicas do Projeto e Análise de Experimentos (Adaptado de NILO JÚNIOR, 2003)	8
Tabela 2.2 – Resumo das propriedades dos três tipos de CCD	12
Tabela 2.3 – Resumo das ligações utilizadas nos agrupamentos hierárquicos	36
Tabela 2.4 – Resumo dos métodos de otimização propostos por alguns autores	47
Tabela 4.1 – Matriz simulada (CCD) com funções de teste	66
Tabela 4.2 – Correlações entre as oito funções de teste com os valores de p-value	67
Tabela 4.3 – Cargas fatoriais com método de extração por ACP	68
Tabela 4.4 – Cargas fatoriais com método de extração por Verossimilhança	68
Tabela 4.5 – Matriz de fatores para os métodos de extração por ACP e Verossimilhança	69
Tabela 4.6 – Ótimos individuais das funções de teste	70
Tabela 4.7 – Alvos de F_1 e F_2 das funções de teste para cada método de extração	71
Tabela 4.8 – Soluções Pareto ótimas para a abordagem MMSE-NBI	73
Tabela 4.9 – Composição química da amostra de teste	76
Tabela 4.10–Parâmetros do processo de torneamento	76
Tabela 4.11–Matriz Experimental com a ferramenta CC 6050	77
Tabela 4.12–Correlação entre as respostas com os valores de p-value	78
Tabela 4.13–Modelo quadrático para as respostas originais com a ferramenta CC 6050	78
Tabela 4.14–Distância de Mahalanobis para cargas rotacionadas	92
Tabela 4.15–Cargas fatoriais com método de extração por ACP	94
Tabela 4.16–Cargas fatoriais com método de extração por Verossimilhança	94
Tabela 4.17–Matriz de fatores para os métodos de extração por ACP e Verossimilhança	96
Tabela 4.18–Modelo quadrático para as Fatores com método de extração por ACP	96
Tabela 4.19–Modelo quadrático para as Fatores com método de extração por Verossimilhança	97
Tabela 4.20–Alvo individual de cada resposta	97
Tabela 4.21–Alvos de F_1 , F_2 e F_3 das funções de teste para cada método de extração	97
Tabela 4.22–Métodos de ligação e distância entre correlações	98
Tabela 4.23–Pontos de ancoragem para os métodos ACP e Verossimilhança com agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$	100
Tabela 4.24–Pontos de ancoragem para os métodos ACP e Verossimilhança com agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$	101
Tabela 4.25–Resultados da otimização com extração dos fatores por ACP e Máxima Verossimilhança sem rotação e rotação Varimax	104

LISTA DE QUADROS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
ACP	Análise de Componentes Principais
AF	Análise Fatorial
NBI	Normal Boundary Intersection
DOE	Delineamento de Experimentos
MMSE	Multivariate Mean Square Error
MSR	Metodologia de Superfície de Resposta
GRG	Gradiente Reduzido Generalizado
ACC	Arranjo Composto Central
AG	Algoritmo Genético
AE	Algoritmo Evolutivo
PNL	Programação Não Linear
EQMM	Erro Quadrático Médio Multivariado

LISTA DE SÍMBOLOS

C	Carbono
Si	Sílicio
Mn	Manganês
Cr	Cromo
V	Vanádio
D	Desirability
V_c	Velocidade do corte
f	Taxa de alimentação
A_p	Profundidade do corte
K_p	Custo total de usinagem
T_t	Tempo total de usinagem
T	Vida da ferramenta
MRR	Taxa de remoção
F_r	Força de usinagem
R_a	Rugosidade média
R_t	Rugosidade total
EEC	Energia específica de corte
Φ_i	Ajuste do modelo método ponderado
g	Gradiente ponderado
d	Direção ponderada
λ_i	Autovalores
e_i	Autovetor

SUMÁRIO

	Agradecimentos	vi
	Resumo	viii
	Lista de Ilustrações	ix
	Lista de Tabelas	xi
	Lista de Quadros	xii
	Lista de Abreviaturas e Siglas	xiv
	Lista de Símbolos	xv
1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Métodos de otimização multiobjetivo correlacionado	1
1.2	Justificativa e Relevância	2
1.3	Problema de Pesquisa	4
1.4	Objetivos	4
1.5	Delimitação do Trabalho	5
1.6	Método	5
1.7	Estrutura do trabalho	6
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	7
2.1	Métodos Estatísticos de Modelagem e Análise	7
2.1.1	Delineamento de experimentos	7
2.1.2	Metodologia de Superfície de Resposta	9
2.1.3	Medidas de distância multivariada	13
2.1.4	Elipse de confiança	15
2.1.5	Restrição de Khuri	19
2.2	Técnicas de Análise Multivariada	22
2.2.1	Análise Componentes Principais	22
2.2.2	Análise Fatorial	27
2.2.2.1	Modelo Fatorial Ortogonal	27
2.2.2.2	Método dos Componentes Principais	30
2.2.2.3	Método da Máxima Verossimilhança	31
2.2.2.4	Rotação Fatorial	33
2.2.3	Análise Hierárquica de Cluster	35

2.3	Algoritmo de otimização	38
2.3.1	Gradiente Reduzido Generalizado	40
2.3.2	Algoritmo Genético	42
2.4	Métodos de Otimização Multivariada	44
2.4.1	Erro Quadrático Médio Multivariado	46
2.4.2	Abordagem de Interseção de Limite Normal	49
3	MÉTODO PROPOSTO	56
4	RESULTADOS E CONCLUSÕES	66
4.1	Aplicação do método MMSE-NBI para função de teste de Rosenbrock	66
4.2	Aplicação do método MMSE-NBI em um processo de torneamento	75
4.3	Otimização pelos métodos de extração ACP e Máxima Verossimilhança	90
4.3.1	Análise das cargas fatoriais rotacionadas	90
4.3.2	Análise dos métodos de extração	93
5	CONCLUSÕES	107
5.1	Conclusões gerais	107
	REFERÊNCIAS	109
	Appendices	119

1 INTRODUÇÃO

1.1 Métodos de otimização multiobjetivo correlacionado

Um problema comum em um projeto de produto ou processo é a determinação de ajustes de variáveis do projeto que, simultaneamente, otimizam múltiplas características de qualidade correlacionadas (SALMASNIA *et al.*, 2012). Na maioria das vezes tratam-se as respostas de forma isoladas na fase de construção dos modelos de regressão. Este processo pode ser ineficiente, especialmente se as respostas forem fortemente correlacionadas, análises separadas podem levar a recomendações conflitantes sobre os níveis dos fatores importantes, porque o nível de um fator pode melhorar a qualidade de uma resposta, mas piorar a de outra (CHIAO; HAMADA, 2001) e (TONG *et al.*, 2005).

A existência de correlação entre as características de qualidade em um processo de fabricação afetam significativamente a qualidade do produto e estas correlações devem ser consideradas quando os problemas de otimização de múltiplas respostas forem resolvidos (WANG, 2007). Alguns métodos não consideram todas as respostas simultaneamente, outros a estrutura de correlação entre as respostas são descartadas, podendo levar a um erro na determinação do ponto de ótimo.

Dentre os métodos que consideram as correlações entre as respostas, encontrar a melhor solução é algo bem complexo, principalmente quando o problema multivariado possui respostas com correlação negativa e objetivos conflitantes, como saber qual o melhor conjunto de respostas, existem métodos que definem critérios para o cálculo dos pesos de importância para cada resposta, assim uma resposta com maior peso tem mais relevância quando forem definidos os modelos de equação para cada resposta (SALMASNIA *et al.*, 2012).

De acordo com GOMES (2013) uma estratégia para a otimização multivariada correlacionada é a eliminação do efeito da correlação durante a otimização, a técnica mais utilizada neste caso é o uso de Análise de Componentes Principais - ACP, esta converte o conjunto original de respostas correlacionadas em novas variáveis não correlacionadas.

Ao utilizar componentes principais em substituição das variáveis originais, deve-se tomar cuidado de como representá-los, BRATCHELL (1989) propôs utilizar um pequeno conjunto de variáveis não correlacionadas provenientes da análise de componentes principais, apesar de inovadora, a abordagem de Bratchell falhou ao não apresentar alternativas para os casos em que o maior componente principal não ser capaz de explicar a maior parte da variância dos dados, além de não definir os limites de especificação e como os alvos das respostas podem ser transformados em alvos para os componentes principais.

Diante de tal problema PAIVA *et al.* (2009) propôs uma média geométrica acumulada para as funções dos componentes cuja explicação acumulada fosse maior que 80%. Esta abordagem foi denominada Erro Quadrático Médio Multivariado (Multivariate Mean Square Error - MMSE). Assim como Método do Critério Global (MCG), e a função *Desirability*, todos estes métodos utilizam de alguma forma as somas ponderadas.

Dentre trabalhos publicados em COSTA *et al.* (2016) e LOPES *et al.* (2016), percebeu alguns problemas na construção das fronteiras de Pareto ao realizar a otimização pelo método da Interseção Normal à Fronteira (Normal Boundary Intersection - NBI), proposto por DAS; DENNIS (1998). As fronteiras com eixos correlacionados dificultam a obtenção pontos equiespaçados, com o uso de ACP este problema foi solucionado. A ACP proporciona um melhor desempenho em problemas multiobjetivos (MESSAC; MATTSON, 2002).

Uma extensão da ACP é a Análise Fatorial (AF), que além de reduzir a dimensionalidade sem perda de informações do conjunto original de variáveis a AF pode levar em consideração a correlação entre estas variáveis para estimar os escores destes componentes, ao extrair os escores com o uso da AF dá-se o nome a este componente de fator. Na ACP o componente é calculado como combinações lineares das variáveis originais, já na AF as variáveis originais são combinações lineares deste fator.

1.2 Justificativa e Relevância

A aplicação NBI, um método de otimização multiobjetivo desenvolvido para encontrar um espaçamento uniforme entre as soluções ótimas de Pareto, é muito útil na otimização de muitos processos industriais com múltiplas respostas. No entanto, se várias funções estiverem correlacionadas e com objetivos conflitantes, o método NBI tende a falhar e os resultados das otimizações podem produzir valores irrealistas. (COSTA *et al.*, 2016).

Conforme citado por alguns autores existe algumas limitações ao estimar os escores com extração pela ACP, segundo COSTA *et al.* (2016), resumi-se em três pontos: i) a presença de correlação significativa entre as respostas de interesse podem resultar em soluções Pareto-ótimo que, na prática não se confirmam LOPES *et al.* (2016), isso intensifica a medida que a correlação entre as variáveis tende ao valor +1 ou -1.

Segundo KHURY; MUKHOPADHYAY (2010) uma solução de compromisso deve ser alcançada, para isso calcula-se a distância entre a resposta estimada e o correspondente valor de ótimo, a minimização desta distância deve ser alcançada considerando os intervalos de confiança definidos pelas respostas originais; ii) o problema NBI pode se tornar extremamente complexo e computacionalmente dispendioso em problemas de dimensões mais elevadas (quando mais de duas respostas são consideradas simultaneamente

no problema de otimização) DAS; DENNIS (1998) e/ou devido ao aumento no número de restrições e iii) em problemas de dimensões mais elevadas, a projeção do plano de Utopia não é capaz de cobrir toda a fronteira de Pareto e alguns pontos da fronteira não são encontrados pelo método NBI (DAS; DENNIS 1998).

Outro fator importante a ser analisado depois de definido a formulação do problema de otimização é a identificação dos pontos de ancoragem da fronteira feita com o emprego de algoritmos de otimização nas equações do problema, métodos gradiente, como o algoritmo Gradiente Reduzido Generalizado - GRG RAO (2009), e os métodos evolucionários, como o Algoritmo Genético - AG (BUSACCA *et al.*, 2001). Após identificação dos pontos de ancoragem, deve-se analisar os resultados, compará-los com o processo real e fazer a validação estatística.

No estudo feito por COSTA *et al.* (2016) em um processo de torneamento usou-se a combinação MMSE-NBI e comparou com a combinação Média Ponderada (MP)-MMSE os resultados foram satisfatórios, no estudo as combinações possíveis em um par de variáveis eram correlações positivas com objetivos iguais de minimização e correlações positivas com objetivos conflitantes.

No trabalho realizado por GAUDÊNCIO *et al.* (2019) em um processo de usinagem a combinação MMSE-NBI provou ser mais eficaz que outros métodos de otimização testados, no trabalho as combinações possíveis eram correlação positiva com objetivos iguais de minimização, correlação positiva com objetivos conflitantes, correlação negativa com objetivos iguais de minimização e maximização e correlação negativa com objetivos conflitantes. Nos dois estudos experimentos de confirmação foram realizados para validar os valores obtidos.

Questões apontadas anteriormente, torna este estudo uma proposta de melhor entendimento sobre o impacto das correlações na construção de uma fronteira, a análise de aumento no número de respostas a serem otimizadas de forma a garantir que a fronteira construída é formada por pontos factíveis, pontos de inicialização do GRG ou AG e sua influência na definição dos pontos de ancoragens.

Para garantir que os pontos da fronteira NBI estarão dentro do intervalo de confiança definidos pelas respostas originais é adicionado ao problema a restrição definida em (KHURY; COLON 1981),

Na validação deste procedimento foi utilizado como exemplo um processo de torneamento com oito respostas correlacionadas com diferentes graus de importância, todas combinações possíveis de correlações positivas e negativas com objetivos conflitantes ou não foram consideradas.

A metodologia estatística do Projeto de Experimentos (Design of Experiments-DOE) foi utilizada para minimizar os custos dos testes e manter a confiabilidade dos

resultados dos experimentos. A aplicação do DOE permite um planejamento de experimentos dos dados adequados a uma análise estatística eficiente (MONTGOMERY, 2008).

1.3 Problema de Pesquisa

Com base nos argumentos apresentados anteriormente, na deficiência que o método NBI ou algoritmo de otimização podem apresentar e na adição de restrições multivariadas ao problema multiobjetivo, este trabalho pretende investigar:

- (a) Como o comportamento da correlação (positiva e negativa, com e sem conflito de objetivos) entre as respostas interfere na construção da fronteira de Pareto;
- (b) Como encontrar fronteiras de Pareto quando o valor da correlação entre as funções tende a 1 e quando tende a 0;
- (c) Como garantir pontos de ancoragem factíveis dentro da região de confiança definida pelos dados experimentais;
- (d) Qual a influência do algoritmo GRG e AG nos pontos de inicialização e consequentemente nos pontos de ancoragem da fronteira de Pareto;
- (e) Como garantir que o método funciona para análise de correlação entre quaisquer tipos de funções.

1.4 Objetivos

O objetivo principal desta tese é: desenvolver, testar e avaliar o desempenho do Método NBI por escores de fator em espaços de solução elípticos para respostas correlacionadas. Esta proposta visa melhorar a qualidade das soluções encontradas, aumentar a estabilidade dos algoritmos de busca utilizados neste tipo de otimização, evitar a inversão dos sentidos de correlação entre as funções objetivo originais, além de mitigar a presença de clusters de soluções espalhados ao longo da Fronteira de Pareto.

A partir do objetivo geral, os objetivos específicos deste trabalho incluem:

- (a) Avaliar comportamentos das fronteiras na presença de correlações entre as funções objetivo bem como sua negligência;
- (b) Avaliar comportamento das fronteiras quando o valor das correlações entre as funções tende a 1 ou a 0;
- (c) Definir os pontos de ancoragem, Utopia e Nadir dentro da região de confiança associados aos dados experimentais causados pela etapa de otimização individual;

- (d) Definir os melhores pontos de inicialização do algoritmo GRG usado para encontrar as soluções do problema multiobjetivo em cada vetor de peso desejado e comparar estas soluções com as obtidas com o AG;
- (e) Utilizar função de teste para validar o método de otimização proposto.

1.5 Delimitação do Trabalho

Com o desenvolvimento do método de otimização multivariado por escores de fator, tem-se o intuito de aplica-lo nos diversos processos de fabricação, os resultados apresentados na presente pesquisa estão delimitados aos seguintes aspectos:

- (a) Processo de fabricação: Limitou-se ao processo de torneamento do aço endurecido ABNT H13 com dureza de 54 HRC, com inserções mistas de cerâmica, a ferramenta é de fabricação da Sandvik classe CC6050, espera-se a aplicação e êxito do método em diferentes processos de fabricação;
- (b) No planejamento e a realização dos experimentos foi considerado apenas Arranjo Composto Central (Central Composite Design - CCD);
- (c) Os algoritmos de busca utilizados para definição dos pontos de inicialização foram GRG e AG;
- (d) Foi utilizado o método MMSE para representar os grupos de respostas correlacionadas;
- (e) Os escores dos fatores para representar o conjunto de respostas foi extraído pela ACP e Máxima Verossimilhança.

1.6 Método

Essa pesquisa classifica-se:

- Quanto à natureza: tem característica **aplicada**, pelo uso de metodologia de coleta e análise dos dados experimentais reais, fundamentais para soluções aos questionamentos apontados no problema de pesquisa e secundária por utilizar de um banco de dados industrial (APPOLINARIO, 2009) e (MARCONI; LAKATOS, 2017)
- Quanto aos objetivos: é caracterizada como **explicativa e normativa**, pois permite ao pesquisador obter evidências do estudo por meio da mensuração de variáveis, classificando-as e analisando-as de forma a comprovar hipóteses de teorias sobre técnicas disponíveis na literatura (BERTRAND; FRANSOO, 2002).

- Quanto à abordagem do problema: classificada como **quantitativa**, os dados coletados foram quantificados e tratados estatisticamente (GERHARDT; SILVEIRA, 2019).
- Quanto ao método de pesquisa: **modelagem**, para avaliar o desempenho do método NBI para otimização multiobjetivo é necessário simulação de vários pontos de inicialização do algoritmo GRG e AG para encontrar a melhor resposta, assim a modelagem torna-se necessário para abstração deste problema como um modelo matemático computadorizado (BRAILSFORD *et al.*, 2019).

1.7 Estrutura do trabalho

Esta tese está dividida em uma estrutura de cinco capítulos nomeados e descritos como:

- **Capítulo 1:** Apresenta um contexto sobre problemas com otimização multiobjetivo correlacionada, além da justificativa, problema de pesquisa, objetivos, delimitação do trabalho e metodologia.
- **Capítulo 2:** Apresenta a revisão bibliográfica dos principais conceitos relacionados aos métodos de otimização multiobjetivo, métodos de ponderação para múltiplas respostas e aos algoritmos de otimização, incluindo trabalhos publicados no meio científico.
- **Capítulo 3:** Apresenta o método proposto para otimização de processos com múltiplas respostas correlacionadas.
- **Capítulo 4:** Apresenta resultados para validação do método, foi utilizado como base de dados os experimentos realizados em um processo de torneamento do aço temperado ABNT H13 com ferramenta CC6050.
- **Capítulo 5:** apresenta as conclusões, contribuições e sugestões para trabalhos futuros.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Métodos Estatísticos de Modelagem e Análise

2.1.1 Delineamento de experimentos

Delineamento de experimentos (Design of Experiments-DOE) é uma metodologia de projeto experimental estatística para executar os experimentos e avaliar os resultados. Os projetos DOE são categorizados em fatorial completo, fatorial fracionário, superfície de resposta, desenhos de Plackett Burman e Taguchi, etc. (REDDY; SHYAMALA, 2016).

As técnicas de projeto e análise de experimentos são definidas como o processo de planejamento dos experimentos para que dados apropriados sejam coletados e depois analisados por métodos estatísticos, resultando em conclusões válidas e objetivas. Dessa forma, qualquer problema experimental deve ser sustentado por dois elementos: o projeto dos experimentos e a análise estatística dos dados. Os principais benefícios no uso desta técnica são: melhorar as características de qualidade dos produtos e processos de fabricação, reduzir o número de testes e otimizar o uso de recursos da empresa (material, tempo dos funcionários, disponibilidade de equipamentos, etc.) (MONTGOMERY, 2008).

De acordo com LEME *et al.* (2014), estes métodos de projeto experimental são uma coleção de técnicas estatísticas capazes de gerar e analisar projetos experimentais nos quais vários fatores são variados simultaneamente. O DOE é amplamente utilizado no gerenciamento de produção e operação, bem como na fabricação e controle de qualidade, e a metodologia procura planejar um projeto experimental para que dados apropriados possam ser obtidos que levem a boas conclusões, usando um número mínimo de experimentos (MONTGOMERY, 2008).

A metodologia do DOE é uma das principais estratégias disponíveis para a melhoria de processos. Com base em uma análise sistematizada do problema, procurou-se avaliar a magnitude das diversas fontes de variação que influenciam um processo (PAIVA *et al.*, 2012)

O processo deve começar com a identificação e seleção de fatores que podem contribuir para uma variação e então prosseguir com a seleção de um modelo que inclua os fatores escolhidos, definindo seus níveis e planejar experimentos eficientes para estimar seus efeitos (MONTGOMERY, 2008).

Durante a realização de um experimento, deve-se estar atento para detectar quaisquer anormalidades que ocorram, bem como documentá-las para análise posterior quando os fatores incluídos no modelo forem estimados, aplicar os métodos estatísticos apropri-

ados, de modo a culminar em inferência, interpretação e discussão de resultados, bem como a recomendação de melhorias quando necessário (PAIVA *et al.*, 2012).

Casos de de sucesso no emprego desta metodologia podem ser observados em (JUNIOR 2003) e (PAIVA *et al.* 2012). A Tabela 2.1, reúne as principais características relacionadas a cada uma dessas técnicas de projetos e análise de experimentos.

Tabela 2.1 – Características fundamentais das principais técnicas do Projeto e Análise de Experimentos (Adaptado de NILO JÚNIOR, 2003)

Projeto experimental	Vantagens	Desvantagens	Aplicações
Fatorial Completo $2k$	Permite a varredura completa da região de estudo, utiliza todos os fatores e respectivos níveis	Não identifica variação intermediária, trabalha em dois níveis. Necessita de um alto número de experimentos para problemas com grande número de variáveis	Processos no qual já se tem um prévio domínio e no qual a realização das experimentos não demanda maior tempo ou custo
Fatorial Fracionado $2(k-p)$	Permite uma pré-análise do processo com um número reduzido de experimentos	Não promove a varredura completa da região experimental	Processos no qual se deseja um pré-conhecimento e no qual a literatura é limitada Experimentos que demandam maior tempo ou custo
Taguchi	Permite a análise de um processo com muitas variáveis de entrada com um número extremamente reduzido de experimentos	Fornecer uma idéia do processo, porém pode apresentar modelos matemáticos não confiáveis	Processos no qual há pouco ou quase nenhum conhecimento prévio de comportamento. Processos com alta dispersão ou que as experimentos demandem alto custo ou tempo
Metodologia da Superfície de Resposta	Permite a verificação de variações intermediárias do processo	Pode apresentar erros na extrapolação dos pontos estrela, já que são realizadas poucas experimentos nestes níveis	Otimização de processos, principalmente bem conhecidos e com baixa dispersão.

A pesquisa experimental ganhou considerável importância na pesquisa organizacional devido principalmente a dois fatores: o primeiro relaciona-se com a força deste método de pesquisa para permitir que o pesquisador faça fortes declarações de causalidade; o segundo diz respeito à facilidade encontrada pelo pesquisador para estabelecer relações de causa e efeito, fazendo com que o experimento seja considerado um modelo de projeto de pesquisa.

2.1.2 Metodologia de Superfície de Resposta

A Metodologia da Superfície de Resposta (Response Surface Methodology – RSM) é um conjunto de técnicas matemáticas e estatísticas que são úteis para modelagem e análise nas aplicações em que a resposta de interesse seja influenciada por várias variáveis e o objetivo seja otimizar essa resposta MONTGOMERY (2008) e HE *et al.* (2012), a MSR originou no trabalho de BOX; WILSON (1951) em processos químicos, projetos com RSM são usados para:

- Encontrar as melhores ou ótimas configurações de processo;
- Solucionar problemas de processo e os pontos fracos;
- Fazer um produto ou processo mais robusto contra as influências externas não controláveis.

O principal objetivo das técnicas de RSM é a otimização do processo. Isso pode significar, por exemplo, minimizar o custo da operação de um processo de produção, minimizar a variabilidade de uma característica de qualidade, maximizar o rendimento de um processo químico, ou atingir as especificações desejadas para uma resposta. Evidentemente, múltiplas respostas de interesse são geralmente consideradas em problemas práticos de modo a otimizar um processo industrial, métodos RSM sugerem a construção de um modelo paramétrico para a resposta esperada utilizando experimentos planejados. Estes modelos devem ser aproximações locais, válidas em uma pequena região experimental (CASTILHO, 2007).

Assim a primeira etapa do RSM é encontrar uma aproximação adequada para a relação verdadeira entre resposta de interesse e as variáveis do processo. Normalmente, um polinômio de ordem inferior de alguma região das variáveis independentes é empregado. Se a resposta é bem modelada por uma função linear das variáveis independentes, então a função aproximada é o modelo de primeira ordem representada por:

$$y = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \dots + \beta_{k1}x_k + \epsilon \quad (2.1)$$

Da qual:

y =Resposta de interesse

x_i =Variáveis independentes

β_i =Coeficientes a serem estimados
 k =Número de variáveis independentes
 ϵ =Erro experimental

Quando a resposta de interesse apresentar um comportamento linear, deve-se utilizar das informações do modelo de primeira ordem para buscar a região de curvatura. Para isso, CASTILHO (2007) e MONTGOMERY (2008) sugeriram o emprego do método do vetor gradiente (steepest descent/ascent). Basicamente, este método possibilita que, a partir de uma primeira aproximação linear da resposta, passos sejam calculados ao longo do espaço experimental, sendo a região de curvatura identificada através da realização de experimentos em cada passo conforme representado na Figura 2.1.

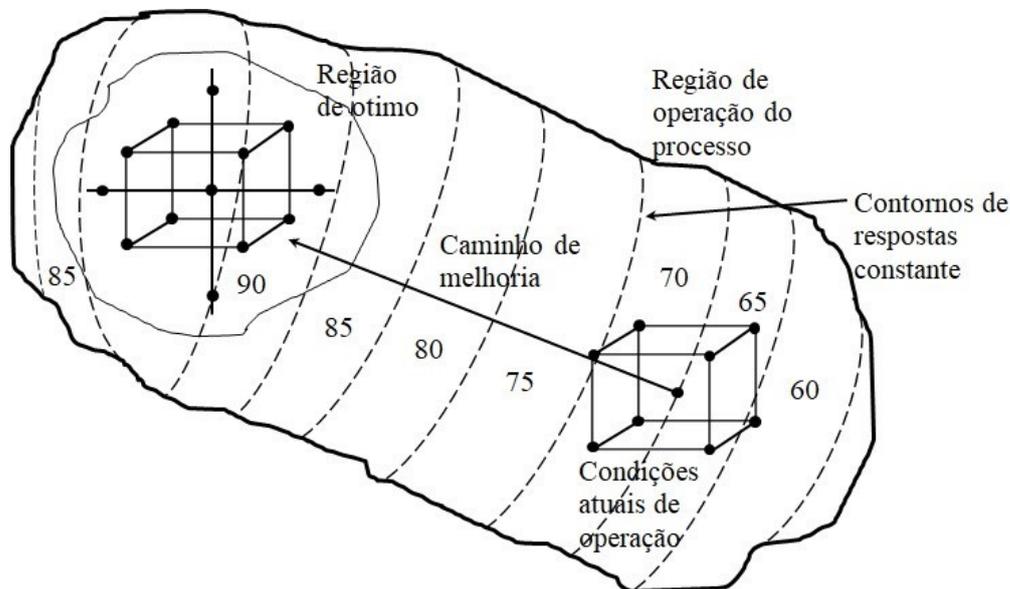


Figura 2.1 – Sequência natural da RSM

Se a resposta apresentar curvatura, então um polinômio de ordem mais alta deve ser utilizado, como o modelo de segunda ordem, por exemplo:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon \quad (2.2)$$

Antes de explorar o caminho de máxima ascensão, a adequação do modelo de primeira ordem deve ser investigada. O fatorial 2^2 com pontos centrais permitem:

1. Obter uma estimativa do erro;
2. Verificar se há interações (produto cruzado termos) no modelo;
3. Verificar os efeitos quadráticos (curvatura).

O método dos Mínimos Quadrados Ordinários (Ordinary Least Squares - OLS) é tipicamente usado para estimar os coeficientes (β) dos modelos das Eq. 2.1 e 2.2, assim tem-se uma função aproximada que relaciona a resposta de interesse com as variáveis do processo. Após a construção do modelo. Uma investigação é realizada através da análise de variância, a estimativa do erro (falta de ajuste do modelo) é feita através da replica dos pontos centrais, para fatorial 2^2 adiciona-se pontos intermediários de pontos centrais iguais a 0, aos níveis ± 1 , a diferença entre as médias das respostas dos fatoriais e pontos centrais for pequena, então o pontos centrais cai dentro ou próximo ao plano que passa através dos pontos fatoriais, nesse caso não há curvatura, se a diferença for grande, haverá curvatura presente.

Além disso, a análise de variância também permite verificar quais entre os termos (individuais e interações) do modelo são significativos e quais podem ser removidos. A verificação dos efeitos dos termos quadráticos é feita comparando-se a soma dos quadrados para curvatura quadrática pura com o erro médio quadrático. Um entendimento melhor sobre o método dos Mínimos Quadrados Ordinários, a Análise de Variância e o ajuste dos modelos é encontrada em (PAIVA 2006).

O arranjo experimental mais utilizado em Metodologia de Superfícies de Resposta para modelos de segunda ordem é o CCD. Segundo BOX; WILSON (1951) e KHURY; MUKHOPADHYAY (2010), um CCD para k fatores são formados ou compostos por três partes:

- 1- Fatorial completo (2^k) ou fracionado ($2^k - p$), p é a fração desejada do experimento), cujos níveis dos fatores são codificados como -1 e +1;
- 2- Conjunto de pontos centrais (m)
- 3- Grupo de níveis extras denominados pontos axiais (2^k)

Grande parte da utilização do CCD evoluiu a partir de seu uso na experimentação sequencial que envolve o uso do fatorial de dois níveis ou fracionário (resolução V) combinado com o axial $2k$ ou pontos estrela MONTGOMERY (2008). O número de pontos axiais em um CCD é igual ao dobro do número de fatores e representam seus valores extremos. Em função da localização dos pontos axiais, o CCD pode ser circunscrito, inscrito ou de face centrada.

Onde α é a distância entre o centro e os pontos axiais. A Tabela 2.2, reúne as principais características relacionadas a cada uma dessas técnicas de projetos e análise de experimentos.

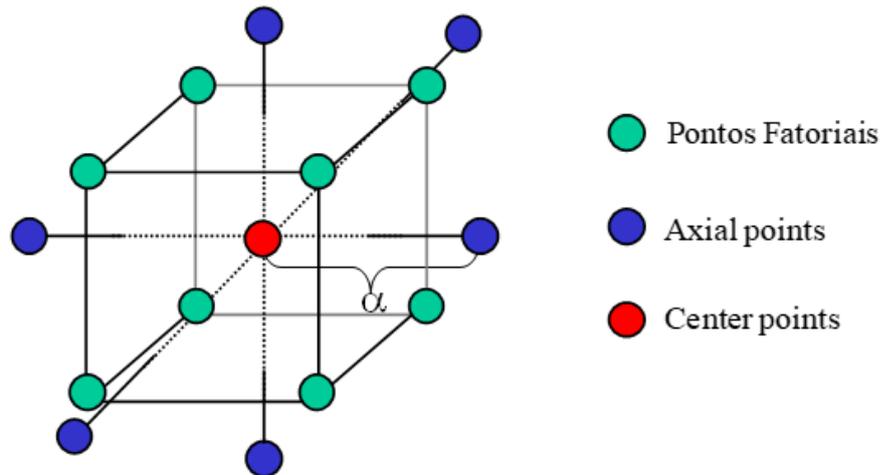


Figura 2.2 – CCD para três fatores

Tabela 2.2 – Resumo das propriedades dos três tipos de CCD

Tipo de CCD	Terminologia	Comentários
Circunscrito	CCC	Projetos CCC é a forma original do CCD. Os pontos axiais estão a uma distância α a partir do centro em função das propriedades desejadas e o número de elementos do projeto. Os pontos axiais estabelecer novos extremos para as configurações de baixa e alta para todos os fatores. Estes projetos têm simetria circular, esférico, ou hiperesférico e requerem cinco níveis para cada fator. O CCC pode ser utilizado para aumentar um fatorial já existente ou realizar fatorial fracionário de resolução V com pontos axiais.
Inscrito	CCI	Para as situações em que os limites especificados para as configurações de fator não podem ser extrapolados, o projeto CCI usa as configurações dos níveis de fatores como pontos axiais e cria um fatorial completo ou fracionado dentro desses limites (em outras palavras, um projeto CCI é um projeto CCC reduzido com cada nível de fator de concepção CCC dividido por gerar o projeto CCI). Este projeto também exige cinco níveis de cada fator.
Face centrada	CCF	Neste projeto os pontos axiais são o centro de cada face do espaço fatorial, $\alpha = \pm 1$. Esta variedade requer três níveis de cada fator. O CCF pode ser utilizado para aumentar um fatorial já existente ou realizar fatorial fracionário de resolução V com pontos axiais.

Um CCC explora o maior espaço experimental possível, enquanto um CCI explora o menor. O valor de α depende do número de experimentos da porção fatorial do CCD. Assim, segundo BOX; HUNTER (1987), $\alpha = (2^k)^{1/4}$, sendo k o número de fatores analisados.

Processos de vida mais reais precisam ser otimizados com relação a vários critérios simultaneamente. Frequentemente, as condições de operação precisam satisfazer várias condições ou restrições m sobre as respostas, y_1, \dots, y_m . Por exemplo, na concepção de um novo produto, especificações do produto têm de ser satisfeitas as quais determinam o desempenho do produto durante a utilização. Num processo de fabricação, há sempre pelo menos duas respostas de interesse em cada processo. A Metodologia de Superfície de Resposta tem sido utilizada com frequência por vários pesquisadores, contribuindo para a otimização e para um melhor entendimento acerca dos fenômenos que caracterizam os mais diversos processos de fabricação (CASTILHO 2007).

2.1.3 Medidas de distância multivariada

A distância euclidiana é a medida de distância para análise multivariada mais utilizada para a análise de agrupamentos. Considerando o caso mais simples, no qual existem n indivíduos, onde cada um dos quais possuem valores para p variáveis, a distância euclidiana entre eles é obtida mediante o teorema de Pitágoras, para um espaço multidimensional como descrito na Eq. (2.3).

$$d^2(x, y) = (x - y)^T(x - y) = \sum_{k=1}^p (x_k - y_k)^2 \quad (2.3)$$

Segundo Manly (1986), a distância euclidiana, quando for estimada a partir das variáveis originais, apresenta a inconveniência de ser influenciada pela escala, de medida pelo número de variáveis e pela correlação existente entre as mesmas". Se as p coordenadas possuem diferentes variância e S é a matriz de covariâncias amostral, a distância entre dois vetores considerando diferentes escalas entre as variáveis, considerando $\Psi = D^{-1} = \text{diag}(1/S_{kk})$, $k=1, 2, \dots, p$, a distância padronizada quadrática é definida como:

$$d^2(x, y) = (x - y)^T D^{-1}(x - y) = \sum_{k=1}^p \frac{(x_k - y_k)^2}{S_{kk}} \quad (2.4)$$

também conhecida como distância de Karl Pearson.

Para contornar os efeitos de escalas diferentes, faz-se a padronização das variáveis em estudo, para que possuam a variância unitárias.

Já para número p de variáveis a análise fatorial se encarrega de reduzir a dimensão, sem perder as características das variáveis originais e para as correlações entre as variáveis deve considerar no cálculo da distância o grau de dependência entre estas variáveis. A

medida mais utilizada, para a quantificação das distâncias entre duas populações, quando existe repetição de dados, é a distância multivariada de Mahalanobis.

Conforme FERREIRA (2018), a distância de Mahalanobis, considera as variâncias (escalas) e as covariâncias (estrutura de correlação), sendo recomendada para dados provenientes de delineamento experimentais, e, principalmente, quando as variáveis são correlacionadas. Quando as correlações entre as variáveis forem nulas, considera-se as variáveis padronizadas, e a distância de Mahalanobis D^2 é equivalente à distância euclidiana.

A distância entre dois pontos $x = (x_1, \dots, x_p)^t$ e $(y_1, \dots, y_p)^t$, em um espaço p -dimensional R^p é definido como:

$$d_E(x, y) = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + \dots + (x_p - y_p)^2} = \sqrt{(x - y)^t(x - y)} \quad (2.5)$$

E $d_E(x, 0) = \|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_p^2} = \sqrt{x^t x}$ é a distância euclidiana normal de x .

Seguem-se imediatamente que todos os pontos com a mesma distância de a origem $\|x\|_2 = c$ satisfaz $(x_1^2, \dots, x_p^2) = c^2$ que é a equação de um esferoide. Isso significa que todos os componentes de uma observação x contribuem igualmente para a distância euclidiana de x do centro. No entanto, nas estatísticas, o ideal é uma distância que para cada um dos componentes (as variáveis) leve em conta a variabilidade dessa variável ao determinar sua distância do centro. Componentes com alta variabilidade devem receber menos peso do que componentes com baixa variabilidade. Isso pode ser obtido redimensionando o componentes.

Denota-se $u = \left(\frac{x_1}{s_1}, \dots, \frac{x_p}{s_p}\right)$ e $v = \left(\frac{y_1}{s_1}, \dots, \frac{y_p}{s_p}\right)$ então defini-se a distância entre x e y .

$$d(x, y) = d_E(u, v) = \sqrt{\left(\frac{x_1 - y_1}{s_1}\right)^2 + \dots + \left(\frac{x_p - y_p}{s_p}\right)^2} = \sqrt{(x - y)^t D^{-1}(x - y)} \quad (2.6)$$

Onde $D = \text{diag}(s_1^2, \dots, s_p^2)$. Para a distância euclidiana normal de x fica:

$$\|x\| = d(x, 0) = d_e(u, 0) = \|u\|_2 \text{ então}$$

$$\|u\|_2 = \sqrt{\left(\frac{x_1}{s_1}\right)^2 + \dots + \left(\frac{x_p}{s_p}\right)^2} = \sqrt{x^t D^{-1} x} \quad (2.7)$$

E os pontos com a mesma distância da origem $\|x\| = c$ satisfaça $\left(\frac{x_1^2}{s_1^2}, \dots, \frac{x_p^2}{s_p^2}\right) = c^2$ que é a equação de um elipsoide centrado na origem com eixos principais iguais aos eixos de coordenadas.

Finalmente, deve-se levar em consideração a correlação entre as variáveis ao calcular distâncias estatísticas. Os eixos do elipsoide devem refletir essa correlação. Isso

é obtido permitindo que os eixos do elipsoide em uma distância constante ao rotacionar. Isso produz a seguinte forma geral para o distância estatística entre dois pontos é a distância de Mahalanobis (2.8):

$d_s(x, y) = \sqrt{(x - y)^t S^{-1} (x - y)}$ e $d_s(x, 0) = \|x\|_s = \sqrt{x^t S^{-1} x}$ é a normal de x . E os pontos com a mesma distância da origem $\|x\| = c$ satisfaz $x^t S^{-1} x = c^2$ é a equação geral de um elipsoide centrado na origem. Em geral, o centro das observações serão diferentes da origem para a distância de uma observação em relação ao seu centro \bar{x} é dado por:

$$d_s(x, \bar{x}) = \sqrt{(x - \bar{x})^t S^{-1} (x - \bar{x})} \quad (2.8)$$

Onde S é a matriz de dispersão amostral comum a todas as unidades que, no caso de delineamentos experimentais, trata-se da matriz de variâncias e covariâncias residuais.

2.1.4 Elipse de confiança

A elipse de confiança foi utilizada para confirmar se os pontos de ótimo da fronteira definidos pelo método MMSE-NBI encontra-se dentro da mesma, sabe-se que ao realizar um CCD, existe a probabilidade de alguns pontos estarem fora da região de confiança, isso é devido a dispersão dos pontos ao longo do eixo maior associado aos erros sistemáticos, enquanto que, ao longo do eixo menor, está associado aos erros aleatórios.

O método MMSE-NBI faz com que a fronteira construída domine todas as respostas obtidas pelo CCD, caso tenha resposta fora da elipse, alguns pontos da fronteira também ficará fora, obtendo assim pontos de ótimo irreais.

A distância entre dois pontos em uma elipse é dada pela decomposição espectral é escrita como:

$$\mathbf{x}^T [\Sigma^{-1}] \mathbf{x} = \left(\frac{x_1}{\sqrt{\sigma_{11}}} \right)^2 + \left(\frac{x_2}{\sqrt{\sigma_{22}}} \right)^2 = \frac{x_1^2}{\sqrt{\sigma_{11}}} + \frac{x_2^2}{\sqrt{\sigma_{22}}} = [x_1 x_2] \begin{bmatrix} 1/\sigma_{11} & 0 \\ 0 & 1/\sigma_{22} \end{bmatrix} = c^2$$

$$\mathbf{x}^T [\Sigma^{-1}] \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \left[\frac{1}{\lambda_1} e_1 e_1^T + \frac{1}{\lambda_2} e_2 e_2^T \right] \mathbf{x} = \frac{1}{\lambda_1} (\mathbf{x}^T e_1) + \frac{1}{\lambda_2} (\mathbf{x}^T e_2) = c^2$$

$$\mathbf{x}^T [\Sigma^{-1}] \mathbf{x} = \frac{1}{c^2 \lambda_1} (\mathbf{x}^T e_1 e_1)^2 + \frac{1}{c^2 \lambda_2} (\mathbf{x}^T e_2 e_1)^2 = 1$$

$$\text{Se } e_2 = 0 \rightarrow \frac{1}{\lambda_1} (x^T e_1)^2 = c^2. : x^T e_1 = c\sqrt{\lambda_1}$$

$$\text{Se } e_1 = 0 \rightarrow \frac{1}{\lambda_2} (x^T e_2)^2 = c^2. : x^T e_2 = c\sqrt{\lambda_2}$$

$$\text{Portanto } a = c\sqrt{\lambda_1}; b = c\sqrt{\lambda_2}$$

Os autovalores de Σ podem ser obtidos a partir de:

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \left[\text{tr}(\Sigma) \pm \sqrt{[\text{tr}(\Sigma)]^2 - 4|(\Sigma)|} \right] \quad (2.9)$$

Os pontos que caem a uma distância c em uma elipse cujos eixos são dados pelos autovetores de Σ com comprimento proporcional ao inverso da raiz quadrada dos autovalores conforme Figura 2.3

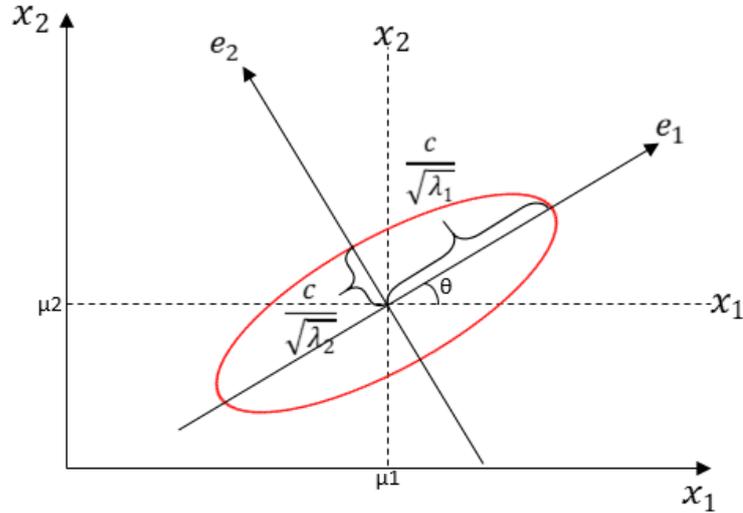


Figura 2.3 – Interpretação geométrica dos autovalores

A equação de uma elipse centrada no vetor de médias $\mu^T = [\mu_{x1}; \mu_{x2}]$, com semi-eixos de comprimentos iguais a $\sqrt{\lambda_{11}}; \sqrt{\lambda_{22}}$ e com $\rho = 0$ pode ser escrita como:

$$f(x_1, x_2) = \left(\frac{x_1 - \mu_{x1}}{\sqrt{\sigma_{11}}} \right)^2 + \left(\frac{x_2 - \mu_{x2}}{\sqrt{\sigma_{22}}} \right)^2 = \sum_{i=1}^p Z_i^2 x_{(p, \alpha/2)}^2$$

$$f(x) = \begin{bmatrix} x_1 - \mu_{x1} & x_2 - \mu_{x2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sigma_{11} & 0 \\ 0 & 1/\sigma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - \mu_{x1} \\ x_2 - \mu_{x2} \end{bmatrix}$$

$$f(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mu)^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mu)$$

Com a decomposição espectral, o elipsoide de Σ pode ser obtidos a partir de:

$$(\mathbf{x} - \mu)^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mu) = c^2$$

$$(\mathbf{x} - \mu)^T P \Lambda^{-1} P^T (\mathbf{x} - \mu) = c^2$$

$$\left[P^T (\mathbf{x} - \mu) \right]^T \Lambda^{-1/2} \Lambda^{-1/2} \left[P^T (\mathbf{x} - \mu) \right] = c^2$$

$$\sqrt{\left[P^T (\mathbf{x} - \mu) \right]^T \Lambda^{-1/2} \Lambda^{-1/2} \left[P^T (\mathbf{x} - \mu) \right]} = \sqrt{c^2}$$

$$\Lambda^{-1/2} \left[P^T (\mathbf{x} - \mu) \right] = \sqrt{\chi^2}$$

Como a matriz de autovetores de Σ é ortonormal, $P^T = P^{-1}$. Dessa forma, tem-se:

$$[P^T(\mathbf{x} - \mu)] = \sqrt{\chi^2} \Lambda^{1/2}$$

$$[P^{-1}(\mathbf{x} - \mu)] = \sqrt{\chi^2} \Lambda^{1/2}$$

$$(\mathbf{x} - \mu) = P[\sqrt{\chi^2} \Lambda^{1/2}]$$

$$\mathbf{x} = \mu + P[\sqrt{\chi^2} \Lambda^{1/2}]$$

Suponha que o ponto $P_1(x_1, y_1)$ forme um ângulo β com o eixo x . A partir deste ponto, e ainda que aplique uma rotação de tamanho α em relação a sua posição inicial, de modo que, em relação ao eixo x , forme um ângulo resultante $(\alpha + \beta)$.

A relação $x_1 = r \cos \beta$ e $y_1 = r \sin \beta$ pode ser obtida na Figura 2.4, para as coordenadas de $P_1(x_1, y_1)$.

