UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

Paulo Roberto Maia

MÉTODO DO VETOR GRADIENTE MULTIVARIADO

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção como requisito parcial à obtenção do título de *Mestre em Engenharia de Produção*

Orientador: Prof. Anderson Paulo de Paiva, Dr.

Itajubá 2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

Paulo Roberto Maia

MÉTODO DO VETOR GRADIENTE MULTIVARIADO

Dissertação aprovada por banca examinadora em 22 de Novembro de 2013, conferindo ao autor o título de *Mestre em Engenharia de Produção*

Banca Examinadora:

Prof. Dr. José Henrique de Freitas Gomes (ASMEC)Prof. Dr. Rafael Coradi Leme (UNIFEI)Prof. Dr. Anderson Paulo de Paiva (Orientador)

Itajubá 2013

AGRADECIMENTOS

A Deus sede de toda sabedoria e misericórdia.

A Santíssima Virgem Maria minha mestra e protetora.

A minha mãe Teresa por acreditar primeiro, aos meus sogros Benedita e Joaquim, por continuar acreditando.

A minha esposa Fabiana, por sonhar os sonhos de Deus para mim.

Aos meus filhos, Gabriel, Pedro Paulo e Matias, amor e alegria incondicionais em cada dia da minha vida.

Ao prof. Dr. Anderson Paulo de Paiva, orientador e amigo, pela compreensão, generosidade e competência transmitidas em todos os momentos, seus exemplos são para toda vida.

Ao prof. Dr. José Henrique de Freitas Gomes, pelas contribuições.

Ao prof. Dr. Rafael Coradi Leme, pela compreensão e apoio nos momentos decisivos.

Aos meus amigos de pós-graduação, Rogério Santana Peruchi, Luiz Gustavo Dias Lopes, Pedro José Papandrea, Tarcísio Gonçalves de Brito e Michele de Santana Carmelossi, pelos conselhos e ajuda.

Aos amigos e colegas do IEPG, pelo carinho e amizade durante o período de convivência.

A cada familiar, amigo e irmão de caminhada que me apoiaram, durante o período de desenvolvimento deste trabalho.

"Em tudo dai graças, porque esta é a vontade de Deus em Cristo Jesus para convosco" 1 Ts. 5:18

Decolores!

RESUMO

Nos processos reais, múltiplas características de qualidade de um produto devem ser atendidas simultaneamente, as quais determinam o desempenho do produto durante seu uso. Analisar estas respostas de forma isolada pode conduzir a resultados conflitantes, principalmente quando as respostas são correlacionadas. Um experimento realizado inicialmente em um novo processo de produção, pouco compreendido, as chances são de que as condições de operação inicial x₁, x₂,..., x_k estarão localizados longe da região no qual os fatores possam atingir um valor máximo ou mínimo para a resposta de interesse. O conceito de variância integrada restringe estes pontos iniciais para dentro da região de interesse com o mínimo de dispersão entre os dados. A ACP é utilizada para combinação linear das respostas originais com redução de dimensionalidades sem perda das informações originais. De acordo o objetivo estabelecido define-se o melhor escore de componente principal como ponto central do experimento, constrói o arranjo fatorial de dois níveis (baixo e alto). Com os níveis definidos estimam-se os modelos lineares codificados para as respostas correlacionadas. Em seguida são calculados os pesos para as respostas correlacionadas, para isto utiliza-se cone de confiança, que além da definição do peso para cada resposta, ele determina o grau de confiança para o tamanho do passo no sentido da direção de máxima ascensão ou íngreme descida definida pelo MVG até uma nova região na qual o processo ou produto pode ser melhorado, experimentos são realizados ao longo da direção definida até que não exista melhora na resposta. Um novo experimento para determinar a nova direção é realizado, este processo é repetido até o encontro de algum ponto significativo na curvatura. Um arranjo de superfície de resposta é conduzido para encontrar os pontos ótimos do processo. Para confirmar a eficiência do método proposto, foi realizada uma simulação utilizando como base de dados os experimentos feitos por Gomes (2010). Os resultados obtidos validam o método proposto para respostas com correlação alta, média e baixa.

Palavras-chave: Análise de Componentes Principais, Cone de Confiança, Variância Integrada, Método Vetor Gradiente, Metodologia de Superfície de resposta, Projeto e Análise de Experimentos.

ABSTRACT

In multivariate processes, to evaluate product performance, multiple characteristics must achieve simultaneously a desirable result. Conflicting results may be obtained when assessing these responses individually, due to the correlation structure among the characteristics. For unknown processes, it is likely that control variables are setup at non optimal conditions. In such case, the concept of integrated variance leads these initial points toward an optimal region at minimum variance. PCA is a linear combination of original variables for reducing problem dimensionality with no loss of original information. Accordingly, the objective statement defines the best score of principal component as center point, and then it is built a 2k factorial design. Based on the pre-defined levels, it is estimated coded linear models for correlated characteristics. After that, weights for correlated responses are calculated using confidence cone. This approach determines not only the weights, but also the degree of confidence to the step length toward the steepest ascent or descent. The MVG procedure is performed as many times as no improvement is obtained to the response. To determine the new direction, more experiments are performed up to the point that the curvature is considered significant. A response surface design is conducted in order to find optimal points to the process. Simulation studies based on Gomes' (2010) experiments were applied to validate the proposed method. The research findings have proved the method effectiveness for high, medium and low correlation structure among variables

Keywords: Principal Component Analysis, Confidence Cone, Integrated Variance, Vector Gradient Method, Response Surface Methodology, Design and Analysis of Experiments

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Sequencia natural da MSR	9
Figura 2.2 – Comportamento das respostas em função das configurações dos fatores	10
Figura 2.3 – Arranjo composto central para três fatores	11
Figura 2.4 – Método vetor gradiente para direção de máxima ascensão	14
Figura 2.5 – Cone de confiança para o caminho de máxima ascensão em um experimento	com
dois fatores	23
Figura 2.6 – Vetores envolvidos na expressão do cone de confiança	24
Figura 2.7 – Fração de direções excluídas pelo cone de confiança	26
Figura 2.8 – Distância dada pelo teorema de Pitágoras	33
Figura 2.9 – Gráfico de dispersão com maior variabilidade dos dados na direção de x_{1}	33
Figura 2.10 – Elipse com distância constante da origem	34
Figura 2.11 – Gráfico de dispersão para correlação positiva com rotação do sistem	na de
coordenadas	35
Figura 2.12 – Interpretação geométrica da ACP (Johnson e Wichern, 2007)	37
Figura 2.13 – Elipse de densidade constante com $\mu = 0$	43
Figura 2.14 – Elipse de distância constante centrada em \bar{x} , $\hat{\lambda}_1 > \hat{\lambda}_2$	44
Figura 2.15 – Elipse de distância constante centrada em \bar{x} , $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$	45
Figura 3.1 – Fluxograma do método proposto para otimização multivariada	49
Figura 4.1 – Estrutura de correlação entre as respostas	55
Figura 4.2 – Caminho de máxima ascensão para W, TD e PCW	60
Figura 4.3 – Caminho de máxima ascensão para D, TD e PCW	64
Figura 4.4 – Caminho de máxima ascensão para W, η e PCW	<u>67</u>
Figura 4.5 – Caminho de máxima ascensão para R, D e PCW	70
Figura 4.6 – Caminho de máxima ascensão para W, η e PCW	73

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Características fundamentais das principais técnicas do Projeto e As	nálise de
Experimentos (Adaptado de NILO JÚNIOR, 2003)	7
Tabela 2.2 – Resumo das propriedades dos três tipos de CCD	
Tabela 2.3 – Proporção de direções excluídas pelo cone de confiança	27
Tabela 4.1 – Parâmetros variáveis e níveis de trabalho	
Tabela 4.2 – Parâmetros fixos	53
Tabela 4.3 – Composição química (%) do metal base e metal de adição	53
Tabela 4.4 – Objetivos das respostas a serem avaliadas	53
Tabela 4.5 – Matriz experimental	
Tabela 4.6 – Coeficientes estimados para os modelos quadráticos reduzidos	55
Tabela 4.7 – Definição dos parâmetros para mínima variância	57
Tabela 4.8 – Experimentos iniciais aleatórios	57
Tabela 4.9 – Escores de componentes principais para respostas W e TD	57
Tabela 4.10 – Matriz experimental para W e TD	58
Tabela 4.11 – Coeficientes estimados do modelo linear para W e TD	
Tabela 4.12 – Caminho de máxima ascensão para PCW de W e TD	60
Tabela 4.13 – Escores de componentes principais para respostas D e TD	61
Tabela 4.14 – Matriz experimental para D e TD	
Tabela 4.15 – Coeficientes estimados do modelo linear para D e TD	
Tabela 4.16 – Caminho de máxima ascensão para PCW de D e TD	63
Tabela 4.17 – Escores de componentes principais para respostas W e η	64
Tabela 4.18 – Matriz experimental para W e η	65
Tabela 4.19 – Coeficientes estimados para o modelo linear para W e η_{-}	
Tabela 4.20 – Caminho de máxima ascensão para PCW de W e η_{\dots}	66
Tabela 4.21 – Escores de componentes principais para respostas R e D	67
Tabela 4.22 – Matriz experimental para <i>R</i> e <i>D</i>	68
Tabela 4.23 – Coeficientes estimados para o modelo linear para <i>R</i> e <i>D</i>	69
Tabela 4.24 – Caminho de máxima ascensão para PCW de <i>R</i> e <i>D</i>	

Tabela 4.25 – Escores de componentes principais para respostas P e $D_{___}$	70
Tabela 4.26 – Matriz experimental para <i>P</i> e <i>D</i>	<u>71</u>
Tabela 4.27 – Coeficientes estimados para o modelo linear para $P \in D_{}$	72
Tabela 4.28 – Caminho de máxima ascensão para PCW de <i>P</i> e <i>D</i>	72

LISTA DE QUADROS

Quadro 2.1 – Objetivos de otimização no Método de Derringer	21
Quadro 2.2 – Relações de importância entre alvo e os limites no Desirability	22

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas		
ACP	Análise de Componentes Principais		
CCC	Arranjo Composto Circunscrito		
CCD	Arranjo Composto Central ou Central Composite Design		
CCF	Arranjo Composto de Face Centrada		
CCI	Arranjo Composto Inscrito		
CPP	Componente Principal Ponderado		
DOE	Design of Experiments ou Projeto e Análise de Experimentos		
IGM	Índice Global Multivariado		
MSR	Metodologia de Superfície de Resposta		
MVG	Método Vetor Gradiente		
OLS	Ordinary Least Squares ou Mínimos Quadrados Ordinários		
PC_1	Primeiro componente principal		
PC_2	Segundo componente principal		
RPD	Robust Parameter Design ou Parâmetros do Projeto Robusto		

LISTA DE SÍMBOLOS

η	Rendimento do processo
ρ	Tamanho do passo
Σ	Somatório
$\mid b_i \mid$	Coeficiente de regressão absoluta
D	Diluição
g	Gradiente
Ι	Variância Integrada
Ν	Distância do bico de contato peça
Р	Penetração
R	Reforço
R^2	Coeficiente de determinação
$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$	Correlação
S	Aspecto superficial
Т	Tensão
Та	Ângulo da tocha
TD	Taxa de deposição
TF	Taxa de fusão
t_s	Tempo de soldagem
Va	Velocidade de alimentação do arame
Vs	Velocidade de soldagem
W	Largura do cordão
X	Variáveis independentes
у	Resposta de interesse
W	Frações de direções excluídas pelo cone de confiança
α	Distância dos pontos axiais em relação aos pontos centrais
β	Coeficiente do modelo matemático a ser estimado
3	Erro experimental

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	1
	1.1. Importância do tema	1
	1.2. Objetivos	2
	1.3. Justificativas	2
	1.4. Limitações	3
	1.5. Estrutura do trabalho	3
2.	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	4
	2.1. Considerações iniciais	4
	2.2. Projeto e Análise de Experimentos	4
	2.3. Metodologia de Superfície de Resposta	8
	2.4. Método vetor gradiente	13
	2.4.1. Efeito da escala sobre a escolha do intervalo de fatores	15
	2.5. Múltiplas respostas	. 16
	2.5.1. Prioridade Ponderada	. 18
	2.5.2. Método Desirability	19 22
	2.6. Cone de contrança	22
	2.7. Variancia integrada	. 28
	2.8. Analise de componentes principais	. 32
2	2.9. Considerações finais do capítulo	. 47
3.	METODO EXPERIMENTAL	49
	3.1. Considerações iniciais	49
	3.2. Desenvolvimento do método	49
	3.3. Considerações finais do capítulo	51
4.	SIMULAÇAO COMPUTACIONAL DO METODO	52
	4.1. Considerações iniciais	52
	4.2. Base de dados	52
	4.3. Caso Nº1 – Estrutura de correlação baixa, sem conflitos de mínimos e máximos	. 57
	4.4. Caso N°2 – Estrutura de correlação baixa, com conflitos de mínimos e máximos	. 61
	4.5. Caso N°3 – Estrutura de correlação média, sem conflitos de mínimos e máximos	64
	4.6. Caso Nº4 – Estrutura de correlação média, com conflitos de mínimos e máximos	. 67
	4.7. Caso Nº5 – Estrutura de correlação alta, sem conflitos de mínimos e máximos	70
	4.8. Considerações finais	73

5. CONCLUSÕES	74
5.1. Conclusões gerais	74
5.2. Contribuições do trabalho	74
5.3. Sugestões para estudos futuros	74
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75

1. INTRODUÇÃO

1.1. Importância do tema

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 isolada 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 de fatores importantes, porque o nível de um fator pode melhorar a qualidade de uma resposta, mas piorar a de outra Chiao e 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 (2006).

Alguns métodos não consideram todas as respostas simultaneamente, outros a estrutura de correlação entre as respostas são descartadas, podendo levar a um erro de determinação do ponto ótimo. A ACP é utilizada para análise de respostas correlacionadas. Porém há vários critérios para escolha dos componentes principais, conforme citado por alguns autores existem algumas dificuldades para ACP como correlações opostas (máximo e mínimo) e baixa correlação entre as variáveis originais e definição do sentido de otimização de uma equação em termos de componentes principais que reflita o sentido esperado pelas funções originais, o presente trabalho dedicou a aplicação do método do vetor gradiente multivariado através da ACP ponderados pelo método de cone de confiança, responsável por garantir uma direção precisa para os componentes principais.

1.2. Objetivos

Este trabalho foi desenvolvido com o propósito de cumprir com três objetivos principais:

- 1°) Desenvolver uma abordagem multivariada baseada na Análise de Componentes Principais (ACP) para o Método do Vetor Gradiente (MVG) aplicada a múltiplas respostas correlacionadas.
- 2°) Aplicar o Método do Vetor Gradiente Multivariado na otimização do processo de soldagem.

1.3. Justificativas

Processos reais precisam ser otimizados com relação a vários critérios simultaneamente. A definição dos parâmetros de entrada do processo demanda alto custo, principalmente quando o processo é novo.

Em um processo de fabricação, há pelo menos duas respostas a ser otimizadas, o ajuste para uma resposta pode influenciar no ajuste das outras, principalmente quando as características de qualidade tem objetivos diferentes, na maioria das vezes estas características são tratadas de forma isolada, a correlação entre as respostas são negligenciadas, a presente pesquisa busca preencher esta lacuna da seguinte forma:

- Compreensão da influência da estrutura de correlação nas variáveis de resposta que caso seja negligenciada pode levar a pontos de ótimo inapropriado.
- Desenvolver método capaz de encontrar pontos de ótimo independente da estrutura de correlação entre as repostas.
- A aplicação do método vetor gradiente multivariado através da análise de componentes principais em processos de fabricação, tem o objetivo de reduzir o número de tentativas para encontrar parâmetros adequados ao processo.

1.4. Limitações

O presente trabalho encontra-se limitado pelos seguintes elementos:

- As respostas devem ser correlacionadas.

- A análise de componentes principais foi realizada apenas para duas respostas.

- O método vetor gradiente foi utilizado para deslocamento até o ponto de curvatura.

1.5. Estrutura do trabalho

Este trabalho esta organizado da seguinte forma:

O **Capítulo 2** apresenta a revisão bibliográfica dos principais conceitos aplicados nesta pesquisa, incluindo trabalhos publicados no meio científico.

O **Capítulo 3** apresenta o método proposto para otimização de processos com múltiplas respostas correlacionadas.

O **Capítulo 4** apresenta uma simulação computacional para validação do método, foi utilizado como base de dados os experimentos realizados em um processo de soldagem com arame tubular para revestimentos em chapas de aço carbono ABNT 1020 com aço inoxidável ABNT 316L.

O Capítulo 5 apresenta as conclusões, contribuições e sugestões para trabalhos futuros.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. Considerações iniciais

Este capítulo tem o objetivo de apresentar a fundamentação teórica do Método de Vetor Gradiente aplicado a respostas correlacionadas na busca de uma região onde pode-se realizar a otimização. Os conceitos sobre Projeto e Análise de Experimentos são essenciais para a aplicação do Método de Vetor Gradiente, assim como a Metodologia de Superfície de Respostas (MSR) é empregada para realizar a otimização dos parâmetros de entrada de processos de manufatura.

Em processos com múltiplas respostas, mais de uma característica de qualidade deve ser atendida, assim o método Cone de Confiança é utilizado para determinar dentre as direções dos vetores gradiente, com certa probabilidade, qual seria o verdadeiro gradiente dos sistema.

O conhecimento da metodologia estatística multivariada da Análise Componentes Principais (ACP) é fundamental para otimização simultânea com múltiplas respostas correlacionadas. Para insuficiência de representação do primeiro componente principal, os componentes significativos são ponderados pelo Índice Global Multivariado (IGM).

2.2. Projeto e Análise de Experimentos

A técnica de projeto e análise de experimentos é uma metodologia relativamente antiga, desenvolvida por Ronald A. Fisher, entre 1920 e 1930, sendo posteriormente aperfeiçoada por outros importantes pesquisadores como Box, Hunter e Taguchi, dentre outros.

Fisher através de trabalhos realizados no *Rothamsted Agricultural Experimental Station* em Londres, na Inglaterra, descobriu que falhas no modo como a experiência é realizada interferem na análise dos os dados, definiu-se então os três princípios básicos do Projeto de Experimentos, a aleatorização, a replicação e a blocagem. A aleatorização consiste na execução dos experimentos em ordem aleatória para que os efeitos desconhecidos dos fenômenos sejam distribuídos entre os fatores, aumentando a validade da investigação. A replicação é a repetição de um mesmo teste várias vezes, criando uma variação para a variável de resposta utilizada para avaliação do erro experimental. A blocagem deve ser utilizada quando não for possível manter a homogeneidade das condições experimentais. Esta técnica permite avaliar se a falta de homogeneidade interfere nos resultados Montgomery (2009).

Experiências são realizadas em praticamente todos os campos de pesquisa, com o objetivo de descobrir algo sobre um determinado processo ou sistema. Define-se um

experimento como um teste ou uma série de testes em que as alterações propositais são feitas para as variáveis de entrada de um processo ou sistema, para que se possa entender e identificar as razões para as mudanças que podem ser observadas na resposta. Na engenharia, a experimentação desempenha um papel importante no projeto de novos produtos, desenvolvimento de processos de fabricação e melhoria de processos Montgomery (2009).

Segundo o mesmo autor, define-se processo como uma combinação de máquinas, métodos, pessoas e outros recursos que transforma alguma entrada para uma saída que tem uma ou mais respostas observáveis. As variáveis do processo x_1, x_2, \ldots, x_p são controláveis, enquanto que outras variáveis Z_1, Z_2, \ldots, Z_q , são incontroláveis. Os objetivos da experiência podem incluir o seguinte:

1. Determinar quais variáveis possuem maior influência na resposta y;

2. Determinar valor atribuído aos *x*'s que influenciam de modo que *y* esta quase sempre perto do valor nominal desejado;

3. Determinar valor atribuído aos x's que influenciam na variabilidade de y.

4. Determinar valor atribuído aos x's que influenciam de modo que os efeitos das variáveis não controláveis Z_1, Z_2, \ldots, Z_q sejam minimizados.

Experimentos muitas vezes envolvem vários fatores. Normalmente, um dos objetivos é o de determinar a influência que estes fatores têm sobre a resposta de saída do sistema.

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, 2009).

