

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO

**Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de
Componentes Principais em Otimização de
Processos de Manufatura com Múltiplas Respostas
Correlacionadas**

Autor: Anderson Paulo de Paiva

Orientador: Prof. Sebastião Carlos da Costa, PhD.

Co-orientador: Prof. Pedro Paulo Balestrassi, Dr.

Itajubá, Setembro de 2006.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO

**Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de
Componentes Principais em Otimização de
Processos de Manufatura com Múltiplas Respostas
Correlacionadas**

Autor: **Anderson Paulo de Paiva**

Orientador: **Prof. Sebastião Carlos da Costa, PhD.**

Co-orientador: **Prof. Pedro Paulo Balestrassi, Dr.**

Curso: **Doutorado em Engenharia Mecânica**

Área de Concentração: **Projeto e Fabricação**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica como parte dos requisitos para obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Itajubá, Setembro de 2006

M.G. – Brasil

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Mauá –
Bibliotecária Margareth Ribeiro- CRB_6/1700

M149m

Paiva, Anderson Paulo de

Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de Componentes Principais em otimização de processos de manufatura com múltiplas respostas correlacionadas / Anderson Paulo de Paiva. -- Itajubá, MG : [s.n.], 2006.

33 p. : il.

Orientador : Prof. PhD. Sebastião Carlos da Costa.

Co-orientador : Prof. Dr. Pedro Paulo Balestrassi.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Itajubá.

1. Metodologia de Superfície de Resposta (MSR). 2. Análise de Componentes Principais (PCA). 3. Gradiente Reduzido Generalizado (GRG). 4. Processo de manufatura. I. Costa, Sebastião Carlos da, orient. II. Balestrassi, Pedro Paulo, co-orient. III. Universidade Federal de Itajubá. IV. Título.

CDU 658.62(043.2)

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO

**Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de
Componentes Principais em Otimização de
Processos de Manufatura com Múltiplas Respostas
Correlacionadas**

Autor: **Anderson Paulo de Paiva**

Orientador: **Prof. Sebastião Carlos da Costa, PhD.**

Co-orientador: **Prof. Pedro Paulo Balestrassi, Dr.**

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luiz César Ribeiro Carpinetti – USP/EESC

Prof. Dr. Adriano Mendonça Souza - UFSM

Prof. Dr. João Roberto Ferreira - IEPG/UNIFEI

Prof. Dr. Ariosto Bretanha Jorge - IEM/UNIFEI

Prof. Dr. José Célio Dias - IEM/UNIFEI

Prof. Dr. Márcio Tadeu de Almeida - IEM/UNIFEI

Prof. Sebastião Carlos da Costa, PhD., Orientador – IEPG/UNIFEI

Dedicatória

À minha esposa Cecília, pelo longo e feliz caminho percorrido até aqui, pelo amor incontestado e pelos dez anos de cumplicidade, amizade e companheirismo ímpares.

Agradecimentos

A DEUS, origem e fim de tudo o que é vivente, pelo dom da vida.

À minha esposa Cecília, pelo apoio, compreensão e incentivo incomparáveis.

Aos meus queridos pais, Sebastião e Dorinha, pelos bons exemplos.

Aos meus irmãos, Emerson e Weverson, à Dona Marília, aos meus cunhados, Kênia, Eduardo, Camila, Cristiane e Juliano, e aos meus sobrinhos, Lara e Pedro.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Sebastião Carlos da Costa, pela competência, dedicação, paciência e amizade.

Ao meu grande amigo Pedro Paulo, pela mão amiga sempre estendida nos momentos de dificuldade; pela generosidade, pela motivação constante e pelo exemplo de humildade.

Ao Prof. Dr. José Juliano de Lima Jr., coordenador do curso de pós-graduação em Engenharia Mecânica, pela gentileza e presteza com que sempre nos atendeu.

Aos amigos de caminhada: Fabrício, Ronã e Paulo Roberto.

Aos amigos do IEPG, Carlos Eduardo, Carlos Henrique, Turrioni, Gonzaga e José Arnaldo.

Ao meu grande amigo, João Roberto Ferreira, pela motivação constante.

À CAPES, através do Programa de bolsas, pelo apoio financeiro.

O que ouço, esqueço. O que vejo, lembro. Mas o que faço, aprendo.

(Albert Einstein)

Resumo

PAIVA, A. P. (2006), Metodologia de Superfície de Resposta e Análise de Componentes Principais em Otimização de Processos de Manufatura com Múltiplas Respostas Correlacionadas, 229p., Tese (Doutorado em Projeto e Fabricação) - Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

A qualidade dos processos de manufatura normalmente envolve o atendimento de um grande número de características que, muitas vezes, apresentam-se correlacionadas. Uma eficiente transformação destes atributos pode ser realizada através de um mecanismo de redução de dimensionalidade tal como a Análise de Componentes Principais. Quando representados através de componentes principais, os índices globais podem ser insuficientes, não representativos ou ainda, podem apresentar conflitos com os sentidos de otimização das características originais, o que dificulta sua implementação e interpretação. Neste trabalho, estudou-se o método de componentes principais aplicados aos arranjos de Superfície de Resposta, culminando com a proposição de um índice multivariado representativo do conjunto original de múltiplas respostas. Na validação do método, foram analisados vários experimentos, procurando-se destacar em cada um deles as particularidades matemáticas inerentes. Todos os exemplos referiram-se aos processos de manufatura por soldagem e usinagem. Esta nova proposta apresentou, de modo geral, resultados satisfatórios em relação à abordagem tradicional, o que qualifica o procedimento como uma alternativa viável para a otimização de múltiplas respostas correlacionadas.

Palavras-Chave:

Metodologia de Superfície de Resposta (MSR), Análise de Componentes Principais (PCA), Gradiente Reduzido Generalizado (GRG), Processos de Manufatura.

Abstract

PAIVA, A. P. (2006), *Response Surface Methodology and Principal Component Analysis in optimization of the manufacturing processes with multiple correlated responses*, Itajubá, 229p., Thesis (Doutorado em Projeto e Fabricação) - Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

The quality in the manufacturing processes generally depends on the attainment of a great deal of characteristics, which sometimes are correlated. An efficient transformation of these attributes probably can be done through a reduction of dimensionality mechanism. When represented by principal components, the global indexes formed can not be enough, not representative or may present conflicts with the optimization sense of original responses, which difficulty its implementation and interpretation. In this work, it was studied the improvement of the principal components method applied to Response Surface designs, using the concept of multivariate indexes, a singular and representative measure of original set of correlated responses. In attempt to asses the method efficiency, several experimental designs involving welding and machining processes were used. Each case highlighted some particular issue of the whole method. When compared with other traditional optimization methods, this approach presented satisfactory results, what means the proposal is adequate and feasible to optimization of multiple responses.

Keywords:

Response Surface Methodology (RSM), Principal Component Analysis (PCA), Generalized Reduced Gradient (GRG), Manufacturing Processes.

Sumário

SUMÁRIO	I
LISTA DE FIGURAS	IV
LISTA DE QUADROS	IX
LISTA DE TABELAS	X
SIMBOLOGIA	XIII
LETRAS LATINAS	XIII
LETRAS GREGAS	XIV
SIGLAS	XV

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1 – O ASPECTO MULTIVARIADO DOS PROCESSOS DE MANUFATURA	01
1.2 – JUSTIFICATIVA	03
1.3 – PROBLEMA DE PESQUISA	06
1.4 - OBJETIVO PRINCIPAL E PROPOSTA DE TESE	07
1.5 - CONTRIBUIÇÕES DA TESE	07
1.6 - DELIMITAÇÃO DO TEMA	08
1.7 – METODOLOGIA	09
1.8 - ESTRUTURA DO TRABALHO	09

Capítulo 2

ABORDAGENS HÍBRIDAS

2.1 – CONSIDERAÇÕES INICIAIS	11
2.2 – EXPERIMENTOS COM MÚLTIPLAS RESPOSTAS	12

2.3 – A INSUFICIÊNCIA DO MÉTODO DESIRABILITY E OS MODELOS HÍBRIDOS ENVOLVENDO DOE CLÁSSICO	14
2.4 - MODELOS HÍBRIDOS E ARRANJOS DE TAGUCHI	19
2.5 – METODOLOGIA DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA MODELADA POR COMPONENTES PRINCIPAIS	23
2.6 - CONSIDERAÇÕES FINAIS DO CAPÍTULO	25

Capítulo 3

ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS

3.1 – CONSIDERAÇÕES INICIAIS	26
3.2 - ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS	26
3.2.1 - Componentes Principais Populacionais	29
3.3 - DESIGUALDADE DE CAUCHY-SCHWARZ	35
3.4 – DEMONSTRAÇÕES	38
3.4.1 - Componentes Principais de Variáveis Padronizadas	41
3.4.2 – Variância Amostral e ACP	43
3.4.3 - Escores de Componentes Principais	45
3.5 - TESTES DE ADEQUAÇÃO	46
3.5.1 - Teste de Variação Isotrópica ou Esférica	46
3.5.2 - Teste de Bartlett	48
3.5.3 - Teste de Lawley	48
3.5.4 – Índices de Correlação	49
3.6 – CRITÉRIOS DE SELEÇÃO	49
3.7 – CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	51

Capítulo 4

MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO EXPERIMENTAL

4.1 – CONSIDERAÇÕES INICIAIS	52
4.2 – METODOLOGIA DE PROJETO DE EXPERIMENTOS	52
4.3 - METODOLOGIA DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA	58
4.3.1-Arranjos Experimentais para Superfície de Resposta	61
4.4 - TESTE PARA A SIGNIFICÂNCIA DO MODELO	63
4.5 – MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS ORDINÁRIOS	63
4.5.1 - Medidas de Adequação de Modelos de Regressão	67

4.5.2 - Análise Residual	68
4.5.3 - Testes para a Falta de Ajuste dos Modelos	68
4.6 – REGRESSÃO MÚLTIPLA MULTIVARIADA	70
4.7 – MODELOS SUR	72
4.8 - OTIMIZAÇÃO DE UMA ÚNICA RESPOSTA	77
4.8.1 - Localização do Ponto Estacionário	79
4.8.2 - Método de Draper (Ridge Analysis)	81
4.8.3 - Método do Gradiente Reduzido Generalizado	83
4.9 – OTIMIZAÇÃO DE MÚLTIPLAS RESPOSTAS	85
4.9.1 - Metodologia de Superfície de Resposta Múltipla	87
4.10 – O MÉTODO DESIRABILITY	90
4.11 – CONSIDERAÇÕES FINAIS DO CAPÍTULO	93

Capítulo 5

OTIMIZAÇÃO BASEADA EM COMPONENTES PRINCIPAIS

5.1 - CONSIDERAÇÕES INICIAIS	95
5.2 – A PROPOSTA MULTIVARIADA	96
5.2.1 - Algumas Particularidades do Método	98
5.2.2 – Índice Multivariado	99
5.2.3 - Dirimindo Conflitos no Sentido de Otimização	100
5.3 – DESCRIÇÃO DO MÉTODO	102
5.3.1 Otimização com restrições para as respostas	106
5.3.2 Como introduzir limites nas equações	106
5.3.2.1 Demonstração	107
5.4 – EQUACIONAMENTOS E ESTRATÉGIAS	111
5.4.1 Aplicações em problemas duais	112
5.5 – CONSIDERAÇÕES FINAIS DO CAPÍTULO	114

Capítulo 6

APLICAÇÃO DA METODOLOGIA PROPOSTA

6.1 – CASO N°. 1 – INSUFICIÊNCIA DO PRIMEIRO COMPONENTE PRINCIPAL PARA UM CONJUNTO DE RESPOSTAS COM CORRELAÇÕES MODERADAS	116
6.1.1 Visão Geral	116

6.1.2 O Processo GMAW Pulsado	116
6.1.3 Arranjo Experimental	117
6.1.4 Resultados	118
6.1.5 Análise das Correlações entre as Respostas	118
6.1.6 Análise de Componentes Principais	119
6.1.7 Modelos Matemáticos Multivariados	122
6.1.8 Otimização Multivariada	124
6.1.9 Discussões	126
6.2 – CASO N°. 2: UTILIZAÇÃO DE RESTRIÇÕES NÃO-LINEARES MULTIVARIADAS	129
6.2.1 Visão Geral	129
6.2.2 - Análise de Correlações entre as respostas	130
6.2.3 Análise de Componentes Principais	131
6.2.4 Modelos Matemáticos Multivariados	133
6.2.5 Otimização Multivariada	135
6.2.6 Discussão	138
6.3 - CASO N°. 3: UTILIZAÇÃO DE IGM PARA RESPOSTAS FORTEMENTE CORRELACIONADAS	139
6.3.1 Visão Geral	139
6.3.2 Análise das Correlações entre as Respostas	140
6.3.3 Análise de Componentes Principais	141
6.3.4 Modelos Matemáticos Multivariados	142
6.3.5 Otimização Multivariada	143
6.3.6 Discussões	143
6.4 – CASO N°4: IGM PONDERADO PELO PERCENTUAL DE EXPLICAÇÃO DOS COMPONENTES PRINCIPAIS	146
6.4.1 Visão Geral	146
6.4.2 Análise de Correlações entre as Respostas	147
6.4.3 Análise de Componentes Principais	149
6.4.4 Otimização Multivariada	151
6.4.5 Discussões	158
6.5 – CASO N°. 5: OBTENÇÃO DE IGM A PARTIR DA RELAÇÃO SINAL-RUÍDO DE TAGUCHI	160
6.5.1 Visão Geral	160

6.5.2	Análise de Componentes Principais	161
6.5.3	Otimização Multivariada	162
6.5.4	Discussões	163
6.6	CASO Nº. 6: ABORDAGEM MULTIVARIADA PARA PROBLEMAS DUAIS	164
6.6.1	Visão Geral	164
6.6.2	Análise de Componentes Principais	166
6.6.3	Otimização Multivariada	167
6.6.4	Aplicação ao Estudo de Kim e Rhee (2003)	168
6.6.5	Discussões	169
6.7	CASO Nº. 7: REPRESENTAÇÃO DE RÉPLICAS ATRAVÉS DE COMPONENTES PRINCIPAIS	170
6.7.1	Visão Geral	170
6.7.2	O Processo RSW – <i>Resistance Spot Welding</i>	170
6.7.3	Arranjo Experimental	171
6.7.4	Análise das Correlações entre as Respostas	171
6.7.5	Análise de Componentes Principais	172
6.7.6	Modelos Matemáticos Multivariados	173
6.7.7	Otimização Multivariada	174
6.7.8	Discussões	175
6.8	CASO Nº. 8: OTIMIZAÇÃO DE IGM BASEADA EM RESTRIÇÕES CUBOIDAIS	176
6.8.1	Visão Geral	176
6.8.2	O Processo de soldagem com Laser de CO ₂	176
6.8.3	Arranjo Experimental	177
6.8.4	Análise de Componentes Principais	177
6.8.5	Modelo Matemático Multivariado	179
6.8.6	Otimização Multivariada	180
6.8.7	Discussões	181
6.9	CASO Nº. 9: FUNÇÕES OBJETIVO MULTIVARIADAS COM MÚLTIPLAS RESTRIÇÕES NÃO-LINEARES APLICADAS A UM PROCESSO DE USINAGEM	183
6.9.1	Visão Geral	183
6.9.2	Arranjo Experimental	183

	vi
6.9.3 Análise de Correlações e Componentes Principais	185
6.9.4 Modelagem Matemática Multivariada	185
6.9.5 Otimização Multivariada	188
6.9.6 Discussões	188
6.10 - Comentários Finais do Capítulo	189
Capítulo 7	
CONCLUSÕES	
7.1 CONCLUSÕES	190
7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	191
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	193
APÊNDICES	212
ANEXOS	220

Lista de Figuras

Figura 3.1 – Interpretação Geométrica do PCA. Adaptado de Gabrielsson et al.(2003 b).	32
Figura 3.2 – Interpretação Geométrica do PCA. Adaptado de Johnson e Wichern (2002).	33
Figura 3.3 – Elipse de densidade de constante para dois componentes principais.	45
Figura 3.4 – Correlação Nula = Autovalores idênticos.	46
Figura 4.1 – (a) Rotacionalidade, (b) Arranjo central composto para 2 fatores.	62
Figura 4.2 – Arranjo do tipo Box-Behnken para três fatores.	63
Figura 4.3 – Método do Vetor Gradiente.	78
Figura 5.1 – Superfícies de Respostas de $f(x)$ e $-f(x)$.	100
Figura 5.2 – Fluxograma do método de otimização múltipla proposto.	103
Figura 5.3 – Fluxograma do método adotado para problemas do tipo nominal-melhor.	104
Figura 5.4 – Fluxograma do método adotado para problemas mistos.	105
Figura 6.1 - Autovalores significativos.	119
Figura 6.2 - Dendograma para as correlações absolutas entre as respostas.	121
Figura 6.3 – Teste de Normalidade para os resíduos de PC_1 e IGM.	124
Figura 6.4 - Gráficos de Contorno para PC_1 : sobreposição dos 3 métodos.	126
Figura 6.5 – Superfícies de Respostas de PC_1 para alguns pares de Fatores.	126
Figura 6.6 – Autovalores da matriz de correlação.	131
Figura 6.7 - Dendograma para as correlações absolutas entre as respostas.	133
Figura 6.8 – Análise de resíduos de IGM e PC_2 .	135
Figura 6.9 – Representação gráfica de IGM com $d(X_3)$ constante e igual a 17,5.	137
Figura 6.10 – Geometria do Cordão de Solda.	140
Figura 6.11 – Gráficos de Contorno de IGM e D.	144
Figura 6.12 (a) – Superfície de Resposta para IGM.	145

Figura 6.12 (b) – Gráfico de sobreposição dos contornos das Superfícies de Resposta.	145
Figura 6.13 – Análise de Cluster para respostas e componentes principais.	149
Figura 6.14 – Lambda versus Raio do Espaço Experimental.	154
Figura 6.15 – Curvas de Nível de PC_1 para cada uma das combinações entre os fatores.	155
Figura 6.16 – Comparação dos pontos de ótimo obtidos por diferentes métodos.	157
Figura 6.17 – Gráfico comparativo dos métodos.	163
Figura 6.18 – Análise de resíduos de PC_1 .	174
Figura 6.19 - Dendograma para as correlações absolutas entre as respostas.	179
Figura 6.20 – Teste de normalidade para os resíduos de IGM.	180

Lista de Quadros

Quadro 4.1 – Fórmulas para ANOVA em dois níveis.	58
Quadro 4.2 - Tabela de ANOVA.	59
Quadro 4.3 - Objetivos de otimização no Método de Derringer.	92
Quadro 4.4 - Relações de importância entre o Alvo e os Limites no <i>Desirability</i> .	92

Lista de Tabelas

Tabela 1.1 - Relação de trabalhos que apresentam múltiplas respostas correlacionadas.	05
Tabela 4.1 – Hipóteses presentes em uma ANOVA para dois fatores.	57
Tabela 6.1 - Planilha Experimental.	117
Tabela 6.2 - Testes e Índices de adequação para aplicação do PCA às respostas.	118
Tabela 6.3 - Análise de Correlação das propriedades dos modelos.	119
Tabela 6.4 - Análise de PCA para a matriz de Correlação das respostas.	120
Tabela 6.5 - Análise do modelo quadrático multivariado.	122
Tabela 6.6 - ANOVA do modelo PC_1	123
Tabela 6.7 - ANOVA do modelo IGM	123
Tabela 6.8 - Resultados comparativos entre os métodos.	125
Tabela 6.9 – Comparação entre métodos.	127
Tabela 6.10 - Parâmetros de controle do processo e seus níveis.	130
Tabela 6.11 - Testes e Índices de adequação para aplicação do PCA às respostas.	131
Tabela 6.12 - Análise de correlação entre as respostas.	131
Tabela 6.13 – Análise de componentes principais para as respostas do exemplo 2.	132
Tabela 6.14 - Análise do modelo quadrático reduzido multivariado.	133
Tabela 6.15 - ANOVA do modelo reduzido de PC_2 .	134
Tabela 6.16 - ANOVA do modelo reduzido de IGM.	134
Tabela 6.17 – Correlações entre as respostas originais, PC_1 , PC_2 e IGM.	136
Tabela 6.18 – Análise comparativa de resultados dos métodos de otimização.	137
Tabela 6.19 – Correlações entre as respostas utilizadas no exemplo 3.	141
Tabela 6.20 – Índices multivariados do exemplo 3.	141
Tabela 6.21 – Análise de componentes principais para as respostas do exemplo 3.	142
Tabela 6.22 – Modelos quadráticos completos para as respostas.	142

Tabela 6.23 – Análise de Resultados	144
Tabela 6.24 – Testes e Índices de adequação para aplicação do PCA.	147
Tabela 6.25 – Correlações entre respostas originais e componentes principais.	148
Tabela 6.26 – Análise de componentes principais para caso N°. 4.	149
Tabela 6.27 – Funções objetivo e respectivos limites.	150
Tabela 6.28 – Análise de Componentes Principais para o caso N°. 4	150
Tabela 6.29 – Matrizes de coeficientes e Ponto Estacionário (X_s).	152
Tabela 6.30 – Iterações no método de <i>Ridge Analysis</i> .	153
Tabela 6.31 – Comparação entre os métodos de otimização.	154
Tabela 6.32 – Iterações no Método de Ridge Analysis.	155
Tabela 6.33 – Comparação entre os diferentes métodos.	157
Tabela 6.34 – Iterações no método de <i>Ridge Analysis</i> para IGM (Total)	158
Tabela 6.35 – Fatores e Níveis do experimento (Correia et al., 2005)	161
Tabela 6.36 – Análise de Componentes principais para o caso N° 5.	161
Tabela 6.37 – Comparação entre os pontos de ótimo obtidos por diferentes métodos.	162
Tabela 6.38 - Análise de PCA para a matriz de Correlação das respostas.	166
Tabela 6.39 – Análise comparativa dos métodos.	167
Tabela 6.40 – Análise comparativa dos métodos.	169
Tabela 6.41 - Planilha Experimental.	171
Tabela 6.42 - Testes e Índices de adequação para aplicação do PCA às respostas.	172
Tabela 6.43 - Análise de Correlação das propriedades dos modelos.	172
Tabela 6.44 – Análise de componentes principais para as respostas do exemplo 7.	173
Tabela 6.45 - Análise do modelo quadrático multivariado.	173
Tabela 6.46 - ANOVA do modelo PC_1	174
Tabela 6.47 - Resultados Comparativos entre os métodos.	175
Tabela 6.48 - Planilha Experimental.	177
Tabela 6.49 - Análise de Correlação das propriedades dos modelos.	178
Tabela 6.50 – Análise de componentes principais para as respostas do exemplo 8.	178
Tabela 6.51 - Análise do modelo quadrático multivariado.	180
Tabela 6.52 - Resultados Comparativos entre os métodos.	181
Tabela 6.53 – Parâmetros de usinagem utilizados.	184
Tabela 6.54 – Análise de correlações.	185
Tabela 6.55 – Análise de Autovalores e Autovetores da Matriz de Correlação.	185
Tabela 6.56 – Análise de significância do modelo completo para a rugosidade.	186

Tabela 6.57 – ANOVA do modelo completo de rugosidade.	186
Tabela 6.58 – Análise de significância do modelo completo de PC ₁ .	187
Tabela 6.59 - ANOVA do modelo reduzido de PC ₁ .	187
Tabela 6.60 – Análise comparativa dos métodos.	188

Simbologia

Letras Latinas

<i>A</i>	Área Total
<i>a</i>	Constante
<i>B</i>	Matriz Simétrica, Matriz Positiva Definida.
<i>b</i>	Vetor de coeficientes OLS, Constante ou Vetor
<i>c</i>	Constante de formação de uma elipse
<i>D</i>	Função Desirability Global, Diluição, Distância Bico de Contato – Peça
<i>d</i>	Resíduo Padronizado, vetor
<i>e</i>	Autovetor, Erro
<i>E</i>	Valor Esperado
<i>F</i>	Força, Estatística de Teste de Fisher, Função
<i>f</i>	Avanço da Ferramenta, Velocidade de Alimentação
<i>H</i>	Matriz Chapéu
<i>I</i>	Corrente de Soldagem
<i>i</i>	Índice
<i>k</i>	Número de Componentes Principais, Número de Experimentos, Constante
<i>L</i>	Função Perda de Taguchi, Função de Mínimos Quadrados
<i>l</i>	Combinação Linear
<i>m</i>	Número de eixos sem variação isotrópica, modelo
<i>M</i>	Matriz das derivadas parciais
<i>N</i>	Distância Bico de Contato-Peça
<i>n</i>	Distância Bico de Contato-Peça, Número de observações

N	Valor Nominal
P	Penetração, Matriz Ortogonal, Valor da área para a estatística de Teste (<i>P-Value</i>)
p	Número de Variáveis de Resposta
R	Preferência, Reforço, Matriz de Correlação Amostral
r	Número de observações, Coeficiente de Correlação de Pearson, Raio Experimental
S	Erro Residual, Velocidade de Soldagem, Matriz de Variância-Covariância Amostral
s	Velocidade de Soldagem, Desvio-Padrão amostral
t	Tensão
T	<i>Target</i> , Ângulo de Soldagem, Matriz Transposta, Tempo
u	Número de observações
V	Volt, Tensão, Matriz Diagonal de Desvios-Padrão
v	Número de observações, Tensão de Soldagem
W	Importância da Resposta, Importância Total, Largura do Cordão de Solda
X	Matriz Experimental dos Fatores, Variável Aleatória
x	Variável Independente, vetor não-nulo
Y	Variável Básica (Dependente)
y	Vetor
Z	Variável Não-básica (Independente), Matriz de Variáveis Predictoras (Independentes)

Letras Gregas

Símbolo	Significado
Σ	Matriz de Variância-Covariância Estimada
$\hat{\epsilon}$	Erro estimado
Δ	Variação
λ	Multiplicador de Lagrange
∇	Gradiente
Ω	Espaço Experimental
$\hat{\beta}_i$	Coeficiente Estimado
ϕ	Parâmetro Inicial
ζ	Vetor aleatório

ξ	Constante
Σ	Matriz de Variância-Covariância Populacional
ρ	Matriz de Correlação Populacional, Raio experimental
λ	Autovalor
μ	Média Populacional
σ	Desvio-Padrão
σ^2	Variância
Λ	Matriz Diagonal
α	Nível de Significância, Raio Experimental.
$\hat{\lambda}$	Autovalor Estimado
χ^2	Distribuição do Qui-Quadrado
ν	Número de Graus de Liberdade
ε	Erro aleatório
β	Erro do Tipo II
Σ	Somatório
η	Função
∂	Derivada parcial
$\hat{\beta}$	Coefficientes dos modelos
\forall	Para todo (qualquer) valor
$\hat{\sigma}$	Desvio-Padrão estimado
\otimes	Produto Direto de Matrizes (Kronecker)
$\phi(.)$	Função Densidade Probabilidade
$\Phi(.)$	Função de Probabilidade Acumulada

Siglas

Sigla	Significado
[D]	Matriz de Desvios
[H]	Matriz Hessiana
[Z]	Matriz das variáveis de resposta padronizadas