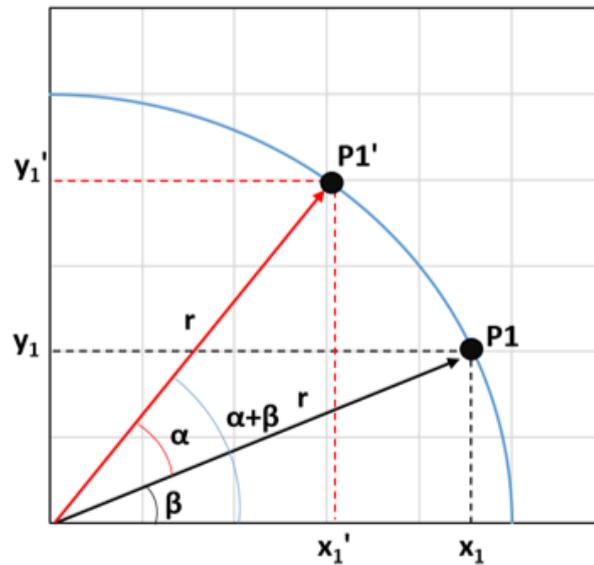


Figura 2.4 – Coordenadas de $P_1(x_1, y_1)$

Então, as coordenadas do ponto rotacionado P_1' serão, respectivamente:

$$x_1' = r[\cos(\alpha + \beta)] = r \cos \alpha (\cos \beta) - r \sin \alpha (\sin \beta)$$

$$x_1' = r[\cos(\alpha + \beta)] = r (\cos \beta) \cos \alpha - (r \sin \beta) \sin \alpha$$

$$x_1' = r[\cos(\alpha + \beta)] = x_1 \cos \alpha - y_1 \sin \alpha$$

Analogamente:

$$y_1' = r[\sin(\alpha + \beta)] = r \sin \alpha (\cos \beta) - r \sin \beta (\cos \alpha)$$

$$y_1' = r[\sin(\alpha + \beta)] = (r \cos \beta) \sin \alpha - (r \sin \beta) \cos \alpha$$

$$y'_1 = r[\text{sen}(\alpha + \beta)] = x_1 \text{sen}\alpha + y_1 \text{cos}\alpha$$

Em notação matricial, pode-se escrever:

$$\begin{bmatrix} x'_1 \\ y'_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{cos}\alpha & -\text{sen}\alpha \\ \text{sen}\alpha & \text{cos}\alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}$$

Na Figura 2.5, é possível verificar que: $P = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{cos}\theta & -\text{sen}\theta \\ \text{sen}\theta & \text{cos}\theta \end{bmatrix}$

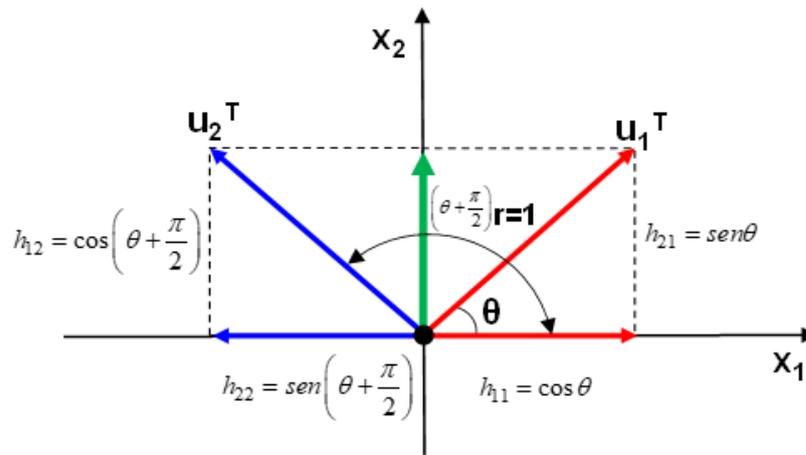


Figura 2.5 – Rotação de $P_1(x_1, X_2)$

As relações entre os autovetores da matriz de variância-covariância e o ângulo de rotação são escritas como:

$$\text{sen}\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) = \text{sen}\theta \cos \frac{\pi}{2} + \text{sen} \frac{\pi}{2} \text{cos}\theta = \text{cos}\theta$$

$$\text{cos}\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) = \text{cos}\theta \cos \frac{\pi}{2} - \text{sen}\theta \cdot \text{sen} \frac{\pi}{2} = -\text{sen}\theta$$

Uma elipse é o lugar geométrico compreendido entre duas circunferências de raios respectivamente iguais ao semi-eixo maior (a) e ao semi-eixo menor (b). Qualquer ponto Q da elipse pode ser escrito a partir das relações trigonométricas entre estas três regiões. Da Figura 2.6, tem-se a relação:

$$\overline{OS} = x. : x = (a)\text{cos}\alpha$$

$$\overline{MN} = y. : y = (b)\text{sen}\alpha$$

$$\begin{bmatrix} (a)\text{cos}\alpha \\ (b)\text{sen}\alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (a)c\sqrt{\lambda_1}\text{cos}\alpha \\ (b)c\sqrt{\lambda_2}\text{sen}\alpha \end{bmatrix} \text{ para } 0 \leq \alpha \leq 2\pi$$

$$\text{Como: } x = \mu + P[\sqrt{\chi^2 \Lambda^{1/2}}], P = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{cos}\theta & -\text{sen}\theta \\ \text{sen}\theta & \text{cos}\theta \end{bmatrix} \text{ e } \Lambda^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} \end{bmatrix}$$

Então, a equação da elipse rotacionada (θ) e paramétrica (α) pode ser obtida por:

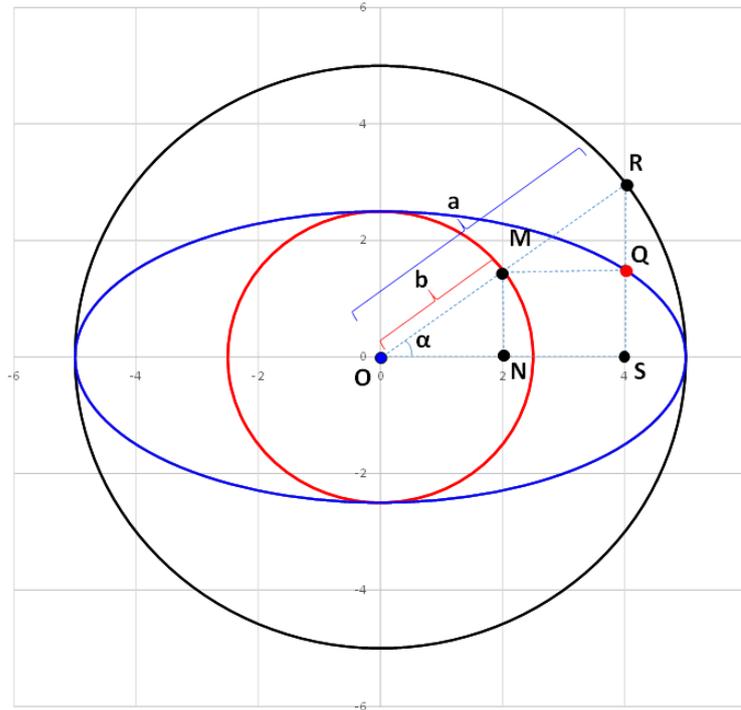


Figura 2.6 – Construção da elipse a partir de duas circunferências

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \cos\theta & -\text{sen}\theta \\ \text{sen}\theta & \cos\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\chi^2\lambda_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{\chi^2\lambda_2} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \cos\theta & -\text{sen}\theta \\ \text{sen}\theta & \cos\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\chi^2\lambda_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{\chi^2\lambda_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\alpha \\ \text{sen}\alpha \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\chi^2\lambda_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{\chi^2\lambda_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\alpha \\ \text{sen}\alpha \end{bmatrix} \text{ para } 0 \leq \alpha \leq 2\pi$$

E o modelo geral:

$$\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c\sqrt{\lambda_1}h_{11}\cos\alpha - c\sqrt{\lambda_2}h_{12}\text{sen}\alpha \\ c\sqrt{\lambda_1}h_{21}\cos\alpha + c\sqrt{\lambda_2}h_{22}\text{sen}\alpha \end{bmatrix} \text{ para } c = \sqrt{\chi_{p,\alpha/2}^2}; \text{ e } 0 \leq \alpha \leq 2\pi$$

2.1.5 Restrição de Khuri

Uma outra abordagem para um conjunto de múltiplas respostas é a proposta por (KHURY; COLON 1981). Os aspectos particulares desta abordagem se iniciam com a identificação e posterior remoção de dependências lineares entre as respostas de interesse.

Depois que as l dependências lineares são retiradas, uma regressão múltipla é utilizada sobre as $m - l$ respostas remanescentes, originando-se um modelo de segunda ordem para as funções. Cada uma das $m - l$ funções é otimizada individualmente, produzindo um vetor de ótimos individuais Φ . Se todas as respostas estimadas alcançarem seus respectivos ótimos para uma mesma combinação de fatores, x^* , então o problema está resolvido. De outro modo, se isto não ocorrer, então uma solução de compromisso deve ser calculada

usando a distância entre a resposta estimada e o correspondente valor de ótimo, tal que:

$$\begin{aligned}
 D &= [\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{x}) - \varphi]^T \hat{\Sigma}^{-1} [\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{x}) - \varphi] \\
 [\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{x})]^T &= [\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}) \quad \hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x}) \dots \hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] \\
 [\varphi]^T &= [\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}^*) \quad \hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x}^*)] \\
 \hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}) &= \mathbf{z}^T(\mathbf{x}) [(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^T \mathbf{Y}_1)] \\
 Var[\hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] &= \sigma_p^2 [\mathbf{z}^T(\mathbf{x}) (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{z}^T(\mathbf{x})] \\
 Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x})] &= \sigma_{12} [\mathbf{z}^T(\mathbf{x}) (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{z}^T(\mathbf{x})] = \sigma_{12} \sqrt{\sigma_1^2 \sigma_2^2} [\mathbf{z}^T(\mathbf{x}) (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{z}^T(\mathbf{x})] \\
 \mathbf{z}^T(\mathbf{x}) &= [1 \quad x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_k \quad x_1^2 \quad x_2^2 \quad \dots \quad x_k^2 \quad x_1 x_2 \quad x_1 x_3 \quad \dots \quad x_{k-1} x_k] \\
 \hat{\Sigma} &= \begin{bmatrix} Var[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x})] & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x})] & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_3(\mathbf{x})] & \dots & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] \\ Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x})] & Var[\hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x})] & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_3(\mathbf{x})] & \dots & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] \\ Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x})] & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_2(\mathbf{x})] & Var[\hat{\mathbf{Y}}_3(\mathbf{x})] & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] \\ Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] & Cov[\hat{\mathbf{Y}}_1(\mathbf{x}); \hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] & \dots & Var[\hat{\mathbf{Y}}_p(\mathbf{x})] \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\begin{cases} Max_{x \neq 0} (X^T \Sigma X) \\ \text{sujeito a.: } X^T X = 1 \implies (\lambda_1, e_1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} Max_{x \perp e_k} (X^T \Sigma X) \\ \text{sujeito a.: } X_k^T X_k = 1 \implies (\lambda_{k+1}, e_{k+1}) \\ X_k^T X_{k+1} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} Min_{x \neq 0} (X^T \Sigma X) \\ \text{sujeito a.: } X^T X = 1 \implies (\lambda_p, e_p) \end{cases}$$

Uma vez que são estimativas das funções de resposta, KHURY; COLON (1981) estabelecem que ϕ_i são os resultados de uma variável aleatória. Portanto, a minimização imediata de $\rho[\hat{y}(x) - \phi]$ pode conduzir a uma solução incorreta se for desconsiderada a aleatoriedade de ϕ . Para incorporar esta aleatoriedade, os pesquisadores introduzem, então, um intervalo de confiança para o ponto de ótimo verdadeiro para as $(m - l)$ respostas. O parâmetro é ϕ , então, trocado por um vetor aleatório ζ , e o mínimo de $\rho[\hat{y}(x) - \zeta]$ dentro do espaço experimental R não pode exceder o correspondente limite superior, determinado por:

$$\rho[\hat{y}(x) - \varsigma] \leq \min_{x \in R} \left\{ \max_{\eta \in D_\zeta} \rho[\hat{y}(x), \eta] \right\} \tag{2.10}$$

Neste caso D_ζ é a região de confiança em torno de ζ é um ponto em D_ζ . Segundo

KHURY; COLON (1981) e OSBORNE *et al.* (1997), os valores verdadeiros ζ_i estão cobertos pelo intervalo de confiança dado por:

$$\phi_i - g_i(X, \hat{\xi}_i) \sqrt{MS_{i,t\alpha/2,n-p}} \leq \varsigma \leq \phi_i + g_i(X, \hat{\xi}_i) \sqrt{MS_{i,t\alpha/2,n-p}}, \quad i = 1, 2, \dots, (m - \ell), \quad (2.11)$$

Onde $\hat{\zeta}$ é um ponto interior a R no qual prioridades (desirability para valores particulares de $\hat{y}(x)$) atingem o ótimo individual, ϕ . Nesta equação tem-se que:

$$g_i(X, \hat{\xi}_i) = \left[z^T(\hat{\xi}_i) (X^T X)^{-1} z(\hat{\xi}_i) \right]^{1/2} \quad (2.12)$$

O processo de otimização é realizado iterativamente em vários passos. A métrica de distância ρ é calculada utilizando o procedimento de busca randômica controlada de Price, conforme (OSBORNE *et al.* 1997).

Para cada x escolhido pelo algoritmo, ρ é maximizado com relação a η sobre D_ζ utilizando a técnica do gradiente restrito de CARROLL (1961), baseado no método do vetor gradiente dentro da região de interesse. As soluções que fornecem os menores valores de ρ são selecionadas. A abordagem procura minimizar a distância do ponto ideal usando pesos gerados pela inversa da matriz de variância-covariância e os intervalos de confiança para o máximo ideal verdadeiro, conforme Figura 2.7.

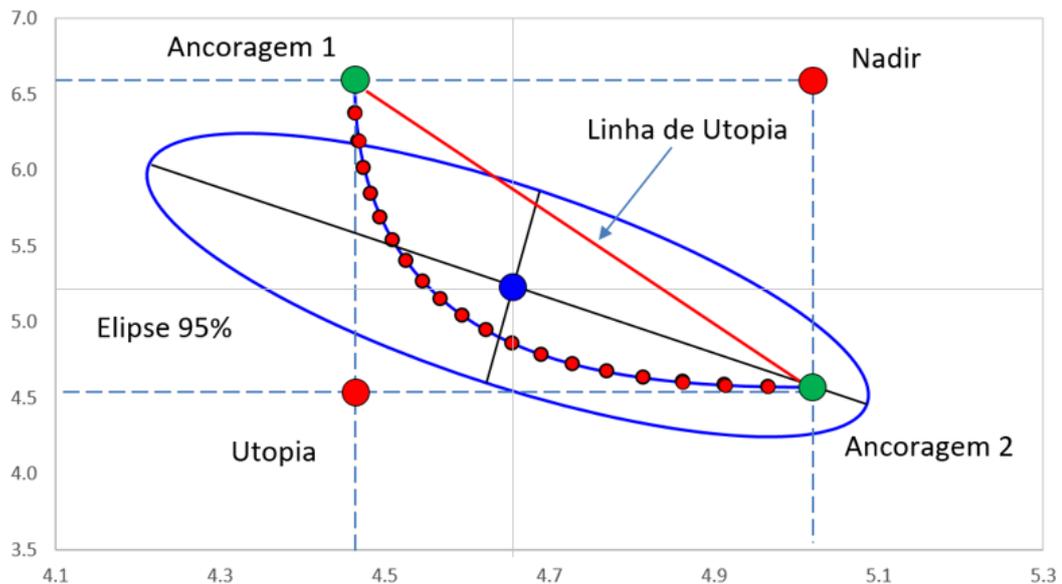


Figura 2.7 – Construção da fronteira sem restrição elíptica

Nesta pesquisa a restrição de Khuri exerce um papel fundamental ao impedir que a alguns pontos da fronteira fique fora da elipse de confiança, a restrição de Khuri deve ser considerada ao definir os pontos de ancoragem e quando for construída a fronteira de Pareto, de forma a garantir solução ótimas e reais.

2.2 Técnicas de Análise Multivariada

Análise multivariada de dados se refere a todas as técnicas estatísticas que avaliam, simultaneamente, múltiplas variáveis ou objetos sob investigação HAIR *et al.* (2006). Segundo JOHNSON; WICHERN (2007), a análise multivariada é um conjunto de técnicas estatísticas geralmente aplicadas em investigações científicas de reduções de dimensionalidades como ACP e AF, reduções de agrupamentos ou de classificações de variáveis similares baseado nas características medidas como a AHC e reduções de investigações das dependências entre variáveis, previsão, construção de hipóteses, entre outras aplicações como o método dos Mínimos Quadrados Parciais).

A análise de coeficiente de correlação e covariância são medidas utilizadas para avaliar a associação entre duas variáveis, quando os dados não apresentam valores discrepantes e possui um padrão linear (JOHNSON; WICHERN 2007). Para p variáveis com n medições podem-se escrever a correlação r e a variância e covariância S_n na forma matricial:

$$r = \begin{bmatrix} 1 & \dots & r_{12} & \dots & r_{1p} \\ r_{21} & \dots & 1 & \dots & r_{2p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{p1} & \dots & r_{p2} & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

$$S_n = \begin{bmatrix} s_{11} & \dots & s_{12} & \dots & s_{1p} \\ s_{21} & \dots & s_{22} & \dots & r_{2p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & \dots & s_{p2} & \dots & s_{pp} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

O desenvolvimento de procedimentos capazes de otimizar simultaneamente problemas com múltiplas respostas tem se tornado cada vez mais importante, procedimentos disponíveis não consideram as correlações entre as respostas e isto matematicamente torna complicada aplicação prática, pode-se obter uma solução irrealista. Além disso, as possíveis correlações entre as respostas podem causar dificuldade na otimização de múltiplas respostas simultaneamente (LEE *et al.* 2005).

2.2.1 Análise Componentes Principais

A PCA é um método de análise multivariado criado por PEARSON (1901) e desenvolvida por HOTELLING (1933) para combinações lineares não correlacionadas das respostas originais com redução de dimensionalidade sem perda da maioria das informações originais (FUL; CHYU 2004). A PCA geralmente revela relacionamentos que não seriam previamente identificados com o conjunto original, o que resulta em uma inter-

pretação mais abrangente do fenômeno. Segundo JOHNSON; WICHERN (2007), a PCA serve como um passo intermediário na análise dos dados.

Considerando que os resultados apresentados pelos métodos de otimização podem ser comprometidos caso o problema apresente mais do que duas funções objetivo ou apresentem funções correlacionadas, a pergunta que se faz é como diminuir a dimensionalidade de um problema de otimização que apresenta múltiplas funções objetivo correlacionadas (COSTA *et al.* 2016).

Suponha que $f_1(x), f_2(x), \dots, f_p(x)$ sejam funções correlacionadas, escritas a partir do vetor aleatório $Y^T = [Y_1, Y_2, \dots, Y_p]$. Assumindo que Σ seja a matriz de variância-covariância (ou matriz de correlação ρ) associada ao vetor Y^T , então, Σ (ou ρ) pode ser fatorada em pares de autovalores-autovetores $(\lambda_1, e_1), \dots, (\lambda_p, e_p)$, onde: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots, \lambda_p \geq 0$, de tal modo que a i -ésima combinação linear não correlacionada seja $PC_i = e_i^T Y = e_{1i}Y_1 + e_{2i}Y_2 + \dots + e_{pi}Y_p$, com $i = 1, 2, \dots, p$.

Esta combinação linear não correlacionada é chamada de escore de PC que pode ser escrita como $PC_{score} = [Z]x[E]$, onde Z é definida como uma matriz de dados padronizados e E como uma matriz de autovetores do conjunto de dados multivariados. O i -ésimo PC pode ser obtido a partir da maximização dessa combinação linear, restrita ao fato de que a $(i + 1)$ -ésima combinação linear seja independente da anterior, isto é, que a covariância entre as duas combinações lineares seja nula, o primeiro componente principal ($PC1$) é a combinação linear que possui a máxima variância (JOHNSON; WICHERN 2007).

Geralmente, os parâmetros ρ e Σ são desconhecidos, o que conduz à utilização da matriz de correlação amostral R_{ij} (no lugar de ρ) e variância-covariância S_{ij} (no lugar de Σ). Se as variáveis de interesse forem escritas no mesmo sistema de unidades ou se forem previamente padronizadas, a escolha mais comum para a extração dos componentes é a matriz S_{ij} , caso contrário, deve-se utilizar a matriz de correlação R_{ij} , conforme Eq.(2.15) (JOHNSON; WICHERN 2007).

$$\bar{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & \dots & S_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{q1} & \dots & S_{qp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 & \dots & \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{qj} - \bar{x}_p) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{qj} - \bar{x}_p) & \dots & \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{qj} - \bar{x}_p)^2 \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Assim, são escritos os componentes principais amostrais em termos de S e r .

$$\sum_{i=1}^p S_{ii} = \hat{\lambda}_1 + \hat{\lambda}_2 + \dots + \hat{\lambda}_p \quad (2.16)$$

$$r_{(\hat{\lambda}_i, x_k)} = \frac{Cov(x_k, \hat{\lambda}_i)}{\sqrt{Var(\hat{\lambda}_i)Var(x_k)}} = \frac{\hat{e}_{ki}\sqrt{\hat{\lambda}_i}}{\sqrt{S_{kk}}} \quad \text{para } i, k = 1, 2, \dots, p \quad (2.17)$$

O hiper-elipsoide centrado na média amostral \bar{x} , cujos eixos são os autovetores da matriz de covariância amostral S , possuindo comprimentos proporcionais aos seus autovalores. Então, tem-se que:

$$(x - \bar{x})^T S^{-1} (x - \bar{x}) = c^2 \quad (2.18)$$

A interpretação geométrica dos componentes principais de uma amostra é representada pelas Figuras 2.8 e 2.9. A Figura 2.8 representa uma elipse de distância constante, centrada em \bar{x} , com $\hat{\lambda}_1 > \hat{\lambda}_2$. Os componentes principais se situam em uma direção perpendicular aos eixos da elipse na direção de máxima variância. A Figura 2.9 representa uma elipse de distância constante centrada em \bar{x} , com $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$, os eixos da elipse (círculo) de distância constante não são determinados unicamente e podem estar em qualquer das duas direções perpendiculares, incluindo as direções dos eixos de coordenados originais.

Da mesma forma, os componentes principais da amostra podem estar em qualquer das duas direções perpendiculares incluindo as direções dos eixos de coordenados originais. Se os autovalores são iguais, a variação da amostra é homogênia em todas as direções e os componentes menores terão uma importância menor e seus autovalores são suficientemente pequenos de modo que a variação correspondente seja \hat{e}_i , tornando as direções desprezíveis. No caso do segundo componente principal, isto é caracterizado pela pequena dimensão do semi-eixo menor, os dados são adequadamente representados pelos primeiros componentes.

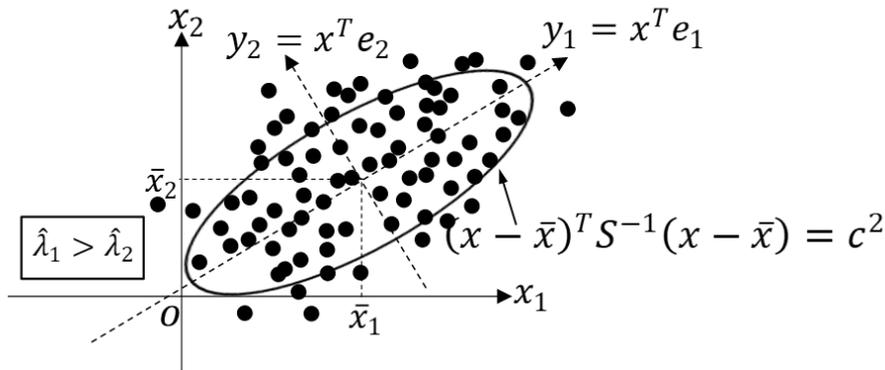


Figura 2.8 – Elipse de distância constante centrada em \bar{x} , com $\hat{\lambda}_1 > \hat{\lambda}_2$

Os escores de componentes principais podem ser obtidos a partir de combinações

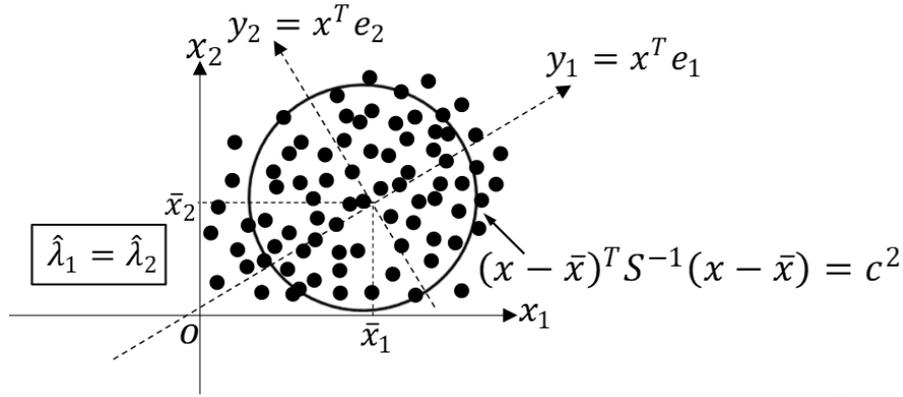


Figura 2.9 – Elipse de distância constante centrada em \bar{x} , com $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$

lineares utilizando matriz de variáveis padronizadas transposta, conforme Eq. 2.19.

$$PC_k = Z^T e = \begin{bmatrix} \left(\frac{x_{11} - \bar{x}_1}{\sqrt{S_{11}}}\right) & \left(\frac{x_{21} - \bar{x}_2}{\sqrt{S_{22}}}\right) & \dots & \left(\frac{x_{p1} - \bar{x}_p}{\sqrt{S_{pp}}}\right) \\ \left(\frac{x_{12} - \bar{x}_1}{\sqrt{S_{11}}}\right) & \left(\frac{x_{22} - \bar{x}_2}{\sqrt{S_{22}}}\right) & \dots & \left(\frac{x_{p2} - \bar{x}_p}{\sqrt{S_{pp}}}\right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{x_{1n} - \bar{x}_1}{\sqrt{S_{11}}}\right) & \left(\frac{x_{2n} - \bar{x}_2}{\sqrt{S_{22}}}\right) & \dots & \left(\frac{x_{pn} - \bar{x}_p}{\sqrt{S_{pp}}}\right) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1p} \\ e_{21} & e_{22} & \dots & e_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{q1} & e_{q2} & \dots & e_{qp} \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

Segundo SALMASNIA *et al.* (2012) um inconveniente das abordagens baseadas em ACP é não assegurar que todas as características de qualidade estarão dentro dos limites de especificação. Em sua pesquisa é proposto um procedimento sistemático através da análise Componentes Principais Ponderados (CPP) e abordagem *desirability* para otimização de múltiplas respostas correlacionadas. Esta abordagem não só obtém condições ideais de operação, mas também considera diferentes variâncias e níveis de correlação das respostas e impõe os objetivos satisfazendo as restrições.

O método CPP utiliza o coeficiente de determinação, quando a proporção do autovalor para o número de respostas originais são os pesos para combinar todos os componentes principais, a fim de formar um índice de desempenho multivariado. Unificar todos os efeitos de localização e dispersão através da correlação entre cada duas respostas e incluir limites de especificação para as mesmas.

O critério de CATTEL (1966) sugere que a amplitude dos autovalores seja representada graficamente em função do número dos autovalores, dispostos em ordem crescente. A seleção do número de componentes retidos é baseada no ponto de ruptura do gráfico. Este ponto de ruptura ocorre quando há uma queda brusca na amplitude dos autovalores SCREMIN (2003), ainda SOUZA (2000) afirma que todos os componentes principais cujo percentual acumulado de variação explicada supere um dado valor de referência devem

ser retidos.

Com base nos requisitos de engenharia, pode-se determinar a direção de otimização para cada componente principal usando o método gráfico. JOHNSON; WICHERN (2007), recomendam que uma seleção adequada é aquela que permita a seleção de até três componentes, e que representem um percentual acumulado de variação explicada entre 80 e 90%, para um número p de variáveis.

Para resolver esse problema, alguns pesquisadores têm utilizado os escores de todos os componentes principais significativos, ponderados pelos seus respectivos autovalores ou percentual de proporção acumulada, formando um único indicador, o qual denominaram de Componentes Principais Ponderados (Weighted Principal Components Analysis - WPCA) (WU; CHYU 2004; LIAO 2006; PAIVA *et al.* 2010; COSTA *et al.* 2011; LOPES *et al.* 2016; DAS *et al.* 2014; PERUCHI *et al.* 2013; COSTA *et al.* 2017a).

No entanto, quando as várias características correlacionadas também apresentam objetivos conflitantes, maximizar ou minimizar os componentes principais ponderados pode favorecer algumas variáveis em detrimento de outras. Nesse sentido, embora capaz de eliminar a correlação entre as múltiplas respostas, considerando a variabilidade dos dados originais, não é capaz de encontrar uma única solução que atenda a todos os múltiplos objetivos simultaneamente (COSTA *et al.* 2016a).

Alguns pesquisadores fizeram uso da padronização da direção de otimização para resolver tal problema, empregando-se a relação sinal-ruído de Tagushi nas respostas originais, como em BERTOLINI; SCHIOZER (2016); BOUZID *et al.* (2014); COSTA *et al.* (2016a); PRABHU; VINAYAGAM (2014), mas como sabe-se apenas que a relação Sinal-ruído deve ser maximizada, seu valor alvo e por conseguinte o alvo para os escores dos componentes principais ficam sem uma referência de valor, o mesmo pode-se dizer em relação as definições de alvos para as restrições envolvendo os escores.

A aplicação do método MMSE juntamente com a ACP tem sido eficaz em problemas com múltiplas respostas correlacionadas com objetivos conflitantes, o método considera de forma adequada, a estrutura de correlação, a dimensionalidade e os alvos estabelecidos para as múltiplas características. Ao adotar a minimização do quadrado da diferença entre a resposta estimada em termos de escores do componente principal e seus respectivos alvos, correlações extremamente fortes podem ser eliminadas, fazendo desse método uma alternativa para desacoplar as restrições dos eixos da fronteira de Pareto, normalizando, ao mesmo tempo, o sentido de otimização das funções objetivo e de restrição (PAIVA *et al.*, 2009; GOMES, 2013).

2.2.2 Análise Fatorial

A análise fatorial é uma técnica estatística multivariada, teve seus primeiros conceitos com Galton em 1888, depois em Spearman em 1904 propôs a atual modelagem da estrutura fatorial em estudos de testes de escores na inteligência humana. O modelo de um único fator de SPEARMAN (1904) foi generalizado posteriormente por THURSTONE (1931) para contemplar múltiplos fatores. Esta técnica é muito útil e poderosa e funciona efetivamente na extração de informações de grandes bancos de dados e mantém o senso de grandes coleções de dados inter-relacionados. (HAIR *et al.*, 2006).

Tanto a ACP como a AF são propostas para estudarem, a estrutura de covariância ou de correlações populacionais, a explicação total das covariâncias ou das correlações na PCA é feita utilizando todas as variáveis latentes, na AF, quando for possível modelar, ela explica todas as covariâncias e correlações, utilizando algumas poucas variáveis latentes, que são denominadas fatores comuns, a explicação total das covariâncias ou das correlações é feita por alguns poucos fatores, mas a explicação total das variâncias proporcionada por esses fatores é em geral, menor do que a proporcionada pelo mesmo número de componentes principais, assim o objetivo da AF é explicar fundamentalmente as covariâncias, enquanto a da PCA enfatiza as variâncias (FERREIRA 2018; HAIR *et al.* 2006; WILLIAMS *et al.* 2010; JOHNSON; WICHERN 2007).

A análise fatorial, segundo JOHNSON; WICHERN (2007), pode ser considerada uma extensão da análise de componentes principais e ambas podem ser vistas como tentativas de aproximar a matriz de covariância Σ . No entanto, a abordagem baseada no modelo de análise fatorial é mais elaborada que a análise de componentes principais. Outra diferença entre PCA e AF está na extração dos componentes, pela PCA tem-se apenas uma combinação linear para cada componente (sem rotação), pela AF pode-se obter inúmeras combinações lineares para cada fator de acordo o método de estimação dos fatores e para cada um dos métodos definidos pode-se escolher a distribuição dos pesos da rotação nos fatores (valor de gama).

A partir da álgebra matricial, sabe-se que uma transformação ortogonal corresponde a uma rotação rígida dos eixos coordenados e, por essa razão, uma transformação ortogonal da carga fatorial é denominada rotação do fator (JOHNSON; WICHERN 2007).

2.2.2.1 Modelo Fatorial Ortogonal

Considere o vetor aleatório p -dimensional $X = [X_1, X_2, \dots, X_p]^T$ com média μ ($p \times 1$) e covariância Σ ($p \times p$), o modelo fatorial é definido por:

$$X - \mu = LF + \epsilon \quad (2.20)$$

Em que $L = [l_{ij}]$ é uma matriz ($p \times p$) de coeficientes conhecidos por cargas fatoriais

de posto $m \leq p$, F é um vetor aleatório ($m \times 1$) de fatores comuns latentes não-observáveis e ϵ é um vetor ($p \times 1$) de erros aleatórios ou de fatores específicos. os elementos l_{ij} da matriz L representam as cargas fatoriais associadas à i -ésimo fator (F_j). O modelo fatorial associado a Eq. (2.20) é escrito como:

$$\begin{aligned} X_1 - \mu_1 &= l_{11}F_1 + l_{12}F_2 + \cdots + l_{1m}F_m + \epsilon_1 \\ X_2 - \mu_2 &= l_{21}F_1 + l_{22}F_2 + \cdots + l_{2m}F_m + \epsilon_2 \\ &\vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\ X_p - \mu_p &= l_{p1}F_1 + l_{p2}F_2 + \cdots + l_{pm}F_m + \epsilon_p \end{aligned}$$

A Eq. 2.20 pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} (X - \mu)F^T &= (LF + \epsilon)F^T, \text{ como } Cov(X) = E[(X - \mu)(X - \mu)^T], \text{ assim} \\ \Sigma &= E[LF(L^T F^T) + (LF)\epsilon^T + \epsilon(L^T F^T) + \epsilon\epsilon^T] \\ \Sigma &= LE(FF^T)L^T + LE(F\epsilon^T) + E(\epsilon F^T)L^T + \Psi \\ \Sigma &= LI_m L^T + L0_{m \times p} + 0_{p \times m}L^T + \Psi \end{aligned}$$

$$\Sigma = LL^T + \Psi \tag{2.21}$$

Dessa relação conclui-se que:

$$\begin{aligned} Var(X_i) &= \sigma_i^2 = l_{i1}^2 + l_{i2}^2 + \cdots + l_{im}^2 + \psi_i \\ Covar(X_i X_k) &= \sigma_{ik} = l_{i1}l_{k1} + l_{i2}l_{k2} + \cdots + l_{im}l_{km} \end{aligned} \tag{2.22}$$

Os fatores comuns e os fatores específicos são responsáveis por explicar as variâncias de cada variável, mas as covariâncias são explicadas integralmente pelos fatores comuns. Essa é uma das diferenças em ACP e AF, pois alguns poucos $m < p$ fatores explicam todas as covariâncias, mas são necessários todos os componentes para fazer o mesmo na ACP e que os elementos da diagonal de LL^T são denominados comunalidades ou variâncias comuns definidas por:

$$h_i^2 = \sum_{j=1}^m l_{ij}^2 = l_{i1}^2 + l_{i2}^2 + \cdots + l_{im}^2$$

que correspondem à primeira parte dos fatores comuns não observáveis de uma divisão do modelo fatorial em duas partes ($X_i - \mu_i = c_i + \epsilon$), sendo a segunda parte denominada de parte única, relativa aos fatores específicos. A parte comum (c_i) é definida por:

$$c_i = l_{i1}F_1 + l_{i2}F_2 + \cdots + l_{im}F_m$$

Assim a variância da variável aleatória X_i é representada por:

$$\sigma_{ii} = h_i^2 + \psi_i$$

Onde Ψ é uma matriz diagonal formada pelas variâncias específicas Ψ_i , como $\Psi_i = \sigma_i^2 - h_i^2$. O i^{th} comunalidade h_i^2 é a soma dos quadrados dos carregamentos da variável i^{th} nos m fatores comuns.

As novas cargas reproduzem a matriz de covariâncias Σ e podem ser rotacionadas usando uma transformação ortogonal até que uma estrutura mais simples seja alcançada, ou seja, a rotação do fator pode levar a uma separação de grupos que é mais fácil de interpretar. Neste caso, $L^* = LT$, onde $TT^T = T^T T = I$.

Essa transformação não altera as comunalidades e as variações específicas. embora a identificabilidade do modelo seja utilizada de forma favorável na realização de rotação fatorial, muitas vezes melhorando consideravelmente a interpretação dos fatores, ela exige a incorporação de restrições, duas categorias de restrições são utilizadas, a primeira chamada de caracterização de componentes principais da análise fatorial, impõe a restrição de que $T^T T$ deve ser uma matriz diagonal. A caracterização de correlação canônica é a segunda categoria, a qual impõe que $T^T \Psi^{-1} T$ seja diagonal (JOHNSON; WICHERN 2007 e FERREIRA 2018).

Para que os estimadores considerados livres de escala, segundo TIMM (2002) a caracterização de correlação canônica é adequada, enquanto a caracterização de componentes é inapropriada. Assim como na ACP um dos pontos mais importantes e ainda não bem definidos é em relação ao desconhecimento do real valor do número de fatores m . alguns autores advogam que o número m de fatores é igual ao posto da matriz semi-positiva definida $|\text{sum}-\Psi$, que é o mínimo igual a m .

O problema é que essas matrizes são desconhecidas em situações reais, testes de hipóteses sobre o ajuste do modelo, no caso de dados provenientes de uma normal p -variada, são aplicados para diferentes tamanhos de m e são utilizados para determinar o valor de m , embora, em geral esse valor seja superestimado (FERREIRA 2018).

Em situações reais os parâmetros do modelo fatorial são desconhecidos e precisam ser estimados a partir de uma amostra aleatória de tamanho n . o modelo fatorial só faz sentido quando a matriz Σ difere de uma matriz diagonal ou matriz de correlações ρ difere da matriz identidade I , pois nesses casos as variáveis aleatórias originais seriam não-correlacionadas. os métodos de estimação são divididos em métodos que são livres e em métodos que não são livres de escala.

Os métodos de extração do escores por componentes principais, por fatores principais e iterativo dos fatores principais não são livres de escala, enquanto métodos da máxima verossimilhança e das variáveis canônicas são livres de escala. Nos métodos não livres os resultados são diferentes quando analisamos pela matriz r ou S , enquanto nos livres pode-se migrar da matriz S para estimativas r por uma simples transformação linear

(HATDLE; SIMAR 2015).

2.2.2.2 Método dos Componentes Principais

Pela decomposição espectral ou de Jordan, toda matriz simétrica $A(p \times p)$ pode ser decomposta em

$$A = P\Lambda P^T = \sum_{i=1}^p \lambda_i x_i x_i^T \quad (2.23)$$

Este nome ao método causa confusão entre a AF e a ACP, a razão ao nome é devido as matrizes de autovalores e autovetores de Σ para determinar as cargas fatoriais. A matriz Σ é decomposta em

$$\Sigma = P\Lambda P^T = P\Lambda^{1/2}\Lambda^{1/2}P^T = LL^T \quad (2.24)$$

Na Eq. (2.20), \mathbf{L} é a matriz de cargas fatoriais que podem ser calculadas após a decomposição espectral da matriz de variância-covariância, como:

$$\Sigma = \lambda_1 e_1 e_1^T + \lambda_2 e_2 e_2^T + \dots + \lambda_p e_p e_p^T = \left[\sqrt{\lambda_1} e_1 \quad \sqrt{\lambda_2} e_2 \quad \dots \quad \sqrt{\lambda_p} e_p \right] \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} e_1^T \\ \sqrt{\lambda_2} e_2^T \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_p} e_p^T \end{bmatrix} = LL^T \quad (2.25)$$

As cargas fatoriais são os autovetores da matriz de variância-covariância Σ , escalados pelo fator $\sqrt{\lambda_j}$. Desde que $\Sigma = E(X - \mu)(X - \mu)^T$, então:

$$\begin{aligned} \Sigma &= E[(X - \mu)(X - \mu)^T] = E[(LF + \epsilon)(LF + \epsilon^T)] = E[(LF + \epsilon)(L^T F^T + \epsilon^T)] \\ \Sigma &= E[LF(L^T F^T) + \epsilon(L^T F^T) + (LF)\epsilon^T + \epsilon\epsilon^T] \\ \Sigma &= L \underbrace{E(FF^T)}_I L^T + \underbrace{E(\epsilon F^T)}_0 L^T + L \underbrace{E(F\epsilon^T)}_0 + \underbrace{E(\epsilon\epsilon^T)}_\Psi = LL^T + \Psi \end{aligned} \quad (2.26)$$

Como na teoria dos componentes principais, o conjunto de dados original também pode ser representado por fatores não correlacionados chamados “Fator de pontuação” considerando apenas Z , a matriz de valores padronizados de X e matriz de carregamento L , conforme Eq. (2.27).

Ao utilizar as variáveis padronizadas amostrais, a extração é feita com a matriz de correlações amostrais R . Este procedimento é útil para estimar o modelo, principalmente quando as escalas de variáveis forem muito diferentes. As estimativas das cargas fatoriais

e das variâncias específicas são obtidas pelos autovalores e autovetores de R . O uso de R na maioria das aplicações é mais apropriado do que o uso de S (RENCHEER 2002).

$$F = Z \left[L(L^T L)^{-1} \right] \quad (2.27)$$

As cargas fatoriais rotacionais de cada variável são definidas para cada fator, por decomposição espectral tem-se

$$\begin{aligned} [\Sigma] &= [\lambda_1 e_1 e_1^T + \lambda_2 e_2 e_2^T + \dots + \lambda_m e_m e_m^T] \\ [\Sigma] &= \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} e_1 & & & \\ & \sqrt{\lambda_2} e_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & \sqrt{\lambda_m} e_m \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Coefficiente do fator = $L(L^T L)^{-1}$ e o score do fator = $Z[L(L^T L)^{-1}]$

$$\%Var = \frac{\mu_j}{(tr(R))} \text{ onde } tr(R) \text{ é igual ao número de variáveis}$$

Ao avaliarmos qual dos métodos é mais eficaz, a métrica utilizada é a qualidade do ajuste do modelo, se os resíduos são pequenos em módulos, os $p-m$ últimos autovalores são pequenos e sua soma dos quadrados é pequena (FERREIRA 2018).

2.2.2.3 Método da Máxima Verossimilhança

O método da máxima verossimilhança estima as cargas fatoriais, supondo-se que os dados seguem uma distribuição normal multivariada (fatores comuns F e específicos ϵ). Conforme seu nome indica, este método encontra estimativas das cargas fatoriais e variâncias comuns e específicas ($X_j - \mu = LF_j + \epsilon_i$) únicas maximizando a função de verossimilhança associada com o modelo normal multivariado. Equivalentemente, isso é feito ao minimizar-se uma expressão envolvendo as variâncias dos resíduos. O algoritmo inteira até um mínimo ser encontrado ou até que o número máximo especificado de iterações seja alcançado, a função verossimilhança é escrita como:

$$\begin{aligned} L(\mu, \Sigma) &= (2\pi)^{-\frac{np}{2}} |\Sigma|^{-\frac{n}{2}} e^{\left\{ -\frac{1}{2} tr \left[\Sigma^{-1} \left(\sum_{j=1}^n (X_j - \bar{X})(X_j - \bar{X}) + n(\bar{X} - \mu)(\bar{X} - \mu)^T \right) \right] \right\}} \\ L(\mu, \Sigma) &= (2\pi)^{-\frac{(n-1)p}{2}} |\Sigma|^{-\frac{(n-1)}{2}} e^{-\frac{1}{2} tr \left[\Sigma^{-1} \left(\sum_{j=1}^n (X_j - \bar{X})(X_j - \bar{X})^T \right) \right]} \\ &\quad \times (2\pi)^{-\frac{p}{2}} |\Sigma|^{-\frac{1}{2}} e^{\left[-\left(\frac{n}{2}\right) (\bar{X} - \mu)^T \Sigma^{-1} (\bar{X} - \mu) \right]} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Seja X_1, X_2, \dots, X_n uma amostra aleatória de $Np(\mu, \Sigma)$, onde $\Sigma = LL^T + \Psi$ é a covariância matriz para o modelo de fator comum m de 2.20, os estimadores de verossimilhança máxima \hat{L} , $\hat{\Psi}$ e $\hat{\mu} = \bar{X}$ maximizar 2.28 sujeito a $\hat{L}^T, \hat{\Psi}^{-1}\hat{L}$ sendo diagonal.

As estimativas de máxima verossimilhança das comunalidades são:

$$\hat{h}_i^2 = \hat{l}_{i1}^2 + \hat{l}_{i2}^2 + \dots + \hat{l}_{im}^2 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, p \quad (2.29)$$

Assim

$$\%Var = \frac{\hat{l}_{1j}^2 + \hat{l}_{2j}^2 + \dots + \hat{l}_{pj}^2}{S_{11} + S_{22} + \dots + S_{pp}} \quad (2.30)$$

Pela propriedade de invariância da estimativa de máxima verossimilhança as funções de L e Ψ são estimadas pelas mesmas funções de \hat{L} e $\hat{\Psi}$, em particular, as comunalidades $l_{i1}^2 + l_{i2}^2 + \dots + l_{im}^2$ têm estimativas de máxima verossimilhança $\hat{l}_{i1}^2 + \hat{l}_{i2}^2 + \dots + \hat{l}_{im}^2$. Mais detalhes podem ser encontrados em JOHNSON; WICHERN (2007) na seção 4.3.

Na ACP, os componentes podem ser obtidos por variáveis padronizadas tal que $Z = (V^{1/2})^{-1}(X - \mu)$, então a matriz de covariância ρ de Z tem a representação

$$\rho = V^{-1/2} \Sigma V^{-1/2} = (V^{-1/2}L)(V^{-1/2}L)^T + V^{-1/2}\Psi V^{-1/2} \quad (2.31)$$

Assim, ρ tem uma fatoração análoga a 2.22 com matriz de cargas fatoriais $L_z = V^{-1/2}L$ e matriz de variância específica $\Psi_z = V^{-1/2}\Psi V^{-1/2}$. Pela propriedade de invariância dos estimadores de máxima verossimilhança, o estimador de máxima verossimilhança de ρ é:

$$\hat{\rho} = (\hat{V}^{-1/2}\hat{L})(\hat{V}^{-1/2}\hat{L})^T + \hat{V}^{-1/2}\hat{\Psi}\hat{V}^{-1/2} = \hat{L}_z\hat{L}_z^T + \hat{\Psi} \quad (2.32)$$

onde $\hat{V}^{-1/2}$ e \hat{L} são os estimadores de máxima verossimilhança de $V^{-1/2}$ e L , respectivamente. Como consequência da fatoração da Eq. (2.32), sempre que a análise de máxima verossimilhança pertencer à matriz de correlação, têm-se

$$\hat{h}_i^2 = \hat{l}_{i1}^2 + \hat{l}_{i2}^2 + \dots + \hat{l}_{im}^2 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, p \quad (2.33)$$

as estimativas de máxima verossimilhança das comunalidades podem ser escritas como

$$\%var(\text{padronizada}) = \frac{\hat{l}_{1j}^2 + \hat{l}_{2j}^2 + \dots + \hat{l}_{pj}^2}{p} \quad (2.34)$$

Normalmente, as observações são padronizadas e feita uma análise fatorial da matriz de correlação destas observações. A matriz de correlação de amostra R é inserida para $[(n-1)/n]S$ na função de verossimilhança de (2.28) e as estimativas de máxima

verossimilhança \hat{L}_z e $\hat{\Psi}_z$ são obtidas usando um computador. Embora a verossimilhança de 2.28 seja apropriado para S , não para R , surpreendentemente, essa prática é equivalente à obtenção das estimativas de máxima verossimilhança \hat{L}_z e $\hat{\Psi}_z$ com base na matriz de covariância S da amostra, definindo $\hat{L}_z = \hat{V}^{-1/2}\hat{L}$ e $\hat{\Psi}_z = \hat{V}^{-1/2}\hat{\Psi}\hat{V}^{-1/2}$. Aqui $\hat{V}^{-1/2}$ é a matriz diagonal com o inverso dos desvios padrão da amostra (calculados com o divisor \sqrt{n}) na diagonal principal (JOHNSON; WICHERN 2007).