Método Fatorial Completo – os fatores são alterados conjuntamente, avaliando interações entre os fatores. Uma alternativa ao planejamento fatorial é a mudança dos fatores um de cada vez em vez de variá-los simultaneamente. O tipo mais simples de experimento fatorial envolve somente dois fatores, sendo um planejamento completamente aleatorizado. É utilizado análise de variância para estudo do experimento (Montgomery, 2009).

Entretanto, vários casos especiais do planejamento fatorial geral são importantes por serem utilizados em larga escala em pesquisas e por formarem a base de outros planejamentos. O mais importante desses casos especiais é aquele de k fatores, cada um com somente dois níveis. Esses níveis podem ser quantitativos, tais como os dois valores da temperatura, pressão ou tempo, ou eles podem ser qualitativos, tais como duas máquinas, dois operadores, os níveis "alto" e "baixo" de um fator, ou talvez a presença e a ausência de um fator. Uma réplica completa de tal planejamento requer 2^k observações, sendo chamado planejamento fatorial 2^k (Montgomery, 2009).

À medida que o número de fatores em um planejamento fatorial 2^k aumenta linearmente, o número requerido de experimentos aumenta exponencialmente. Por exemplo, 2^5 requerem 32 experimentos. Existem muitas interações de ordens altas, a maioria das quais geralmente descartadas. Como alternativa, para reduzir o número de experimentos, utiliza-se o método de Taguchi para filtrar as variáveis, de forma a estabelecer quais podem ser desconsideradas do processo sem que ocorram interferências na resposta ou o Plackett-Burman que é um arranjo fracionário para avaliar apenas os efeitos principais (Montgomery, 2009).

Fatorial Fracionado – o número de corridas necessárias para um fatorial completo se torna rapidamente inviável financeiramente. Por exemplo, um fatorial completo 2^6 requer 64 experimentos. Neste projeto apenas 6 dos 63 graus de liberdade correspondem aos efeitos principais, e apenas 15 graus de liberdade correspondem a interações com dois fatores, os restantes 42 graus de liberdade estão associados a 3 fatores e interações mais elevadas. É razoável assumir que certas interações de ordem alta são desprezíveis, informações sobre os efeitos principais e interações de ordem baixa pode ser obtido executando apenas uma fração do experimento fatorial completo. Estes projetos fatoriais fracionários estão entre os mais utilizados em projetos de produto e processo. A grande utilização de fatoriais fracionários é em experimentos de triagem. Estes são experimentos em que muitos fatores são considerados e o objetivo é identificar os fatores que possuem grandes efeitos. Experiências são normalmente realizados nos estágios iniciais do projeto, quando é provável que muitos dos elementos inicialmente considerados tenham pouco ou nenhum efeito sobre a resposta. Os fatores que são identificados como importantes são, então, investigados mais a fundo nos experimentos posteriores.

Método Taguchi – o engenheiro japonês e consultor Genichi Taguchi introduziu o importante conceito na literatura em experimentos chamado de fatores de ruído ou fatores incontroláveis, a percepção de Taguchi foi notar que esses fatores podem em muitos casos ser controláveis (variáveis) durante uma experiência conduzida cuidadosamente. Realizam-se

experimentos modificando os fatores de controle, obtém assim o desenvolvimento de um modelo em que as respostas são uma função de ambos os fatores controláveis e os fatores de ruído. O termo robusto consiste em utilizar esse modelo para otimizar os fatores controláveis, de tal forma que a solução é insensível ou robusta as variações dos fatores de ruído, os fatores de controle são os Parâmetros do Projeto Robusto enquanto os ruídos são fatores não controláveis ou cujo custo de controle seja oneroso Phadke (1989) e Castilho (2007).

Com relação aos projetos experimentais, a *Tabela 2.1*, apresentada por Nilo Júnior (2003), reúne as principais características relacionadas a cada uma dessas técnicas experimentais.

Projeto experimental	Projeto Vantagens Desvantagens		Aplicações
Fatorial CompletoPermite a varredura completa da região de estudo, pois utiliza todos os fatores e respectivos 		Não identifica variação intermediária, pois só 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
TaguchiPermite a análise de um processo com muitas variáveis de entrada com um número extremamente reduzido de experimentos		Fornece 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 RespostaPermite 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

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

2.3. Metodologia de Superfície de Resposta

A Metodologia da Superfície de Resposta (Response Surface Metodology – RSM) é uma 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, 2009) e He et al (2012). A MSR originou no trabalho de Box e Wilson em 1951 em processos químicos.

Projetos com RSM são usados para:

- Encontrar as configurações de processo melhores ou ótimas;
- Solucionar problemas de processo e pontos fracos;

- Fazer um produto ou processo mais robusto contra influências externas e 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 MSR 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 pelo modelo:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + ... + \beta_k x_k + \varepsilon$$
 (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

Uma aproximação polinomial de segunda ordem como descrito pela deve ser realizada caso exista curvatura no modelo de primeira ordem apresentado.

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

Tais modelos (modelo de primeira e segunda ordem) são chamados empíricos. Estes modelos são muito utilizados em problemas de superfície de resposta para uma região específica, a fim de chegar às condições operacionais ótimas com as variáveis de controle que maximizam (ou minimizar) a resposta prevista Montgomery (2009), Box e Draper (1987). Contudo, é improvável que o modelo polinomial se comporte como uma aproximação adequada para todo o espaço experimental coberto pelas variáveis independentes.

O método dos mínimos quadrados é tipicamente usado para estimar os coeficientes do modelo (β) da Eq.(2.2) Montgomery (2009).

RSM é um procedimento sequencial, geralmente quando se esta em um ponto na superfície de resposta que é afastada da região de ótimo, há pouca curvatura no sistema e o modelo de primeira ordem é apropriado. O objetivo é de deslocar com rapidez e eficiência até a região de ótimo. Uma vez que a região é encontrada, um modelo mais elaborado, tal como o modelo de segunda ordem, pode ser empregado. A partir da *Figura 2.1*, vê-se que a análise de uma superfície de resposta pode ser considerada como máxima ascensão, se o ideal é um ponto de mínimo, íngreme descida Montgomery (2009).



Figura 2.1 – Sequência natural do MSR.

A *Figura 2.2* ilustra possíveis comportamentos de respostas como funções de configurações de fatores, o projeto da matriz para quantificar o comportamento que deve conter apenas fatores com dois níveis *Figura 2.2a* (baixo e alto). Este modelo é um pressuposto básico de dois níveis fatoriais e fatoriais fracionários. Se uma resposta comportase como na *Figura 2.2b*, o número mínimo requerido de níveis de um fator para quantificar o comportamento é três. Seria lógico supor que a adição de pontos centrais para um projeto de dois níveis poderia satisfazer esse requisito, mas o arranjo dos tratamentos em tal matriz confunde todos os efeitos quadráticos um com o outro. Enquanto um projeto de dois níveis com pontos centrais não pode estimar efeitos quadráticos individuais puros, pode detectá-los de forma eficaz. Uma solução para a criação de um projeto de matriz que permite a estimativa de curvatura simples, como mostrado na *Figura 2.2b* seria a utilização de um modelo fatorial com três níveis.

Nos casos mais complexos, como ilustrado na *Figura 2.2c* o projeto da matriz deve conter pelo menos quatro níveis de cada um dos fatores para caracterizar o comportamento da resposta adequada.



Figura 2.2 - Comportamento das respostas em função das configurações dos fatores

Antes de explorar o caminho de máxima ascensão, a adequação do modelo de primeira ordem deve ser investigada. O fatorial 2² 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).

Esta 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 (*center point*), para fatorial 2² adiciona-se pontos intermediários de *center points* iguais a 0, aos níveis -1 e +1, a diferença entre as médias das respostas dos fatoriais e *center points* for pequena, então o *center point* 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. Uma visão mais detalhada envolvendo o Método dos Mínimos Quadrados, Análise de Variância e ajuste dos modelos pode ser observada em Paiva (2006), juntamente com outras análises importantes como a análise de resíduos e o teste de falta de ajuste (*Lack-of-fit*).

O arranjo experimental mais utilizado em Metodologia de Superfícies de Resposta para modelos de segunda ordem é o arranjo composto central (*Central Composite Design – CCD*). Outro arranjo que também pode ser utilizado é o arranjo de Box-Behnken, porém pouco aplicado em comparação ao emprego do CCD.

Segundo Box e Wilson (1951) e Khuri e 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 (2k)

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 (2009).

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.



Figura 2.3 – Arranjo composto central para três fatores

Onde α é a distância entre o centro e os pontos axiais.

Tabela 2.2 – Resumo	das propriedades	dos três tipos de	CCD
---------------------	------------------	-------------------	-----

Tipo de CCD	Terminologia	Comentários
		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
Circunscrito	CCC	as configurações de baixa e alta para todos os fatores.
Circuiserito		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.
		Para as situações em que os limites especificados para as
	CCI	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
Inscrito		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.
		Neste projeto os pontos axiais são o centro de cada face
		do espaço fatorial, $\alpha = \pm 1$. Esta variedade requer três
Face centrada	CCF	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 e Drapper (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 precisão satisfazer várias condições ou restrições m sobre as respostas, $y_1, ..., y_m$. 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).

2.4. Método vetor gradiente

Uma experimentação é realizada inicialmente em um novo processo de produção, pouco compreendido, as chances são de que as condições de operação inicial x_1 , x_2 ,..., x_k , estão localizados longe da região no qual os fatores possam atingir um valor máximo ou mínimo para a resposta de interesse.

Segundo Box e Wilson (1951) quando o erro experimental é pequeno, o experimento inicial envolvendo fatores quantitativos deve ser limitado a uma sub-região pequena da região experimental viável. Neste caso, uns pequenos números de ensaios permitiram estimar efeitos principais lineares para os fatores, e este vetor de estimativas proporciona uma direção de busca de que deve trazer melhoria rápida na resposta à medida que se afasta da sub-região inicial. A direção de respostas a ser aumentada ou diminuída é denominada direção de máxima ascensão ou íngreme descida (Path of Steepest Ascent or Descent).

O método vetor gradiente busca uma nova região na qual o processo ou produto pode ser melhorado. O delineamento experimental, modelo de construção, e experimentação sequencial que são usados na busca por uma região de melhor resposta constituem o método de direção de máxima ascensão.

Para descobrir a direção de melhoria deve-se manter o experimento ao longo da direção de máxima ascensão até que a resposta não experimente melhorias adicionais.

Como o resultado da operação pode envolver mais do que uma experiência, a simplicidade do modelo é muito importante. Assume-se que um modelo de primeira ordem Eq.(2.5) é uma aproximação razoável do sistema na região inicial de $x_1, x_2, ..., x_k$.

Tal método inclui as seguintes etapas:

- 1- Ajuste do modelo de primeira ordem, utilizando um projeto ortogonal.
- 2- Calculo da direção de máxima ascensão se a resposta requerida for maximizar. Cálculo da direção de íngreme descida, se a resposta requerida for minimizar.

- 3- Realização de ensaios experimentais ao longo da direção, até que não exista melhora na resposta.
- 4- Um novo experimento deve ser conduzido para determinar uma nova direção. Este processo é repetido até que em algum ponto significativo na curvatura é detectado.
- 5- Realização de um arranjo de superfície de resposta, tal como um arranjo composto central (CCD).



Figura 2.4 – Método vetor gradiente direção de máxima ascensão

As coordenadas ao longo da direção de máxima ascensão dependem dos sinais e magnitudes dos coeficientes de regressão do modelo de primeira ordem montado, para máxima ascensão o sinal do coeficiente deve ser a referência para a direção, para íngreme descida a direção deve ser oposta ao sinal do coeficiente.

Escolher um tamanho de passo de uma das variáveis de processo, por exemplo, Δxi geralmente, é selecionado a variável que se conhece mais sobre ela, ou seleciona a variável que tem o maior coeficiente de regressão absoluta | *bi* |, Myers et al (2009).

Os tamanhos dos passos das variáveis é dado por:

$$\Delta x_j = \frac{b_j}{b_i/\Delta x_i} \qquad i = 1, 2 \dots, k \quad i \neq j$$
(2.3)

Converte o Δx_j das variáveis codificadas para as variáveis naturais.

Algumas observações importantes sobre a máxima ascensão

1- Máxima ascensão é uma técnica de otimização de primeira ordem baseada em gradiente, Quando usado próximo de um ponto extremo na superfície de resposta

verdadeira, máxima ascensão normalmente irá resultar em um passo muito pequeno a partir do ponto de partida. Esta pode ser uma indicação para expansão do modelo de ordem superior.

- 2- Outras técnicas de otimização de primeira ordem pode ser utilizado como alternativa ao do gradiente. Estes procedimentos de máxima ascensão ou íngreme descida não fornece a realimentação de informações de processo sobre os efeitos de fatores obtidos a partir do planejamento fatorial.
- 3- Se a resposta mudar lentamente, o tamanho do passo pode ser aumentado, porém, é fácil ultrapassar a região do ótimo, se o tamanho do passo for muito grande.

A partir de algumas condições de operação dadas, a prática recomendada é executar um experimento fatorial com dois níveis e pontos centrais replicados para permitir testar a falta de ajuste e de curvatura. Se há evidência de falta de ajuste ou de curvatura, devem-se adicionar pontos ao fatorial de dois níveis, de modo que um modelo de segunda ordem pode ser estimado.

Box e Wilson (1951) afirmam que para a busca de máxima ascensão deve-se tomar cuidado com a regra da parada, se a resposta cai pela primeira vez, pode perder o máximo real, a queda observada pode ser devida ao ruído.

Box e Wilson (1951) observou isso, mencionando que os valores de resposta observada poderia ser utilizado para testar a diferença da resposta média, e alerta que o procedimento máxima ascensão é útil em condições de baixo ruído.

Sobre o processo de máxima ascensão, como proposto na Box e Wilson (1951) se refere ao modelo assumido. Para um experimento fatorial com dois níveis, a negligência de interações de fatores é devido ao fato de na fase inicial da experimentação as interações são dominadas pelos efeitos principais.

Segundo Myers e Montgomery (2009), mesmo quando os coeficientes das interações são relativamente grandes, ao ignora-los o caminho da máxima ascensão diferem muito pouco do verdadeiro caminho. Na prática, as interações tem pouco efeito sobre o resultado final. Pode- se realizar uma corrida adicional de máxima ascensão para compensar os erros no cálculo do caminho.

2.4.1. Efeito da escala sobre a escolha do intervalo de fatores

A escolha de faixas dos fatores é uma decisão vital para a eficiência do caminho de máxima ascensão. Decisões com pouca prudência nesses primeiros estágios pode levar à otimização do processo muito ineficiente em um estágio posterior.

Existe uma relação entre a seleção de intervalos de variáveis bem como a escolha da escala a ser utilizada. A mudança de escala não muda a direção que um fator deve mover-se ao longo do trajeto de máxima ascensão. No entanto, ela altera a magnitude relativa de movimento do fator Box e Wilson (1951).

A seguinte regra geral, que reflete a diferença entre as coordenadas de uma máxima ascensão de um problema com k-variável.

Seja o intervalo r_i , r_2 ,... r_k um fator $A \in r_1$ ', r_2 ',... r_k ', um fator B, no qual $a_j = r_j/r_j$ '. Os movimentos relativos ao longo do caminho entre os fatores dado por: Δ_1 , Δ_2 ,..., $\Delta_k e \Delta_1$ ', Δ_2 ',..., Δ_k' para $A \in B$, respectivamente. Então $\Delta_j/\Delta_j' = a_j^2$ para j = 1, 2,..., k.

Isto sugere que independente de o usuário ter qualquer conhecimento sobre o processo em estudo ele possa definir os intervalos das variáveis e, portanto a escala na aplicação do método de máxima ascensão. O método em si pode ser um instrumento de aprendizado que permiti uma melhor escolha de faixas em experimentos futuros, especialmente os experimentos em que o objetivo é encontrar condições ótimas do processo.

2.5. Múltiplas respostas

Processos reais precisam ser otimizados com relação a vários critérios simultaneamente. Frequentemente, as condições de operação precisão satisfazer várias condições ou restrições m sobre as respostas, $y_1, ..., y_m$. 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 e Montgomery (2009) e He et al (2012).

Há várias maneiras de usar técnicas de programação para formular e resolver o problema de otimização múltipla resposta. Ortiz et al. (2004) classifica os métodos existentes 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 $\binom{k}{2}$ 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 Castillo (2007) e Montgomery (2009). Para resolver o problema de erro de amostragem, é recomendado cálculo de regiões de confiança para a localização dos pontos estacionários Box e Hunter (1954). Se as respostas são lineares, um cone de confiança na direção de máxima melhoria pode ser construído Box e Draper (1987).

A segunda técnica consiste de métodos que usa resposta mais importante como função objetivo e o restante das respostas são consideradas restrições. Exemplos típicos para tais métodos estão em Castillo (2007) e Fan (2000). De acordo com Kim e 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 de resposta dual é uma técnica, que se aplica ao caso particular de duas respostas Myers e Montgomery (2009).

A terceira técnica consiste de métodos que combinam a respostas múltiplas em uma única função agregada e resolver como um problema de otimização de um único objetivo. O mais popular destes métodos é definida como função *desirability* Harington (1965), Deringer e Suich (1980), Pasandideh e Niaki (2006), função de perda Pignatiello (1993), Ames et al. (1997), e Vining (1998), função de distância Khuri e Conlon (1981), proporção de conformidade Chiao e Hamada (2001) e Análise de Componente Principal, Antony (2000), Liao (2006) e Routara et al. (2010).

Para Wang (2007) esta última técnica embora possa obter uma combinação ótima para os níveis dos fatores das múltiplas respostas, eles não podem determinar a significância dos fatores individuais sobre os efeitos das respostas.

O método *desirability* não leva em consideração as estruturas de correlação por utilizar funções modeladas pelo método dos mínimos quadrados ordinários (OLS), quando houver a necessidade de se aplicar uma otimização múltipla de um arranjo com respostas correlacionadas, o erro na determinação do ponto de ótimo pode ser grande.

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 e Wichern, 2007). Para p variáveis com n medições podemse escrever a correlação r e a variância e covariância S_n na forma matricial:

$$r = \begin{bmatrix} 1 & r_{12} & \dots & r_{1p} \\ r_{21} & 1 & \dots & r_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{p1} & r_{p2} & \dots & 1 \end{bmatrix}$$
(2.4)
$$S_n = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \dots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \dots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \dots & s_{pp} \end{bmatrix}$$

2.5.1. Prioridade Ponderada

O método de Prioridade Ponderada utiliza o caminho de máxima ascensão para cada resposta a ser investigada. Utiliza-se o seguinte procedimento:

1. Encontrar os gradientes g de todas as respostas;

$$g'_{i} = \rho \frac{b}{\|b\|} = \rho \frac{b_{i}}{\sqrt{\sum_{j=1}^{k} b_{j}^{2}}} \qquad i = 1, 2, \dots, k.$$
(2.6)

Da qual:

 $\rho = \epsilon$ o tamanho do passo que ϵ definido pelo pesquisador.

A partir desta equação, pode-se concluir que qualquer múltiplo de ρ na direção do gradiente (dada por b/||b||) conduzirá a pontos na direção de máxima ascensão. Para íngreme descida, usar o *-bi* no numerador da Eq.(2.6).

 Calcular as prioridades relativas πi para cada uma das k respostas, Se não houver prioridades pré-definidas, pode-se utilizar a qualidade de ajuste dos modelos como critério.

$$\pi_i = \frac{R_i^2}{\sum_{i=1}^k R_i^2}, i = 1, 2, \dots, k$$
(2.7)

3. Determinar o gradiente ponderado para direção de procura.

$$g = \frac{\pi_1 g_1 + \pi_2 g_2 + \dots + \pi_k g_k}{\sum_{i=1}^k \pi_i}$$
(2.8)

4. Calcular a direção ponderada:

$$d = \frac{g}{\|g\|} = \frac{g_i}{\sqrt{\sum_{j=1}^k g_j^2}} \qquad i = 1, 2, \dots, k.$$
(2.9)

2.5.2. Método Desirability

Este método foi originalmente proposto por Harrington (1965) e mais tarde aprimorado por Derringer e Suich (1980). O método desirability é um dos métodos mais amplamente utilizados na indústria para tratar otimização de processos com múltiplas respostas. Ele baseia-se na idéia de que a "qualidade" de um produto ou processo que tem múltiplas características de qualidade, com um deles fora dos limites desejados, é completamente inaceitável. O método encontra as condições operacionais x que proporcionam valores de resposta desejáveis Castilho (2007).