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
AD	Estatística de Teste de Anderson-Darling
ANOVA	<i>Analysis of Variance</i>
a_p	Profundidade de corte por passo
AP	Área de Penetração do Cordão
AR	Área de Reforço do Cordão
AWS	<i>American Welding Society</i>
BOP	<i>Bead on Plate</i>
Ca	Ciclo Ativo
CCD	<i>Central Composite Design</i>
CI	<i>Convexity Index</i>
C_{jj}	j -ésimo elemento da diagonal de $(X^T X)^{-1}$
CO ₂	Dióxido de Carbono (Gás de Proteção)
Coef	Coefficiente
Cov	Covariância
Cr _{eq}	Cromo Equivalente
det	Determinante de uma matriz
d_i	Função <i>Desirability</i> Individual
d^{i-}	Distância euclidiana da PIOR solução
d^{i+}	Distância euclidiana da MELHOR solução
DOE	<i>Design of Experiments</i>
DRS	<i>Dual Response Surface</i>
EBW	<i>Electron Beam Welding</i>
EQL	<i>Expected Quality Loss</i>
FCAW	<i>Flux Cored Arc Welding</i>
FL	Força de Pressão
GL	Graus de liberdade
GA	<i>Genetic Algorithm</i>
GGZ	<i>Grown Grain Zone</i>
GLM	<i>General Linear Model</i>
GMAW	<i>Gas Metal Arc Welding</i>
Gr	Gradiente
GRG	Gradiente Reduzido Generalizado
GTAW	<i>Gas Tungsten Arc Welding</i>

H_0	Hipótese Nula
H_1	Hipótese Alternativa
HAZ	<i>Heat Affected Zone</i>
HI	<i>Heat Input</i>
h_i	Restrição
H_i	Valor aceitável mais alto
h_{ii}	i -ésimo elemento da diagonal da matriz chapéu
HPLC	<i>High Performance Liquid Chromatography</i>
IC	Índice de Convexidade
I_{CG}	Índice de Correlação Generalizada
I_D	Índice de Divergência
IGM	Índice Global Multivariado
I_K	Índice de Kulbach
KA	Kilo Ampere
K_p	Custo da Operação
L16	Arranjo Ortogonal de Taguchi com 16 experimentos
L18	Arranjo Ortogonal de Taguchi com 18 experimentos
L4	Arranjo Ortogonal de Taguchi com 4 experimentos
L8	Arranjo Ortogonal de Taguchi com 8 experimentos
lb	<i>Lower bound</i>
LI	Limite Inferior
ln	Logaritmo Natural
lof	<i>Lack of Fit</i>
log	Logaritmo
LS	Limite Superior
LSL	<i>Lower Specification Limit</i>
LW	<i>Laser Welding</i>
L_x	Comprimento da Resultante entre vetores
m	Número de Componentes Principais Significativos
MAG	<i>Metal Active Gas</i>
max	Máximo
min	minuto
min	Mínimo
MLP	<i>Multilayer Perceptron</i>

MS	<i>Mean Square</i>
ms	milisegundo
MSE	<i>Mean Square Error</i>
MSR	Metodologia de Superfície de Resposta
MVR	<i>Multivariate Regression</i>
n_c	Número de pontos centrais
n_{eq}	Número de restrições de Igualdade
n_f	Número de pontos fatoriais
NF_c	Número de Ferrita Calculada
NF_m	Número de Ferrita Medida
Ni_{eq}	Níquel Equivalente
O_f	<i>Objective Function</i>
OLS	<i>Ordinary Least Squares</i>
PBT	Teraftalato de Polibutileno
PC	Escore de Componente Principal
PC_1	Primeiro Componente Principal (Escore)
PC_2	Segundo Componente Principal (Escore)
PCA	<i>Principal Component Analysis</i>
PC_k	k -ésimo componente principal
PCR	<i>Principal Component Regression</i>
PCR	<i>Principal Capability Ratio</i>
PC_s	Componentes Principais
pe	<i>Pure error</i>
P-GMAW	<i>Pulsed Gas Metal Arc Welding</i>
PLS	<i>Partial Least Squares</i>
R	Matriz de Correlação Amostral
R_a	Rugosidade Média
RD	Rendimento
RNA	Redes Neurais Artificiais
RSM	<i>Response Surface Methodology</i>
RSW	<i>Resistance Spot Welding</i>
R^2	Coefficiente de Determinação
$R^2(\text{adj.})$	Coefficiente de Determinação Ajustado
S/R	Relação Sinal - Ruído de Taguchi

SAW	<i>Submerged Arc Welding</i>
S_i	Proximidade relativa da solução
SQ	Soma de Quadrados
SS	<i>Sum of Squares</i>
SUR	<i>Seemingly Unrelated Regression</i>
$S_{x,y}$	Direção de Busca
T_0	Estatística de Teste baseada na distribuição t-student
tb	Tempo de Base
Tc	Tempo de Corte
TD	Taxa de Deposição
Th	Espessura das Chapas
TOPSIS	<i>Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution</i>
tp	Tempo de Pico
tr	Traço
Tt	Tempo Total de Usinagem
TV	Volume Total do Cordão
ub	<i>Upper Bound</i>
UNIFEI	Universidade Federal de Itajubá
USL	<i>Upper Specification Limit</i>
Va	Velocidade de Alimentação
Var	Variância
V_c	Velocidade de Corte
WHAZ	Largura da Zona Afetada pelo Calor
WLS	<i>Weighted Least Squares</i>
x^*	Ponto de ótimo
X_s	Ponto Estacionário
Y_i	Resposta
Y_{sl}	Soma de linha
Y_{sc}	Soma de coluna
Y_{sccel}	Soma de célula
Y_t	Soma Total
\bar{Y}	Média
ZTA	Zona Termicamente Afetada pelo Calor

Capítulo 1

1. INTRODUÇÃO

1.1 – O ASPECTO MULTIVARIADO DOS PROCESSOS DE MANUFATURA

Na atualidade, a competição entre as organizações para conquistar a preferência dos consumidores tornou-se extremamente acirrada, fazendo da busca pela melhoria contínua da qualidade uma questão de sobrevivência. Os consumidores por sua vez, tornaram-se muito mais exigentes, quer pela incessante necessidade de inovações, quer pela ampla gama de opções disponíveis.

Um produto tem melhor qualidade se ele é mais adequado ao usuário a que se destina. Assim, ouvir o cliente torna-se fundamental para se obter um nível de qualidade satisfatório, uma vez que as melhorias efetivas advêm dos benefícios concretos gerados aos clientes.

Tendo, portanto, a satisfação do cliente como objetivo principal, a qualidade deve ser projetada e desenvolvida no processo produtivo a partir de necessidades e características desejadas pelos próprios consumidores, enquanto que no processo produtivo são criadas as condições necessárias para que o produto atenda aos anseios previamente estabelecidos. Tratando-se exclusivamente de produtos (bens tangíveis), a satisfação do cliente passa, então, pelo gerenciamento e a otimização dos processos de manufatura.

Quanto mais complexas forem as necessidades dos clientes e consumidores, mais atributos de qualidade serão necessários para atingir tal expectativa, e encontrar uma configuração para o processo de manufatura que satisfaça a este perfil de exigência, torna-se uma tarefa difícil e, por vezes, inglória. Portanto, este perfil de exigência dos clientes atuais, quase sempre traduzido em número superlativo de características críticas de qualidade, pode conferir aos processos de manufatura o caráter multivariado.

Na tentativa de se equacionar este problema, uma abordagem muito difundida tem sido o emprego da análise das relações funcionais estabelecidas entre as múltiplas características exigíveis e um conjunto de variáveis de processo (Ch'ng et al, 2005a). Apesar de se estabelecer relações individuais para cada característica, dificilmente este tipo otimização conduzirá a um procedimento adequado para o atendimento de todas as necessidades impostas. Assim, muitos métodos têm sido dedicados à obtenção de soluções que, de certa maneira, atendam satisfatoriamente o máximo número de requisitos possível (Fung, 2006; Chiao e Hamada, 2001; Del Castillo et al, 1996; Derringer e Suich, 1980). Não obstante existam muitos procedimentos dedicados a esta finalidade, a maioria deles não leva em consideração um fenômeno que naturalmente ocorre quando se estabelecem relacionamentos entre várias características e um mesmo conjunto de variáveis de processo: o surgimento de estruturas de dependência entre as funções de transferência (Khuri, 2003; Chiao e Hamada, 2001, Khuri e Conlon, 1981). Em termos técnicos, tais estruturas de dependência podem ser caracterizadas como estruturas de correlação ou covariância. Então, um problema adicional é incluir tal dependência nas funções de transferência estabelecidas para os processos. Como não existem soluções previamente definidas, as melhores condições para um processo de manufatura podem ser encontradas a partir do entendimento do comportamento de variação das características desejadas. Por vezes, este entendimento advém da observação. Como é pouco provável que tal observação revele naturalmente uma condição ótima, uma estratégia experimental pode ser útil nessa determinação.

Dentro do contexto dos processos de manufatura, os processos de soldagem e usinagem são típicos exemplos dessa natureza multivariada. Por uma série de razões, a qualidade dos produtos obtidos nestes casos também é planejada levando-se em consideração o melhor atendimento possível de uma grande quantidade de critérios exigíveis, tais como resistência, operacionalidade, praticidade, segurança, preço, disponibilidade, versatilidade etc. Em termos matemáticos, estas múltiplas exigências podem ser representadas por modelos empíricos de natureza multivariada.

1.2 – JUSTIFICATIVA

Ao se tratar de processos ou produtos que possuam múltiplos atributos de qualidade, é sempre difícil se encontrar um conjunto de parâmetros ótimos para todas as características de interesse a partir da otimização individual de cada função de transferência pré-estabelecida. Além deste tipo de otimização ser de eficácia improvável, as inter-relações entre as várias características podem levar a análise univariada a conclusões equivocadas e sem sentido (Wu, 2005; Khuri e Cornell, 1996).

A existência de correlações entre as várias respostas de um conjunto exerce uma forte influência sobre as funções de transferência utilizadas para representar as características de qualidade. Como o modelo matemático é extremamente importante para a determinação do ponto de ótimo, a negligência da estrutura de correlação pode conduzir a pontos de ótimo inapropriados, fruto de uma inadequação do método dos mínimos quadrados ordinários (Khuri e Conlon, 1981; Bratchell, 1989). Ao longo dos últimos anos, vários pesquisadores têm se preocupado em dar um tratamento mais adequado para este tipo de problema. A maioria dos estudos nesse sentido passa pela consideração adequada das estruturas de correlação entre as respostas antes que se construam os modelos dos processos. Para a investigação e o entendimento destas estruturas, o estudo dos autovalores e dos autovetores das matrizes de resíduos têm se destacado. De acordo com Langsrud (2001), a primeira proposta de se empregar o planejamento e a análise de experimentos (DOE, do inglês *Design of Experiments*) com múltiplas respostas utilizando-se o conceito de autovalores se deve a Box et al. (1973). Neste estudo, os pesquisadores consideraram a influência da correlação sobre a correta modelagem dos processos, estabelecendo-se a aplicação da análise de autovalores da matriz de variância-covariância das respostas como estratégia de detecção e seleção de variáveis linearmente dependentes. Estas variáveis deveriam ser retiradas posteriormente do conjunto estudado. Box et al. (1973) propuseram a detecção de dependências lineares. Khuri e Conlon (1981) empregaram esta abordagem para eliminar as respostas que apresentavam dependências lineares em relação a outras. As respostas utilizadas por Khuri e Conlon (1981) foram levantadas experimentalmente a partir de um arranjo de Superfície de Resposta (MSR). No trabalho de Langsrud (2001), entretanto, para se desenvolver testes mais robustos que fossem úteis à identificação de fatores significativos em fatoriais fracionários com múltiplas respostas, empregou-se a análise de componentes principais (ACP).

O emprego da Metodologia de Projeto e Análise de Experimentos (DOE) a conjuntos de dados formados por respostas correlacionadas é muito comum, conforme se observa nos exemplos da Tabela 1.1. Segundo Mays (2001), respostas correlacionadas podem ser geradas pelo simples fato de se conduzir experimentos sem considerar a correta aleatorização e, embora sejam comuns, uma série de problemas podem ocorrer quando tais estruturas são negligenciadas. Langsrud (2002), por exemplo, demonstrou em seu trabalho que os testes para a Análise de Variância Multivariada (MANOVA) não funcionam bem em casos onde um número grande de respostas apresente fortes estruturas de correlação. Os testes também falham quando o número de respostas excede o número de observações. Para tratar o problema, um novo método baseado na redução de dimensionalidade do conjunto de respostas foi utilizado, no qual se considerou a decomposição da matriz de correlação das respostas utilizando-se a análise de componentes principais (ACP). Sobre a variável latente originada da transformação – ou Escore de Componente Principal, aplicou-se uma ANOVA. Para Chiao e Hamada (2001) assim como Ch'ng et al. (2005a e 2005b), a análise univariada de um sistema de múltiplas respostas não é uma alternativa viável quando as múltiplas respostas estão correlacionadas; uma análise individual neste caso pode conduzir a níveis conflitantes para os fatores importantes, uma vez que um nível escolhido pode otimizar uma resposta em detrimento das outras. Além disso, quando a correlação entre as respostas é ignorada, a solução encontrada pode-se afastar consideravelmente da solução que otimiza simultaneamente todas as respostas.

Para Ellekjaer et al. (1996), embora a importância da ANOVA univariada não deva ser subestimada, a dificuldade em tratar separadamente as respostas de um conjunto multivariado reside na dificuldade de se detectar suas colinearidades. Tais colinearidades podem indicar uma relação funcional verdadeira entre as características medidas que não são perceptíveis quando se examinam as variáveis individualmente. Johnson e Wichern (2002) denominaram estas estruturas ocultas de “Variáveis Latentes”.

É natural que tais estruturas correlacionadas possam existir também em processos de manufatura. Inúmeros são os trabalhos que apresentam processos com múltiplas respostas dotadas de fortes estruturas de correlação, entre os quais se destacam a soldagem e a usinagem. A Tabela 1.1 destaca alguns exemplos de aplicação da Metodologia de Projeto e Análise de Experimentos (DOE/MSR) a processos de soldagem onde se observam variáveis independentes com correlações extremamente fortes e significativas.

Tabela 1.1 - Trabalhos de soldagem que apresentam múltiplas respostas correlacionadas.

Trabalho	Coefficiente de Correlação¹	Número de respostas	Processo
Kannan e Murugan (2006 a e b)	0,88	8	FCAW
Olabi et al. (2006)	0,77	6	LW
Benyounis et al. (2005a)	0,91	4	LW
Gunaraj e Murugan (2005)	0,85	5	SAW
Rodrigues (2005)	0,85	5	FCAW
Correia et al. (2005)	0,83	4	GMAW
Paiva et al. (2005)	-0,85	5	P-GMAW
Nilo Jr. (2003)	0,99	9	GMAW
Gunaraj e Murugan (2002)	0,95	4	SAW
Darwish e Al-Dekhial (1999)	0,93	6	RSW
Guanaraj e Murugan (1999a)	0,86	7	SAW
Kim et al. (1996)	0,70	3	GMAW

Obs.: (¹) – O valor se refere a mais alta correlação significativa do conjunto original.

Apesar das inúmeras aplicações de Projeto de Experimentos ao estudo dos processos de manufatura com múltiplas respostas, nota-se que:

- a) Embora, muitas das respostas consideradas apresentem fortes estruturas de correlação, conforme ilustra a Tabela 1.1, raramente se menciona a influência dessas estruturas sobre a formação dos coeficientes do modelo ou sobre a localização do ponto de ótimo, conforme advertem Box et al. (1973) e Khuri e Conlon (1981).
- b) Não se constata a análise da independência dos resíduos dos modelos, o que, segundo Box et al. (1973) e Barbetta (1998), se constitui em um problema de ajuste para a aplicação da técnica de mínimos quadrados ordinários.
- c) Quanto à aplicação da ACP, raros são os trabalhos que justificaram a adoção do método ou a adequação do número de autovalores e de componentes principais;
- d) Nos casos onde se observa o princípio multiplicativo de obtenção de funções objetivo singulares, há uma preponderância e predileção pelo método *Desirability* (Derringer e Suich, 1980).
- e) Não foi encontrado nenhum trabalho na área de manufatura que tenha empregado a Metodologia de Superfície de Resposta modelada a partir de componentes principais.

Estas constatações parecem ser justificativas plausíveis para se propor um estudo sobre métodos de otimização múltipla para variáveis correlacionadas.

1.3 - PROBLEMA DE PESQUISA

A otimização experimental individual de um conjunto com múltiplas respostas pode ser ineficiente, especialmente se as respostas forem fortemente correlacionadas. Box et al. (1973) alerta para a possível existência de diferentes tipos de dependência em dados multivariados. Como é usual em análise de regressão, supõe-se que cada observação pode ser expressa por dois termos: o valor esperado e o termo aleatório, ou erro. Assim, existem três tipos de dependência que podem ocorrer em modelos de regressão: (a) dependência entre os erros (também chamados de resíduos), (b) a dependência entre os valores esperados ou (c), uma dependência no próprio valor observado de cada resposta.

A Análise de Componentes Principais (ACP) é reconhecidamente uma técnica de redução de dimensionalidade que tem a característica de manter a maior parte da informação contida no conjunto de variáveis originais. Como na ACP a técnica de extração das variáveis latentes se dá através do cálculo dos autovalores e autovetores da matriz de variância-covariância ou da matriz de correlação dos dados originais, uma função de transferência representativa do conjunto multivariado pode ser adequadamente obtida. Entretanto, tais transformações podem gerar conflitos e dificuldades de interpretação, quando empregadas com o objetivo de otimização. Considerando, portanto, a recomendação de Box et al (1973), e as dificuldades propostas por Bratchell (1989) sobre a utilização de ACP como mecanismo de obtenção de funções objetivo singulares, esta tese pretende investigar:

- a) A insuficiência do primeiro componente principal na representação do conjunto de múltiplas respostas original e a combinação de outros componentes principais menores;
- b) A adequação dos sentidos de otimização das respostas e seus respectivos limites de especificação para os componentes principais correspondentes;
- c) A correspondência entre os limites impostos às equações em componentes principais e as variáveis de resposta originais.

1.4 – OBJETIVO PRINCIPAL E PROPOSTA DE TESE

Nos itens anteriores já se discutiu que, embora muitos processos de manufatura sejam caracterizados por múltiplos indicadores de desempenho ou qualidade (Wu, 2005), a negligência e o desconhecimento da influência das estruturas de correlação sobre a determinação de uma condição ótima, ou a incapacidade dos métodos de otimização múltipla existentes explicar, neutralizar ou considerar tais influências é proeminente (Murphy et al, 2005, Hsu, 2004; Khuri e Conlon, 1981)

Como a consideração das estruturas de correlação é uma prática importante para o entendimento dos processos, a sua complexidade considerável e sua inobservância habitual, abrem novas perspectivas de estudo. Dentro deste contexto, o objetivo principal desta pesquisa será:

Desenvolver um método de otimização múltipla baseado na Análise de Componentes Principais, capaz de considerar adequadamente a estrutura de correlação existente nas respostas de interesse, enquanto seja possível reduzir o número de funções-objetivo ou restrições obtidas experimentalmente através de um arranjo de superfície de resposta.

Deseja-se mostrar através de exemplos que o ponto de ótimo para os processos múltiplos pode ser encontrado substituindo-se as respostas originais por um índice multivariado, formado por uma soma ponderada de seus componentes principais significativos e que, em comparação com outros métodos já consagrados, o método proposto não diverge consideravelmente.

1.5 - CONTRIBUIÇÕES DA TESE

Considerando-se as questões levantadas na literatura sobre os arranjos de superfície de resposta aplicados em problemas com múltiplos objetivos correlacionados, esta pesquisa apresenta as seguintes contribuições:

- a) A proposição do Índice Global Multivariado (IGM): quando um único componente principal não é suficiente para a representação da estrutura de variância-covariância das respostas originais, um índice formado a partir dos componentes principais

significativos, ponderados pelos seus respectivos autovalores, pode ser uma alternativa viável.

- b) A proposição de harmonização dos sentidos de otimização através da inversão das respostas que demonstrarem correlação inversa à do componente principal. Esta inversão pode ser realizada multiplicando-se por constantes negativas, ou ainda, utilizando-se as relações Sinal-ruído de Taguchi.

1.6 - DELIMITAÇÃO DO TEMA

Nesta tese, propõe-se exclusivamente o estudo e o desenvolvimento de um procedimento de otimização de múltiplas respostas baseado nas técnicas estatísticas de redução de dimensionalidade. Não se propõe a análise de resultados específicos dos processos usados como exemplos.

Para validar o método proposto, serão utilizados somente os arranjos experimentais de superfície de resposta do tipo CCD (*Central Composite Design*) e Box-Behnken, que possuam múltiplas respostas correlacionadas e que tratem especificamente de processos de soldagem e usinagem. Alguns arranjos experimentais utilizados como exemplo são provenientes de ensaios realizados nos laboratórios da UNIFEI durante o período de doutoramento do pesquisador, enquanto que outros provêm de artigos clássicos da literatura, nos quais a otimização foi realizada por técnicas tradicionais. Estes exemplos serão utilizados para fins de comparação com o método proposto por esta pesquisa.

1.7 METODOLOGIA

O centro desta pesquisa é o desenvolvimento de um método de otimização múltipla baseado na Análise de Componentes Principais, capaz de considerar adequadamente a estrutura de correlação existente as respostas de interesse. Observando-se também o aspecto da redução do número de funções-objetivo ou restrições obtidas experimentalmente através de um arranjo de superfície de resposta.

Inicialmente, na fundamentação teórica são estabelecidas várias informações consideradas relevantes para o desenvolvimento da pesquisa, particularmente as que tratam da Metodologia de Superfície de Resposta e Projeto de Experimentos, da Análise de Componentes Principais e dos Métodos de otimização múltipla.

A validação da proposta será realizada através de experimentos, cada qual enfatizando uma particularidade do método. Portanto, pode-se considerar que o procedimento de pesquisa adotado nesta tese será a pesquisa experimental.

Para a consecução deste objetivo, propõe-se a utilização da técnica estatística multivariada denominada Análise de Componentes Principais (ACP, ou PCA do inglês: *Principal Component Analysis*) para a obtenção de coeficientes de regressão segundo o Método dos Mínimos Quadrados Ordinários (OLS) (do inglês: *Ordinary Least Squares*), para a modelagem das respostas obtidas através dos arranjos experimentais de superfície de resposta, conduzindo a modelos estocásticos completos ou reduzidos.

1.8 ESTRUTURA DO TRABALHO

Esta pesquisa foi dividida em sete capítulos. Este primeiro trata da Introdução, objetivos, justificativas, delimitação do tema, problemas de pesquisa e expectativas.

O capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica sobre a abordagem multivariada associada à metodologia de projeto de experimentos, o que se denominará “Abordagem Híbrida”. Este capítulo dedica-se a descrever o cenário atual no qual se insere este problema de pesquisa. O objetivo do capítulo 2 é dar uma visão sobre o ineditismo do tema proposto e avaliar as oportunidades de pesquisa e suas questões correlatas.

O capítulo 3 trata da parte central da pesquisa, com a descrição detalhada da teoria da Análise de Componentes Principais (ACP). Antes de propor qualquer modelo de transformação, é preciso entender como e em que condições esta teoria pode ser aplicada para a criação de uma metodologia de análise de múltiplas respostas correlacionadas. Alguns exemplos da literatura de trabalhos de engenharia que empregaram a ACP serão citados.

O capítulo 4 trata dos métodos estatísticos de modelagem de funções, por vezes denominados de Regressão. Neste capítulo apresenta-se uma revisão detalhada do método dos

mínimos quadrados, dos métodos de regressão aparentemente não relacionados, e da regressão múltipla multivariada. Adicionalmente, apresenta-se uma revisão da Metodologia de Superfície de Resposta, procedimento que originará os dados para todas as respostas de interesse. O capítulo trata ainda dos métodos de otimização disponíveis para os processos com múltiplas respostas, suas aplicações e limitações.

O capítulo 5 apresenta a proposta de tese, discriminada em termos das estratégias necessárias para a adequada consideração das estruturas de correlação entre as respostas de um conjunto multivariado, bem como sua transformação em funções objetivo e restrições necessárias à utilização de algoritmos de otimização, tais como o Gradiente reduzido generalizado.

No capítulo 6 é realizada a validação da proposta através de estudos de caso de processos de soldagem e usinagem com múltiplas respostas correlacionadas. Procurou-se em cada exemplo, apresentar uma particularidade do método.

No capítulo 7 constam as considerações finais onde, com base na revisão de literatura e no desenvolvimento do método, apresentam-se as principais conclusões e limitações, a partir das quais são apontadas algumas sugestões para a continuidade deste estudo.

Capítulo 2

ABORDAGENS HÍBRIDAS

2.1 – CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Neste capítulo, apresenta-se parte da fundamentação teórica relativa à abordagem combinada de DOE e ACP aplicada a problemas de engenharia. Iniciando-se com uma visão geral sobre as propostas multivariadas utilizadas em conjunto com a Metodologia de Projeto de Experimentos, tanto clássica quanto de Taguchi, procura-se também explorar o aspecto da insuficiência de métodos tradicionais de otimização múltipla, tal como o *desirability*, em atender às particularidades das múltiplas respostas correlacionadas. Além disso, discute-se a extensa aplicação dos métodos de Taguchi em relação à escassa quantidade de trabalhos relacionados à Metodologia de Superfície de Resposta (MSR). Nos casos onde a MSR foi aplicada, várias questões são levantadas, comparando-se a teoria da análise estatística multivariada às inconsistências verificadas nos trabalhos.

Um aspecto muito importante deste capítulo é que, a partir da revisão da literatura, algumas limitações da abordagem híbrida e algumas lacunas deixadas por alguns pesquisadores foram relatadas. Estas limitações e lacunas são encaradas como oportunidades para geração de contribuições científicas para a base do conhecimento sobre o assunto.

2.2 – EXPERIMENTOS COM MÚLTIPLAS RESPOSTAS

Os processos de manufatura, tal como a soldagem e a usinagem, são eminentemente multivariados por se estabelecer relacionamentos funcionais para múltiplas características de saída (Respostas) a partir de um mesmo conjunto de variáveis de entrada. Na maioria das vezes, este relacionamento é estabelecido a partir de estratégias experimentais, e as soluções ótimas para os sistemas podem ser encontradas a partir de combinações entre a Metodologia de Projeto de Experimentos e outros procedimentos de otimização. Em alguns casos, a combinação de níveis e fatores que otimiza um conjunto de características é determinada graficamente. Para ilustrar estas afirmações, seguem-se alguns exemplos da literatura.