2.2.2.4 Rotação Fatorial

A modelagem ou fatoração da matriz de covariâncias Σ em $LL^T + \Psi$ não é única, todas as cargas fatoriais obtidas a partir das cargas iniciais por uma transformação ortogonal têm a mesma capacidade de reproduzir a covariância (ou correlação) e mantêm as propriedades originais. A partir da álgebra matricial, uma transformação ortogonal corresponde a uma rotação rígida do eixo de coordenadas. Por esse motivo, uma transformação ortogonal das cargas fatoriais, bem como a transformação ortogonal implícita dos fatores é chamada rotação de fatores (JOHNSON; WICHERN ; 2007; HATDLE; SIMAR 2015).

A ideia é encontrar uma rotação ortogonal dos fatores com a finalidade de facilitar a interpretação, buscando uma estrutura simples para a matriz de cargas \hat{L}^* obtida pela rotação. Como as cargas fatoriais representam as covariâncias entre os fatores e as variáveis originais, os padrões encontrados são interpretados para dar algum sentido real aos fatores (FERREIRA 2018). Se \hat{L} é uma matriz $p \times m$ das cargas fatoriais estimadas obtidas por qualquer método (componente principal, máxima verossimilhança ou outras) então $\hat{L}^* = \hat{L}T$, onde $TT^T = T^TT = I$ é uma matriz $p \times m$ de cargas "rotacionadas". Além disso, a covariância estimada (ou matriz de correlação) permanece inalterada, pois

$$\hat{L}^*\hat{L}^T + \hat{\Psi} = \hat{L}TT^T\hat{L} + \hat{\Psi} = \hat{L}\hat{L}^{*T} + \hat{\Psi} \quad (2.35)$$

A equação indica que a matriz de resíduos, $S_n - \hat{L}\hat{L}^T - \hat{\Psi} = S_n - \hat{L}^*\hat{L}^{*T} - \hat{\Psi}$, permanece inalterada. Além disso, as variações específicas Ψ_i e portanto, as comunaliidades \hat{h}_i^2 , são inalteradas. Assim, do ponto de vista matemático, é irrelevante se o \hat{L} ou \hat{L}^* é obtido. Como as cargas originais podem não ser prontamente interpretáveis, é prática comum girá-los até que uma *estrutura mais simples* seja alcançada. Os eixos de coordenadas podem ser rotacionados através de um ângulo θ e novas cargas rotadas \hat{l}_{ij} são determinadas a partir das relações.

$$\begin{matrix} \hat{L}^* & = & \hat{L} & T \\ (p \times 2) & & (p \times 2) & (2 \times 2) \end{matrix}$$

$$T = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}}_{\text{sentido horário}} \quad T = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}}_{\text{sentido anti-horário}} \quad (2.36)$$

Vários métodos são empregados para obtenção da rotação dos eixos fatoriais. Dentre eles tem-se o critério de busca empírico de THURSTONE (1931), os procedimentos gráficos e os procedimentos analíticos, o critério empírico devido as condições limitantes em relação a quantidade de dados, o método gráfico depende de critérios subjetivos, ambos dificilmente são aplicados em casos reais já o analítico que utiliza rotações ortogonais, as cargas fatoriais são alteradas, mas as propriedades estatísticas, como comunalidade (soma dos quadrados das linhas da matriz de cargas) ou das proporções das explicações (soma de quadrados de cada coluna tomada em relação à variação total), ficam inalteradas (FERREIRA 2018).

Dentre os critérios que utilizam rotações ortogonais existentes até hoje os mais utilizados são:

Quartimax: Maximiza a variância de cargas fatoriais quadráticas dentro de variáveis, pretende simplificar as linhas de uma matriz de pesos, isto é, tornar os pesos de cada variável, elevados para um pequeno número de componentes e próximos de zero para todos os restantes dos componentes.

Equimax: Maximiza a variância de cargas fatoriais quadráticas dentro de variáveis e fatores, seu objetivo é simplificar as linhas e colunas ao mesmo tempo (simplificação dos fatores e das variáveis).

Ortomax: 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 estiver esse peso, mais forte é a associação entre a dita variável e o componente, enquanto que um peso da variável próximo de 0 permite concluir que pouco contribui para a formação do fator.

Varimax: Maximiza a variância de cargas fatoriais quadráticas dentro de fatores. Este método simplifica as colunas da matriz de cargas fatoriais e é o método de rotação mais amplamente utilizado. Para facilitar a interpretação, este método tenta tornar as cargas fatoriais grandes ou pequenas.

O Varimax, que foi desenvolvido por KAISER (1958), é o método de rotação mais utilizado dentre os tipos de rotações ortogonais. A rotação Varimax 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, 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; JOHNSON; WICHERN 2007; FERREIRA 2018).

O método varimax simplifica a interpretação porque, após a rotação, cada variável original tende a estar associada a um (ou um pequeno número) de fatores, e cada fator representa apenas um pequeno número de variáveis. Além disso, os fatores muitas vezes podem ser interpretados a partir da oposição de poucas variáveis com cargas positivas a poucas variáveis com cargas negativas ABDI (2003). Os coeficientes rotacionados são escalonados pela raiz quadrada das comunalidades, produzindo $\tilde{\ell}_{ij}^* = \hat{\ell}_{ij}^*/\hat{h}_i$. Então, o procedimento Varimax seleciona a transformação ortogonal como indicado na Eq. (2.37).

$$MaxV = 1/p \sum_{j=1}^m \left[\sum_{i=1}^p \tilde{\ell}_{ij}^{*4} - \left(\sum_{i=1}^p \tilde{\ell}_{ij}^{*2} \right)^2 / p \right] \quad (2.37)$$

Existem vários algoritmos computacionais que podem maximizar V , programas como por exemplo, os pacotes de software estatístico, SAS, SPSS, BMDP e MINITAB fornecem rotações varimax. Como era de se esperar, rotações de cargas fatoriais varimax obtidas por diferentes métodos de solução (componentes principais, máxima verossimilhança assim por diante) geralmente não coincidem. O padrão de cargas rotacionadas também pode mudar consideravelmente se fatores comuns adicionais estão incluídos na rotação. Se existir um fator único dominante, geralmente será obscurecido por qualquer rotação ortogonal. Por outro lado, ele sempre pode ser mantido fixo e o fatores restantes rotacionados.

Além das rotações ortogonais existe as rotações oblíquas, estas são mais faceis de interpretar em função de possibilitar que os eixos fatoriais movam de forma diferente um do outro, ou seja, os novos eixos não são perpendiculares e conseqüentemente os fatores gerados estão correlacionados.

2.2.3 Análise Hierárquica de Cluster

Análise de cluster refere-se a um conjunto muito amplo de técnicas para localizar subgrupos, ou agrupamento clusters, em um conjunto de dados. Quando agrupa-se as observações de um conjunto de dados, procure dividi-los em grupos distintos para que as observações dentro cada grupo sejam bastante semelhante um ao outro, enquanto observações em diferentes grupos sejam bem diferentes um do outro. Claro, para tornar isso concreto, deve-se definir o que significa dizer quando duas ou mais observações sejam semelhantes ou diferentes. De fato, essa é geralmente uma consideração específica do domínio que deve ser feita com base no conhecimento dos dados em estudo (HAIR *et al.* 2006 e JAMES *et al.* 2013).

Neste trabalho a seleção das funções que formam os grupos é realizada aplicando-se a Análise Hierárquica de Cluster (AHC) de modo que, embora as superfícies de resposta

sejam correlacionadas, os grupos de funções formados serão linearmente separáveis, o que viabiliza a representação de cada grupo por escores de fatores distintos com a mínima sobreposição possível. Assim, o problema de agrupamento subdivide-se em dois.

O primeiro recai na escolha da medida de proximidade que seria a mais adequada para quantificar a semelhança entre as variáveis. O segundo refere-se à determinação do método que será utilizado para construir os grupos. Com base nas medidas de proximidades, as variáveis são alocadas aos grupos de tal forma que as distâncias entre os grupos são grandes e os elementos dentro dos grupos estão o mais próximo possível uns dos outros (JOHNSON; WICHERN 2007).

Os métodos de agrupamentos são divididos em hierárquicos e não hierárquicos. Os métodos não-hierárquicos designam as observações aos grupos por intermédio de um processo em que o número de grupos deve ser previamente definido. Como exemplo, citam-se os métodos k-médias e k-medoides, já no método hierárquico inicia-se com n grupos, cada um contendo uma das variáveis e termina com um único grupo, contendo todas as variáveis.

Este método é denominado de agrupamento hierárquico aglomerativo, tem ainda a possibilidade de reverter essa ordem, ou seja, inicia-se com um único grupo contendo as n variáveis e termina com n grupos de uma única variável cada. Os principais métodos aglomerativos são: Ligação simples, completa, média, mediana, método Centróide e método Ward JAMES *et al.* (2013).

A maior parte dos métodos de agrupamento requer que a matriz de proximidades entre objetos seja previamente obtida. A proximidade é o termo utilizado para indicar similaridade ou dissimilaridade entre as variáveis a serem agrupadas, normalmente expressa em função de uma distância entre as variáveis, definidas por uma matriz de similaridades simétrica que utiliza na maioria dos casos a distância euclidiana quadrática padronizada (distância de Mahalanobis), de forma a eliminar as diferenças entre as escalas da variáveis e considerar existência de correlação entre estas variáveis.

Tabela 2.3 – Resumo das ligações utilizadas nos agrupamentos hierárquicos

Ligação	Descrição
Simple	Os grupos são formados considerando a distância mínima entre os pares de variáveis de um grupo e as variáveis dos grupos remanescentes
Completa	Os grupos são formados considerando a distância máxima entre os pares de variáveis de um grupo e as variáveis dos grupos remanescentes
Média	Os grupos são formados considerando a distância média entre os pares de variáveis de um grupo e as variáveis dos grupos remanescentes

Mediana	Os grupos são formados considerando a distância euclidiana quadrática mínima entre os pares de variáveis de um grupo e depois utiliza a média aritmética entre grupos formados e as variáveis dos grupos remanescentes
Centróide	Os grupos são formados considerando a distância euclidiana quadrática mínima entre os pares de variáveis de um grupo e depois utiliza a média ponderada entre grupos formados e as variáveis dos grupos remanescentes
Ward	Os grupos são formados considerando o mínimo de incremento na soma de quadrados dentro dos grupos (soma de quadrados dos erros).

Em geral, dois grupos são aglomerados em um ponto de junção (distância) que é maior do que o da junção anterior. Essa propriedade é denominada monotonicidade, outra propriedade dos métodos é a capacidade do agrupamento em alterar as características do espaço das distâncias, na medida em que os grupos são formados, os métodos que não alteram essa propriedade são chamados de conservativos, eles podem tanto contrair quanto dilatar o espaço das distâncias (LANCE; WILLIAMS 1967).

Nos métodos de contração do espaço, os novos grupos formados em cada estágio do processo tendem a se aglomerar a uma nova variável, em vez de grupos pré-existent, essa tendência é conhecida como encadeamento. Nos métodos dilatadores de espaço, os grupos recém-formados se afastam das variáveis individuais, assim, as variáveis individuais tendem a formar grupos com outras variáveis individuais e não com outros grupos existentes, o método de ligação simples é um exemplo de contração do espaço, o método de ligação completa é espaço dilatador, os outros métodos hierárquicos se situam entre estes dois extremos (FERREIRA 2018).

Os métodos ligação simples, ligação média, mediana, centróide e Ward são insensíveis a observações discrepantes já o método de ligação completa é sensível a outliers (citeauthorRENCHE:2002 (2002)). Segundo o mesmo autor muitos estudos mostram que os métodos Ward e ligação média possuem melhores desempenhos de uma maneira geral.

Neste trabalho, foi utilizado o método hierárquico aglomerativo de WARD (1963) o qual tem-se os detalhes do cálculo da distância a seguir. O procedimento básico consiste em computar uma matriz de distância ou similaridade entre os indivíduos, a partir da qual se inicia um processo de sucessivas fusões destes, com base na proximidade ou similaridade entre eles.

Se em um dado estágio do processo, tivermos $k \leq n$ grupos e se i -ésima variável do l -ésimo grupo for representado por y_i^l , $l = 1, 2, \dots, k$ e $i = 1, 2, \dots, n_l$ a soma de quadrados

do erro l -ésimo grupo por

$$SSE_l = \sum_{i=1}^{n_l} (y_i^l - \bar{y}^l)^T (y_i^l - \bar{y}^l) = \sum_{i=1}^{n_l} \sum_{j=1}^p (y_{ij}^l - \bar{y}_j^l)^2 \quad (2.38)$$

onde n_l é o número de variáveis no l -ésimo grupo, $n = \sum_{l=1}^k n_l$ é o número total de variáveis, \bar{y}^l é o vetor de médias (centróide) do l -ésimo grupo dada por

$$\hat{y}^l = \frac{1}{n_l} \sum_{i=1}^{n_l} y_i^l$$

e \bar{y}_j^l j -ésimo componente de \hat{y}^l , ou seja, a média do l -ésimo grupo relativa a j -ésima variável

A soma de quadrados dos erros, para o conjunto todo de grupos, é dada pela soma das soma de quadrados dos erros dos grupos individuais em relação a todos os grupos por

$$SSE = \sum_{l=1}^k SSE_l = \sum_{l=1}^k \sum_{i=1}^{n_l} (y_i^l - \bar{y}^l)^T (y_{ij}^l - \bar{y}_j^l) \quad (2.39)$$

Pelo método de WARD (1963), caso tenha-se $k=n$ grupos considerando dois grupos quaisquer A e B , e que a troca na SSE provocada pela junção de A e B seja δSSE a troca provocada pelos grupos A e B é dada por

$$\Delta SSE = SSE_{ab} - SSE_a - SSE_b$$

sendo

$$SSE_{ab} = \sum_{i=1}^{n_{ab}} (y_i^{ab} - \bar{y}^{ab})^T (y_i^{ab} - \bar{y}^{ab})$$

em que $n_{ab} = n_a + n_b$ e $\bar{y}^{ab} = (n_a \bar{y}^a + n_b \bar{y}^b) / (n_a + n_b)$ são o tamanho e o centróide do novo grupo AB , respectivamente. WARD (1963) mostrou que a troca provocada pela junção de a e b é diretamente proporcional à distância quadrática entre os centróides dos grupos correspondentes, que é simplificada em:

$$\Delta SSE = \frac{n_a n_b}{n_a + n_b} (\bar{y}^a - \bar{y}^b)^T (\bar{y}^a - \bar{y}^b) \quad (2.40)$$

2.3 Algoritmo de otimização

Geralmente, os algoritmos de otimização podem ser divididos em duas classes básicas: algoritmos determinísticos e probabilísticos. Algoritmos determinísticos são mais frequentemente usados se uma relação clara entre as características das soluções possíveis e

sua utilidade para um problema existe, se esta relação não tão óbvia ou muito complicada ou a dimensão do espaço de pesquisa é muito ampla, então a melhor opção é pelo algoritmo probabilísticos (WEISE 2009).

Velocidade e precisão são objetivos conflitantes, pelo menos em termos de algoritmos probabilísticos. Uma regra geral é que você pode obter melhorias na precisão da otimização apenas investindo mais tempo. Cientistas da área de otimização global tentam forçar ainda mais essa fronteira de Pareto, inventando novas abordagens ou aprimorando as que existem.

Em problemas de minimização, uma solução Y^* é chamada mínima global quando não existir outra y , dentro do espaço de busca, que forneça um valor para a função objetivo $f(y)$ menor do que $f(y^*)$. Em problemas de maximização, o máximo global y^* atende a condição $f(y^*)$ maior do que $f(y)$ para qualquer x pertencente ao espaço de busca GOMES *et al.* (2017), conforme pode ser visto na Figura 2.10

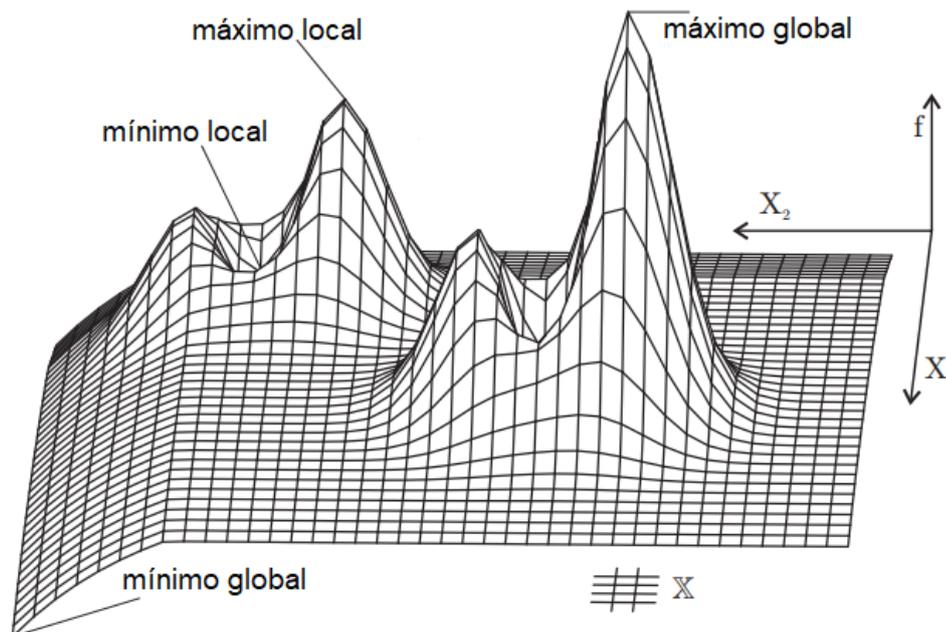


Figura 2.10 – Pontos de máximo e mínimo de uma função

Fonte: adaptado de Weise (2009)

Este tipo de problema pode ser resolvido com algoritmos heurísticos, este estudo utiliza como referência o método do Gradiente Reduzido Generalizado (GRG) que, mesmo não sendo capaz de garantir a obtenção do mínimo global, pode oferecer soluções aceitáveis para problemas complexos com baixo custo computacional (IGNÍZIO; CAVALIER 1994). E entre as estratégias de busca meta-heurísticas, este estudo utiliza algoritmos genéticos, que propiciam a busca por pontos ótimos sem a necessidade de calcular todas as soluções possíveis empregando conceitos de evolução natural (HAMMOUCHE *et al.* 2010).

2.3.1 Gradiente Reduzido Generalizado

O algoritmo GRG, teve sua origem com WOLFE (1963), ele desenvolveu o algoritmo gradiente reduzido, para problemas de minimização com restrições lineares. Depois ABADIE; CARPENTIER (1969) aprimorou o método para problema geral de programação não-linear, hoje conhecido como GRG, Com a mesma estratégia dos métodos com restrições ativas para problemas com restrições lineares (MARTÍNEZ; SANTOS 1995).

O método GRG pretende minimizar o valor da função objetivo isso é feito primeiro com a definição de uma direção de busca, para qualquer pequeno movimento, as restrições ativas atuais permaneçam ativamente precisas. Se algumas restrições ativas não forem satisfeitas com precisão devido à não linearidade das funções de restrição, o método Newton-Raphson é usado para retornar ao limite da restrição. Assim, o método GRG pode ser considerado um pouco semelhante ao método de projeção em gradiente (ARORA 2017). Segundo KÖKSOY; DOGANAKSOY (2003), é um dos métodos gradientes que apresenta maior robustez e eficiência, o que o torna apropriado para a solução de uma vasta variedade de problemas.

Além disso, KÖKSOY (2008) destaca a facilidade de acesso a este algoritmo, já que além de poder ser aplicado a diversos problemas de otimização não lineares restritos ou irrestritos, geralmente encontra-se disponível em softwares comerciais, como no caso das planilhas eletrônicas do *Microsoft Excel*[®]. Entretanto, segundo KÖKSOY; YALCINOZ (2006) e ARORA (2017) a maior limitação da utilização do GRG provém do fato de que é necessário que a estimativa inicial dos parâmetros seja próxima ao valor do ponto ótimo para que se tenha uma garantia de convergência para o ponto ótimo, esta deficiência do método foi contornada neste estudo, onde foi desenvolvido uma rotina com vários pontos de inicialização do algoritmo preservando sempre a melhor resposta.

Os métodos de tipo GRG têm analogia computacional com o método Simplex para programação linear. Usando técnicas de fatoração de matrizes e de manipulação de esparsidade similares às usadas no Simplex. Segundo LUENBERGER; YE (2008) apresenta três vantagens significantes: (i) se o processo de busca termina antes da confirmação do ótimo, o último ponto encontrado é viável devido ao fato de que cada ponto gerado é viável e provavelmente próximo do ótimo; (ii) se o método gera uma sequência convergente, o ponto limite garante pelo menos, um mínimo local; (iii) a maioria dos métodos primais são geralmente absolutos, não dependendo de uma estrutura especial, tal como a convexidade.

Segundo LASDON *et al.* (1978), uma forma geral para a programação não-linear

pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} & \text{Min } f(x) \\ & \text{sujeito a.: } h_i(x) = 0 \\ & X^{min} \leq X \leq X^{max} \end{aligned} \quad (2.41)$$

onde:

x – Vetor das variáveis de decisão

$f(x)$ – Função objetivo não-linear

$h_i(x) = 0$ – Restrições

X^{min} , X^{max} – Limites mínimo e máximo para as variáveis de decisão

No caso da existência de inequações como restrição ($g_I(x) \leq 0$), o algoritmo deverá convertê-las para a forma de equações de restrição através da adição de variáveis de folga. O modelo geral para o GRG é baseado na conversão das restrições do problema em modelos com equações irrestritas, utilizando a substituição direta. Neste caso, o vetor das variáveis x pode ser particionado em dois sub-vetores x_B e x_N , tal que $x = (x_B, x_N)^T$, de forma que x_B representa o vetor das variáveis básicas (dependentes) e x_N é o vetor das variáveis não básicas (independentes). Dessa forma, reescrevendo a Eq. (2.41) na forma das variáveis básicas e não básicas, chega-se à seguinte formulação apresentada por (CHEN; FAN 2002 e LASDON *et al.* 1978):

$$\begin{aligned} & \text{Min } f(x) = F[X_B, (X_N), x_N] \\ & \text{sujeito a.: } l_N \leq X_N \leq u_N \end{aligned} \quad (2.42)$$

onde:

l_N = limite inferior para x_N

u_N = limite superior para x_N

A partir de um ponto inicial viável x^k , o algoritmo GRG define uma direção de movimento para otimizar a função objetivo. Esta direção de movimento é obtida pelo gradiente reduzido, o qual é calculado da seguinte maneira:

$$r^k(x_N) = \left(\frac{\partial f^k}{\partial x_N^k} \right)^T - \left(\frac{\partial f^k}{\partial x_B^k} \right)^T \left(\frac{\partial g^k}{\partial x_B^k} \right)^{-1} \left(\frac{\partial g^k}{\partial x_N^k} \right) \quad (2.43)$$

A busca pelo ponto de ótimo se encerra quando a magnitude do gradiente reduzido atinge o valor de erro desejado o método de Newton-Raphson é utilizado para convergência até chegar a um ponto de solução viável. Se a nova solução encontrada atender à condição de descida, a busca é encerrada; caso contrário, o passo de avaliação anterior é descartado e o procedimento é repetido com um passo reduzido. Pode-se observar que quando $df/dx = 0$

na (Eq. 2.43), as condições de otimização da KKT são satisfeitas para o problema original da PNL.

A principal carga computacional associada ao algoritmo GRG decorre das iterações de Newton–Raphson durante a busca de direção do gradiente reduzido. Os gradientes das restrições precisam ser recalculados e a matriz Jacobiana B precisa ser invertida a cada iteração durante a busca de direção do gradiente reduzido. Isso pode ser dispendioso, para esse fim, muitos esquemas numéricos eficientes foram sugeridos por exemplo, o uso de uma fórmula quase-Newton para atualizar a matriz Jacobiana sem recalcular os gradientes, mas exigindo apenas valores de função de restrição. Isso pode causar problemas se o conjunto de variáveis independentes mudar durante as iterações (ARORA 2017).

2.3.2 Algoritmo Genético

O AG foram propostos por HOLLAND (1975) EM 1975, mas foi possível aplicá-los com tempos de computação razoáveis somente nos anos 90, quando os computadores se tornaram muito mais rápidos. O AG faz parte da família dos Algoritmos Evolutivos (AE), algoritmos de otimização meta-heurístico, como mutação, cruzamento, seleção natural e sobrevivência do mais apto, afim de selecionar iterativamente um conjunto de possíveis soluções WEISE (2009). Partindo de uma população de soluções ao invés de uma única solução, é então capaz de encontrar ótimos globais para problemas de otimização restritos e irrestritos, assim como para uma ou múltiplas funções objetivo (JIN; WONG 2010 e ZAIN *et al.* 2010).

Os algoritmos genéticos usam apenas os valores das funções no processo de busca para progredir em direção a uma solução, independentemente da forma como as funções são avaliadas. A continuidade ou a diferença entre as funções do problema não são necessárias nem usadas nos cálculos das algoritmos. Portanto, os algoritmos são muito gerais e podem ser aplicados a todos os tipos de problemas, discretos, contínuos e indiferentes. Além disso, os métodos determinam soluções ótimas globais em oposição às soluções locais determinadas por um algoritmo de otimização baseado em métodos derivativos. Os métodos são fáceis de usar e programar, pois não requerem o uso de gradientes de funções de custo ou restrição (ARORA 2017).

Segundo CHENG *et al.* (2002), a aplicação do AG é eficaz quando utilizado para otimização de problemas com múltiplas respostas aglutinadas. Para compreender o funcionamento dos algoritmos genéticos é necessário realizar uma analogia com a teoria da evolução das espécies. Desse modo, o funcionamento do AG possui as seguintes etapas conforme Figura 2.11:

- a) Inicialmente é gerada uma população formada por um conjunto aleatório de indivíduos, que podem ser vistos como possíveis soluções do problema;
- b) Durante o processo evolutivo, esta população é avaliada, sendo que para cada indivíduo

é atribuída uma nota, ou índice, que reflete sua habilidade de adaptação a determinado ambiente;

c) Uma porcentagem dos indivíduos mais adaptados é mantida, enquanto os outros são descartados;

d) Os membros mantidos pela seleção podem sofrer modificações em suas características fundamentais por meio de cruzamentos, mutações ou recombinação genética gerando descendentes para a próxima geração;

e) O processo descrito anteriormente é chamado de reprodução, é repetido até que uma solução satisfatória seja encontrada. Embora possam parecer simplistas do ponto de vista biológico, estes algoritmos são suficientemente complexos para fornecer mecanismos de busca adaptativos poderosos e robustos.

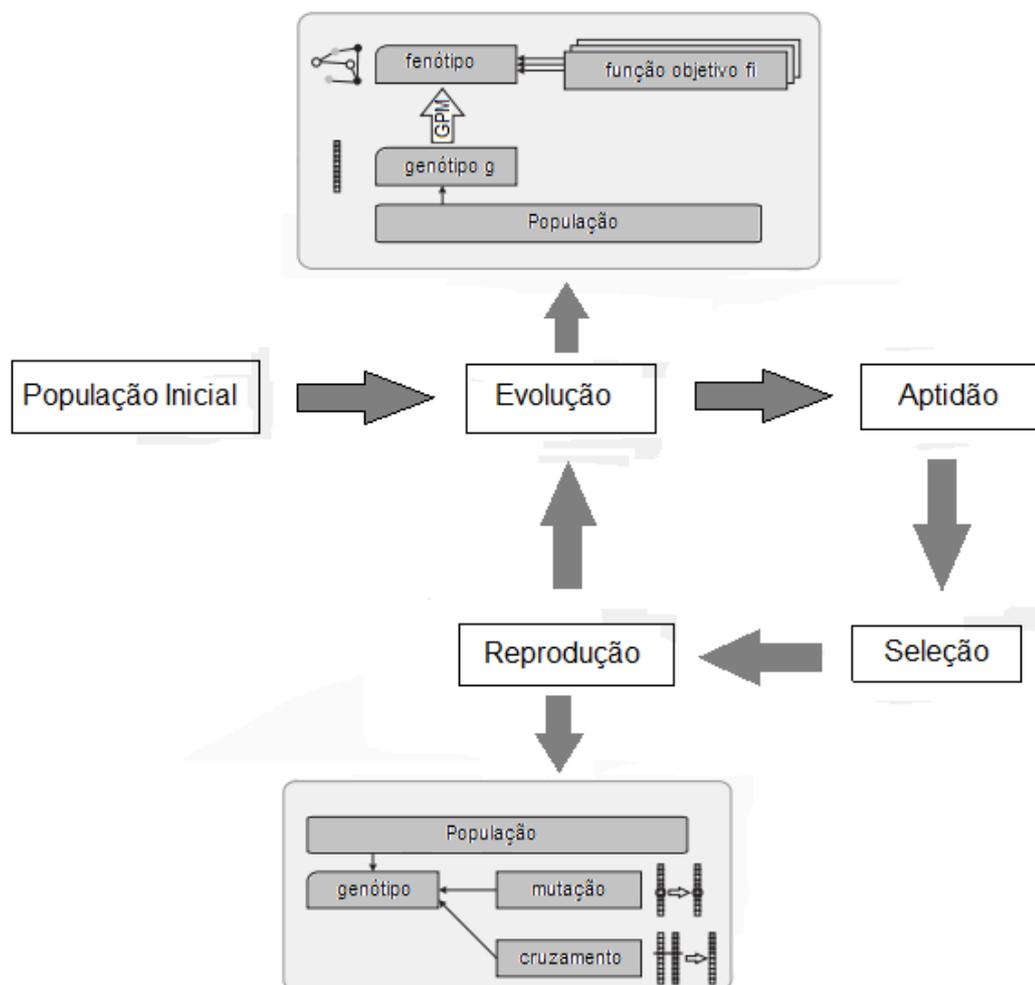


Figura 2.11 – Etapas na execução do algoritmo genético

Fonte: adaptado de Weise (2009)

A maioria dos Algoritmos Genéticos converte um problema de otimização restrito em um problema irrestrito utilizando uma função de penalidade OKTEM *et al.* (2005).

Cada solução proposta pelo método iterativo é representada por um vetor x de variáveis independentes, as quais são codificadas em cromossomos, formados por uma quantidade de genes necessária para representar as variáveis independentes do problema original. Para esta tarefa, o código binário tem sido o mais utilizado (BUSACCA *et al.* 2001). Se a solução não é adequada para a otimização da função objetivo, o problema é penalizado.

Quando se utiliza o AG, uma diversidade genética suficiente entre as soluções da população deve ser garantida. A falta desta diversidade pode levar a uma redução na região de busca utilizada pelo algoritmo e, conseqüentemente, a uma degradação no desempenho da otimização, resultando na convergência prematura para um ótimo local.

Por outro lado, um excesso na diversidade genética também compromete o desempenho do algoritmo, resultando em convergências tardias ou até mesmo a não convergência. Portanto, o bom desempenho do AG depende do ajuste adequado de alguns parâmetros críticos, representados principalmente pelo tamanho da população, taxa de cruzamento, taxa de mutação e o número de iterações (gerações) (BUSACCA *et al.* 2001 e OKTEM *et al.* 2005).

Segundo ARORA (2017) além destas os algoritmos genéticos exigem uma grande quantidade de cálculo para problemas de tamanho razoável ou para problemas em que a avaliação das funções em si exige cálculos massivos.

A seqüência de gerações populacionais é interrompida e chega-se ao ponto de ótimo ao atingir um dos seguintes critérios de convergência:

- O número de gerações alcança o valor pré-estabelecido;
- O tempo de processamento atinge o valor previsto;
- A aptidão do indivíduo mais fraco atinge um mínimo pré-estabelecido;
- A aptidão do indivíduo mais forte atinge um valor desejado.

2.4 Métodos de Otimização Multivariada

Processos reais precisam ser otimizados com relação a vários critérios simultaneamente. Frequentemente, as condições de operação precisam satisfazer várias condições ou restrições m sobre as respostas, y_1, \dots, y_m . Por exemplo, na concepção de um novo produto, especificações do produto têm de ser satisfeitas as quais determinam o desempenho do produto durante a utilização. Em um processo de fabricação, há sempre pelo menos duas respostas de interesse em cada processo (CASTILHO 2007).

Em análise de superfície resposta é prática comum localizar condições de processo ótimo baseado em gráficos de contorno de respostas ajustadas. Em muitas instâncias práticas, há várias respostas que necessitam ser otimizadas simultaneamente (MYERS *et al.* 2016 e HE *et al.* 2012).

Há várias maneiras de usar técnicas de programação para formular e resolver o problema de otimização múltipla resposta. Segundo ORTZ *et al.* (2004) e BOUACHA *et al.* (2010) os métodos existentes podem ser classificados em três categorias básicas:

A primeira técnica é relativamente simples, consiste de sobreposição dos gráficos de contorno para cada resposta e encontrando a região de interesse em que diferentes respostas são satisfeitas este método funciona bem quando existem apenas duas respostas, para maior quantidade de respostas a sobreposição dos gráficos de contorno torna-se inviável.

Nos gráficos de contorno, após sobrepô-los no espaço de fatores controláveis, busca-se uma região de condições de funcionamento que otimiza todas as respostas. Este método é útil, desde que o número de fatores controláveis seja de 2 ou talvez 3 fatores. Com três fatores, a interpretação dos gráficos já não é tão simples, uma vez que se deve procurar em três diferentes planos no qual os contornos são projetados.

Evidentemente, para k fatores, haverá uma necessidade de (k^2) planos deste tipo. Outra limitação evidente desta abordagem é que ela proporciona a falsa sensação de que um "ponto ideal" vai ser encontrado com certeza, quando na verdade os contornos são apenas estimativas pontuais sobre a média das respostas em cada localização no espaço de fatores controláveis.

Estes problemas são agravados quando respostas múltiplas necessitam ser encontradas. Gráficos de contorno sobrepostos é uma estratégia comum quando se trabalha com múltiplas respostas, porém ambos os erros de dimensionamento e problemas de amostragem permanecem sem solução. Para evitar problemas de dimensionamento, métodos clássicos de otimização tem sido usado para encontrar condições de processos ótimos (CASTILHO 2007) e MONTGOMERY 2008).

Para resolver o problema de erro de amostragem, é recomendado cálculo de regiões de confiança para a localização dos pontos estacionários. Se as respostas são lineares, um cone de confiança na direção de máxima melhoria pode ser construído (BOX; HUNTER 1987).

A segunda técnica consiste de métodos que usam uma resposta mais importante como função objetivo e o restante das respostas são consideradas restrições. Exemplos típicos para tais métodos estão em CASTILHO (2007) e FAN (2000). De acordo com KIM; JEONG (2003), a principal desvantagem destes métodos é não considerar simultaneamente todas as respostas. Além disso, a seleção de uma resposta como função objetivo pode não ser fácil na maioria dos casos. A abordagem dual é uma técnica, que se aplica ao caso particular de duas respostas (MYERS *et al.* 2016).

A terceira técnica consiste de métodos que combinam as múltiplas respostas em uma única função, resolve-se como um problema de otimização de um único objetivo. O

mais popular destes métodos é a função Desirability HARRINGTON (1965), DERRINGER; SUICH (1980) e PASANDIDEH; NIAKI (2006), além da função de perda PIGNATIELLO (1993), AMES *et al.* (1997) e VINING (1998), função de distância KHURY; COLON (1981), proporção de conformidade CHIAO; HAMADA (2001) e PCA, (ANTONY 2000, LIAO 2006 e C.ROUTARA *et al.* 2010).

2.4.1 Erro Quadrático Médio Multivariado

O método de otimização multivariada Erro Quadrático Médio (Mean Square Error - MSE) é uma técnica proposta inicialmente por VINING; MYERS (1990) que combina as funções objetivo desenvolvidas para \hat{y} e variância $\sigma^2(x)$ de uma resposta, considerando, ao mesmo tempo, o alvo T , estabelecido para suas funções originais Y , Essa abordagem se sujeita apenas à restrição do espaço de solução viável (Ω), na qual o vetor x de variáveis de decisão está inserido conforme sugerido por (LIN; TU 1995).

$$\text{Min } MSE = [\hat{y}(x) - T]^2 + \sigma^2(x), x \in \Omega \quad (2.44)$$

Considerando a otimização de múltiplos objetivos, KÖKSOY (2006) propôs uma combinação de várias funções MSE, as quais poderiam ser ponderadas ou não. Para o caso ponderado, o Erro Quadrático Médio Global (Global Mean Squared Error - MSE_G) pode ser escrito como:

$$\text{Min } MSE_G = \sum_{i=1}^p w_i MSE_i = \sum_{i=1}^p w_i \{[\hat{y}(x) - T]^2 + \sigma^2(x)\}, x \in \Omega \quad (2.45)$$

Onde:

MSE_G =Erro quadrático médio global

p =Número de respostas consideradas

w_i = Pesos atribuídos

Em seu trabalho BRATCHELL (1989) propôs uma abordagem mais simples, que considera a estrutura de correlação entre as respostas, utiliza as funções de superfície de resposta de segunda ordem para representar adequadamente o conjunto original de respostas correlacionadas através de um pequeno número de variáveis não correlacionadas, estas últimas provenientes da ACP JOHNSON; WICHERN (2007).

Além de KÖKSOY (2006) e ARDAKANI; NOOROSSANA (2008), outros autores apresentam propostas para otimização de múltiplos objetivos, mas não consideram as influências das correlações entre as respostas nos resultados de otimização, conforme resumo a seguir:

Tabela 2.4 – Resumo dos métodos de otimização propostos por alguns autores

Autor	Proposta
ARDAKANI; NOO-ROSSANA (2008) (Não considera correlação entre as respostas)	$\bar{f}(x) = \sum_{i=1}^m w_i \left[\frac{f_i(x) - f_i^I}{f_i^{MAX} - f_i^I} \right]^2$ $s.a. : X^T X \leq \rho^2$ $0 \leq w_i \leq 1$
GOVINDALURI; CHO (2007) (Elevado número de experimentos)	$MSE_i = [\hat{y}_i(x) - T_i]^2 + \hat{\sigma}_i^2(x) + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\hat{\sigma}_i(x)}{\hat{\sigma}_i(x) + \hat{\sigma}_j(x)} \times \left\{ \hat{\sigma}_{ij}(x) + [\hat{y}_i(x) - T_i] \times [\hat{y}_i(x) - T_j] \right\}, x \in \Omega$
VINING (1998) (Despendiosa)	$\left\{ E[L[y(x), \theta]] \right\} = \left\{ E[y(x)] - \theta \right\}^T C \left\{ E[y(x)] - \theta \right\} + trace \left[C \Sigma_y(x) \right]$
CHIAO; HAMADA (2001) (Despendiosa)	$MaxP(Y \in S) = \frac{1}{\sqrt{ \Sigma (2\pi)^p}} \left[\int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_p}^{b_p} e^{-\frac{1}{2}(Y-\mu)^T \Sigma^{-1}(Y-\mu)} dY \right]$ $s.a. : X^T X \leq \rho^2$

Apesar de inovadora, a abordagem de Bratchell não apresentou alternativas para os casos em que o maior componente principal não é capaz de explicar a maior parte da variância dos dados, assim como não indica como os limites de especificação e como os alvos das respostas podem ser transformados para o plano dos componentes principais.

Considerando as limitações do trabalho de Bratchell, PAIVA *et al.* (2009) combinaram os conceitos de função MSE com as superfície de resposta desenvolvidas para os escores dos componentes principais, com a transformação dos alvos originais em alvos para os escores dos componentes. A abordagem de Bratchell considera somente o primeiro componente principal, o método MMSE apresentado em PAIVA *et al.* (2009) propôs uma média geométrica para as funções dos componentes cuja explicação acumulada fosse maior que 80%.

O método MMSE inicia com a extração dos fatores pela ACP e Máxima Verossimilhança convertendo o conjunto original de respostas correlacionadas em novas variáveis não correlacionadas (fatores). Em seguida, os escores dos fatores, através da Metodologia de Superfície de Resposta, são utilizados para o desenvolvimento de modelos matemáticos de segunda ordem para cada fator. Finalmente, considerando a função MSE , a média estimada $\hat{y}(x)$ é substituída pelo modelo do fator $F(x)$, a variância $\hat{\sigma}^2(x)$ é substituída pelo autovalor λ e o alvo T é transformado no alvo para o fator ζ_F . Com isso, a função

MMSE fica definida através da expressão:

$$MMSE = [F(x) - \zeta_F]^2 + \lambda \quad (2.46)$$

Na equação acima, $F(x)$ é um polinômio de segunda ordem desenvolvido como função das variáveis de decisão. O alvo para o fator (ζ_F) é calculado com base no seguinte conceito: de acordo com JOHNSON; WICHERN (2007), o escore para o i –ésimo fator é o somatório do produto dos valores padronizados $Z(j)$ das respostas originais Y_j pelos seus respectivos autovetores e_j . Neste caso, a variável padronizada normal é calculada levando em consideração a média, tal como $Z(Y_j|\mu_{Y_j})$. Dessa forma, utilizando um raciocínio análogo para o caso dos alvos das respostas originais (T_{Y_j}), o alvo para o fator pode ser calculado como:

$$\zeta_F = e^T [Z(Y_j|T_{Y_j})] = \sum_{j=1}^m e_j \times [Z(Y_j|T_{Y_j})], \text{ para } i = 1, 2, \dots, p; j = 1, 2, \dots, p \quad (2.47)$$

Onde:

$$Z(Y_j|T_{Y_j}) = (T_{Y_j} - \mu_{Y_j}) \times (\sigma_{Y_j})$$

μ_{Y_j} = Média da j -ésima resposta

σ_{Y_j} = Desvio padrão da j -ésima resposta

e

$$F_i = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon = \beta_0 + [\nabla f(x)^T] + \left\{ \frac{1}{2} x^T [\nabla^2 f(x)] x \right\} \quad (2.48)$$

No método MMSE, a otimização é obtida pela minimização da Eq. (3.2), o que significa que o fator tende a atingir o alvo estabelecido com o mínimo de variância. Se mais de um fator é necessário, faz-se o uso da seguinte formulação para o método MMSE:

$$\text{Min } MMSE_T = \left[\prod_{i=1}^r MMSE_i \right]^{\frac{1}{r}} = \left\{ \prod_{i=1}^r [(F_i(x) - \zeta_{F_i})^2 + \lambda_i] \right\}^{\frac{1}{r}}, r \leq m \quad (2.49)$$

$$s.a. : g_j(x) \leq 0$$

onde:

$MMSE_T$ = Erro Quadrático Médio Multivariado Global

$MMSE_i$ = $MMSE$ para o i -ésimo componente principal

r = Número de componentes principais necessários

m = Número de respostas otimizadas

$F_i(x)$ = Modelo de superfície de resposta para o i -ésimo fator

ζ_{F_i} = Alvo calculado para o i -ésimo fator

λ_i =Autovalor para o i -ésimo fator
 $g_j(x) \leq 0$ =Restrições

Nas Eq. (3.2) e (2.49), a formulação MMSE se propõe à otimização das múltiplas respostas correlacionadas atribuindo a elas o mesmo grau de importância. No trabalho de GOMES (2013) sugere uma abordagem que pondera as variáveis originais padronizadas para, em seguida, extrair os escores de componentes principais pela matriz de Variância-covariância. Essa abordagem, denominada Erro Quadrático Médio Multivariado Ponderado (Weighted Multivariate Mean Squared Error - $MMSE_p$) é escrita como:

$$\begin{aligned} \text{Min } MMSE_{PT} &= \sum_{i=1}^r \left[\frac{v_i}{v_T} \times MMSE_{P_i} \right] = \sum_{i=1}^r \left\{ \frac{v_i}{v_T} \times \left[(F_i^*(x) - \zeta_{F_i}^*)^2 + \lambda_i^* \right] \right\}, r \leq m \\ \text{s.a. : } &g_j(x) \leq 0 \end{aligned} \quad (2.50)$$

onde:

$MMSE_{PT}$ =Erro Quadrático Médio Multivariado Ponderado Global

$MMSE_{P_i}$ = $MMSE_p$ para o i -ésimo fator

r =Número de fatores necessários

m =Número de respostas otimizadas

v_i =Grau de explicação do i -ésimo fator, tal que $\sum_{i=1}^r v_i = v_T$

$F_i^*(x)$ =Modelo de superfície de resposta para o i -ésimo fator

$\zeta_{F_i}^*$ =Alvo calculado para o i -ésimo fator

λ_i^* =Autovalor para o i -ésimo fator

$g_j(x) \leq 0$ =Restrições

2.4.2 Abordagem de Interseção de Limite Normal

De acordo com DAS; DENNIS (1998), converter a otimização multi-objetivo em um único problema de otimização de objetivo é a ideia principal do método de Somas Ponderadas (WSM). Para fazer isso, cada função objetiva $f_i(x)$ recebe um peso diferente (w), como indicado na Eq. (2.51).

$$\begin{aligned} \text{Min } F(x) &= \sum_{i=1}^n x_i f_i(x) = w^T F(x) \\ \text{sujeito a.: } &x \in C \end{aligned} \quad (2.51)$$

No entanto, segundo BRITO *et al.* (2014) os pontos de Pareto podem se agrupar em regiões com forte curvatura, se o conjunto for não-convexo, pontos na superfície com

soluções de compromisso (*trade-off*) poderiam ser perdidos, formando Clusters de soluções Pareto-ótimo em regiões de grande curvatura, porém descontínuas no espaço de solução, segundo VAHIDINASAB; JADID (2010) o método das somas ponderadas não é capaz de gerar uma fronteira uniformemente espaçada, mesmo quando a distribuição dos vetores de peso seja uniforme. O método das somas ponderadas falha na captura dos pontos de Pareto onde a fronteira é não convexa, mesmo que a curva seja convexa, o método não consegue produzir uma distribuição equilibrada dos pontos na curva de Pareto (MESSAC; MATTSON 2002). A Figura 2.12 ilustra essas limitações do método.

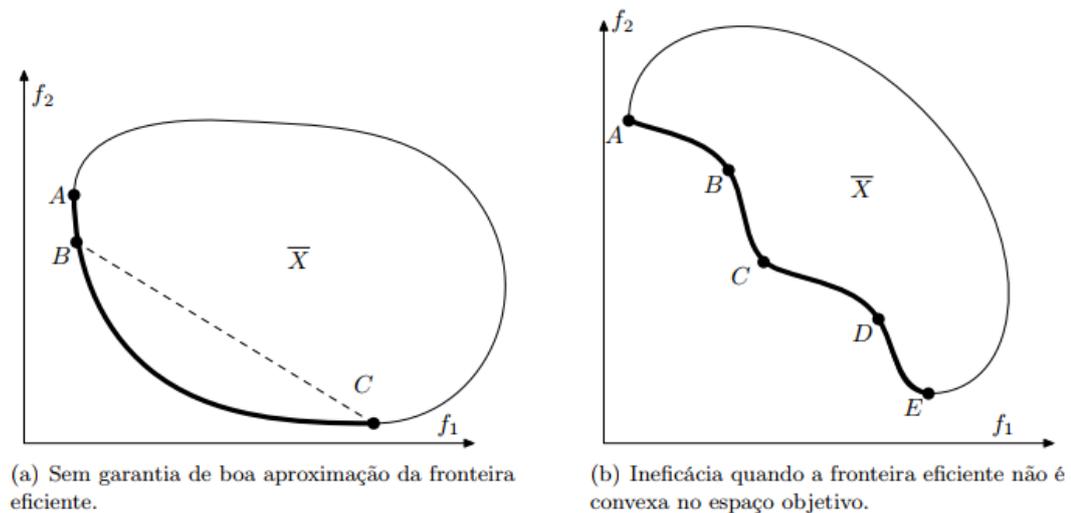


Figura 2.12 – Limitações do método das somas ponderadas

Fonte: SAMPAIO (2011)

O método de intersecção de limite normal (NBI) proposto por DAS; DENNIS (1998) é uma alternativa ao método das somas ponderadas, superando as desvantagens, sendo útil para gerar a superfície de Pareto em problemas de otimização multiobjetivo não linear. De acordo com JIA; IERAPETRITOU (2007) está provado que o método NBI é independente das escalas relativas das funções objetivas e é bem sucedido em produzir um conjunto uniformemente distribuído de pontos na superfície de Pareto dado um conjunto uniformemente distribuído de parâmetros, o que é uma vantagem em comparação com as abordagens de multiobjetivos mais comuns - o método de ponderação e o método ϵ -restrição.