Seu procedimento faz uso das funções individuais e dos pesos relativos a cada resposta que converte cada resposta y_i em uma função individual *desirability* d_i , que varia entre 0 e 1, com di (Yi) = 0 representa um valor indesejável de Yi e di (Yi) = 1 representa um valor de resposta desejável ou ideal. Os *desirabilities* individuais são então combinados usando a média geométrica, o que dá a *desirabilitity* geral D, Eq.(2.10) Montgomery (2009) e He et al. (2012).

$$D = (d_1(y_1) \times d_2(y_2) \times ... \times d_m(y_m))^{1/m}$$
(2.10)

Onde *m* representa o número de respostas. A função de *desirability* é um índice de escala invariante, que permite que as características de qualidade com diferentes unidades são comparados. Assim, a função de *desirability* é um meio eficaz de otimizar simultaneamente um problema multi-resposta Ming et al. (2006), Jer et al. (2007).

Em 1994 Derringer definiu uma média geométrica ponderada, Eq.(2.11), utilizada quando as respostas possuem diferentes importâncias.

$$D = (d_1(y_1)^{w_1} \times d_2(y_2)^{w_2} \times ... \times d_m(y_m)^{w_m})^{1/\Sigma w_i}$$
(2.11)

Da qual *wi* é a importância relativa de cada resposta. A vantagem deste método é que a solução ótima é encontrada de maneira balanceada, caso alguma resposta esteja fora dos limites aceitáveis, ele retorna uma solução inviável, Salmasnia et al. (2012).

Segundo proposto por Derringer e Suich (1980) diferentes funções *desirability* $d_i(y_i)$ podem ser usadas, depende se uma determinada resposta y_i deve ser maximizado, minimizado ou atribuído a um valor de referência. L_i , U_i e T_i são os valores inferior, superior, e alvo desejados para resposta i, onde $L_i \leq T_i \leq U_i$, deseja-se o alvo como melhor resposta, a transformação é dada por:

$$d_{i}(\hat{y}_{i}) = \begin{cases} 0 & se \ \hat{y}_{i}(x) < L_{i} \\ \left(\frac{\hat{y}_{i}(x) - L_{i}}{T_{i} - L_{i}}\right)^{s} & se \ L_{i} \le \hat{y}_{i}(x) \le T_{i} \\ \left(\frac{\hat{y}_{i}(x) - U_{i}}{T_{i} - U_{i}}\right)^{t} & se \ T_{i} \le \hat{y}_{i}(x) \le U_{i} \\ 0 & se \ \hat{y}_{1}(x) > U_{i} \end{cases}$$
(2.12)

Da qual, os expoentes *s* e *t* determinam o quanto é importante acertar o valor alvo desejado. Para s = t = 1, a função *desirability* aumenta linearmente para T_i , para s < 1, t < 1, a função é convexa, e para s > 1, t > 1, a função é côncava.

Se uma resposta deve ser maximizada, a desirability indivídual é definido como:

$$d_{i}(\hat{y}_{i}) = \begin{cases} 0 & se \ \hat{y}_{i}(x) < L_{i} \\ \left(\frac{\hat{y}_{i}(x) - L_{i}}{T_{i} - L_{i}}\right)^{s} & se \ L_{i} \le \hat{y}_{i}(x) \le T_{i} \\ 1.0 & se \ \hat{y}_{1}(x) > T_{i} \end{cases}$$
(2.13)

Da qual, T_i é interpretado como um valor suficientemente grande para a resposta. Para, minimizar uma resposta, usa-se:

$$d_{i}(\hat{y}_{i}) = \begin{cases} 1.0 & se \ \hat{y}_{i}(x) < T_{i} \\ \left(\frac{\hat{y}_{i}(x) - U_{i}}{T_{i} - U_{i}}\right)^{s} & se \ T_{i} \le \hat{y}_{i}(x) \le U_{i} \\ 0 & se \ \hat{y}_{1}(x) > U_{i} \end{cases}$$
(2.14)

Da qual, T_i representa um valor suficientemente pequeno para a resposta. A abordagem *desirability* consiste nos seguintes passos:

- 1- Conduzir Experimentos e modelos de resposta de ajuste para todas as *m* respostas;
- 2- Definir funções *desirability* individuais para cada resposta;
- 3- Maximizar a *desirability* geral D para os fatores controláveis.

Objetivo	Característica	Representação Matemática
Minimizar	O valor da função <i>desirability</i> aumenta enquanto que o valor da resposta original se aproxima de um valor alvo mínimo. Abaixo do alvo, $d = 1$; acima do limite superior, $d = 0$.	d Alvo Peso =0,1 Peso =1 Limite Superior
Normalizar	Quando a resposta se move em direção alvo, o valor da função <i>desirability</i> aumenta. Acima ou abaixo dos limites,d = 0; no alvo d = 1.	d Alvo Peso =1 Peso =0,1 Cimite Inferior Peso =10 Limite Superior
Maximizar	O valor da função <i>desirability</i> aumenta quando o valor da resposta aumenta. Abaixo do limite inferior, $d= 0$; acima do alvo, $d = 1$.	d Alvo Peso =0,1 Peso =1 Peso =10 Limite Inferior

Quadro 2.1 – Objetivos de otimização no Método de Derringer, Paiva (2006).

Quadro 2.2 – Relações de importância entre o Alvo e os Limites no *Desirability*, Paiva (2006).

Peso = 0,1	Se o peso é menor que 1 (valor mínimo é 0,1), então,
d = 0 $d = 1$ Alvo	menos ênfase se dá ao alvo.
Peso = 1 d = 0 Alvo	Quando o peso é igual a 1, a importância dada ao alvo é igual à importância dada aos limites.
Peso = 10 Alvo $d = 1$	Se o peso dado à resposta é maior do que 1 (o valor
d = 0	máximo é 10), então, mais ênfase é dada ao alvo.

Algumas desvantagens do método:

- 1- Na transformação, a estrutura de variância e covariância das respostas é ignorada, Ko et al. (2005) e Kazemzadeh et al. (2008). Ignorar estas informações pode conduzir a uma solução não realista se, as respostas têm níveis significativamente diferentes de variância, Peterson (2004) e Ko et al. (2005);
- 2- Desconsiderar a correlação entre as respostas;
- 3- Desconsiderar as estimativas das incertezas dos parâmetros do modelo, Peterson (2004) e He et al. (2012).
- 4- O aumento da não linearidade de *D* na medida em que se considera um número maior de variáveis de respostas, que pode conduzir a localização de ótimos locais apenas. Ortiz et al. (2004).

2.6. Cone de confiança

A definição o tamanho do passo em uma direção de máxima ascensão ou íngreme descida, depende do grau de confiança que se tem nesse sentido. Se o ajuste do modelo é pobre, as estimativas dos parâmetros para os efeitos principais, e, por conseguinte, a estimativa do gradiente vai ser pobre (erro padrão grande), e isso significa que não se deve confiar muito na direção de máxima ascensão ou íngreme descida estimada. Se o ajuste é

muito pobre ou é porque precisa-se realizar mais experimentos para reduzir o ruído e obter um melhor ajuste do modelo linear ou porque o mesmo não é adequado Castilho (2006).

A direção dada pelo gradiente $g' = (b_0, b_2, ..., b_k)$ constitui apenas um única estimativa (ponto) baseada em uma amostra de experimentos N. Se um conjunto diferente de experimentos N foram conduzidos, estes iriam fornecer estimativas de parâmetros diferentes, o que por sua vez irá dar um gradiente diferente. Para explicar essa variabilidade de amostragem, Box e Draper (1987) desenvolveu uma fórmula para a construção de um "cone" em torno da direção de subida mais íngreme que, com certa probabilidade, contém o gradiente verdadeiro do sistema (desconhecido) dada por ($\beta_1, \beta_2, ..., \beta_k$). A largura do cone confiança é útil para avaliar o grau de confiabilidade de uma direção de busca estimada.



Figura 2.5 cone de confiança para o caminho de máxima ascensão em um experimento com dois fatores.

Suponha que a resposta de interesse é descrito adequadamente por um modelo polinomial de primeira ordem.

$$\hat{y} = b_0 + x'b.$$
 (2.15)

Qualquer condição operacional $x' = (x_1, x_2, ..., x_k)$ que satisfazer

$$\sum_{i=1}^{k} b_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{k} b_i x_i\right)^2}{\sum_{i=1}^{k} x_i^2} \le (k-1) S_b^2 F_{\alpha,k-1,n-p}$$
(2.16)

Da qual, $s_b^2 = SS_{error}C_{jj}/(n-p)$, Cjj é o j-ésimo elemento da diagonal principal da matriz (X'X)⁻¹ (para j = 1, 2..., k). Estes valores são todos iguais, se o arranjo experimental é um fatorial 2^{k-p} de pelo menos resolução III, e X é a matriz do modelo do experimento.
Gera uma direção que se encontra dentro de $100(1-\alpha)$ % do cone de confiança da máxima ascensão se

$$\sum_{i=1}^{k} b_i x_i > 0 \tag{2.17}$$

Ou dentro de $100(1-\alpha)$ % do cone de confiança da íngreme descida se

$$\sum_{i=1}^{k} b_i x_i < 0 \tag{2.18}$$

O resultado da Eq. (2.19) é baseado na *Figura 2.6*, que mostra os vetores envolvidos na expressão do cone em algum espaço *k*-dimensional. A projeção do vetor *b* em *x* é dada por $\frac{b'x}{||x||} \frac{x}{||x||}$ e magnitude $\frac{b'x}{||x||}$. Do teorema de Pitágoras, tem-se,

$$||\boldsymbol{b}||^{2} - \left(\frac{\boldsymbol{b}'\boldsymbol{x}}{||\boldsymbol{x}||}\right)^{2} = ||\boldsymbol{d}||^{2}$$
 (2.19)



Figura 2.6 - Vetores envolvidos na expressão do cone de confiança

Observa-se que o lado esquerdo da Eq. (2.19) é idêntico ao lado esquerdo da Eq. (2.16). A direção gerada por x está dentro do cone de confiança em torno do gradiente estimado (dado pelo vetor b), o vetor d explica a variabilidade estatística para o vetor b estimado. Se todos *bi* são estimados com o mesmo erro padrão, a variância do *bi*, s_b^2 , é uma medida dessa variação. O lado direito da Eq. (2.19) é o comprimento do vetor d, e é uma soma de quadrados. Assim, pode-se comparar o vetor d com s_b^2 para determinar se x esta ou não dentro do cone. Como o vetor d tem (*k*-1) graus da liberdade, sua extremidade coincide com o vetor b, dimensiona-se a soma de quadrados que representam o seu comprimento dividido por (*k*-1) de modo a formar um quadrado médio que pode ser comparado com s_b^2 . Têm-se, então os erros normalmente distribuídos conforme Eq. (2.20) e da Eq. (2.16), para $\mathbf{b'x} = (\cos \phi) ||\mathbf{b}|| ||\mathbf{x}||$, tem-se $\mathbf{b'x} > 0 \Rightarrow \cos \phi > 0 \Rightarrow \phi < 90^\circ$, e \mathbf{x} esta dentro do cone de máxima ascensão, do mesmo modo, se $\mathbf{b'x} < 0 \Rightarrow \phi > 90^\circ$ e \mathbf{x} esta dentro do cone de íngreme descida Castilho (2006).

$$\frac{\left(||\boldsymbol{b}||^2 - \left(\frac{\boldsymbol{b}'\boldsymbol{x}}{||\boldsymbol{x}||}\right)^2\right) / (k-1)}{S_b^2} \sim F_{k-1,n-p}$$
(2.20)

Para o vetor **x**, estar dentro do cone de confiança deve-se ter:

$$\|\boldsymbol{d}\|^{2} \leq (k-1)S_{b}^{2}F_{\alpha,k-1,n-p}$$
(2.21)

Utiliza-se a raiz quadrada do limite superior como o valor da distância ||d|| no cone. Com isso, o anglo \emptyset do cone na *Figura 2.6* é:

$$\emptyset = \arcsin\left(\frac{(k-1)S_b^2 F_{\alpha,k-1,n-p}}{\sum_{i=1}^k b_i^2}\right)$$
(2.22)

Se a largura do cone de confiança de direção máxima ascensão ou íngreme descida for muito grande, isso significa que a direção estimada não é muito precisa, uma medida prudente seria não tomar grandes passos nessa direção ou até mesmo realizar mais experimentos antes de conduzir uma direção de máxima ascensão ou íngreme descida.

Uma quantidade útil para determinar a precisão de uma direção é a fração de direções excluída pelo cone de confiança, *w*. Se esta fração é próxima de 1, significa que o cone é muito estreito e, por conseguinte, preciso. Para calcular *w*, tem-se:

$$w = 1 - \frac{S_{tampa}}{S_{esfera}}$$
(2.23)

Da qual, S_{tampa} é a área da superfície da tampa esférica gerada pelo cone confiança quando atinge uma esfera centrada no vértice do cone e S_{esfera} é a área da superfície da esfera.



Figura 2.7 – Fração de direções excluídas pelo cone de confiança. Para dimensões k, a área de superfície de uma hiperesfera de raio unitário é,

$$S_{esfera} = \frac{2\pi^{k/2}}{\Gamma(k/2)} \tag{2.24}$$

E a superfície da tampa esférica de uma hiperesfera de raio unitário é,

$$S_{tampa} = \frac{(k-1)\pi^{(k-1)}}{\Gamma(k+1)/2} \int_0^{\emptyset} \sin^{k-2}u du$$
 (2.25)

A *Tabela 2.3* mostra a proporção de direções excluídas pelo cone de confiança, *w*, a partir da fórmula para áreas de superfície de tampas e hiperesferas.

Portanto, a fração de direções excluídas pelo cone de confiança $100(1-\alpha)$ % na direção de máxima ascensão ou íngreme descida é:

$$w_{Cone} = 1 - \frac{(k-1)\Gamma(k/2)}{2\pi^{1/2}\Gamma(\frac{k+1}{2})} \int_0^{\emptyset} \sin^{k-2}u du$$
(2.26)

Esta expressão para valores pequenos de k é fácil de manusear, com base em uma caracterização da distribuição t de Student relacionada com tampas esféricas, Box e Draper (1987) desenvolveram uma expressão equivalente,

$$w = 1 - \phi_{\alpha} = 1 - T_{k-1} \left(\frac{\sum_{i=1}^{k} b_i^2}{s_b^2 F_{\alpha,k-1,n-p}} - (k-1) \right)^{1/2}$$
(2.27)

k	S _{tampa}	S _{esfera}	W
2	2Ø	2π	$1-\frac{\phi}{\pi}$
3	$2\pi(1-\cos\phi)$	4π	$\frac{1}{2}(1+\cos\emptyset)$
4	$2\pi(\emptyset - \cos \theta \sin \theta)$	2π ²	$1 + \frac{1}{\pi} (\cos \phi \sin \phi - \phi)$
5	$\frac{2\pi^2(-\cos\phi(\sin^2\phi+2)+2)}{3}$	8π ² /3	$1 + \frac{1}{4}\cos\phi(\sin^2\phi + 2) + 2$
6	$\frac{8\pi^2}{3} \left(\frac{-\sin \phi \cos \phi}{4} \left(\sin^2 \phi + \frac{3}{2} \right) + \frac{3\phi}{8} \right)$	π^3	$1 - \frac{8}{3\pi} \left(\frac{-\sin \phi \cos \phi}{4} \left(\sin^2 \phi + \frac{3}{2} \right) + \frac{3\phi}{8} \right)$
7	$\frac{\pi^3}{5} \left(-\sin^2 \emptyset \cos \ \emptyset \left(\sin^2 \emptyset - \frac{4}{3} \right) + \frac{8}{3} (1 - \cos \ \emptyset) \right)$	16π ³ /15	$1 - \frac{3}{16} \left(-\sin^2 \emptyset \cos \emptyset \left(\sin^2 \emptyset - \frac{4}{3} \right) + \frac{8}{3} (1 - \cos \emptyset) \right)$
8	$\frac{8\pi^3}{45} \left(\sin \emptyset \cos \emptyset \left(-\sin^4 \emptyset - \frac{5}{4}\sin^2 \emptyset - \frac{15}{8}\right) + \frac{15\emptyset}{8}\right)$	$\pi^4/3$	$1 - \frac{8}{15\pi} \left(\sin \emptyset \cos \emptyset \left(-\sin^4 \emptyset - \frac{5}{4} \sin^2 \emptyset - \frac{15}{8} \right) + \frac{15\emptyset}{8} \right)$
9	$\frac{\pi^4}{21} \left(\sin^2 \emptyset \cos \emptyset \left(-\sin^4 \emptyset - \frac{6}{5} \sin^2 \emptyset - \frac{24}{15} \right) + \frac{48}{15} (1 - \cos \emptyset) \right)$	32π ⁴ /105	$1 - \frac{5}{32} \left(\sin^2 \phi \cos \phi \left(-\sin^4 \phi - \frac{6}{5} \sin^2 \phi - \frac{24}{15} \right) + \frac{48}{15} (1 - \cos \phi) \right)$
10	$\frac{4\pi^4}{105} \left(\sin \emptyset \cos \emptyset \left(-\sin^6 \emptyset - \frac{7}{6} \sin^4 \emptyset - \frac{35}{24} \sin^3 \emptyset - \frac{105}{48} \right) + \frac{105\emptyset}{192} \right)$	$\pi^{5}/3$	$1 - \frac{4}{35\pi} \left(\sin \phi \cos \phi \left(-\sin^6 \phi - \frac{7}{6} \sin^4 \phi - \frac{35}{24} \sin^3 \phi - \frac{105}{48} \right) + \frac{105\phi}{192} \right)$

Tabela 2.3 – Proporção de direções excluídas pelo cone de confiança, w.

Da qual T_{k-1} () indica o complemento da função de distribuição Student t com k-1 graus de liberdade, isto é, T_{k-1} (u) = P ($t_{k-1} \ge u$) e $F\alpha$, k-1,n-p denota um ponto percentual α da distribuição F com k-1 e n-p graus de liberdade, n-p denota os graus de liberdade do erro, com n igual ao número de experimentos e p = k+1. O valor de \emptyset_{α} representa a fração de direções incluídas pelo cone de confiança. O menor w ocorre quanto maior for o cone, com $0 \le w \le 1$.

As Eq. (2.26) e (2.27) são válidas quando as condições operacionais são dadas em unidades codificadas.

2.7. Variância integrada

Um experimento realizado inicialmente em um novo processo de produção, pouco compreendido, as chances são de que as condições de operação inicial x_1 , x_2 ,..., x_k estarão localizados longe da região no qual os fatores possam atingir um valor máximo ou mínimo para a resposta de interesse.

O conceito de variância integrada foi utilizado para gerar os pontos iniciais aleatórios com o mínimo de dispersão entre os dados, evita-se assim a simulação de parâmetros fora da região de trabalho.

O conceito de variância integrada pode ser escrito como:

$$I = \frac{\int_{\Omega} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} = \frac{\int_{\xi_1,\xi_2}^{\eta_1 \eta_2} \cdots \int_{\xi_p}^{\eta_p} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] dx_1 dx_2 \cdots dx_p}{\int_{\xi_1,\xi_2}^{\eta_1 \eta_2} \cdots \int_{\xi_p}^{\eta_p} dx_1 dx_2 \cdots dx_p}$$
(2.28)

Como $Var[\hat{Y}(x)]$ para o caso da incerteza dos modelos de previsão, as variáveis aleatórias consideradas são os coeficientes do modelo proposto. A $Var[\hat{Y}(x)]$ pode ser escrita como:

$$Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{i}} \right\}_{\hat{\beta}_{i}}^{2} \sigma_{\beta_{i}}^{2} + 2 \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{i}} \right\}_{\hat{\beta}_{i}} \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{j}} \right\}_{\hat{\beta}_{j}} \times r_{\beta_{i}\beta_{j}} \times \sqrt{\sigma_{\beta_{i}}^{2} \sigma_{\beta_{j}}^{2}} \right\}$$
(2.29)

Para os arranjos experimentais (DOE), a segunda parte da soma representada pela Eq. (2.29) é nula, dado que as colunas dos arranjos experimentais de DOE são independentes. Logo, a Eq. (2.29) pode ser escrita como:

$$Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{i}} \right\}_{\hat{\beta}_{i}}^{2} \sigma_{\beta_{i}}^{2}$$
(2.30)

Assim, *I* pode ser escrito finalmente como:

$$I = \frac{\int_{\Omega} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} = \frac{\int_{\xi_{1},\xi_{2}}^{\eta_{1}} \cdots \int_{\xi_{p}}^{\eta_{p}} \left[\sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{i}} \right\}_{\hat{\beta}_{i}}^{2} \sigma_{\beta_{i}}^{2} \right] dx_{1} dx_{2} \cdots dx_{p}}{\int_{\xi_{1},\xi_{2}}^{\eta_{1}} \int_{\xi_{p}}^{\eta_{2}} \cdots \int_{\xi_{p}}^{\eta_{p}} dx_{1} dx_{2} \cdots dx_{p}}$$
(2.31)

O método dos mínimos quadrados ordinários (OLS) é o algoritmo tipicamente usado para estimar os coeficientes de um modelo de regressão linear múltipla, fatoriais completos, fracionados ou superfícies de resposta.