Kim et al. (1996), utilizaram um arranjo fatorial completo 3^3 para respostas correlacionadas. Analogamente, Scotti e Rosa (1997) utilizaram um fatorial fracionado 2^{8-3} , combinado com uma ANOVA. Meng e Butler (1997) descreveram uma metodologia integrada utilizando arranjos experimentais de Taguchi e Redes Neurais Artificiais (RNA) também para múltiplas respostas. Os experimentos foram utilizados como dados de treinamento da rede neural, o que possibilitou a geração de modelos não-lineares para as funções de transferência. Wyckoff (1998) empregou o planejamento de experimentos para múltiplas respostas com análise realizada através de gráficos de contorno. Segundo Kim e Lin (2000), embora esta seja uma maneira intuitiva e simples de se analisar superfícies de resposta, o método é severamente limitado pelo número de variáveis de entrada e saída. Utilizando-se um arranjo central composto, Darwish e Al-Dekhial (1999) analisaram um conjunto de múltiplas respostas graficamente. Com o mesmo tipo de arranjo, Gunaraj e Murugan (1999a, 1999b, 2000a, 2000b) aplicaram um método de otimização múltipla não-linear restrita. Elegeu-se uma resposta como função objetivo, fixando-se as demais como restrições. Abordagem similar é encontrada no trabalho de Ribardo (2000). Scotti et al. (2000) demonstraram a aplicação de um arranjo L16 de Taguchi para avaliar cinco respostas de interesse. Koleva (2001) utilizou a modelagem estatística e programas computacionais de otimização utilizando a função *desirability*. Allen et al. (2002) empregaram um arranjo Box-Behnken, otimizando o conjunto de múltiplas respostas através do Gradiente Reduzido Generalizado (GRG). Kim et al. (2002) empregaram a combinação dos métodos MSR, GA (*Genetic algorithm*) e a função *desirability*. Gunaraj e Murugan (2002) aplicaram um arranjo central composto com solução por gráficos de contorno, assim como Tarn et al. (2002), que utilizaram um arranjo L8 de Taguchi. Kim et al. (2003) utilizaram um CCD (*Central*

Composite Design) de face centrada para otimizar a média e a variância simultaneamente, através da minimização de MSE (*Mean Square Error*). Nesta pesquisa, as restrições foram adicionadas à função objetivo (MSE) na forma de função de penalidade. Esta função objetivo – denominada de *Fitness* - foi minimizada através de algoritmos genéticos. Ribardo e Allen (2003) aplicaram um arranjo de superfície de resposta do tipo Box-Behnken, utilizando o GRG para resolver o método *desirability* modificado. Gomes e Costa (2004) também utilizaram a Metodologia de Superfície de Resposta em conjunto com soluções gráficas para tratar múltiplas respostas em um processo de corte por plasma. Kim e Rhee (2004) e Kim et al. (2005) empregaram o enfoque dual DRS (*Dual Response Surface*), considerando a média e a variância de cada característica investigada. A função objetivo foi obtida através da função *desirability* aplicada à média e à variância da característica em estudo, e resolvida posteriormente através de Algoritmo Genético. Correia et al. (2005) apresentaram um estudo comparativo entre a metodologia de superfície de resposta e o método dos Algoritmos Genéticos. Este último procedimento empregou como função objetivo singular uma combinação ponderada das múltiplas respostas. Paiva et al. (2005a) empregaram um arranjo central composto, aplicando o método *desirability* aos dois primeiros componentes principais representativos do conjunto original de múltiplas respostas. Song et al. (2005) estudaram múltiplas respostas utilizando um arranjo L9 de Taguchi. Benyounis et al. (2005a, 2005b) e Olabi et al (2006) utilizaram um arranjo do tipo Box-Behnken e apenas gráficos de contorno sobrepostos como forma de análise. Kim et al. (2005) empregaram o método de otimização de busca aleatória (*Random Search*) para otimizar uma função singular obtida a partir da combinação de 3 respostas, modeladas utilizando-se os dados experimentais coletados com um arranjo de superfície de resposta. Gunaraj e Murugan (2005) também utilizaram um arranjo central composto e análise gráfica individual. Casalino et al. (2005) utilizaram previamente uma ANOVA seguida pela análise gráfica das relações sinal-ruído, obtidas em um arranjo L4 de Taguchi. Rodrigues (2005) empregou a metodologia de superfície de resposta e a função *Desirability*. Kannan e Murugan (2006 a e b) empregaram um CCD e análise gráfica. Nilo Jr. (2003), Bonanni (2005) e Oliveira (2005) empregaram o método *Desirability*. Liao (2005) combinou um arranjo L8 de Taguchi com ACP. A configuração mais adequada para os fatores experimentais foi determinada através de gráficos das relações sinal-ruído da resposta singular.

Uma análise do estado da arte das aplicações da análise de componentes principais à análise e planejamento de experimentos (DOE) revela quatro aspectos importantes: (a) a abordagem híbrida envolvendo os Arranjos Fatoriais completos e fracionários (DOE), cuja

análise é predominantemente por Análise de Variância e a combinação ótima é obtida graficamente; (b) a abordagem híbrida com arranjos de Taguchi (utilizados para se contornar o problema de diferenças de sentidos de otimização entre as respostas); (c) a insuficiência do método *Desirability* em tratar problemas com múltiplas respostas correlacionadas, e (d) a Metodologia de Superfície de Resposta modelada por componentes principais (Bratchell, 1989). A revisão da literatura que será apresentada procurará enfatizar que é necessário se estudar uma abordagem mais adequada para o problema que considere as lacunas observadas nos métodos existentes.

Como poderá se constatar a abordagem híbrida envolvendo a combinação das técnicas de projeto de experimentos e as técnicas estatísticas multivariadas é mais facilmente utilizada a partir dos arranjos ortogonais de Taguchi. A seguir, vêm os arranjos fatoriais (completos e fracionários). Raríssimos, entretanto, são os trabalhos que aplicam a Metodologia de Superfície de Resposta. Mesmo nas publicações relacionadas onde a MSR foi identificada, não há indícios de uma fusão dos métodos. O método da ACP é utilizado apenas para a demonstração de agrupamentos de variáveis, o que de certa forma, ajuda bastante nas tentativas de otimização dos processos.

O fato de Taguchi ser um método muito mais utilizado no enfoque híbrido do que a metodologia de superfície de resposta reside na natureza conciliadora das relações Sinal-ruído. Tais transformações permitem que a relação entre a média e a variância seja sempre maximizada. Esta particularidade facilita em muito a composição dos métodos.

Dentro deste contexto, a proposta desta tese é aprofundar a utilização dos enfoques híbridos, estendendo-os à metodologia de superfície de resposta.

2.3 – A INSUFICIÊNCIA DO MÉTODO DESIRABILITY E OS MODELOS HÍBRIDOS ENVOLVENDO O DOE CLÁSSICO

Embora seja uma metodologia amplamente difundida no meio acadêmico e industrial, o método *Desirability* (Derringer e Suich, 1980) tem algumas limitações e inconsistências no que tange a otimização de processos com múltiplas respostas. A principal dificuldade é que o método depende de uma escolha subjetiva das funções d_i individuais. Além disso, assim como

destacam Ko et al. (2005) e Wu (2005), o método não leva em consideração a variância das respostas, bem como a estrutura de correlação entre elas.

Khuri e Conlon (1981) afirmam que, apesar do método ser fácil, simples de se aplicar e permitir avaliações subjetivas da importância de cada resposta, a inexperiência do pesquisador pode conduzir a resultados imprecisos. Além disso, a negligência do método em relação à correlação entre as múltiplas respostas pode alterar a estrutura da função D global, o que põe em risco a determinação das condições ótimas de operação do processo. Khuri e Conlon (1981) ressaltam ainda a importância de se levar em conta a matriz de variância-covariância do conjunto de múltiplas respostas, como critério para se determinar o ponto de ótimo geral adequado. Ko et al. (2005) postulam que a negligência da estrutura de variância-covariância das respostas pode conduzir a uma solução irrealista se, de fato, as respostas possuem uma estrutura de variância significativa ou se mostrarem altamente correlacionadas.

Chiao e Hamada (2001) apontam ainda duas desvantagens do método: primeiro, a função D será, provavelmente, mais difícil de se modelar uma vez que é uma combinação complexa de m respostas; em segundo, é difícil se afirmar qual é o valor esperado de D , exceto que quanto maior ele for, tanto melhor para o processo.

Ortiz et al (2004) declaram também que à medida que o número de respostas e fatores que definem a qualidade do processo aumenta a superfície de resposta para função *desirability* correspondente torna-se altamente não-linear, multimodal e restrita. Nestes casos, os algoritmos convencionais de otimização e os métodos de busca direta podem encontrar apenas ótimos locais, ou falhar em encontrar uma solução viável para o problema. Nesta tese, assim como sugere Pignatiello (1993), será considerado que a matriz de variância-covariância é dependente dos fatores experimentais.

Como o método *Desirability* é incapaz de incorporar as colinearidades observadas entre as respostas, há uma tendência em se empregar técnicas estatísticas de redução de dimensionalidade que se baseiem na matriz de variância-covariância das respostas originais. Mais recentemente, nota-se o crescente interesse pelo desenvolvimento de métodos que combinam o planejamento de experimentos (Clássico ou Taguchi) com técnicas multivariadas de análise; são os chamados modelos híbridos. Muito embora haja uma quantidade considerável de publicações em periódicos abordando o assunto, nota-se claramente que esta metodologia tem sido mais proficuamente empregada em áreas específicas, tais como a

Alimentícia, a Química e a Farmacêutica. São raras as pesquisas que envolvem os processos de manufatura, tais como a soldagem ou a usinagem.

O trabalho de Carlson et al. (1992) talvez tenha sido um dos primeiros a empregar a abordagem híbrida de projeto de experimentos clássico e análise de componentes principais. Por DOE clássico, entenda-se a estratégia de experimentos ortogonais e balanceados, em sua maioria, fatoriais completos e fracionários, com arranjos distintos dos introduzidos por Taguchi, conforme descreve Montgomery (2001). A ênfase dada por Carlson et al. (1992) consiste na análise dos fatoriais fracionários com múltiplas respostas, empregados como arranjos exploratórios. Foi demonstrado que a decomposição das respostas em componentes principais poderia ser aplicada satisfatoriamente para se analisar experimentos com múltiplas respostas, desde que as mesmas possuíssem certo nível de correlação. Desse modo, os vetores dos componentes principais poderiam ser utilizados para se determinar os fatores significativos para a maioria das respostas de interesse. Nenhum teste de adequação para aplicação da ACP foi mencionado pelo autor.

Ellekjær et al. (1995a) apresentaram um dos primeiros estudos sobre a substituição de múltiplas respostas por componentes principais em fatoriais fracionários. Seguindo a mesma linha de raciocínio, Ellekjær et al. (1995b, 1996) empregaram a análise multivariada de ACP na melhoria de produtos alimentícios. A estratégia geral do estudo foi identificar uma maneira eficiente de melhorar as qualidades sensoriais do produto analisado. Sobre os escores dos componentes principais das respostas originais obtidas a partir de uma escala sensorial, aplicou-se a análise de variância (ANOVA).

Magnus et al. (1997) empregaram os escores dos componentes principais para analisar os dados de um arranjo de superfície de resposta através de uma análise de variância (ANOVA), em um experimento realizado para se identificar as propriedades ótimas de produtos de panificação. Um arranjo central composto foi utilizado para a coleta dos dados. A análise da superfície de resposta foi feita de maneira univariada, diferentemente da proposta apresentada nesta tese. Os componentes principais foram utilizados também para agrupar as respostas.

Bergman et al. (1998) também empregaram uma abordagem combinada para tornar ótimo e robusto um processo de granulação e compressão de comprimidos. Foram utilizados fatoriais fracionários seqüenciais 2^{6-2} e 2^{5-1} para examinar a influência do conjunto de fatores sobre 6 respostas. Nenhum método de otimização foi aplicado, assim como não foram gerados

modelos matemáticos dos experimentos. A ACP foi empregada apenas com a finalidade de relacionar resultados de experimentos com grupos de respostas de interesse e para se identificar qualquer variação nas respostas dentro do espaço experimental escolhido.

Sahni et al. (1999) mostraram que as técnicas envolvendo fatoriais fracionários e ACP podem ser eficientes na redução do número de respostas necessárias para descrever a variação principal entre as amostras, além de permitir o estudo de interações. Foi possível também a redução do número de experimentos necessários ao se empregar um fatorial fracionário 2^{8-2} para 8 respostas de interesse. Segundo os autores, o produto desenvolvido com base nesta técnica constituiu-se, posteriormente, em um sucesso de mercado.

Uosukainen et al. (1999) aplicaram a ACP em conjunto com a metodologia de superfície de resposta e as técnicas de fatoriais fracionários para a otimização de processos de fabricação de medicamentos e óleos. Entretanto, a proposta desse estudo não contempla a utilização dos componentes principais como variáveis de saída em arranjos de projetos de experimentos, mas sim, para agrupar respostas semelhantes.

Careri et al. (1999) criaram uma aplicação combinando análise de regressão múltipla, ACP e Análise Hierárquica de *Cluster* utilizando-se escores de componentes principais. Um arranjo de superfície de resposta para 3 fatores, cúbico e de face centrada, foi utilizado para se coletar dados de 13 respostas. O objetivo dessa abordagem é o agrupamento de respostas que apresentem modelos matemáticos similares. Assim, uma condição ótima para uma resposta representativa do grupo seria também, uma solução viável para as demais. Nesta aplicação, a solução ótima foi obtida graficamente.

Sandström et al. (2001) empregaram uma combinação de regressão linear múltipla com ACP. Os dados experimentais foram coletados seguindo-se um arranjo exploratório de Plackett-Burman (Box et al, 1978) para seis variáveis independentes (fatores) e 9 respostas. Este arranjo é um fracionário de resolução III, capaz apenas de avaliar efeitos principais.

Rossi (2001) utilizou a ACP em conjunto com a Metodologia de Superfície de Resposta, com o objetivo de otimizar as características principais de um produto alimentício. Utilizando uma escala sensorial, 33 atributos de qualidade (variáveis de resposta) foram avaliados. O método proposto por Rossi (2001) propõe a coleta dos dados através de um arranjo central composto, calculando-se, posteriormente, a distância euclidiana entre os valores experimentais e um valor desejado para cada atributo. Com a análise de componentes

principais, foi possível realizar o estudo utilizando apenas 5 componentes principais. A condição ótima nesta aplicação é determinada por substituição e comparação, diferentemente da proposta desta tese que aplicará métodos de otimização não-linear com restrições.

Gabriellson et al. (2003a, 2003b) propuseram a abordagem híbrida de Projeto de experimentos multivariados (*Multivariate Design*). Esta proposta combina as técnicas multivariadas de ACP, as multivariadas derivadas, como o PLS (do inglês, *Partial Least Squares*) e o PCR (do inglês *Principal Component Regression*), com um DOE do tipo fatorial completo. O aspecto mais interessante destes estudos é a aplicação inédita de projeto de experimentos para fatores representados por sinais de um espectro de frequência. Em Gabriellson et al. (2003b), por exemplo, alguns fatores qualitativos com muitos níveis foram caracterizados por espectroscopia, gerando um sinal formado por uma grande quantidade de frequências. Sobre a transformada de Fourier destes sinais aplicou-se a ACP. Cerca de 8000 pontos do sinal original puderam ser representados por 9 componentes principais. Como, então, as variáveis independentes foram transformadas em componentes principais, empregou-se o PLS como método de análise de regressão.

Rueda et al. (2003) apresentaram uma aplicação na qual a metodologia de superfície de resposta, o método *Desirability* e a análise de componentes principais (ACP) são utilizados na otimização de um sinal multivariado de um sistema de detecção eletroquímica, em fluxo contínuo, de três compostos fenólicos. Um arranjo central composto com 2 fatores foi utilizado para avaliar três propriedades do sinal de cada um dos três compostos, totalizando nove respostas. Diferentemente do que será proposto nesta tese, Rueda et al. (2003) aplicaram o algoritmo de ACP para corrigir desvios do sinal. Em seguida, sobre as 9 respostas retificadas, aplicou-se o método *desirability*.

Van Gyseghem et al. (2004) empregaram isolada e comparativamente, os métodos *desirability*, ACP e otimalidade de Pareto, para melhorar a definição dos picos das colunas em um processo de cromatografia líquida (HPLC, do inglês *High Performance Liquid Chromatography*) em função de 28 tipos de fases estacionárias, medindo-se 8 propriedades (respostas) das colunas.

2.4 - MODELOS HÍBRIDOS E ARRANJOS DE TAGUCHI

Avaliando-se os vários artigos nos quais se percebe a utilização conjunta de técnicas de projeto de experimentos e a análise de componentes principais, verifica-se uma preponderância dos arranjos ortogonais de Taguchi. Esta metodologia tem uma característica particularmente interessante para a abordagem híbrida: a análise das respostas através da relação sinal-ruído. De acordo com Phadke (1989) e Montgomery (2001), esta relação transforma uma resposta original em uma função que deve ser sempre maximizada, o que simplifica muito o processo de otimização. As relações Sinal-ruído são transformações logarítmicas aplicadas às respostas experimentais originais, escolhidas segundo o tipo de otimização desejada (maximização, normalização ou minimização). Por definição, estas relações devem ser sempre maximizadas para que a resposta original atinja o sentido originalmente escolhido (Fung e Kang, 2005; Liao, 2003; Antony, 2000). Além disso, a Metodologia de Taguchi disponibiliza arranjos que permitem a exploração de vários fatores, em um número razoável de níveis, com uma quantidade consideravelmente pequena de experimentos.

Su e Tong (1997) apresentaram uma das primeiras aplicações conjuntas de Taguchi e ACP. O método consiste em armazenar as relações sinal-ruído para cada resposta, normalizando-as em seguida. A transformação por ACP é então aplicada ao conjunto de respostas pré-processadas. A análise de variância e a análise gráfica são realizadas considerando-se o escore do primeiro componente principal. Segundo os autores, este procedimento é aplicado somente quando o primeiro componente principal é significativo.

Antony (2000) é um clássico exemplo de aplicação de Taguchi com ACP. A ênfase desse estudo foi a aplicação da abordagem de Su e Tong (1997), descrita anteriormente. Escolhidos os sentidos de otimização de cada resposta, são calculadas as relações sinal-ruído de cada uma delas. Normalizando-as, aplica-se a ACP. A condição ótima é aquela que maximizar o escore do primeiro componente principal.

Hsu (2001) aplicou a ACP em conjunto com Redes Neurais Artificiais (RNA) e Taguchi, em um problema de fabricação de fibras óticas com múltiplas respostas. Primeiramente, foram identificados os fatores de controle, os fatores de ruído e as respostas. Utilizando um arranjo L18 de Taguchi, foram executados os experimentos, computando-se em seguida a relação sinal-ruído de cada resposta do conjunto multivariado. Os resultados

foram, então, utilizados para treinar uma RNA através do algoritmo de *back propagation*. Uma vez treinada, a rede neural foi utilizada para prever as respostas de cada experimento do L18. A esta saída da RNA, aplicou-se a ACP, transformando o conjunto de previsões da RNA em um único componente principal. O ponto ótimo foi aquele que otimizou o escore do primeiro componente principal.

Algumas das aplicações híbridas propostas com os métodos de Taguchi e ACP utilizaram a técnica TOPSIS (*Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution*) de Hwang e Yoon (1981). O TOPSIS é uma abordagem da classe de problemas denominada de “Tomada de Decisão Multicritério”. Esta abordagem considera simultaneamente a distância entre cada alternativa representada pelos experimentos de um arranjo de Taguchi, a solução ideal desejada e a pior situação. A melhor alternativa é aquela que apresentar a menor distância em relação à solução ideal e a maior distância em relação à pior solução (Tong et al, 2004). O procedimento compreende a definição de uma matriz de alternativas, formada pelos valores das respostas de cada experimento de um arranjo de Taguchi. Esta matriz é normalizada e em seguida multiplicada pelas importâncias respectivas de cada resposta. Calcula-se, então, a distância euclidiana entre a alternativa ideal e a solução alternativa, bem como entre a pior solução e a solução ideal. Em seguida, calcula-se a proximidade relativa da solução (S_i), dividindo-se a distância euclidiana da pior solução (d^+) pela soma da distância euclidiana ideal (d^{++}) e a distância da pior solução (Yang e Chou, 2005). O ponto de ótimo no método de Hwang e Yoon (1981) é a condição experimental que apresentar o maior S_i .

Liao (2003) apresentou uma comparação entre o método PCR-TOPSIS e o método híbrido de Taguchi e ACP. O PCR (do inglês *Principal Capability Ratio*) é o índice de capacidade de processo, elemento formado pela razão entre a variação da especificação (diferença entre limites superior e inferior do processo) e a variação do processo (Desvio Padrão). Uma vez calculadas as relações sinal-ruído das respostas, calcula-se o PCR de cada resposta. Uma vez encontrado o PCR de cada sinal-ruído, computa-se o TOPSIS, conforme descrito anteriormente.

Tong et al. (2004) propuseram uma alternativa ao modelo criado por Liao (2003), substituindo a resposta original pelo componente principal da relação sinal-ruído de cada resposta, previamente padronizada. Tong et al. (2005) aplicaram esta proposta para encontrar uma condição ótima de operação de um processo de polimento químico-mecânico de circuitos integrados. Liao (2005) propôs o método dos componentes principais ponderados para os casos onde há mais do que um componente principal com autovalores maiores que 1. A

ponderação consiste na pré-multiplicação do escore de cada componente principal pelo respectivo autovetor. O índice resultante é avaliado graficamente ou utilizando-se uma ANOVA. O artigo apresenta três estudos de caso.

Yih-Fong (2005) apresentou uma aplicação híbrida para otimização de um processo de fresamento utilizando máquinas de comando numérico HSM (do inglês *High Speed Machininig*). Este é um dos raros estudos encontrados onde a metodologia foi aplicada a um processo de fabricação. Yih-Fong (2005) utilizou um arranjo L18 para coletar os resultados de experimentos realizados com 6 fatores controláveis e 2 fatores de ruído (incontroláveis), avaliando-se 4 variáveis de resposta. Foi proposto um índice múltiplo constituído pela soma de cada produto do escore de componente principal pela porcentagem de explicação do respectivo componente. Embora o trabalho apresente uma análise dos autovalores e autovetores, também como em Fung e Kang (2005), nenhum teste de adequação é realizado.

Fung (2006) e Fung e Kang (2005) demonstraram a otimização do processo de injeção e moldagem por propriedades de fricção de fibras reforçadas com PBT (Teraftalato de Polibutileno) utilizando um arranjo L9 de Taguchi em conjunto com a análise de componentes principais (ACP). Quatro respostas são avaliadas. Uma análise univariada foi realizada com a introdução de um índice de qualidade. Por tentativa e erro, os pesquisadores combinam a soma de cada escore de componente principal, multiplicado por sua respectiva porcentagem de explicação. Apesar da abordagem multivariada, não são feitos testes de correlação entre as respostas, testes de esfericidade. O estudo também não faz menção sobre os critérios de seleção de componentes principais.

Embora a abordagem híbrida formada por arranjos de Taguchi e ACP seja bastante difundida, devem ser ressaltados alguns aspectos observados na literatura: primeiramente, o emprego da relação sinal-ruído é realmente uma forma interessante de se padronizar a direção de otimização das respostas individuais e de sintonizá-las de acordo com a representação por componentes principais. Muito embora isto seja uma vantagem importante, sabe-se apenas que a relação Sinal-ruído deve ser maximizada, mas não se sabe qual valor é o mais adequado. O mesmo se pode dizer de sua representação em escores de componentes principais.

Em segundo, a quase totalidade dos métodos apresentados utiliza algum processo de normalização de variáveis antes da aplicação da análise de componentes principais com o objetivo de tornar as respostas adimensionais ou de reduzir a variação da escala natural. Não

haveria nenhum problema com isto se a extração dos componentes principais se desse através da matriz de correlação. Johnson e Wichern (2002), Rencher (2002), dentre outros, afirmam que a matriz de correlação é adequada na extração dos componentes principais quando os dados possuem escalas diferentes, ou quando a variância das respostas não for homogênea. Nos estudos citados anteriormente, a localização do ponto de ótimo se dá por inspeção gráfica. São raras as pesquisas que empregam algum tipo de método de otimização. Mesmo que estes métodos fossem aplicados, haveria uma limitação quanto aos modelos aditivos, para os quais o comportamento de variação do fenômeno é supostamente linear entre os níveis dos fatores adotados.

De acordo com Montgomery (2001), alguns dos arranjos de Taguchi são formas de fatoriais fracionários. Além disso, em algumas aplicações, dependendo do número de fatores e experimentos escolhidos, o arranjo pode ser saturado. Isto significa que os arranjos de Taguchi não conseguem avaliar interações, a não ser que o arranjo não seja saturado, e que se escolham apenas algumas interações de interesse. Ainda assim, apenas interações duplas são contempladas. Deste modo, o método de Taguchi só é capaz de gerar modelos lineares e de primeira ordem. Um clássico exemplo disto é o trabalho de Reddy et al (1997), onde a idéia de “Projeto Robusto” é combinada, através de modelos de regressão linear múltipla, com a técnica de otimização por objetivos (*Goal Programming*). Na maioria dos casos, ao se empregar os arranjos de Taguchi só serão obtidos modelos lineares para o fenômeno estudado. Portanto, dependendo da aplicação, os modelos de regressão múltipla (modelos de primeira ordem) não serão tão adequados quanto aqueles gerados pela Metodologia de Superfície de Resposta. Entretanto, segundo Kim e Lin (2000), a metodologia de superfície de resposta perde eficiência com o número crescente de variáveis de entrada e de saída. Portanto, é viável se utilizar alguma técnica de redução de dimensionalidade.

Uma crítica à discussão de Kim e Lin (2000) é que, de acordo com Montgomery (2001), a metodologia de superfície de resposta (MSR) só deve ser empregada depois que experimentos exploratórios (Fracionados, Completos ou Plackett-Burman) tenham sido utilizados, numa tentativa de se filtrar apenas fatores estatisticamente significativos e, então, construir modelos matemáticos de ordem mais alta. Disso decorre que, enquanto o método de Taguchi carece de meios para gerar equações não lineares, a MSR é mais apropriada para um número reduzido de fatores. Parece incoerente também, dizer que um número grande de respostas torna inviável a aplicação da MSR.

Examinando-se este cenário, Hsu (2004) utilizou um arranjo de Taguchi para vários fatores e uma quantidade de experimentos inferior à maior parte das alternativas equivalentes de DOE clássico. Os resultados experimentais serviram como variáveis de entrada de uma RNA (Rede Neural Artificial) Como uma rede neural utiliza um algoritmo não-linear, os valores previstos por ela também seguem um padrão não-linear. Aplicando-se a regressão múltipla a estas saídas, obteve-se um modelo não-linear. Convertendo-se as múltiplas respostas em uma função objetivo singular através do método *desirability* exponencial, aplicou-se um método de otimização não-linear para se determinar o ponto de ótimo da função.

Apesar da ênfase multivariada dos estudos apresentados, em nenhum deles se verifica a aplicação de testes de adequação aos dados originais, tais como o Teste de esfericidade de Bartlett (1954) e o Teste de Isotropia, conforme sugerem Anderson (1963) e Lopes (2001), ou mesmo, o Teste de Lawley (1956). Nenhuma alusão se faz ao número adequado de componentes principais, não havendo referências acerca dos índices de correlação de Todeschini (1997) ou do teste F de Malinowski. Nenhuma referência é feita também aos critérios de seleção de Kaiser como citado por Johnson e Wichern (2002) ou Cattell (1966), assim como recomendam Peres-Neto et al. (2005), Mohammad e Brereton (2004), Faber (1999), Todeschini (1997) e Wold (1978).

2.5 – METODOLOGIA DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA MODELADA POR COMPONENTES PRINCIPAIS

Nos itens anteriores, discorreu-se sobre a utilização conjunta da análise de componentes principais em conjunto com a metodologia de projeto de experimentos. Como foi demonstrado, há uma grande quantidade de publicações que contemplam esta abordagem, no entanto, raros são os casos onde se empregou a metodologia de superfície de resposta. A razão mais provável para isto é a facilidade proporcionada pelo método de Taguchi, em contraposição às dificuldades particulares da MSR.

O único estudo encontrado durante a revisão bibliográfica sobre a aplicação da análise multivariada de componentes principais associada à metodologia de superfície de resposta é a pesquisa de Bratchell (1989). Neste estudo, Bratchell aponta várias dificuldades e limitações

potenciais do emprego de equações escritas em termos de componentes principais como respostas utilizadas em arranjos do tipo MSR.