A abordagem NBI tem a capacidade de encontrar uma distribuição quase uniforme que contém as opções de solução Pareto-ótimos na fronteira. Isso faz com que o NBI se aproxime de uma alternativa mais viável em relação ao Método de Somas Ponderadas na resolução de problemas não convexos (COSTA *et al.* 2016a).

Para BRITO *et al.* (2014), o método das somas ponderadas será eficiente apenas se o coeficiente de ponderação for positivo. Segundo o autor, quando arranjos de superfície

de resposta são usados para a modelagem de funções objetivo, considera-se que a solução do problema de otimização deva cair dentro da região experimental. Como a região experimental é esférica (ou hiperesférica, no caso de um número de fatores $k > 2$), a restrição natural para qualquer resposta de interesse modelada por este arranjo será igual à $g(x) = \sum_{i=1}^k g(x) = X^T X \leq \alpha^2$ para um *CCD* com $k = 2$, a restrição $g(x)$ poderá ser escrita como $g(X) = X^T X = x_1^2 + x_2^2$, ilustrado na Figura 2.13

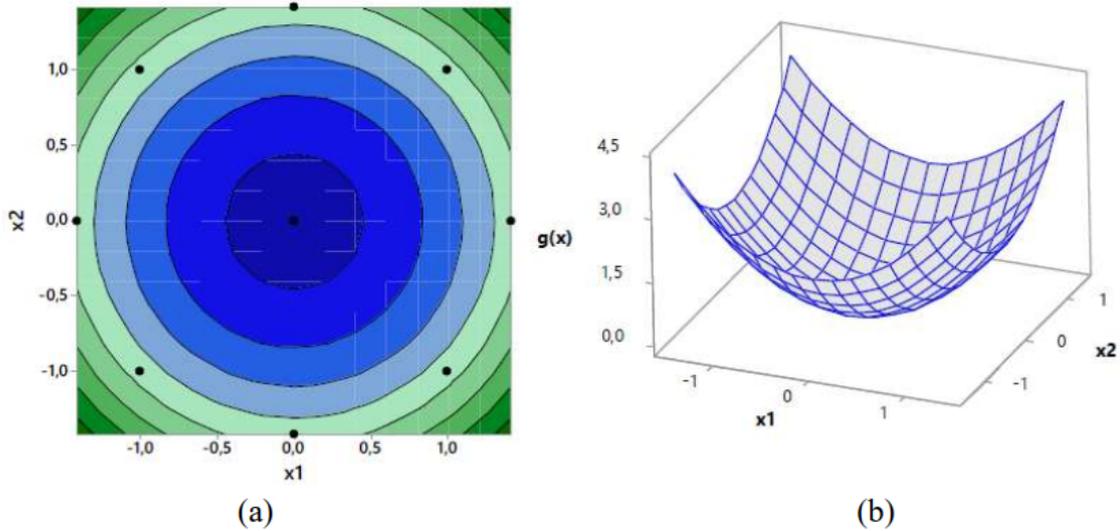


Figura 2.13 – Convexidade da restrição $g(x)$: (a) contorno e (b) superfície

Fonte: BRITO *et al.* (2014)

A restrição $g(x)$ é uma função com ponto de mínimo e representa uma região convexa. De outro modo, calculando-se a matriz Hessiana de $g(x)$ tem-se:

$$g(x) = X^T X = x_1^2 + x_2^2 = \nabla g(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial g(x)}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

$$[Hg(x)] = \nabla^2 g(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 g(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 g(x)}{\partial x_1 x_2} \\ \frac{\partial^2 g(x)}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial^2 g(x)}{\partial x_2^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

Como o determinante de $[H]$ será sempre positivo para qualquer k , seus autovalores serão sempre positivos e, portanto, $[H]$ será sempre uma matriz positiva-definida. Por conseguinte, $g(x)$ será uma função convexa para qualquer k . O ponto estacionário de $g(x)$ é um ponto de mínimo e o espaço de solução será sempre convexo quando se utilizar superfícies de resposta para a modelagem de funções objetivo. Assim, como não há garantias de que as funções objetivo da fronteira de Pareto sejam ambas convexas para

qualquer valor de k , quando a formulação de somas ponderadas for repetida iterativamente para diferentes pesos, haverá a formação de clusters de pontos de ótimo na fronteira com espaços grandes entre as porções convexas da fronteira.

Para evitar tais incongruências, sugere-se que a combinação convexa de funções objetivo seja substituída pelo esquema escalonado com restrições de igualdade do método NBI. Essa solução garantirá fronteiras equiespaçadas para os problemas de otimização (COSTA *et al.* 2016a).

A Figura 2.14 é resultado de um exemplo para comparar as Fronteira de Pareto entre os métodos NBI com o das somas ponderadas, o método NBI se aproxima de uma alternativa mais viável em relação ao método das somas ponderadas na resolução de problemas não-convexos (GANESAN *et al.* 2013).

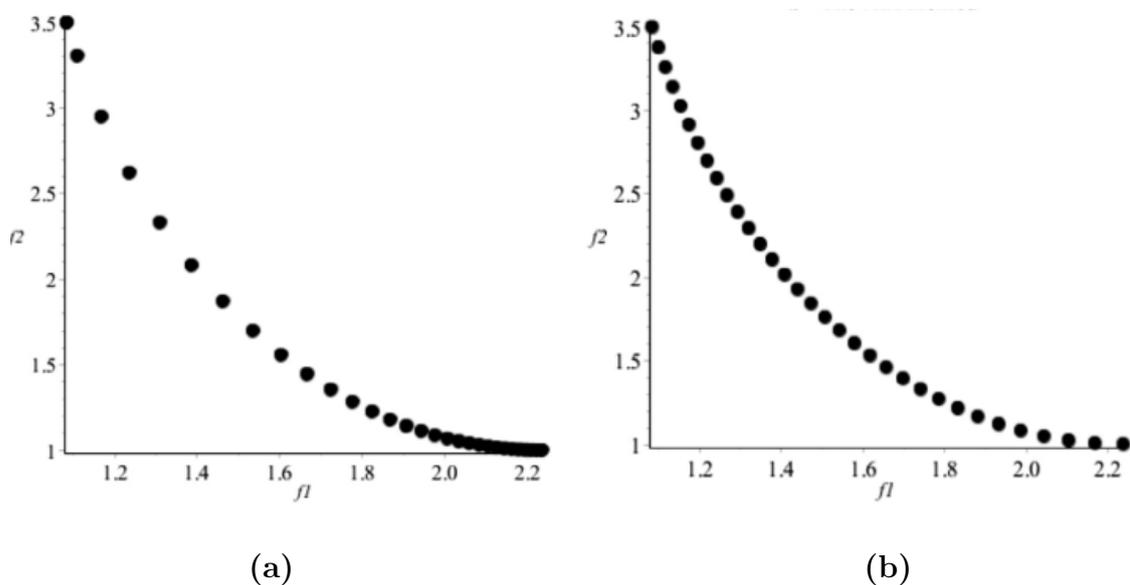


Figura 2.14 – Fronteira de Pareto obtidas pelos métodos: (a) soma ponderada e (b) NBI

Fonte: GHANE-KANAFI; KHORRAM (2015).

A criação matriz payoff ($\bar{\Phi}$) é o primeiro passo necessário no método NBI. A matriz de payoff é formada por cada função objetivo, com base no cálculo dos mínimos individuais. Na notação matricial $f_i^*(x_i^*)$ é a solução de minimização da função objetivo i^{th} ; quando o ótimo individual $f_i(x)$ é substituído nas funções objetivo que permanecem

(x_i^*) é obtido então $\bar{\Phi}$ e pode ser escrito como na Eq. 2.54.

$$\Phi = \begin{bmatrix} f_1^*(x_1^*) & \dots & f_1^*(x_i^*) & \dots & f_1^*(x_m^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_i^*(x_1^*) & \dots & f_i^*(x_i^*) & \dots & f_i^*(x_m^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_m^*(x_1^*) & \dots & f_m^*(x_i^*) & \dots & f_m^*(x_m^*) \end{bmatrix} \rightarrow \bar{\Phi} = \begin{bmatrix} \bar{f}_1 & \dots & \bar{f}_1 & \dots & \bar{f}_1(x_m^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{f}_i & \dots & \bar{f}_i & \dots & \bar{f}_i(x_m^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{f}_m(x_1^*) & \dots & \bar{f}_m(x_i^*) & \dots & \bar{f}_m(x_m^*) \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

Os valores de i^{th} função objetivo $f_i(x)$ (o mínimo $f_i^*(x_i^*)$ e o máximo $f_i(x_i^*)$) formam as linhas da matriz payoff $\bar{\Phi}$.

De acordo com COSTA *et al.* (2016), estes valores podem ser usados para normalizar as funções objetivo, principalmente quando eles serão escritos em termos de diferentes escalas ou unidades. O ponto Utopia pode ser obtido escrevendo um vetor com o conjunto mínimo individual $f^U = [f_1^*(x_1^*) \dots, f_i^*(x_i^*) \dots, f_m^*(x_m^*)]$; corresponde a todos os objetivos sendo simultaneamente os melhores valores possíveis, como um ponto específico $f_1^*(x_1^*)$, geralmente fora da região viável.

Da mesma forma, o ponto Nadir $f_i(x_i^*)$ pode ser obtido com os valores máximos de cada função objetivo: $f^N = [f_i(x_i^*) \dots, f_i(x_i^*) \dots, f_i(x_i^*)]^T$; corresponde aos piores valores de todos os objetivos no espaço experimental (COSTA *et al.*, 2016). Ainda BRITO *et al.* (2014), destaca que, na linha de utopia, os dois pontos de ancoragem são obtidos quando o objetivo i^{th} é minimizado.

Para normalizar as funções objetivo, as etapas nas Eqs. (2.55), (2.56) e (2.57) são descritas.

$$\bar{f}(x) = \frac{f_i(x) - f_i^U}{f_i^N - f_i^U}, \quad i = 1, \dots, m \quad (2.55)$$

A normalização das funções objetivo leva à escalonamento da matriz $\bar{\Phi}$ e do vetor $\bar{F}(x)$. Assim, a formulação NBI pode ser descrita como uma associação do vetor de pesos (β) e um vetor normal unitário (\hat{n}) (COSTA *et al.*, 2016).

Max D

(x, t)

sujeito a: $\bar{\Phi}\beta + D\hat{n} = \bar{F}(x)$

$\mathbf{x} \in \Omega$

$g_j(x) \leq 0$

$h_j(x) \leq 0$

(2.56)

A Eq. (2.56) pode ser simplificada, para problemas bidimensionais, com a eliminação algébrica do parâmetro (D), como definido na Eq. (2.57).

$$\begin{aligned} & \text{Min } \bar{f}_1(x) \\ & \text{sujeito a: } \bar{f}_1(x) - \bar{f}_2(x) + 2w - 1 = 0 \\ & g_j(x) \geq 0 \\ & 0 \leq w \leq 1 \end{aligned} \quad (2.57)$$

As restrições na Eq. (2.57) são: $\bar{f}_1(x)$ e $\bar{f}_2(x)$ como a função objetivo normalizada $g_j(x) \geq 0$ para região experimental; e $0 \leq w \leq 1$ para a região cuboidal. Uma fronteira de Pareto distribuída uniformemente pode ser criada com a solução do problema de otimização, iterativamente, com diferentes valores de peso (w) (COSTA *et al.*, 2016).

O método NBI pode produzir fronteiras não-convexas, resultados irrealis e tende a falhar se várias funções objetivo estiverem correlacionadas positivamente com objetivos conflitantes entre si. (COSTA *et al.*, 2016). No entanto, PAIVA *et al.* (2009) propôs um método chamado Erro Quadrático Médio Multivariado (MMSE), capaz de preencher essa desvantagem. O método MMSE é capaz de obter funções objetivas não correlacionadas, considerando os respectivos alvos, a partir dos Componentes Principais. O MMSE é uma combinação dos métodos MSE, RSM e ACP. A Eq. (2.58) é a representação matemática do método.

$$\begin{aligned} MMSE_i = [& (AF_{(x)} - \zeta_F)^2 + \lambda_F], i = 1, 2, \dots, p \\ & x^T x \leq \rho^2 \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$F = b_{0i} + \left[\nabla f(\mathbf{x})^T \right]_i + \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \left[\nabla^2 f(\mathbf{x}) \right] \mathbf{x} \right\}_i, i = 1, 2, \dots, p \quad (2.59)$$

$$\zeta_F = \sum_{j=1}^p e_{ij} \cdot \left[Z \left(Y_j | \zeta_{Y_j} \right) \right], i = 1, 2, \dots, p \quad (2.60)$$

O número de i^{th} fatorial (F) significativo é relativo ao número de variáveis i da função $MMSE_i$. Se a resposta original estabelecida entre a estrutura de variância-covariância for maior que 80 %, então o F é considerado significativo (JOHNSON; WICHERN 2007). O F é o polinômio de segunda ordem ajustado, posicionado em relação às variáveis de entrada, conforme estabelecido na Eq. (2.59). De acordo com COSTA *et al.* (2016) ζ_F é o valor alvo do i^{th} fator e deve manter uma relação direta com as metas estabelecidas para o conjunto de dados original; A Eq. (2.60), ζ_F é definida, onde $Z(Y_j | \zeta_{Y_j}) = [(\zeta_{Y_j} - \mu_{Y_j}) \cdot (\sigma_{Y_j})^{-1}]$ é a variável normal padronizada $Z(\cdot)$ calculado para cada resposta original (Y_j) considerando, o ponto Utopia, a média (μ_{Y_j}) e o desvio padrão

(σ_{YJ}) de cada $Y_j.e_{ij}$ representa o conjunto de autovetores associados ao i^{th} componente principal.

Finalmente, λ_F são os autovalores associados ao F .

Estabelecidas as formulações $MMSE_i$, o problema multi-objetivo pode ser resolvido pelo método NBI. Em geral, o número de equações obtidas para substituir o conjunto original é menor do que o valor inicial, obviamente, dependendo da força da estrutura de variância-covariância (PAIVA *et al.*, 2009).

Assim, tomando $f_i(x) = MMSE_i(x)$, $f_i^U = MMSE_i^U$ e $f_i^N = MMSE_i^N(x)$ para otimização multiobjetivo desenvolvida pela abordagem NBI-MMSE e, em seguida, adotando um escalonamento descrito pela Eq. (2.55), um método bidirecional de NBI para funções $MMSE_i$, com $i = 1, 2, \dots, p$ pode ser escrito como indicado na Eq. (2.61).

$$\begin{aligned} \text{Min } \bar{f}_1(\mathbf{x}) &= \left(\frac{MMSE_1(\mathbf{x}) - MMSE_1^U}{MMSE_1^N - MMSE_1^U} \right) \\ \text{sujeito a:} \\ g_1(\mathbf{x}) &= \left(\frac{MMSE_1(\mathbf{x}) - MMSE_1^U}{MMSE_1^N - MMSE_1^U} \right) - \left(\frac{MMSE_1(\mathbf{x}) - MMSE_1^U}{MMSE_1^N - MMSE_1^U} \right) + 2w - 1 = 0 \\ g_2(\mathbf{x}) &= \mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2 \\ g_2(\mathbf{x}) &= [\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{X}) - \varphi]^T \hat{\Sigma}^{-1} [\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{X}) - \varphi] \leq \chi_{(p,\alpha)}^2 \end{aligned} \quad (2.61)$$

Onde, $MMSE_1^U(\mathbf{x})$ e $MMSE_2^U(\mathbf{x})$ são calculados como sugerido por PAIVA *et al.* (PAIVA *et al.*, 2009).

$MMSE_i^U(\mathbf{x})$ foram determinados pela minimização de restrição individual, como $MMSE_i^U(\mathbf{x}) = \text{Min}[MMSE_i(\mathbf{x})]$, $x \in \Omega$ em que Ω indica a região experimental na qual \mathbf{x} está inserido. O denominador $MMSE_i^N(\mathbf{x}) - MMSE_i^U(\mathbf{x})$ é usado para normalizar as múltiplas respostas, fazendo $MMSE_i^N(\mathbf{x})$ como o valor máximo de matriz payoff (matriz formada por todas as soluções observadas nas otimizações individuais). O conjunto de restrições $g_2(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2$, em que ρ é o raio do região experimental, mas, outras restrições podem ser adicionadas se for necessário. Em termos de fatores de projeto, esta proposta estabelece modelos empíricos para múltiplas respostas de processos de torneamento duro, mas pode ser usada em qualquer processo de fabricação.

Estabelecida a função multi-objetivo, o ótimo é alcançado usando o *GRG* ou *AG*.

3 MÉTODO PROPOSTO

Para validação do método proposto, este capítulo apresenta a estratégia utilizada, importante para as simulações com os modelos experimentais das funções objetivo estocásticas. As respostas do processo de torneamento foram obtidas por meio de um arranjo de superfície de resposta do tipo CCD, desenvolvido por (CAMPOS 2015).

Nesta etapa foi possível estudar, entender e propor alternativas satisfatórias para (a) o comportamento das correlações entre as funções objetivo e suas consequências, (b) a definição de pontos de ancoragem, de Utopia e de Nadir fora das regiões de confiança associados aos dados experimentais causada pela etapa de otimização individual e (c) a natureza dos pontos de inicialização do algoritmo gradiente e algoritmo genérico usados para encontrar as soluções do problema multiobjetivo em cada vetor de peso desejado.

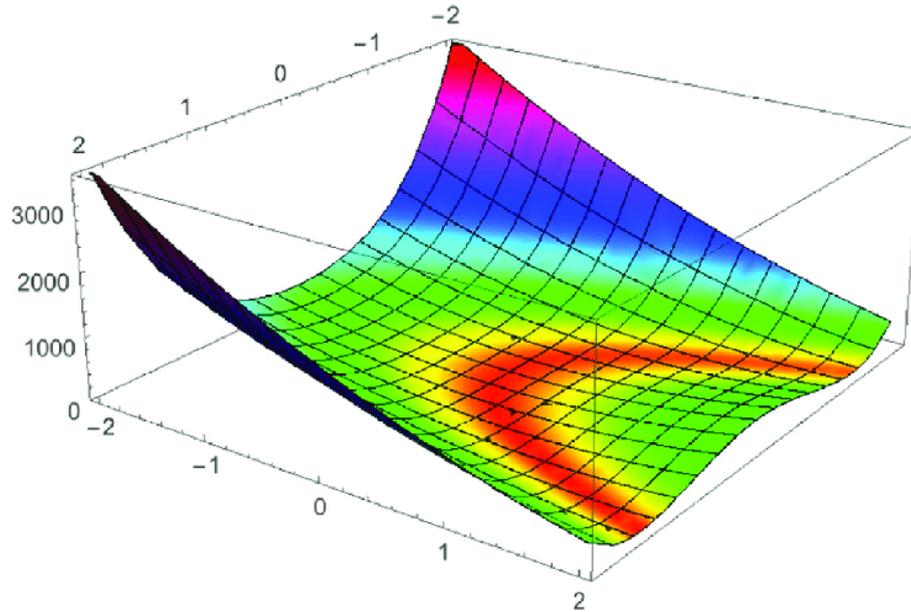
Ainda nesta etapa também foi possível validar a proposta MMSE-NBI com funções de teste de (ROSENBROCK 1960), uma função de minimização expressa pela Eq. (3.1).

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=0}^{n-1} 100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \quad (3.1)$$

Esta função é clássica em problema de otimização, proposta por ROSENBROCK (1960) e posteriormente generalizada para n variáveis. Esta função tem como característica a presença de muitos mínimos locais e uma suave variação nas vizinhanças do mínimo global, tornando o processo de busca árduo para os algoritmos de otimização. A função de Rosenbrock geralmente é definida pela literatura com o espaço de busca $-100 \leq x_i \leq 100$ para $n = 30$. Na Figura 3.1 tem-se uma representação gráfica de uma função de teste de Rosenbrock com mínimo global em zero, quando $x_n = (1, 1, \dots)$.

Foram definidas justamente oito equações de teste de Rosenbrock para testar a metodologia MMSE-NBI, porque a validação do método será em um processo que possui oito respostas correlacionadas. Estas funções são desenvolvidas geralmente para testar a capacidade de um algoritmo de escapar dos pontos de mínimo local, segundo JAMIL e YANG (2013), o aumento no número de variáveis dificulta o encontro da solução esperada, o aumento exponencial no número de dimensões podem ser uma barreira para os algoritmos de otimização em problemas altamente não lineares.

Foram testados os algoritmos GRG, GA e GRG_R (GRG com rotinas de inicialização), o GRG_R proposto neste trabalho é a implementação de rotinas com vários pontos de inicialização do GRG, como escrito por ARORA (2017) uma limitação do algoritmo GRG é o encontro de ótimos locais, estas rotinas são utilizadas para definir, os ótimos individuais e pontos de ancoragem das funções de Rosenbrock e das respostas do processo



Fonte: DAKOTA (2015)

Figura 3.1 – Representação gráfica da função Rosenbrock

de torneamento e como pode ser confirmado neste trabalho a implementação das rotinas tornou o algoritmo GRG mais robusto para problemas de otimização não linear.

As equações baseadas na função de Rosenbrock são:

$$\text{Caso 1 - } f(x_1, x_2, x_3) = 100(x_3 - x_2^2)^2 + (1 - x_2)^2 + x_1$$

$$\text{Caso 2 - } f(x_1, x_2, x_3) = (x_3 - x_2^2)^2 + (1 - x_2)^2 + x_1^3 - x_2$$

$$\text{Caso 3 - } f(x_1, x_2, x_3) = \frac{(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2}{\cos(x_3^4)} + 3\pi$$

$$\text{Caso 4 - } f(x_1, x_2, x_3) = (x_3 - x_2^2)^2 + (1 - x_2)^2 + \cos(x_1)$$

$$\text{Caso 5 - } f(x_1, x_2, x_3) = (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 + \sqrt{e^{x_3}}$$

$$\text{Caso 6 - } f(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{x_3^2 + \sqrt{\pi}} + (x_3 - x_2^2)^2 + (1 - x_2)^2 + \cos(\pi + x_1)$$

$$\text{Caso 7 - } f(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{e^{x_1}} + (x_3 - x_2^2)^2 + (1 - x_2)^2$$

$$\text{Caso 8 - } f(x_1, x_2, x_3) = \frac{(x_3 - x_2^2)^2 + (1 - x_2)^2}{100(x_3 - x_1)^2 + \pi}$$

O método proposto foi desenvolvido e aplicado de acordo com a Figura 3.2 primeiro

para as equações baseadas na função de Rosenbrock e depois no processo de torneamento.

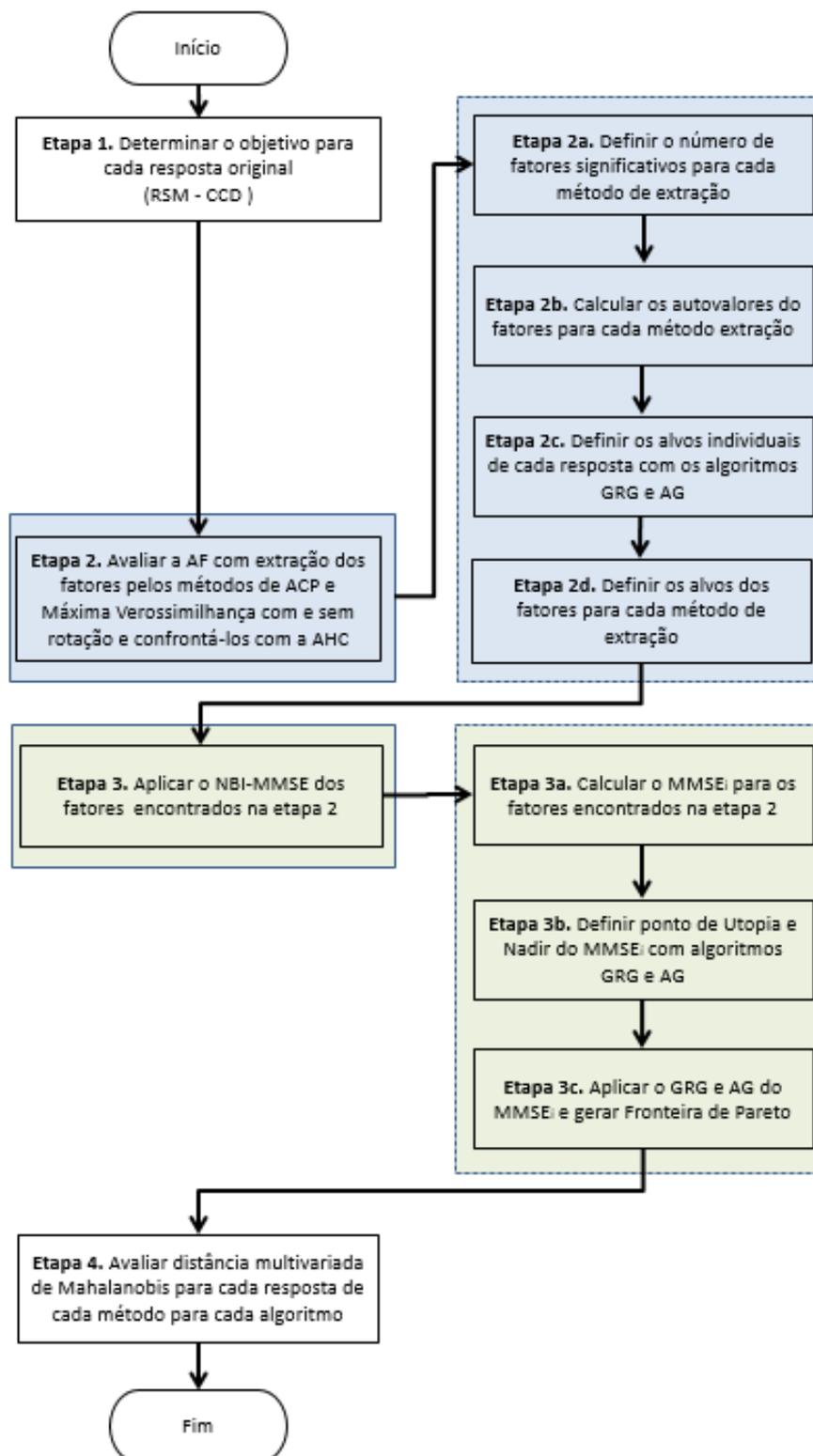


Figura 3.2 – Visão geral da abordagem proposta

Etapa 2a. Realizada a AF das oito respostas e de acordo com a percentual de explicação dos autovalores (94,3 %), dois fatores foram suficientes para explicar mais de 80% da variação do modelo, e utilizados os métodos de extração pela ACP e Máxima

Verossimilhança, com e sem rotação dos fatores, a rotação ortogonal das cargas fatoriais adotada foi Varimax, por apresentar fatores mais significativos.

De acordo com KAISER (1958) esta rotação simplifica as colunas da matriz de cargas fatoriais, em cada fator, as grandes cargas são aumentadas e as pequenas são reduzidas, após uma rotação Varimax, cada variável original tende a estar associado a um fator e cada fator representa um número pequeno de variáveis, isso é feito através da combinação linear dos fatores originais de modo que a variância entre as cargas seja maximizada, tornando a correlação entre os fatores nula.

Em relação ao cálculo dos fatores, adotou-se a matriz de correlação, pois as respostas das variáveis possuem escalas diferentes. O critério para avaliar qual método é mais eficaz foi a matriz de correlação das respostas e distância de Mahalanobis.

Etapa 2b. Considera a matriz de variância-covariância Σ associado ao vetor aleatório $X^T = [X_1, X_2, \dots, X_p]$. Presume-se que essa matriz tenha pares de autovalores e autovetores $(\lambda_1, e_1), (\lambda_2, e_2), \dots, (\lambda_p, e_p)$, onde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$. $m < p$ seja o número de fatores comuns. A análise dos fatores pressupõe que as variáveis originais podem ser agrupadas por suas correlações:

Etapa 2c. Os alvos individuais de cada resposta original são calculados com o uso dos algoritmos GRG , GA e GRG_R , respeitando o objetivo de cada resposta.

Etapa 2d. A extração dos fatores foi feita pela ACP e máxima verossimilhança, os ζ_{Fi} é o valor alvo da i -ésimo fator que deve manter uma relação direta com os alvos do conjunto original de dados. Para estabelecer essa relação, é possível usar a Eq. (2.60). Onde e_i representa o conjunto de autovetores associado à i -ésimo fator e ζ_{Fi} representa o alvo para cada uma das p respostas originais. Com essa transformação, pode-se estabelecer um valor coerente para o alvo da i -ésimo fator que seja compatível com os alvos do problema original.

Etapa 3a. A estimação dos coeficientes de cada fator é feita com a utilização do método dos OLS, constrói-se uma função aproximada que relaciona a resposta de interesse com as variáveis do processo. De acordo com a Eq. (2.58), Obtém-se o MMSE usando os escores de fator obtidos no Estágio 2c, o alvo de cada fator (ζ_F) e seu respectivo autovalor (λ_{FA}). O próximo passo é proceder com o cálculo do MMSE conforme Eq. (3.3) para os fatores, os mesmos foram agrupados conforme análise de Cluster para as 8 respostas.

As cargas fatoriais rotacionadas de cada variável são definidas para cada fator e, em seguida, é realizado o agrupamento das variáveis com cada fator, foram testados os métodos ligação média, centróide, mediana e Ward para determinar a distância entre dois clusters, o critério para escolha do melhor método foi, a menor distância entre os grupos e similaridades entre eles.

Etapa 3b. Com a função MMSE definida em **etapa 3a** obtém-se os valores de

$MMSET_i^U(x)$ e $MMSET_i^N(x)$ conforme Eq. (3.2) e (3.3), o critério para junção dos fatores foi definido de acordo com a comunalidade, e dendrograma, constrói-se a matriz Payoff Φ para as duas equações do MMSE Eq. (3.4) e Eq. (3.5).

$$\begin{aligned} MMSE_1 &= [(F_1 - \zeta_{f1})^2 + \lambda_1] \\ MMSE_2 &= [(F_2 - \zeta_{f2})^2 + \lambda_2] \end{aligned} \quad (3.2)$$

Caso seja necessário mais de dois fatores para explicar a variância dos dados, procede-se da seguinte forma:

$$MMSET_1 = \sqrt{[(F_1 - \zeta_{f1})^2 + \lambda_1] \times [(F_2 - \zeta_{f2})^2 + \lambda_2]} \quad (3.3)$$

$$\bar{\Phi} = \begin{bmatrix} MMSET_1^U & MMSET_1^N \\ MMSET_2^N & MMSET_2^U \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

$$\bar{f}(x) = \frac{f_i(x) - f_i^U}{f_i^N - f_i^U} \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} \bar{f}_1(x) &= \overline{MMSET_1}(x) = \frac{MMSET_1(x) - MMSET_1^U}{MMSET_1^N - MMSET_1^U} \\ \bar{f}_2(x) &= \overline{MMSET_2}(x) = \frac{MMSET_2(x) - MMSET_2^U}{MMSET_2^N - MMSET_2^U} \end{aligned} \right\} \quad (3.5)$$

Etapa 3c. Resolve o sistema da Eq. (2.61) com o algoritmo GRG e AG para valores diferentes de w , restrito apenas à região experimental. A Fronteira de Pareto esperada é conforme Figura 3.3

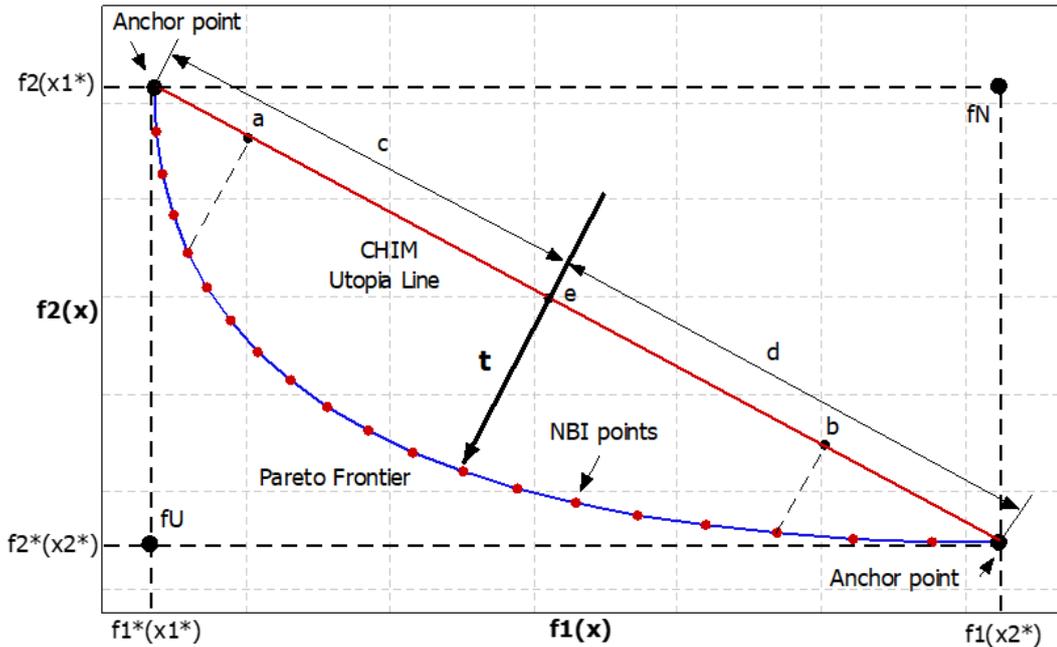


Figura 3.3 – Fronteira de Pareto esperada

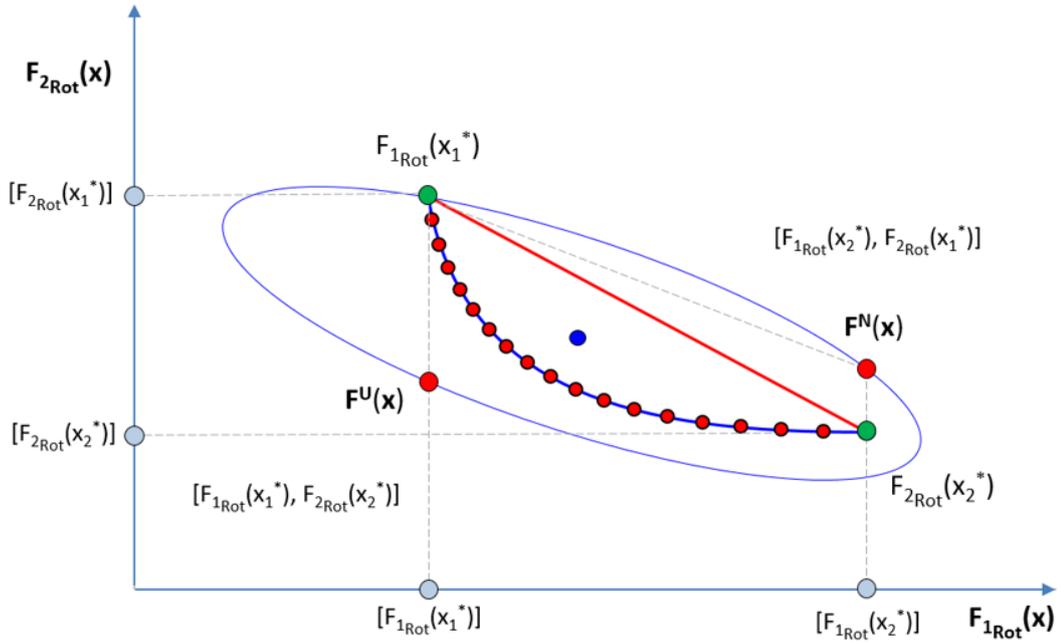


Figura 3.4 – Construção da Fronteira com restrição Elíptica

A Fronteira de Pareto após aplicação da restrição de Khuri, fica como na Figura 3.4

$$\text{Min}_{\mathbf{x} \in \Omega} \quad \bar{f}_{(Rot)}(\mathbf{x}) = \left[\frac{MMSE_{g_1}(\mathbf{x}) - MMSE_{g_1}^U}{MMSE_{g_1}^N - MMSE_{g_1}^U} \right]$$

sujeito a:

$$\bar{g}_1(Rot)(\mathbf{x}) = \left[\frac{MMSE_{g_1}(\mathbf{x}) - MMSE_{g_1}^U(\mathbf{x})}{MMSE_{g_1}^N(\mathbf{x}) - MMSE_{g_1}^U(\mathbf{x})} \right] - \left[\frac{MMSE_{g_2}(\mathbf{x}) - MMSE_{g_2}^U}{MMSE_{g_2}^N - MMSE_{g_2}^U} \right] + 2\beta - 1 = 0$$

$$g_2(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2$$

$$g_2(\mathbf{x}) = [\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{x}) - \varphi]^T \hat{\Sigma}^{-1} [\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{x}) - \varphi] \leq \chi_{(p, \alpha)}^2$$

$$FMSE_{(\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2)} = [\hat{F}_{Rot(g_1)}(\mathbf{x}) - T_i]^2 + \lambda_i$$

$$0 \leq \beta_i \leq 1$$

(3.6)

$$\text{Com } E[\hat{F}_s(x) | x_0] = x_0^{(m)T} \left[(X^T X)^{-1} \left(X^T Z \left\{ (LT) [(LT)^T (LT)]^{-1} \right\} \right) \right]$$

$$\tilde{L} = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} e_{11} & \sqrt{\lambda_2} e_{12} \\ \sqrt{\lambda_1} e_{11} & \sqrt{\lambda_2} e_{12} \end{bmatrix}$$

$$T = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$\hat{F}_{Rot(g_1)}(\mathbf{x})$ = Modelo de superfície de resposta para primeiro fator rotacionado que representa principal grupo de respostas originais.

$\hat{F}_{Rot(g_2)}(\mathbf{x})$ = Modelo de superfície de resposta para o segundo fator rotacionado

que representa o segundo grupo de respostas originais.

$\hat{F}_{Rot_{(g_1)}^U}(\mathbf{x})$: Ótimo individual para $\hat{F}_{Rot_{(g_1)}}(\mathbf{x})$

$\hat{F}_{Rot_{(g_2)}^U}(\mathbf{x})$: Ótimo individual para $\hat{F}_{Rot_{(g_2)}}(\mathbf{x})$

$\hat{F}_{Rot_{(g_1)}^N}(\mathbf{x})$: Pior valor para $\hat{F}_{Rot_{(g_1)}}(\mathbf{x})$ obtido com ótimo individual de $\hat{F}_{Rot_{(g_2)}}(\mathbf{x})$

$\hat{F}_{Rot_{(g_2)}^N}$: Pior valor para $\hat{F}_{Rot_{(g_2)}}(\mathbf{x})$ obtido com ótimo individual de $\hat{F}_{Rot_{(g_1)}}(\mathbf{x})$

\hat{F}_{Rot}^N : Ponto de Nadir correspondente ao vetor $\hat{F}_{Rot}^N(\mathbf{x})^T = [\hat{F}_{Rot_{(g_1)}^N}(\mathbf{x}) \hat{F}_{Rot_{(g_2)}^N}(\mathbf{x})]$

\hat{F}_{Rot}^U : Ponto de Utopia correspondente ao vetor $\hat{F}_{Rot}^U(\mathbf{x})^T = [\hat{F}_{Rot_{(g_1)}^U}(\mathbf{x}) \hat{F}_{Rot_{(g_2)}^U}(\mathbf{x})]$

$\hat{F}_{Rot_{(g_1)}}(\mathbf{x})$: Modelo de superfície de resposta para primeiro fator rotacionado que representa principal grupo de respostas originais é obtido com o valor esperado de $\hat{F}_{Rot_{(g_1)}}(\mathbf{x})$ em um \mathbf{x}_0 ótimo, quando:

$$E[\hat{F}_s(x)|x_0] = x_0^{(m)T} \left[(X^T X)^{-1} (X^T F_s) \right] = x_0^{(m)T} \left[(X^T X)^{-1} \left(X^T Z \left[L (L^T L)^{-1} \right] \right) \right]$$

onde: \mathbf{L} é a matriz de carregamento dos vetores e \mathbf{Z} é o valor padronizado das respostas originais.

$$\tilde{F}_R = Z \left\{ (LT) \left[(LT)^T (LT) \right]^{-1} \right\} = Z \left\{ (\tilde{L}) \left[(\tilde{L})^T (\tilde{L}) \right]^{-1} \right\}$$

$$E[\hat{F}_s(x)|x_0] = x_0^{(m)T} \left[(X^T X)^{-1} (X^T F_s) \right] = x_0^{(m)T} \left\{ (X^T X)^{-1} \left[X^T Z \left((LT) \left[(LT)^T (LT) \right]^{-1} \right) \right] \right\}$$

$g_2(\mathbf{x})$ A restrição elíptica é calculada a partir da distância ao quadrado \mathbf{D} , como:

$$D = [\hat{Y}(x) - \phi]^T \hat{\Sigma}^{-1} [\hat{Y}(x) - \phi]$$

$\chi_{(p,\alpha)}^2$: O valor crítico Chi-quadrado crítico para p respostas com $\alpha = 5\%$, Corresponde ao lado direito da restrição.

$\hat{Y}(x)^T$: vetor da superfície de resposta original tal como:

$$\hat{Y}(x)^T = [\hat{Y}_1(x) \quad \hat{Y}_2(x) \quad \cdots \quad \hat{Y}_p(x)]$$

$[\phi]^T$: vetor de restrição para ótimo individual, obtido com restrições esféricas e elípticas. Em forma vetorial, pode-se escrever que:

$$[\phi]^T = [\hat{Y}_1(x_1^*) \quad \hat{Y}_2(x_2^*) \quad \cdots \quad \hat{Y}_p(x_p^*)]$$

$\hat{\Sigma}^{-1}$: é o inverso da matriz de variância-covariância $\hat{\Sigma}$ dos modelos de superfície de respostas, como:

$$\hat{\Sigma} = \begin{bmatrix} Var[\hat{Y}_1(\mathbf{x})] & Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_2(\mathbf{x})] & Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_3(\mathbf{x})] & \dots & Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_p(\mathbf{x})] \\ Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_2(\mathbf{x})] & Var[\hat{Y}_2(\mathbf{x})] & Cov[\hat{Y}_2(\mathbf{x}); \hat{Y}_3(\mathbf{x})] & \dots & Cov[\hat{Y}_2(\mathbf{x}); \hat{Y}_p(\mathbf{x})] \\ Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_2(\mathbf{x})] & Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_2(\mathbf{x})] & Var[\hat{Y}_3(\mathbf{x})] & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_p(\mathbf{x})] \\ Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_p(\mathbf{x})] & Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_p(\mathbf{x})] & Cov[\hat{Y}_1(\mathbf{x}); \hat{Y}_p(\mathbf{x})] & \dots & Var[\hat{Y}_p(\mathbf{x})] \end{bmatrix}$$

$\hat{Y}_1(\mathbf{x})$ = modelo de superfície de resposta para a i-ésima resposta original, que pode ser obtida por

$$\hat{Y}_1(\mathbf{x}) = \mathbf{z}^T(\mathbf{x})[(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^T \mathbf{Y}_1)]$$

$Var[\hat{Y}_p(\mathbf{x})]$ = variação de previsão do i-ésimo modelo de superfície de resposta associado ao i-ésimo erro quadrático médio. Essa propriedade do modelo de superfície pode ser obtida como:

$$Var[\hat{Y}_p(\mathbf{x})] = \sigma_p^2[\mathbf{z}^T(\mathbf{x})(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}\mathbf{z}^T(\mathbf{x})] \text{ Onde:}$$

$$\mathbf{z}^T(\mathbf{x}) = [1 \quad x_1 \quad x_2 \dots x_k \quad x_1^2 \quad x_2^2 \dots x_k^2 \quad x_1x_2 \quad x_1x_3 \dots x_{k-1}x_k]; \mathbf{x}_0 = [x_1 \quad x_2 \dots x_k]$$

$Cov[\hat{Y}_i(\mathbf{x}); \hat{Y}_j(\mathbf{x})]$ = covariância entre a i-ésima e a-ésima superfície de resposta que pode ser estabelecida usando a correlação ρ_{ij} entre cada par de funções e as respectivas variâncias individuais.

$$Cov[\hat{Y}_i(\mathbf{x}); \hat{Y}_j(\mathbf{x})] = \sigma_{ij}[\mathbf{z}^T(\mathbf{x})(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}\mathbf{z}^T(\mathbf{x})] = \rho_{ij}\sqrt{\sigma_i^2\sigma_j^2}[\mathbf{z}^T(\mathbf{x})(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}\mathbf{z}^T(\mathbf{x})]$$

Os carregamentos dos fatores rotacionados são calculadas da seguinte forma:

$$\tilde{F}_R = Z\{(LT)[(LT)^T(LT)]^{-1}\} = Z\{(\tilde{L})[(\tilde{L})^T(\tilde{L})]^{-1}\}$$

Onde \tilde{L} é o carregamento do fator rotacionado . Uma escolha comum para a matriz de rotação no espaço R^2 com uma rotação no sentido anti-horário em torno do eixo z positivo através de um ângulo θ é $T_{(2x2)}$, como:

$$T = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

Analogamente, uma escolha comum adequada para a matriz de rotação no espaço R^3 com uma rotação no sentido anti-horário sobre o eixo z positivo através de um ângulo θ é $T_{(3x3)}$ que pode ser escrita como:

$$T = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\text{sen}\theta & 0 \\ \text{sen}\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

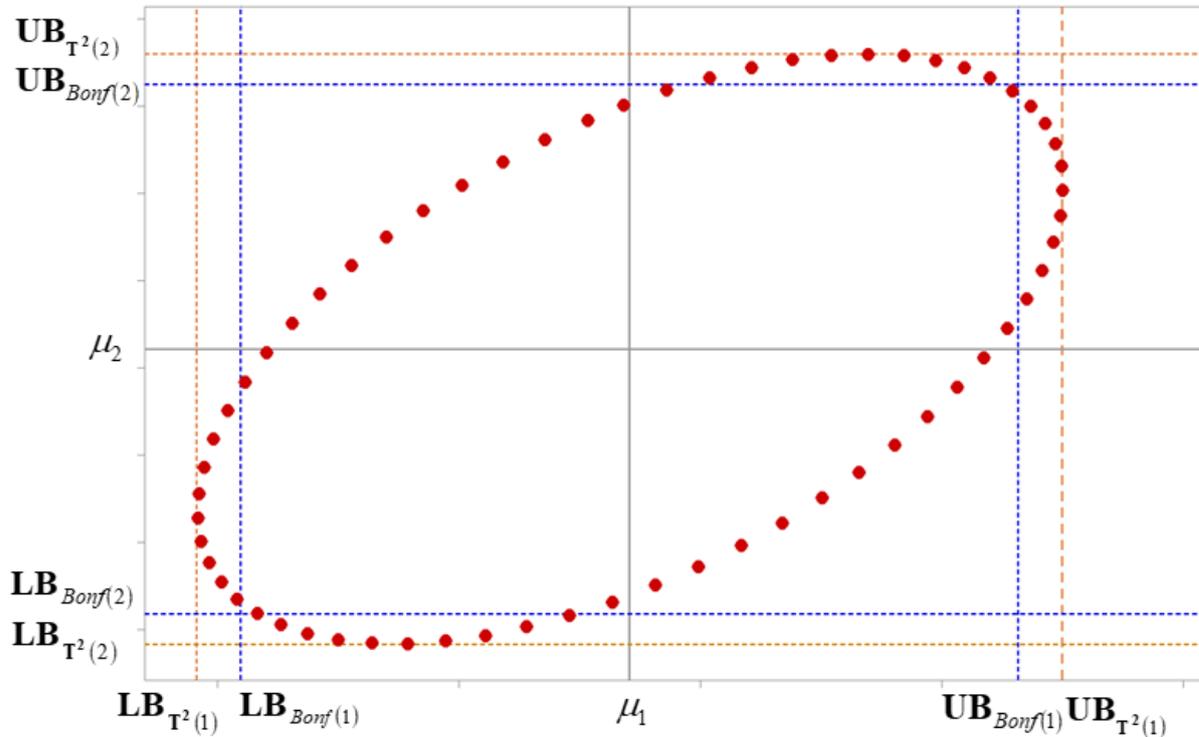


Figura 3.5 – Intervalos de confiança de Bonferroni x Hotelling

Na investigação dos efeitos das correlações sobre a fronteira, o problema multivariado com 8 respostas foram transformados em 28 sub problemas bidimensionais com isso, o Erro Quadrático Médio do Função (Function Mean Square Error-FMSE) de cada função podem ser agrupados por média geométrica, tal que:

$$FMSE_{(g_1)} = \left[\prod_{i=1}^{p-j} \left\{ \left[\hat{F}_{Rot(g_1)}(x) - T_i \right]^2 + \lambda_i \right\} \right]^{1/(p-j)}$$

Onde o grupo 1 (g_1) é formado segundo as informações obtidas em uma análise de clusters, p é o número de fatores e j representa o número de fatores que serão alocados em outros grupos.