Sejam consideradas as n>k observações da variável de resposta disponíveis, assim como $y_1, y_2, ..., y_n$. Assumindo-se que valor esperado do erro seja zero, pode-se escrever que:

$$Y_{i} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{i1} + \beta_{2}x_{i2} + \dots + \beta_{k}x_{ik} + \varepsilon_{i} = \beta_{0} + \sum_{j=1}^{k}\beta_{j}x_{ij} + \varepsilon_{i}$$
(2.32)

O método dos mínimos quadrados baseia-se na escolha de valores para β na Eq. (2.32), de modo que a soma dos quadrados dos erros seja minimizada. A função de mínimos quadrados pode ser escrita como:

$$L = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_{i}^{2} = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{i} - \beta_{0} - \sum_{j=1}^{k} \beta_{j} x_{ij} \right)^{2}$$
(2.33)

A função L deve ser minimizada em função de $\beta_0, \beta_1, ..., \beta_k$. Assim, tem-se que:

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_0} = \frac{\partial L}{\partial \beta_j} = -2\sum_{i=1}^n \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} \right) = 0$$
(2.34)

Em notação matricial, pode-se escrever que, se $Y = \beta X + \varepsilon$, com:

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_0 \\ \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_k \end{bmatrix}$$

Então:

$$L = y^{T}y - \beta^{T}X^{T}y - y^{T}X\beta + \beta^{T}X^{T}X\beta = y^{T}y - 2\beta^{T}X^{T}y + \beta^{T}X^{T}X\beta$$
(2.35)

Como os estimadores de mínimo quadrado devem satisfazer a:

$$\frac{\partial L}{\partial \beta} = -2X^T y + 2X^T X \hat{\beta} = 0$$
(2.36)

Resolvendo-se a Eq. (2.35), tem-se:

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$
(2.37)

A equação (2.37) é a expressão matricial das equações normais de mínimos quadrados. Considere que:

$$E(\widehat{\boldsymbol{\beta}}) = E[(X^T X)^{-1} X^T y] = E[(X^T X)^{-1} X^T (X^T \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon})]$$
(2.38)

Então:

$$E(\widehat{\beta}) = E[(X^T X)^{-1} (X^T X \beta + X^T \varepsilon] = E[(X^T X)^{-1} (X^T X) \beta] + [(X^T X)^{-1} (X^T \varepsilon)]$$

$$= E[\beta] + [(X^T X)^{-1} (X^T \varepsilon)]$$

$$= \beta + (X^T X)^{-1} (X^T) \underbrace{E(\varepsilon \varepsilon)}_{0}$$

$$E(\widehat{\beta}) = \beta$$
(2.39)

Logo, pode-se afirmar que $\hat{\beta}$ é um estimador não tendencioso de β .

Analogamente, a incerteza associada a estes coeficientes pode ser escrita como:

$$Cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = E\left\{ \left[\hat{\boldsymbol{\beta}} - E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) \right]^{\mathrm{r}} \left[\hat{\boldsymbol{\beta}} - E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) \right] \right\} = E\left[\left[(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}) (\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}) \right]$$
(2.40)

Da Eq. (2.13), pode-se escrever que:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})\boldsymbol{\beta} + (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\epsilon})$$
$$\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\epsilon})$$
(2.41)

Então:

$$Cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = E\left\{\left[(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\epsilon})\right]\left[(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\epsilon})\right]\right\} = E\left\{\left[(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\epsilon})\right]\left[(\boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}\right]\right\}$$

Logo:

g

$$Cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = E\left\{ \left[(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}) \right] \left[(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon}) (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1} \right] \right\}$$
$$Cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = E(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon}) (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$$
$$Cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^{2} (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$$
(2.42)

A Eq. (2.42) demonstra que a variância dos coeficientes dos modelos de mínimos quadrados depende da incerteza experimental e da matriz de entrada dos dados. Suponha, por exemplo, que se deseja ajustar um modelo não linear de primeira ordem a partir de um fatorial completo 2², sem réplicas. Então:

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_{12} x_1 x_2$$
(2.43)

Para este modelo, tem-se que:

$$Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{i}} \right\}_{\hat{\beta}_{i}}^{2} \sigma_{\beta_{i}}^{2}$$
$$Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] = \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{0}} \right\}_{\hat{\beta}_{0}}^{2} \sigma_{\beta_{0}}^{2} + \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{1}} \right\}_{\hat{\beta}_{1}}^{2} \sigma_{\beta_{1}}^{2} + \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{2}} \right\}_{\hat{\beta}_{2}}^{2} \sigma_{\beta_{2}}^{2} + \left\{ \frac{\partial [\hat{Y}(\mathbf{x})]}{\partial \beta_{12}} \right\}_{\hat{\beta}_{12}}^{2} \sigma_{\beta_{12}}^{2}$$
(2.44)

Então, tomando-se as derivadas parciais da Eq. (2.44), vem que:

$$Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] = \sigma_{\beta_0}^2 + x_1^2 \sigma_{\beta_1}^2 + x_2^2 \sigma_{\beta_2}^2 + x_1^2 x_2^2 \sigma_{\beta_{12}}^2$$
(2.45)

Como:

$$Cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^{2} (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} = \sigma^{2} \begin{bmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix}$$

Então, a Eq. (2.45) fica como:

$$Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] = \frac{\sigma^2}{4} \left(1 + x_1^2 + x_2^2 + x_1^2 x_2^2 \right)$$
(2.46)

Logo, a variância integrada para este modelo será:

$$I = \frac{\int_{\Omega} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} = \frac{\int_{-1-1}^{+1+1} \left[\frac{\sigma^2}{4} \left(1 + x_1^2 + x_2^2 + x_1^2 x_2^2\right)\right] dx_1 dx_2}{\int_{-1-1}^{+1+1} dx_1 dx_2} = \frac{\sigma^2}{16} \left[\int_{-1-1}^{+1+1} \left(1 + x_1^2 + x_2^2 + x_1^2 x_2^2\right) dx_1 dx_2\right]$$

$$I = \frac{\int_{\Omega} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} = \frac{4\sigma^2}{9}$$
(2.47)

Para um modelo genérico de pontos tomados dentro do espaço experimental, a variância integrada pode ser generalizada neste caso como:

$$I = \frac{\int_{\Omega} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} = \frac{\sigma^2 \int_{ac}^{b} \int_{ac}^{d} [(c_{11} + c_{22}x_1^2 + c_{33}x_2^2 + c_{44}x_1^2x_2^2)] dx_1 dx_2}{\int_{ac}^{b} \int_{ac}^{d} dx_1 dx_2}$$

$$I = \frac{\int_{\Omega} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} = \left[\frac{\sigma^2}{(b-a)(d-c)}\right]_{ac}^{b} \int_{ac}^{d} [(c_{11} + c_{22}x_1^2 + c_{33}x_2^2 + c_{44}x_1^2x_2^2)] dx_1 dx_2$$

$$I = \left[\frac{\sigma^2}{(b-a)(d-c)}\right] \times \begin{bmatrix} c_{11}(b-a)(d-c) + c_{22}\left(\frac{b^3 - a^3}{3}\right)(d-c) + c_{33}(b-a)\left(\frac{d^3 - c^3}{3}\right) + c_{44}\left(\frac{b^3 - a^3}{3}\right)(d^3 - c^3) \end{bmatrix}$$
(2.48)

2.8. Análise de componentes principais

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).

A Análise de Componentes Principais (ACP) 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 e Chiuh (2004).

A ACP geralmente revela relacionamentos que não seriam previamente identificados com o conjunto original, o que resulta em uma interpretação mais abrangente do fenômeno. Segundo Johnson e Wichern (2002), a ACP serve como um passo intermediário na análise dos dados.

A maioria das técnicas multivariadas são baseadas sobre o conceito simples de distância. Considere o ponto $P = (x_1, x_2)$ No plano, a distância em linha reta, d(O, P), a partir de P para a origem 0 = (0,0) é, de acordo com o teorema de Pitágoras,



Figura 2.8 – Distância dada pelo teorema de Pitágoras



Figura 2.9 – Gráfico de dispersão com maior variabilidade dos dados na direção de x_1

Ponderar as coordenadas na direção de x_2 mais fortemente do que coordenadas na direção x_1 , ao calcular a distância *OP* até a origem. Uma maneira de proceder é dividir cada coordenada pelo desvio-padrão da amostra.

$$d^{2}(0,P) = \frac{x_{1}^{2}}{S_{11}} + \frac{x_{2}^{2}}{S_{22}} = c^{2}$$
(2.49)

Da qual, c^2 representa todos os pontos $(x_1, x_2, ..., x_p)$ que estão a uma distância ao quadrado, constante da origem.

A Eq. (2.49) é a equação de uma elipse centrada na origem com maior e o menor eixo que coincidem com os das coordenadas.



Figura 2.10 – Elipse com distância constante da origem.

A Eq.(2.28) pode ser generalizada para o cálculo da distância a partir de um ponto arbitrário $P = (x_1, x_2, ..., x_p)$ para qualquer ponto fixo $Q = (y_1, y_2, ..., y_p)$. Considera-se que as coordenadas das variáveis variam independentemente uma da outra, a distância de *P* a *Q* é representada por:

$$d(P,Q) = \sqrt{\frac{(x_1 - y_1)^2}{S_{11}} + \frac{(x_2 - y_2)^2}{S_{22}}}$$
(2.50)

Ao rotacionar o sistema de coordenadas original com um ângulo θ , mantendo fixa a dispersão dos dados, a variância em relação aos novos eixos é representado por $\tilde{x}_1 e \tilde{x}_2$ e a distância entre o ponto $P = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$ até a origem O = (0,0) pode ser escrita por:

$$d(0,P) = \sqrt{\frac{\tilde{x}_1^2}{\tilde{S}_{11}} + \frac{\tilde{x}_2^2}{\tilde{S}_{22}}}$$
(2.51)

Em que \tilde{S}_{11} e \tilde{S}_{22} denotam as variâncias amostrais calculadas com as medições de \tilde{x}_1 e \tilde{x}_2 .



Figura 2.11 – Gráfico de dispersão para correlação positiva com rotação sistema de coordenadas.

A relação entre as coordenadas originais (x_1, x_2) e as coordenadas $(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$, é deduzida através da lei dos cossenos

$$\tilde{x}_1 = x_1 \cos(\theta) + x_2 sen(\theta) \tag{2.52}$$

$$\tilde{x}_2 = -x_1 \operatorname{sen}(\theta) + x_2 \cos(\theta) \tag{2.53}$$

Substituindo a Eq. (2.52) e Eq. (2.53) na equação Eq. (2.51) tem-se:

$$d(0,P) = \sqrt{a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^2}$$
(2.54)

Da qual:

$$a_{11} = \frac{\cos^2(\theta)}{\cos^2(\theta)S_{11} + 2sen(\theta)\cos(\theta)S_{12} + sen^2(\theta)S_{22}} + \frac{sen^2(\theta)}{\cos^2(\theta)S_{22} - 2sen(\theta)\cos(\theta)S_{12} + sen^2(\theta)S_{11}}$$
(2.55)

$$a_{22} = \frac{sen^{2}(\theta)}{cos^{2}(\theta)S_{11} + 2sen(\theta)\cos(\theta)S_{12} + sen^{2}(\theta)S_{22}} + \frac{cos^{2}(\theta)}{cos^{2}(\theta)S_{22} - 2sen(\theta)\cos(\theta)S_{12} + sen^{2}(\theta)S_{11}}$$
(2.56)

$$a_{12} = \frac{\cos(\theta)\operatorname{sen}(\theta)}{\cos^2(\theta)S_{11} + 2\operatorname{sen}(\theta)\cos(\theta)S_{12} + \operatorname{sen}^2(\theta)S_{22}} + \frac{\operatorname{sen}(\theta)\cos(\theta)}{\cos^2(\theta)S_{22} - 2\operatorname{sen}(\theta)\cos(\theta)S_{12} + \operatorname{sen}^2(\theta)S_{11}}$$
(2.57)

Da qual, a_{11} , $a_{12} e a_{22}$, são determinados através do ângulo θ , e s_{11} , $s_{12} e s_{22}$, são calculados a partir dos dados originais.

A distância do ponto *P* a um ponto *Q* qualquer pode ser escrito por:

$$d^{2}(P,Q) = a_{11}(x_{1} - y_{1})^{2} + 2a_{12}(x_{1} - y_{1})(x_{2} - y_{2}) + a_{22}(x_{2} - y_{2})^{2} = c^{2} \quad (2.58)$$

Para matrizes quadradas ortogonais A de dimensão $k \ge k$, tem-se:

$$AA^{T} = A^{T}A = I \text{ ou } Q^{T} = Q^{-1}$$
(2.59)

Seja A uma matriz quadrada e I a matriz identidade $k \ge k$ os escalares $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_k$, satisfaz a equação polinomial $|A - \lambda I| = 0$ são chamados autovalores (ou raízes características) de uma matriz A. A equação $|A - \lambda I| = 0$ é chamada equação característica. Isto resulta em $A \ge \lambda \ge x$, em que os correspondentes autovetores e_i normalizados podem ser escritos segundo a equação $A e_i = \lambda_i e_i k \ge k$ Johnson e Wichern (2007).

Assim tem-se que a decomposição espectral

$$A_{(kxk)} = \lambda_1 e_{1(kx1)} e_{1(1xk)}^T + \lambda_2 e_{2(kx1)} e_{2(1xk)}^T + \dots + \lambda_k e_{k(kx1)} e_{k(1xk)}^T$$
(2.60)

Da qual, λ_i são os autovalores de $A \in e_i$, seus respectivos autovetores normalizados. Para k = 2 tem-se:

$$A = \lambda_1 e_1 e_1^T + \lambda_2 e_2 e_2^T$$
(2.61)

Multiplicando os dois lados por $x^T e x$, obtém-se:

$$x^{T}Ax = \lambda_{1}x^{T}e_{1} e_{1}^{T}x + \lambda_{2}x^{T}e_{2} e_{2}^{T}x$$
(2.62)

Com

$$y_1 = x^T e_1 = e_1^T x$$
 e $y_2 = x^T e_2 = e_2^T x$ (2.63)

Da Eq. (2.54), a distância da origem a um ponto qualquer, para k=2 é definida como:

$$d^{2}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{P}) = a_{11}x_{1}^{2} + 2a_{12}x_{1}x_{2} + a_{22}x_{2}^{2} = c^{2} = \begin{bmatrix} x_{1} & x_{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1} \\ x_{2} \end{bmatrix}$$
(2.64)

Seja A uma matriz $k \ge k$ definida simétrica positiva

$$d^{2}(0,P) = \mathbf{x}^{T} \mathbf{A} \mathbf{x} \text{ para } \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$$
(2.65)

37

E para a distância entre dois pontos quaisquer tem-se:

$$d^{2}(0,P) = (x - y)^{T} A(x - y) \text{ para } x \neq 0$$
(2.66)

Pela decomposição espectral e utilizando as Eq. (2.62) e Eq. (2.64) obtém-se:

$$x^{T}Ax = \lambda_{1}(x^{T}e_{1})^{2} + \lambda_{2}(x^{T}e_{2})^{2}$$
(2.67)

Para $y_1 = x^T e_1 e y_2 = x^T e_2$ tem-se $c^2 = \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2$ é uma elipse com os autovalores $\lambda_1, \lambda_2 > 0$, para A uma matriz definida positiva. Verifica-se que $x = c \lambda_1^{-1/2} e_1$ satisfaz $x^T A x = \lambda_1 \left(c \lambda_1^{-1/2} e_1^T e_1 \right)^2 = c^2$, similarmente $x = c \lambda_2^{-1/2} e_2$ fornece a apropriada distância na direção de e_2 .

Portanto, os pontos que caem a uma distância c em uma elipse cujos eixos são dados pelos autovetores de A com comprimento proporcional ao inverso da raiz quadrada dos autovalores.



Figura 2.12 – Interpretação geométrica da ACP. Johnson e Wichern (2007).

Os componentes principais dependem somente da matriz de variância-covariância Σ ou da matriz de correlação ρ das variáveis $x_1, x_2, ..., x_p$, e seu desenvolvimento não requer o pressuposto de normalidade multivariada. Por outro lado, os componentes principais derivados de uma população normal multivariada conduzem a interpretações úteis em termos elipsoides de densidade constante. Adicionalmente, inferências podem ser feitas a partir de componentes amostrais quando a população é multivariada normal.

Os componentes principais são combinações lineares não correlacionadas de p variáveis aleatórias $x_1, x_2, ..., x_p$. Estas combinações lineares descrevem a seleção de um novo sistema de coordenadas obtido pela rotação do sistema original com $x_1, x_2, ..., x_p$ como eixos coordenados. Os novos eixos descrevem as direções com a variabilidade máxima e fornecem uma descrição mais concisa da estrutura de covariância.

Seja um vetor aleatório $X^T = [X_1, X_2, ..., X_p]$ possui uma matriz de variância-covariância Σ com autovalores $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \lambda_p \ge 0$, tal que para q combinações lineares de p variáveis aleatórias $X_1, X_2 ... X_p$, não correlacionada pode ser escrita como:

$$Y_{1} = c_{1}^{T}X = c_{11}X_{1} + c_{21}X_{2} + \dots + c_{p1}X_{p}$$
$$Y_{2} = c_{2}^{T}X = c_{12}X_{1} + c_{22}X_{2} + \dots + c_{p2}X_{p}$$
$$\vdots \qquad \vdots$$
$$Y_{q} = c_{q}^{T}X = c_{q1}X_{1} + c_{q2}X_{2} + \dots + c_{qp}X_{p}$$

Ou

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{q1} & c_{q2} & \cdots & c_{qp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_p \end{bmatrix} = C\mathbf{X}$$
(2.68)
(qx1) (qxq) (px1)

Seja uma variável aleatória simples X_1 , multiplicada por uma constante k, então o valor esperado e a variância de X_1 , serão dados, respectivamente por:

$$E(kX_1) = kE(X_1) = k\mu_1$$
(2.69)

$$Var(kX_1) = E(kX_1 - k\mu_1)^2 = k^2 Var(X_1) = k^2 \sigma_{11}$$
(2.70)

Se X_2 é uma segunda variável aleatória e se *a* e *b* são constantes, então, usando a propriedade da adição na expectância, tem-se:

$$Cov(aX_{1,}bX_{2}) = E(aX_{1} - a\mu_{1})(bX_{2} - b\mu_{2})$$

= $abE(X_{1} - \mu_{1})(X_{2} - \mu_{2})$
= $abCov(X_{1}, X_{2})$
= $ab\sigma_{12}$ (2.71)

Para a combinação linear $aX_1 + bX_2$, tem-se:

$$E(aX_1 + bX_2) = aE(X_1) + bE(X_2) = a\mu_1 + b\mu_2$$
(2.72)

$$Var(aX_{1} + bX_{2}) = E[(aX_{1} + bX_{2}) - (a\mu_{1} + b\mu_{2})]^{2}$$

$$= E[(aX_{1} - a\mu_{1})(bX_{2} - b\mu_{2})]^{2}$$

$$= E[a^{2}(X_{1} - \mu_{1})^{2} + b^{2}(X_{2} - \mu_{2})^{2} + 2ab(X_{1} - \mu_{1})(X_{2} - \mu_{2})]$$

$$= a^{2}Var(X_{1}) + b^{2}Var(X_{2}) + 2abCov(X_{1}, X_{2})$$

$$Var(aX_{1} + bX_{2}) = a^{2}\sigma_{11} + b^{2}\sigma_{22} + 2ab\sigma_{12}$$

$$(2.73)$$

Com $c^T = [a, b], (aX_1 + bX_2)$ pode ser escrito como:

$$\begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = c^T X \tag{2.75}$$

Similarmente, $E(aX_1 + bX_2) = a\mu_1 + b\mu_2$, pode ser expresso por:

$$\begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{c}^T \boldsymbol{\mu} \tag{2.76}$$

E considerando-se a matriz de variância-covariância de X igual a:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix}$$
(2.77)

A matriz de variância-covariância de X torna-se:

$$Var(aX_1 + aX_2) = Var(\boldsymbol{c}^T \boldsymbol{X}) = \boldsymbol{c}^T \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{c}$$
(2.78)

Da Eq.(2.74) tem-se:

$$\boldsymbol{c}^{T}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a^{2}\sigma_{11} + 2ab\sigma_{12} + b^{2}\sigma_{22}$$
(2.79)

Os resultados anteriores podem ser estendidos para uma combinação linear de p variáveis aleatórias. Assim, para uma dada combinação linear, pode-se escrever:

$$\boldsymbol{c}^{T} = c_{1}X_{1} + c_{2}X_{2} + \dots + c_{p}X_{p}$$

média = $E(\boldsymbol{c}^{T}\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{c}^{T}\boldsymbol{\mu}$ (2.80)
Variância = $Var(\boldsymbol{c}^{T}\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{c}^{T}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{c}$

Da Eq.(2.80) na Eq. (2.68) vem que:

$$\mu_{Z} = E(CX) = C\mu_{X}$$

$$\Sigma_{Z} = Cov(Z) = Cov(CX) = C\Sigma_{X}C^{T}$$

$$Var(Y_{i}) = c_{i}^{T}\Sigma c_{i} \quad \text{para } i = 1, 2, ..., p$$

$$Cov(Y_{i}, Y_{k}) = c_{i}^{T}\Sigma c_{k} \quad \text{para } i = 1, 2, ..., p$$

$$(2.81)$$

Os componentes principais serão, portanto, todas as combinações lineares não correlacionadas Y_1 , Y_2 ,..., Y_q cujas variâncias em (2.81) sejam tão grande quanto possível.