A primeira limitação descrita por Bratchell, trata do possível conflito existente entre um valor de mínimo e um valor de máximo em um grupo de variáveis que devam ser simultaneamente maximizadas. Esta dificuldade ocorre devido às discrepâncias existentes entre os autovetores, ou seja, enquanto que uma função modelada pelo p -ésimo componente principal tem uma concavidade conhecida, as respostas originais têm concavidades em sentidos inversos. Assim, a otimização da equação em termos de componentes principais não conduziria à resposta desejada no sistema original. Neste caso, os sinais dos autovetores expressam os sentidos das correlações existentes. Desse modo, a dificuldade pode ser traduzida como uma divergência entre a correlação estabelecida por um componente principal e uma resposta original. Por exemplo, há casos onde existe uma correlação negativa entre o componente principal e a resposta original, ao passo que tal resposta deva ser minimizada. Considerando-se a natureza da correlação, a minimização da equação escrita em termos do componente principal conduzirá à maximização da resposta original.

Uma segunda dificuldade surge quando algumas variáveis são pobremente representadas pelos componentes principais, isto é, quando elas possuem autovetores muito pequenos. Segundo Bratchell (1989), a otimização baseada em componentes principais neste caso não conduziria a um ponto de ótimo adequado com os requisitos iniciais esperados para a otimização. Em um estudo de caso, Bratchell mostra que isto realmente acontece, mas não propõe nenhuma solução alternativa. O autor recomenda ainda a utilização de métodos de rotação para melhorar a explicação dos modelos, mas não apresenta nenhum exemplo de sua eficiência, ou dos problemas que esta transformação pode acarretar.

Na aplicação utilizada por Bratchell (1989), nenhuma análise de adequação do método é proposta; o pesquisador utiliza indistintamente os componentes principais. Neste caso específico, a pesquisa aponta sérios problemas encontrados com a modelagem do segundo componente principal, ao passo que se verifica facilmente, que tal componente não é representativo do sistema original. A pesquisa não trata e não utiliza os testes de Kaiser ou o critério gráfico de Cattell (1966), o teste de esfericidade de Bartlett (1954) ou mesmo o Teste de Lawley (1956). A única referência que Bratchell faz ao número adequado de componentes principais é sobre os testes de validação cruzada de Wold (1978) e Malinowski, como citado em Faber (1999). A pesquisa de Bratchell (1989) também não trata da análise de correlações entre as respostas estudadas, princípio básico de toda a análise de componentes principais.

Muito sobre o comportamento das respostas e dos componentes principais pode ser visualizado mais facilmente com este tipo de análise, embora os sinais dos autovetores revelem a mesma coisa.

Bratchell afirma ainda que, quando houver a necessidade de se modelar também os componentes principais menores, o ponto de ótimo será consideravelmente diferente daquele obtido pelas técnicas convencionais; entretanto, o estudo não deixa claro se após a modelagem dos componentes menores, eles serão utilizados em conjunto, como na função *desirability*, ou separadamente. Como os componentes principais representam aspectos diferentes do sistema multivariado original, é possível que a otimização individual das equações transformadas conduza a pontos de ótimo diferentes daquele obtido por um método de otimização simultânea. Isto parece óbvio, uma vez que também aconteceria se fosse utilizada a otimização individual das respostas originais. No artigo, não há demonstrações matemáticas ou exemplos numéricos destas afirmações.

O estudo não revela a existência de correlações entre as equações modeladas por componentes principais e o conjunto de respostas originais. Embora esta seja uma constatação óbvia, o entendimento destas correlações poderia direcionar a harmonização dos sentidos de otimização dos componentes principais. O autor faz uma afirmação de que o primeiro componente principal sempre estará perto de um ótimo global. O exemplo citado na pesquisa comprova isto, mas não fica claro qual é o poder de generalização dessa afirmação.

2.6 CONSIDERAÇÕES FINAIS DO CAPÍTULO

Conforme pode ser constatado na revisão da literatura, existem várias questões ainda não respondidas sobre a utilização do enfoque multivariado associado à Metodologia de Superfície de Resposta, que possibilitam um estudo complementar. Acredita-se que as tentativas realizadas com o intuito de se responder tais indagações, possam contribuir para o melhor entendimento do assunto.

Capítulo 3

ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS

3.1 – CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Neste capítulo, apresenta-se parte da fundamentação teórica relativa à metodologia estatística multivariada da Análise de Componentes Principais (ACP). Esta revisão é fundamental para o entendimento da pesquisa e dos métodos criados para proporcionar à Metodologia de Superfície de Resposta um respaldo adequado na sua atribuição de análise e otimização de processos de manufatura com múltiplas respostas correlacionadas.

3.2 - ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS

A Análise de Componentes Principais (ACP) é uma técnica estatística multivariada criada por Hotelling (1933) e que se dedica à explicação da estrutura de variância-covariância existente em um conjunto de dados, utilizando-se combinações lineares das variáveis originais. Segundo Johnson e Wichern (2002) e Rencher (2002), seus objetivos principais são: (1) a redução de dimensionalidade, e (2) a interpretação de dados.

Embora p componentes sejam necessários para se reproduzir a variabilidade total de um sistema de interesse, geralmente, a maior parte desta variabilidade pode ser representada por um pequeno número k de componentes principais. Isto quer dizer que existe quase tanta informação em k componentes principais que nas p variáveis originais. A idéia geral da ACP é, portanto, que k componentes principais podem substituir, sem perda considerável de informação, as p variáveis originais. O conjunto original de dados, consistindo de n medições das p variáveis, é reduzido para um conjunto posterior formado por n medições de k componentes principais.

De acordo com Rencher (2002), 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 análise de componentes principais (ACP) serve como um passo intermediário na análise dos dados.

A Análise de Componentes Principais tem uma extensa gama de aplicações. Basicamente, sua utilidade está na redução de dimensionalidade de vetores de entradas ou de saídas em determinados equacionamentos. Os exemplos a seguir mostram algumas aplicações associadas às Redes Neurais Artificiais, Análise de Confiabilidade, extração de características de sinais ou imagens em ensaios não-destrutivos, ou uma combinação destas aplicações.

Haykin (1994), por exemplo, utilizou a ACP para as etapas de pré-processamento de dados utilizados na construção de redes neurais artificiais, o que reduz a complexidade do projeto classificador. Segundo Haykin (1994), um número reduzido de características retém a maior parte da informação intrínseca; assim, a redução da dimensionalidade se dá pela eliminação das combinações lineares entre as variáveis de entrada da rede, restando apenas aquelas que expressarem a maior parte da variabilidade dos dados originais.

Mingoti (2001) estudou o aperfeiçoamento do Diagrama de Pareto para aplicações em variáveis linearmente dependentes. Através da análise de componentes principais os resultados conflitantes do processo foram desfeitos.

Lopes (2001) desenvolveu sua tese de doutorado através da criação de uma metodologia multivariada para determinar a confiabilidade e o tempo médio de falha de um produto, cujos componentes tenham seus tempos de vida correlacionados. Para isto, utilizou-se da análise de componentes principais. Numa aplicação apresentada em sua tese, a adoção da ACP permitiu a redução de um grande número de variáveis (80 peças originais) para um grupo de apenas

três variáveis (componentes principais), optando-se, posteriormente, pela utilização de apenas um componente. Observou-se que a diferença entre a confiabilidade do primeiro componente principal e a média das confiabilidades das peças originais para três percentis foi de 0,2%.

Souza Filho (2002) utilizou a ACP como uma técnica de extração de características em sistemas de sonar passivo, onde a manipulação de um grande número de variáveis em tempo real se faz necessária. Nestas aplicações, a redução de dimensionalidade é peça chave, sem a qual a operação dos sistemas pode se tornar inviável.

Scremin (2003) desenvolveu sua tese de doutorado sobre a seleção adequada do número de componentes principais baseado na Lógica Difusa (*Fuzzy*). Os métodos frequentemente utilizados para esse propósito são fundamentados apenas na variabilidade explicada pelos fatores. Dessa forma, deixando de contemplar informações relevantes, como por exemplo, as cargas fatorias e o conhecimento do pesquisador e/ou especialista sobre o problema em estudo. O uso da lógica difusa contribuiu para o aperfeiçoamento do método de Análise de Componentes Principais ao permitir agregar o conhecimento do pesquisador e/ou especialista, sobre o problema, às informações estatísticas dos dados. O método proposto apresentou resultados superiores aos métodos tradicionais de seleção.

Lamar et. al (2003), apresentaram um estudo de reconhecimento de posturas manuais usando uma RNA. A partir da gravação de um vídeo com os sinais manuais, definiu-se um vetor de características da imagem. Após o pré-processamento dos vetores através da ACP, características dos vetores 2 D foram extraídas. Auxiliado por uma rede neural MLP (do inglês *Multilayer Perceptron*), construiu-se um sistema automático de reconhecimento da linguagem de sinais.

Warne et al. (2004) utilizaram a idéia central de redução de dimensionalidade e de tratamento da colinearidade proporcionada pelo algoritmo ACP, com retenção máxima da variabilidade do conjunto de dados de entrada, para redefinir as variáveis de entrada de uma rede neural artificial. A matriz de entrada original possuía 11 variáveis, com 573 observações cada. Foram retidos 3 componentes principais com percentual acumulado de explicação da matriz de variância-covariância entre 70 % e 95%. Utilizando o critério de Cattell (1966), uma segunda tentativa empregou 4 PC's. A abordagem com 3 componentes apresentou, após 1000 simulações, erros de treinamento, validação e teste inferiores à abordagem com 4 componentes.

Murphy (2004) apresentou um estudo sobre controle de qualidade multivariado utilizando os componentes principais da função perda escalonada.

Yacoub e MacGregor (2004) utilizaram o algoritmo de ACP para otimizar um processo químico com dez variáveis de resposta altamente correlacionadas e sete variáveis de entrada. Após a aplicação do método multivariado, apenas 3 componentes principais foram suficientes para representar o conjunto original. Como as variáveis independentes foram padronizadas, aplicou-se apropriadamente um método de regressão por PLS.

Harb (2005) procurou identificar as competências essenciais para a busca da competitividade que devem ser adotadas pelas empresas do setor supermercadista brasileiro. Com efeito, procurou analisar as correlações entre as várias competências, assim como estabelecer as variáveis que exercem maior influência na percepção de gestores dos segmentos hipermercado e supermercado nas cinco regiões brasileiras.

Tino (2005) utilizou a ACP para desenvolver um método de regulação de máquinas de injeção plástica, visando a redução de rejeitos. Os ajustes paramétricos foram propostos para serem feitos durante o processo de regulação, utilizando a metodologia de Análise por Componentes Principais, com base nos dados amostrados por um sistema de monitoração em tempo real. Os parâmetros de regulação amostrados durante o período de regulação, de uma determinada máquina injetora, molde e matéria-prima, foram armazenados para que, em seguida, com a ACP fosse possível a definição de grupos de parâmetros com maior representatividade.

Uma extensa quantidade de pesquisas também tem sido realizada empregando-se a análise de componentes principais como método de redução de dimensionalidade e de extração de características de sinais obtidos em ensaios não-destrutivos, tais como: radiografia, ultra-som e correntes parasitas. Entre eles podem ser citados Lingvall e Stepinski (2000), Shophian et al. (2003), Sun et al. (2004), da Silva et al. (2004), Jonhson (2002), Wang e Paliwal (2003), Swiniarski e Skowron (2003) e Zhang e Lin (2005).

3.2.1 - Componentes Principais Populacionais

De acordo com Johnson e Wichern (2002) e Rencher (2002), algebricamente, a ACP é uma combinação linear particular das p variáveis aleatórias X_1, X_2, \dots, X_p . Geometricamente, estas combinações lineares representam a seleção de um novo sistema de coordenadas obtido

a partir da rotação do sistema original, tendo como ordenadas as variáveis X_1, X_2, \dots, X_p . Os novos eixos representam as direções com máxima variabilidade e fornecem uma maneira mais simples e parcimoniosa de descrever a estrutura de covariância.

Conforme descrevem Gabrielsson *et al.* (2003b), a ACP corresponde a um ajuste por mínimos quadrados de uma linha reta ($N=1$) ou um plano/hiperplano N -dimensional para os dados em um espaço K -dimensional de componentes principais. No caso apresentado pela figura 3.1, adaptado de Gabrielsson *et al.* (2003b), os dados são centrados na média, e três variáveis originais são descritas por apenas dois componentes principais. O objeto é projetado no plano matemático descrito pelos componentes, e o valor do escore em cada componente é obtido através da determinação das distâncias entre a origem e o objeto projetado. Os autovetores, também chamados de “Carregamentos”, representam os coeficientes da direção do plano ajustado. A distância perpendicular entre o objeto e o plano é a distância para o modelo.

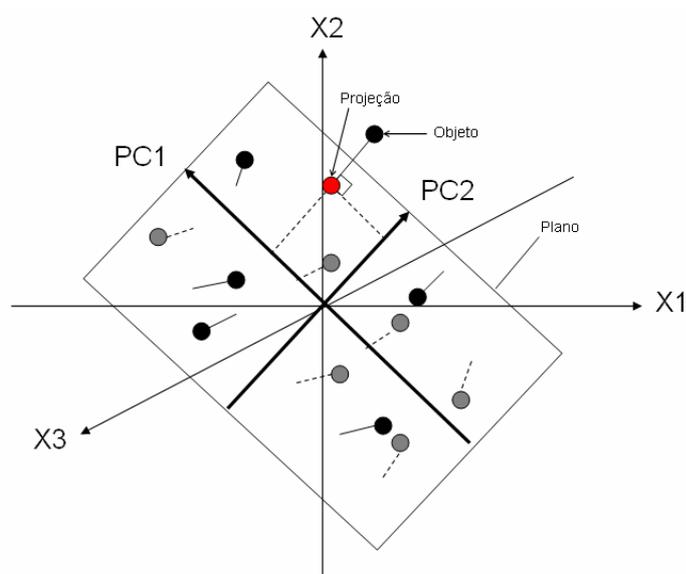


Figura 3.1 – Interpretação geométrica da ACP. Adaptado de Gabrielsson *et al.* (2003 b).

Segundo Rencher (2002), uma outra forma de interpretar geometricamente os componentes principais é através da decomposição espectral da matriz de variância-covariância Σ ou da matriz de correlação ρ . Por definição, de acordo com o disposto em Johnson e Wichern (2002), a decomposição espectral de uma matriz simétrica \mathbf{A} ($k \times k$) é dada por:

$$\mathbf{A} = \lambda_1 \underset{(k \times 1)}{e_1} \underset{(1 \times k)}{e_1^T} + \lambda_2 \underset{(k \times 1)}{e_2} \underset{(1 \times k)}{e_2^T} + \dots + \lambda_k \underset{(k \times 1)}{e_k} \underset{(1 \times k)}{e_k^T} \quad (1)$$

Onde λ_i são os autovalores de A e e_i , seus respectivos autovetores normalizados.

De acordo com Johnson e Wichern (2002), o produto interno de dois vetores pode ser encontrado considerando-se seu comprimento e o ângulo formado entre eles, tal que:

$$L_x = \sqrt{x^T x} \quad (2)$$

$$\cos \theta = \frac{x^T y}{\sqrt{x^T x} \sqrt{y^T y}} \quad (3)$$

Assim, tem-se que:

$$e_i^T e_i = 1, \quad i = 1, 2, \dots, k \quad \text{e} \quad e_i^T e_j = 0, \quad i \neq j \quad (4)$$

Supondo que $k = 2$ pode-se escrever que:

$$x^T A x = a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2 + 2a_{12} x_1 x_2 = c^2 \quad (5)$$

E, aplicando-se a decomposição espectral como descrito anteriormente, tem-se:

$$x^T A x = \lambda_1 (x^T e_1)^2 + \lambda_2 (x^T e_2)^2 \quad (6)$$

Quando A é uma matriz positiva e definida, os autovalores são maiores que zero e c^2 é uma elipse cujos eixos são $y_1 = (x^T e_1)$ e $y_2 = (x^T e_2)$, tal que $c^2 = \lambda_1 (y_1)^2 + \lambda_2 (y_2)^2$. É fácil se verificar que $x = c \lambda_1^{-1/2} (e_1)$ satisfaz $x^T A x = \lambda_1 (c \lambda_1^{-1/2} e_1^T e_1)^2 = c^2$, e que $x = c \lambda_2^{-1/2} (e_2)$ 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, tal como mostra a figura 3.2.

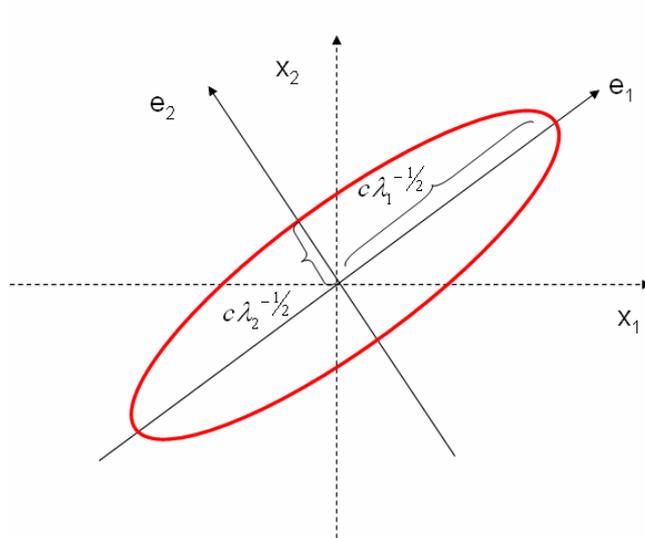


Figura 3.2 – Interpretação geométrica da ACP. Adaptado de Johnson e Wichern (2002).

Os componentes principais dependem somente da matriz de variância-covariância Σ ou da matriz de correlação ρ das variáveis X_1, X_2, \dots, 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 de elipsóides de densidade constante. Adicionalmente, inferências podem ser feitas a partir de componentes amostrais quando a população é multivariada normal.

Seja o vetor aleatório $X^T = [X_1, X_2, \dots, X_p]$, cuja matriz de variância-covariância Σ possua autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$.

Sejam consideradas as seguintes combinações lineares:

$$\begin{aligned} Y_1 &= \ell_1^T X = \ell_{11}X_1 + \ell_{21}X_2 + \dots + \ell_{p1}X_p \\ Y_2 &= \ell_2^T X = \ell_{12}X_1 + \ell_{22}X_2 + \dots + \ell_{p2}X_p \\ &\vdots \\ Y_p &= \ell_p^T X = \ell_{1p}X_1 + \ell_{2p}X_2 + \dots + \ell_{pp}X_p \end{aligned} \quad (7)$$

Considere-se ainda que uma variável aleatória simples, X_1 , seja multiplicada por uma constante k . Então, o valor esperado e a variância de kX_1 , serão dados, respectivamente por:

$$E(kX_1) = k.E(X_1) = k\mu_1 \quad (8)$$

$$Var(kX_1) = E(kX_1 - k\mu_1)^2 = k^2 Var(X_1) = k^2 \sigma_{11} \quad (9)$$

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

$$\begin{aligned} Cov(aX_1, bX_2) &= E(aX_1 - a\mu_1)(bX_2 - b\mu_2) \\ &= abE(X_1 - \mu_1)(X_2 - \mu_2) \\ &= abCov(X_1, X_2) \\ &= ab\sigma_{12} \end{aligned} \quad (10)$$

Como:

$$\begin{aligned} E(aX_1) &= aE(X_1) = a\mu_1 \\ E(bX_2) &= bE(X_2) = b\mu_2 \end{aligned} \quad (11)$$

Então, pode-se escrever para a combinação linear $aX_1 + bX_2$, que:

$$E(aX_1 + bX_2) = aE(X_1) + bE(X_2) = a\mu_1 + b\mu_2 \quad (12)$$

$$\begin{aligned} Var(aX_1 + bX_2) &= E[(aX_1 + bX_2) - (a\mu_1 + b\mu_2)]^2 \\ &= E[(aX_1 - a\mu_1) + (bX_2 - b\mu_2)]^2 \\ &= E[a^2(X_1 - \mu_1)^2 + b^2(X_2 - \mu_2)^2 + 2ab(X_1 - \mu_1)(X_2 - \mu_2)] \\ &= [a^2Var(X_1) + b^2Var(X_2) + 2abCov(X_1, X_2)] \end{aligned} \quad (13)$$

$$Var(aX_1 + bX_2) = a^2\sigma_{11} + b^2\sigma_{22} + 2ab\sigma_{12} \quad (14)$$

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

$$[a \quad b] \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = c^T X \quad (15)$$

Analogamente, $E(aX_1 + bX_2) = a\mu_1 + b\mu_2$, se torna:

$$[a \quad b] \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} = c^T \mu \quad (16)$$

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

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{bmatrix} \quad (17)$$

Então, a variância da combinação linear poderá ser escrita como:

$$Var(aX_1 + bX_2) = Var(c^T X) = c^T \Sigma c \quad (18)$$

Desde que de (14) vem:

$$\begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a^2 \sigma_{11} + 2ab \sigma_{12} + b^2 \sigma_{22}$$

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

$$\begin{aligned} c^T X &= c_1 X_1 + c_2 X_2 + \dots + c_p X_p \\ \text{média} &= E(c^T X) = c^T \mu \\ \text{Variância} &= \text{Var}(c^T X) = c^T \Sigma c \end{aligned} \quad (19)$$

Usando os resultados de (19) em (7), vem que:

$$\begin{aligned} \text{Var}(Y_i) &= \ell_i^T \Sigma \ell_i \quad i = 1, 2, \dots, p \\ \text{Cov}(Y_i, Y_k) &= \ell_i^T \Sigma \ell_k \quad i, k = 1, 2, \dots, p \end{aligned} \quad (20)$$

Os componentes principais serão, portanto, todas as combinações lineares não-correlacionadas Y_1, Y_2, \dots, Y_p cujas variâncias em (20) sejam tão grandes quanto possível.

O primeiro componente principal (PC_1), segundo a definição de Johnson e Wichern (2002), é a combinação linear que possui a máxima variância, isto é, aquela combinação que maximizar a variância, de acordo com a equação 20. Parece evidente que a expressão $\text{Var}(Y_i) = \ell_i^T \Sigma \ell_i$ pode ser aumentada pela multiplicação de qualquer ℓ_i por uma dada constante. Para eliminar esta indeterminação, é conveniente restringir os vetores coeficientes ao comprimento unitário. Deste modo, pode-se escrever as definições do primeiro e segundo componente principais, respectivamente PC_1 e PC_2 , na forma de funções objetivo com restrições.

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad & \text{Var}(\ell_1^T X) \\ \text{Sujeito a:} \quad & \ell_1^T \ell_1 = 1 \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad & \text{Var}(\ell_2^T X) \\ \text{Sujeito a:} \quad & \ell_2^T \ell_2 = 1 \\ & \text{Cov}(\ell_1^T X, \ell_2^T X) = 0 \end{aligned} \quad (22)$$

As soluções dos sistemas (21) e (22) conduzem, respectivamente, ao valor do primeiro e do segundo componentes principais.

Desta forma, o i -ésimo componente principal será a combinação linear $\ell_i^T X$ que for solução da expressão (23) a seguir:

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad & \text{Var}(\ell_i^T X) \\ \text{Sujeito a:} \quad & \ell_i^T \ell_i = 1 \\ & \text{Cov}(\ell_i^T X, \ell_k^T X) = 0 \quad \text{para } k < i \end{aligned} \quad (23)$$

Para demonstrar a veracidade das expressões (21), (22) e (23), é necessário recorrer ao princípio da Desigualdade de Cauchy-Schwarz, como será visto a seguir.

3.3 - DESIGUALDADE DE CAUCHY-SCHWARZ

Se alguns autovalores λ_i forem iguais, as escolhas dos correspondentes vetores coeficientes e_i , e conseqüentemente, Y_i , não serão únicas.

Prova: Seja considerada a desigualdade de Cauchy-Schwarz, tomando-se \mathbf{b} e \mathbf{d} dois vetores ($p \times 1$) quaisquer. Então:

$$(\mathbf{b}^T \mathbf{d})^2 \leq (\mathbf{b}^T \mathbf{b})(\mathbf{d}^T \mathbf{d}) \quad (24)$$

A igualdade só existirá se e somente se $\mathbf{b} = c\mathbf{d}$ (ou $\mathbf{d} = c\mathbf{b}$), para qualquer constante c .

A desigualdade é óbvia se tanto \mathbf{b} quanto \mathbf{d} forem nulos. Excluindo-se esta possibilidade, escolha-se um vetor $\mathbf{b} - x\mathbf{d}$, onde x é um escalar arbitrário. Desde que o comprimento do vetor seja positivo para $\mathbf{b} - x\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$, então neste caso:

$$\begin{aligned} 0 < (\mathbf{b} - x\mathbf{d})^T (\mathbf{b} - x\mathbf{d}) &= \mathbf{b}^T \mathbf{b} - x\mathbf{d}^T \mathbf{b} - \mathbf{b}^T (x\mathbf{d}) + x^2 \mathbf{d}^T \mathbf{d} \\ &= \mathbf{b}^T \mathbf{b} - 2x(\mathbf{b}^T \mathbf{d}) + x^2 \mathbf{d}^T \mathbf{d} \end{aligned} \quad (25)$$

A expressão imediatamente acima é quadrática em x . Se os quadrados forem completados com a adição e a subtração de um escalar, obtém-se:

$$\begin{aligned} 0 < \mathbf{b}^T \mathbf{b} - \frac{(\mathbf{b}^T \mathbf{d})^2}{\mathbf{d}^T \mathbf{d}} + \frac{(\mathbf{b}^T \mathbf{d})^2}{\mathbf{d}^T \mathbf{d}} - 2x(\mathbf{b}^T \mathbf{d}) + x^2 \mathbf{d}^T \mathbf{d} \\ = \mathbf{b}^T \mathbf{b} - \frac{(\mathbf{b}^T \mathbf{d})^2}{\mathbf{d}^T \mathbf{d}} + \frac{(\mathbf{b}^T \mathbf{d})^2}{\mathbf{d}^T \mathbf{d}} + (\mathbf{d}^T \mathbf{d}) \left[x - \frac{\mathbf{b}^T \mathbf{d}}{\mathbf{d}^T \mathbf{d}} \right] \end{aligned} \quad (26)$$

O termo entre colchetes será nulo se for escolhido um $x = \frac{b^T d}{d^T d}$. Assim, pode-se concluir que:

$$0 < b^T b - \frac{(b^T d)^2}{d^T d} \text{ se para qualquer } x, \mathbf{b} \neq x\mathbf{d}. \quad (27)$$

Uma extensão direta da desigualdade de Cauchy-Schwarz se segue naturalmente.

Considere-se \mathbf{b} ($p \times 1$) e \mathbf{d} ($p \times 1$) dois vetores quaisquer e tome-se \mathbf{B} , uma matriz positiva e definida. Então, tem-se:

$$(b^T d)^2 \leq (b^T B b)(d^T B^{-1} d) \quad (28)$$

Onde a igualdade só existirá se $b = c(B^{-1}d)$ ou $d = c(B^{-1}b)$, para qualquer constante c .