A formulação usada para a restrição de Bonferroni é escrita como:

$$\bar{y}_p - t_{n-1} \left(\frac{\alpha}{2p} \right) \sqrt{\frac{s_{pp}}{n}} \leq \mu_p \leq \bar{y}_p + t_{n-1} \left(\frac{\alpha}{2p} \right) \sqrt{\frac{s_{pp}}{n}}$$

Para definir os pontos ancoragens para NBI de FMSE, Nadir e Utopia para a parametrização do método NBI com escores rotacionados de fator, as funções $FMSE_i$ individuais são definidas a partir da seguinte otimização:

$$\begin{aligned}
 \underset{x \in \Omega}{Min} \quad & FMSE_i = [\hat{F}_{Rot(g_1)}(x) - T_i]^2 + \lambda_i \\
 S.t. : \quad & g_1(x) = x^T x - \rho^2 = 0 \\
 & g_2(x) = [\hat{Y}(x) - \phi]^T \hat{\Sigma}^{-1} [\hat{Y}(x) - \phi] \leq \chi_{(p,\alpha)}^2 \\
 & g_j(x) = \hat{Y}_i(x) \geq \bar{y}_p - t_{n-1} \left(\frac{\alpha}{2p} \right) \sqrt{\frac{s_{pp}}{n}} \\
 & g_{2j}(x) = \hat{Y}_i(x) \leq \bar{y}_p + t_{n-1} \left(\frac{\alpha}{2p} \right) \sqrt{\frac{s_{pp}}{n}}
 \end{aligned}$$

O alvos individuais (T_i) também são obtidos por otimização, tal que:

$$\begin{aligned}
 \underset{x \in \Omega}{Min} \quad & T_i = \hat{Y}_i(x) = z^T(x) \beta \\
 S.t. : \quad & g_1(x) = x^T x - \rho^2 = 0 \\
 & g_2(x) = [\hat{Y}(x) - \phi]^T \hat{\Sigma}^{-1} [\hat{Y}(x) - \phi] \leq \chi_{(p,\alpha)}^2
 \end{aligned}$$

Etapa 4. Análise das distâncias de Mahalanobis calculadas conforme Eq. 2.8 para método de extração por PCA e Máxima verossimilhança com e sem rotação das cargas do fator, constroem as fronteiras para cada método.

4 RESULTADOS E CONCLUSÕES

4.1 Aplicação do método MMSE-NBI para função de teste de Rosenbrock

Etapa 1. A partir das equações de teste definidas no capítulo 3 foi possível construir a Tabela 4.1 que apresenta os resultados simulados das funções de teste baseadas no CCD e calcular as correlações entre as funções conforme a Tabela 4.2.

A AF foi capaz de reduzir as oito funções em dois fatores para os dois métodos de extração com e sem rotação ortogonal, na rotação foi utilizado o método *Varimax*.

Tabela 4.1 – Matriz simulada (CCD) com funções de teste

Variáveis			Respostas							
x_1	x_2	x_3	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8
-1	-1	-1	7,0	8,0	24,2	43,0	8,6	5,7	1,2	1,7
1	-1	-1	9,0	10,0	24,2	44,5	9,6	3,2	0,2	0,5
-1	1	-1	3,0	2,0	16,8	4,5	4,6	4,4	0,6	0,9
1	1	-1	5,0	4,0	16,8	4,5	5,6	3,2	0,1	0,2
-1	-1	1	3,0	4,0	16,8	40,5	4,6	3,2	0,4	0,9
1	-1	1	5,0	6,0	16,8	40,5	5,6	4,4	0,1	0,2
-1	1	1	-1,0	-2,0	9,4	0,5	0,6	3,1	0,0	0,0
1	1	1	1,0	0,0	9,4	-1,0	1,6	3,1	0,0	0,0
-1,6	0,0	0,0	-0,6	-3,4	8,3	9,9	1,4	3,1	0,1	0,4
1,6	0,0	0,0	2,6	5,4	8,3	9,9	3,3	3,1	0,0	0,0
0,0	-1,6	0,0	14,0	15,7	23,5	76,4	15,0	7,6	1,1	1,4
0,0	1,6	0,0	7,5	5,9	16,9	11,1	8,5	5,5	0,6	0,8
0,0	0,0	-1,6	3,7	3,7	13,1	12,6	4,7	3,2	0,2	0,4
0,0	0,0	1,6	3,7	3,7	13,1	12,6	4,7	3,2	0,2	0,4
0	0	0	1,0	1,0	10,4	11,0	2,0	3,5	0,1	0,1
0	0	0	1,0	1,0	10,4	11,0	2,0	3,5	0,1	0,1
0	0	0	1,0	1,0	10,4	11,0	2,0	3,5	0,1	0,1
0	0	0	1,0	1,0	10,4	11,0	2,0	3,5	0,1	0,1
0	0	0	1,0	1,0	10,4	11,0	2,0	3,5	0,1	0,1

Etapa 2a. A Figura 4.1 mostra as cargas fatoriais para todos os fatores que usam o método de extração pela ACP e Verossimilhança. O primeiro fator têm variância (autovalor) maior que 1. Para o método de extração por ACP a partir do segundo fator os autovalores variam muito pouco e esta variação chega a ser zero a partir do quinto fator. Com apenas um fator apesar de possuir o % de explicação maior que 80% devido ao

Tabela 4.2 – Correlações entre as oito funções de teste com os valores de p-value

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7
f_2	0,966	0,000					
f_3	0,884	0,848	0,000				
f_4	0,803	0,847	0,794	0,000			
f_5	0,994	0,951	0,906	0,820	0,000		
f_6	0,767	0,711	0,642	0,672	0,794	0,000	
f_7	0,740	0,689	0,794	0,672	0,793	0,863	0,000
f_8	0,695	0,645	0,816	0,689	0,758	0,772	0,978
	0,001	0,003	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000

resultado do autovalor, usar somente ele para otimizar as funções pode levar a resultados não confiáveis devido a alta variância não explicado pelo fator.

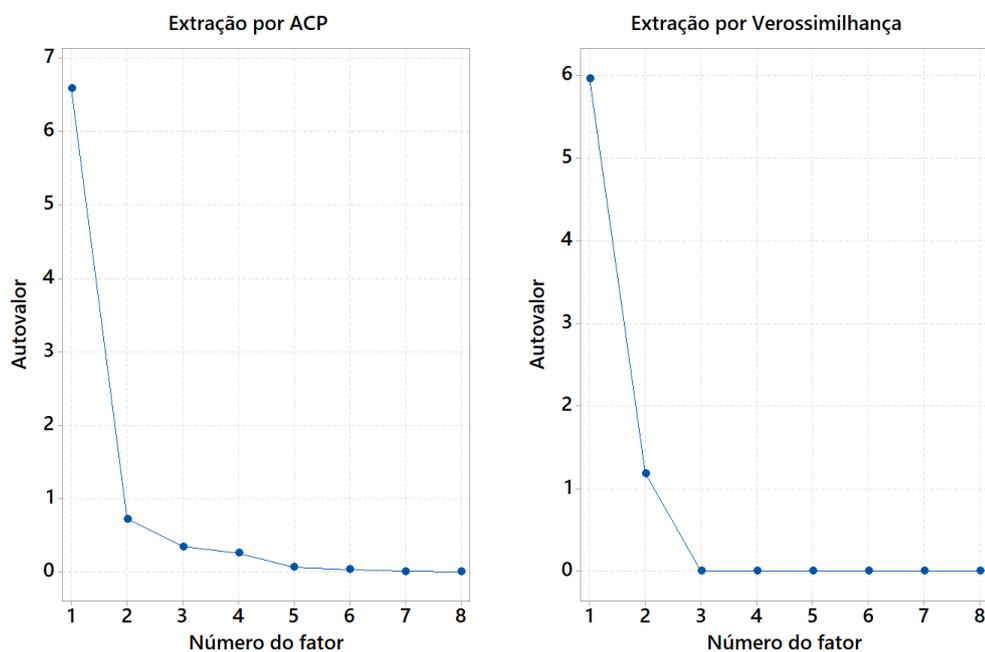


Figura 4.1 – % de explicação dos autovalores para os métodos de extração por ACP e Verossimilhança

No método de extração por Verossimilhança o segundo fator é obtido de f_8 o que torna o primeiro autovalor um pouco menor que no método pela ACP, porém o segundo fator tem um valor maior que pela ACP e a partir do terceiro fator a variação é zero, isto significa que os dois explicam grande parte da variabilidade total dos dados. Tanto pelo método de ACP quanto pela Verossimilhança a partir do terceiro fator o %

de explicação da variabilidade dos dados correspondem a uma proporção muito pequena e são provavelmente sem importância.

Etapa 2b. A tabela 4.3 traz os percentuais de explicação de cada fator pelo método de ACP não rotacionado, F_1 explica 82,3% da matriz de variância-covariância, F_1 é obtido de $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_7$ e f_8 e F_2 explica 9% da matriz de variância-covariância, apesar de não possuir percentual maior que F_1 para nenhuma função, ele é necessário para obtenção da fronteira NBI, no método de ACP rotacionado F_1 explica 51,5% da matriz de variância-covariância, F_1 é obtido de f_1, f_2, f_3, f_4 e f_5 e F_2 explica 39,9% da matriz de variância-covariância, F_2 é obtido de f_6, f_7 e f_8 .

Tabela 4.3 – Cargas fatoriais com método de extração por ACP

Variável	Não Rotacionado			Rotação Varimax		
	FC_1	FC_2	Comunalidade	FCR_1	FCR_2	Comunalidade
f_1	0,947	0,257	0,963	0,888	-0,419	0,963
f_2	0,921	0,341	0,964	0,922	-0,338	0,964
f_3	0,923	0,094	0,861	0,763	-0,528	0,861
f_4	0,868	0,216	0,799	0,800	-0,399	0,799
f_5	0,97	0,176	0,971	0,852	-0,495	0,971
f_6	0,855	-0,277	0,807	0,470	-0,766	0,807
f_7	0,897	-0,431	0,99	0,403	-0,910	0,99
f_8	0,873	-0,434	0,949	0,383	-0,896	0,949
Variância	6,5866	0,7195	7,3061	4,1179	3,1882	7,3061
% Var	0,823	0,09	0,913	0,515	0,399	0,913

Tabela 4.4 – Cargas fatoriais com método de extração por Verossimilhança

Variável	Não Rotacionado			Rotação Varimax		
	FV_1	FV_2	Comunalidade	FVR_1	FVR_2	Comunalidade
f_1	1,000	0,000	1,000	0,919	-0,393	1,000
f_2	0,966	0,040	0,936	0,904	-0,343	0,936
f_3	0,884	-0,227	0,833	0,724	-0,556	0,833
f_4	0,803	-0,136	0,663	0,685	-0,441	0,663
f_5	0,994	-0,089	0,996	0,879	-0,472	0,996
f_6	0,767	-0,417	0,762	0,541	-0,685	0,762
f_7	0,740	-0,666	0,991	0,419	-0,903	0,991
f_8	0,695	-0,697	0,969	0,365	-0,914	0,969
Variância	5,966	1,183	7,149	4,030	3,119	7,149
% Var	0,746	0,148	0,894	0,504	0,390	0,894

Das Tabelas 4.3 e 4.4 tem-se:

$FC1$: F_1 da extração por ACP Não Rotacionado;

$FC2$: F_2 da extração por ACP Não Rotacionado;

FRC1: F_1 da extração por ACP Rotação Varimax;

FRC2: F_2 da extração por ACP Rotação Varimax;

FV1: F_1 da extração por Máxima Verossimilhança Não Rotacionado;

FV2: F_2 da extração por Máxima Verossimilhança Não Rotacionado;

FRV1: F_1 da extração por Máxima Verossimilhança Rotação Varimax;

FRV2: F_2 da extração por Máxima Verossimilhança Rotação Varimax;

Na Tabela 4.4 os percentuais de explicação de cada fator são pelo método de extração Verossimilhança não rotacionado F_1 explica que 74,6% da matriz de variância-covariância F_1 é obtido de $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ e f_7 o F_2 explica 14,8% da matriz de variância-covariância, F_2 é obtido de F_8 , no método de Verossimilhança rotacionado F_1 explica 50,4% da matriz de variância-covariância, F_1 é obtido de f_1, f_2, f_3, f_4 e f_5 e F_2 explica 39% da matriz de variância-covariância, F_2 é obtido de f_6, f_7 e f_8 .

Tabela 4.5 – Matriz de fatores para os métodos de extração por ACP e Verossimilhança

ACP				Verossimilhança			
<i>FC1</i>	<i>FC2</i>	<i>FRC1</i>	<i>FRC2</i>	<i>FV1</i>	<i>FV2</i>	<i>FRV1</i>	<i>FRV2</i>
1,76	-2,07	0,00	-2,72	0,92	-2,84	-0,27	-2,97
0,97	2,44	2,32	1,23	1,46	1,67	1,99	0,96
0,19	-1,64	-0,91	-1,37	-0,15	-1,48	-0,72	-1,30
-0,12	0,85	0,46	0,72	0,38	1,08	0,78	0,85
0,27	-0,10	0,14	-0,25	-0,15	-0,77	-0,44	-0,65
0,32	1,17	1,00	0,68	0,38	1,00	0,74	0,77
-1,08	-0,47	-1,13	0,34	-1,23	-0,14	-1,18	0,36
-0,91	-0,02	-0,71	0,58	-0,69	0,49	-0,44	0,73
-0,81	-1,11	-1,34	-0,32	-1,13	-0,77	-1,34	-0,26
-0,48	0,94	0,24	1,03	-0,25	0,88	0,11	0,91
2,82	0,30	2,34	-1,60	2,81	-0,30	2,46	-1,38
0,78	-0,62	0,19	-0,98	1,06	-0,07	0,94	-0,48
-0,19	0,27	0,03	0,33	0,03	0,24	0,12	0,21
-0,19	0,27	0,03	0,33	0,03	0,24	0,12	0,21
-0,67	-0,04	-0,53	0,40	-0,69	0,15	-0,57	0,41
-0,67	-0,04	-0,53	0,40	-0,69	0,15	-0,57	0,41
-0,67	-0,04	-0,53	0,40	-0,69	0,15	-0,57	0,41
-0,67	-0,04	-0,53	0,40	-0,69	0,15	-0,57	0,41
-0,67	-0,04	-0,53	0,40	-0,69	0,15	-0,57	0,41

A Tabela 4.5, tem-se os escores para cada método de extração, o algoritmo OLS foi aplicado para obter o modelo de segunda ordem dos fatores, conforme descrito nas equações a seguir.

Para método de extração por ACP não rotacionado:

$$FC_1 = -0,648 - 0,026x_1 - 0,643x_2 - 0,315x_3 - 0,055x_1^2 + 0,861x_2^2 + 0,117x_3^2 + 0,0076x_1x_2 + 0,167x_1x_3 + 0,007x_2x_3$$

$$FC_2 = -0,040 + 0,9055x_1 - 0,3162x_2 + 0,0753x_3 - 0,0160x_1^2 - 0,0439x_2^2 + 0,1171x_3^2 - 0,356x_1x_2 - 0,659x_1x_3 - 0,050x_2x_3$$

Para método de extração por ACP rotação Varimax:

$$FCR_1 = -0,519 + 0,5672x_1 - 0,6943x_2 - 0,1912x_3 - 0,0520x_1^2 + 0,6268x_2^2 + 0,1650x_3^2 - 0,1733x_1x_2 - 0,3008x_1x_3 - 0,0265x_2x_3$$

$$FCR_2 = 0,390 + 0,706x_1 + 0,176x_2 + 0,262x_3 + 0,023x_1^2 - 0,013x_2^2 + 0,013x_3^2 - 0,320x_1x_2 - 0,610x_1x_3 - 0,043x_2x_3$$

Para método de extração por Verossimilhança não rotacionado:

$$FV_1 = -0,657 + 0,268x_1 - 0,536x_2 - 0,322x_3 - 0,105x_1^2 + 0,878x_2^2 + 0,163x_3^2 + 0,000x_1x_2 + 0,000x_1x_3 + 0,000x_2x_3$$

$$FV_2 = 0,163 + 0,911x_1 + 0,096x_2 + 0,162x_3 - 0,071x_1^2 - 0,160x_2^2 - 0,002x_3^2 - 0,385x_1x_2 - 0,584x_1x_3 - 0,080x_2x_3$$

Para método de extração por Verossimilhança rotação Varimax

$$FVR_1 = -0,540 + 0,605x_1 - 0,455x_2 - 0,232x_3 - 0,124x_1^2 + 0,744x_2^2 + 0,149x_3^2 - 0,151x_1x_2 - 0,230x_1x_3 - 0,031x_2x_3$$

$$FVR_2 = 0,408 + 0,733x_1 + 0,299x_2 + 0,275x_3 - 0,024x_1^2 - 0,493x_2^2 - 0,066x_3^2 - 0,354x_1x_2 - 0,537x_1x_3 - 0,074x_2x_3$$

Etapa 2c. A otimização de funções individuais foi realizada sequencialmente usando o algoritmo GRG, GA e GRG_R , na Tabela 4.6 tem-se os valores de mínimo encontrados para cada função. O algoritmo GRG falhou ao encontrar o ponto de mínimo global para f_5 , diferentemente do GRG_R foi capaz de encontrar os mesmos valores que o algoritmo AG, com tempo de processamento bem menor.

Tabela 4.6 – Ótimos individuais das funções de teste

Algoritmo	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8
GRG	-2,196	-3,567	8,841	-0,124	1,470	1,818	-0,241	-0,216
GA	-2,196	-3,567	8,841	-0,124	-0,136	1,818	-0,241	-0,216
GRG_R	-2,196	-3,567	8,841	-0,124	-0,136	1,813	-0,241	-0,216

Etapa 2d. A extração dos fatores foi feita apenas pela ACP e máxima verossimilhança, os alvos para cada método de extração foi definido conforme a Eq. 2.60

Tabela 4.7 – Alvos de F_1 e F_2 das funções de teste para cada método de extração

Alvo	CP	RCP	V	RV
F_1	-1,538	-0,791	-5,121	-5,957
F_2	-0,627	-1,466	6,026	5,200

Onde:

CP: Extração por ACP Não Rotacionado;

RCP: Extração por ACP Rotação Varimax;

V: Extração por Máxima Verossimilhança Não Rotacionado;

RV: Extração por Máxima Verossimilhança Rotação Varimax;

Etapa 3a. O método MMSE foi utilizado para minimizar as oito funções simultaneamente, com seus respectivos alvos expressos em termos de fatores. Assim, duas equações do MMSE foram obtidas: $MMSE_1$ e $MMSE_2$. O critério para junção dos fatores foi definido de acordo com a comunalidade Tabelas 4.3 e 4.4 e dendograma Figura 4.2 realizada através da equação $MMSE_1 = [(F_1 - \zeta_{f_1})^2 + \lambda_1]$ e $MMSE_2 = [(F_2 - \zeta_{f_2})^2 + \lambda_2]$.

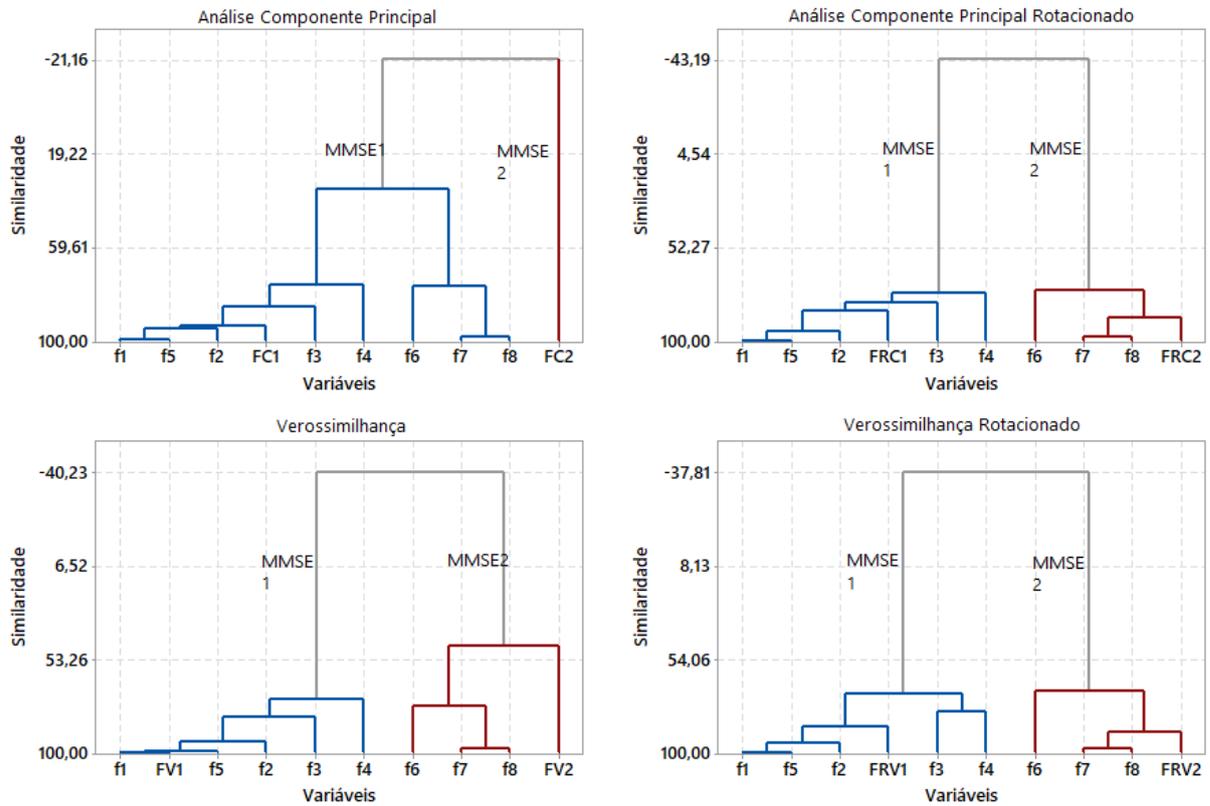


Figura 4.2 – Análise Hierárquica de Cluster para funções de Rosenbrock

Etapa 3b. Constrói a matriz Payoff Φ com as otimizações individuais das funções objetivas do MMSET's para cada método de extração obtendo os pontos de Utopia e Nadir conforme Figura 4.3. Neste ponto foi testado novamente os algoritmos GRG_R e AG, obtendo nos dois algoritmos o mesmo valor para os pontos de Utopia e Nadir.

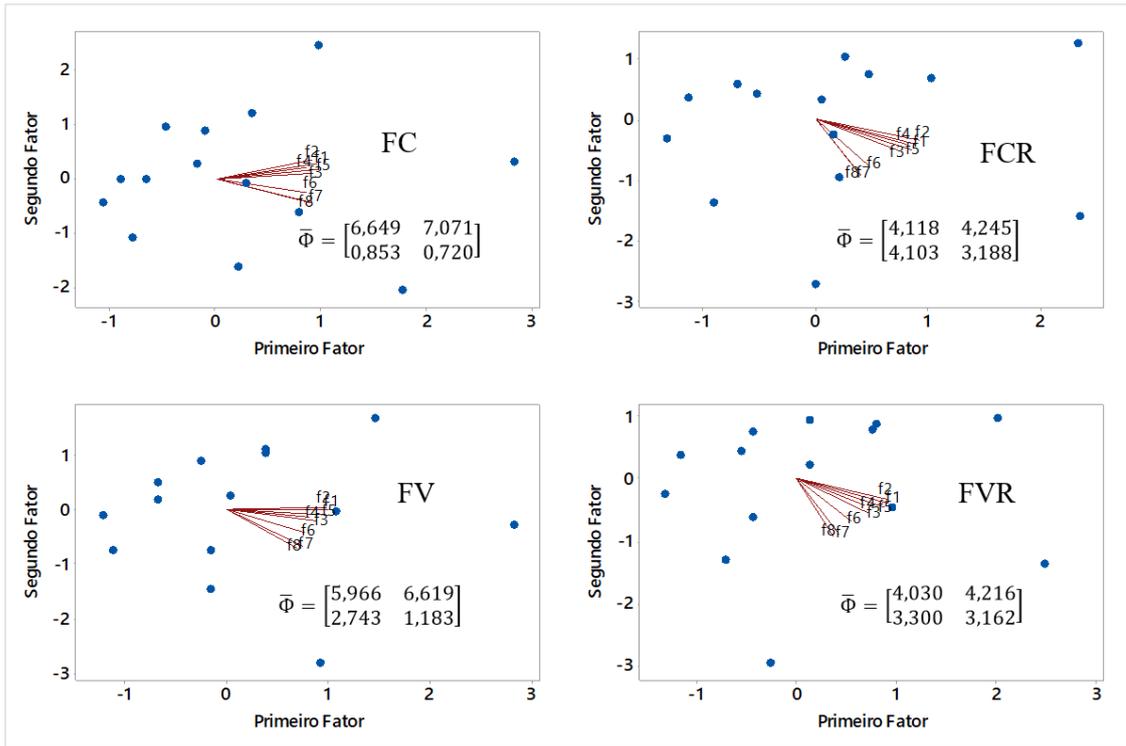


Figura 4.3 – Escores dos fatores com suas cargas fatoriais e matriz Payoff Φ

Etapa 3c. Os pesos (w) que variam de $[0:1]$ e com incrementos de 5% foram adotados para construir a fronteira de Pareto com 21 pontos ótimos, construídos pelos métodos de extração por ACP e Verossimilhança, conforme apresenta a Tabela 4.8. Assim, a abordagem MMSE-NBI gera uma fronteira convexa e equidistante de Pareto. As fronteiras foram construídas considerando o uso do algoritmo GRG e AG.

De acordo com as fronteiras comparando os métodos de extração e analisando os dois parâmetros, distância de Mahalanobis e matriz de correlação das respostas de f_1 a f_8 , utilizados para definir qual o melhor método, na Figura 4.4, tem-se as fronteiras NBI com as correlações inalteradas em relação ao conjunto original de repostas e independentemente do método de extração a rotação das cargas fez com que a distância de Mahalanobis diminuísse.

O que deve ser investigado aqui são os pontos da fronteira que não são dominados, estes pontos estão próximos ao vértice da fronteira, os pontos no vértice tende a ser sempre formados pelas coordenadas Utopia de $MMSE_1$ e $MMSE_2$, que são valores iguais aos autovalores dos fatores F_1 e F_2 , é possível manter as coordenadas de Utopia de $MMSE_1$ e $MMSE_2$ e simular outras coordenadas de Nadir para $MMSE_1$ e $MMSE_2$.

As fronteiras ficam conforme Figura. 4.5, as fronteiras ficam convexas, mas a distância de Mahalanobis evidencia uma distância bem maior entre os pontos da fronteira e os ótimos individuais de cada função e os sinais das correlações entre as respostas das funções não se mantêm.

Tabela 4.8 – Soluções Pareto ótimas para a abordagem MMSE-NBI

Peso	FC		FCR		FV		FVR	
	W	$MMSE_1$	$MMSE_2$	$MMSE_1$	$MMSE_2$	$MMSE_1$	$MMSE_2$	$MMSE_1$
0,00	8,80	0,72	5,03	3,19	10,09	1,18	5,17	3,12
0,05	8,61	0,72	4,94	3,19	9,68	1,18	5,05	3,12
0,10	8,43	0,72	4,85	3,19	9,27	1,18	4,94	3,12
0,15	8,24	0,72	4,76	3,19	8,86	1,18	4,83	3,12
0,20	8,06	0,72	4,67	3,20	8,44	1,18	4,72	3,14
0,25	7,88	0,72	4,58	3,22	8,03	1,18	4,61	3,21
0,30	7,69	0,72	4,49	3,26	7,62	1,18	4,50	3,21
0,35	7,51	0,72	4,41	3,34	7,20	1,18	4,38	3,18
0,40	7,33	0,72	4,32	3,42	6,79	1,18	4,26	3,16
0,45	7,14	0,72	4,21	3,22	6,38	1,18	4,15	3,17
0,50	6,96	0,72	4,13	3,28	6,05	1,21	4,04	3,23
0,55	6,77	0,72	4,12	4,19	5,99	1,35	4,03	4,08
0,60	6,66	0,74	4,12	5,19	5,98	1,50	4,03	5,04
0,65	6,65	0,78	4,12	6,19	5,97	1,65	4,03	6,00
0,70	6,65	0,82	4,12	7,20	5,97	1,81	4,03	6,96
0,75	6,65	0,87	4,12	8,20	5,97	1,96	4,03	7,92
0,80	6,65	0,91	4,12	9,20	5,97	2,12	4,03	8,87
0,85	6,65	0,96	4,12	10,20	5,97	2,28	4,03	9,83
0,90	6,65	1,00	4,12	11,20	5,97	2,43	4,03	10,79
0,95	6,65	1,05	4,12	12,21	5,97	2,59	4,03	11,75
1,00	6,66	1,09	4,12	13,21	5,97	2,74	4,03	12,71

Etapa 4. Manter os sinais de correlação entre as respostas é um importante indicio de que as respostas para cada função em cada ponto da fronteira condizem com as respostas originais definidas pelo CCD.

Como são funções criadas de forma aleatórias, não se conhece ao certo quais respostas poderiam ser alteradas de forma a não trazer mudanças nos resultados otimizados, assim investigar os pontos da fronteira NBI que são dominados ou não, se torna muito subjetivo, este tipo de análise para validar o método é feito no exemplo real em um processo de torneamento.

O mesmo procedimento foi realizado para construção das fronteiras foi utilizado considerando o algoritmo GA, conforme Figura 4.6, O algoritmo GA não é adequado para construção da fronteira NBI, uma vez que desrespeita as restrições e os pontos de ancoragem da fronteira, o algoritmo GA prioriza o encontro do ponto mínimo ou máximo global, tornando as fronteiras não convexas com pontos não equidistantes. Desta forma não foi considerado para o algoritmo GA o cálculo da distância de Mahalanobis e matriz de correlação das respostas para as funções geradas pela fronteira NBI.

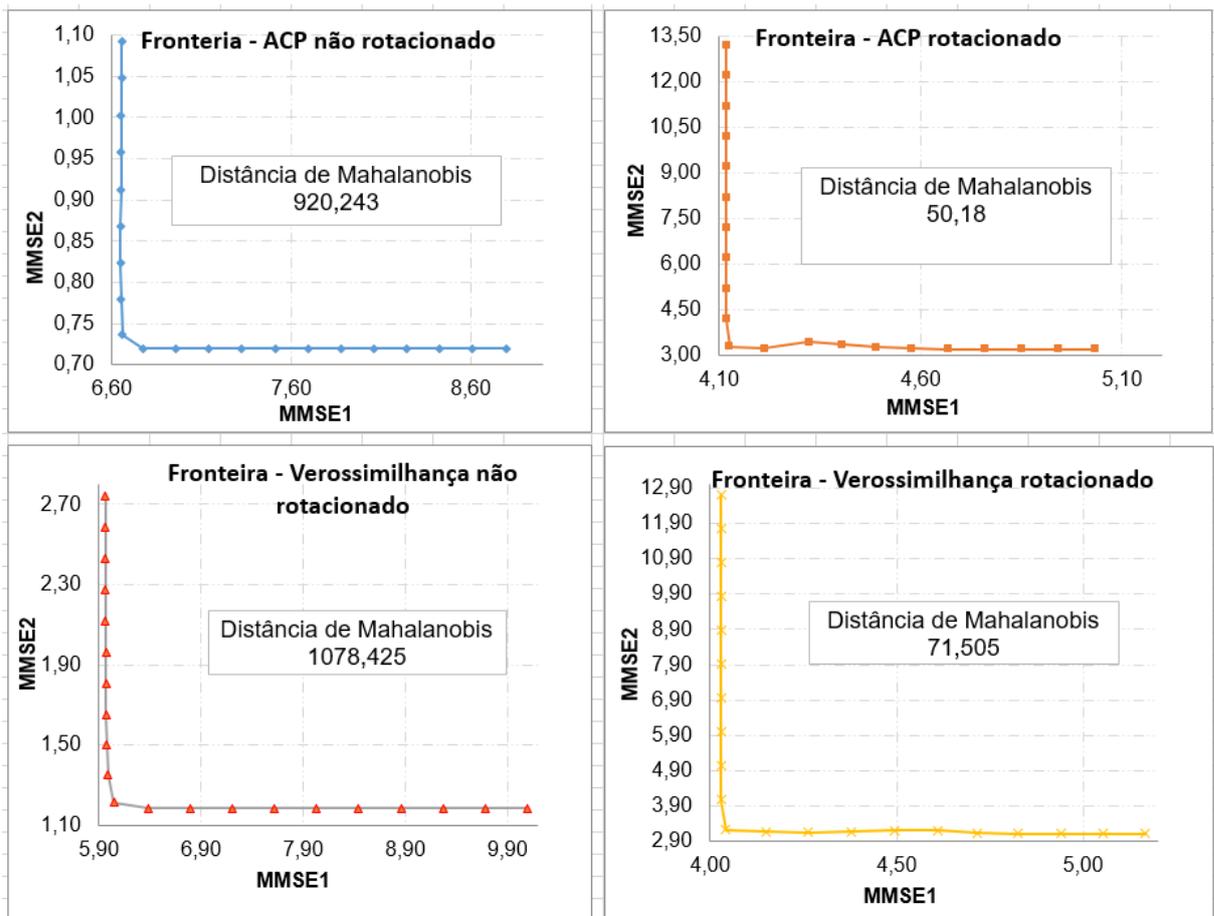


Figura 4.4 – Frontera de Pareto para as Funções de Teste com algoritmo GRG

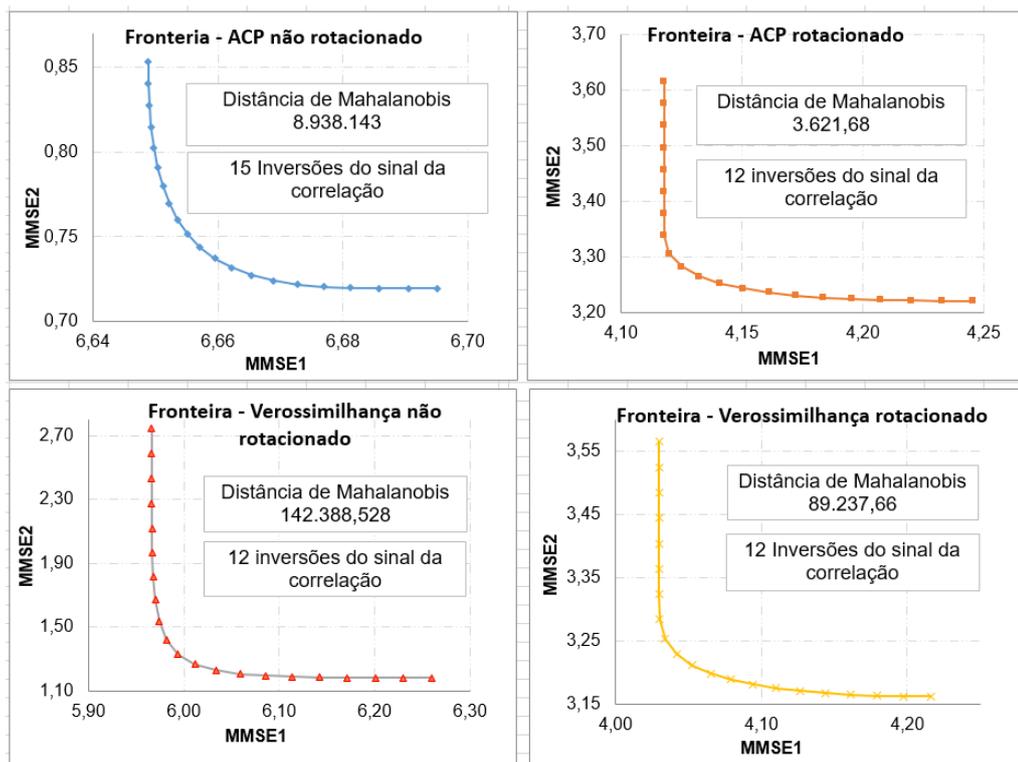


Figura 4.5 – Frontera de Pareto para as Funções de Teste com algoritmo GRG

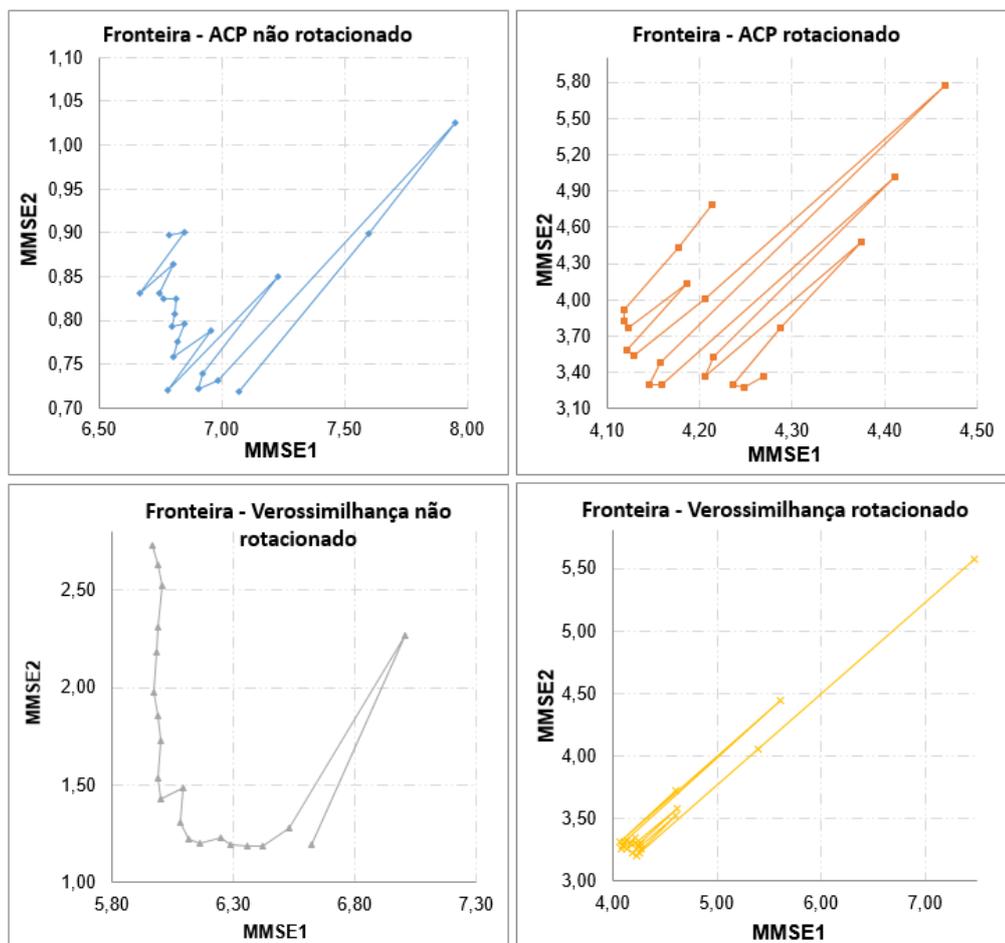


Figura 4.6 – Fronteira de Pareto para as Funções de Teste com algoritmo GA

4.2 Aplicação do método MMSE-NBI em um processo de torneamento

Para validar o método proposto, foi realizada uma aplicação de torneamento em um aço temperado. A peça de aço endurecido ABNT H13 usada neste estudo tem dureza de 54 HRC e inserções mistas de cerâmica. A ferramenta foi fabricada pela Sandvik (classe Sandvik CC6050). Tabela 4.9 mostra a composição química da amostra de teste, de acordo com a descrição do fabricante.

De acordo com as características do processo, uma Metodologia de Superfície de Resposta (MSR) foi aplicada; e de acordo com (GAUDÊNCIO *et al.*, 2019), ele busca discernir respostas que são influenciadas por algumas variáveis para otimizar os resultados. O MSR é uma coleção de técnicas matemáticas e estatísticas aplicadas para modelar e analisar problemas cujo resultado desejado é influenciado por muitos fatores (MONTGOMERY, 2008). Ainda de acordo com o mesmo autor, tal abordagem foi seguida no planejamento de experimentos, na coleta dos dados e na modelagem das respostas de interesse.

Tabela 4.9 – Composição química da amostra de teste

Elementos	%
C	0.37-0.45
Si	0.80-1.20
Mn	0.20-0.50
Cr	5.50-5.50
Mo	1.20-1.75
V	0.80-1.20

O CCD foi usado para determinar as funções objetivas para as respostas originais criadas para três parâmetros em dois níveis ($2^k = 2^3 = 8$), seis pontos axiais ($2 * k = 6$) e cinco pontos centrais. Isso resultou em 19 experimentos, os níveis dos parâmetros foram fixados, como mostrado na Tabela 4.10

Tabela 4.10 – Parâmetros do processo de torneamento

Parâmetros	Unit	Notação	Níveis		
			-1	0	1
Velocidade do corte	mm/min	Vc	100.00	162.50	225.00
Taxa de avanço	mm	f	0.10	0.16	0.22
Profundidade do corte	mm	ap	0.15	0.24	0.33

Fonte: (CAMPOS, 2015)

Os objetivos das respostas originais são: custo de usinagem específico (Kp), tempo total de usinagem (Tt), vida da ferramenta (T), volume de remoção de material (MRR), força de usinagem (Fr), rugosidade média (Ra) rugosidade total (Rt) e Energia Específica de corte ($EEC = MRR/F$).

Os experimentos foram realizados em um Centro de Torneamento MHC Kingsbury, na Universidade de Aveiro. Os principais dados da máquina-ferramenta são: motor de fuso com 18 kW de potência, faixa de rotação entre 4 e 4500 rpm, torre de ferramentas com 12 posições, diâmetro da placa de 200 mm. A placa possui acionamento hidráulico com pressão máxima de 23 kgf / cm^2 , seção externa do porta-ferramenta 20 x 20 mm e controle numérico GE Fanuc, um contraponto de 70 mm de diâmetro também acionado por ação hidráulica. Os cursos nos eixos X e Z são, respectivamente, 200 mm e 550 mm.

Os testes foram realizados com ferramentas e porta-ferramentas fornecidos pela Sandvik. Os valores dos parâmetros de rugosidade de acordo com a norma ISO 4287/1 foram obtidos através do rugosimêtro de agulha Hommeltester-T 1000. Esta ferramenta foi montada em um suporte de giro externo (código ISO DCLNL - 2020K - 12)

De acordo com as respostas das variáveis, a AF foi realizada para analisar a estrutura das correlações entre as variáveis. As respostas foram modeladas a partir dos dados da matriz experimental tabela 4.11. Os modelos quadráticos completos foram construídos para comparar as médias dos pontos centrais e dos três fatores em dois níveis (2^3), das respostas estudadas.

Tabela 4.11 – Matriz Experimental com a ferramenta CC 6050

#	Parâmetros de corte			Respostas originais							
	V_c	f	a_p	T	Tt	K_p	Ra	Rt	MRR	Fr	ECC
1	100.00	0.10	0.15	57.00	2.32	2.47	0.62	3.00	1.50	339.39	4.42
2	225.00	0.10	0.15	29.50	1.42	1.53	0.64	3.00	3.38	235.38	14.36
3	100.00	0.23	0.15	48.25	1.47	1.93	0.98	7.26	3.38	430.77	7.84
4	225.00	0.23	0.15	26.50	1.04	1.26	1.09	7.42	7.59	239.77	31.65
5	100.00	0.10	0.33	58.50	2.40	3.02	0.65	3.02	3.30	449.38	7.34
6	225.00	0.10	0.33	26.00	1.45	1.77	0.72	2.84	7.43	242.35	30.65
7	100.00	0.23	0.33	49.00	1.53	2.34	1.33	6.78	7.43	452.35	16.42
8	225.00	0.23	0.33	26.50	1.02	1.13	1.39	8.28	16.71	244.86	68.24
9	57.39	0.16	0.24	56.00	2.52	3.19	1.12	4.86	2.24	486.44	4.60
10	267.61	0.16	0.24	22.50	1.07	1.18	1.97	7.25	10.44	221.24	47.18
11	162.50	0.06	0.24	37.00	2.46	2.76	0.32	2.18	2.24	320.87	6.98
12	162.50	0.27	0.24	38.25	1.11	1.44	1.35	7.44	10.44	355.38	29.37
13	162.50	0.16	0.09	50.00	1.32	1.45	0.87	4.56	2.34	331.38	7.06
14	162.50	0.16	0.39	46.00	1.38	1.87	0.95	4.16	10.33	357.55	28.89
15	162.50	0.16	0.24	42.00	1.38	1.88	1.14	7.43	6.34	340.39	18.62
16	162.50	0.16	0.24	41.50	1.37	1.86	1.13	7.44	6.34	333.28	19.02
17	162.50	0.16	0.24	42.50	1.38	1.90	1.12	7.45	6.34	336.30	18.85
18	162.50	0.16	0.24	41.00	1.37	1.86	1.14	7.44	6.34	335.38	18.90
19	162.50	0.16	0.24	42.25	1.38	1.84	1.13	7.46	6.34	332.28	19.08

T (min), Tt (min), K_p (U\$), Ra (mm), Rt (mm), MRR (cm^3/min), Fr (N), ECC ($cm^3/N.minx$) 10^{-3} .

O modelo de superfície de resposta de segunda ordem é usado para representar a correlação entre uma resposta ($T, Tt, K_p, Ra, Rt, MRR, Fr$ e EEC) das variáveis de entrada (V_c, f e a_p) descritas pela equação 4.1.

$$y(x) = \beta_0 + \beta_1 V_c + \beta_2 a_p + \beta_3 f + \beta_{11} V_c^2 + \beta_{22} a_p^2 + \beta_{33} f^2 + \beta_{12} V_c a_p + \beta_{13} V_c f + \beta_{23} a_p f + \epsilon \quad (4.1)$$

Onde $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ e β_4 são os coeficientes estimados.