O primeiro componente principal (PC1), segundo a definição de Johnson e Wichern (2007), é a combinação linear que possui a máxima variância, isto é, aquela combinação que maximiza a variância, de acordo com a equação $Var(Y_i) = c_i^T \Sigma c_i$ a multiplicação de qualquer c_i por uma constante aumenta o valor de $Var(Y_i)$. Para eliminar esta indeterminação, é conveniente restringir os vetores coeficientes ao comprimento unitário. Deste modo, podem-se escrever as definições do primeiro e segundo componente principais, respectivamente PC₁ e PC₂, na forma de funções objetivo com restrições.

Maximizar
$$Var(c_1^T X)$$

Sujeito a: $c_1 = 1$ (2.82)

Maximizar
$$Var(c_2^T \mathbf{X})$$

Sujeito a: $c_2^T \mathbf{c}_2 = 1$
 $Cov(c_1^T \mathbf{X}, c_2^T \mathbf{X}) = 0$
(2.83)

As soluções dos sistemas (2.82) e (2.83) conduzem, respectivamente, ao valor do primeiro e do segundo componentes principais.

Desta forma, o i-ésimo componente principal será a combinação linear $c_i^T X$, que for solução da Eq. (2.84) a seguir:

Maximizar
$$Var(c_i^T \mathbf{X})$$

Sujeito a: $c_i^T c_i = 1$ (2.84)
 $Cov(c_i^T \mathbf{X}, c_k^T \mathbf{X}) = 0$ para $k < i$

A veracidade das equações (2.82), (2.83) e (2.84) são demonstradas por Paiva (2006) através do princípio de Desigualdade de Cauchy-Schwarz, desta forma podem ser escritos os seguintes resultados:

Resultado 1: Considere a matriz de variância-covariância Σ associada ao vetor aleatório $X^T = [X_1, X_2, ..., X_p]$. Admita-se que esta matriz possua pares de autovaloresautovetores $(\lambda_1, e_1), (\lambda_2, e_2), ... (\lambda_p, e_p)$, onde $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \lambda_p \ge 0$. Desta forma o i-ésimo componente principal é dado por:

$$Y_{i} = e_{i}^{T} X = e_{1i} X_{1} + e_{2i} X_{2} + \dots + e_{pi} X_{p} \quad i = 1, 2, \dots, p$$
(2.85)

Com as seguintes escolhas:

$$Var(Y_i) = \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{\lambda}_i \quad i = 1, 2, ..., p$$

$$Cov(Y_i, Y_k) = \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{e}_k = 0 \quad i \neq k$$
(2.86)

Se os autovetores forem perpendiculares, então $Cov(Y_i, Y_k) = e_i^T \Sigma e_k = 0$ $i \neq k$. Então, todos os autovetores de Σ serão ortogonais se todos os autovalores $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_p$ forem distintos. Se os autovalores não forem todos distintos, os autovetores correspondentes aos autovalores comuns podem ser escolhidos para serem ortogonais. Portanto, para quaisquer dois autovetores $e_k, e_i^T e_k = 0$, se $i \neq k$. Desde que $\Sigma e_k = \lambda_k e_k$, pré-multiplicando-se por e_i^T , obtém-se:

$$Cov(Y_i, Y_k) = \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{e}_k = \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{\lambda}_i^T \boldsymbol{e}_k = 0 \quad i \neq k$$
(2.87)

Resultado 2: Considere que $X^T = [X_1, X_2, ..., X_p]$ possua matriz de variância-covariância com pares de autovalores-autovetores $(\lambda_1, e_1), (\lambda_2, e_2), ..., (\lambda_p, e_p)$, onde $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge ..., \lambda_p \ge 0$. Tomem-se os *p* componentes principais iguais a $Y_p = e_p^T X$. Então, a soma a seguir será:

$$\sigma_{11} + \sigma_{22} + \dots + \sigma_{pp} = \sum_{i=1}^{p} Var(X_i) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = \sum_{i=1}^{p} Var(Y_i)$$
(2.88)

O Resultado 2 pode ser usado para se definir qual é a proporção da variância total que é representada ao k-énsimo componente principal, tal que:

$$PC_k = \frac{\lambda_k}{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p}, \quad k = 1, 2, \dots, p$$
(2.89)

Resultado 3: Se $Y_1 = e_1^T X$, $Y_2 = e_2^T X$, ..., $Y_p = e_p^T X$ são os componentes principais obtidos a partir da matriz de variância-covariância Σ , então:

$$\rho_{X_i,Y_i} = \frac{Cov(X_k, Y_i)}{\sqrt{Var(Y_i).Var(X_k)}} = \frac{\lambda_i e_{ki}}{\sqrt{\lambda_i \sigma_{kk}}} = \frac{e_{ki}\sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}} \quad i,k = 1,2,\dots,p$$
(2.90)

A equação (2.90) é a fórmula para o cálculo do coeficiente de correlação de Pearson entre os Y_i componentes principais das variáveis originais X_k . Nesta expressão $(\lambda_1, e_1), (\lambda_2, e_2), ... \ge (\lambda_p, e_p)$ são pares de autovalores-autovetores da matriz de covariância Σ .

Segundo Johnson e Wichern (2007), pode-se considerar os componentes principais como derivados de uma amostra aleatória de uma distribuição normal multivariada. Suponha-se que X seja distribuído como $N_p(\mu, \Sigma) com |Z| > 0$. Sabe-se que μ é o centro dos elipsóides descritos por:

$$(x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu) = c^2$$
 (2.91)

Este elipsóide de densidade constante tem eixos definidos por $\mathbf{x} = c \lambda_1^{1/2}(e_1), i = 1, 2, ..., p$, onde $(\lambda_1, e_1), (\lambda_2, e_2), ... \ge (\lambda_p, e_p)$ são pares de autovalores-autovetores da matriz de covariância Σ . Um ponto que cai no *i*-ésimo eixo do elipsóide possuirá coordenadas proporcionais a $e_i^T = [e_{1i}, e_{2i}, ..., e_{pi}]$ no sistema de coordenadas com a origem em μ e eixos $x_1, x_2, ..., x_p$. Da equação (2.91), considerando $\mathbf{y} = \mu = \mathbf{0}$, sendo A uma matriz positiva e definida, seus autovalores são maiores que 0 e c^2 é uma elipse cujos os eixos são $\mathbf{y}_1 = (\mathbf{x}^T \mathbf{e}_1)$ e $\mathbf{y}_2 = (\mathbf{x}^T \mathbf{e}_2)$, tal que $c^2 = \lambda_1 \mathbf{y}_1^2 + \lambda_2 \mathbf{y}_2^2$. Com os autovalores $\lambda_1, \lambda_2 > \mathbf{0}$, verificas e que $\mathbf{x} = c \lambda_1^{-1/2} \mathbf{e}_1$ satisfaz $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \lambda_1 \left(c \lambda_1^{-1/2} \mathbf{e}_1^T \mathbf{e}_1 \right)^2 = c^2$, similarmente $\mathbf{x} = c \lambda_2^{-1/2} \mathbf{e}_2$ fornece a apropriada distância na direção de \mathbf{e}_2 . Fazendo $\mathbf{A} = \Sigma^{-1}, c^2$ pode ser escrito como:

$$c^{2} = x^{T} \Sigma^{-1} x = \frac{1}{\lambda_{1}} (e_{1}^{T} x)^{2} + \frac{1}{\lambda_{2}} (e_{2}^{T} x)^{2} + \dots + \frac{1}{\lambda_{p}} (e_{p}^{T} x)^{2}$$
(2.92)

Esta equação define um elipsóide em um sistema de coordenadas, nos quais os eixos são componentes principais construídos nas direções dos autovetores da matriz de covariância. Como os parâmetros populacionais raramente são conhecidos, substituindo-se Σ , $\mu e \rho$ por seus respectivos equivalentes valores amostrais, S, $\bar{x} e r$, tem-se a demonstração gráfica deste equacionamento na figura 100, com $\mu = 0$, os componentes principais são obtidos pela rotação dos eixos de coordenadas originais por meio de um ângulo θ até que eles coincidam com os eixos da elipse densidade constante.



Figura 2.13 – Elipse de densidade constante com $\mu = 0$

Na maioria das vezes, não se tem conhecimento dos parâmetros populacionais de variância-covariância e correlação, respectivamente, $\Sigma \in \rho$. Neste caso, adota-se a matriz de variância-covariância amostral *S* no lugar de Σ e a matriz de correlação amostral *r* no lugar de ρ , tem-se:

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & \dots & S_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{q1} & \dots & S_{qp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 & \dots & \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} (x_{1j} - \bar{x}_1) (x_{qj} - \bar{x}_p) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} (x_{1j} - \bar{x}_1) (x_{qj} - \bar{x}_q) \dots & \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} (x_{qj} - \bar{x}_q)^2 \end{bmatrix}$$
(2.93)

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

$$\sum_{i=1}^{p} S_{ii} = \hat{\lambda}_1 + \hat{\lambda}_2 + \dots + \hat{\lambda}_p$$
(2.94)

$$\boldsymbol{r}_{(\hat{\lambda}_{i},\boldsymbol{x}_{k})} = \frac{Cov(\boldsymbol{x}_{k},\hat{\lambda}_{i})}{\sqrt{Var(\hat{\lambda}_{i})Var(\boldsymbol{x}_{k})}} = \frac{\hat{e}_{ki}\sqrt{\hat{\lambda}_{i}}}{\sqrt{S_{kk}}}, i, k = 1, 2, \dots, p$$
(2.95)

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

$$(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}})^T \boldsymbol{S}^{-1} (\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}) = c^2$$
(2.96)

A interpretação geométrica dos componentes principais de uma amostra é representada pelas *Figuras 2.14 e 2.15*. A *Figura 2.14* representa uma elipse de distância constante, centrada em \overline{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 2.15* representa uma elipse de distância constante centrada em \overline{x} , com $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$. Se $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$, os eixos da elipse (círculo) de distância constante centrada em \overline{x} , com $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$. Se $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$, 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 homogenia 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 2.14 – Elipse de distância constante, centrada em \overline{x} , com $\hat{\lambda}_1 > \hat{\lambda}_2$

44



Figura 2.15 – Elipse de distância constante centrada em \overline{x} , com $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$

Os escores de componentes principais podem ser obtidos a partir de combinações lineares utilizando matriz de variáveis padronizadas transposta, conforme equação (2.97).

$$PC_{k} = \mathbf{Z}^{T} \mathbf{e} = \begin{bmatrix} \left(\frac{x_{11} - \bar{x}_{1}}{\sqrt{S_{11}}}\right) & \left(\frac{x_{21} - \bar{x}_{2}}{\sqrt{S_{22}}}\right) \dots & \left(\frac{x_{p1} - \bar{x}_{p}}{\sqrt{S_{pp}}}\right) \\ \left(\frac{x_{12} - \bar{x}_{1}}{\sqrt{S_{11}}}\right) & \left(\frac{x_{22} - \bar{x}_{2}}{\sqrt{S_{22}}}\right) \dots & \left(\frac{x_{p2} - \bar{x}_{p}}{\sqrt{S_{pp}}}\right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{x_{1n} - \bar{x}_{1}}{\sqrt{S_{11}}}\right) & \left(\frac{x_{2n} - \bar{x}_{2}}{\sqrt{S_{22}}}\right) \dots & \left(\frac{x_{pn} - \bar{x}_{p}}{\sqrt{S_{pp}}}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} \dots & e_{1p} \\ e_{21} & e_{22} \dots & e_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{q1} & e_{q2} \dots & e_{qp} \end{bmatrix}$$
(2.97)

Em seu estudo Tong et al (2005) desenvolve um procedimento de otimização para múltiplas respostas correlacionadas. A razão sinal-ruído (SN) é inicialmente utilizada para avaliar o desempenho de cada resposta. A Análise de Componentes Principais (ACP) é conduzida sobre os valores SN para obter um conjunto de componentes principais não correlacionados, a direção de otimização para cada componente é determinada com base no correspondente gráfico de variação.

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 otimizar 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.

De acordo com Peres-Neto et al (2005), existem algumas regras de escolha do número adequado de componentes principais que devem ser mantidos na análise, baseadas em valores médios. Estas regras são utilizadas para se avaliar se uma estatística de teste observada, baseada em autovalores ou autovetores, é maior do que o valor esperado médio, sob a hipótese nula de que não há associação entre as variáveis.

Segundo o critério de Kaiser-Guttman que utiliza a matriz de correlação na análise de componentes principais, apenas os componentes principais que apresentarem autovalores maiores do que 1,0 devem ser mantidos para representar a variação total (Jackson, 1993). Entretanto, devido à variação ocorrida na amostragem, aproximadamente metade dos autovalores excederão à unidade.

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). 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 e 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. Segundo Bratchell (1989) existem alguma dificuldades com a otimização de uma resposta multivariada com componentes principais, dentre elas: a) conflito mínimos e máximos em um grupo de variáveis a ser otimizadas, b) representação pobre ocasionada pela pequena estrutura de correlação entre as variáveis originais, c) como incluir ou representar a informação contida nos componentes principais menores, d) a insuficiência de representação do primeiro componente principal. A otimização do componente não considera as variáveis com representação pobre e não pode ser garantido um ponto de ótimo para essas variáveis, Wang (2007) afirma que com a ACP obtêm-se uma combinação de níveis de fator ideal para múltiplas respostas, mas os componentes não podem determinar a significância dos efeitos dos fatores individuais sobre respostas.

Paiva (2006) menciona outra dificuldade em trabalhar com componentes, definir o sentido de otimização de uma equação em termos de componentes principais que reflita o sentido esperado pelas funções originais.

Para insuficiência de representação do primeiro componente principal Paiva (2006) recomenda que se mantenham apenas os componentes principais significativos, ou seja, aqueles componentes que apresentarem autovalores maiores do que 1 e/ou que em conjunto, representem 80% da estrutura de variação das respostas originais ou mais. Uma vez estabelecidos quais componentes principais devem ser utilizados, pode-se compor uma função aditiva ponderada, cujos pesos podem ser (a) os próprios autovalores referentes a cada componente, ou (b) o percentual de explicação de cada componente. O resultado da ponderação será denominado de "Índice Global Multivariado – (IGM)" e pode ser escrito matematicamente como:

$$IGM = \sum_{i=1}^{m} [\lambda_i (PC_{S_i})]$$
(2.98)

Da qual, m = número de componentes principais significativos, $\lambda_i = i$ -ésimo autovalor e $PC_{S_i} = i$ -ésimo escore de componente principal.

$$IGM = \sum_{i=1}^{m} \left[\frac{\lambda_i}{\sum_{j=1}^{p} \lambda_j} \cdot (PC_{S_i}) \right]$$
(2.99)

Neste trabalho adotou-se a abordagem de Souza (2000) e Lopes (2001), que utilizaram uma combinação dos três critérios descritos anteriormente. Usar um valor de referência de percentual de variação explicada de 80%.

2.9. Considerações finais do capítulo

Conforme descrito na revisão de literatura, existem vários trabalhos publicados no meio científico sobre otimização de processos com múltiplas respostas. Alguns métodos não consideram todas respostas simultaneamente, outros a estrutura de correlação entre as respostas são descartadas, podendo levar a um erro de determinação do ponto ótimo. A ACP é utilizada para análise de respostas correlacionadas. Porém há vários critérios para escolha dos componentes principais, conforme citado por alguns autores existem algumas dificuldades para ACP como correlações opostas (máximo e mínimo) e baixa correlação entre as variáveis originais e definição do sentido de otimização de uma equação em termos de componentes

principais que reflita o sentido esperado pelas funções originais, o presente trabalho dedicou a aplicação do método do vetor gradiente multivariado através da ACP ponderados pelo método de cone de confiança, responsável por garantir uma direção precisa para os componentes principais.

Para análise e otimização, foram apresentados os conceitos que envolvem o Projeto e Análise de Experimentos, fundamental no desenvolvimento de novos projetos e melhorias de processos. A MSR que é um conjunto de técnicas matemáticas e estatísticas úteis para modelagem e análise de problemas com otimização multivariada foi utilizada neste trabalho.

Os métodos de otimização *desirability* e prioridade ponderada são apresentados como métodos para otimização multivariada e foram utilizados para comparar a eficiência do método proposto.

3. MÉTODO EXPERIMENTAL

3.1. Considerações iniciais

Nos capítulos anteriores foram apresentados conceitos sobre métodos de otimização multivariada, este capítulo tem o objetivo de descrever o método proposto por este trabalho.

Este trabalho propõe um método de deslocamento na direção de máxima ascensão para múltiplas respostas correlacionadas, através da análise dos componentes principais ponderados pelo cone confiança.

Para desenvolver o método, primeiro definem-se os parâmetros e as variáveis utilizadas, em seguida, o método é descrito em detalhe.

3.2. Desenvolvimento do método

Para um melhor entendimento do método proposto, foi construído um fluxograma com os passos até a região onde deve ser aplicado a MSR.



Figura 3.1 – Fluxograma do método proposto para otimização multivariada.

O conceito de variância integrada foi utilizado na realização dos experimentos iniciais aleatórios, os pontos definidos continham o mínimo de dispersão, evita-se assim a simulação de parâmetros fora da região de trabalho.

Na maioria das vezes esses processos deverão atender a mais de uma característica de projeto (resposta). É muito comum se desejar que o máximo de requisitos ou características de um produto ou processo, que determinem a satisfação de um cliente, sejam totalmente atendidas (Castilho, 2007). Assim a etapa de padronização dos objetivos é definida quais respostas serão estudadas, conforme estrutura de correlação apresentado na sessão 4.1. Negligenciar esta correlação entre as respostas pode levar a recomendações conflitantes sobre os níveis de fatores Johnson e Wichern (2007) e Salmasnia (2012).

As variáveis correlacionadas são substituídas pelos escores de componentes principais sem que haja perda significativa de informações e de acordo com o objetivo estabelecido define-se o melhor escore de componente principal como ponto central do experimento.