Prova: A desigualdade é óbvia quando $b = 0$ ou $d = 0$. Para outros casos, porém, deve-se levar em conta matriz raiz quadrada $\mathbf{B}^{1/2}$ definida em termos de seus autovalores, λ_i , e dos autovetores normalizados, e_i , tem-se, considerando-se a decomposição espectral já descrita anteriormente, que:

$$B^{-1/2} = \sum_{i=1}^p \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} e_i e_i^T \quad (29)$$

E segue que $b^T d = b^T I d = b^T B^{1/2} B^{-1/2} d = (B^{1/2} b)^T (B^{-1/2} d)$. A prova é completada aplicando-se a desigualdade de Cauchy-Schwarz aos vetores $(B^{1/2} b)$ e $(B^{-1/2} d)$, como já descrito anteriormente.

A extensão da desigualdade de Cauchy-Schwarz pode ser utilizada para provar que os primeiros componentes principais são resultados da maximização de uma combinação linear.

Lema: Seja B ($p \times p$), uma matriz positiva e definida e d ($p \times 1$), um dado vetor. Então, para um vetor não-nulo arbitrário x ($p \times 1$), tem-se:

$$\max_{x \neq 0} \frac{(x^T d)^2}{x^T B x} = d^T B^{-1} d \quad (30)$$

Com o máximo sendo alcançado quando $x = c B^{-1} d$ para $\forall c \neq 0$.

Prova: Pela extensão da desigualdade de Cauchy-Schwarz, $(x^T d)^2 \leq (x^T Bx)(d^T B^{-1}d)$. Se x for não-nulo e \mathbf{B} for uma matriz positiva e definida, então, $(x^T Bx) > 0$. Dividindo-se ambos os lados da desigualdade pelo escalar positivo $(x^T Bx) > 0$, obtém-se:

$$\frac{(x^T d)^2}{x^T Bx} \leq d^T B^{-1}d \quad (31)$$

Portanto, um máximo é alcançado quando $x = cB^{-1}d$. Os resultados alcançados com a maximização conduzem aos autovalores da matriz \mathbf{B} .

Seja $B_{(p \times p)}$, uma matriz positiva e definida com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$ e os respectivos autovetores normalizados $(e_1), (e_2), \dots, (e_p)$. Então:

$$\max_{x \neq 0} \frac{(x^T Bx)}{x^T x} = \lambda_1 \Rightarrow p/x = e_1 \quad (32)$$

$$\max_{x \neq 0} \frac{(x^T Bx)}{x^T x} = \lambda_p \Rightarrow p/x = e_p \quad (33)$$

Além disso, estendendo-se estes resultados para $k+1$ componentes principais, tem-se que:

$$\max_{x \perp e_1, \dots, e_k} \frac{(x^T Bx)}{x^T x} = \lambda_{k+1} \Rightarrow p/x = e_{k+1}, k = 1, 2, \dots, p-1 \quad (34)$$

Prova: Seja $P_{(p \times p)}$, uma matriz ortogonal cujas colunas sejam os autovetores $(e_1), (e_2), \dots, (e_p)$ e Λ uma matriz diagonal com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$ ao longo da diagonal principal. Seja também $B^{1/2} = P\Lambda^{1/2}P^T$ e $y = \underset{(p \times 1)}{P^T} \underset{(p \times p)}{x}$. Consequentemente, se x for diferente de zero implica que y também o será. Portanto:

$$\frac{(x^T Bx)}{x^T x} = \frac{x^T B^{1/2} B^{1/2} x}{x^T \underbrace{PP^T}_{I(p \times p)} x} = \frac{x^T P\Lambda^{1/2} P^T \Lambda^{1/2} x}{y^T y} = \frac{y^T \Lambda y}{y^T y} = \frac{\sum_{i=1}^p \lambda_i y_i^2}{\sum_{i=1}^p y_i^2} \leq \frac{\lambda_1 \sum_{i=1}^p y_i^2}{\sum_{i=1}^p y_i^2} = \lambda_1 \quad (35)$$

Fazendo:

$$x^T = e_1^T \Rightarrow y = Pe_1^T = [1 \quad 0 \quad \dots \quad 0], \text{ desde que } e_k^T e_1 = 1, p/k = 1 \text{ e } e_k^T e_1 = 0, p/k \neq 1.$$

Para esta escolha de x , $\frac{y^T \Lambda y}{y^T y} = \lambda_1$, ou $\frac{(e_1^T B e_1)}{e_1^T e_1} = \lambda_1$.

Então, fazendo: $x = Py = y_1 e_1 + y_2 e_2 + \dots + y_p e_p$, $x \perp e_1, e_2, \dots, e_k$, implica que:

$$0 = y_1 e_1^T e_1 + y_2 e_2^T e_2 + \dots + y_p e_p^T e_p = y_i, \quad i \leq k$$

Portanto, para x perpendicular aos primeiros k autovetores, o lado esquerdo da desigualdade em (35), se torna:

$$\frac{x^T B x}{x^T x} = \frac{\sum_{i=1}^p \lambda_i y_i^2}{\sum_{i=1}^p y_i^2} \quad (36)$$

Considerando-se $y_{k+1} = 1, y_{k+2} = \dots = y_p = 0$, obtém-se o máximo declarado.

3.4 – DEMONSTRAÇÕES

Com a dedução realizada no item 3.4 a partir da desigualdade de Cauchy-Schwarz, podem ser escritos os seguintes resultados:

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

$$Y_i = e_i^T X = e_{1i} X_1 + e_{2i} X_2 + \dots + e_{pi} X_p \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (36)$$

Com as seguintes escolhas:

$$\begin{aligned} Var(Y_i) &= e_i^T \Sigma e_i = \lambda_i \quad i = 1, 2, \dots, p \\ Cov(Y_i, Y_k) &= e_i^T \Sigma e_k = 0 \quad i \neq k \end{aligned} \quad (37)$$

Sabe-se que, se $B = \Sigma$, então:

$$\max_{x \neq 0} \frac{(e^T B e)}{e^T e} = \lambda_1 = \frac{e_1^T \Sigma e_1}{e_1^T e_1} = Var(Y_1) \quad (38)$$

Estendendo-se estes resultados para $k+1$ componentes principais, vem que:

$$\max_{x \perp e_1, \dots, e_k} \frac{(\ell^T \Sigma \ell)}{\ell^T \ell} = \lambda_{k+1} \quad (39)$$

Para a escolha de $\ell = e_{k+1}$, com $e_{k+1}^T e_k = 0, k = 1, 2, \dots, p-1$, tem-se que:

$$\frac{e_{k+1}^T \Sigma e_{k+1}}{e_{k+1}^T e_{k+1}} = e_{k+1}^T \Sigma e_{k+1} = \text{Var}(Y_{K+1}) \quad (40)$$

Mas, $e_{k+1}^T \Sigma e_{k+1} = \lambda_{k+1} e_{k+1}^T \Sigma e_{k+1} = \text{Var}(Y_{K+1}) = \lambda_{k+1}$. Como já demonstrado anteriormente, se os autovetores forem perpendiculares, então $\text{Cov}(Y_i, Y_k) = e_i^T \Sigma e_k = 0$, se $i \neq k$. Então, todos os autovetores de Σ serão ortogonais se todos os autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ 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:

$$\text{Cov}(Y_i, Y_k) = e_i^T \Sigma e_k = e_i^T \lambda_k e_k = \lambda_k e_i^T e_k = 0, i \neq k \quad (41)$$

Assim, a prova está completa. Dos resultados anteriores, decorre que os componentes principais são não correlacionados e possuem variâncias iguais aos autovalores da matriz de variância-covariância.

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

$$\sigma_{11} + \sigma_{22} + \dots + \sigma_{pp} = \sum_{i=1}^p \text{Var}(X_i) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = \sum_{i=1}^p \text{Var}(Y_i) \quad (42)$$

Prova: Defina-se a soma das variâncias como o traço da matriz de variância-covariância. Usando os resultados anteriores, pode-se escrever que:

$$\begin{aligned} \text{tr}(\Sigma) &= \text{tr}(P\Lambda P^T) = \text{tr}(\Lambda P^T P) = \text{tr}(\Lambda) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p \therefore \\ \sum_{i=1}^p \text{Var}(X_i) &= \text{tr}(\Sigma) = \text{tr}(\Lambda) = \sum_{i=1}^p \text{Var}(Y_i) \end{aligned} \quad (43)$$

O **Resultado 2** pode ser usado para se definir qual é a proporção da variância total que é representada (ou devida) ao k -ésimo componente principal, tal que:

$$PC_k = \frac{\lambda_k}{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p}, \quad k = 1, 2, \dots, p \quad (44)$$

Segundo Johnson e Wichern (2002), Souza (2000), Rencher (2002), Lopes (2001), Fung (2006), Liao (2006), dentre outros, se a maior parte da variância total (80 a 90%), para um p grande, puder ser atribuída ao primeiro, segundo ou terceiro componentes principais, então estes componentes podem “substituir” as p variáveis originais sem perda considerável de informação.

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

$$\rho_{Y_i, Y_k} = \frac{e_{ki} \sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}} \quad i, k = 1, 2, \dots, p \quad (45)$$

A expressão (45) é a fórmula para o cálculo do coeficiente de correlação de Pearson entre os Y_i componentes principais as variáveis originais X_k . Nesta expressão, $(\lambda_1, e_1), (\lambda_2, e_2), \dots \geq (\lambda_p, e_p)$ são pares de autovalores-autovetores da matriz de covariância Σ .

Prova: Seja o vetor $\ell_k^T = [0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0]$. Então, estabelecendo-se a igualdade $X_k = \ell_k^T X$ tem-se, considerando-se o já disposto anteriormente que:

$$\text{Cov}(X_k, Y_i) = \text{Cov}(\ell_k^T X, e_i^T X) = \ell_k^T \Sigma e_i.$$

Desde que $\Sigma e_i = \lambda_i e_i$, $\text{Cov}(X_k, Y_i) = \ell_k^T \lambda_i e_i = \lambda_i e_{ki}$. Então: $\text{Var}(Y_i) = \lambda_i$ e $\text{Var}(X_k) = \sigma_{kk}$. Substituindo-se estas expressões, tem-se:

$$\rho_{(X_k, Y_i)} = \frac{\text{Cov}(X_k, Y_i)}{\sqrt{\text{Var}(Y_i)\text{Var}(X_k)}} = \frac{\lambda_i e_{ki}}{\sqrt{\lambda_i \cdot \sigma_{kk}}} = \frac{e_{ki} \sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}}, \quad i, k = 1, 2, \dots, p \quad (46)$$

De acordo com o disposto em Johnson e Wichern (2002), é interessante se considerar os componentes principais como derivados de uma amostra aleatória de uma distribuição normal multivariada. Suponha-se que X seja distribuída como uma normal multivariada $N_p(\mu, \Sigma)$. É sabido que μ é o centro dos elipsóides descritos por:

$$(x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu) = c^2 \quad (47)$$

Este elipsóide de densidade constante tem eixos definidos por $x = c\lambda_i^{1/2}(e_i), i = 1, 2, \dots, p$, onde $(\lambda_1, e_1), (\lambda_2, e_2), \dots \geq (\lambda_p, e_p)$ são pares de autovalores-autovetores da matriz de covariância Σ . Um ponto caindo no i -ésimo eixo do elipsóide possuirá coordenadas proporcionais a $e_i^T = [e_{1i}, e_{2i}, \dots, e_{pi}]$ no sistema de coordenadas com a origem em μ e eixos x_1, x_2, \dots, x_p . Segundo Rencher (2002) é conveniente escolher $\mu = 0$. De discussões anteriores, sabe-se que quando A é uma matriz positiva e definida, seus autovalores são maiores que zero e c^2 é uma elipse cujos eixos são $y_1 = (x^T e_1)$ e $y_2 = (x^T e_2)$, tal que $c^2 = \lambda_1(y_1)^2 + \lambda_2(y_2)^2$. É fácil se verificar que $x = c\lambda_1^{-1/2}(e_1)$ satisfaz $x^T A x = \lambda_1 (c\lambda_1^{-1/2} e_1^T e_1)^2 = c^2$, e que $x = c\lambda_2^{-1/2}(e_2)$ fornece a apropriada distância na direção de (e_2) . Fazendo $A = \Sigma$, c^2 pode ser escrito como:

$$c^2 = \frac{(y_1)^2}{\lambda_1} + \frac{(y_2)^2}{\lambda_2} + \dots + \frac{(y_p)^2}{\lambda_p} \quad (48)$$

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 , μ e ρ por seus respectivos equivalentes valores amostrais, S , \bar{x} e r , tem-se a demonstração gráfica deste equacionamento na figura seguinte.

3.4.1 - Componentes Principais de Variáveis Padronizadas

Os componentes principais também podem ser obtidos a partir de variáveis padronizadas. As variáveis padronizadas são aquelas que assumem a forma:

$$Z_1 = \frac{(X_1 - \mu_1)}{\sqrt{\sigma_{11}}}, Z_2 = \frac{(X_2 - \mu_2)}{\sqrt{\sigma_{22}}}, \dots, Z_p = \frac{(X_p - \mu_p)}{\sqrt{\sigma_{pp}}} \quad (49)$$

Em notação matricial, as expressões (49) podem ser escritas como:

$$Z = \left(V^{1/2}\right)^{-1} (X - \mu) \quad (50)$$

Onde $\left(V^{1/2}\right)^{-1}$ é uma matriz diagonal formada com os desvios-padrão das variáveis.

Claramente, o valor esperado de Z é zero e $Cov(Z) = \left(V^{1/2}\right)^{-1} \Sigma \left(V^{1/2}\right)^{-1} = \rho$. Os componentes principais de Z podem ser obtidos a partir dos autovetores da matriz de correlação ρ de X . Todos os resultados descritos previamente são aplicáveis às variáveis padronizadas com certa simplificação, uma vez que a variância de cada Z_i é unitária. Embora a notação utilizada seja a mesma, segundo Johnson e Wichern (2002), as quantidades devidas de Σ não são, em geral as mesmas derivadas de ρ .

Resultado 4: O i -ésimo componente principal das variáveis padronizadas $Z^T = [Z_1, Z_2, \dots, Z_p]$, com $Cov(Z) = \rho$, é dado por:

$$Y_i = e_i^T Z = e_i^T \left(V^{1/2}\right)^{-1} (X - \mu), \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (51)$$

Ou de outra maneira:

$$Y_i = e_i^T Z = e_{1i} Z_1 + e_{2i} Z_2 + \dots + e_{pi} Z_p, \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (52)$$

Com:

$$Z = \begin{bmatrix} \frac{x_{11} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} & \frac{x_{12} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} & \dots & \frac{x_{1n} - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} \\ \frac{x_{21} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} & \frac{x_{22} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} & \dots & \frac{x_{2n} - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{x_{p1} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} & \frac{x_{p2} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} & \dots & \frac{x_{pn} - \bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} \end{bmatrix} \quad (53)$$

Além disso,

$$\sum_{i=1}^p Var(Y_i) = \sum_{i=1}^p Var(Z_i) = p \text{ e } \rho_{Y_i, Z_k} = e_{ki} \sqrt{\lambda_i}, \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (54)$$

Neste caso $(\lambda_1, e_1), (\lambda_2, e_2), \dots, (\lambda_p, e_p)$ são pares de autovalores-autovetores da matriz de correlação ρ com $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$.

Prova: O Resultado 4 segue as provas dos Resultados 1, 2 e 3, com $Z^T = [Z_1, Z_2, \dots, Z_p]$ no lugar de $X^T = [X_1, X_2, \dots, X_p]$ e ρ no lugar de Σ .

3.4.2 – Variância Amostral e ACP

Na maioria das vezes, não se tem conhecimento dos parâmetros populacionais de variância-covariância e correlação, respectivamente, Σ e ρ . Neste caso, adota-se a matriz de variância-covariância amostral \mathbf{S} no lugar de Σ e a matriz de correlação amostral \mathbf{R} no lugar de ρ . Assim, tem-se que:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{12} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{1p} & s_{12} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 & \cdots & \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{pj} - \bar{x}_p) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{pj} - \bar{x}_p) & \cdots & \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{pj} - \bar{x}_p)^2 \end{bmatrix} \quad (55)$$

Assim, são escritos os componentes principais amostrais em termos de \mathbf{S} e \mathbf{R} , tal que:

$$\sum_{i=1}^p s_{ii} = \hat{\lambda}_1 + \hat{\lambda}_2 + \dots + \hat{\lambda}_p \quad (56)$$

$$r_{(\hat{y}_i, x_k)} = \frac{\text{Cov}(x_k, \hat{y}_i)}{\sqrt{\text{Var}(\hat{y}_i)\text{Var}(x_k)}} = \frac{\hat{e}_{ki} \sqrt{\hat{\lambda}_i}}{\sqrt{s_{kk}}}, \quad i, k = 1, 2, \dots, p \quad (57)$$

De acordo com o disposto em Rencher (2002) e Johnson e Wichern (2002), o hiperelipsóide centrado na média amostral \bar{x} , cujos eixos são os autovetores da matriz de covariância amostral \mathbf{S} , possuindo comprimentos proporcionais aos seus autovalores. Então, tem-se que:

$$(x - \bar{x})^T \mathbf{S}^{-1} (x - \bar{x}) = c^2 \quad (58)$$

As figuras 3.3 e 3.4 representam geometricamente os conceitos estabelecidos anteriormente.

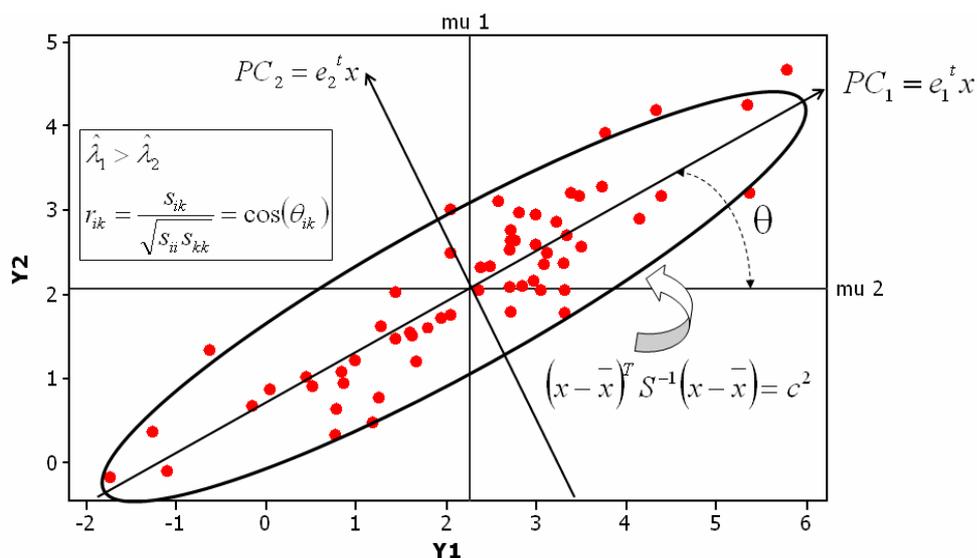


Figura 3.3 – Elipse de densidade constante para dois componentes principais.

Quanto maiores forem as correlações entre as variáveis que compõem o conjunto múltiplo, maior será a importância do semi-eixo maior da elipse, refletindo a preponderância do primeiro componente principal sobre a explicação da estrutura de covariância. Espera-se, então, que seja possível uma redução de dimensionalidade, uma vez que PC_1 representará adequadamente o conjunto original de variáveis. Na figura 3.3, pode-se notar que a combinação linear PC_1 se assemelha muito a uma reta de regressão. Isto demonstra que, tal como a equação de regressão, tal combinação linear seja a equação de regressão capaz de explicar a estrutura de variância-covariância dos dados. Quando a estrutura de correlação entre os dados é forte, os componentes menores terão uma importância menor. No caso do segundo componente principal, isto é caracterizado pela pequena dimensão do semi-eixo menor.

À medida que a estrutura de correlação de um conjunto de dados diminui, a distinção entre os componentes principais também diminui. Isto faz com que os semi-eixos se tornem semelhantes, diminuindo-se também a possibilidade de redução da dimensionalidade do conjunto. Neste caso, a elipse da figura 3.3 se torna uma esfera, tal como demonstra a figura 3.4. Desta representação geométrica originou-se um dos principais testes estatísticos multivariados: o teste da Esfericidade de Bartlett (Peres-Neto et al., 2005).

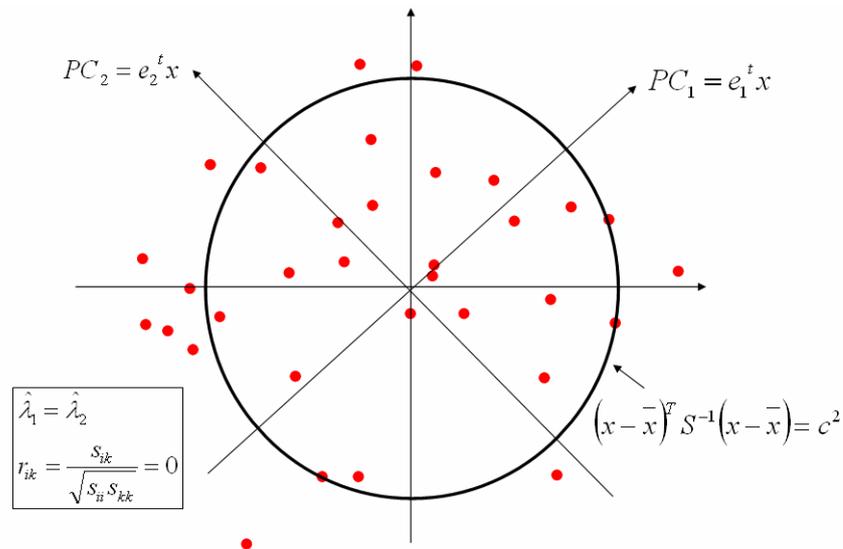


Figura 3.4 – Correlação Nula = Autovalores idênticos.

Segundo Montgomery e Runger (2003), Johnson e Wichern (2002) e Rencher (2002), a correlação é a razão entre a covariância e a raiz quadrada do produto das variâncias, tal como descreve a equação (46). O coeficiente de correlação de Pearson $r_{(X_k, Y_i)}$ possui valores compreendidos no intervalo $-1 \leq r_{(X_k, Y_i)} \leq +1$. Quanto mais próximo destes extremos, mais forte será a correlação entre as variáveis X_k, Y_i . Para testar a significância da correlação, Montgomery e Runger (2003), recomendam:

$$\begin{cases} H_0 : r = 0 \\ H_1 : r \neq 0 \end{cases} \quad (58.a)$$

A estatística de teste usada para avaliar a hipótese nula da expressão (58.a) é dada por:

$$T_0 = \frac{r\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-r^2}} \quad (58.b)$$

T_0 segue uma distribuição t -student com $n-2$ graus de liberdade. Rejeita-se a hipótese nula se $|t_0| > t_{\alpha/2, n-2}$, implicando em um valor de p menor que o nível de significância α .

3.4.3 - Escores de Componentes Principais

Por vezes é útil escrever as combinações lineares na forma de escores dos componentes principais. Em muitas aplicações, a matriz de variáveis padronizadas está representada pelas p colunas das características estudadas, em cada uma das suas n observações. Assim, na prática é mais comumente empregada a matriz transposta de \mathbf{Z} .

Para se encontrar uma expressão adequada a esta realidade que represente a mesma informação que $Y_i = e_i^T Z$, $i = 1, 2, \dots, p$, utiliza-se a entidade estatística denominada de escore de componentes principais (PC_k), que pode ser representada tal como a expressão (59).

$$PC_k = Z^T e = \begin{bmatrix} \left(\frac{x_{11} - \bar{x}_1}{\sqrt{S_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{21} - \bar{x}_2}{\sqrt{S_{22}}} \right) & \dots & \left(\frac{x_{p1} - \bar{x}_p}{\sqrt{S_{pp}}} \right) \\ \left(\frac{x_{12} - \bar{x}_1}{\sqrt{S_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{22} - \bar{x}_2}{\sqrt{S_{22}}} \right) & \dots & \left(\frac{x_{p2} - \bar{x}_p}{\sqrt{S_{pp}}} \right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{x_{1n} - \bar{x}_1}{\sqrt{S_{11}}} \right) & \left(\frac{x_{2n} - \bar{x}_2}{\sqrt{S_{22}}} \right) & \dots & \left(\frac{x_{pn} - \bar{x}_p}{\sqrt{S_{pp}}} \right) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1p} \\ e_{21} & e_{22} & \dots & e_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{1p} & e_{2p} & \dots & e_{pp} \end{bmatrix} \quad (59)$$

3.5 - TESTES DE ADEQUAÇÃO

De acordo com Peres-Neto *et al.* (2005), existem vários testes disponíveis para se avaliar a adequação dos dados à aplicação da análise de componentes principais, principalmente no que tange a magnitude da estrutura de correlação e a possibilidade da redução de dimensionalidade do conjunto original de variáveis estudadas. A seguir, são descritos os testes adotados nesta tese.

3.5.1 - Teste de Variação Isotrópica ou Esférica

O Teste de Isotropia tem por finalidade verificar se um determinado número de eixos não possui variações importantes, podendo ser desprezados na análise, o que pode resultar numa redução de dimensionalidade. Isso ocorre, frequentemente, quando as últimas raízes características (autovalores) são praticamente iguais, não permitindo a definição de eixos de máxima variabilidade. As figuras 3.3 e 3.4 anteriores ilustram dois casos bidimensionais, nos quais se verificam os dois comportamentos típicos dos dados quanto à esfericidade. No caso representado pela figura 3.3, as variabilidades são diferentes entre os eixos ($\hat{\lambda}_1 \neq \hat{\lambda}_2$),

podendo-se determinar um eixo de máxima variabilidade, enquanto que no caso da figura 3.4 isto não é possível, uma vez que $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2$. Neste caso, ocorre uma variação isotrópica ou esférica.

Estudar a isotropia significa inferir sobre a estrutura de dependência, para isso supõe-se que a amostra seja retirada de uma população com distribuição normal multivariada, cuja matriz de covariância tenha uma estrutura específica. E, com base nesta suposição, podem-se inferir sobre a distribuição, os coeficientes e as raízes características das componentes. Além de adquirir conhecimento da estabilidade dessas quantidades, através das variâncias e das covariâncias, esta distribuição também permite a construção de testes de hipóteses e de intervalos de confiança para a estrutura das componentes da população.

O teste sugerido por Anderson (1963), serve para se verificar a igualdade das raízes características, ou seja:

$$H_0 : \hat{\lambda}_{m+1} = \dots = \hat{\lambda}_p \quad (60)$$

Onde: p é o número de variáveis; m é o número de eixos que se supõe não possuir variação isotrópica; $r = p - m$ é o número de eixos que se supõe possuir variação isotrópica, podendo, portanto, serem descartados da análise.

A hipótese alternativa é que algumas das raízes do conjunto são distintas. De acordo com Scremin (2003), o critério da máxima verossimilhança conduz à estatística:

$$\chi^2 = -(n-1) \sum_{k=m+1}^p \ln(\hat{\lambda}_k) + (n-1)r^{-1} \sum_{k=m+1}^p (\hat{\lambda}_k) \quad (61)$$

Quando H_0 for verdadeira, a estatística (61) terá distribuição Qui-quadrado com $\nu = 0,5.r(r+1) - 1$ graus de liberdade para n grande. A hipótese nula será rejeita para valores da estatística de teste (61) superiores a $\chi^2_{(\alpha, \nu)}$, onde α é o nível de significância do teste, escolhido nesta tese como 5%. Neste caso, pode-se concluir que os eixos não são todos iguais, sendo possível, portanto, que os maiores possam representar a variação ocorrida com o conjunto todo. Se, ao contrário, $\chi^2 < \chi^2_{(\alpha, \nu)}$, aceita a hipótese nula de que as r raízes características são iguais e apresentam variação isotrópica. Um valor muito pequeno de P -value no teste equivalerá a um Qui-quadrado muito alto, rejeitando-se H_0 e confirmando-se que os n maiores componentes principais são distintos e podem representar a variância do conjunto multivariado.