A resposta para $MMR(cm^3/min)$ em um processo de torneamento pode ser cal-

Tabela 4.12 – Correlação entre as respostas com os valores de p-value

	T	Tt	Kp	Ra	Rt	MRR	Fr
Tt	0,640 0,003						
Kp	0,733 0,000	0,943 0,000					
Ra	-0,104 0,681	-0,617 0,006	-0,416 0,086				
Rt	-0,243 0,317	-0,676 0,001	-0,514 0,024	0,893 0,000			
MRR	-0,590 0,008	-0,692 0,001	-0,634 0,004	0,652 0,003	0,561 0,012		
Fr	0,874 0,000	0,562 0,012	0,751 0,000	0,135 0,592	-0,051 0,837	-0,418 0,075	
EEC	-0,738 0,000	-0,671 0,002	-0,697 0,001	0,518 0,028	0,475 0,040	0,948 0,000	-0,615 0,005

culada como na Eq. 4.2 (WANG; HSU, 2005).

$$MRR_i = \frac{V_{fi} \times V_{pi} \times V_{ei}}{1,000} = \frac{f_z \times N \times Z \times a_p \times a_e}{1,000} \quad (4.2)$$

A partir das dos valores de cada resposta foi calculado as correlações entre as respostas conforme tabela 4.12, as correlações entre as respostas são positivas e negativas, fortes e fracas, com e sem conflitos de objetivos, com o modelo quadrático apresentados na tabela 4.13, defini-se os ótimos individuais de cada resposta, conforme a tabela 4.20, os ótimos individuais são utilizados para definir os alvos para cada fator.

Tabela 4.13 – Modelo quadrático para as respostas originais com a ferramenta CC 6050

Coefficientes	T	Tt	Kp	Ra	Rt	MRR	Fr	ECC*
Constante	41.91	1.38	1.87	1.13	7.43	6.34	336.17	18.82
Vc	-11.76	-0.38	-0.55	0.03	0.40	2.44	-84.61	13.22
f	-1.37	-0.35	-0.32	0.29	1.96	2.44	11.66	7.69
ap	-0.58	0.02	0.13	0.07	-0.03	2.38	13.74	7.40
Vc*Vc	-1.23	0.13	0.10	0.00	-0.43	0.00	2.89	2.86
f*f	-1.80	0.13	0.07	-0.11	-0.87	0.00	-2.66	0.14
ap*ap	1.86	-0.03	-0.08	-0.08	-1.03	0.00	-0.42	0.07
Vc*f	1.97	0.11	0.04	0.01	0.23	0.94	-10.93	5.30
Vc*ap	-0.72	-0.01	-0.11	0.00	0.15	0.92	-14.94	5.17
f*ap	-0.34	-0.01	-0.06	0.07	0.07	0.92	-11.29	3.25
<i>Adj.R²%</i>	93.11	96.93	96.78	96.21	92.54	99.24	95.29	97.46

*ECCx10⁻³

Em um primeiro momento foi considerado apenas a análise fatorial com extração dos fatores pelo método ACP, sem rotação sem restrição de Khuri, sem algoritmo AG e GRG_R , sem elipse de confiança, ao plotar a fronteira de $MMSET_1$ com $MMMET_2$, mesmo já definido os pontos de ancoragem alguns pontos da Fronteira ficaram descontínuos tornando os resultados não confiáveis Figura 4.7

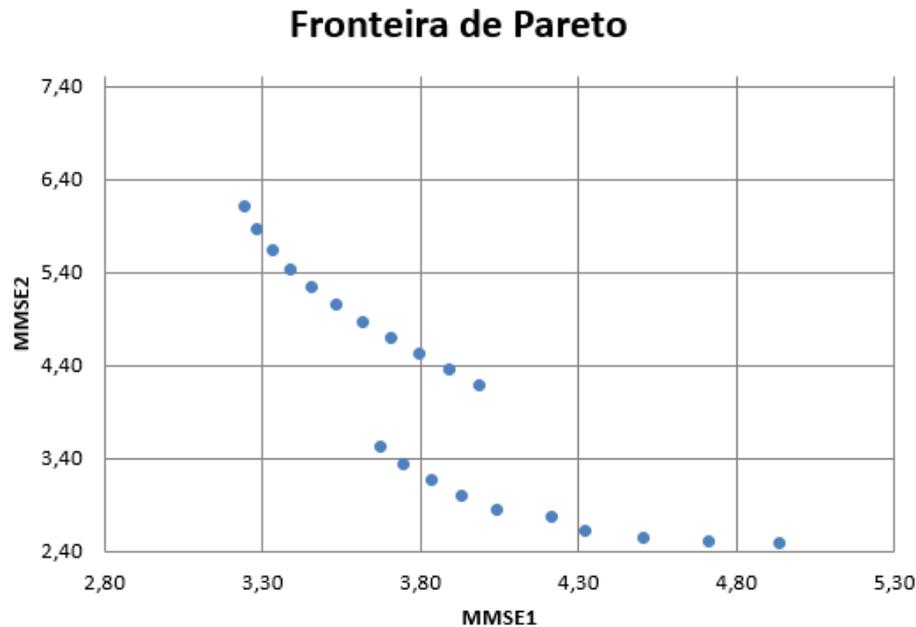


Figura 4.7 – Fronteiras com pontos descontínuos

Uma maneira de resolver este problema foi criar várias combinações de pontos de partida na execução do algoritmo GRG Não Linear para encontrar os melhores pontos de ancoragem para $MMSET_1$ e $MMSET_2$, este procedimento foi realizado com a execução de rotinas implementadas no ambiente VBA do Excel, a Figura 4.8 traz parte da rotina utilizada para encontrar o menor valor de $MMSET_1$ e $MMSET_2$ de forma a garantir construção de fronteiras mantendo os pontos equidistantes e sem descontinuidade. O algoritmo GRG com rotinas de inicialização ficou definido como GRG_R neste trabalho.

Após implementação das rotinas, com o uso do algoritmo GRG construiu a Fronteira de Pareto conforme Figura 4.30.

Uma forma de verificar se os pontos da fronteira atendem os limites de valores aceitáveis para as oito respostas do processo de torneamento, é plotar a fronteira da Figura 4.30 em um gráfico de contorno para múltiplas respostas.

Gráfico de contornos sobrepostos servem para identificar visualmente uma área em que as médias previstas de uma ou mais variáveis de resposta encontram-se em uma faixa aceitável. As aplicações que envolvem múltiplas respostas apresentam um desafio diferente dos estudos de resposta individuais. Os valores de variáveis ótimos para uma resposta podem estar longe de serem ótimos para outra resposta. Os gráficos de contorno

```

For linha = 4 To 30 Step 1
SolverOk SetCell:="$E$18", MaxMinVal:=2, ValueOf:=0, ByChange:="$S$6:$S$8", _
Engine:=1, EngineDesc:="GRG Nonlinear"

Plan10.Cells(6, 19).Value = Plan10.Cells(linha, 22).Value
Plan10.Cells(7, 19).Value = Plan10.Cells(linha, 23).Value
Plan10.Cells(8, 19).Value = Plan10.Cells(linha, 24).Value

SolverSolve True

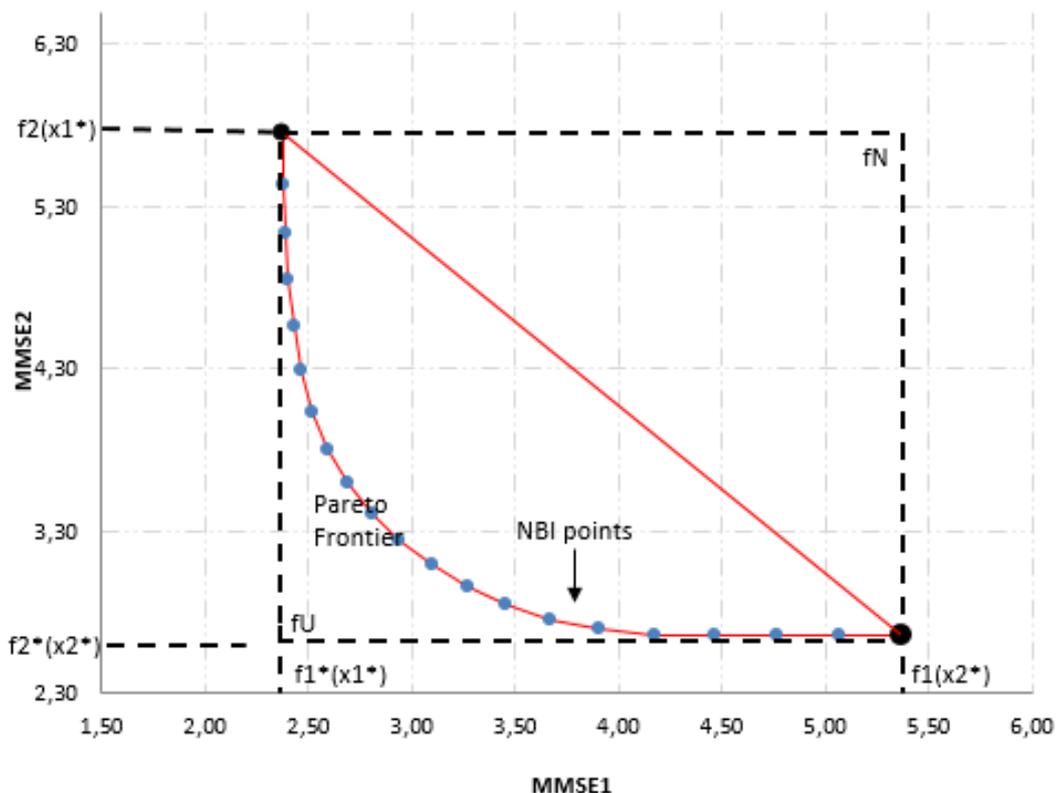
Plan10.Cells(linha, 25).Value = Plan10.Cells(18, 3).Value
Plan10.Cells(linha, 26).Value = Plan10.Cells(18, 5).Value
Plan10.Cells(linha, 27).Value = Plan10.Cells(44, 10).Value

Plan10.Cells(linha, X).Value = Plan10.Cells(18, 3).Value
Plan10.Cells(linha, X + 1).Value = Plan10.Cells(18, 5).Value
Plan10.Cells(linha, X + 2).Value = Plan10.Cells(44, 10).Value

Next|
Range("Y4:AA7").Select
Range(Selection, Selection.End(xlDown)).Select
Selection.Copy
ActiveWindow.SmallScroll Down:=-27
Range("AB4:AD30").Select
Range(Selection, Selection.End(xlDown)).Select
ActiveWindow.SmallScroll Down:=-30
Selection.PasteSpecial Paste:=xlPasteValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks _
:=False, Transpose:=False
ActiveWindow.SmallScroll Down:=-12
Application.CutCopyMode = False
ActiveWorkbook.Worksheets("Mistura").Sort.SortFields.Clear
ActiveWorkbook.Worksheets("Mistura").Sort.SortFields.Add Key:=Range( _
"AC4:AC30"), SortOn:=xlSortOnValues, Order:=xlAscending, DataOption:= _

```

Figura 4.8 – Algoritmo para corrigir ponto de partida

Figura 4.9 – $MMSE_1 \times MMSE_2$ com rotinas de inicialização do GRG

sobrepostos permitem identificar visualmente uma área de compromisso entre as várias respostas.

Para identificar visualmente uma área onde todas as respostas estão em uma amplitude desejável considerando a combinação dos três parâmetros velocidade de corte (Vc), avanço (f) e profundidade de corte (Ap), a área branca em destaque nas figuras 4.10, 4.11 e 4.12 evidenciam haver regiões que para quaisquer ajustes dos três parâmetros Vc , f e Ap devem produzir um resultado com respostas médias aceitáveis para as oito respostas e onde são possíveis otimizações no processo de torneamento.

Nas Figuras 4.10, 4.11 e 4.12, as linhas contínuas representam o limite inferior e as linhas pontilhadas o limite superior de cada variável, definidas conforme resultados do CCD, as fronteiras, resultados das otimizações pelo método MMSE-NBI foram construídas, considerado para cada par de parâmetros, sempre com o terceiro definido no ponto central.

A Figura 4.10, refere-se aos parâmetros profundidade do corte por taxa de alimentação com velocidade de corte de 200mm/min, na Figura 4.11, tem-se os parâmetros de profundidade do corte por velocidade de corte com taxa de alimentação de 0.1625 mm e a Figura 4.12, é referente a velocidade do corte por taxa de alimentação com profundidade do corte de 0.24 mm. Em todos os casos a fronteira permaneceu dentro da região de possíveis soluções. O ponto vermelho (peso $w = 0,5$) em destaque nas fronteiras, dentro da região de possíveis soluções, são para analisar se os valores de $MMSE_1$ e $MMSE_2$ estão coerentes em relação a fronteira original, Figura 4.30.

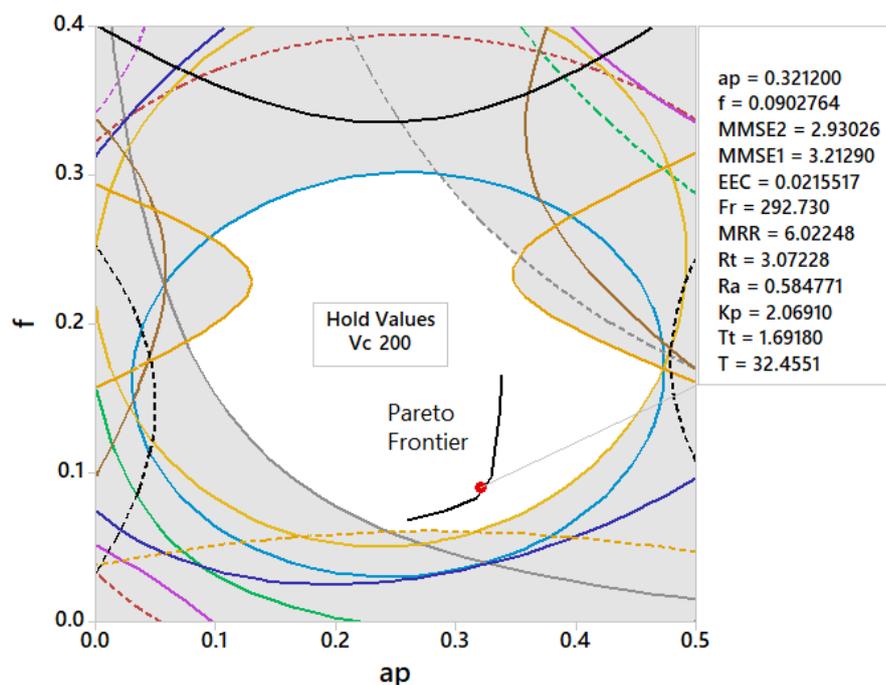


Figura 4.10 – Gráfico de contorno sobreposto para as oito respostas com os resultados de $MMSE_1$ com $MMSE_2$ e variação de f e ap

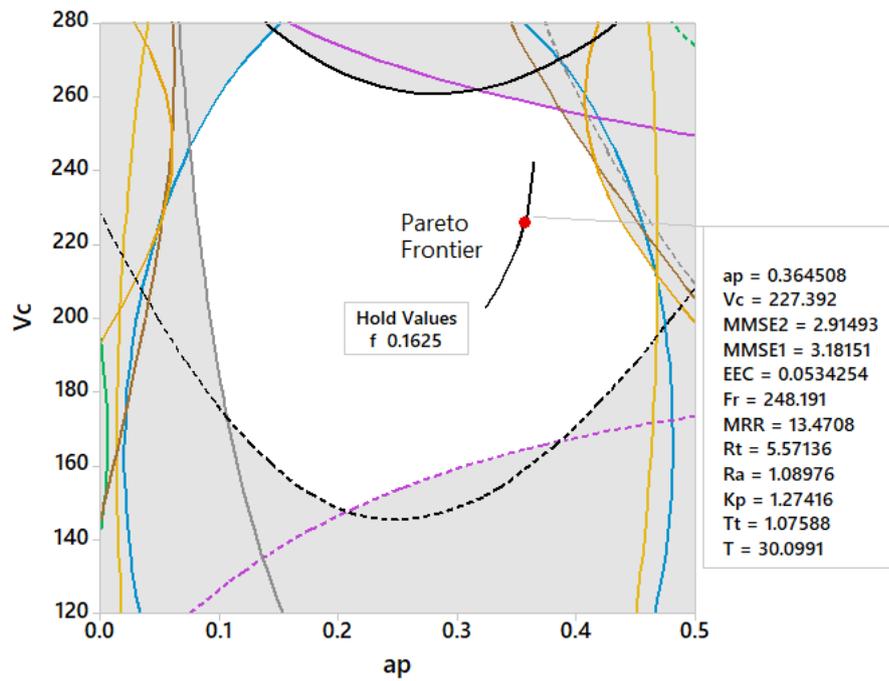


Figura 4.11 – Gráfico de contorno sobreposto para as oito respostas com os resultados de $MMSE_1$ com $MMSE_2$ e variação de V_c e ap

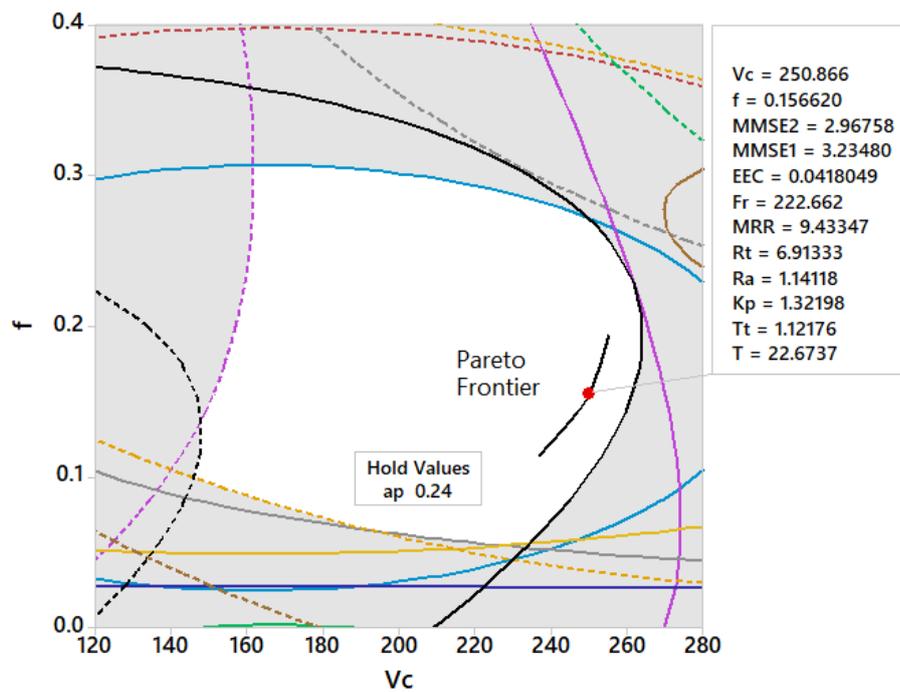


Figura 4.12 – Gráfico de contorno sobreposto para as oito respostas com os resultados de $MMSE_1$ com $MMSE_2$ e variação de f e V_c

Depois de encontrar uma região que atende os níveis definidos para cada resposta, fronteira foi plotada dentro da elipse de confiança de Bonferroni para os dados experimentais conforme Figura 4.13. Alguns pontos da fronteira caíram fora do intervalo de confiança dos dados para $MMSE_1$ com $MMSE_2$.

O método de extração dos fatores utilizado para construção da fronteira referente a Figura 4.13 pela ACP sem rotação, como a Fronteira tende a dominar todos os pontos, parte dela ficou fora do elipse de confiança de Bonferroni, os pontos vermelhos são os valores de $MMSE_1$ e $MMSE_2$ dos fatores referente aos dados experimentais, a elipse azul é o intervalo de confiança de Bonferroni para o vetor dos dados experimentais, a elipse vermelha é o vetor das médias dos dados experimentais e a fronteira são os valores de $MMSE_1$ e $MMSE_2$ depois da otimização.

Uma possível justificativa é que quando minimiza os pontos Utopia de $MMSE_1$ e $MMSE_2$ para definição dos pontos de ancoragem da fronteira, não tem nenhuma restrição para o ponto de Nadir de $MMSE_1$ e $MMSE_2$.

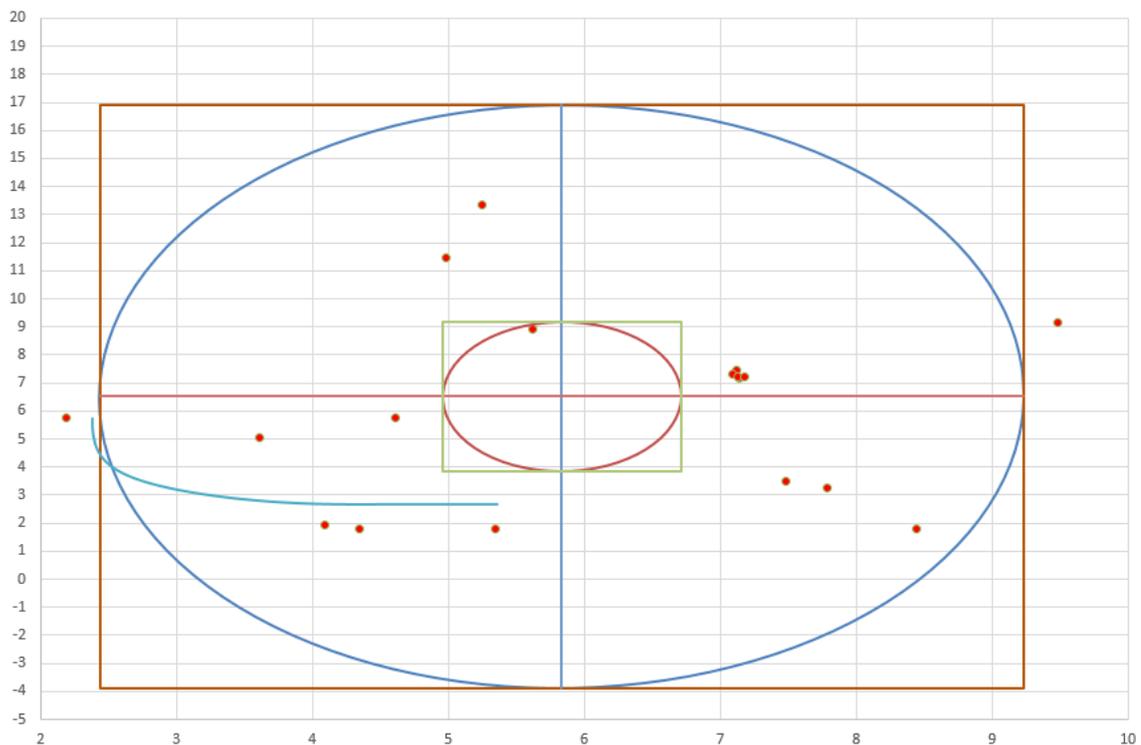


Figura 4.13 – Elipse de confiança de Bonferroni com a Fronteira $MMSE_1 \times MMSE_2$

Com o intuito de entender melhor o comportamento das respostas nas fronteiras, foi então realizado o método MMSE-NBI para otimizações das respostas individuais. Na construção da fronteira foi considerado duas respostas em cada otimização, o procedimento foi repetido para as oito respostas, dando um total de 28 combinações de otimizações individuais possíveis, foram feitas várias fronteiras, primeiro para as respostas originais com restrição apenas da região esférica onde $X^T X \leq \rho$, depois considerando restrição

de Khuri para as otimizações individuais das respostas originais, por fim os mesmos procedimentos anteriores com os fatores das respostas originais, a restrição de khuri é adicionada no momento em que são definidos os pontos de ancoragem para as otimizações individuais.

O critério para avaliar se a fronteira construída para os ótimos individuais faz parte da região de possíveis soluções considerando todas as respostas, é a estrutura de correlação, caso a estrutura de correlação das respostas individuais definidas pelos pontos da fronteira se mantiverem em relação a estrutura de correlações das respostas originais, Como exemplo a Figura 4.14 mostra as respostas vida da ferramenta (T) e taxa de remoção (MRR).

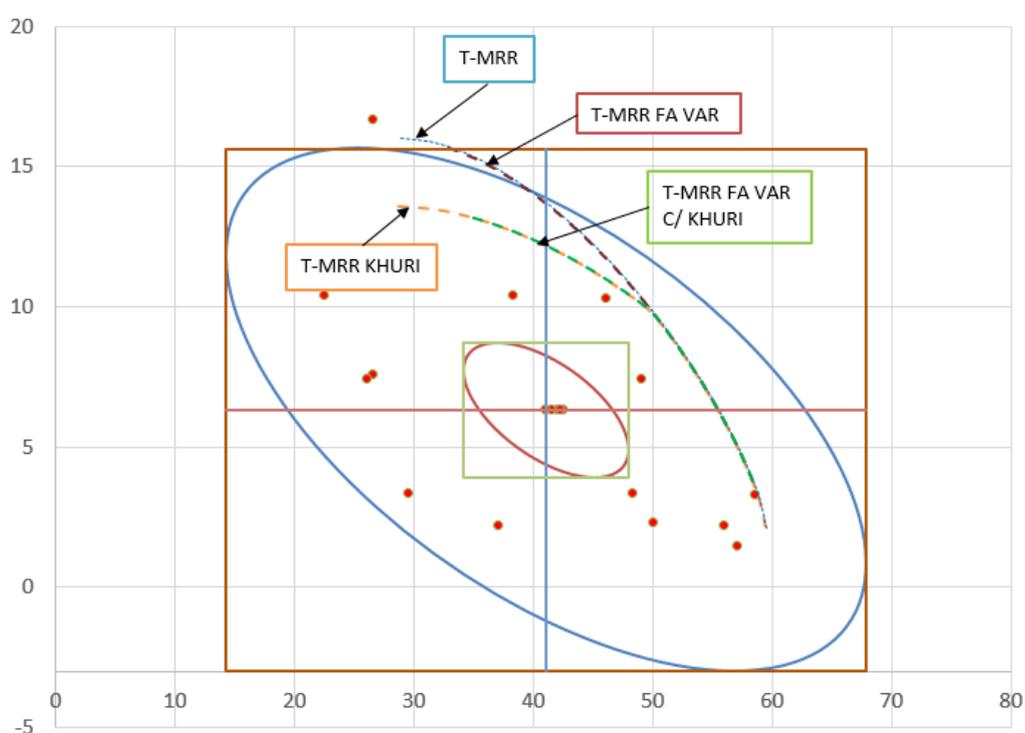


Figura 4.14 – Análise das fronteiras khuri para T x MRR

A fronteira para respostas individuais possui pontos fora da elipse de confiança, (azul) assim como a fronteira para os fatores de T e MRR (vermelho), depois de adicionar a restrição de Khuri, tanto a fronteira para valores individuais (laranja) quanto a fronteira dos fatores (verde), todos os pontos da fronteira ficaram dentro do intervalo de confiança da elipse, tornando todos os pontos factíveis. Os pontos vermelhos são os valores de T e MRR experimentais, o mesmo foi feito para todas as combinações conforme Figura 4.15, 4.16, 4.17, 4.18 e 4.19.

Nos casos em que os sinais das correlações entre as respostas dos pontos das fronteiras para, otimização individual, otimização individual com restrição de Khuri e otimização pelo fator com restrição de Khuri, se mantiveram em relação ao conjunto de respostas experimentais e ficaram na mesma região de otimização.

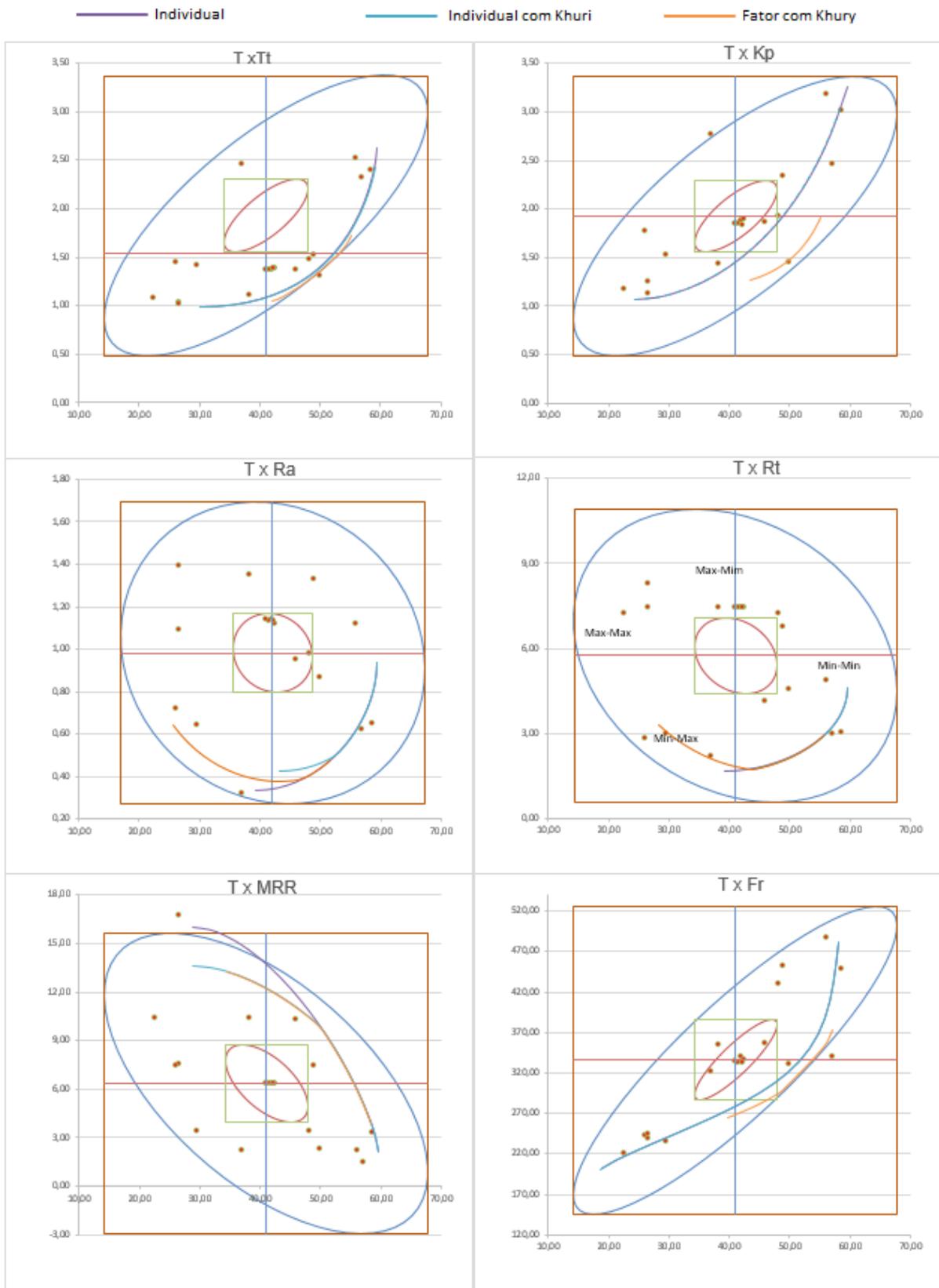


Figura 4.15 – Fronteiras com restrição de khuri para respostas TxMRR, TxKp, TxRa, TxRt, TxMRR e TxFr

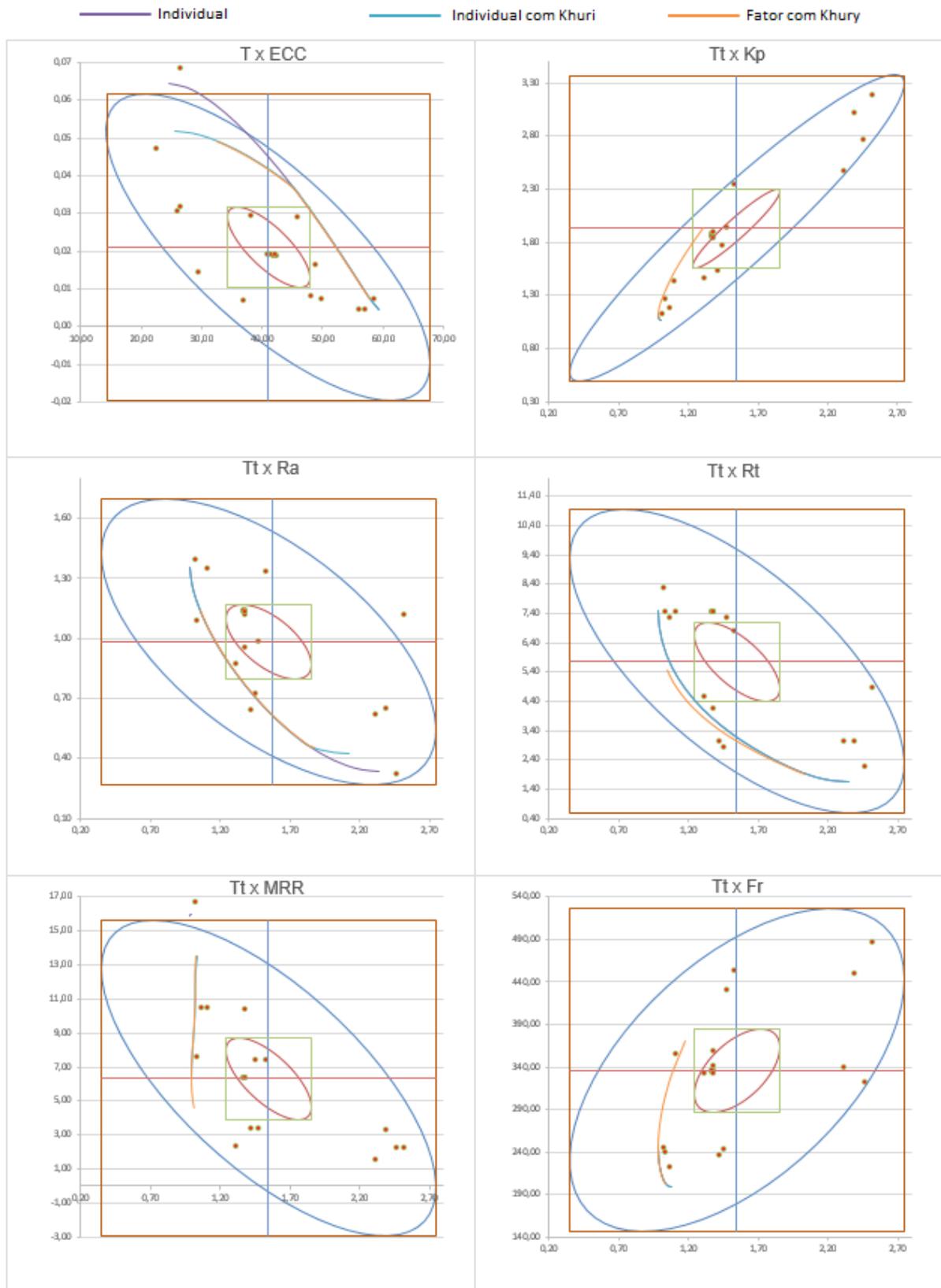


Figura 4.16 – Fronteiras com restrição de khuri para respostas TxECC, TtxKp, TtxRa, TtxRt, TtxMRR e TtxFr

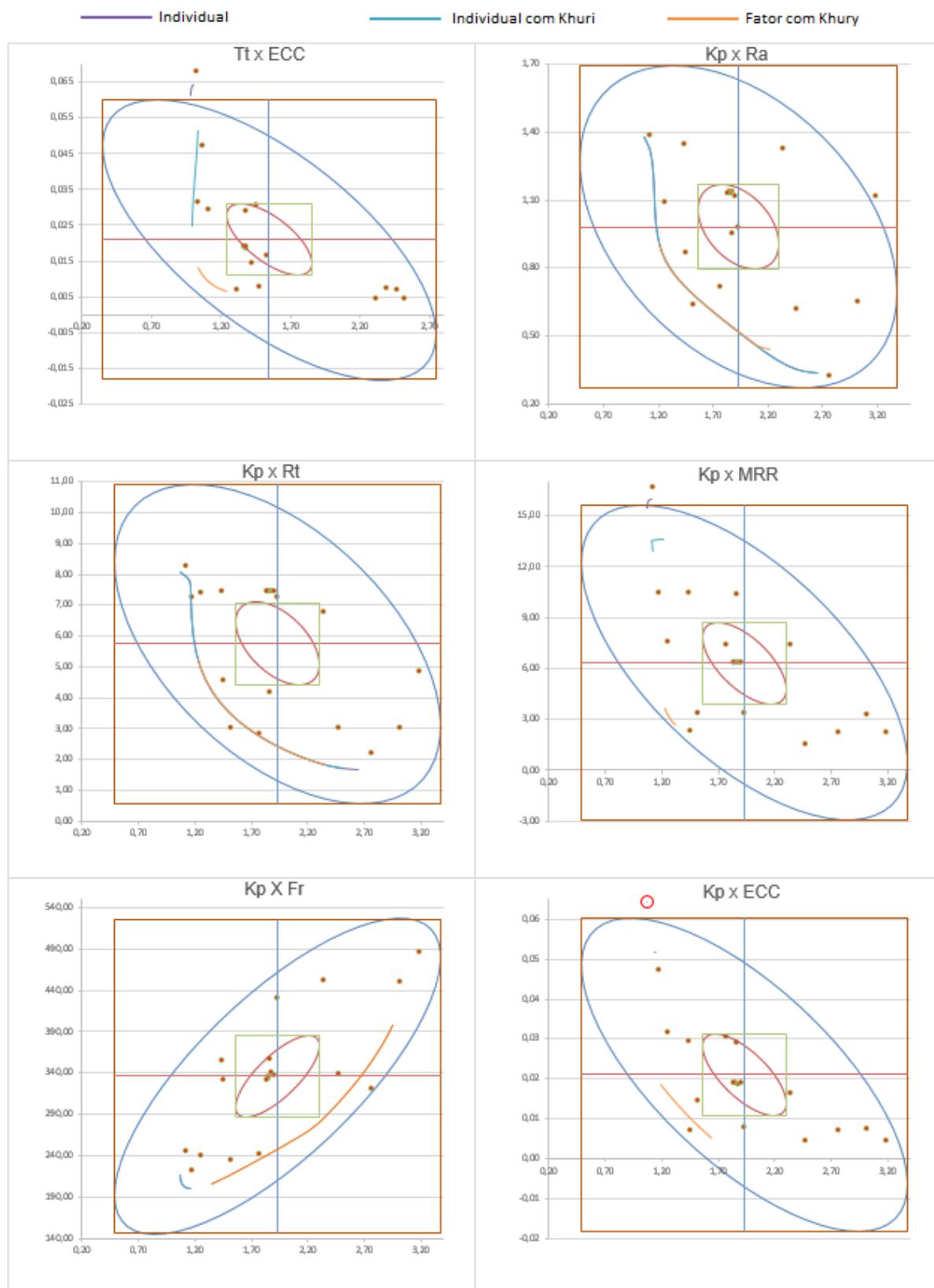


Figura 4.17 – Fronteiras com restrição de khuri para respostas TtxECC, KpxRa, KpxRt, KpxMRR, KpxFr e KpxECC

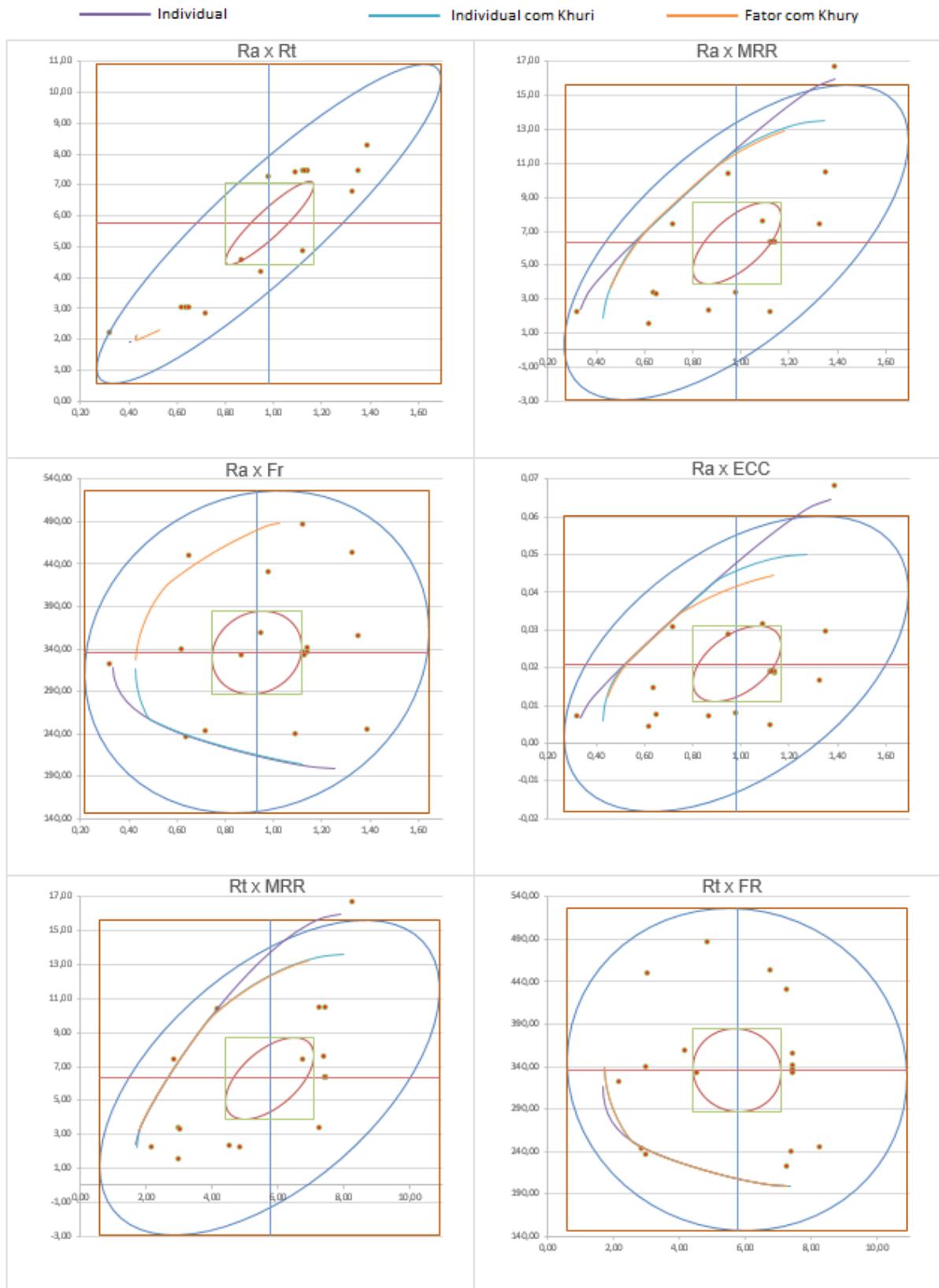


Figura 4.18 – Fronteiras com restrição de khuri para respostas RaxRt, RaxMRR, RaxFr, RaxECC, RtxMRR e RtxFr

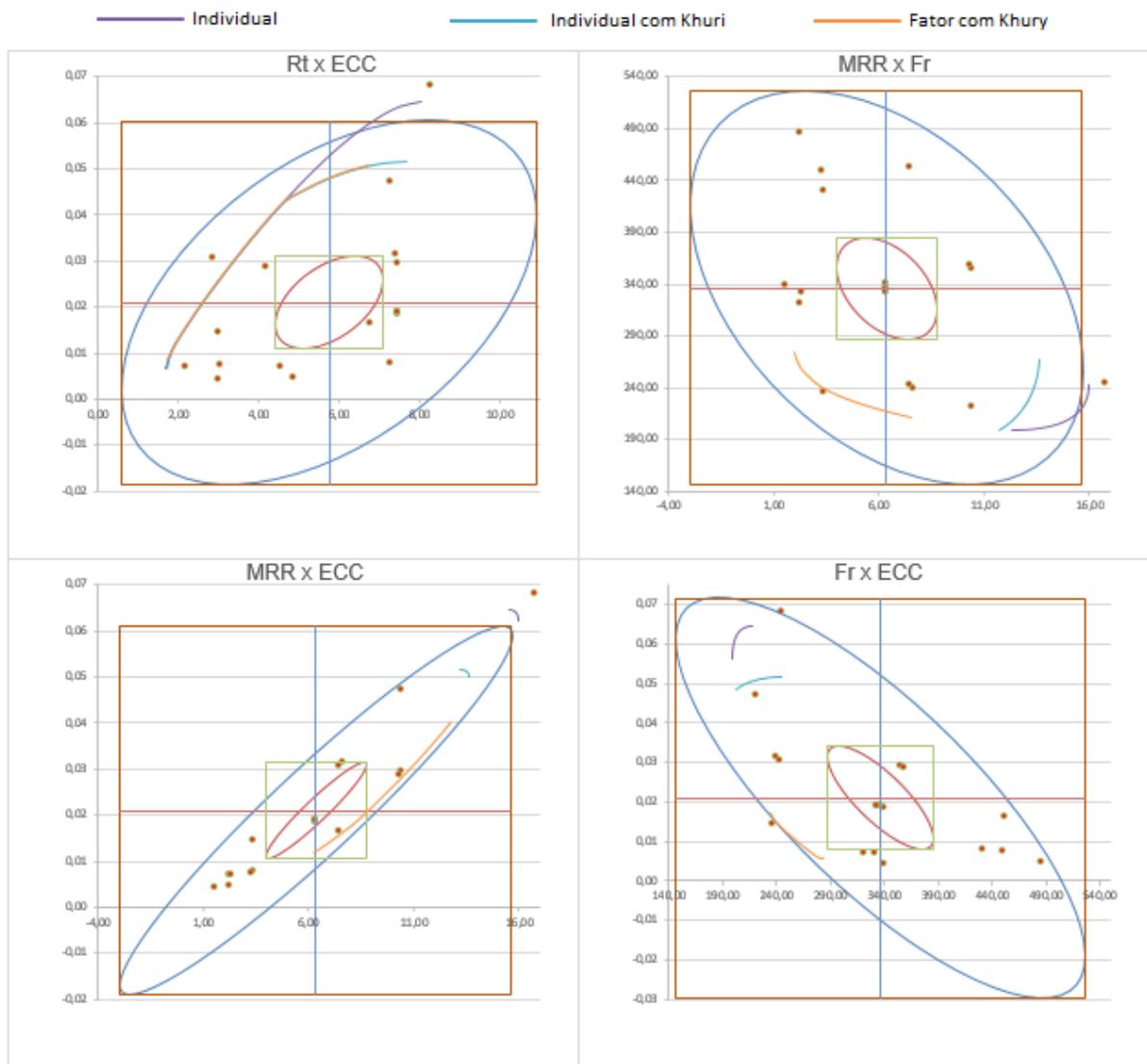


Figura 4.19 – Fronteiras com restrição de khuri para respostas $R_t \times ECC$, $MRR \times Fr$, $MRR \times ECC$ e $Fr \times ECC$

Caso 1 - Correlação entre as respostas é positiva, com objetivos diferentes: $T \times T_t$, $T \times K_p$, $T \times Fr$, $R_a \times MRR$, $R_a \times ECC$, $R_t \times MRR$ e $R_t \times ECC$;

Caso 2 - Correlação entre as respostas é negativa, com objetivos de maximizar: $T \times MRR$ e $T \times ECC$;

Caso 3 - Correlação entre as respostas é negativa, com objetivos de minimizar, sendo: $T_t \times R_a$, $T_t \times R_t$, $K_p \times R_a$, $K_p \times R_t$ e $R_t \times Fr$;

Caso 4 - Correlação entre as respostas é positiva, com objetivos de minimizar: $R_a \times R_t$.

Todos estes casos as fronteiras são semelhantes, em alguns deles sem a restrição de Khuri pontos das fronteiras ficaram fora da elipse de confiança.