Para definição dos níveis dos fatores adotou-se o critério desenvolvido por Myers et al (2009), descritos na sessão 2.4.1, tem-se:

$$\frac{\Delta x_i}{\Delta x_j} = a_{ij}^2 = \frac{r_i}{r_j} \quad para \ i, j = 1, 2, \dots k \quad i \neq j$$
(3.1)

Da qual

 r_i = intervalo para o fator um fator A;

 r_j = intervalo para o fator um fator B;

 Δx_i = cumprimento do passo relativo ao fator A;

 Δx_i = cumprimento do passo relativo ao fator B;

Constrói-se o arranjo fatorial de dois níveis (baixo e alto), segundo Myers e Montgomery (2009) como o resultado da operação pode envolver mais do que um experimento (corrida), a simplicidade do modelo é muito importante. Assume-se que um modelo de primeira ordem é uma aproximação razoável do sistema na região inicial de x_1 , x_2 ,..., x_k .

Os experimentos são simulados de acordo com a planilha desenvolvida para modelagem matemática das respostas dos experimentos realizados por Gomes (2010) e estimam-se os modelos lineares codificados para as respostas correlacionadas. Em seguida são calculados os pesos para as respostas correlacionadas através do cone de confiança conforme Eq. (2.26).

As respostas são então padronizadas e ponderadas pelo cone de confiança *w*, na sequência calcula-se o escore do componente principal ponderado das respostas padronizadas e ponderadas. Estima-se o modelo linear codificado para o componente principal ponderado. Em seguida calcula-se o cone de confiança para o escore do componente principal ponderado.

Para o modelo de primeira ordem do componente principal ponderado é realizado a sequência de passos:

- Calculo do passo na direção da região de ótimo com a confiabilidade dada pelo cone de confiança;
- 2- Simulação de ensaios experimentais com base nos coeficientes estimados para os modelos quadráticos reduzidos do escore do componente principal das respostas analisadas, até que em algum ponto significativo na curvatura é detectado;
- 3- Simulação de um arranjo de superfície de resposta, tal como um arranjo composto central (CCD).

3.3. Considerações finais do capítulo

Neste capítulo foi apresentado o método proposto para otimização de processos com respostas correlacionadas através de ACP ponderados pelo cone de confiança, o método proposto ficou dividido nas seguintes fases: Simulação dos experimentos iniciais, desenvolvimento do método proposto e otimização. Os detalhes de todas as etapas foram apresentados no fluxograma.

No próximo capitulo será descrito a aplicação do método proposto através da simulação computacional. Para isto será utilizado como exemplo dados simulados da planilha desenvolvida por Gomes (2010).

4. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MÉTODO

4.1. Considerações iniciais

Como o objetivo testar a eficiência do método proposto, este capítulo apresenta a simulação de duas respostas correlacionadas ($Y_1 e Y_2$). Serão apresentados cinco casos:

- Estrutura de correlação baixa, sem conflitos de mínimos e máximos;
- Estrutura de correlação baixa, com conflito de mínimo e máximo;
- Estrutura de correlação média, sem conflito de mínimo e máximo;
- Estrutura de correlação média, com conflito de mínimo e máximo;
- Estrutura de correlação alta, sem conflito de mínimo e máximo.

4.2. Base de dados

Nos experimentos realizados por Gomes (2010), com o objetivo de otimizar o processo de soldagem com arame tubular para operações de revestimentos de chapas de aço carbono ABNT 1020 com aço inoxidável ABNT 316L, é desejado:

- Maximização da largura do cordão;
- Maximização do reforço;
- Minimização da penetração;
- Minimização da diluição.

Para a produtividade do processo, busca-se a:

- Maximização da taxa de deposição;
- Maximização do rendimento.

Danâmatuaa	Unidada	Notação -	Níveis de trabalho					
rarametros	Unidade	Notação -	-2	-1	0	+1	+2	
Velocidade de alimentação do aram	m/min	Va	5,5	7,0	8,5	10,0	11,5	
Tensão	V	Т	24,5	27,0	29,5	32,0	34,5	
Velocidade de soldagem	cm/min	Vs	20	30	40	50	60	
Distância bico de contato peça	mm	Ν	10	15	20	25	30	

Tabela 4.1 – Parâmetros das variáveis e níveis de trabalho

A *Tabela 4.2* apresenta outras variáveis que também compõem a soldagem com arame tubular, estas foram tratadas como parâmetros fixos e a *Tabela 4.3* apresenta a composição química dos materiais utilizados.

Tabela 4.2 – Parâmetros fixos							
Parâmetro	Valor/tipo adotado						
Material do metal base	Aço carbono ABNT 1020						
Material do metal de adição	Aço inoxidável E316LT1-1/4						
Espessura do metal base	6,35 mm						
Diâmetro do eletrodo	1,2 mm						
Tipo do eletrodo	Arame tubular						
Posição de soldagem	Posição plana						
Ângulo da tocha	15° (empurrando)						
Recuo do bico de contato	5 mm						
Tipo do gás de proteção	C_{25}						
Vazão do gás de proteção	16 l/min						

Tabela 4.3 - Composição química (%) do metal base e metal de adição

Material	С	Mn	Р	S	Si	Ni	Cr	Mo
Aço inoxidável E316LT1-1/4	0,03	1,58	-	-	1,00	12,4	18,5	2,46
Aço carbono ABNT 1020	0,18/0,23	0,30/0,60	0,04	0,05	-	-	-	-

Tabela 4.4 – Objetivo para cada resposta a ser avaliada

Resposta	Unidade	Notação	Objetivo
Largura do cordão de solda	mm	W	Maximizar
Reforço	mm	R	Maximizar
Penetração	mm	Р	Minimizar
Diluição	%	D	Minimizar
Taxa de deposição	Kg/h	TD	Maximizar
Rendimento do processo	%	η	Maximizar

A execução dos experimentos foi realizada no Laboratório de Soldagem da Universidade Federal de Itajubá, utilizando como equipamentos uma fonte ESAB AristoPower 460, um módulo AristoFeed 30-4W MA6 para a alimentação do arame e um banco de testes com dispositivo para controle da velocidade de soldagem e ajuste da tocha em relação ao metal base.

Os experimentos foram realizados através da simples deposição de um cordão de aço inoxidável sobre os corpos de prova de aço carbono, cortados em chapas de dimensões 120 x 60 x 6,35 mm. Quanto aos parâmetros do processo, foram considerados conforme *Tabela 4.1* e os parâmetros variáveis foram combinados de acordo com a matriz experimental *Tabela 4.5*.

TF		Parâmetros				Geor	netria	Produtividade		
Teste -	Va	Т	Vs	Ν	W	Р	R	D	TD	η
1	-1	-1	-1	-1	11,19	1,37	2,63	26,44%	2,718	89,74%
2	1	-1	-1	-1	12,99	1,66	3,12	25,82%	3,881	89,71%
3	-1	1	-1	-1	12,70	1,69	2,50	31,49%	2,699	89,14%
4	1	1	-1	-1	15,05	1,98	2,78	31,25%	3,871	89,47%
5	-1	-1	1	-1	9,21	1,65	2,17	36,22%	2,773	91,58%
6	1	-1	1	-1	9,96	1,94	2,67	33,69%	3,924	90,70%
7	-1	1	1	-1	9,75	1,54	2,06	37,12%	2,647	87,43%
8	1	1	1	-1	11,51	2,18	2,42	41,08%	3,822	88,36%
9	-1	-1	-1	1	10,32	1,25	2,87	22,46%	2,740	90,49%
10	1	-1	-1	1	11,43	1,00	*	18,32%	3,870	89,47%
11	-1	1	-1	1	11,27	1,32	2,85	23,71%	2,743	90,60%
12	1	1	-1	1	13,34	1,10	3,18	21,96%	3,885	89,81%
13	-1	-1	1	1	7,99	1,11	2,55	24,96%	2,847	94,03%
14	1	-1	1	1	8,62	1,23	2,80	23,31%	3,901	90,17%
15	-1	1	1	1	8,48	1,37	2,36	28,77%	2,832	93,52%
16	1	1	1	1	10,84	1,64	2,60	30,19%	3,969	91,74%
17	-2	0	0	0	9,07	1,38	2,21	31,56%	2,204	92,62%
18	2	0	0	0	12,21	2,14	3,06	30,95%	4,454	89,52%
19	0	-2	0	0	9,42	1,20	3,03	22,84%	3,324	90,41%
20	0	2	0	0	11,69	1,86	2,46	35,58%	3,311	90,04%
21	0	0	-2	0	14,93	0,95	*	18,58%	3,319	90,27%
22	0	0	2	0	8,48	1,43	2,25	35,78%	3,423	93,08%
23	0	0	0	-2	11,73	2,18	2,61	40,44%	3,242	88,15%
24	0	0	0	2	9,22	1,28	2,89	24,16%	3,385	92,05%
25	0	0	0	0	10,82	1,71	2,60	31,05%	3,421	93,04%
26	0	0	0	0	10,93	1,72	2,59	31,67%	3,380	91,91%
27	0	0	0	0	10,74	1,62	2,65	30,88%	3,402	92,51%
28	0	0	0	0	10,61	1,80	2,50	32,83%	3,382	91,98%
29	0	0	0	0	10,64	1,49	2,62	29,99%	3,388	92,15%
30	0	0	0	0	10,59	1,49	2,61	31,09%	3,398	92,40%
31	0	0	0	0	10,57	1,50	2,56	31,02%	3,404	92,58%

Tabela 4.5 – Matriz	experimental
---------------------	--------------

Após a execução dos experimentos foi gerado um banco de dados para modelagem matemática das respostas. A *Tabela 4.6* apresenta o resumo dos valores obtidos para as variáveis de respostas que passam a ser consideradas para efeito de simulação.

Cooficiento		Respostas								
Coefficiente	W	Р	R	D	TD	η				
Constante	10,6395	1,6387	2,5965	0,3103	3,3964	0,9237				
Va	0,7967	0,1221	0,1914	-0,0028	0,5676	-0,0055				
Т	0,6555	0,1220	-0,1044	0,0249	-0,0089	-0,0027				
Vs	-1,4507	0,0934	-0,2227	0,0368	0,0215	0,0061				
Ν	-0,6290	-0,2408	0,1149	-0,0425	0,0308	0,0090				
Va^2	-0,0000	0,0246	0,0000	-0,0000	-0,0190	-0,0039				
T^2	-0,0000	-0,0320	0,0336	-0,0072	-0,0218	-0,0060				
Vs^2	0,2700	-0,1181	0,0196	-0,0123	-0,0084	-0,0024				
N^2	-0,0000	0,0000	0,0358	0,0000	-0,0229	-0,0063				
VaT	0,2663	0,0337	-0,0299	0,0077	0,0080	0,0028				
VaVs	-0,1137	0,0757	0,0000	0,0050	-0,0057	-0,0026				
VaN	0,0000	-0,0998	-0,0229	-0,0042	-0,0124	-0,0049				
TVs	-0,1023	0,0000	0,0000	0,0000	-0,0103	-0,0032				
TN	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0204	0,0055				
VsN	0,0665	0,0000	0,0000	-0,0077	0,0195	0,0057				

Tabela 4.6 - Coeficientes estimados para os modelos quadráticos reduzidos

A partir do modelo reduzido foi construída uma planilha no Microsoft Excel®, para otimização do processo da soldagem com arame revestido tubular para revestimentos de aço carbono ABNT 1020 com aço inoxidável ABNT 316 L.

Correlations: W; P; R; D; TD; η

Ρ	W 0,225 0,224	P	R	D	TD
R	0,512 0,003	-0,335 0,066			
D	-0,127 0,495	0,833 0,000	-0,772 0,000		
TD	0,362 0,045	0,314 0,085	0,555 0,001	-0,061 0,745	
η	-0,575 0,001	-0,326 0,074	-0,255 0,165	-0,138 0,459	-0,212 0,253
Cell	Contents:	Pearson P-Value	correla	ation	

Figura 4.1 – Estrutura de correlação entre as respostas (Correlação significativa: *p-value* < 0,05)

Assim, foram feitas as combinações de duas respostas, conforme os critérios definidos na seção 4.1.

Como o modelo simulado possui quatro variáveis Va, T, $Vs \ e \ N$ para análise de variância integrada definiu-se pontos aleatórios entre -1 e 1 para os níveis das quatro variáveis, a variância integrada para este modelo é:

$$I = \frac{\int_{\Omega} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})]d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} = \frac{\sigma^{2} \int_{a}^{b} \int_{c}^{d} \int_{g}^{h} \left[\begin{pmatrix} c_{11} + c_{22}x_{1}^{2} + c_{33}x_{2}^{2} + c_{44}x_{3}^{2} + c_{55}x_{4}^{2} + c_{66}x_{1}^{2}x_{2}^{2} + \\ c_{77}x_{1}^{2}x_{3}^{2} + c_{88}x_{1}^{2}x_{4}^{2} + c_{99}x_{2}^{2}x_{3}^{2} + c_{1010}x_{2}^{2}x_{4}^{2} + \\ c_{1111}x_{3}^{2}x_{4}^{2} + c_{1212}x_{1}^{2}x_{2}^{2}x_{3}^{2} + c_{1313}x_{1}^{2}x_{2}^{2}x_{4}^{2} + \\ c_{1414}x_{1}^{2}x_{3}^{2}x_{4}^{2} + c_{1515}x_{2}^{2}x_{3}^{2}x_{4}^{2} + c_{1616}x_{1}^{2}x_{2}^{2}x_{3}^{2}x_{4}^{2} + \\ \frac{\int_{a}^{b} \int_{a}^{d} \int_{c}^{d} \mathbf{x}}{\int_{a}^{b} \int_{c}^{d} \int_{g}^{d} dx_{1} dx_{2} dx_{3} dx_{4}}$$

$$I = \frac{\int_{\Omega} Var[\hat{Y}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} = \left[\frac{\sigma^{2}}{(b-a)(d-c)(f-e)(h-g)}\right] \times \left[\begin{pmatrix} c_{11}(h-g)(f-e)(d-c)(b-a) + c_{22}(h-g)(f-e)(d-c)\left(\frac{b^{3}-a^{3}}{3}\right) \\ + c_{33}(h-g)(f-e)\left(\frac{d^{3}-c^{3}}{3}\right)(b-a) + c_{44}(h-g)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right)(d-c)(b-a) + \\ c_{55}\left(\frac{h^{3}-g^{3}}{3}\right)(f-e)(d-c)(b-a) + c_{66}(h-g)(f-e)\left(\frac{d^{3}-c^{3}}{3}\right)\left(\frac{b^{3}-a^{3}}{3}\right) + \\ c_{77}(h-g)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right)(d-c)\left(\frac{b^{3}-a^{3}}{3}\right) + c_{88}\left(\frac{h^{3}-g^{3}}{3}\right)(f-e)(d-c)\left(\frac{b^{3}-a^{3}}{3}\right) + \\ c_{99}(h-g)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right)\left(\frac{d^{3}-c^{3}}{3}\right)(b-a) + c_{1010}\left(\frac{h^{3}-g^{3}}{3}\right)(f-e)\left(\frac{d^{3}-c^{3}}{3}\right)(b-a) + \\ c_{1111}\left(\frac{h^{3}-g^{3}}{3}\right)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right)(d-c)(b-a) + c_{1212}(h-g)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right)\left(\frac{d^{3}-c^{3}}{3}\right)\left(\frac{b^{3}-a^{3}}{3}\right) + \\ c_{1313}\left(\frac{h^{3}-g^{3}}{3}\right)(f-e)\left(\frac{d^{3}-c^{3}}{3}\right)\left(\frac{b^{3}-a^{3}}{3}\right) + c_{1414}\left(\frac{h^{3}-g^{3}}{3}\right)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right) \\ \left(\frac{b^{3}-a^{3}}{3}\right) + c_{1515}\left(\frac{h^{3}-g^{3}}{3}\right)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right)\left(\frac{d^{3}-c^{3}}{3}\right)(b-a) + c_{1616}\left(\frac{h^{3}-g^{3}}{3}\right)\left(\frac{f^{3}-e^{3}}{3}\right) \\ \left(\frac{d^{3}-c^{3}}{3}\right)\left(\frac{b^{3}-a^{3}}{3}\right)$$

A partir do cálculo da mínima variância, é possível simular os experimentos iniciais aleatórios.

Experimento	Variância	Va	Т	Vs	Ν
1	0,2044	0,2593	-0,1983	-0,1792	-0,4517
2	0,2067	-0,2209	0,1744	0,2772	0,8936
3	0,2193	-0,4334	0,0672	0,0656	-0,142
4	0,2276	-0,0053	-0,276	-0,1283	-0,1277
5	0,2371	-0,2375	-0,0075	-0,0635	-0,0007

Tabela 4.7 – Definição dos parâmetros para mínima variância

Tabela 4.8 – Experimentos iniciais aleatórios Va Т W TD Experimento Vs Ν Р R D η 1 8,9 38,2 17,7 11,262 1,741 2,668 0,316 3,525 0,917 29,0 2 42,8 1,449 0,285 3,292 0,932 8,2 29,9 24,5 9,643 2,614 3 7,8 29,7 40,7 19,3 10,328 1,629 2,476 0,321 0,924 3,141 4 8,5 28,8 38,7 19,4 10,723 1,619 2,642 0,303 0,922 3,388 5 8,1 29,5 39,4 20,0 10,538 1,605 2,566 0,309 3,259 0,924

A partir dos experimentos iniciais aleatórios calculam-se os escores dos componentes principais e conforme o objetivo, adota-se a melhor resposta como *center point* para o arranjo fatorial completo.

4.3. Caso Nº1 – Estrutura de correlação baixa, sem conflitos de mínimos e máximos.

Conforme *Figura 4.1* será utilizado para análise $W \in TD$, para as estruturas de correlações baixas sem conflito de mínimo e máximo.

A correlação entre W e TD é de 0,361 e significativa (*p*-value = 0,046).

Da *Tabela 4.9*, como objetivo de *W* e *TD* é maximizar, a melhor resposta é o experimento 1.

Tablea 4.7 Escores dos componences principais para as resposads w e 1D										
Experimento	PCA	Va	Т	Vs	Ν	W	TD			
1	1,9144	8,9	29,0	38,2	17,7	11,262	3,525			
2	-1,1652	8,2	29,9	42,8	24,5	9,643	3,292			
3	-1,0868	7,8	29,7	40,7	19,3	10,328	3,141			
4	0,5954	8,5	28,8	38,7	19,4	10,723	3,388			
5	-0,2578	8,1	29,5	39,4	20,0	10,538	3,259			

Tabela 4.9 – Escores dos componentes principais para as respostas W e TD

Definido o center point realiza-se o fatorial completo para W e TD.

Experimento	Va	Т	Vs	N	W	TD
1	7,4	26,5	28,2	12,7	12,369	2,858
2	10,4	26,5	28,2	12,7	13,593	4,004
3	7,4	31,5	28,2	12,7	13,527	2,811
4	10,4	31,5	28,2	12,7	15,816	3,988
5	7,4	26,5	48,2	12,7	9,495	2,884
6	10,4	26,5	48,2	12,7	10,264	4,006
7	7,4	31,5	48,2	12,7	10,244	2,795
8	10,4	31,5	48,2	12,7	12,077	3,950
9	7,4	26,5	28,2	22,7	10,955	2,885
10	10,4	26,5	28,2	22,7	12,178	3,981
11	7,4	31,5	28,2	22,7	12,112	2,919
12	10,4	31,5	28,2	22,7	14,401	4,047
13	7,4	26,5	48,2	22,7	8,346	2,988
14	10,4	26,5	48,2	22,7	9,115	4,061
15	7,4	31,5	48,2	22,7	9,095	2,981
16	10,4	31,5	48,2	22,7	10,929	4,086
ср	8,9	29,0	38,2	17,7	11,262	3,525

Tabela 4.10 – Matriz experimental para W e TD

Conforme apresenta a seção 2.3 Eq. (2.2) o modelo de superfície de resposta de segunda ordem é utilizado para representar a relação aproximada entre uma resposta das variáveis de entrada.