3.5.2 - Teste de Bartlett

De acordo com Peres-Neto *et al.* (2005), Bartlett (1954) estendeu seu teste de esfericidade original para avaliar se o autovalor do primeiro componente principal é significativamente diferente dos demais. Após as modificações sugeridas por Jackson (1993), o teste assumiu a seguinte forma:

$$\chi^2 = - \left[n - \frac{1}{6}(2p + 11) \right] \ell n |R| \quad (62)$$

Onde: $|R|$ é o determinante da matriz de correlação dos dados, n é o tamanho da amostra e p , o número de variáveis estudadas. A estatística de teste é aproximadamente distribuída como χ^2 , com $p(p-1)/2$ graus de liberdade. Na hipótese nula se postula que todas as variáveis são não correlacionadas, não sendo adequada a aplicação da análise de componentes principais.

3.5.3 - Teste de Lawley

Lawley (1956) desenvolveu um teste para avaliar se o autovalor do segundo componente principal é significativamente diferente dos remanescentes. A hipótese nula, portanto, pressupõe que pelo menos duas variáveis do conjunto estudado são correlacionadas, o que implicaria que o primeiro eixo é significativo enquanto que o segundo não é significativamente diferente dos demais. Segundo Mardia *et al.* (1979) e Peres-Neto *et al.* (2005), a estatística de teste de Lawley é dada por:

$$\chi^2 = \frac{n-1}{1-\bar{r}} \sum_{j \neq i \neq l \neq j=1}^p \sum_{j=1}^p (r_{ij} - \bar{r})^2 - \mu \sum_{k=1}^p (\bar{r}_k - \bar{r})^2 \quad (63)$$

Com χ^2 distribuída com $(p+1)(p-2)/2$ graus de liberdade. Em (63), tem-se que:

$$\bar{r} = \frac{2}{p(p-1)} \sum_{i=k+1}^p \sum_{j=1}^p r_{ij}, \quad \mu = \frac{(p-1)^2 [1 - (1-\bar{r})^2]}{p - (p-2)(1-\bar{r})^2}, \quad \bar{r}_k = \frac{1}{(p-1)} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^p r_{ik} \quad (64)$$

Onde: n é o número de experimentos, p é o número de variáveis de resposta e r_{ij} é o coeficiente de correlação de Pearson estabelecido entre a variável i e a variável j .

3.5.4 – Índices de Correlação

De maneira complementar, três índices podem ser usados para avaliar a correlação existente em um conjunto de dados e ressaltar sua estrutura favorável à aplicação da análise de componentes principais. Nas fórmulas que se seguem, p é o número de variáveis e \mathbf{R} é a matriz de correlação das p variáveis.

O Índice de Kulbach (I_K) (Todeschini, 1997) é uma proposta para se avaliar a matriz de correlação \mathbf{R} . Quando I_K é próximo de zero, todas as variáveis são perfeitamente não correlacionadas. Este índice pode ser calculado através da equação (65), tal que:

$$I_K = -\frac{1}{2} \ln|\mathbf{R}| = -\frac{1}{2} \sum_{m=1}^p \ln(\lambda_m) \quad (65)$$

Analogamente, o índice de divergência (I_D) (Todeschini, 1997) apresenta valores próximos de zero quando as variáveis não possuem correlação.

$$I_D = \frac{1}{2} \text{traço}(\mathbf{R}^{-1}) = \sum_{m=1}^p \left[\frac{(1 - \lambda_m)}{2\lambda_m} \right] \quad (66)$$

O Índice de Correlação Generalizada (I_{CG}) é igual ao determinante da matriz de correlação (Todeschini, 1997), e é usado para avaliar a correlação contida em um conjunto de dados. Em princípio, os valores de I_{CG} caem entre 0 e 1. Quanto mais próximo de zero, maior e mais perfeita é a correlação entre as variáveis; um I_{CG} próximo de 1 revela a completa falta de correlação.

$$I_{CG} = \sqrt{\frac{\|\mathbf{R}\|^2 - p}{p(p-1)}} = \sqrt{\frac{\left(\sum_{i=k+1}^p \sum_{j=1}^p r_{jk}^2 \right) - p}{p(p-1)}} = \sqrt{\frac{\left(\sum_m \lambda_m \right) - p}{p(p-1)}} \quad (67)$$

3.6 – CRITÉRIOS DE SELEÇÃO

De acordo com Peres-Neto et al (2005), além dos testes e índices descritos anteriormente, 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 (Jackson, 1993; Guttman, 1954), quando se 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. Entretanto, devido à variação ocorrida na amostragem, aproximadamente metade dos autovalores excederão à unidade. Apesar de ser muito criticado por isto (Jackson, 1993), este é o critério mais popular de seleção de componentes principais.

O critério de Cattell (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).

Um conceito também bastante difundido é o do percentual acumulado de variação explicada (Souza, 2000). Segundo este princípio, todos os componentes principais cujo percentual acumulado de variação explicada supere um dado valor de referência devem ser retidos. Este percentual pode ser calculado, somando-se as explicações individuais de todos os componentes escolhidos, tal como representa a equação (44). Scremin (2003) afirma que não há consenso entre os autores sobre qual deve ser o valor de referência para a retenção dos componentes principais. Lopes (2001) utilizou o valor de 70%. Já Scremin (2003), em sua tese utilizando a lógica Fuzzy, preferiu classificar o problema em níveis de aceitação. Assim, o pesquisador considerou que um nível de aceitação “Parcialmente Bom” é aquele cujo percentual acumulado de variação explicada esteja compreendido entre 62 e 80%, e o “Totalmente Bom”, para percentuais acumulados acima de 80%. Johnson e Wichern (2002), 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 grande de variáveis.

Embora cada método tenha suas vantagens e desvantagens, nesta pesquisa preferiu-se adotar a abordagem de Souza (2000) e Lopes (2001), que utilizaram uma combinação dos três critérios descritos anteriormente. Como valor de referência, acredita-se que um percentual de variação explicada de 80% seja um valor adequado para a seleção dos componentes principais mais representativos.

3.7 – CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Neste capítulo procurou-se explicitar toda a complexidade que envolve a Análise de Componentes Principais. O objetivo deste tratamento é prover informações suficientes para a construção de um modelo de análise de superfícies de respostas que sejam escritas em termos de escores de componentes principais. Nos próximos capítulos, em alguns momentos certas afirmações terão como base os conceitos ora descritos. Julgou-se necessária tal profundidade de análise para se evitar que equívocos invalidem o caráter matemático da proposta multivariada.

Capítulo 4

MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO EXPERIMENTAL

4.1 – CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Neste capítulo, apresenta-se a fundamentação teórica relativa à Metodologia de Projeto de Experimentos e os métodos de regressão empregados na construção de funções objetivo e restrições utilizadas nos métodos de otimização. Discutem-se também os métodos de otimização múltipla existentes atualmente e o algoritmo do Gradiente Reduzido Generalizado (GRG). A finalidade deste capítulo é fornecer uma visão geral sobre as técnicas que possibilitarão o desenvolvimento de um novo procedimento de otimização para múltiplas respostas correlacionadas.

4.2 – METODOLOGIA DE PROJETO DE EXPERIMENTOS

Projeto de Experimentos é uma metodologia relativamente antiga, desenvolvida entre 1920 e 1930 por Fisher, sendo posteriormente aperfeiçoada por outros importantes pesquisadores como Box, Hunter e Taguchi, dentre outros. Desenvolvendo uma pesquisa no *Rothamsted Agricultural Experiment Station*, em Londres, Sir Ronald A. Fisher, foi o inovador no uso dos métodos estatísticos e da análise de dados. Em 1933, levou seu trabalho para a Universidade de Londres, onde o DOE (do inglês *Design of Experiments*) foi aplicado em experimentos agrícolas e em ciências biológicas, tendo alcançado enorme sucesso. A

primeira aplicação prática do DOE data de 1930, na *British Textile*. Depois da Segunda Guerra mundial, esta metodologia foi introduzida na indústria química e nos processos industriais de empresas nos Estados Unidos e Europa. Sua notória eficácia fez dela uma das principais ferramentas de melhoria de processos.

Pensar de maneira sistemática sobre um problema contribui enormemente para sua solução. De acordo com Montgomery (2001), uma maneira sistemática de avaliar a magnitude de várias fontes de variação que influenciam um processo deve se iniciar com a identificação e seleção dos fatores que possam contribuir para a variação. Geralmente, sessões de *brainstorming*, fluxogramas e diagramas de causa-efeito realizados por especialistas no processo, podem contribuir para a escolha apropriada destes fatores. Em seguida, deve-se selecionar um modelo que inclua os fatores escolhidos e planejar experimentos eficientes para estimar seus efeitos. A viabilidade do estudo deve ser levada em consideração. Experimentos exploratórios ou dados históricos devem ser utilizados para se avaliar o número de níveis adotados para cada fator. A aleatorização do experimento é algo importante e desejável para garantir que a variação incontrolável seja diluída pelo arranjo proposto, reduzindo a chance de má interpretação dos resultados. Realizar os experimentos de acordo com o planejado, detectar, documentar e analisar as anormalidades que ocorrerem na condução experimental é vital para garantir o sucesso do estudo. Uma vez realizados os experimentos, o passo seguinte é estimar os efeitos dos fatores incluídos no modelo utilizando métodos estatísticos adequados. No final, interpretar e discutir os resultados e recomendar melhorias.

Um bom planejamento de experimentos pode incluir a utilização de réplicas, de aleatorização e blocagem. Ao se repetir um teste várias vezes em unidades experimentais diferentes, cria-se uma variação para a variável de resposta que pode ser utilizada para se avaliar a significância estatística do incremento experimental. Já quando se aleatoriza um experimento, aumenta-se sua validade, porque se aumenta a chance dos efeitos desconhecidos serem distribuídos através dos níveis dos fatores. Quando não for possível manter a homogeneidade das condições experimentais, deve-se empregar a blocagem. Esta técnica estatística permite avaliar se a falta de homogeneidade interfere nos resultados. Um bloco consiste de uma parte do experimento completo, que se presume ser mais uniforme do que o todo.

Uma vez selecionados os fatores e seus respectivos níveis, passa-se à fase de execução dos experimentos. Como todos os fatores podem ser alterados simultaneamente, existem diversas maneiras de combiná-los. Montgomery (2001) cita alguns tipos inadequados de experimentação tais como a Estratégia de Um Fator por Vez, onde o nível de um único fator

será trocado em cada ensaio. A desvantagem dessa estratégia é que não há garantia de que seja encontrada uma solução ótima para o modelo. Estas estratégias são ineficientes em determinar quais fatores afetam com maior intensidade a resposta de interesse. Em tais estratégias nunca serão reveladas *interações*.

A ordem-padrão utilizada pelos arranjos DOE geram condições experimentais balanceadas e ortogonais, de modo que os fatores investigados sejam experimentados uniformemente em cada um dos seus níveis.

O arranjo experimental mais comum é o fatorial completo, para o qual o número de experimentos é igual ao número de níveis experimentais elevado ao número de fatores. No caso típico de fatoriais em dois níveis, o número de experimentos (N) para se avaliar os k fatores é dado por $N = 2^k$. Os arranjos fatoriais completos podem ser gerados para qualquer quantidade de fatores e os níveis de cada fator se alternam nas colunas segundo uma mesma ordem tal que para a primeira coluna, os níveis se alteram a cada experimento (2^0); para a segunda coluna, os níveis se alteram a cada 2^1 ; para a terceira coluna, os níveis se alteram a cada 2^2 e assim por diante. O procedimento se repete para tantas colunas quantas forem os k fatores, até a k -ésima coluna.

Fatoriais Completos cobrem todo o espaço experimental; porém, enquanto o número de fatores cresce linearmente, o número de experimentos cresce exponencialmente. Uma quantidade muito grande de fatores pode tornar um processo de experimentação inviável.

Montgomery e Runger (2003) mencionam que se houver pouco interesse nas interações, pode-se negligenciá-las. Neste caso, uma quantidade menor de experimentos seria suficiente para avaliar apenas os efeitos principais ou as interações de baixa ordem. Assumindo-se, portanto, a hipótese da esparsidade dos efeitos, frações do experimento completo podem ser suficientes para se detectar a presença de fatores influentes. Uma meia-fração de um experimento 2^k , por exemplo, contém 2^{k-1} experimentos. Para compor este arranjo, constrói-se um fatorial completo 2^{k-1} , igualando-se a coluna representativa do fator remanescente com os fatores que fazem parte do fatorial completo 2^{k-1} (Box et al., 1978). Um arranjo 2^{3-1} , por exemplo, possui uma parte 2^2 completa. Assim, para três fatores originais A, B e C, toma-se A e B para compor um fatorial completo e admite-se $C=AB$. Tal relação é chamada de gerador de confundimento (Paiva, 2004). Esta particularidade dos fatoriais fracionados utiliza uma identidade entre os fatores, fazendo com que não seja mais possível estimar-se o efeito do fator isoladamente, mas apenas da combinação linear formada.

Uma vez que os arranjos fracionados apresentam confundimento entre os efeitos principais e as interações, a intensidade dos mesmos pode ser utilizada para a escolha do fracionado mais adequado. Box et al (1978) chamam esta intensidade de *resolução*. Quanto maior for a resolução, menor é o confundimento. Em um projeto de resolução III, por exemplo, os fatores principais confundem-se com interações de 2ª ordem. Já em um de resolução V, os fatores principais confundem-se com interações de 4ª ordem, que em geral são fracas e, portanto, negligenciáveis. Logo, pode-se considerar que grande parte do efeito observado na combinação linear é devida ao efeito principal.

O maior uso destes arranjos se dá para experimentos exploratórios, nos quais muitos fatores são examinados em uma quantidade relativamente pequena de experimentos, com o objetivo de se identificar os (poucos) fatores realmente influentes.

Para se testar se a mudança de níveis de um fator ou interação é significativa emprega-se um teste de hipótese para média. No caso do planejamento de experimentos, este teste é a Análise de Variância (ANOVA) (Montgomery e Runger, 2003).

Quando dois níveis de um fator geram respostas médias estatisticamente iguais, assume-se que o fator não influencia a resposta de interesse. Quando, ao contrário, se detecta uma diferença significativa, o fator é importante. Para um fatorial completo com de 2 fatores, A e B, em dois níveis (+1, -1), pode-se escrever o seguinte modelo:

$$Y_{ijk} = \mu + A_i + B_j + AB_{ij} + \varepsilon_{ijk} \quad (68)$$

Onde: i = número de níveis de A; j = número de níveis de B e k , o número de réplicas.

O termo Y_{ijk} é a (ijk) -ésima observação obtida no experimento, μ é a média geral, A_i é efeito do i -ésimo tratamento do Fator A, B_j o efeito do j -ésimo tratamento do Fator B, $(AB)_{ij}$, o efeito da ij -ésima interação AB entre os fatores e ε_{ijk} , um componente do erro aleatório.

A estatística de teste utilizada na ANOVA para verificar a igualdade entre as médias baseia-se na relação existente entre a variação dentro de um tratamento (*Within*) e a variação entre tratamentos (*Between*) (Montgomery e Runger, 2003). A variação dentro provém dos repetidos ensaios executados com um cada tratamento. Calculando-se a média das réplicas, obtém-se a média dentro do tratamento. Quanto mais as réplicas diferirem desta média, maior será a variação dentro deste tratamento. Dividindo-se a variação *Entre* pela variação *Dentro* obtém-se a estatística de teste F , que quando comparada com um valor de F crítico, definido segundo o nível de significância e o número de graus de liberdade da variação dentro,

possibilita a aceitação ou rejeição da hipótese nula de igualdade entre as médias dos níveis dos fatores.

Sempre que se faz uma inferência sobre uma população a partir de dados amostrais corre-se o risco de se cometer algum tipo de erro. Hipótese é tão somente uma afirmação que se deseja testar, tendo como fonte de provas os dados provenientes da amostra. De acordo com Montgomery e Runger (2003) existem dois tipos de erro (mutuamente exclusivos) que podem ser cometidos em um teste de hipóteses. O primeiro é o Erro Tipo I, que consiste em se rejeitar a hipótese nula quando ela é verdadeira. A probabilidade de se cometer este tipo de erro é α , denominado nível de significância do teste. O segundo, é o Erro Tipo II, que consiste em se aceitar a hipótese nula quando ela for falsa. A probabilidade de se cometer este tipo de erro é β .

A probabilidade de se aceitar a hipótese nula quando ela é verdadeira é $1-\alpha$, e é denominado nível de confiança do teste. A probabilidade de se rejeitar a hipótese nula quando ela for falsa é $1-\beta$, e é chamada de Poder do Teste (Montgomery, 2001).

Com a amostra se calcula a estatística de teste, que quando comparada ao valor crítico determinado por α , conduz à aceitação ou rejeição da hipótese nula. Ao conjunto de todos os valores da estatística de teste que levam à rejeição da hipótese nula dá-se o nome de Região Crítica (Montgomery, 2001).

Para se avaliar a significância do efeito dos níveis de um tratamento A, bem como de um tratamento B, faz-se necessário testar a hipótese da igualdade entre as respostas médias obtidas com os níveis dos dois fatores. É importante se determinar também, se existe interação entre os dois tratamentos. As hipóteses necessárias neste caso estão representadas na tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Hipóteses presentes em uma ANOVA para dois fatores.

Hipóteses	Efeitos Principais	Interações
Hipótese Nula (H_0)	$H_0: A_1 = A_2$	$H_0: AB_{ij} = 0$
Hipótese Alternativa (H_1)	$H_1: A_1 \neq A_2$	$H_1: AB_{ij} \neq 0$

Para os dois tratamentos, a aceitação de H_0 significa que os efeitos na resposta obtidos com os dois níveis dos fatores A e B são iguais; a hipótese alternativa, que os tratamentos são diferentes. Na interação, a aceitação de H_0 indica que a interação não é significativa.

Para se calcular os elementos de uma ANOVA para dois fatores, sendo o Fator A com a níveis, e Fator B, com b níveis, para n réplicas, pode-se empregar as fórmulas do quadro 4.1 (Montgomery e Runger, 2003).

Quadro 4.1 – Fórmulas para ANOVA em dois níveis.

Soma de cada linha (Y_{sl})	$\sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}$	Média de cada linha (\bar{Y}_l)	$\frac{1}{bn} \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}$
Soma de cada coluna (Y_{sc})	$\sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^n y_{ijk}$	Média de cada coluna (\bar{Y}_c)	$\frac{1}{an} \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^n y_{ijk}$
Soma dentro de cada célula (Y_{scel})	$\sum_{k=1}^n y_{ijk}$	Média dentro de cada célula (\bar{Y}_{cel})	$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_{ijk}$
Soma Geral (Y_{st})	$\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}$	Média Geral (\bar{Y}_t)	$\frac{1}{abn} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}$

Com estes somatórios, pode-se escrever a soma de quadrados total (SS_T) como:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n (y_{ijk} - \bar{y}_t)^2 &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n [(\bar{y}_l - \bar{y}_t) + (\bar{y}_c - \bar{y}_l) + (\bar{y}_{cel} - \bar{y}_l - \bar{y}_c - \bar{y}_t) + (y_{ijk} - \bar{y}_t)]^2 \\ &= bn \sum_{i=1}^a (\bar{y}_l - \bar{y}_t)^2 + an \sum_{j=1}^b (\bar{y}_c - \bar{y}_l)^2 + n \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (\bar{y}_{cel} - \bar{y}_l - \bar{y}_c - \bar{y}_t)^2 + \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n (y_{ijk} - \bar{y}_c)^2 \end{aligned} \quad (69)$$

Dessa maneira, a Soma de Quadrados Total do arranjo pode ser dividida em somas de quadrados devido aos tratamentos de linha (Fator A) SS_A , aos tratamentos de coluna (Fator B) SS_B ; a soma de quadrados devido à interação entre A e B, SS_{AB} e a soma de quadrados devido ao erro experimental SS_E . Desse modo, pode-se escrever que:

$$SS_T = SS_A + SS_B + SS_{AB} + SS_E \quad (70)$$

As equações das somas de quadrados podem ainda ser escritas como:

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}^2 - \frac{y_{st}^2}{abn} \quad (71)$$

$$SS_A = \frac{1}{bn} \sum_{i=1}^a y_{st}^2 - \frac{y_{st}^2}{abn} \quad (72)$$

$$SS_B = \frac{1}{an} \sum_{j=1}^b y_{sc}^2 - \frac{y_{st}^2}{abn} \quad (73)$$

Estas equações podem ser resumidas no quadro 4.2.

Quadro 4.2 - Tabela de ANOVA.

Fonte de Variação	Soma de Quadrados	Graus de Liberdade	Média Quadrática	F ₀
Fator A	SS_A	$a-1$	$MS_A = \frac{SS_A}{a-1}$	$F_0 = \frac{MS_A}{MS_E}$
Fator B	SS_B	$b-1$	$MS_B = \frac{SS_B}{b-1}$	$F_0 = \frac{MS_B}{MS_E}$
Interação AB	SS_{AB}	$(a-1)(b-1)$	$MS_{AB} = \frac{SS_{AB}}{(a-1)(b-1)}$	$F_0 = \frac{MS_{AB}}{MS_E}$
Erro	SS_E	$ab(n-1)$	$MS_E = \frac{SS_E}{ab(n-1)}$	
Total	SS_T	$abn-1$		

Para se obter uma simplificação da soma de quadrados referentes à interação é aconselhável calcular-se primeiramente a soma de quadrados parciais, tal que:

$$SS_p = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b y_{scel}^2 - \frac{y_{st}^2}{abn} \quad (74)$$

Em seguida, subtrai-se SS_A e SS_B de SS_p , de modo que:

$$SS_{AB} = SS_p - SS_A + SS_B \quad (75)$$

Assim, pode-se encontrar a parcela de variação devido ao erro, tal que:

$$SS_E = SS_T - SS_{AB} - SS_A - SS_B \quad (76)$$

O quadrado médio é o quociente entre a soma de quadrados e os graus de liberdade associados a cada fonte de variação. F_0 representa a estatística de teste para a análise de dois grupos de dados.

4.3 - METODOLOGIA DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA

De acordo com Myers e Montgomery (1995), a Metodologia de Superfície de Resposta (MSR) é uma coleção de técnicas matemáticas e estatísticas que são utilizadas para modelar e analisar problemas nos quais a resposta de interesse é influenciada por muitas variáveis e nos quais a resposta deva alcançar um valor ótimo, e nos quais a forma de relacionamento entre a variável de resposta e as variáveis independentes seja desconhecida. Portanto, o primeiro

passo dentro da metodologia MSR é encontrar uma aproximação razoável para o verdadeiro relacionamento entre y e o conjunto de variáveis. Usualmente, emprega-se um polinômio de baixa ordem.

Supondo que a resposta esperada $E(Y)$ seja função de k variáveis preditoras codificadas x_1, x_2, \dots, x_k , o relacionamento entre y e as variáveis preditoras pode ser expresso segundo uma expansão em Série de Taylor (Box e Draper, 1987), tal que:

$$E(Y) = \eta = \eta_0 + \sum_{i=1}^k \left[\frac{\partial \eta}{\partial x_i} \right]_0 x_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \left[\frac{\partial^2 \eta}{\partial x_i \partial x_j} \right] + \dots \quad (77)$$

Onde o subscrito zero indica a avaliação na origem.

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

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i \quad (78)$$

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

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (79)$$

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

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (80)$$

Segundo Box e Draper (1987) quase todos os problemas de superfície de resposta utilizam um desses dois modelos. Contudo, é improvável que um modelo polinomial seja uma aproximação razoável do modelo real em todo o espaço experimental, mas pelo menos para uma determinada região, ele funcionará muito bem (Montgomery, 2001). Para estimar os parâmetros (β) do modelo polinomial emprega-se o método dos mínimos quadrados, que também pode ser escrito em forma matricial.

A análise de uma superfície de resposta é feita em termos de uma superfície ajustada. Se tal superfície é adequada, sua análise será aproximadamente equivalente a análise da superfície real. Evidentemente, usando-se um arranjo experimental adequado para coletar os dados de y , os parâmetros do modelo serão estimados eficazmente. Geralmente, quando se está em um ponto da região experimental distante do ponto de ótimo, a curvatura do sistema é bem pequena, de onde decorre que um modelo de primeira ordem seja adequado para modelar

a resposta. O objetivo experimental deve ser, portanto, caminhar em direção à região de ótimo. Uma vez encontrada tal região, um modelo quadrático deve ser utilizado.

Sob algumas circunstâncias, um modelo envolvendo apenas efeitos principais e algumas interações pode ser apropriado para descrever a superfície de resposta, principalmente quando a análise dos resultados revelar a inexistência de curvatura. Em outras circunstâncias, a completa descrição do comportamento do processo poderá requerer um modelo quadrático ou cúbico. Se os limites para os fatores forem definidos apropriadamente, será improvável a necessidade de modelos de terceira ordem.

Na maioria dos experimentos, assume-se inicialmente que o modelo linear é adequado; entretanto, para se confirmar se existe ou não falta de ajuste, deve-se utilizar pontos experimentais extras denominados de *Pontos Centrais*. De acordo com Box et al (1978), tal procedimento consiste em adicionar ao fatorial completo, pontos que sejam intermediários aos níveis dos fatores. Serão adicionados tantos pontos centrais quantos forem os K fatores do experimento. Os pontos centrais são utilizados para avaliar a existência de curvatura. Se a resposta média obtida com os nf pontos fatoriais \bar{y}_f for significativamente diferente da média formada pelos nc pontos centrais \bar{y}_c , então, pode-se caracterizar uma região de curvatura significativa. Segundo Montgomery (2001), a soma de quadrados para curvatura é dada por:

$$SS_{QP} = \frac{(nf \times nc)(\bar{y}_f - \bar{y}_c)^2}{nf + nc} \quad (81)$$

O Erro médio quadrático e o teste de hipótese são respectivamente:

$$MS_e = \frac{SS_e}{nc - 1} = \frac{\sum_{i=1}^{nc} (y_i - \bar{y})^2}{nc - 1} \quad (82)$$

$$H_0 : \sum_{j=1}^k \beta_{jj} = 0 \text{ e } H_1 : \beta_{jj} \neq 0 \quad (83)$$

Se SS_{qp} for muito maior do que MS_e , haverá evidência suficiente para rejeitar a hipótese nula de que os coeficientes quadráticos são nulos.

4.3.1- Arranjos Experimentais para Superfície de Resposta

Existem dois tipos principais de arranjos experimentais para a coleta de dados na Metodologia de Superfície de Resposta: o arranjo central composto e o Box-Behnken.

O arranjo central composto (*Box-Wilson Central Composite Design - CCD*) é uma matriz formada por três grupos distintos de elementos experimentais: um fatorial completo ou fracionado; um conjunto de pontos centrais e, adicionalmente, um grupo de níveis extras denominados *Pontos Axiais*. Se a distância entre o centro do arranjo e ponto fatorial (+1;-1) for aproximadamente 1 (em módulo), a distância do centro ao ponto axial será maior que a unidade. Esta distância, comumente representada por α , depende de certas propriedades desejadas para o experimento e do número de fatores envolvidos (Montgomery, 2001), tal como ilustra a figura 4.1. O número de pontos axiais em um CCD é igual ao dobro do número de fatores e representam seus valores extremos. Em função de sua localização, podem ser circunscritos, inscritos ou de face centrada.