Nos casos em que os sinais das correlações entre as respostas dos pontos das fronteiras para a otimização individual, otimização individual com restrição de Khuri inverteram em relação ao conjunto de respostas experimentais.

Caso 5 - Correlação entre as respostas é negativa, com objetivos diferentes: $T \times Ra$, $T \times Rt$, $Tt \times MRR$, $Tt \times ECC$, $Kp \times MRR$, $Kp \times ECC$, $MRR \times FR$ e $Fr \times ECC$;

Caso 6 - Correlação entre as respostas é positiva com objetivos de minimizar: $Tt \times Kp$, $Tt \times Fr$, $Kp \times Fr$ e $Ra \times Fr$;

Caso 7 - Correlação entre as respostas é positiva, com objetivos de maximizar: $MRR \times ECC$.

Nestes casos as fronteiras para otimizações individuais com e sem restrição de Khuri ficaram em regiões diferentes em relação as fronteiras para otimizações pelo fator com restrição de Khuri, neste último em todas os casos os sinais das correlações das respostas das fronteiras se mantiveram em relação ao conjunto de respostas experimentais e os pontos da fronteira ficaram todos dentro da elipse de confiança.

Com um melhor entendimento no comportamento das correlações entre as respostas, o próximo passo é validar o método MMSE-NBI para as oito respostas, nesta etapa foi analisado os métodos de extração por ACP e Máxima Verossimilhança.

4.3 Otimização pelos métodos de extração ACP e Máxima Verossimilhança

Antes de testar quais dos dois métodos de extração encontra a melhor solução, considerando os critérios, estrutura de correlações inalterada e distância de Mahalanobis, foi realizado o procedimento de rotação das cargas fatoriais para avaliar se a mesma influencia no sinal das correlações e na distância de Mahalanobis.

4.3.1 Análise das cargas fatoriais rotacionadas

Foi realizado o mesmo procedimento descrito em 4.2 para avaliar as fronteiras conforme definidas pelo método MMSE-NBI, ilustrado pela Figura 2.7, considerando, restrição de Khuri e rotação das cargas pelo método Ortomax em que os valores de γ variam entre 0 (método de rotação Quartimax) e 1 (método Varimax) inclusive, com uma variação de 0,1 entre as fronteiras conforme ilustrado na Figura 4.20, percebe-se que sem o algoritmo de inicialização (GRG_R), ocorre descontinuidade de algumas fronteiras Depois com o GRG_R as fronteiras foram construídas novamente conforme Figura 4.21.

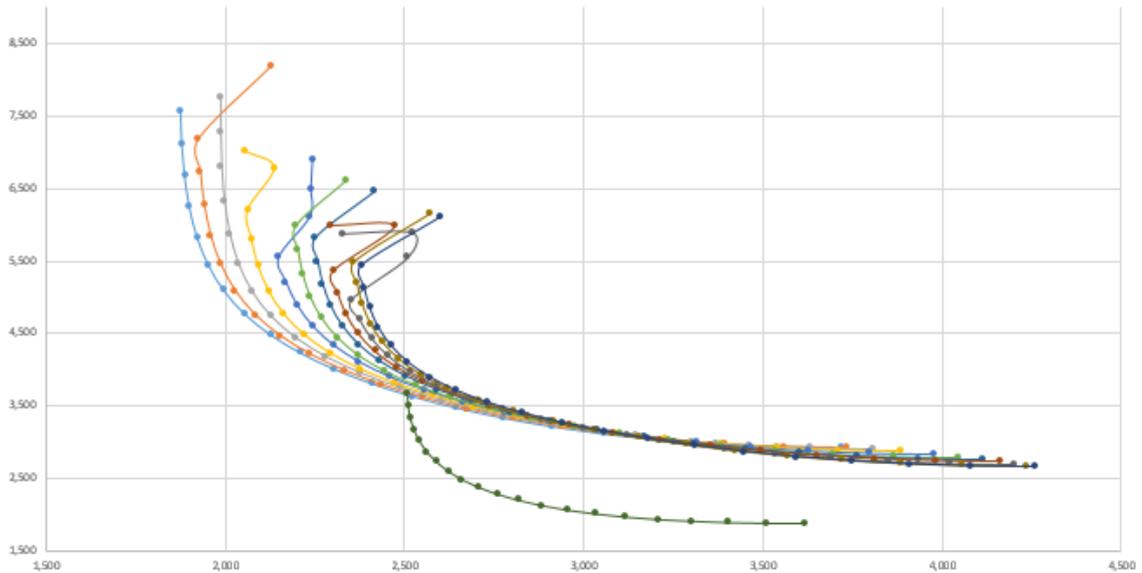


Figura 4.20 – Fronteiras $MMSE_1 \times MMSE_2$ Ortomax sem algoritmo $GRGR$

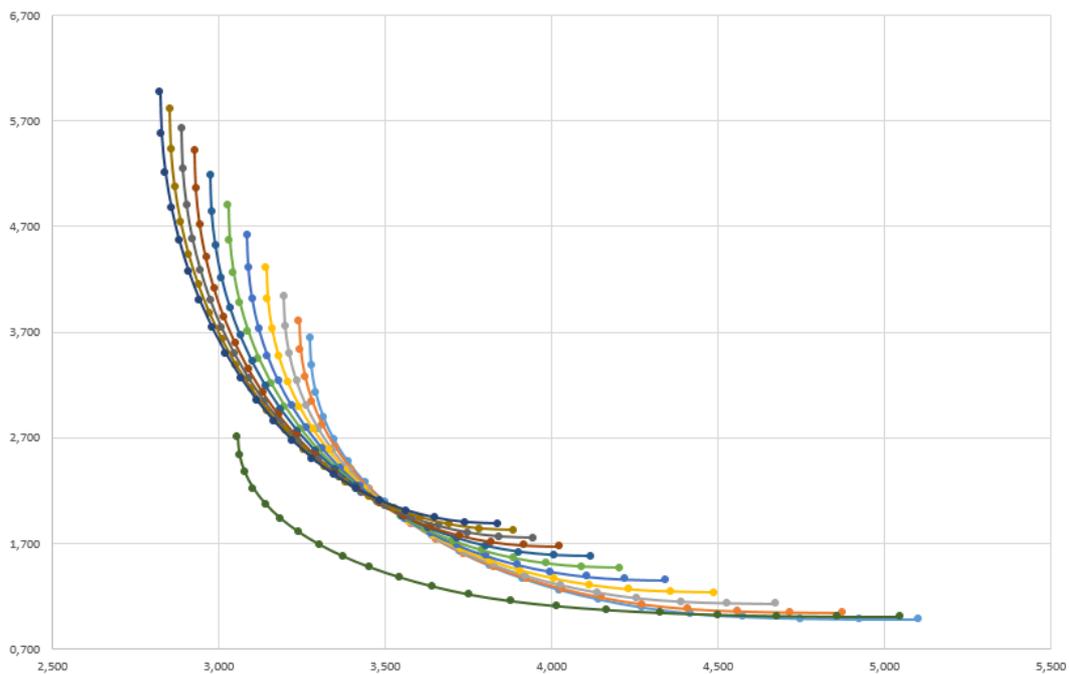


Figura 4.21 – Fronteiras $MMSE_1 \times MMSE_2$ Ortomax com algoritmo $GRGR$

Para construção das 12 Fronteiras Figura 4.21, o algoritmo $GRGR$ definiu $12 \times 21 \times 27 = 6804$ pontos de ancoragem, o algoritmo além de corrigir a descontinuidade torna a busca pelos pontos de ancoragem mais rápida e aplicável. A fronteira inferior (verde) é referente as cargas não rotacionadas (NR) a de maior amplitude em relação ao eixo de $MMSE_2$ representa $\gamma = 1$ até a de menor amplitude $\gamma = 0$. Estas Fronteiras foram plotadas na elipse, de forma a avaliar se todas atendem o intervalo de confiança segundo a restrição de Khuri, conforme observa na Figura 4.22.

Como um dos objetivos é avaliar quais das fronteiras tem a melhor otimização, a

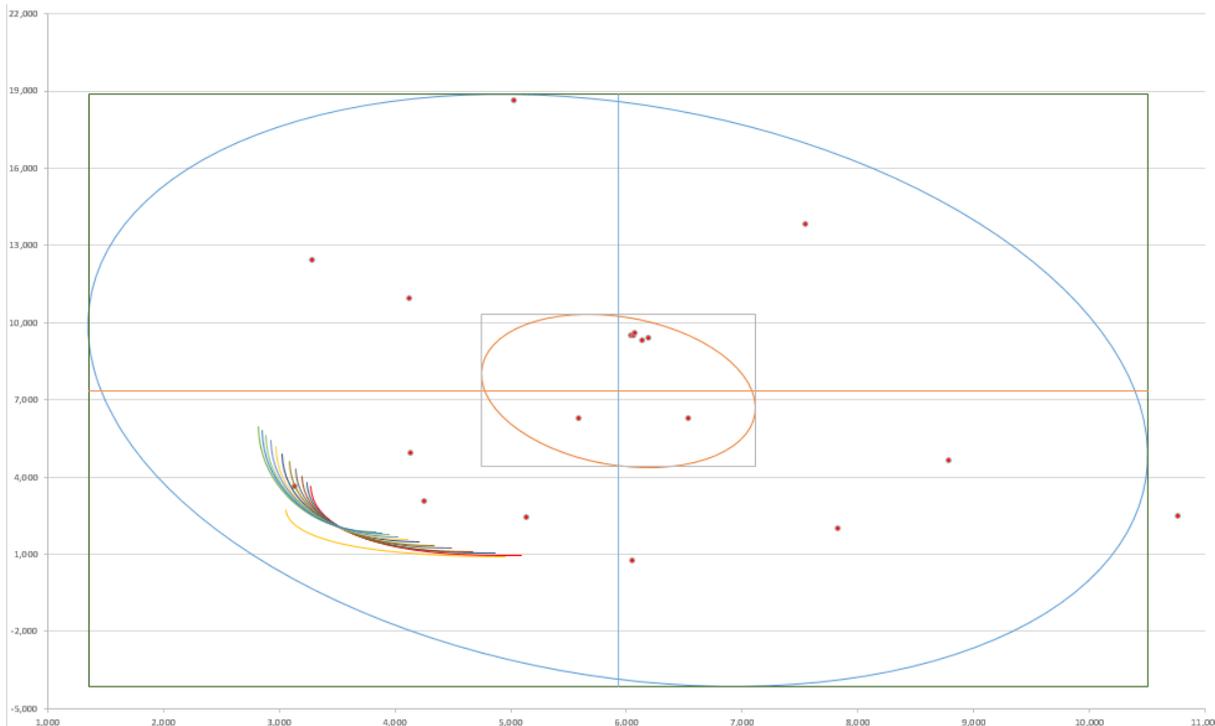


Figura 4.22 – fronteiras ortomax elipse

Tabela 4.14 – Distância de Mahalanobis para cargas rotacionadas

Gama	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	NR
Alvo F1:	1,33	1,27	-1,21	-1,14	-1,07	-1,01	-0,95	-0,90	-0,86	-0,82	-0,78	-0,82
Alvo F2:	-1,32	-1,35	1,41	1,46	1,52	1,57	1,62	1,65	1,68	1,70	1,72	1,71
Alvo F3:	-2,43	-2,43	2,44	2,44	2,44	2,43	2,42	2,42	2,41	2,41	2,41	2,41
$\lambda F1$:	3,66	3,59	3,51	3,43	3,35	3,28	3,21	3,14	3,09	3,04	3,00	4,96
$\lambda F2$:	2,93	2,93	2,91	2,88	2,84	2,80	2,76	2,73	2,70	2,68	2,66	1,88
$\lambda F3$:	0,95	1,03	1,12	1,23	1,35	1,47	1,58	1,67	1,75	1,82	1,89	0,70
$MMSET_1^U$	3,27	3,24	3,20	3,14	3,08	3,03	2,97	2,93	2,89	2,85	2,82	2,52
$MMSET_1^N$	5,07	5,10	5,14	5,22	5,21	5,20	5,19	5,17	5,14	5,12	5,10	5,17
$MMSET_2^U$	0,96	1,03	1,12	1,23	1,35	1,47	1,58	1,67	1,75	1,82	1,89	1,88
$MMSET_2^N$	11,92	12,24	12,37	12,34	12,28	12,13	11,99	11,88	11,82	11,76	11,70	3,57
Mahalanobis	379	953	296	203	185	187	179	138	117	99	71	150.346

distância de Mahalanobis foi utilizada para determinar a distância entre cada fronteira e a otimização individual para cada resposta. Foi armazenado a matriz de respostas 21x8 para cada variação de γ é feito o cálculo da distância.

A tabela 4.14 traz os valores de distância de Mahalanobis para as rotações de cargas a medida em que aproxima-se da rotação Varimax ($\gamma=1$) a distância de Mahalanobis diminui, neste procedimento a estrutura de correlação se manteve em relação a estrutura de correlações dos dados experimentais.

Já a extração pelo método ACP não rotacionado (NR) na tabela 4.14 os valores foram muito maiores e ocorreu 8 discordâncias na estrutura de correlações. Como o método Varimax mostrou melhor resultado em relação a variação de γ , os procedimentos

a seguir foram considerados métodos de extração por ACP e Verossimilhança sem rotação e rotação Varimax.

4.3.2 Análise dos métodos de extração

Etapa 2a. A Figura 4.23 mostra as cargas fatoriais para todos os fatores que usam o método de extração pela ACP e Verossimilhança. O primeiro fator têm variância (autovalor) maior que 1. No método de extração por ACP a partir do quarto fator os autovalores variam muito pouco e esta variação chega a ser zero a partir do quinto fator. Foi considerado três fatores com um % de explicação de 94,3%, no método não rotacionado apesar do terceiro fator explica apenas 8,7% da variabilidade total e não ter nenhuma carga fatorial de valor expressiva ele é mantido no modelo, pois no método de extração rotacionado o terceiro fator explica 23,6% da variabilidade total e possui grandes cargas fatoriais positivas para as respostas *MRR* e *EEC*.

No método de extração por verossimilhança a partir do quarto fator os autovalores assumem os valores zero, também foi considerado três fatores com um % de explicação de 91,0%, no método não rotacionado apesar do terceiro fator explica apenas 9,1% da variabilidade total e não ter nenhuma carga fatorial de valor expressiva ele é mantido no modelo, pois no método de extração rotacionado o terceiro fator explica 22,2% da variabilidade total e possui grandes cargas fatoriais positivas para as respostas *MRR* e *EEC*. Tanto pelo método de ACP quanto pela Verossimilhança a partir do quarto fator o % de explicação da variabilidade dos dados correspondem a uma proporção muito pequena e são provavelmente sem importância.

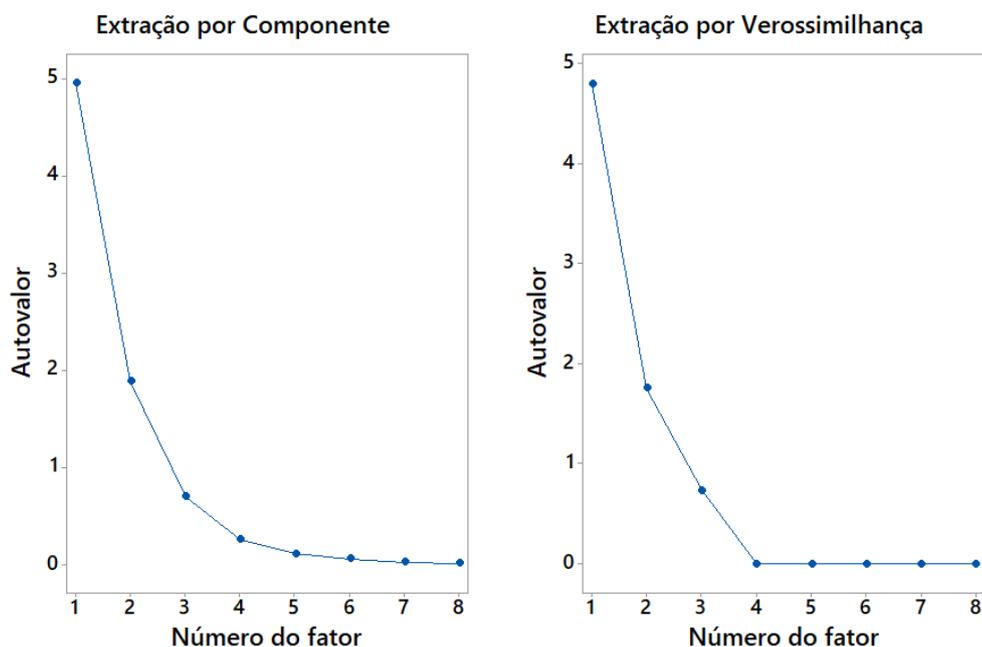


Figura 4.23 – Autovalores para os métodos de extração por ACP e Verossimilhança

Etapa 2b. A tabela 4.15 traz os percentuais de explicação de cada fator pelo método de ACP não rotacionado, dos 94,3% de explicação FC_1 explica 62% da matriz de variância-covariância FC_1 é obtido de T , Tt , Kp , Rt , MRR e EEC , FC_2 explica 23,5% da matriz de variância-covariância, FC_2 é obtido de Ra e Fr e FC_3 explica 8,7% da matriz de variância-covariância, apesar de não possuir percentual maior que FC_1 e FC_2 para nenhuma resposta, ele é necessário para obtenção da fronteira NBI, no método de ACP rotacionado FCR_1 explica 37,5% da matriz de variância-covariância, FCR_1 é obtido de T , Kp e Fr , FCR_2 explica 33,2% da matriz de variância-covariância FCR_2 é obtido de Tt , Ra e Fr e FCR_3 explica 23,6% da matriz de variância-covariância, FCR_3 é obtido de MRR e ECC .

Tabela 4.15 – Cargas fatoriais com método de extração por ACP

Variável	Não rotacionado				Rotação Varimax			
	FC_1	FC_2	FC_3	Comun.	FCR_1	FCR_2	FCR_3	Comun.
T	0,755	-0,544	-0,042	0,869	0,836	-0,001	-0,413	0,869
Tt	0,913	0,059	0,334	0,950	0,672	0,677	-0,200	0,950
Kp	0,892	-0,195	0,340	0,949	0,831	0,478	-0,174	0,949
Ra	-0,641	-0,741	-0,003	0,959	0,082	-0,905	0,365	0,959
Rt	-0,662	-0,648	-0,224	0,907	-0,075	-0,932	0,185	0,907
MRR	-0,861	-0,160	0,455	0,974	-0,280	-0,423	0,847	0,974
Fr	0,624	-0,741	0,101	0,949	0,936	-0,165	-0,214	0,949
EEC	-0,882	0,053	0,450	0,984	-0,438	-0,279	0,845	0,984
Variância	4,9595	1,8828	0,6995	7,5418	2,9989	2,6572	1,8857	7,5418
% Var	0,620	0,235	0,087	0,943	0,375	0,332	0,236	0,943

Tabela 4.16 – Cargas fatoriais com método de extração por Verossimilhança

Variável	Não rotacionado				Rotação Varimax			
	FV_1	FV_2	FV_3	Comun.	FVR_1	FVR_2	FVR_3	Comun.
T	-0,738	-0,460	-0,084	0,764	0,770	-0,002	-0,413	0,764
Tt	-0,859	0,154	-0,461	0,974	0,693	-0,684	-0,163	0,974
Kp	-0,858	-0,114	-0,474	0,975	0,853	-0,469	-0,165	0,975
Ra	0,589	-0,756	-0,002	0,918	0,067	0,897	0,330	0,918
Rt	0,573	-0,660	0,174	0,794	-0,071	0,869	0,186	0,794
MRR	0,907	-0,171	-0,319	0,954	-0,300	0,467	0,804	0,954
Fr	-0,627	-0,683	-0,220	0,908	0,900	0,189	-0,249	0,908
EEC	0,939	0,048	-0,325	0,990	-0,443	0,301	0,839	0,990
Variância	4,794	1,754	0,731	7,279	2,908	2,592	1,780	7,279
% Var	0,599	0,219	0,091	0,910	0,363	0,324	0,222	0,910

Já a tabela 4.16 traz os percentuais de explicação de cada fator pelo método de Verossimilhança não rotacionado, dos 91% de explicação, FV_1 explica 59,9% da matriz

de variância-covariância FV_1 é obtido de T , Tt , Kp , MRR e EEC , FV_2 explica 21,9% da matriz de variância-covariância, FV_2 é obtido de Ra , Rt e Fr e FV_3 explica 9,1% da matriz de variância-covariância, apesar de não possuir percentual maior que FV_1 e FV_2 para nenhuma resposta, ele é necessário para obtenção da fronteira NBI, no método de Verossimilhança rotacionado FVR_1 explica 36,3% da matriz de variância-covariância, FVR_1 é obtido de T , Tt , Kp e Fr , FVR_2 explica 32,4% da matriz de variância-covariância FVR_2 é obtido de Ra e Rt e FVR_3 explica 22,2% da matriz de variância-covariância, FVR_3 é obtido de MRR e ECC . A Figura 4.24 permite visualizar a posição de cada resposta com seu respectivo fator.

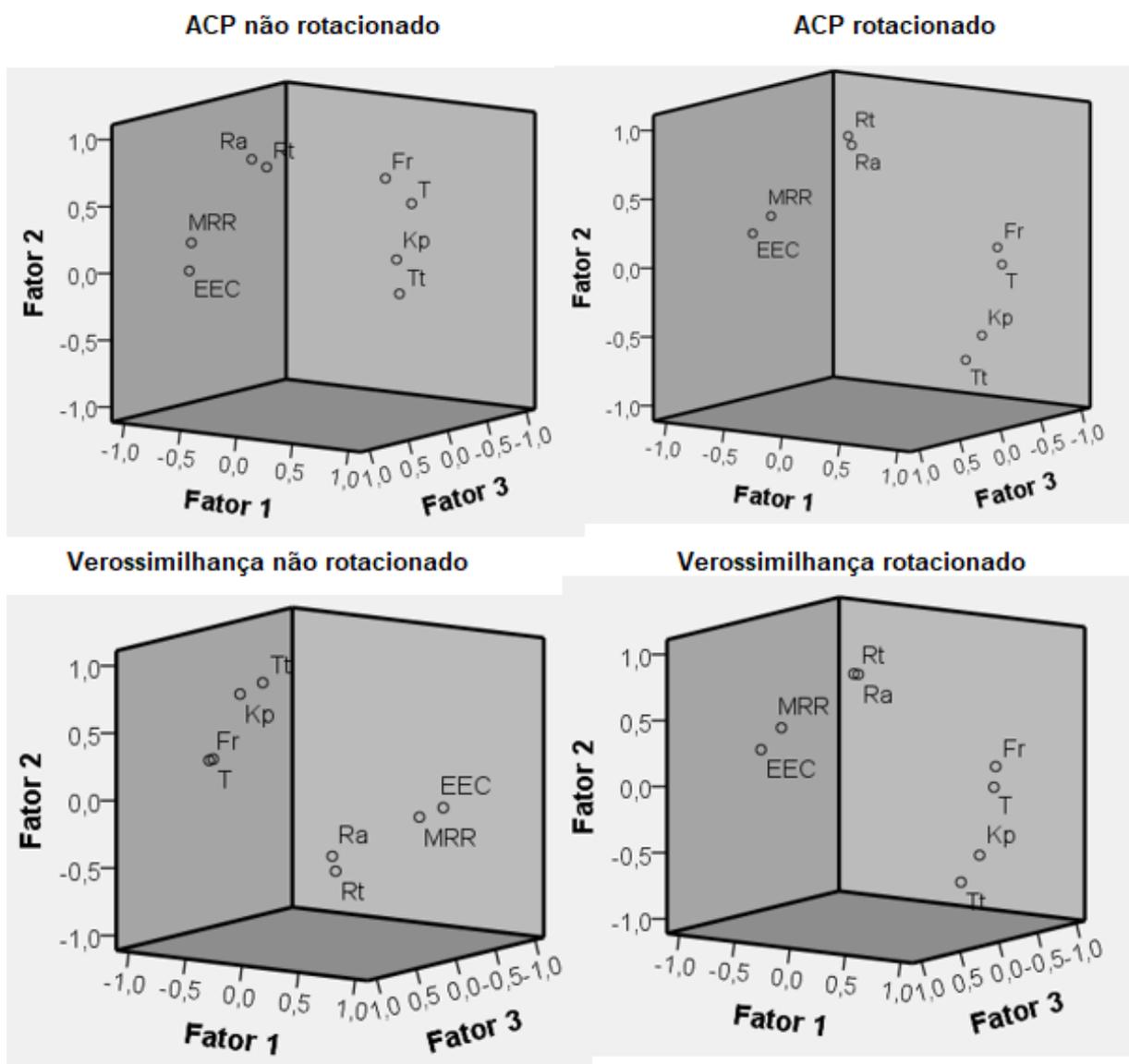


Figura 4.24 – Cargas fatoriais por método de extração

Depois são calculados os escores Tabela 4.17, para cada método de extração, o algoritmo OLS foi aplicado para obter o modelo de segunda ordem dos fatores, conforme descrito na tabela a análise foi realizada utilizando unidades codificadas para eliminar

quaisquer resultados estatísticos errados devido a diferentes escalas de medição para os fatores.

Tabela 4.17 – Matriz de fatores para os métodos de extração por ACP e Verossimilhança

ACP						Verossimilhança					
<i>FNR1</i>	<i>FNR2</i>	<i>FNR3</i>	<i>FR1</i>	<i>FR2</i>	<i>FR3</i>	<i>FNR1</i>	<i>FNR2</i>	<i>FNR3</i>	<i>FR1</i>	<i>FR2</i>	<i>FR3</i>
1,37	0,55	0,02	0,52	1,17	-0,72	-1,21	0,87	-0,26	0,39	-1,37	-0,51
-0,06	1,93	-0,95	-1,68	1,04	-0,85	-0,01	1,65	1,22	-1,58	-0,96	-0,88
0,36	-0,85	-1,20	0,35	-0,89	-1,17	-0,47	-0,84	0,99	0,25	0,78	-1,10
-1,19	0,64	-0,72	-1,46	-0,46	-0,01	1,04	0,52	0,67	-1,30	0,29	0,14
1,64	-0,25	1,19	1,66	1,18	0,15	-1,35	0,00	-1,32	1,54	-1,07	0,20
-0,41	1,81	0,74	-1,21	1,39	0,77	0,57	1,58	-0,35	-1,07	-1,13	0,70
0,14	-1,52	0,36	1,24	-0,92	0,29	-0,21	-1,65	-0,29	1,24	1,16	0,02
-2,27	-0,05	2,15	-0,64	-0,48	3,02	2,63	0,23	-2,01	-0,71	0,41	3,21
1,53	-1,30	0,96	2,21	0,24	0,06	-1,51	-1,13	-1,43	2,35	-0,26	0,14
1,31	1,69	0,85	0,02	2,30	-0,03	-1,26	1,78	-0,91	0,25	-2,35	0,02
-0,96	-0,75	0,04	-0,10	-1,08	0,57	0,88	-0,87	0,30	-0,21	1,23	0,27
0,28	0,30	-1,77	-0,67	-0,29	-1,66	-0,27	0,24	1,84	-0,94	0,28	-1,60
-0,22	0,02	1,08	0,24	0,31	1,03	0,50	-0,03	-0,50	-0,03	0,10	0,70
-0,29	-0,48	-0,54	-0,06	-0,72	-0,29	0,12	-0,52	0,41	0,00	0,62	-0,28
-0,31	-0,42	-0,55	-0,13	-0,69	-0,29	0,15	-0,45	0,42	-0,06	0,57	-0,26
-0,27	-0,46	-0,52	-0,06	-0,69	-0,28	0,12	-0,47	0,38	0,00	0,57	-0,24
-0,32	-0,43	-0,55	-0,13	-0,71	-0,28	0,14	-0,47	0,43	-0,05	0,59	-0,27
-0,31	-0,43	-0,57	-0,12	-0,71	-0,30	0,15	-0,44	0,43	-0,07	0,57	-0,26

Quando se utilizam unidades não codificadas, muitas vezes levam à colinearidade entre os termos do modelo, o que pode causar um aumento na variabilidade dos coeficientes estimados, tornando-os difíceis de interpretar. Definido o número de fatores aplica o modelo quadrático para cada método de extração conforme Tabela 4.18 e 4.19, os fatores modelados permitem calcular os MMSE's da matriz pay off.

Tabela 4.18 – Modelo quadrático para as Fatores com método de extração por ACP

Coefficientes	<i>FNR1</i>	<i>FNR2</i>	<i>FNR3</i>	<i>FR1</i>	<i>FR2</i>	<i>FR3</i>
Constante	-0,30	-0,44	-0,54	-0,09	-0,70	-0,28
Vc	-0,95	0,80	0,06	-1,13	0,09	0,52
f	-0,68	-0,73	-0,13	0,00	-0,97	0,28
ap	-0,16	-0,20	0,88	0,36	0,10	0,84
Vc*Vc	0,04	0,18	0,48	0,08	0,34	0,38
f*f	0,15	0,32	0,31	-0,01	0,44	0,17
ap*ap	0,10	0,22	0,03	-0,07	0,23	-0,04
Vc*f	-0,06	-0,06	0,46	0,17	0,10	0,42
Vc*ap	-0,19	0,08	0,23	-0,09	0,04	0,29
f*ap	-0,15	-0,06	0,20	0,01	-0,05	0,25
<i>Adj.R²%</i>	99,36%	97,55%	95,11%	97,22%	98,08%	96,73%

Tabela 4.19 – Modelo quadrático para as Fatores com método de extração por Verossimilhança

Coefficientes	<i>FNR1</i>	<i>FNR2</i>	<i>FNR3</i>	<i>FR1</i>	<i>FR2</i>	<i>FR3</i>
Constante	0,13	-0,47	0,41	-0,03	0,58	-0,26
Vc	0,96	0,71	0,09	-1,05	-0,10	0,56
f	0,63	-0,75	0,15	-0,04	0,96	0,23
ap	0,26	-0,18	-0,77	0,35	0,02	0,76
Vc*Vc	0,03	0,20	-0,54	0,15	-0,33	0,45
f*f	-0,09	0,33	-0,22	-0,02	-0,39	0,13
ap*ap	0,01	0,21	0,12	-0,19	-0,13	-0,08
Vc*f	0,15	0,11	-0,56	0,14	-0,20	0,54
Vc*ap	0,26	0,17	-0,24	-0,13	-0,09	0,35
f*ap	0,18	-0,02	-0,17	-0,01	0,05	0,24
<i>Adj.R²%</i>	98,69%	98,20%	91,53%	96,44%	97,73%	94,30%

Etapa 2c. A otimização de funções individuais foi realizada sequencialmente usando o algoritmo GRG, AG e GRG_R , Tabela 4.20. Todos algoritmos foram capazes de encontrar os mesmos valores, com uma vantagem para o GRG e GRG_R , o tempo de compilação para encontrar os alvos bem menor em relação ao algoritmo AG.

Tabela 4.20 – Alvo individual de cada resposta

Método	Max	Min	Min	Min	Min	Max	Min	Max
	<i>T</i>	<i>T_t</i>	<i>Kp</i>	<i>Ra</i>	<i>Rt</i>	<i>MRR</i>	<i>Fr</i>	<i>ECC</i>
AG	59,480	0,982	1,073	0,341	1,682	15,990	199,692	0,064
GRG	59,480	0,982	1,073	0,341	1,682	15,990	199,692	0,064
GRG_R	59,480	0,982	1,073	0,341	1,682	15,990	199,692	0,064

Etapa 2d. A extração dos fatores foi feita apenas pela ACP e máxima verossimilhança, os alvos para cada método de extração foi definido conforme a Eq. (2.60)

Tabela 4.21 – Alvos de F_1 , F_2 e F_3 das funções de teste para cada método de extração

Alvo	CP	RCP	V	RV
F_1	-0,821	-0,783	2,081	-1,797
F_2	1,706	1,725	2,287	-1,380
F_3	2,407	2,406	-1,544	2,609

Etapa 3a. O método MMSE foi utilizado para otimizar as oito respostas simultaneamente, com seus respectivos alvos expressos em termos de fatores. Assim, três equações do MMSE foram obtidas: $MMSE_1$, $MMSE_2$ e $MMSE_3$. Para definição dos $MMSET_1$ e $MMSET_2$ conforme Eq. (3.3).

Foram testados os métodos de ligação Ward, Média, Centróide, Completa, McQuitty, Mediana e Único entre eles os que apresentaram menores valores de distância entre os grupos e maiores similaridades foram os métodos por Média, Centróide, Mediana e Ward, conforme Tabela 4.22.

Tabela 4.22 – Métodos de ligação e distância entre correlações

Extração por ACP								
Correlação	Média		Centróide		Mediana		Ward	
	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$
r	1,28	1x2	1,06	1x3	0,85	1x3	1,81	2x3
rA	0,62	1x2	0,42	1x2	0,43	1x2	1,10	1x3

Extração por ACP Rotacionado								
Correlação	Média		Centróide		Mediana		Ward	
	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$
r	0,80	1x2	0,70	1x2	0,63	1x2	1,27	1x2
rA	0,57	1x3	0,43	1x3	0,46	1x3	1,63	1x3

Extração por Verossimilhança								
Correlação	Média		Centróide		Mediana		Ward	
	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$
r	1,20	1x2x3	1,02	1x2x3	0,90	1x2x3	2,39	1x2x3
rA	0,63	1x3	0,44	1x3	0,46	1x3	1,05	1x3

Extração por Verossimilhança Rotacionado								
Correlação	Média		Centróide		Mediana		Ward	
	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$	D	$MMSET_1$
r	0,61	2x3	0,53	2x3	0,58	2x3	1,61	2x3
rA	0,57	1x3	0,42	1x3	0,45	1x3	1,61	1x3

Da tabela tem-se Tabela 4.22

r: Correlação

rA: Correlação Absoluta

D: Distância entre os grupos $MMSET_1$: Agrupamento conforme similaridade

Ainda foram testados para cada método a medida de distância pela correlação, que fornece distâncias entre 0 e 1 para correlações positivas e entre 1 e 2 para correlações negativas, se for considerar dados negativamente correlacionados como mais afastados do que dados correlacionados positivamente, este método deve ser utilizado. E pela correlação absoluta que, fornece distâncias entre 0 e 1. Se a força da relação é importante ao considerar a distância e não o sinal, o método de correlação absoluta deve ser utilizado.

Os dois métodos foram testados e o critério para escolha foi a menor distância entre os grupos. A partir dos resultados, os métodos pela média e centróide com correla-

ção absoluta, resultaram em distâncias menores, considerando estes dois métodos tem-se agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$ pela extração por ACP e $MMSE_1$ com $MMSE_3$ pela extração por ACP com cargas rotacionadas e verossimilhança com e sem rotação das cargas, foram realizadas as duas combinações para os quatro métodos de extração com intuito de estudar os resultados.

Etapa 3b. O resultado é exibido como um dendrograma, Figura 4.25, onde o eixo vertical fornece os valores de distância nos quais as fusões ocorrem, as respostas agrupadas para cada fator estão em concordância com as tabelas 4.15 e 4.16, a junção dos fatores foi definido de acordo com a comunalidade realizada através da equação $MMSE_1 = [(F_1 - \zeta_{f_1})^2 + \lambda_1]$, $MMSE_2 = [(F_2 - \zeta_{f_2})^2 + \lambda_2]$ e $MMSE_3 = [(F_3 - \zeta_{f_3})^2 + \lambda_3]$ resultando em $MMSET_1$ e $MMSET_2$ de acordo com os agrupamentos de $MMSE_1$, $MMSE_2$ e $MMSE_3$.

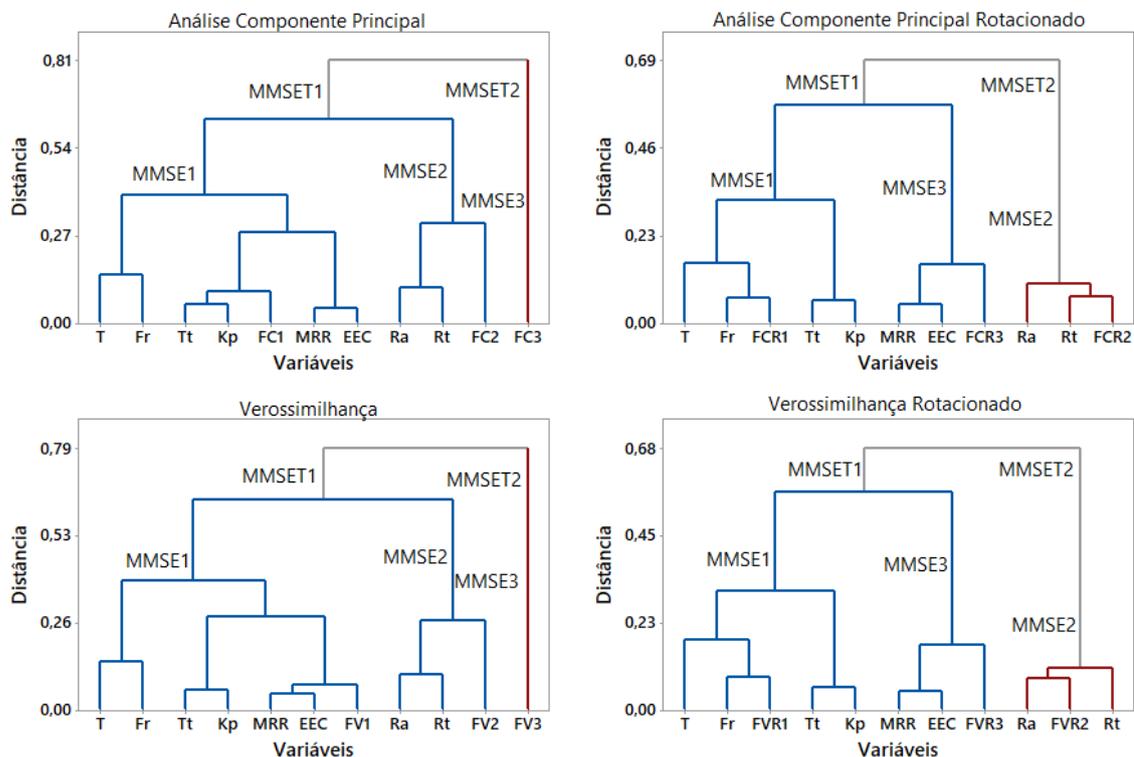


Figura 4.25 – Análise Hierárquica de Cluster das respostas com os fatores

Com a escolha dos dois agrupamentos, o próximo passo é definir os pontos de ancoragem com os valores de Utopia e Nadir para cada método de extração considerando as duas combinações para $MMST_1$, assim tem-se a matriz Payoff Φ com as otimizações individuais para as funções objetivas de $MMSET_1$ e $MMSET_2$. Neste ponto foi testado novamente o algoritmo $GRGR$ com vários pontos de inicialização e algoritmo GA, foi observado que o Algoritmo AG encontra um único ponto de ancoragem, considerando um ponto de mínimo para Utopia e consequentemente um valor qualquer para Nadir.

Já o algoritmo $GRGR$, encontra o mesmo ponto de Utopia com vários valores para

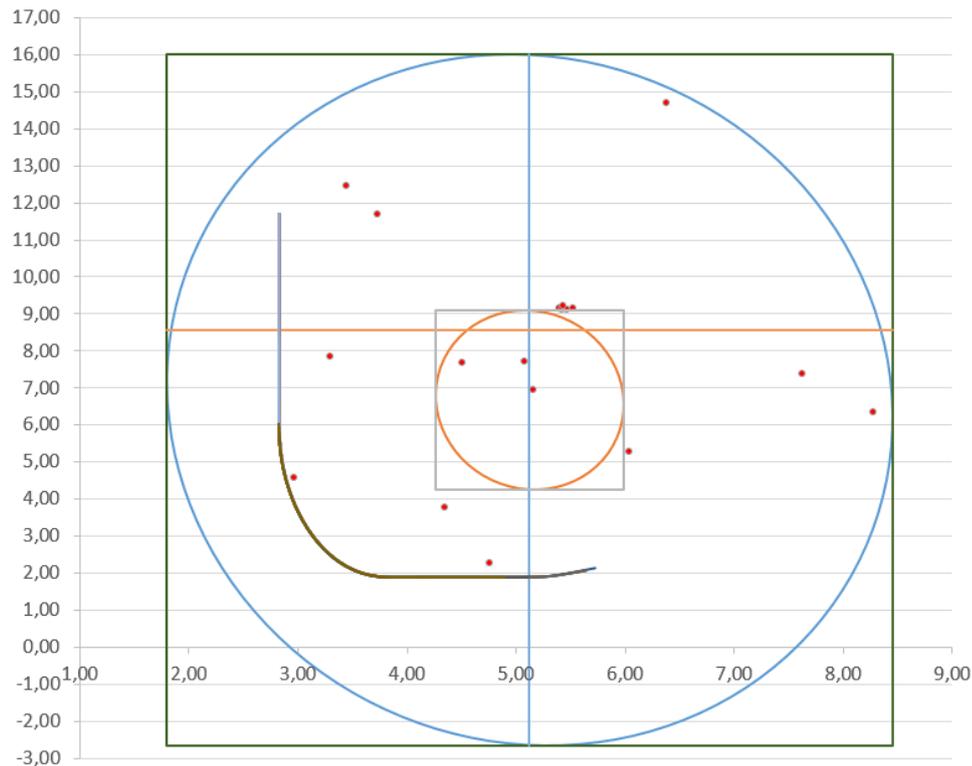


Figura 4.26 – Fronteiras $MMSET_1 \times MMSET_2$ com vários pontos de Nadir

o ponto de Nadir, isso foi fundamental para entender a amplitude da fronteira, os vários pontos de Nadir que o algoritmo GRG encontra, pertence a mesma fronteira, porém com variação de amplitudes, a Figura 4.26 mostra várias fronteiras sobrepostas para os mesmos pontos de Utopia com vários pontos de Nadir, percebe-se que quanto maior a amplitude da fronteira menor a distância de Mahalanobis, isso é possível observar somente com a geração de vários pontos de ancoragem realizadas pelo GRG. Dentre os vários pontos gerados pelo algoritmo, foram escolhidos aqueles com maior amplitude, conforme tabela 4.23 e 4.24

Tabela 4.23 – Pontos de ancoragem para os métodos ACP e Verossimilhança com agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$

	ACP		Verossimilhança	
	Não rotacionado	Rotacionado	Não rotacionado	Rotacionado
$MMSET_1^U(x)$	3,056	2,823	3,906	2,897
$MMSET_1^N(x)$	4,655	5,093	5,230	5,611
$MMSET_2^U(x)$	1,012	1,886	0,731	1,852
$MMSET_2^N(x)$	6,003	11,700	4,098	3,818
Mahalanobis	508,23	71,14	124,481	2.119,50
Inver. Sinal Corr.	7	0	11	11

Etapa 3c. Definidos os pontos de ancoragem da fronteira NBI para cada método

Tabela 4.24 – Pontos de ancoragem para os métodos ACP e Verossimilhança com agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$

	ACP		Verossimilhança	
	Não rotacionado	Rotacionado	Não rotacionado	Rotacionado
$MMSET_1^U(x)$	2,536	2,417	1,876	2,383
$MMSET_1^N(x)$	5,830	7,401	6,213	10,519
$MMSET_2^U(x)$	1,883	2,657	1,872	2,592
$MMSET_2^N(x)$	3,531	8,410	3,212	3,495
Mahalanobis	327,6	23	3.382,57	58,58
Sinal da Correlação	0	0	0	0

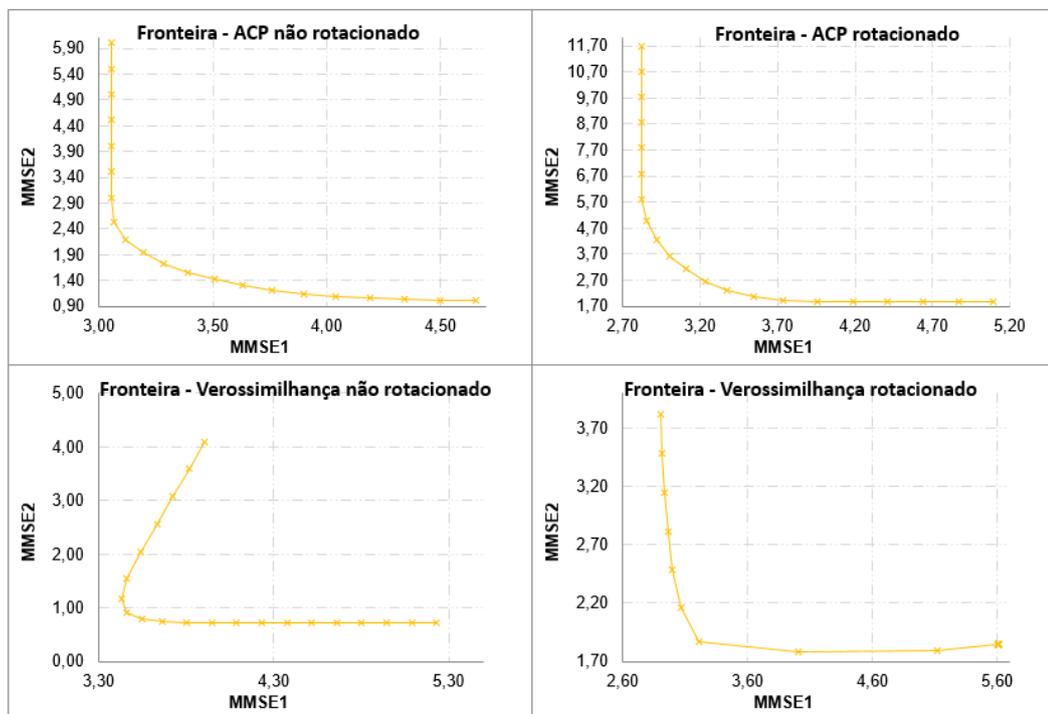


Figura 4.27 – Fronteira NBI pelos métodos de extração ACP e Verossimilhança com agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$

com e sem rotação, e utilizando os pesos (w) entre $[0 : 1]$, com incrementos de 5% foi possível construir as fronteiras conforme Figura 4.27 e 4.28 . No agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$ ocorreram inversões dos sinais na estrutura de correlação das respostas referentes aos pontos da fronteira comparado com as respostas experimentais, na extração por ACP sem rotação ocorreram 7 inversões e com rotação não ocorreram inversões, já no método Verossimilhança com e sem rotação foram 11 sinais invertidos. Para o agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$ não ocorreram inversões dos sinais na estrutura de correlação das respostas referentes aos pontos da fronteira comparado com as respostas experimentais. Considerando a inalteração na estrutura de correlação e distância de Mahalanobis, o agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$ obteve melhor desempenho ao manter a estrutura de

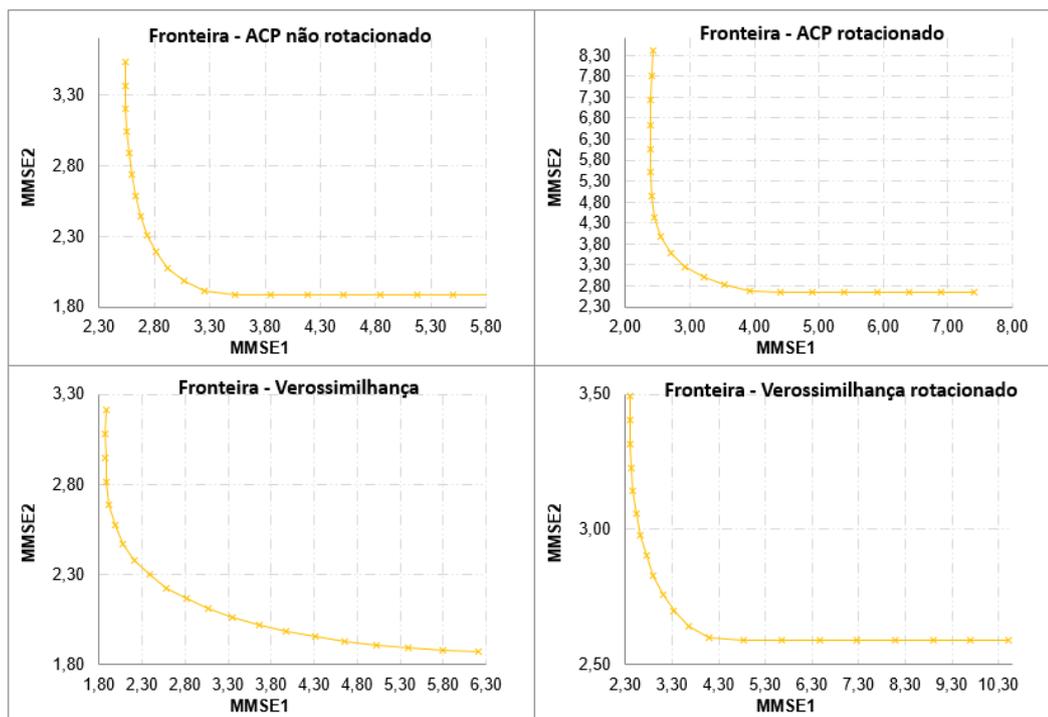


Figura 4.28 – Fronteira NBI pelos métodos de extração ACP e Verossimilhança com agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$

correlação inalteradas e por obter o menor valor de distância, sendo ACP rotacionado com distância de 23 seguida por Verossimilhança também rotacionado com distância de 58,58. Como foi constatado com as funções de Rosenbrock, o algoritmo AG não é adequado para construção, aqui foi utilizado apenas o algoritmo GRG. As fronteiras construídas pelo método MMSE-NBI são convexas e equidistantes.