As Eq. (4.2) descreve o modelo entre as respostas *W* e *TD* e os parâmetros do processo *Va*, *T*, *Vs* e *N*.

$$W = 10,6395 + 0,7967Va + 0,6555T - 1,4507Vs - 0,6290N - 0,0033Va^{2} - 0,0240T^{2} + 0,27Vs^{2} - 0,044N^{2} + 0,2663VaT - 0,1137VaVs - 0,0308VaN - 0,1023TVs - 0,0064TN + 0,0665VsN$$
(4.2)

$$TD = 3,3964 + 0,5676Va - 0,0089T + 0,0215Vs + 0,0308N - 0,0190Va^{2} - 0,0218T^{2} - 0,0084Vs^{2} - 0,0229N^{2} + 0,0080VaT - 0,0057VaVs -$$
(4.3)
0,0124VaN - 0,0103TVs + 0,0204TN + 0,0195VsN

Após definição dos modelos lineares para $W \in TD$, calculam-se os pesos destas respostas conforme Eq. (2.44), para $W \in TD$. Tanto para W quanto para TD pode-se afirmar com 95% de confiança que 99,98% das direções possíveis do ponto de operação atual são excluídas. Esta informação pode ser utilizada para determinar o tamanho do passo. Quanto

menor for o percentual das direções excluídas, menor deve ser o passo, Neste caso, a direção de máxima ascensão verdadeira está dentro deste cone de 0,02% de direções possíveis, como 0,02% de 360° é 0,072°, pode afirmar que o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 0,036°$ do caminho verdadeiro. Então, pode-se usar um grande passo no caminho máxima ascensão.

Neste trabalho o cone de confiança também foi utilizado para ponderar as respostas, aquela resposta que possui um maior percentual de direções excluídas pelo cone de confiança terá um peso maior no cálculo do componente principal ponderado (*PCW*) das duas respostas. Para *W* e *TD*, o percentual foi o mesmo, não influenciando no valor do *PCW*.

Da **Tabela 4.10**, padroniza e pondera as respostas W e TD pelo cone de confiança, calcula-se o PCW e estima-se o modelo entre as respostas PCW e os parâmetros do processo Va, T, Vs e N.

 $PCW = 0,0083 + 0,5552Va + 0,1274T - 0,2807Vs - 0,1068N - 0,0138Va^{2} - 0,0200T^{2} + 0479Vs^{2} - 0,0248N^{2} + 0,0598VaT - 0,0271VaVs - 0,0148VaN$ (4.4) - 0,0279TVs + 0,0128TN + 0,0270VsN (4.4)

Definido o componente, estima-se o modelo linear para o mesmo.

	W	TD	PCW
Constante	11,5160	3,4570	0,0000
Va	0,7640	0,5627	0,4840
Т	0,7430	-0,0055	0,1252
Vs	-1,5870	0,0162	-0,2647
Ν	-0,6410	0,0408	-0,0855
R ² (adj.)	98,35%	98,47%	100,00%

Tabela 4.11 – Coeficientes estimados do modelo linear para W e TD

Com os coeficientes estimados, calcula-se o cone de confiança para o PC ponderado. A região excluída pelo cone de confiança é de 99,9999998%, isto indica que a direção de máxima ascensão verdadeira está dentro deste cone de 0,0000002% de direções possíveis, como 0,0000002% de 360° é 0,00000072°, pode afirmar que o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 0,00000036°$ do caminho verdadeiro.

Após definido os coeficientes, aplica-se o método do vetor gradiente para o *PCW* até que um ponto de curvatura é detectado.
Passo	Va	Т	Vs	N	PCW	PCWPadron.
Δ	-0,700	1,940	-1,641	0,177	-	-
ср	8,889	29,004	38,209	17,741	-	-
-8	14,489	13,484	51,334	16,328	-1,19025	-1,444
-7	13,789	15,424	49,693	16,505	-0,77911	-0,742
-6	13,089	17,364	48,053	16,681	-0,43499	-0,154
-5	12,389	19,304	46,412	16,858	-0,15787	0,320
-4	11,689	21,244	44,771	17,035	0,052236	0,678
-3	10,989	23,184	43,131	17,211	0,195333	0,923
-2	10,289	25,124	41,490	17,388	0,27142	1,053
-1	9,589	27,064	39,849	17,565	0,280497	1,068
0	8,889	29,004	38,209	17,741	0,222564	0,969
1	8,189	30,944	36,568	17,918	0,097621	0,756
2	7,489	32,884	34,927	18,095	-0,09433	0,428
3	6,789	34,825	33,286	18,271	-0,35329	-0,014
4	6,089	36,765	31,646	18,448	-0,67927	-0,571
5	5,389	38,705	30,005	18,625	-1,07225	-1,242
6	4,689	40,645	28,364	18,801	-1,53224	-2,028

Tabela 4.12 – Caminho de máxima ascensão para PCW de W e TD



Figura 4.2 – Caminho de máxima ascensão para W, TD e PCW

4.4. Caso N°2 – Estrutura de correlação baixa, com conflitos de mínimos e máximos.

Segundo Paiva (2006), se a correlação entre PC1 (ou IGM) e um grupo de variáveis for positiva, sua maximização ou minimização implicará na maximização ou minimização de cada variável de resposta original. Se a correlação for negativa, os sentidos de otimização serão inversos. Se uma variável do conjunto não puder ser harmonizada com estas inversões, então, a multiplicação da resposta original por uma constante negativa, resolverá o problema. Esta multiplicação deve ser realizada antes de se proceder à análise dos componentes principais,

Assim, a multiplicação de uma resposta por (-1), não influenciará os autovalores, mas inverterá o sinal do autovetor referente à resposta que recebeu a inversão. Com esta demonstração pode-se entender também que uma ponderação das respostas originais do conjunto multivariado por graus de importância alteraria substancialmente a análise de componentes principais. Assim, se o vetor $c^T X$ representará uma matriz ponderada do conjunto multivariado. Portanto, qualquer ponderação de respostas só é recomendada neste método, posteriormente à transformação por componentes principais.

Para estruturas de correlações baixas com conflito de mínimo e máximo, conduziu-se a analise com as respostas *D* e *TD*.

A correlação entre $D \in TD$ é de -0,056 e não significativa (*p*-value = 0,766).

Como objetivo de D é minimizar e TD é maximizar, na geração dos experimentos iniciais aleatórios multiplicam-se as respostas para D por (-1), obtém-se como melhor resposta o experimento 2.

Iuoen	LI13 L500	100 000 0	omponent	es princip	uib puiu	us respondes	DUID
Teste	PCA	Va	Т	Vs	Ν	D	TD
1	0,5403	8,9	29,0	38,2	17,7	-31,58%	3,525
2	0,9671	8,2	29,9	42,8	24,5	-28,47%	3,292
3	-1,6058	7,8	29,7	40,7	19,3	-32,11%	3,141
4	0,4969	8,5	28,8	38,7	19,4	-30,33%	3,388
5	-0,3984	8,1	29,5	39,4	20,0	-30,86%	3,259

Tabela 4.13 – Escores dos componentes principais para as respostas D e TD

Definido o *center point* realiza-se o fatorial completo para D e TD.

Teste	Va	Т	Vs	N	D	TD
1	6,7	27,4	32,8	19,5	27,08%	2,64
2	9,7	27,4	32,8	19,5	24,62%	3,79
3	6,7	32,4	32,8	19,5	29,68%	2,60
4	9,7	32,4	32,8	19,5	30,29%	3,78
5	6,7	27,4	52,8	19,5	32,02%	2,70
6	9,7	27,4	52,8	19,5	31,55%	3,83
7	6,7	32,4	52,8	19,5	34,63%	2,62
8	9,7	32,4	52,8	19,5	37,23%	3,78
9	6,7	27,4	32,8	29,5	20,71%	2,59
10	9,7	27,4	32,8	29,5	16,58%	3,69
11	6,7	32,4	32,8	29,5	23,32%	2,63
12	9,7	32,4	32,8	29,5	22,26%	3,76
13	6,7	27,4	52,8	29,5	22,58%	2,73
14	9,7	27,4	52,8	29,5	20,43%	3,81
15	6,7	32,4	52,8	29,5	25,18%	2,73
16	9,7	32,4	52,8	29,5	26,11%	3,84
ср	8,2	29,9	42,8	24,5	28,47%	3,29

Tabela 4.14 – Matriz experimental para D e TD

As Eq. (4.5) e Eq. (4.6) descrevem os modelos entre as respostas D e TD e os parâmetros do processo Va, T, $Vs \ e \ N$.

 $D = 0,3103 - 0,0028Va + 0,0249T + 0,0368Vs - 0,0425N - 0,0023Va^{2} - 0,0072T^{2} + 0,1237Vs^{2} + 0,0003N^{2} + 0,0077VaT - 0,005VaVs - 0,0042VaN + 0,0023TVs$ (4.5) - 0,0020TN - 0,0077VsN (4.5)

 $TD = 3,3964 + 0,5676Va - 0,0089T + 0,0215Vs + 0,0308N - 0,0190Va^{2} - 0,0218T^{2} - 0,0084Vs^{2} - 0,0229N^{2} + 0,0080VaT - 0,0057VaVs - 0,0124VaN - 0,0103TVs + 0,0204TN + 0,0195VsN$ (4.6)

Para *D* o percentual de direções excluídas é de 99,52% e para *TD* mesmo com a região experimental diferente em relação ao caso N°1 o percentual é de 99,98%. A direção de máxima ascensão verdadeira para *D* esta dentro de 0,48% de direções possíveis, como 0,48% de 360° é 1,72° pode-se afirmar que o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 0,864°$ do caminho verdadeiro e para *TD*, o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 0,036°$ do caminho verdadeiro. Como no caso N°1 o percentual é muito próximo entre *D* e *TD*, também não influencia no valor do *PCW*.

$$PCW = 0,0587 - 0,4229Va + 0,1514T + 0,1988Vs - 0,2695N + 0,0002Va^{2} - 0,0276T^{2} - 0,0666Vs^{2} + 0,0182N^{2} + 0,0390VaT + 0,0330VaVs - 0,0155VaN + 0,0205TVs - 0,0262TN - 0,0588VsN$$

$$(4.7)$$

Definido o componente, estima-se o modelo linear para o mesmo.

	D	TD	PCW
Constante	0,266	-3,250	0,000
Va	-0,004	-0,565	-0,393
Т	0,021	0,003	0,128
Vs	0,022	-0,034	0,112
Ν	-0,044	-0,002	-0,268
R ² (adj.)	88,13%	98,48%	98,13%

Tabela 4.15 – Coeficientes estimados do o modelo linear para D e TD

A região excluída pelo cone de confiança é de 99,97%, isto indica que a direção de máxima ascensão verdadeira está dentro deste cone de 0,03% de direções possíveis, como 0,03% de 360° é 0,108°, o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 0,054°$ do caminho verdadeiro.

		10 - Cammo uc	maxima ascer	isao para r		C I D
Passo	Va	Т	Vs	Ν	PCW	PCWPadron.
Δ	-0,050	0,883	0,086	-0,085	-	-
ср	8,169	29,936	42,772	24,468	-	-
0	8,169	29,936	42,772	24,468	-0,017	-2,317
1	8,119	30,819	42,858	24,382	0,040	-1,552
2	8,069	31,703	42,944	24,297	0,089	-0,886
3	8,019	32,586	43,030	24,212	0,130	-0,321
4	7,969	33,469	43,116	24,126	0,165	0,144
5	7,919	34,352	43,202	24,041	0,191	0,508
6	7,869	35,236	43,288	23,955	0,211	0,773
7	7,819	36,119	43,374	23,870	0,223	0,936
8	7,769	37,002	43,460	23,784	0,228	1,000
9	7,719	37,885	43,546	23,699	0,225	0,963
10	7,669	38,769	43,631	23,614	0,215	0,826
11	7,619	39,652	43,717	23,528	0,197	0,589
12	7,569	40,535	43,803	23,443	0,172	0,251
13	7,519	41,419	43,889	23,357	0,140	-0,187
14	7,469	42,302	43,975	23,272	0,101	-0,726

Tabela 4.16 – Caminho de máxima ascensão para PCW de D e TD



Figura 4.3 - Caminho de máxima ascensão para D, TD e PCW

4.5. Caso N°3 – Estrutura de correlação média, sem conflitos de mínimos e máximos.

Para estruturas de correlações média sem conflito de mínimo e máximo, a analise foi realizada com as respostas $W e \eta$.

A correlação entre *W* e η é de -0,533 e significativa (*p*-value = 0,002).

O objetivo de *W* e η é maximizar, a melhor resposta é o experimento 2.

			1	r r	1	T	
Experimento	PCA	Va	Т	Vs	Ν	\mathbf{W}	η
1	-1,813	8,9	29,0	38,2	17,7	11,262	91,72%
2	2,089	8,2	29,9	42,8	24,5	9,643	93,16%
3	0,191	7,8	29,7	40,7	19,3	10,328	92,37%
4	-0,497	8,5	28,8	38,7	19,4	10,723	92,21%
5	0,029	8,1	29,5	39,4	20,0	10,538	92,43%

Tabela 4.17– Escores dos componentes principais para as respostas $W e \eta$

Definido o *center point* realiza-se o fatorial completo para $W \in \eta$.

	1 400				· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
Experimento	Va	Т	Vs	Ν	W	η
1	6,7	27,4	32,8	19,5	10,494	91,507%
2	9,7	27,4	32,8	19,5	11,812	90,751%
3	6,7	32,4	32,8	19,5	11,303	90,190%
4	9,7	32,4	32,8	19,5	13,686	90,561%
5	6,7	27,4	52,8	19,5	8,325	93,493%
6	9,7	27,4	52,8	19,5	9,188	91,715%
7	6,7	32,4	52,8	19,5	8,724	90,914%
8	9,7	32,4	52,8	19,5	10,653	90,263%
9	6,7	27,4	32,8	29,5	9,140	90,493%
10	9,7	27,4	32,8	29,5	10,458	87,787%
11	6,7	32,4	32,8	29,5	9,949	91,387%
12	9,7	32,4	32,8	29,5	12,332	89,808%
13	6,7	27,4	52,8	29,5	7,237	94,752%
14	9,7	27,4	52,8	29,5	8,100	91,024%
15	6,7	32,4	52,8	29,5	7,636	94,385%
16	9,7	32,4	52,8	29,5	9,565	91,785%
ср	8,2	29,9	42,8	24,5	9,643	93,163%

Tabela 4.18 – Matriz experimental $W e \eta$

As Eq. (4.8) e Eq. (4.9) descrevem os modelos entre as respostas $W e \eta e$ os parâmetros do processo *Va*, *T*, *Vs e N*.

$$W = 10,6395 + 0,7967Va + 0,6555T - 1,4507Vs - 0,6290N - 0,0033Va^{2} - 0,0240T^{2} + 0,27Vs^{2} - 0,044N^{2} + 0,2663VaT - 0,1137VaVs - 0,0308VaN$$
(4.8)
- 0,1023TVs - 0,0064TN + 0,0665VsN

$$\eta = 0.924 - 0.0006Va - 0.003T + 0.006Vs + 0.009N - 0.004Va^{2} - 0.006T^{2} + 0.002Vs^{2} - 0.0066N^{2} + 0.003VaT - 0.003VaVs - 0.005VaN - 0.003TVs - 0.006TN + 0.006VsN$$
(4.9)

Para *W* o percentual de direções excluídas é de 99,96% e para η é de 83,88%. A direção de máxima ascensão verdadeira para *W* esta dentro de 0,04% de direções possíveis, como 0,04% de 360° é 0,144° pode-se afirmar que o caminho de máxima ascensão esta dentro de ±0,072° do caminho verdadeiro e para η 16,12% de direções possíveis, com ±29° do caminho verdadeiro, para esta resposta uma medida prudente é não dar grandes passos.

Neste caso como a diferença entre o percentual das respostas é maior, W tem uma influência maior no cálculo do PCW.

 $PCW = 0,2679 - 0,2908Va - 0,2101T + 0,4663Vs + 0,3026N - 0,0614Va^{2} - 0,0899T^{2} - 0,1050Vs^{2} - 0,0897N^{2} - 0,0226VaT - 0,0119VaVs - 0,0699VaN - 0,0243TVs + 0,0898TN + 0,0738VsN$ (4.10)

_	W	η	PCW
Constante	9,897	0,914	0,000
Va	0,812	-0,008	-0,337
Т	0,568	-0,001	-0,145
Vs	-1,234	0,010	0,454
Ν	-0,611	0,001	0,151
R ² (adj.)	99,62%	82,07%	92,87%

Tabela 4.19 – Coeficientes estimados do modelo linear para W e η

A região excluída pelo cone de confiança é de 92,87%, isto indica que a direção de máxima ascensão verdadeira está dentro deste cone de 7,13% de direções possíveis, o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 12,83^{\circ}$ do caminho verdadeiro.

				1		1
Passo	Va	Т	Vs	Ν	PCW	PCWPadron.
Δ	-0,371	-0,213	0,200	0,111	-	-
ср	8,169	29,936	42,772	24,468	-	-
-7	10,763	31,428	41,372	23,690	-23,194	-2,350
-6	10,392	31,215	41,572	23,801	-18,034	-1,670
-5	10,022	31,001	41,772	23,912	-13,476	-1,070
-4	9,651	30,788	41,972	24,023	-9,522	-0,549
-3	9,281	30,575	42,172	24,135	-6,170	-0,107
-2	8,910	30,362	42,372	24,246	-3,421	0,255
-1	8,539	30,149	42,572	24,357	-1,275	0,538
0	8,169	29,936	42,772	24,468	0,268	0,741
1	7,798	29,723	42,972	24,579	1,208	0,865
2	7,428	29,510	43,172	24,690	1,546	0,910
3	7,057	29,297	43,372	24,801	1,281	0,875
4	6,686	29,084	43,572	24,912	0,413	0,760
5	6,316	28,871	43,772	25,023	-1,058	0,567
6	5,945	28,658	43,972	25,134	-3,132	0,293
7	5,575	28,445	44,172	25,245	-5,808	-0,059

Tabela 4.20 – Caminho de máxima ascensão para *PCW* de *W* e η



Figura 4.4 – Caminho de máxima ascensão para W, $\eta \in PCW$

4.6. Caso Nº4 – Estrutura de correlação média, com conflitos de mínimos e máximos.

Para estruturas de correlações média com conflito de mínimo e máximo, a analise foi realizada com as respostas R e D.

A correlação entre *R* e *D* é de -0,679 e significativa (p-value = 0,00).

O objetivo de R é maximizar e D é minimizar, assim como no caso 2 a resposta D é multiplicada por (-1) a melhor resposta é o experimento 3.

Tabela 4	4.21 - Esco	res dos co	omponent	es princip	ais para i	respostas .	R e D
Experimento	PCA	Va	Т	Vs	Ν	R	D
1	-0,243	8,9	29,0	38,2	17,7	2,668	-31,583%
2	-1,300	8,2	29,9	42,8	24,5	2,614	-28,468%
3	1,818	7,8	29,7	40,7	19,3	2,476	-32,105%
4	-0,623	8,5	28,8	38,7	19,4	2,642	-30,331%
5	0,348	8,1	29,5	39,4	20,0	2,566	-30,855%

Definido o *center point* realiza-se o fatorial completo para R e D.

Teste	Va	Т	Vs	Ν	R	D
1	6,3	27,2	30,7	14,3	2,452	28,567%
2	9,3	27,2	30,7	14,3	2,996	26,993%
3	6,3	32,2	30,7	14,3	2,320	31,187%
4	9,3	32,2	30,7	14,3	2,744	32,688%
5	6,3	27,2	50,7	14,3	2,147	35,519%
6	9,3	27,2	50,7	14,3	2,570	35,931%
7	6,3	32,2	50,7	14,3	2,059	39,041%
8	9,3	32,2	50,7	14,3	2,361	42,528%
9	6,3	27,2	30,7	24,3	2,786	23,057%
10	9,3	27,2	30,7	24,3	3,237	19,812%
11	6,3	32,2	30,7	24,3	2,650	24,883%
12	9,3	32,2	30,7	24,3	2,982	24,712%
13	6,3	27,2	50,7	24,3	2,360	26,926%
14	9,3	27,2	50,7	24,3	2,691	25,667%
15	6,3	32,2	50,7	24,3	2,268	29,654%
16	9,3	32,2	50,7	24,3	2,478	31,469%
ср	7,8	29,7	40,7	19,3	2,478	32,065%

Tabela 4.22 – Matriz experimental para R e D

As Eq. (4.11) e Eq. (4.12) descrevem os modelos entre as respostas $R \in D$ e os parâmetros do processo *Va*, *T*, *Vs* e N.