O Circunscrito (CCC) é o CCD original. Nele, os pontos axiais estão a uma distância α do centro, baseado nas propriedades desejadas do projeto. Este arranjo requer 5 níveis para cada fator.

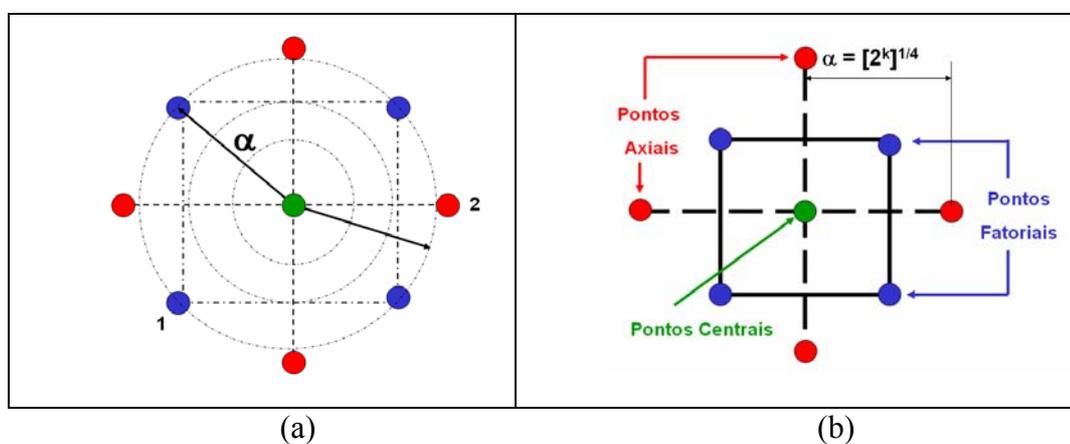


Figura 4.1 – (a) Rotacionalidade, (b) Arranjo central composto para 2 fatores.

O Arranjo inscrito (CCI) é adequado às situações nas quais os limites especificados não podem ser extrapolados, quer por medida de segurança, quer por incapacidade física de realização. Neste caso, o CCI utiliza os níveis dos fatores como pontos axiais e cria um fatorial completo ou fracionado dentro desses limites. Um CCI requer 5 níveis.

O arranjo de Face Centrada (CCF) caracteriza-se por dispor os pontos axiais sobre o centro de cada face do espaço fatorial, ou seja, $\alpha = +1$ ou -1 . Requer 3 níveis para cada fator.

Nos arranjos centrais compostos, a variância predita é constante ao longo da esfera de raio α , ou seja, $V[\hat{y}(x)]_{(1)} = V[\hat{y}(x)]_{(2)} = \dots = V[\hat{y}(x)]_{(i)}$ e é definida como:

$$V[\hat{y}(x)] = \sigma^2 x^T (X^T X)^{-1} x \quad (84)$$

Esta propriedade denomina-se *rotacionalidade*. Segundo Box e Draper (1987), para manter a rotacionalidade de um arranjo, o valor de α depende do número de experimentos (k) da porção fatorial do CCD, tal que:

$$\alpha = (2^k)^{1/4} \quad (85)$$

Quando for necessário se empregar um arranjo em blocos, α é dado por:

$$\alpha = \left[k \left(1 + \frac{n_{s0}}{n_s} \right) / \left(1 + \frac{n_{c0}}{n_c} \right) \right]^{1/2} \quad (86)$$

Na equação (86), n_{s0} é o número de pontos centrais presentes na porção axial do arranjo; n_s é a quantidade restante de pontos da porção axial; n_{c0} é o número de pontos centrais da porção cúbica do arranjo (fatorial completo) e n_c é a quantidade restante de pontos da porção cúbica (Box e Draper, 1987).

Um arranjo do tipo Box-Behnken (Box e Behnken, 1960) é um modelo quadrático independente que não contém fatoriais completos ou fracionários embutidos. Neste tipo de arranjo, as combinações de fatores são os pontos médios das arestas das faces do espaço experimental Ω , além dos pontos centrais, como pode ser visto na figura 4.2. Estes arranjos são rotacionáveis e requerem 3 níveis para cada fator.

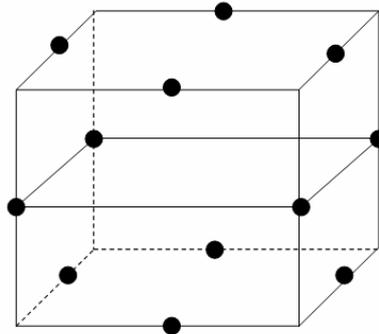


Figura 4.2 – Arranjo do tipo Box-Behnken para três fatores.

4.4 - TESTE PARA A SIGNIFICÂNCIA DO MODELO

Este teste é realizado como um procedimento de ANOVA. Calculando-se a razão entre a média quadrática dos termos de regressão e a média quadrática do erro, encontra-se a estatística F , que comparada com o valor crítico de F para um dado nível de significância, permite avaliar a significância do modelo. Se F for maior que $F_{\text{crítico}}$, então o modelo é adequado (Montgomery, 2001).

O teste individual de significância de cada coeficiente pode conduzir à otimização do modelo através da eliminação ou da adição de termos. Se o valor de P do teste individual para os termos for inferior ao nível de significância, então, o termo é adequado ao modelo e deve, portanto, ser mantido. Ao contrário, o termo deve ser excluído se tal procedimento conduzir a um aumento do coeficiente de determinação R^2 conjuntamente com a diminuição do erro residual S e o valor de P referente à falta de ajuste do modelo for superior ao nível de significância. Além disso, a retirada de qualquer termo deve obedecer ao princípio da Hierarquia (Montgomery, 2001). Este princípio postula que quando um termo de ordem alta é mantido no modelo, o de ordem baixa que o compõe também deve ser conservado.

4.5 – MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS ORDINÁRIOS

Como descrito anteriormente, a MSR é uma combinação de técnicas de planejamento de experimentos, os testes de hipótese, a ANOVA e a regressão. O planejamento de experimentos serve como instrumento eficaz de coleta de dados que serão, posteriormente, ajustados segundo algum algoritmo de modelagem.

O método dos mínimos quadrados ordinários (OLS) (do inglês *Ordinary Least Squares*) 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, \dots, y_n . Assumindo-se que valor esperado do erro seja zero, pode-se escrever que:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik} + \varepsilon_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} + \varepsilon_i \quad (87)$$

O método dos mínimos quadrados baseia-se na escolha de valores para β na equação (87), de modo que a soma dos quadrados dos erros seja minimizada. A função de mínimos quadrados pode ser escrita como:

$$L = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} \right)^2 \quad (88)$$

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

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_0} = \frac{\partial L}{\partial \beta_j} = -2 \sum_{i=1}^n \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} \right) = 0 \quad (89)$$

Simplificando-se e generalizando-se a equação (89), obtém-se:

$$\hat{\beta}_0 \sum_{i=1}^n x_{ik} + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1} x_{ik} + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n x_{i2} x_{ik} + \dots + \hat{\beta}_k \sum_{i=1}^n x_{ik}^2 = \sum_{i=1}^n x_{ik} y_i \quad (90)$$

Estas equações são chamadas de Equações normais de mínimos quadrados. Nota-se que existem $p = k + 1$ equações, uma para cada coeficiente de regressão desconhecido.

Em notação matricial, o sistema de equações (90) pode ser escrito como:

$$Y = \beta X + \varepsilon \quad (91)$$

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

É possível notar que L pode ser expresso como:

$$L = y^T y - \beta^T X^T y - y^T X \beta + \beta^T X^T X \beta = y^T y - 2\beta^T X^T y + \beta^T X^T X \beta \quad (93)$$

Como os estimadores de mínimo quadrado devem satisfazer a:

$$\frac{\partial L}{\partial \beta} = -2X^T y + 2X^T X \hat{\beta} = 0 \quad (94)$$

Uma simplificação da eq. (17) conduz a:

$$X^T X \hat{\beta} = X^T y \quad (95)$$

Multiplicando-se ambos os lados da equação (95) pela inversa da matriz $X^T X$, tem-se:

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y \quad (96)$$

A equação (96) é a expressão matricial das equações normais de mínimos quadrados, descritos anteriormente (Montgomery, 2001)

Modelos de regressão linear múltipla são frequentemente utilizados como aproximações de funções. Isto é, como a verdadeira relação função entre x e y não é conhecida, aproxima-se tal relacionamento por um modelo de regressão, que é relativamente adequado dentro de certa faixa de variação das variáveis independentes.

Considere-se o modelo quadrático da equação (80). Como se sabe, \hat{y}_i representa um valor ajustado, obtido a partir do modelo de regressão. A diferença entre o valor real observado y_i e \hat{y}_i , denomina-se resíduo, e pode ser representado por:

$$e = y - \hat{y} \quad (97)$$

Considerando-se a soma de quadrados para os resíduos, pode-se escrever:

$$SS_E = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (e_i)^2 = e^T e \quad (98)$$

Substituindo-se $e = y - \hat{y} = y - X\hat{\beta}$, chega-se a:

$$\begin{aligned} SS_E &= (y - X\hat{\beta})^T (y - X\hat{\beta}) = y^T y - \beta^T X^T y - y^T X\hat{\beta} + \hat{\beta}^T X^T X\hat{\beta} \\ SS_E &= y^T y - 2\beta^T X^T y + \hat{\beta}^T X^T X\hat{\beta} \end{aligned} \quad (99)$$

Como: $X^T X\hat{\beta} = X^T y$, a equação (99) se torna:

$$SS_E = y^T y - \hat{\beta}^T X^T y \quad (100)$$

A equação (100) é chamada soma de quadrados residual.

Derivando-se uma forma matricial para a soma de quadrados total, vem que:

$$SS_T = \sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2}{n} = y^T y - \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2}{n} \quad (101)$$

Para a soma de quadrados do modelo, tem-se que:

$$SS_m = SS_t - SS_e = y^T y - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2 - (y^T y - \hat{\beta}^T X^T y) = \hat{\beta}^T X^T y - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2 \quad (102)$$

O teste para a significância da regressão determina se existe uma relação linear entre a variável de resposta y um subconjunto de regressores. As hipóteses apropriadas neste caso são:

$$\begin{aligned} H_0 &= \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \dots = \beta_k = 0 \\ H_1 &= \beta_j \neq 0 \end{aligned} \quad (103)$$

A rejeição da hipótese nula implica que no mínimo um dos regressores contribui significativamente para a explicação da variação de Y . Uma vez que raramente um modelo explica 100% da variação da resposta modelada, é provável que exista uma diferença entre o valor observado e o valor modelado. Se a hipótese nula, descrita na equação (103) for verdadeira, então SQ_R/σ^2 será uma variável aleatória χ^2 , com k graus de liberdade. O número de graus de liberdade para esta variável é igual ao número de regressores presentes no modelo. Por sua vez, SQ_E/σ^2 segue o mesmo condicionamento, com $n-p$ graus de liberdade. As duas expressões anteriores são independentes. Logo, dividindo-se as duas variações encontra-se uma distribuição F. Portanto, a estatística de teste para a significância do modelo pode ser descrita por:

$$F_0 = \frac{SQ_M/k}{SQ_E/(n-p)} = \frac{MQ_M}{MQ_E} \quad (104)$$

Deve-se rejeitar a hipótese nula se o valor calculado na equação (104) for maior do que o valor de $F_{(\alpha, k, n-p)}$.

As hipóteses para testar a significância de qualquer coeficiente de regressão são:

$$\begin{aligned} H_0 &: \beta_j = 0 \\ H_1 &: \text{Pelo menos um } \beta_j \neq 0 \end{aligned} \quad (105)$$

Se a hipótese nula não for rejeitada, então o coeficiente poderá ser retirado do modelo. A estatística de teste utilizada para esta finalidade é da pela equação (106):

$$T_0 = \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 \cdot C_{jj}}} \quad (106)$$

Na equação (106) C_{jj} é o elemento da diagonal de $(X^T X)^{-1}$ correspondente a $\hat{\beta}_j$. Observa-se que o denominador da equação (106) é o erro-padrão do coeficiente $\hat{\beta}_j$. Deve-se rejeitar a hipótese nula se $T_0 > t_{(\alpha/2, n-p)}$.

Um intervalo de confiança para os coeficientes de regressão é dado por:

$$P(\hat{\beta}_j - t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}} \leq \beta_j \leq \hat{\beta}_j + t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}) = 1 - \alpha \quad (107)$$

Do mesmo modo, pode-se também construir um intervalo de confiança para a resposta média de um determinado ponto como $x_0 = [1 \quad x_{01} \quad x_{02} \quad \dots \quad x_{0k}]^T$. A resposta média neste ponto é estimada por $\hat{\mu}_{Y|x_0} = x_0^T \hat{\beta}$, com variância dada pela equação 108:

$$V(\hat{\mu}_{Y|x_0}) = \sigma^2 x_0^T (X^T X)^{-1} x_0 \quad (108)$$

Logo, um intervalo de confiança de $100(1-\alpha)\%$ é dado por:

$$P\left(\hat{\mu}_{Y|x_0} - t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\sigma^2 x_0^T (X^T X)^{-1} x_0} \leq \mu_{Y|x_0} \leq \hat{\mu}_{Y|x_0} + t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\sigma^2 x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}\right) = 1 - \alpha \quad (109)$$

4.5.1- Medidas de Adequação de Modelos de Regressão

A medida mais comum de adequação de um modelo é o coeficiente de determinação (R^2). Este termo representa o percentual de variação na resposta que é explicada pelo modelo construído. Associado a este coeficiente, encontra-se o R^2 ajustado (R^2 (adj.)), que considera o fato de que R^2 tende a superestimar a quantidade atual de variação contabilizada para a população. Também é fato que a inclusão de muitos termos no modelo de regressão aumenta substancialmente o valor de R^2 . Se o modelo recebeu fatores adicionais desnecessários, haverá um incremento em R^2 , sem haver, necessariamente, melhoria de informação na resposta. É por este motivo que o valor de R^2 ajustado é mais apropriado para se comparar modelos com diferentes quantidades de termos.

O valor de R^2 pode ser calculado aplicando-se a equação (110), tal que:

$$R^2 = \frac{SQ_M}{SQ_T} = 1 - \frac{SQ_E}{SQ_T} \quad (110)$$

O coeficiente de determinação ajustado (R^2 ajustado) é uma modificação que considera o número p de variáveis incluídas no modelo. Observando-se a equação (111), nota-se que o valor ajustado decresce à medida que p aumenta.

$$R_{aj}^2 = 1 - \left(\frac{n-1}{n-p} \right) (1 - R^2) \quad (111)$$

4.5.2 - Análise Residual

Os resíduos de um modelo de regressão desenvolvem um importante papel no julgamento da sua adequação. Considerando-se alguns aspectos peculiares, o conjunto de resíduos deve ter distribuição normal com média zero e variância σ^2 , devem ser não correlacionados com outros resíduos, com a média dos tratamentos, com as variáveis preditoras e ao longo do tempo. Devem ter padrão aleatório, não tendencioso e devem preferencialmente assumir a forma padronizada segundo a equação (112).

$$d_i = \frac{e_i}{\sqrt{MQ_E}} = \frac{e_i}{\sqrt{\hat{\sigma}^2}} \quad (112)$$

A padronização dos resíduos cria um escalonamento para o desvio-padrão, o que torna sua interpretação mais fácil. Uma outra forma de escalonamento é a de Student, dada pela equação (113) a seguir:

$$d_i = \frac{e_i}{\sqrt{\hat{\sigma}^2(1-h_{ii})}} \quad (113)$$

h_{ii} representa o i -ésimo elemento da diagonal de uma Matriz Chapéu H.

4.5.3 - Testes para a Falta de Ajuste dos Modelos

A adição de pontos centrais aos arranjos experimentais proporciona a obtenção de uma estimativa do erro experimental. De acordo com Montgomery (2001), este artifício permite que a soma de quadrados residual (SS_e) seja discriminada em dois componentes: (a) a soma de quadrados devida ao erro puro (SS_{pe}) e (b), a soma de quadrados devido à falta de ajuste do modelo escolhido (SS_{lof}) (*lof*, do inglês *Lack of Fit*). Assim, pode-se escrever:

$$SS_e = SS_{pe} + SS_{lof} \quad (114)$$

Por suposição, admita-se que existam n_i observações de uma dada resposta de interesse no i -ésimo nível dos regressores x_i , $i = 1, 2, \dots, m$. Considere-se que y_{ij} denote a j -ésima observação de uma resposta no nível x_i , $i = 1, 2, \dots, m$ e $j = 1, 2, \dots, n_i$. Como existe um total de observações $n = \sum_{i=1}^m n_i$, então, o ij -ésimo resíduo será:

$$y_{ij} - \hat{y}_i = (y_{ij} - \bar{y}_i) + (\bar{y}_i - \hat{y}_i) \quad (115)$$

Onde \bar{y}_i é a média da n_i observações no nível x_i . Elevando-se ao quadrado ambos os lados da Eq. (43) e somando-se cada i e j , obtém-se:

$$\underbrace{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \hat{y}_i)^2}_{SS_r} = \underbrace{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2}_{SS_{ep}} + \underbrace{\sum_{i=1}^m n_i (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}_{SS_{lof}} \quad (116)$$

O lado esquerdo da equação (116) é a soma de quadrados residual (SS_r). Os dois termos do lado direito são respectivamente, o erro puro (SS_{ep}) e a falta de ajuste do modelo (SS_{lof}).

Pode-se notar que SS_{pe} é obtido computando-se a correta soma de quadrados das observações repetidas em cada nível da variável independente (fator), em operações repetidas para cada um dos m níveis de x . Se a suposição de variância constante for satisfeita, SS_{ep} representa um modelo independente de medição do erro puro, porque apenas a variabilidade das respostas em nível dos fatores é utilizada para calculá-lo. Uma vez que existem $n_i - 1$ graus de liberdade associados ao erro puro em cada nível, o número total de graus de liberdade para o termo de erro puro é igual a $n - m$. Como se nota, SS_{lof} é uma soma quadrática ponderada dos desvios encontrados entre a resposta média \bar{y}_i em um dado nível da variável independente e o correspondente valor ajustado \hat{y}_i . O valor ajustado \hat{y}_i é a estimativa fornecida pelo modelo de regressão escolhido para os valores das variáveis independentes em uma dada observação. Se o valor ajustado \hat{y}_i possuir um valor numérico muito próximo ao valor das médias das respostas \bar{y}_i , então, há um forte indício que o modelo de regressão escolhido é o mais correto. Caso contrário haverá a necessidade de se estudar um outro modelo que apresente um melhor ajuste dos dados observacionais. Há $m - p$ graus de liberdade associados à SS_{lof} porque existem m níveis de x e p graus de liberdade perdidos em função dos p parâmetros que devem ser estimados pelo modelo.

A estatística de teste para a falta de ajuste pode, então, ser escrita na forma:

$$F_0 = \frac{SS_{lof} / (m - p)}{SS_{pe} / (n - m)} = \frac{MS_{lof}}{MS_{pe}} \quad (117)$$

Quando a estatística de F_0 assumir valores menores que o nível de significância escolhido, então, haverá evidência suficiente para se aceitar a hipótese nula de que a diferença entre o valor ajustado e a média observada é nula. Logo, não haverá falta de ajuste na estimativa proporcionada pelo modelo escolhido.

4.6 - REGRESSÃO MÚLTIPLA MULTIVARIADA

Segundo Barbetta (1998), costuma-se chamar de regressão múltipla multivariada (MVR, do inglês *Multivariate Regression*) os modelos com múltiplas variáveis dependentes (respostas) associadas a um conjunto de variáveis independentes (fatores). Em geral, assume-se que todas as equações tenham a mesma forma funcional e variâncias constantes ao longo das observações (homocedasticidade). Segundo Rencher (2002), a regressão é chamada de *multivariada* porque refere-se ao conjunto de múltiplas respostas, enquanto que o termo *múltipla* faz menção ao conjunto de variáveis independentes x , ou regressoras. O pressuposto básico deste tipo de regressão é que as r respostas de interesse são modeladas pelos mesmos regressores; isto é, se a interação X_1X_2 é um regressor significativo para uma resposta, ela estará presente nos modelos de todas as demais. O conjunto de regressores pode ser encontrado utilizando-se a técnica OLS para cada resposta individualmente e, então, para a MVR, usando o conjunto de regressores que é a união dos conjuntos para cada resposta. Obviamente, este método produzirá modelos com um grande número de regressores. Esta é a principal desvantagem do método.

Quando todas as respostas são modeladas pelos mesmos regressores, a negligência das correlações entre as respostas (OLS) ou a sua consideração (MVR), conduzirá às mesmas estimativas para os coeficientes.

Considere-se o problema de modelagem do relacionamento entre r respostas Y_1, Y_2, \dots, Y_r e um conjunto de variáveis preditoras z_1, z_2, \dots, z_p . Assume-se que cada resposta tem seu próprio modelo, tal que:

$$\begin{aligned}
Y_1 &= \beta_{01} + \beta_{11}z_1 + \dots + \beta_{p1}z_p + \varepsilon_1 \\
Y_2 &= \beta_{02} + \beta_{12}z_1 + \dots + \beta_{p2}z_p + \varepsilon_2 \\
&\vdots \\
Y_r &= \beta_{0r} + \beta_{1r}z_1 + \dots + \beta_{pr}z_p + \varepsilon_r
\end{aligned} \tag{134}$$

O termo de erro $\varepsilon = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_r]^T$ tem média $E(\varepsilon) = 0$ e variância Σ . Portanto, os termos de erro associados às diferentes respostas podem estar correlacionados.

Para se estabelecer uma notação similar àquela adotada no modelo clássico de regressão linear, considere-se que $[z_{j0}, z_{j1}, \dots, z_{jp}]$ denota os valores das variáveis independentes para o j -ésimo experimento, sendo $Y_j = [Y_{j1}, Y_{j2}, \dots, Y_{jr}]^T$ as respectivas respostas e $\varepsilon_j = [\varepsilon_{j1}, \varepsilon_{j2}, \dots, \varepsilon_{jr}]^T$ os erros associados. Assim o modelo de regressão multivariada poderá ser escrito como:

$$Y = Z\beta + \varepsilon \tag{135}$$

Em notação matricial, a equação (135) assume a seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} & \dots & Y_{1r} \\ Y_{21} & Y_{22} & \dots & Y_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Y_{n1} & Y_{n2} & \dots & Y_{nr} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & z_{11} & \dots & z_{1p} \\ 1 & z_{21} & \dots & z_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & z_{n1} & \dots & z_{np} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{01} & \beta_{02} & \dots & \beta_{0r} \\ \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{p1} & \beta_{p2} & \dots & \beta_{pr} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \dots & \varepsilon_{1r} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \dots & \varepsilon_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varepsilon_{n1} & \varepsilon_{n2} & \dots & \varepsilon_{nr} \end{bmatrix} \tag{136}$$

Neste modelo, $E(\varepsilon_{(i)}) = 0$ e $Cov(\varepsilon_{(i)}, \varepsilon_{(k)}) = \sigma_{ik}$ $i, k = 1, 2, \dots, r$. As r observações de cada uma das r respostas em cada j -ésimo experimento podem ser correlacionadas e assumem como matriz de variância-covariância $\Sigma = \{\sigma_{ik}\}$; entretanto, as observações de cada um dos diferentes experimentos (linhas) serão não-correlacionadas.

Uma vez estabelecida a matriz de respostas Y e os valores das variáveis independentes Z , os coeficientes de regressão serão estimados através da técnica de mínimos quadrados de maneira análoga ao caso univariado, tal que:

$$\hat{\beta} = (Z^T Z)^{-1} Z^T Y \tag{137}$$

Usando os estimadores de mínimos quadrados da equação (137), pode-se formar a matriz dos valores previstos \hat{Y} e a respectiva matriz de resíduos $\hat{\varepsilon}$ tal que:

$$\hat{Y} = Z\hat{\beta} = Z(Z^T Z)^{-1} Z^T Y \tag{138}$$

$$\hat{\varepsilon} = Y - \hat{Y} = \left[I - Z(Z^T Z)^{-1} Z^T \right] Y \quad (139)$$

A soma de resíduos quadráticos e os produtos cruzados podem ser escritos como:

$$\hat{\varepsilon}^T \hat{\varepsilon} = Y^T Y - \hat{Y}^T \hat{Y} = Y^T Y - \hat{\beta}^T Z^T Z \hat{\beta} \quad (140)$$

Como é possível notar, o modelo de regressão múltipla multivariada (MVR) não apresenta nenhum novo problema de estimação. Apesar da matriz da equação (136) apresentar todos os coeficientes em uma única formulação, em termos práticos, cada conjunto de coeficientes pode ser estimado individualmente aplicando-se a técnica de mínimos quadrados a cada resposta particular. Nota-se, entretanto, que o modelo requer que o mesmo conjunto de variáveis independentes x seja utilizado para todas as respostas.

4.7 - MODELOS “SUR”

Na maioria dos problemas de MSR com múltiplas respostas, o experimentador utiliza como ajuste para cada resposta o modelo de mínimos quadrados ordinários (OLS). Algumas vezes, quando se verificar problemas com a igualdade de variância para algumas respostas, o método de mínimos quadrados ponderados (WLS) poderá ser utilizado.

Entretanto, quando as múltiplas respostas se apresentarem correlacionadas, o modelo de regressão aparentemente não relacionada SUR (*Seemingly Unrelated Regression*) fornecerá estimativas mais precisas dos parâmetros de regressão que o OLS. A melhoria na precisão de estimação pode conduzir a uma estimativa mais precisa do ponto de ótimo. Segundo Shah et al. (2004), é comum se encontrar variáveis de resposta correlacionadas em estudos MSR, logo, o modelo SUR torna-se uma técnica extremamente útil nestes casos. O modelo SUR diferencia-se do modelo MVR por permitir diferentes formas funcionais para as equações. Neste contexto, o sistema SUR pode ser considerado como uma generalização da regressão multivariada. A ênfase no sistema SUR se dá sobre o processo de estimação dos parâmetros. Sob certas condições, esta abordagem obtém estimadores mais eficientes do que os obtidos com o tratamento de cada equação isoladamente.

Considere-se um experimento com múltiplas respostas formado por r variáveis dependentes y_1, y_2, \dots, y_r . Para cada resposta existem n observações, de acordo com o arranjo

experimental escolhido. Em notação matricial, um modelo genérico para a i -ésima resposta pode ser escrito como:

$$y_i = X_i \beta_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, r \quad (118)$$

Na equação (118), y_i é um vetor ($n \times 1$) das observações experimentais obtidas da i -ésima resposta, X_i é uma matriz ($n \times p$) de variáveis independentes (regressoras), β_i é um vetor ($p \times 1$) dos parâmetros desconhecidos do modelo de regressão, e ε_i é o vetor de erro aleatório associado à i -ésima resposta de interesse.