Etapa 4. De acordo com as fronteiras comparando os métodos de extração e analisando os dois parâmetros, distância de Mahalanobis e a estrutura de correlação das respostas, ocorreu o mesmo que nas funções de Rosenbrock, independentemente do método de extração a rotação das cargas fez com que a distância de Mahalanobis diminuísse.

Nas Tabelas 4.15 e 4.16 pode-se observar que nos dois métodos de extração rotacionado ocorreu um aumento na maioria das correlações entre as respostas e o fator, ao rotacionar ortogonalmente o cargas fatorais o fator 3 passa a explicar as respostas MRR e EEC para os dois métodos de extração, nos dois métodos sem rotação o fator 3 não explica nenhuma resposta, mas ele é necessário mesmo para as fronteiras não rotacionadas, caso seja realizado a construção da fronteira sem o terceiro fator, as fronteiras para o método de extração por ACP ficam com os pontos não equiespaçados, não convexas e com uma distância de Mahalanobis de 559.750,40 e a fronteira para o método de extração por Verossimilhança sem o fator 3, apesar da distância de Mahalanobis em relação ao alvo não ser tão grande com valor de 1.928,6, tem em sua estrutura de correlação entre as respostas 7 inversões no sinal, as fronteiras ficam como na Figura 4.29.

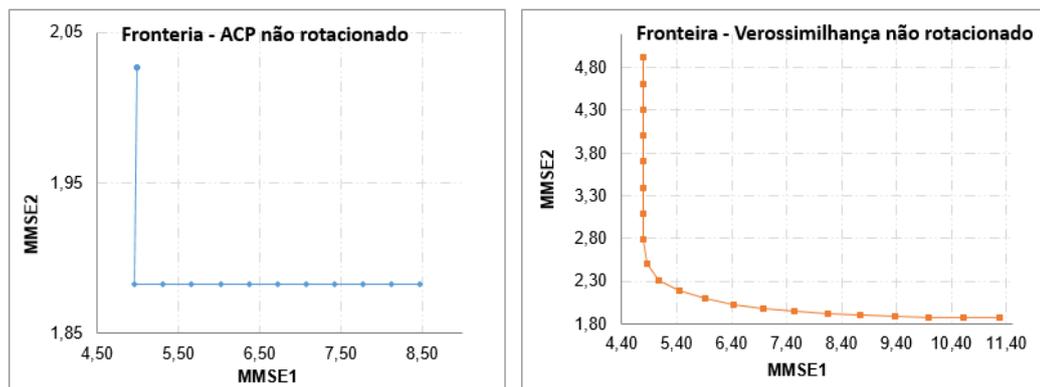


Figura 4.29 – Fronteira NBI não rotacionada com dois fatores pelos métodos de extração por ACP e Verossimilhança

A Tabela 4.25 traz um resumo dos resultados em cada etapa da abordagem proposta, foram necessários 3 fatores para um % de explicação de 94,3% para extração pela ACP e 91%. Com os alvos individuais, autovalores e alvos dos fatores definidos, foram calculados os $MMSE_1$, $MMSE_2$ e $MMSE_3$ para métodos de extração por ACP e Máxima Verossimilhança sem rotação das cargas e com rotação Varimax.

Conforme a 4.22, foram ainda realizados para cada método de extração com ou sem rotação das cargas, combinações entre $MMSE_1$, $MMSE_2$ e $MMSE_3$, para definição de $MMSET_1$, conforme Eq. 3.3. Os métodos de ligação pela Média e Centróide, apresentaram menores distâncias e maiores similaridades, assim os agrupamentos foram definidos conforme Figura 4.25, foram testados $MMSET_1$ formado por $MMSE_1$ com $MMSE_2$ e $MMSE_1$ com $MMSE_3$.

Depois de encontrados os pontos de Utopia e Nadir, as fronteiras construídas são como na Figura 4.30 e 4.31, assim foi possível avaliar pelos critérios da distância mínima multivariada de Mahalanobis e estrutura de correlações entre as respostas, qual método é melhor.

Conforme Tabela 4.25 o melhor método é pela ACP com rotação das cargas Varimax, agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$ pelo critério de ligação Média e Centróide, com distância de 23 e estrutura de correlação inalteradas em relação as respostas originais.

O segundo melhor resultado foi é pela Máxima verossimilhança também com rotação das cargas Varimax, agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$ pelo critério de ligação Média e Centróide, com distância de 58,58 e estrutura de correlação inalteradas em relação as respostas originais.

Para cada método é feito uma análise referente aos pontos da fronteira, os resultados estão conforme Figuras 4.30 para agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$ e na Figura 4.31, para agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$

No agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$ obteve distâncias maiores com inversões

Tabela 4.25 – Resultados da otimização com extração dos fatores por ACP e Máxima Verossimilhança sem rotação e rotação Varimax

Alvo individual								
Algoritmo	T	Tt	Kp	Ra	Rt	MRR	Fr	ECC
AG	59,48	0,982	1,073	0,341	1,682	15,99	199,692	0,064
GRG	59,48	0,982	1,073	0,341	1,682	15,99	199,692	0,064
GRGr	59,48	0,982	1,073	0,341	1,682	15,99	199,692	0,064
			ACP			Verossimilhança		
			FC_1	FC_2	FC_3	FC_1	FC_2	FC_3
Autovalor	sem rotação		4,960	1,883	0,699	4,794	1,754	0,731
	Varimax		2,999	2,657	1,886	2,908	2,592	1,780
Alvo	sem rotação	-0,821	1,706	2,407	2,081	2,287	-1,544	
	com rotação	-0,783	1,725	2,406	-1,797	-1,380	2,609	
Aj. $R^2\%$	sem rotação	99,36	97,55	95,11	98,69	98,2	91,53	
	Varimax	97,22	98,08	96,73	96,44	97,73	94,3	
$MMSE_1$ com $MMSE_2$	sem rotação	-2,004	0,471	1,848	2,380	0,326	-1,544	
	Varimax	-0,821	1,706	0,104	0,656	1,594	0,291	
		-0,504	-0,678	2,405	-0,545	0,728	2,340	
		-0,783	1,725	-0,727	-1,346	-1,055	1,181	
$MMSE_1$ com $MMSE_3$	sem rotação	0,044	1,706	0,114	-0,463	1,943	0,098	
	Varimax	-2,000	0,423	1,847	2,211	1,079	-1,521	
		1,328	1,725	0,069	1,833	-1,380	0,351	
		-0,467	-0,674	2,395	-1,253	-0,430	2,574	
$MMSE_1$ com $MMSE_2$			sem rotação	Varimax	sem rotação	Varimax		
	$MMSET_1^U$		3,056	2,823	3,906	2,897		
	$MMSET_1^N$		4,655	5,093	5,23	5,611		
	$MMSET_2^U$		1,012	1,886	0,731	1,852		
	$MMSET_2^N$		6,003	11,700	4,098,	3,818		
	Mahalanobis		508,23	71,14	124,481	2.119,50		
Inversão do sinal na correlação			7	0	11	11		
$MMSE_1$ com $MMSE_3$			sem rotação	Varimax	sem rotação	Varimax		
	$MMSET_1^U$		2,536	2,417	1,876	2,383		
	$MMSET_1^N$		5,830	7,401	6,213	10,519		
	$MMSET_3^U$		1,883	2,657	1,872	2,592		
	$MMSET_3^N$		3,531	8,410	3,212	3,495		
	Mahalanobis		327,6	23	3.382,57	58,58		
Inversão do sinal na correlação			0	0	0	0		

no sinal das correlações em relação a estrutura original das repostas, independentemente do método de extração a rotação das cargas apresentou um resultado melhor.

Na AHC Figura 4.25 sem rotação de cargas para método de extração por ACP e Máxima Verossimilhança, prevaleceu o agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$, com F_1 no mesmo grupo que as repostas T , Fr , Tt , Kp , MRR e EEC o F_2 ficou com as variáveis Ra e Rt , e com o FC_3 não ficou nenhuma resposta, como $MMSE_1$ agrupou com $MMSE_2$ para formar $MMSET_1$ e $MMSET_2$ foi apenas as respostas de $MMSE_3$, representado pelo terceiro fator. Os resultados das otimizações não foram os melhores pelos critérios da distância de Mahalanobis e estrutura de correlações.

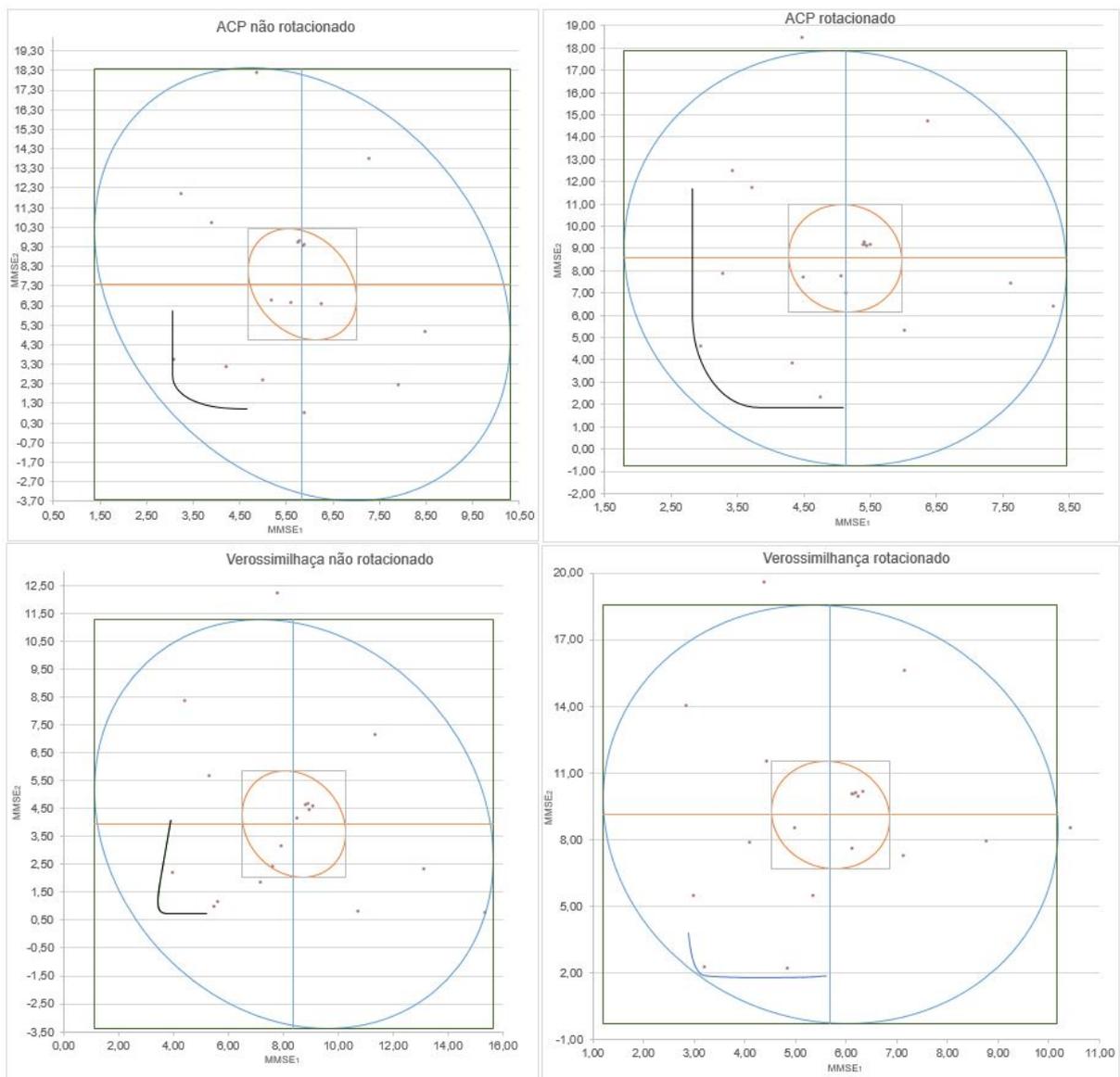


Figura 4.30 – Elipse de confiança para método de extração por ACP e Verossimilhança, agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_2$

Já com a rotação das cargas Varimax para método de extração por ACP e Máxima Verossimilhança, prevaleceu o agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$, com F_1 no mesmo

grupo que as repostas T , Fr , Tt , Kp , o F_3 ficou com as variáveis MRR e EEC e FC_2 com Ra e Rt , como $MMSE_1$ agrupou com $MMSE_3$ para formar $MMSET_1$ e $MMSET_2$ foi apenas as respostas de $MMSE_2$, representado por Ra e Rt . Os resultados das otimizações foram melhores pelos critérios da distância de Mahalanobis e estrutura de correlações.

Pode-se concluir que a rotação das cargas contribui para um melhor agrupamento das variáveis e que os métodos de extração ACP e Máxima Verossimilhança apresentaram resultados de otimizações das respostas muito similares.

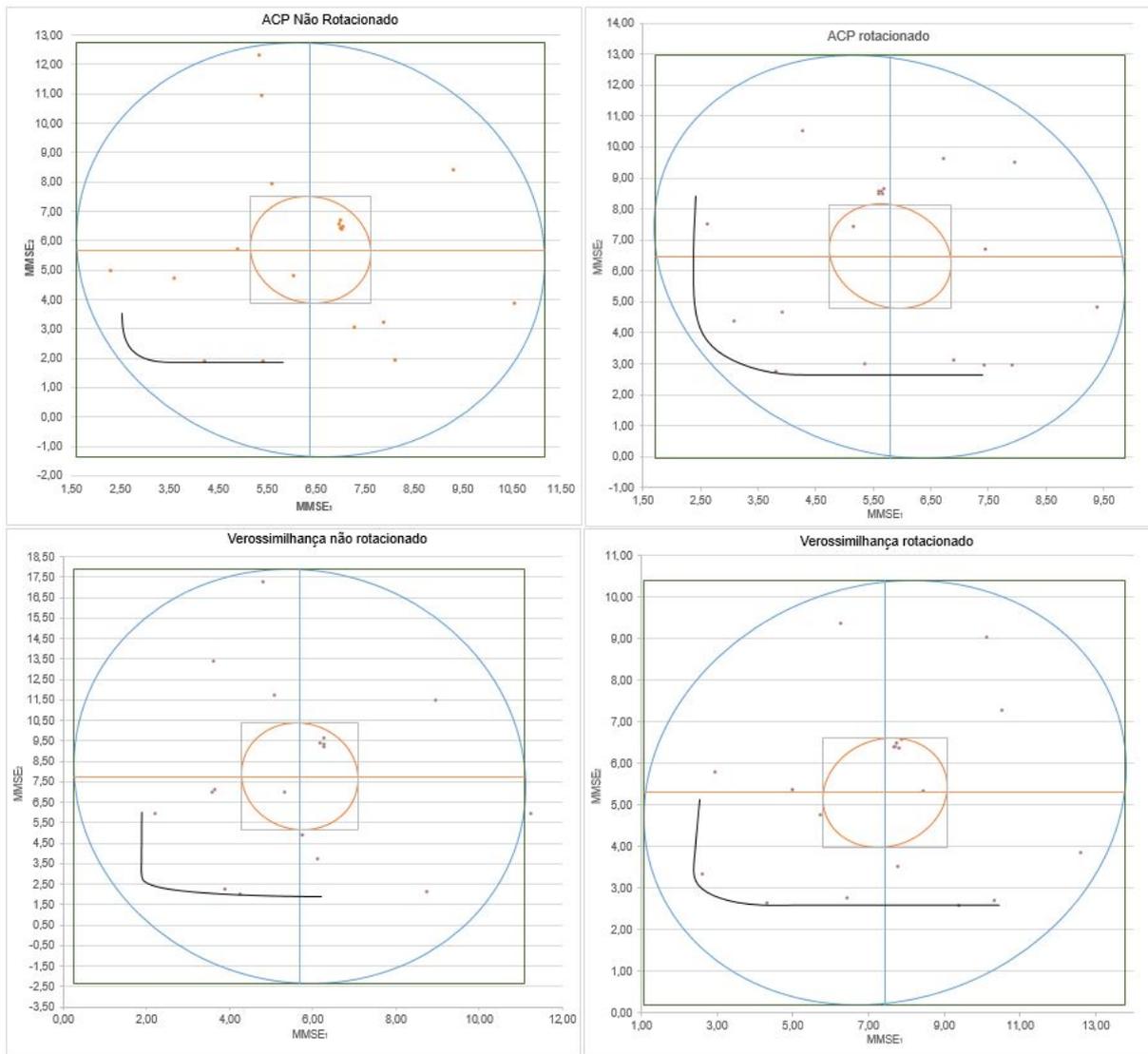


Figura 4.31 – Elipse de confiança para método de extração por ACP e Verossimilhança, agrupamento $MMSE_1$ com $MMSE_3$

5 CONCLUSÕES

Dentre os métodos de otimização multivariada que consideram as correlações entre as respostas, neste trabalho foi possível concluir que, na extração dos fatores não correlacionados, tanto a ACP como a Máxima Verossimilhança obtiveram resultados semelhantes. A adição da restrição de Khuri ao modelo de otimização MMSE-NBI, tornou o método mais confiável e a implementação de rotinas de inicialização do algoritmo GRG não linear foi de extrema importância para o estudo de comportamento das correlações entre as respostas definidas pelas fronteiras de Pareto.

5.1 Conclusões gerais

1- Os métodos de extração dos fatoriais por Análise de Componentes Principais e Verossimilhança mostraram-se satisfatório para definição de alvos dos autovetores e posteriormente cálculo do $MMSE_i$ dos fatores;

2- O agrupamento de variáveis com seus respectivos fatores pelo método da média e centróide foram mais eficazes para definição dos agrupamentos na formação de $MMSET_1$ considerando como critério maior similaridade e menor distância entre agrupamentos;

3- A análise individual das respostas proporcionou um melhor entendimento sobre as consequências da estrutura de correlação na formação das fronteiras e a evidência de que a transformação das respostas em fatores deve ser aplicada, principalmente quando tem-se correlação negativa, com objetivos diferentes e correlação positiva com objetivos iguais;

4- O algoritmo GRG não linear foi fundamental para estudar a variação dos pontos de Nadir e concluir que a amplitude entre os pontos de ancoragem permite encontrar menores valores para distância multivariada de Mahalanobis;

5- O algoritmo GA apesar de ser mais robusto para encontrar o ótimo global não permite encontrar vários pontos de Nadir para o mesmo ponto de Utopia, imprescindível para entender o comportamento das fronteiras;

6- A restrição de Khuri é parte fundamental na aplicação do método NBI-MMSE, pois sem esta restrição não tem garantia de que a fronteira está localizada em uma região de ótimo real;

7- A rotação das cargas fatoriais trouxe resultados melhores que as cargas sem rotação ao manter a estrutura de correlação entre as respostas nos pontos da fronteira em relação as respostas experimentais e com distâncias mínimas dos ótimos individuais

de cada resposta original;

8- A variação de γ foi importante para investigar a continuidade dos pontos das fronteiras; além de comprovar uma redução da distância em relação ao alvo a medida em que aumenta-se o valor de γ até o valor 1 (Varimax);

9- Mesmo sem possuir respostas agrupadas com o terceiro fator no método sem rotação das cargas, o terceiro fator foi imprescindível, ao rotacionar as cargas para encontrar a melhor solução;

10- A aplicação do método MMSE-NBI com funções de teste Rosenbrock foi fundamental para validação do método MMSE-NBI;

11- As rotinas implementadas no software Excel foram de extrema importância para encontrar os resultados esperados, foram realizadas mais de 20.000 rotinas com o solver com algoritmo GRG não linear e mais de 500.000 iterações com o algoritmo GA;

12- A aplicação do NBI para MMSE1 e MMSE2 foi capaz de gerar a fronteira de Pareto, que mostra inúmeros pontos ótimos para aplicação do processo de torneamento do aço AISI H13 ao utilizar a ferramenta CC 6050;

13- A estrutura de correlação das respostas na matriz payoff em relação aos valores da matriz original das respostas se mantiveram, validando método proposto. Os resultados apresentados neste artigo confirmam que a otimização multi objectivo para respostas correlacionadas podem ser aplicadas com sucesso em um processo de usinagem;

REFERÊNCIAS

- ABADIE, J.; CARPENTIER, J. Generalization of the wolfe reduced gradient method to the case of nonlinear constraints. *ED. R. FLETCHER*, London, England, v. 1, 1969. Citado na página 40.
- ABDI, H. Factor rotations in factor analyses. *Encyclopedia for Research Methods for the Social Sciences*. Sage: Thousand Oaks, CA, p. 792–795, 2003. Citado na página 35.
- AMES, A.; MATTUCCI, N.; MCDONALD, S.; G.SZONYI; D.HAWKINS. Quality loss function for optimization across multiple response surfaces. *Journal of Quality Technology*, v. 29, p. 339–346, 1997. Citado na página 46.
- ANTONY, J. Multiresponse optimization in industrial experiments using taguchi's quality lossfunction and principal component analysis. *Quality and Reliability Engineering International*, 2000. Citado na página 46.
- APPOLINARIO, F. *Metodologia da ciência: filosofia e prática da pesquisa*. [S.l.]: Cengage Learning, 2009. 209 p. (Metodologia da ciência). Citado na página 5.
- ARDAKANI, M. K.; NOOROSSANA, R. A new optimization criterion for robust parameter design — the case of target is best. *Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v. 38, p. 851–859, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 47.
- ARORA, J. S. *Introduction to Optimum Design*. [S.l.]: 4 ed. Elsevier, 2017. 968 p. (MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO). ISBN 978-0-12-800806-5. Citado 4 vezes nas páginas 40, 42, 44 e 56.
- BERTOLINI, A. C.; SCHIOZER, D. J. Principal component analysis for reservoir uncertainty reduction. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 38(4), p. 1345–1355, 2016. Citado na página 26.
- BERTRAND, J. W. M.; FRANSOO, J. C. Operations management research methodologies using quantitative modeling. *International Journal of Operations amp; Production Management*, v. 22, n. 2, p. 241–264, Feb 2002. ISSN 0144-3577. Citado na página 5.
- BOUACHA, K.; YALLESE, M. A.; MABROUKI, T.; RIGAL, J.-F. Statistical analysis of surface roughness and cutting forces using response surface methodology in hard turning of {AISI} 52100 bearing steel with {CBN} tool. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, v. 28, n. 3, p. 349 – 361, 2010. ISSN 0263-4368. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263436809001632>>. Citado na página 45.
- BOUZID, L.; BOUTABRA, S.; YALLESE, M. A.; BELHADI, S.; GIRANDINI, F. Simultaneous optimization of surface roughness and material removal rate for turning of x20cr13 stainless steel. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v. 74(5-8), p. 879–891, 2014. Citado na página 26.

- BOX, G.; HUNTER, J. A confidence region for the solution of a set of simultaneous equations with an application to experimental design. *Biometrika*, Elsevier, v. 41, p. 190–199, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 45.
- BOX, G.; WILSON, K. On the experimental attainment of optimum conditions. *Journal of the Royal Statistical Society*, Elsevier, v. 1, p. 1–45, 1951. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 11.
- BRAILSFORD, S. C.; ELDABI, T.; KUNC, M.; MUSTAFEE, N.; OSORIO, A. F. Hybrid simulation modelling in operational research: A state-of-the-art review. *European Journal of Operational Research*, v. 278, n. 3, p. 721 – 737, 2019. ISSN 0377-2217. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377221718308786>>. Citado na página 6.
- BRATCHELL, N. Cluster analysis. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, Elsevier, v. 6, n. 2, p. 105–125, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 46.
- BRITO, T.; PAIVA, A.; FERREIRA, J.; GOMES, J.; BALESTRASSI, P. A normal boundary intersection approach to multiresponse robust optimization of the surface roughness in end milling process with combined arrays. *Precision Engineering*, v. 38, n. 3, p. 628 – 638, 2014. ISSN 0141-6359. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0141635914000439>>. Citado 4 vezes nas páginas 49, 50, 51 e 53.
- BUSACCA, G. P.; MARSEGUERRA, M.; ZIO, E. Multi-objective optimization by genetic algorithms: application to safety systems. *Reliability Engineering System Safety*, v. 72-1, p. 59–74, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 44.
- CAMPOS, P. H. d. S. *DEA-OTS Methodology: A contribution to the optimal selection of tools in the Turning of ABNT H13 Hardened Steel*. Tese (Doutorado) — Federal University of Itajuba, may 2015. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 76.
- CARROLL, C. W. The created response surface technique for optimizing nonlinear restrained systems. *Operations Research*, v. 9, p. 169, 1961. Citado na página 21.
- CASTILHO, H. D. *Process Otimization A statistical Approach*. [S.l.]: Springer, 2007. 480 p. (Métodos de pesquisa). ISBN 9780387714356. Citado 5 vezes nas páginas 9, 10, 13, 44 e 45.
- CATTEL, R. B. The screen test for the number of factors. *Multivariate Behavior Research*, v. 1, p. 245–276, 1966. Citado na página 25.
- CHEN, M.; FAN, S. K. S. Tolerance evaluation of minimum zone straightness using nonlinear programming techniques: a spreadsheet approach. *Computers Industrial Engineering*, v. 43-3, p. 437–453, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.
- CHENG, C. B.; CHENG, C. J.; LEE, E. S. Neuro-fuzzy and genetic algorithm in multiple response optimization. *Computer and Mathematics with Applications*, v. 44-12, p. 1503–1514, 2002. Citado na página 42.
- CHIAO, H.; HAMADA, M. Analyzing experiments with correlated multiple responses. *Journal of Quality Technology*, v. 33(4), p. 451–465, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 1, 46 e 47.

- COSTA, D. M. D.; BELINATO, G.; BRITO, T. G.; PAIVA, A. P.; FERREIRA, J. F. Weighted principal component analysis combined with taguchi's signal-to-noise ratio to the multiobjective optimization of dry end milling process: a comparative study. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 39, p. 1663–1681, 2017a. Citado na página 26.
- COSTA, D. M. D.; BRITO, T. G.; PAIVA, A. P. de; LEME, R. C.; BALESTRASSI, P. P. A normal boundary intersection with multivariate mean square error approach for dry end milling process optimization of the {AISI} 1045 steel. *Journal of Cleaner Production*, p. –, 2016. ISSN 0959-6526. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652616000974>>. Citado 5 vezes nas páginas 2, 3, 23, 53 e 54.
- COSTA, D. M. D.; LEME, R. C.; BRITO, T. G.; PAIVA, A. P.; BALESTRASSI, P. P. A normal boundary intersection with multivariate mean square error approach for dry end milling process optimization of the aisi 1045 steel. *Journal of Cleaner Production*, v. 135, p. 1658–1672, 2016a. Citado 3 vezes nas páginas 26, 50 e 52.
- COSTA, J. F. P.; ALONSO, H.; ROQUE, L. A weighted principal component analysis and its application to gene expression data. *IEEE/ACM transactions on computational biology and bioinformatics / IEEE, ACM*, v. 8, p. 246–252, 2011. Citado na página 26.
- C.ROUTARA, B.; MOHANTY, S. D.; DATTA, S.; MAHAPATRA, A. B. A. S. S. Combined quality loss (cql) concept in wpca-based taguchi philosophy for optimization of multiple surface quality characteristics of uns c34000 brass in cylindrical grinding. *International Journal Advanced Manufacturing Technology*, v. 51, p. 135–143, 2010. Citado na página 46.
- DAKOTA. Design analysis kit for optimization and terascale applications. <http://dakota.sandia.gov/software.html>, 2015. Citado na página 57.
- DAS, I.; DENNIS, J. E. Normal-boundary intersection: A new method for generating the pareto surface in nonlinear multicriteria optimization problems. *SIAM J. on Optimization*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, v. 8, n. 3, p. 631–657, mar. 1998. ISSN 1052-6234. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1137/S1052623496307510>>. Citado 4 vezes nas páginas 2, 3, 49 e 50.
- DAS, M. K.; KUMAR, K.; BARMAN, T. K.; SAHOO, P. Application of artificial bee colony algorithm for optimization of mrr and surface roughness in edm of en31 tool steel. *Procedia Materials Science*, v. 6, p. 741–751, 2014. Citado na página 26.
- DERRINGER, G.; SUICH, R. Simultaneous optimization of several response variables. *Journal of Quality Technology*, v. 12, p. 214–219, 1980. Citado na página 46.
- FAN, S.-K. S. A generalized global optimization algorithm for dual response systems. *Journal of Quality Technology*, v. 32, p. 444–456, 2000. Citado na página 45.
- FERREIRA, D. F. *Estatística multivariada*. [S.l.]: 3ed EDITORA UFLA, 2018. 624 p. (Métodos de OTIMIZAÇÃO). ISBN 9788581270630. Citado 8 vezes nas páginas 14, 27, 29, 31, 33, 34, 35 e 37.

- FUL, C. W.; CHYU, C. C. Optimization of correlated multiple quality characteristics robust design using principal component analysis. *Journal of Manufacturing Systems*, v. 23, p. 134–143, 2004. Citado na página 22.
- GANESAN, T.; ELAMVAZUTHI, I.; SHAARI, K. Z. K.; VASANT, P. Swarm intelligence and gravitational search algorithm for multi-objective optimization of synthesis gas production. *Applied Energy*, v. 103, p. 368–374, 2013. Citado na página 52.
- GAUDÊNCIO, J. H. D.; ALMEIDA, F. A. de; TURRIONI, J. B.; QUININO, R. da C.; BALESTRASSI, P. P.; PAIVA, A. P. de. A multiobjective optimization model for machining quality in the aisi 12114 steel turning process using fuzzy multivariate mean square error. *Precision Engineering*, 2019. ISSN 0141-6359. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0141635918306342>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 75.
- GERHARDT, T. E.; SILVEIRA, D. T. *Métodos de pesquisa*. [S.l.]: Editora da UFRGS, 2019. 120 p. (Métodos de pesquisa). ISBN 9788538600718. Citado na página 6.
- GHANE-KANAFI, A.; KHORRAM, E. A new scalarization method for finding the efficient frontier in non-convex multi-objective problems. *Applied Mathematical Modelling*, v. 39, p. 7483–7498, 2015. Citado na página 52.
- GOMES, F. M.; PEREIRA, F. M.; MARINS, F. A. S.; SILVA, M. B. Comparative study between the generalized reduced gradient and genetic algorithm in multiple response optimization. *REVISTA CIENTÍFICA ELETRÔNICA DE ENGENHARIA DE PRODUÇÃO FLORIANÓPOLIS*, v. 17, p. 592–619, 2017. Citado na página 39.
- GOMES, J. H. de F. *Método dos polinômios canônicos de misturas para otimização multiobjetivo*. [S.l.]: Tese (Doutorado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2013, 2013. 162 p. Citado 3 vezes nas páginas 1, 26 e 49.
- GOVINDALURI, S. M.; CHO, B. R. Robust design modeling with correlated quality characteristics using a multicriteria decision framework. *Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v. 32, p. 423–433, 2007. Citado na página 47.
- HAIR, J. F.; BLACK, W. C.; BABIN, B. J.; ANDERSON, R. E.; TATHAM, R. L. Multivariate data analysis 6th edition. *Pearson Prentice Hall. New Jersey. humans: Critique and reformulation. Journal of Abnormal Psychology*, v. 87, p. 49–74, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 22, 27 e 35.
- HAMMOUCHE, K.; DIAF, M.; SIARRY, P. A. A comparative study of various meta-heuristic techniques applied to the multilevel thresholding problem. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, v. 23, p. 676–688, 2010. Citado na página 39.
- HARRINGTON, E. J. The desirability function. *Industrial Quality Control*, v. 21, p. 494–498, 1965. Citado na página 46.
- HATDLE, W. K.; SIMAR, L. *Applied multivariate statistical analysis*. [S.l.]: 4 ed Springer, 2015. 581 p. (Métodos de OTIMIZAÇÃO). ISBN 9783662451700. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 33.

- HE, Z.; ZHU, P.-F.; PARK, S.-H. A robust desirability function method for multi-response surface optimization considering model uncertainty. *European Journal of Operational Research*, v. 221, n. 1, p. 241–247, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 44.
- HOLLAND, J. H. Adaptation in natural and artificial systems. *The University of Michigan Press*, v. 16, p. 3–8, 1975. Citado na página 42.
- HOTELLING, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. *International Journal Advanced Manufacturing Technology*, v. 24, p. 417–441, 1933. Citado na página 22.
- IGNÍZIO, J. P.; CAVALIER, T. M. *LINEAR PROGRAMMING*. [S.l.]: ENGLEWOOD CLIFFS PRENTICE HALL, 1994. 666 p. (MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO). ISBN 1. Citado na página 39.
- JAMES, G.; WITTEN, D.; HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R. *An Introduction to Statistical Learning*. [S.l.]: 1 ed. SPRINGER, 2013. 434 p. (MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO). ISBN 978-1-4614-7137-0. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 36.
- JIA, Z.; IERAPETRITOU, M. G. Generate pareto optimal solutions of scheduling problems using normal boundary intersection technique. *Computers & Chemical Engineering*, v. 31, n. 4, p. 268 – 280, 2007. ISSN 0098-1354. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135406001943>>. Citado na página 50.
- JIN, H.; WONG, M. L. Adaptive, convergent, and diversified archiving strategy for multiobjective evolutionary algorithms. *Expert Systems with Applications*, v. 37-12, p. 8462–8470, 2010. Citado na página 42.
- JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W. *Applied multivariate statistical analysis*. [S.l.]: Pearson Education Limited Essex, 2007. 773 p. (MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO). ISBN 9780131877153. Citado 12 vezes nas páginas 22, 23, 26, 27, 29, 32, 33, 35, 36, 46, 48 e 54.
- JUNIOR, L. P. N. *Otimização de um processo de solda MIG/MAG para aplicação na indústria automobilística através da utilização da técnica do projeto e análise de experimentos*. [S.l.]: Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2003, 2003. 111 p. Citado na página 8.
- KAISER, H. F. The varimax criterion for analytic rotation in factor analysis. *Psychometrika*, Springer, v. 23, n. 3, p. 187–200, 1958. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 59.
- KHURY, A.; MUKHOPADHYAY, S. Response surface methodology. *Wiley Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, Wiley, v. 2, p. 128–149, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 11.
- KHURY, A. I.; COLON, M. Simultaneous optimization of multiple responses represented by polynomial regression functions. *Technometrics*, v. 23, p. 363–375, 1981. Citado 5 vezes nas páginas 3, 19, 20, 21 e 46.

- KIM, I. J.; JEONG, K. J. Interactive desirability function approach multi-response surface optimization. *International Journal of Reliability, Quality and Safety Engineering*, v. 10, p. 205–217, 2003. Citado na página 45.
- KÖKSOY, O. Multiresponse robust design: Mean square error (mse) criterion. *Applied Mathematics and Computation*, v. 175-2, p. 1716–1729, 2006. Citado na página 46.
- KÖKSOY, O. A nonlinear programming solution to robust multi-response quality problem. *Applied Mathematics and Computation*, v. 196-2, p. 603–612, 2008. Citado na página 40.
- KÖKSOY, O.; DOGANAKSOY, N. Joint optimization of mean and standard deviation using response surface methods. *Journal of Quality Technology*, v. 35-3, p. 239–252, 2003. Citado na página 40.
- KÖKSOY, O.; YALCINOZ, T. Mean square error criteria to multiresponse process optimization by a new genetic algorithm. *Applied Mathematics and Computation*, v. 175-2, p. 1657–1674, 2006. Citado na página 40.
- LANCE, G. N.; WILLIAMS, W. T. A general theory of classificatory sorting strategies: I. hierarquical systems. *COMPUTER JOURNAL, LONDON*, v. 9, p. 373–380, 1967. Citado na página 37.
- LASDON, L. S.; WARREN, A. D.; JAIN, A.; RATNER, M. Design and testing of a generalized reduced gradient code for nonlinear programming. *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 4-1, p. 34–50, 1978. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 41.
- LEE, I. T.; CHUNG, H. W.; HUNG, C. C. Optimization of multiple responses using principal component analysis and technique for order preference by similarity to ideal solution. *International Journal Advanced Manufacturing Technology*, v. 27, p. 407–414, 2005. Citado na página 22.
- LEME, R. C.; PAIVA, A. P.; SANTOS, P. E. S.; BALESTRASSI, P. P.; GALVÃO, L. de L. Design of experiments applied to environmental variables analysis in electricity utilities efficiency: The brazilian case. *Energy Economics*, Elsevier, v. 45, p. 111–119, 2014. Citado na página 7.
- LIAO, H. C. Multi-response optimization using weighted principal component. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v. 27, p. 720–725, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 46.
- LIN, D. K. J.; TU, W. Dual response surface optimization. *Journal of Quality Technology*, v. 27, p. 34–39, 1995. Citado na página 46.
- LOPES, L. G. D.; BRITO, T. G.; PAIVA, A. P.; PERUCHI, R. S.; BALESTRASSI, P. P. Robust parameter optimization based on multivariate normal boundary intersection. *Computers Industrial Engineering*, v. 93, p. 55–66, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 26.
- LUENBERGER, D. G.; YE, Y. *Linear and nonlinear programming*. [S.l.]: 3 ed. Springer, 2008. 256 p. (MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO). ISBN 1. Citado na página 40.

- MARCONI, M. de A.; LAKATOS, E. M. *Fundamentos de metodologia científica*. [S.l.]: Editora da Atlas, 2017. 368 p. (Métodos de pesquisa). ISBN 9788597010121. Citado na página 5.
- MARTÍNEZ, J. M.; SANTOS, S. A. [S.l.]: EDITORA RIO DE JANEIRO:SOCIEDADE BRASILEIRA DE MATEMÁTICA, 1995. 256 p. (MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO). ISBN 1. Citado na página 40.
- MESSAC, A.; MATTSON, C. A. Generating well-distributed sets of pareto points for engineering design using physical programming. *Optimization and Engineering*, v. 3, p. 431–450, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 50.
- MONTGOMERY, D. *Design and Analysis of Experiments*. John Wiley & Sons, 2008. (Student solutions manual). ISBN 9780470128664. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=kMMJAm5bD34C>>. Citado 7 vezes nas páginas 4, 7, 9, 10, 11, 45 e 75.
- MYERS, R.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*. [S.l.]: 4 ed. WILEY, 2016. 856 p. (MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO). ISBN 978-1-118-91601-8. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 45.
- OKTEM, H.; ERZURUMLU, T.; KURTARAN, H. Application of response surface methodology in the optimization of cutting conditions for surface roughness. *Journal of Materials Processing Technology*, v. 170-1/2, p. 11–16, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 44.
- ORTZ, F. J.; SIMPSON, J. R.; PIGNATELLO, J. J.; HEREDIA, L. A genetic algorithm approach to multiple-response optimization. *Journal of Quality Technology*, v. 36, p. 432–450, 2004. Citado na página 45.
- OSBORNE, D. M.; ARMACOST, R. L.; PET-EDWARDS, J. State of the art in multiple response surface methodology. *IEEE International Conference on Computational Cybernetics and Simulation*, v. 4, p. 3833–3838, 1997. Citado na página 21.
- PAIVA, A. P.; COSTA, S. C.; FERREIRA, J. F.; BALESTRASSI, P. P.; PAIVA, E. J. Multiobjective optimization of pulsed gas metal arc welding process based on weighted principal component scores. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v. 50, p. 113–125, 2010. Citado na página 26.
- PAIVA, A. P.; PAIVA, E. J.; FERREIRA, J. R.; BALESTRASSI, P. P.; COSTA, S. C. A multivariate mean square error optimization of aisi 52100 hardened steel turning. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v. 43, n. 7, p. 631–643, 2009. ISSN 1433-3015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s00170-008-1745-5>>. Citado 5 vezes nas páginas 2, 26, 47, 54 e 55.
- PAIVA, A. P. de. *Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de Componentes Principais em otimização de processo de manufatura com múltiplas respostas correlacionadas*. [S.l.]: Tese (Doutorado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2006, 2006. 229 p. Citado na página 11.

- PAIVA, E. J. de; RODRIGUES, L. d. O.; COSTA, S. C. da; PAIVA, A. P. de; BALESTRASSI, P. P. Fcaw process optimization using the multivariate mean square error. *Welding International*, Taylor & Francis, v. 26, n. 2, p. 79–86, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 8.
- PASANDIDEH, S. H. R.; NIAKI, S. T. A. Multi-response simulation optimization using genetic algorithm within desirability function framework. *Applied Mathematics and Computation*, v. 175, p. 366–382, 2006. Citado na página 46.
- PEARSON, K. On line and planes of closest fit to systems of points in space. *Philos Mag*, v. 6, p. 559, 1901. Citado na página 22.
- PERUCHI, R. S.; PAIVA, A. P.; FERREIRA, J. F.; BALESTRASSI, P. P.; CARMELOSSI, M. S. A. A new multivariate gage rr method for correlated characteristics. *International Journal of Production Economics*, v. 144, p. 301–315, 2013. Citado na página 26.
- PIGNATIELLO, J. J. J. Strategies for robust multiresponse quality engineering. *IIE Transactions*, v. 25, p. 5–15, 1993. Citado na página 46.
- PRABHU, S.; VINAYAGAM, B. K. Multiobjective optimization of elid grinding process using grey relational analysis coupled with principal component analysis. *Advances in Mechanical Engineering*, v. 6, p. 1–12, 2014. Citado na página 26.
- RAO, S. S. *Engineering optimization: theory and practice*. [S.l.]: 4 ED. HOBOKEN: JOHN WILEY SONS, INC, 2009. 830 p. (Métodos de OTIMIZAÇÃO). ISBN 9780387714356. Citado na página 3.
- REDDY, P. V. V.; SHYAMALA, K. New scoring formula to rank hypervisors' performance complementing with statistical analysis using doe. *Future Generation Computer Systems*, Elsevier, v. 61, p. 54–65, 2016. Citado na página 7.
- RENCHER, A. C. *Methods of multivariate analysis*. [S.l.]: 2 ed J WILEY, 2002. 708 p. (Métodos de OTIMIZAÇÃO). Citado 2 vezes nas páginas 31 e 37.
- ROSENBROCK, H. H. A automatic method for finding the greatest or least value of a function. *THE COMPUTER JOURNAL*, v. 3-3, p. 175–184, 1960. Citado na página 56.
- SALMASNIA, A.; KAZEMZADEH, R. B.; NIAKI, S. T. A. An approach to optimize correlated multiple responses using principal component analysis and desirability function. *International Journal Advanced Manufacturing Technology*, v. 62, p. 835–846, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 25.
- SAMPAIO, P. R. Teoria, métodos e aplicações de otimização multiobjetivo. *UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO*, p. 95, 2011. Citado na página 50.
- SCREMIN, M. A. A. *Método para Seleção do Número de Componentes Principais com base na Lógica Difusa*. [S.l.]: Tese (Doutorado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, 2003. 124 p. Citado na página 25.

- SOUZA, A. M. *Monitoração e Ajuste de Realimentação em Processos Produtivos Multivariados*. [S.l.]: Tese (Doutorado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, 2000. 166 p. Citado na página 25.
- SPEARMAN, C. General intelligence objectively determined and measured. *American Journal of Psychology Champaign*, v. 15, p. 201–293, 1904. Citado na página 27.
- THURSTONE, L. L. Multiple factor analysis. *Psychological Review*, v. 38, p. 406–427, 1931. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 34.
- TIMM, N. H. *Applied multivariate analysis*. [S.l.]: Springer Verlag, 2002. 693 p. (Métodos de OTIMIZAÇÃO). Citado na página 29.
- TONG, L. I.; WANG, C. H.; CHEN, H. C. Optimization of multiple responses using principal component analysis and technique for order preference by similarity to ideal solution. *Internacional Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v. 27, p. 407–414, 2005. Citado na página 1.
- VAHIDINASAB v.; JADID, S. Normal boundary intersection method for suppliers strategic bidding in electricity markets: An environmental / economic approach. *Energy Conversion and Management*, v. 51, p. 1111–1119, 2010. Citado na página 50.
- VINING, G.; MYERS, R. H. Combining taguchi and response surface philosophies: A dual response approach. *Journal of Quality Technology*, v. 22, p. 38–45, 1990. Citado na página 46.
- VINING, G. G. A. A compromise approach to multiresponse optimization. *Journal of Quality Technology*, v. 30, p. 309–313, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 47.
- WANG, C. H. Dynamic multi-response optimization using principal component analysis and multiple criteria evaluation of the grey relation model. *Internacional Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v. 32, p. 617–624, 2007. Citado na página 1.
- WANG, S.-G.; HSU, Y. L. One-pass milling machining parameter optimization to achieve mirror surface roughness. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture*, v. 219, n. 1, p. 177–181, 2005. Citado na página 78.
- WARD, J. H. Hierarchical grouping to optimize an objective function. *Journal of the American statistical association*, Taylor & Francis, v. 58, n. 301, p. 236–244, 1963. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 38.
- WEISE, T. *Global Optimization Algorithms – Theory and Application*. [S.l.]: 2 ed J WILEY, 2009. 708 p. (Métodos de OTIMIZAÇÃO). Citado 2 vezes nas páginas 39 e 42.
- WILLIAMS, B.; ONSMAN, A.; BROWN, T. Exploratory factor analysis: A five-step guide for novices. *Australasian Journal of Paramedicine*, v. 8, n. 3, 2010. Citado na página 27.
- WOLFE, P. The reduced gradient method. in: Recent advances in mathematical programming. *New York: R. L.*, v. 1, 1963. Citado na página 40.

WU, F. C.; CHYU, C. C. Optimization of correlated multiple quality characteristics robust design using principal component analysis. *Journal Manufature System*, v. 2, p. 134–143, 2004. Citado na página 26.

ZAIN, A. M.; HARON, H.; SHARIF, S. Application of ga to optimize cutting conditions for minimizing surface roughness in end milling machining process. *Expert Systems with Applications*, v. 37-6, p. 4650–4659, 2010. Citado na página 42.

Appendices