 $R = 2,5965 + 0,1914Va - 0,1044T - 0,2227Vs + 0,1149N + 0,0025Va^{2} + 0,0336T^{2} + 0,0192Vs^{2} + 0,0358N^{2} - 0,0299VaT - 0,0304VaVs - 0,0229VaN + 0,0109TVs - 0,0010TN - 0,0302VsN$ (4.11)

 $D = 0,3103 - 0,0028Va + 0,0249T + 0,0368Vs - 0,0425N - 0,0023Va^{2} - 0,0072T^{2} + 0,1237Vs^{2} + 0,0003N^{2} + 0,0077VaT - 0,005VaVs - 0,0042VaN + 0,0023TVs - 0,0020TN - 0,0077VsN$ (4.12)

Para *R* o percentual de direções excluídas é de 99,8% e para *D* é de 99,62%. A direção de máxima ascensão verdadeira para *R* esta dentro de 0,2% de direções possíveis, o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 0,36^{\circ}$ do caminho verdadeiro e para *D* 0,38% de direções possíveis, com $\pm 0,68^{\circ}$ do caminho verdadeiro.

O percentual das respostas são praticamente iguais, não influenciando no cálculo do PCW.

$$PCW = 0,1981 - 0,2225Va + 0,2672T + 0,4868Vs - 0,3835N - 0,0163Va^{2} - 0,0752T^{2} + 0,1335Vs^{2} - 0,0309N^{2} + 0,0936VaT + 0,0606VaVs - 0,0189VaN$$
(4.13)
+ 0,0025TVs - 0,0109TN + 0,0158VsN

	R	D	PCW
Constante	2,559	0,303	0,000
Va	0,193	-0,001	-0,216
т	-0,087	0,021	0,217
Vs	-0,220	0,034	0,442
Ν	0,115	-0,042	-0,370
R² (adj.)	93,17%	89,67%	90,30%

Tabela 4.23 – Coeficientes estimados para o modelo linear $R \in D$

A região excluída pelo cone de confiança é de 99,63%, isto indica que a direção de máxima ascensão verdadeira está dentro deste cone de 0,37% de direções possíveis, o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 0,66^{\circ}$ do caminho verdadeiro.

	Tuotia III I	Culture de maxima ascensae para r e v de R e D				
Passo	Va	Т	Vs	Ν	PCW	PCWPadron.
Δ	-0,876	0,235	0,239	-0,100	-	-
ср	7,850	29,668	40,656	19,290	-	-
-5	12,230	28,495	39,462	19,790	-12,130	-1,952
-4	11,354	28,729	39,701	19,690	-8,720	-1,216
-3	10,478	28,964	39,940	19,590	-5,782	-0,582
-2	9,602	29,199	40,178	19,490	-3,316	-0,050
-1	8,726	29,433	40,417	19,390	-1,323	0,380
0	7,850	29,668	40,656	19,290	0,198	0,708
1	6,974	29,903	40,894	19,190	1,247	0,934
2	6,098	30,137	41,133	19,090	1,823	1,059
3	5,222	30,372	41,372	18,990	1,927	1,081
4	4,346	30,607	41,610	18,890	1,559	1,002
5	3,469	30,842	41,849	18,790	0,718	0,820
6	2,593	31,076	42,088	18,690	-0,595	0,537
7	1,717	31,311	42,326	18,590	-2,381	0,152
8	0,841	31,546	42,565	18,490	-4,639	-0,335
9	-0,035	31,780	42,804	18,390	-7,369	-0,924
10	-0,911	32,015	43,042	18,290	-10,571	-1,615

Tabela 4.24 – Caminho de máxima ascensão para *PCW* de *R* e *D*



Figura 4.5 – Caminho de máxima ascensão para R, D e PCW

4.7. Caso N°5 – Estrutura de correlação alta, sem conflitos de mínimos e máximos.

Para estruturas de correlação alta sem conflito de mínimo e máximo, a analise foi realizada com as respostas $P \in D$.

A correlação entre $P \in D$ é de 0,817 e significativa (*p*-value = 0,00).

O objetivo de *P* e *D* é minimizar, a melhor resposta é o experimento 2.

Experimento	PCA	Va	Т	Vs	N	Р	D
1	1,3580	8,9	29,0	38,2	17,7	1,741	31,583%
2	-2,1895	8,2	29,9	42,8	24,5	1,449	28,468%
3	0,8615	7,8	29,7	40,7	19,3	1,629	32,105%
4	-0,1006	8,5	28,8	38,7	19,4	1,619	30,331%
5	0,0707	8,1	29,5	39,4	20,0	1,605	30,855%

Tabela 4.25 – Escores dos componentes principais para respostas P e D

Definido o *center point* realiza-se o fatorial completo para *P* e *D*.

Teste	Va	Т	Vs	N	Р	D
1	6,7	27,4	32,8	19,5	1,390	27,078%
2	9,7	27,4	32,8	19,5	1,469	24,615%
3	6,7	32,4	32,8	19,5	1,528	29,683%
4	9,7	32,4	32,8	19,5	1,742	30,294%
5	6,7	27,4	52,8	19,5	1,256	32,025%
6	9,7	27,4	52,8	19,5	1,637	31,548%
7	6,7	32,4	52,8	19,5	1,395	34,629%
8	9,7	32,4	52,8	19,5	1,911	37,227%
9	6,7	27,4	32,8	29,5	1,110	20,711%
10	9,7	27,4	32,8	29,5	0,790	16,577%
11	6,7	32,4	32,8	29,5	1,268	23,316%
12	9,7	32,4	32,8	29,5	1,082	22,256%
13	6,7	27,4	52,8	29,5	1,070	22,575%
14	9,7	27,4	52,8	29,5	1,052	20,427%
15	6,7	32,4	52,8	29,5	1,228	25,180%
16	9,7	32,4	52,8	29,5	1,345	26,106%
ср	8,2	29,9	42,8	24,5	1,455	28,468%

Tabela 4.26 – Matriz experimental para P e D

As Eq. (4.14) e Eq. (4.15) descrevem os modelos entre as respostas $P \in D$ e os parâmetros do processo *Va*, *T*, *Vs* e N.

 $P = 1,6387 + 0,1221Va + 0,1220T + 0,0934Vs - 0,2408N + 0,0246Va^{2} - 0,0320T^{2} - 0,1181Vs^{2} + 0,0190N^{2} + 0,0337VaT - 0,0757VaVs - 0,0998VaN$ (4.14) + 0,0002TVs + 0,0048TN + 0,0045VsN

$$D = 0,3103 - 0,0028Va + 0,0249T + 0,0368Vs - 0,0425N - 0,0023Va^{2} - 0,0072T^{2} + 0,1237Vs^{2} + 0,0003N^{2} + 0,0077VaT - 0,005VaVs - 0,0042VaN + 0,0023TVs - 0,0020TN - 0,0077VsN$$

$$(4.15)$$

Para *P* o percentual de direções excluídas é de 99,05% e para *D* é de 99,52%. A direção de máxima ascensão verdadeira para *R* esta dentro de 0,95% de direções possíveis, o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 1,71^{\circ}$ do caminho verdadeiro e para *D* 0,48% de direções possíveis, com $\pm 0,86^{\circ}$ do caminho verdadeiro.

A diferença entre os percentuais é mínima, não influenciando no cálculo do PCW.

$$PCW = 0,1846 + 0,1113Va + 0,2796T + 0,3215Vs + 0,5112N + 0,0140Va^{2} - 0,0766T^{2} - 0,1978Vs^{2} + 0,0219N^{2} + 0,0821VaT + 0,1098VaVs - 0,1303VaN$$
(4.16)
+ 0,0139TVs - 0,0070TN - 0,0420VsN

	Р	D	PCW
Constante	1,330	0,266	0,000
Va	0,049	-0,004	0,037
Τ	0,103	0,021	0,263
Vs	0,111	0,022	0,156
Ν	-0,219	-0,044	-0,557
R ² (adj.)	81,18%	88,13%	83,54%

Tabela 4.27 – Coeficientes estimados do modelo linear para P e D

A região excluída pelo cone de confiança é de 99,15%, isto indica que a direção de máxima ascensão verdadeira está dentro deste cone de 0,85% de direções possíveis, o caminho de máxima ascensão esta dentro de $\pm 1,53^{\circ}$ do caminho verdadeiro.

	rubela 1.20 Cultimito de maxima ascensao para r e m						
Passo	Va	Т	Vs	Ν	PCW	PCWPadron.	
Δ	1,318	1,183	1,399	-1,500	-	-	
ср	8,169	29,936	42,772	24,468	-	-	
-8	-2,379	20,473	31,578	36,468	5,792	2,304	
-7	-1,061	21,656	32,977	34,968	4,621	1,533	
-6	0,258	22,839	34,376	33,468	3,605	0,864	
-5	1,576	24,022	35,776	31,968	2,743	0,296	
-4	2,895	25,205	37,175	30,468	2,037	-0,169	
-3	4,213	26,388	38,574	28,968	1,485	-0,532	
-2	5,532	27,570	39,974	27,468	1,089	-0,793	
-1	6,850	28,753	41,373	25,968	0,847	-0,952	
0	8,169	29,936	42,772	24,468	0,760	-1,009	
1	9,487	31,119	44,172	22,968	0,829	-0,964	
2	10,806	32,302	45,571	21,468	1,052	-0,817	
3	12,124	33,485	46,970	19,968	1,430	-0,568	
4	13,443	34,668	48,370	18,468	1,962	-0,218	
5	14,761	35,850	49,769	16,968	2,650	0,235	
6	16,080	37,033	51,168	15,468	3,493	0,790	

Tabela 4.28 – Caminho de máxima ascensão para *PCW*



4.8. Considerações finais

Este capítulo teve o objetivo de descrever a validação do método definido no Capítulo 3, a aplicação do método de deslocamento na direção de máxima ascensão ou íngreme descida para múltiplas respostas correlacionadas, através da análise dos componentes principais ponderados pelo cone de confiança. Conforme visto na *Figura 4.1* de estrutura de correlação, além dos casos apresentados existem mais combinações de respostas, a escolha dos cinco casos dentre as possíveis combinações obedeceu ao melhor valor encontrado para baixa, média e alta correlação entre as respostas, não foi analisado o caso em que a correlação entre as respostas é alta, com conflito de máximo e mínimo para o objetivo, devido a não existência no estudo de caso apresentado.

5. CONCLUSÕES

5.1. Conclusões gerais

A partir da revisão de literatura e dos resultados obtidos, pode-se estabelecer as seguintes conclusões:

- A análise de múltiplas respostas correlacionadas pelo componente principal mostrou-se eficaz mesmo para respostas com conflitos de objetivos e estrutura de correlação baixa, média e alta.
- A utilização do cone de confiança para ponderar as respostas no cálculo do PCW e principalmente avaliar se a direção a ser tomada para otimizar as respostas de interesse esta correta.
- A análise da variância integrada foi fundamental na definição dos experimentos iniciais aleatórios, evitando-se assim a escolha de pontos fora espaço amostral definido pelo processo.
- 4. Para as respostas W, R e D, foi utilizado a direção determinada pelos autovetores, por não apresentam pontos de mínimo ou máximo definido.
- 5. Nos casos 1, 2, 4 e 5 a diferença entre os percentuais de direções excluídas pelo cone de confiança é mínima, não influenciando no cálculo do PCW, mas foi fundamental para determinação do tamanho do passo.

5.2. Contribuições do trabalho

O desenvolvimento deste trabalho permite as seguintes contribuições:

- 1. Desenvolvimento do método de análise de processos multivariados com respostas correlacionados.
- Desenvolvimento do cálculo da fração de direções excluídas pelo cone de confiança para valores de k até 10, conforme *Tabela 2.3*.

5.3. Sugestões para estudos futuros

Como sugestões para estudos futuros, ficam as seguintes considerações:

- Avaliação do método desenvolvido em outros processos, com intuito de consolidar a aplicabilidade do método.
- Realização de experimentos de confirmação para respostas geradas pelo PCW.
- Aplicação do método considerando o PCW de todas as respostas envolvidas no processo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMES, A.; MATTUCCI, N.; MCDONALD, S.; SZONYI, G. HAWKINS, D. Quality loss function for optimization across multiple response surfaces. **Journal of Quality Technology** v.29, pp.339–34, 1997.

ANTONY, J. Multiresponse Optimization in Industrial Experiments using Taguchi's Quality LossFunction and Principal Component Analysis, **Quality and Reliability Engineering** International, v 16, pp. 3-8, 2000.

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

BOX, G.E.P.; HUNTER, J.S. A confidence region for the solution of a set of simulataneous equations with an application to experimental design, **Biometrika**, v.41, pp. 190–199, 1954.

BOX, G. E. P., WILSON, K. B. On the Experimental Attainment of OptimumConditions, Journal of the Royal Statistical Society, XIII, v 1, Série B, pp. 1-45, 1951.

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

CASTILHO E. **Process Otimization A statistical Approach**, 1th Edition, New York, Springer Science +Business Media, 2007, 480p.

CASTILHO E. Multiresponse process optimization via constrained confidence regions, **Journal of Quality Technology**, v 28, p. 61-70, 2006.

CATTEL, R. B. The Screen Test for the Number of Factors. Multivariate Behavior Research, v. 1, p.245-276, 1966.

CHIAO, H.; HAMADA, M. Analyzing experiments with correlated multiple responses. **Journal of Quality Technology**, 33(4):451–465, 2001.

CHUNG, H. W. Dynamic multi-response optimization using principal component analysis and multiple criteria evaluation of the grey relation model. **International Journal Advanced Manufacturing Technology**, v. 32 p.617-624, 2007.

DATTA, S.; MAHAPATRA, S. S. Simultaneous Optimization of Correlated Multiple Surface Quality Characteristics of Mild Steel Turned Product. **Intelligent Information Management**, v.2, p.26-39, 2010.

DATTA, S.; NANDI, G.; BANDYOPADHYAY, A. Application of entropy measurement technique in grey based Taguchi method for solution of correlated multiple response optimization problems: A case study in welding. **Journal of Manufacturing Systems**, v.28 p.55-63, 2009.

DERRINGER, G.; SUICH, R. Simultaneous optimization of several response variables. **Journal of Quality Technology** v.12 pp.214–219, 1980.

FAN, S.-K. S. A Generalized Global Optimization Algorithm for Dual Response Systems, **Journal of Quality Technology**, 32, 444–456, 2000.

FUL, C. W.; CHIUH, C. C. Optimization of correlated multiple quality characteristics robust design using principal component analysis. **Journal of Manufacturing Systems**, v. 23, p.134-143, 2004.

GAURI, S. K.; CHAKRAVORTY, R.; CHAKRAVORTY, S. Optimization of correlated multiple responses of ultrasonic machining (USM) process. **International Journal Advanced Manufacturing Technology**, v. 53, p.1115-1127, 2011.

GOMES, J. H. F. **Otimização do processo de soldagem com arame tubular para o revestimento de aços carbono com aços inoxidáveis**. 2010. 120 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2010.

HARRINGTON E. Jr The desirability function. **Industrial Quality Control**. v.21pp.494–498, 1965.

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.221p.241-247, 2012.

HOTELLING, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. **Journal of Educational Psychology**, v. 24, p. 417-441, 1933.

LIAO, H. C. Multi-response optimization using weighted principal component. International Journal Advanced Manufacturing Technology, v.27, p.720-725, 2006.

LOPES, L. F. D., Análise de Componentes Principais Aplicada à Confiabilidade de Sistemas Complexos. (2001), 138 p. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, Florianópolis, 2001.

JACKSON, D. A. Stopping rules in principal component analysis. A comparison of heuristical and statistical approaches. **Ecology**, v. 74, p.2204-2214, 1993.

JER, Y.H.; JIA, H. L.; JIUMN,Y W.; SZU, C.S.; HSIA F.H. Enhancement of asymmetric bioreduction of ethyl 4-chloro acetoacetate by the design of composition of culture medium and reaction conditions. **Process Biochemistry**, v.42 pp.1–7, 2007.

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

KAZEMZADEH, R.B.; BASHIRI, M.; ATKINSON, A.C.; NOOROSANA, R. A general framework for multi response optimization problems based on goal programming. **European Journal of operational Research** v.189 pp.421–429, 2008.

KHURI, A. I.; CONLON, M. Simultaneous optimization of multiple responses represented by polynomial regression functions. **Technometrics**, v. 23, p.363-375, 1981.

KHURI, A. I.; MUKHOPADHYAY, S. Response Surface Methodology. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics v.2 pp. 128-149, 2010.

KIM, I. J., JEONG, K. J. Interactive DesirabilityFunction Approach Multi-response Surface Optimization **International Journal of Reliability, Quality and Safety Engineering**, v 10, n 2, pp. 205-217, 2003.

KO, Y. H., KIM, K. J., JUN, C. H. A New Loss Function-Based Method for Multiresponse Optimization. Journal of Quality Technology, v 37, n 1, pp. 50-59, 2005.

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.

MING, Y. C.; GUO, J.T.; JER, Y. H. Optimization of the medium composition for the submerged culture of Ganoderma lucidum by Taguchi array design and steepest ascent method. Enzyme and Microbial Technology v.38 pp. 407–414, 2006.

MYERS R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C.M. **Response Surface Methodology**, 3th Edition, Wiley series in probability and statistics, John Wiley & Sons, 2009.

MONTGOMERY, D. C. Design and Analysis of Experiments. 6 ed. New York: John Wiley, 2009. 643 p.

NAJAFI, S.; SALMASNIA, A.; KAZEMZADEH, R. B. Optimization of Robust Design for Multiple Response Problem. Australian Journal of Basic and Applied Sciences, v.5, p. 1566-1577, 2011.

NILO JÚNIOR, L. P. Otimização de um processo de solda MIG/MAG para aplicação na indústria automobilística através da utilização da técnica do projeto e análise de experimentos. 2003. 111 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2003.

ORTZ, F. Jr.; SIMPSON, J.R.; PIGNATELLO, J. J. Jr.; HEREDIA L. A. A Genetic Algorithm Approach to Multiple-Response Optimization. **Journal of Quality Technology**, v 36, p. 432-450, 2004.

PAIVA, A. P. Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de Componentes Principais em otimização de processo de manufatura com múltiplas respostas correlacionadas. 2006. 229 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2006.

PAIVA, E. J. Otimização de processos de manufatura com múltiplas respostas baseada em índices de capacidade. 2008. 118 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2008.

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 pp.366–382, 2006.

Pearson K. On line and planes of closest fit to systems of points in space. **Philos Mag** 6:559, 1901.

PERES-NETO, P. R., JACKSON, D. A., SOMERS, K. M. How Many Principal Components? Stopping Rules for Determining the Number of Non-Trivial Axes Revisited. **Computational Statistics & Data Analysis**, v 49, p. 974-997, 2005.

PETERSON, J. J. A Posterior Predictive Approach to Multiple Response Surface Optimization, **Journal of Quality Technology**, v 36, pp. 139-153, 2004.

PHADKE, M. S. Quality Engineering Using Robust Design, Prentice-Hall: Englewood Cliffs, New Jersey, 480p, 1989.

PIGNATIELLO, J. J. JR. Strategies for Robust Multiresponse Quality Engineering, **IIE Transactions**, v 25, pp. 5-15, 1993.

ROUTARA, B.C.; MOHANTY, S.D.; DATTA, S.; BANDYOPADHYAY, A.; MAHAPATRA, 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** doi:10.1007/s00170-010-2599-1, 2010.

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.

SALMASNIA, A.; KAZEMZADEH, R. B.; ESFAHANI, M. S; HEJAZI, T. H. Multiple response surface optimization with correlated data. **International Journal Advanced Manufacturing Technology**, v. 64, p.841-865, 2012.

SIBALIJA, T. V.; MAJSTOROVIC, V. D.; Multi-response optimization of thermosonic copper wire-bonding process with correlated responses - **International Journal Advanced Manufacturing Technology**, v.42, p.363-371, 2009.

SCREMIN, M. A. A., **Método para Seleção do Número de Componentes Principais com base na Lógica Difusa**. 2003. 124p.Tese doutorado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Santa Catarina, 2003.

SOUZA, A. M., Monitoração e Ajuste de Realimentação em Processos Produtivos Multivariados. 2000. 166p.Tese doutorado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Santa, 2000.

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**, 27: 407–414, 2005.

VINING G. A compromise approach to multiresponse opti-mization, **Journal of Quality Technology** v.30 pp.309–313, 1998.

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**, DOI 10.1007/s00170-005-0365-6 32: 617–624, 2007.