O modelo SUR foi originalmente desenvolvido por Zellner (1962). Neste procedimento, assume-se que cada uma das r variáveis de resposta pode ser representada por um modelo de regressão polinomial. Para cada um destes r modelos, assume-se que os erros entre as observações são não correlacionados e que para qualquer um dos modelos individuais, os mesmos possuem variância constante. Entretanto, os erros dos diferentes modelos apresentarão forte estrutura de correlação. Matematicamente, isto significa que:

$$E(\varepsilon_i) = 0 \quad (119)$$

$$Var(\varepsilon_i) = \sigma_{ii} I_n \quad (120)$$

$$Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = \sigma_{ij} I_n \quad i, j = 1, 2, \dots, r; \quad i \neq j \quad (121)$$

Os r modelos de regressão dados pela equação (119) podem ser representados na seguinte forma matricial pela equação (122), tal que:

$$Y = X\beta + \varepsilon \quad (122)$$

Onde $Y = [y_1^T : y_2^T : \dots : y_r^T]^T$, $\beta = [\beta_1^T : \beta_2^T : \dots : \beta_r^T]^T$, $\varepsilon = [\varepsilon_1^T : \varepsilon_2^T : \dots : \varepsilon_r^T]^T$ e X é a matriz diagonal-bloco, $diag(X_1, X_2, \dots, X_r)$.

No caso específico de dois fatores e duas respostas, a forma matricial da equação (122) é dada pela equação (124). Combinando-se as equações (120) e (121), pode-se notar que ε possui a seguinte matriz de variância-covariância:

$$Var(\varepsilon) = \Sigma \otimes I_n \quad (123)$$

Onde Σ é a matriz de variância-covariância das múltiplas respostas e \otimes denota o produto direto (ou Kronecker) de matrizes. O produto direto de duas matrizes, \mathbf{A} e \mathbf{B} , de ordens $n_1 \times n_2$ e $m_1 \times m_2$, respectivamente, é definido pela matriz $n_1 m_1 \times n_2 m_2$, $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$.

A matriz Σ e a equação (124) pressupõem que a variância e a covariância entre períodos (ou observações) são constantes e que a autocorrelação entre os erros é nula.

Considere-se um conjunto de r variáveis de resposta, cujos erros para cada resposta possam ser representados por ε_{ui} e ε_{vj} , respectivamente, onde u e v representem o número da observação. Então, a covariância entre os erros pode ser escrita como:

$$\begin{bmatrix} y_{11} \\ y_{21} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y_{n1} \\ \dots \\ y_{12} \\ y_{22} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y_{n2} \end{bmatrix}_{(2m \times 1)} = \begin{bmatrix} 1 & x_{111} & x_{121} & x_{111}^2 & x_{121}^2 & x_{111}x_{121} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x_{211} & x_{221} & x_{211}^2 & x_{221}^2 & x_{211}x_{221} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ 1 & x_{n11} & x_{n21} & x_{n11}^2 & x_{n21}^2 & x_{n11}x_{n21} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x_{112} & x_{122} & x_{112}^2 & x_{122}^2 & x_{112}x_{122} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x_{212} & x_{222} & x_{212}^2 & x_{222}^2 & x_{212}x_{222} \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x_{n12} & x_{n22} & x_{n12}^2 & x_{n22}^2 & x_{n12}x_{n22} \end{bmatrix}_{(2m \times 12)} \begin{bmatrix} \beta_{01} \\ \beta_{11} \\ \beta_{21} \\ \beta_{111} \\ \beta_{221} \\ \beta_{121} \\ \dots \\ \beta_{02} \\ \beta_{12} \\ \beta_{22} \\ \beta_{112} \\ \beta_{222} \\ \beta_{122} \end{bmatrix}_{(12 \times 1)} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{21} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \varepsilon_{n1} \\ \dots \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{22} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \varepsilon_{n2} \end{bmatrix}_{(2m \times 1)} \quad (124)$$

$$\text{Cov}(\varepsilon_{ui}, \varepsilon_{vj}) = \begin{cases} \sigma_{ij} & u = v \\ 0 & u \neq v \end{cases} \text{ e } i \neq j \quad (125)$$

Nota-se que variância para os erros é dada por:

$$\text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma_{ii} \quad \forall i \quad (126)$$

Assim, o melhor estimador não tendencioso de β na equação (122) é dado por:

$$\hat{\beta} = [X^T (\Sigma^{-1} \otimes I_n) X]^{-1} X^T (\Sigma^{-1} \otimes I_n) Y \quad (127)$$

A matriz de variância-covariância de $\hat{\beta}$ poderá ser escrita como:

$$\text{Var}(\hat{\beta}) = [X^T (\Sigma^{-1} \otimes I_n) X]^{-1} \quad (128)$$

Considerando $\hat{y}(x)$ o vetor das respostas previstas de ordem $(r \times 1)$ no ponto x da região experimental, tal que:

$$\hat{y}(x) = [\hat{y}_1(x), \hat{y}_2(x), \dots, \hat{y}_r(x)]^T \quad (129)$$

Na equação (129) $\hat{y}_i(x) = f_i^T(x) \hat{\beta}_i$ e $f_i(x)$ é o vetor que expressa o ponto x na forma do modelo, e $\hat{\beta}_i$ é o estimador de β_i obtido a partir da equação (128). A equação (129) pode ser escrita como:

$$\hat{y}(x) = \Lambda^T(x) \hat{\beta} \quad (130)$$

Onde $\Lambda^T(x)$ é a matriz bloco-diagonal, $\text{diag}[f_1^T(x), f_2^T(x), \dots, f_r^T(x)]$.

Os valores de $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_1^T, \hat{\beta}_2^T, \dots, \hat{\beta}_r^T)^T$ representam os valores estimados para cada resposta do conjunto múltiplo. Das equações (127) e (128), a matriz de covariância da resposta estimada é dada por:

$$\text{Var}[\hat{y}(x)] = \Lambda^T(x) [X^T (\Sigma^{-1} \otimes I_n) X]^{-1} \Lambda(x) \quad (131)$$

Como a matriz de variância-covariância Σ é raramente conhecida, Zellner (1962) propôs um estimador não-singular $\hat{\Sigma} = (\hat{\sigma}_{ij})$ que pode ser definido como:

$$\hat{\sigma}_{ij} = \frac{y_i^T [I_n - X_i (X_i^T)^{-1} X_i^T] [I_n - X_j (X_j^T X_j)^{-1} X_j^T] y_j}{n} \quad (132)$$

Na equação (132), $\hat{\sigma}_{ij}$ é calculado a partir do vetor de resíduos resultantes de um ajuste realizado utilizando-se mínimos quadrados ordinários (OLS), para o i -ésimo e j -ésimo modelos individuais de resposta para seus respectivos dados. Usando o estimador descrito pela equação (132), a equação (127) pode ser reescrita como:

$$\hat{\beta}_e = [X^T (\hat{\Sigma}^{-1} \otimes I_n) X]^{-1} X^T (\hat{\Sigma}^{-1} \otimes I_n) Y \quad (133a)$$

A suposta não-singularidade de Σ não garante a não-singularidade de $\hat{\Sigma}$. Srivastava e Giles (1987) demonstraram que se o número de resposta r é maior do que o número de observações n , então $\hat{\Sigma}$ será singular. Os pesquisadores também demonstraram que $r \leq n$ é uma condição necessária, mas não suficiente de não-singularidade de $\hat{\Sigma}$.

Com a estimativa dos coeficientes, pode-se calcular os novos resíduos, estimar novamente a matriz de variâncias e covariâncias e repetir o processo iterativamente. Admitindo-se que a distribuição dos erros seja simétrica e que a média exista, o estimador $\hat{\beta}$ de Zellner é não viciado. Além disso, a distribuição de qualquer elemento de $\hat{\beta}$ converge para uma distribuição normal. Estas propriedades independem do número de iterações do processo de estimação (Srivastava e Giles, 1987).

Quanto à eficiência, se as correlações forem não nulas e se $X_\ell \neq X_k$ para algum $\ell, k = 1, 2, \dots, L$, os estimadores $\hat{\beta}_\ell$ ($\ell = 1, 2, \dots, L$) de Zellner são assintoticamente mais eficientes do que os estimadores produzidos pelo método usual de OLS aplicado a cada equação isoladamente (Srivastava e Giles, 1987). Além disso, a eficiência do método SUR é maior quando se têm amostras grandes.

A vantagem do método SUR de Zellner, em relação ao método OLS univariado, aumenta na medida em que se têm correlações fortes entre as variáveis dependentes e equações bem diferentes em relação ao conjunto de variáveis independentes. Por outro lado, se as correlações forem muito baixas o método de Zellner tende a produzir estimativas piores do que o OLS (Srivastava e Giles, 1987). Srivastava e Giles (1987) ponderam ainda que, às vezes, o processo iterativo de estimação da matriz de variância-covariância $\hat{\Sigma}$ pode levar à perda de eficiência. Situações favoráveis aos estimadores iterativos ocorrem quando houver correlações fortes entre as respostas e equações com termos bem diferentes.

De acordo com Shah et al. (2004), há duas situações onde os regressores estimados através do método SUR serão equivalentes ao método OLS: (a) quando as correlações entre todos os modelos forem nulas e (b) quando os modelos para cada resposta envolverem o mesmo conjunto de regressores. Neste caso, os cenários de otimização múltipla empregando OLS serão inteiramente apropriados.

4.8 - OTIMIZAÇÃO DE UMA ÚNICA RESPOSTA

O objetivo fundamental da metodologia de superfície de resposta é encontrar uma condição ótima de operação para um processo. Para tanto, algoritmos de modelagem como o OLS, SUR ou MVR são empregados para se estabelecer funções de transferência entre os dados e as variáveis de controle experimentais. A obtenção da função de aproximação viabiliza a determinação do ponto de ótimo.

De acordo com Box e Wilson (1951), a otimização experimental de sistemas com uma única variável de resposta deve ser conduzida em duas fases. A primeira consiste numa seqüência de procura linear na direção da máxima otimização. Esta procura é realizada até que haja evidência de que a direção escolhida não resulta em melhorias adicionais para o modelo, ou, enquanto não houver evidências de falta de ajuste para o modelo de primeira ordem. De acordo com Lin e Chou (2002), a segunda fase só é realizada se for detectada falta de ajuste no modelo de primeira ordem. Evidentemente, nem todas as respostas requererão ajustes dessa natureza, e, em tais casos, o modelo da primeira fase será suficiente quando não houver melhorias adicionais.

Quando uma experimentação é planejada para um processo sobre o qual se conhece pouco, existe uma chance de que as condições iniciais estejam muito distantes da real região de ótimo. Conforme comentado anteriormente, o objetivo é manter o experimento ao longo da direção de máxima ascensão (*Path of Steepest Ascent*) até que a resposta do experimento não experimente melhorias adicionais. Neste ponto, um novo experimento fatorial com pontos centrais deve ser aplicado para se determinar a nova direção. Este processo deve ser repetido até que alguma curvatura seja detectada. A curvatura ou a falta de ajuste considerável do modelo linear indica que os parâmetros do experimento estão próximos da região de máximo. Segundo Lin e Chou (2002); há duas coisas importantes a se observar na Fase 1: (a) determinar a direção de busca e (b) o comprimento do passo utilizado para conduzir o experimento para região de ótimo.

O Método do Vetor Gradiente segundo Forster e Barthe (1990), indica a direção na qual a resposta aumenta mais rapidamente. Esta direção é paralela a uma reta normal traçada sobre as superfícies de respostas ajustadas (figura 4.3), passando pelo centro da região de interesse, a partir do modelo ajustado de primeira ordem. Conseqüentemente, o comprimento dos passos ao longo desse caminho de melhoria é proporcional aos coeficientes de regressão.

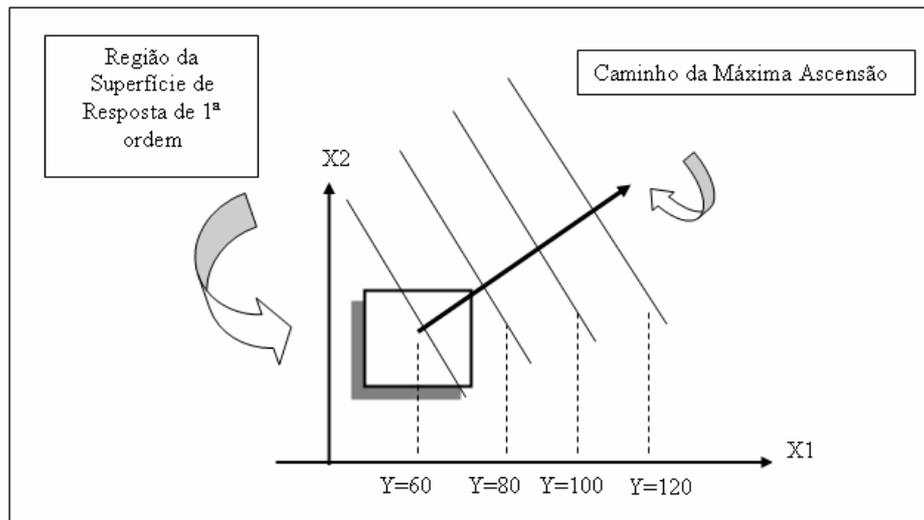


Figura 4.3 – Método do Vetor Gradiente.

De acordo com Box e Draper (1987), o tamanho do passo pode ser dado pela equação (141), baseando-se no coeficiente de o maior valor absoluto $|\hat{\beta}_j|$.

$$\Delta x_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\beta}_j / \Delta x_j} \quad i = 1, 2, \dots, k; \quad i \neq j \quad (141)$$

Posteriormente, deve ser feita a conversão de variáveis codificadas para variáveis naturais. Para facilitar os cálculos, adota-se Δx_j igual a 1. Uma vez determinado o comprimento do passo para cada variável (codificada e natural), os experimentos devem ser realizados alterando-se os níveis dos fatores a partir da origem, de tal forma que se obtenham níveis do tipo $X_0, X_0 + \Delta X, X_0 + 2\Delta X, X_0 + 3\Delta X, \dots$, enquanto houver melhorias na resposta y . Uma vez alcançado o ponto a partir do qual y não sofre melhorias adicionais, um novo experimento deve ser realizado utilizando-se pontos centrais para que a falta de ajuste do modelo seja avaliada. Contudo, se não for detectada falta de ajuste, o novo modelo de primeira ordem deverá fornecer uma nova direção para a investigação. De outro modo, o projeto experimental deve ser aumentado com pontos axiais para que um modelo de segunda ordem seja avaliado.

Segundo Khuri (2003), para se determinar a direção a ser seguida, tal que se alcance um incremento na resposta, é necessário que se maximize $\hat{y}(x)$ sujeito à restrição de que o próximo ponto deva pertencer à região experimental de raio r , tal que:

$$\sum_{i=1}^k x_i^2 = r^2 \quad (142)$$

O raio da região experimental coincide com a distância axial α . Usando os métodos dos multiplicadores de Lagrange e considerando a restrição (142), tem-se:

$$Q(x) = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i - \lambda \left(\sum_{i=1}^k x_i^2 - r^2 \right) \quad (143)$$

Onde λ é um multiplicador de Lagrange. Tomando as derivadas parciais de $Q(x)$ e igualando a zero, obtém-se:

$$x_i = \frac{1}{2\lambda} \hat{\beta}_i \quad (144)$$

Para um máximo, λ deve ser positivo. Usando a equação de restrição (142), tem-se que:

$$\lambda = \frac{1}{2r} \left(\sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i^2 \right)^{1/2} \quad (145)$$

Um máximo local é, então, alcançado no ponto cujas coordenadas são:

$$x_i = r \hat{\beta}_i \left(\sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i^2 \right)^{-1/2}, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (146)$$

Se $e_i = \hat{\beta}_i \left(\sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i^2 \right)^{-1/2}$, $i = 1, 2, \dots, k$, então, $e = (e_1, e_2, \dots, e_k)^T$ é um vetor unitário na direção

de $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_k)^T$. A equação do ponto de máximo indica que há uma distância de r unidades da origem, um máximo aumento na resposta ocorre ao longo da direção do vetor $e = (e_1, e_2, \dots, e_k)^T$. Desde que este é o único máximo local dentro da hipersfera de raio r , deve ser também o máximo global absoluto. Se o valor da resposta obtida no ponto $x = re$ exceder seu valor na origem do experimento, então a movimentação do experimento na direção de e é adequada.

4.8.1 - Localização do Ponto Estacionário

Otimizar uma resposta significa encontrar o melhor conjunto de soluções para as variáveis independentes x_1, x_2, \dots, x_k que atendam uma determinada condição de Y . Se uma função possui ponto de máximo ou de mínimo, a derivada primeira dessa função é nula. No

caso da função ser composta de um conjunto de variáveis independentes, as derivadas parciais da função em relação a cada uma das variáveis independentes também devem ser nulas, para que haja um ponto de máximo ou de mínimo. Este ponto é denominado Ponto Estacionário. Em notação matemática, pode-se escrever como:

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_2} = \dots = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_k} = 0 \quad (147)$$

O ponto estacionário de \hat{y} pode ser encontrado fazendo o $\nabla(\hat{y}) = 0$, tal que:

$$\nabla(\hat{y}) = \left[\frac{\partial(\hat{y})}{\partial x_1}, \frac{\partial(\hat{y})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial(\hat{y})}{\partial x_k} \right]^T = 0 \quad (148)$$

De acordo com Nash e Sofer (1996), a matriz das derivadas segundas de \hat{y} é chamada matriz Hessiana [H]. Se [H] for positiva e definida, ou seja, se $|H| > 0$, então, o ponto estacionário será um ponto de ótimo local.

$$H = [\nabla^2(\hat{y})]_{ij} = \left[\frac{\partial^2(\hat{y})}{\partial x_i \partial x_j} \right] \quad (149)$$

Nash e Sofer (1996) afirmam que todas as funções que possuem derivadas segundas contínuas, serão sempre matrizes simétricas, ou seja, $[\partial^2(\hat{y})/\partial x_i \partial x_j]$ é igual a $[\partial^2(\hat{y})/\partial x_j \partial x_i]$.

Seja a seguinte função quadrática:

$$\hat{y} = f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x \quad (150)$$

Onde $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, b é um vetor de comprimento n , e Q é uma matriz simétrica $n \times n$.

Então, a função (150) também poderá ser escrita como:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n Q_{j,k} x_j x_k - \sum_{j=1}^n b_j x_j \quad (151)$$

Formando-se uma expressão que envolva só os termos da variável x_i , segue que:

$$\frac{1}{2} Q_{i,i} x_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} Q_{j,i} x_j x_i + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} Q_{i,k} x_i x_k - b_i x_i \quad (152)$$

Tomando as derivadas parciais destes termos em relação a x_i , tem-se:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = Q_{i,i}x_i + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} Q_{j,i}x_j + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} Q_{i,k}x_k - b_i = \sum_{j=1}^n Q_{j,i}x_j - b_i = (Qx - b) \quad (153)$$

Admitiu-se Q como simétrica. Portanto, $\nabla f(x)$ e H podem ser escritos como:

$$\nabla f(x) = Qx - b \Rightarrow H = [\nabla^2 f(x)]_{ij} = \left[\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right] = Q_{i,j} \quad (154)$$

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + x'b + x'Bx \quad (155)$$

$$\text{Onde: } x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_k \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} \quad \text{e } B = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \dots & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ & \hat{\beta}_{22} & \dots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ & & \dots & \\ \text{Simétrico} & & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$

Segundo Box e Draper (1987), a equação (155) é a forma matricial de (154), onde b representa o vetor dos coeficientes de regressão de primeira ordem e B é uma matriz simétrica, com a diagonal principal formada pelos coeficientes dos termos quadráticos puros. Os demais coeficientes de B são representados pela metade do valor dos coeficientes mistos. Fazendo-se $\nabla(\hat{y}) = 0$, o ponto estacionário x_s , será escrito como:

$$x_s = -\frac{1}{2} B^{-1} b \quad (156)$$

4.8.2 - Método de Draper (*Ridge Analysis*)

A equação do ponto estacionário descrita anteriormente só é válida para condições não restritas de otimização. Entretanto, como os resultados experimentais só são válidos para o interior dos níveis dos fatores, deve-se pensar em uma estratégia de restrições para o ponto estacionário, de modo que a solução encontrada pertença ao espaço experimental Ω , delimitado pelos níveis extremos do arranjo estudado.

Para este cenário, Hoerl (1959) e Draper (1963) formalizaram um método que ficou conhecido como *Ridge Analysis*. Este método é particularmente útil nos casos onde o ponto de ótimo cai fora da região experimental Ω . Necessitando-se, portanto, se otimizar uma resposta dentro uma hipersfera de raio r , centrada na origem do experimento, deve-se utilizar o conceito de multiplicador de Lagrange, tal que:

$$F = \hat{y}(x) - \lambda \left(\sum_{i=1}^k x_i^2 - r^2 \right) \quad (157)$$

Diferenciando F em relação a x_i ($i = 1, 2, \dots, k$) e igualando a zero, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x_1} &= 2(\hat{\beta}_{11} - \lambda)x_1 + \hat{\beta}_{12}x_2 + \dots + \hat{\beta}_{1k}x_k + \hat{\beta}_1 = 0, \\ \frac{\partial F}{\partial x_2} &= \hat{\beta}_{12}x_1 + 2(\hat{\beta}_{22} - \lambda)x_2 + \dots + \hat{\beta}_{2k}x_k + \hat{\beta}_2 = 0, \\ &\vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_k} &= \hat{\beta}_{1k}x_1 + \dots + \hat{\beta}_{2k}x_2 + 2(\hat{\beta}_{kk} - \lambda)x_k + \hat{\beta}_k = 0. \end{aligned} \quad (158)$$

Estas equações podem ser expressas na forma matricial como:

$$(\hat{B} - \lambda)x = -\frac{1}{2}\hat{\beta} \quad (159)$$

Segundo Khuri (2003), Draper (1963) propôs a resolução desta equação através de um processo iterativo. Primeiramente, (a) considera-se r como variável e fixa-se λ ; (b) insere-se um valor para λ na equação (159) e resolve-se para x ; (c) calcula-se $r = (x^T x)^{1/2}$ e (d) avalia-se $\hat{y}(x)$. Vários valores de λ podem conduzir a pontos estacionários que caem na mesma hipersfera de raio r . Isto acontece porque λ é escolhido para ser diferente de qualquer dos autovalores de \hat{B} . Portanto, a equação (159) tem uma única solução dada por:

$$x = -\frac{1}{2}(\hat{B} - \lambda I_k)^{-1} \hat{\beta} \quad (160)$$

Substituindo-se esta equação em (157), obtém-se:

$$\hat{\beta}^T (\hat{B} - \lambda I_k)^{-2} \hat{\beta} = 4r^2 \quad (161)$$

A escolha do multiplicador de Lagrange tem um efeito na natureza do ponto estacionário. Alguns valores produzem pontos para os quais a resposta alcança um máximo, enquanto que outros conduzem a valores de mínimo. Mais especificamente, sejam λ_1 e λ_2 dois valores possíveis para um multiplicador de Lagrange, com x_1, x_2 e r_1, r_2 os correspondentes valores de x e r , respectivamente. Os seguintes resultados estabelecidos por Draper (1963) *apud* Khuri (2003), podem ser úteis na seleção de um multiplicador de Lagrange que produza um ponto estacionário particular:

Resultado 1: Se $r_1 = r_2$ e $\lambda_1 > \lambda_2$, então, $\hat{y}_1 > \hat{y}_2$, onde \hat{y}_1 e \hat{y}_2 são os valores de $\hat{y}(x)$ em x_1 e x_2 , respectivamente.

Este resultado significa que para dois pontos estacionários que estão à mesma distância da origem, $\hat{y}(x)$ será maior no ponto estacionário que possuir maior valor de λ .

Resultado 2: Seja M a matriz das derivadas parciais de segunda ordem de F :

$$M = 2(\hat{B} - \lambda I_k) \quad (162)$$

Se $r_1 = r_2$, e M é positiva definida para x_1 e é indefinida para x_2 , então $\hat{y}_1 < \hat{y}_2$.

Resultado 3: Se λ_1 é maior do que o maior dos autovalores de \hat{B} , então, a correspondente solução x_1 é um ponto de máximo absoluto para \hat{y} dentro da hipersfera de raio $r_1 = (x_1^T x_1)^{1/2}$. Se, por outro lado, λ_1 é menor do que o menor dos autovalores de \hat{B} , então, x_1 é um ponto de mínimo absoluto dentro da região de experimentação R .

Baseado no resultado 3 pode-se selecionar vários valores para os multiplicadores de Lagrange que excedam o maior dos autovalores da matriz característica \hat{B} .

4.8.3 - Método do Gradiente Reduzido Generalizado

O Gradiente Reduzido Generalizado (GRG) é um método para a resolução de problemas de programação não-linear com restrições. Basicamente, o método prevê apenas a utilização de restrições lineares ou não-lineares de igualdade. Entretanto, para casos onde a restrição for de desigualdade, contorna-se o problema introduzindo-se variáveis de folga (se a restrição for do tipo \leq), ou variáveis de excesso (no caso de restrições do tipo \geq).

Segundo Lasdon et al. (1978), Nash e Sofer (1996), Del Castillo et al. (1993; 1999), Koksoy e Doganaksoy (2003) e Peterson (2004), o GRG é um algoritmo aplicado a problemas de otimização do tipo:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } F_{m+1}(X) \\ & \text{Sujeito a: } h_i(X) = 0, \quad i = 1, neq, \\ & \quad 0 \leq h_i(X) \leq ub(n+i), \quad i = neq+1, m, \\ & \quad lb(i) \leq X_i \leq ub(i), \quad i = 1, n, \end{aligned} \quad (163)$$

Onde X é um vetor de n variáveis. O número de restrições de igualdade (neq) pode ser zero. As funções g_i são consideradas diferenciáveis. As equações escritas na forma (163) são convertidas em restrições de igualdade adicionando-se variáveis de folga X_{n+1}, \dots, X_{n+m} , tal que:

$$\begin{aligned}
 & \text{Minimizar } F_{m+1}(X) \\
 & \text{Sujeito a: } h_i(X) - X_{n+1} = 0, \quad i = 1, m \\
 & \quad \quad \quad lb(i) \leq X_i \leq ub(i), \quad i = 1, n + m, \\
 & \quad \quad \quad lb(i) = ub(i) = 0, \quad i = n + 1, n + neq, \\
 & \quad \quad \quad lb(i) = 0, \quad i = n + neq + 1, n + m.
 \end{aligned} \tag{164}$$

Estas duas últimas equações de (164) são os limites para as variáveis de folga.

A expressão “gradiente reduzido” significa que o algoritmo GRG é inicializado com a substituição das restrições na função objetivo, reduzindo assim o número de variáveis e, conseqüentemente, de gradientes presentes. Dado um vetor viável x , então, fazendo-se a partição das variáveis em básicas (ou dependentes) e não-básicas (independentes), pode-se escrever que:

$$X = \begin{Bmatrix} Z \\ Y \end{Bmatrix} \tag{165}$$

Com Z representando as variáveis independentes ou não-básicas (gradiente reduzido na configuração irrestrita), e Y , representando as variáveis dependentes ou básicas (aquelas escritas usando os resultados de Z). Reescrevendo-se a função objetivo e as restrições em termos das variáveis básicas e não-básicas, vem que:

$$\begin{aligned}
 F(X) &= F(Z, Y) \\
 h(X) &= h(Z, Y)
 \end{aligned} \tag{166}$$

Usando a expansão em série de Taylor, e derivando-se a função objetivo e as restrições, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 dF(X) &= \nabla_z F(X)^T dZ + \nabla_y F(X)^T dY \\
 dh_j(X) &= \nabla_z h_j(X)^T dZ + \nabla_y h_j(X)^T dY
 \end{aligned} \tag{167}$$

Para atender à condição de otimalidade é necessário que $dh_j(X) = 0$, ou seja, as restrições ativas e viáveis permanecem neste estado. Então, definindo-se:

$$\begin{aligned}
 A &= \nabla_z h_j(X)^T; \quad e \quad B = \nabla_y h_j(X)^T \\
 dh_j(X) &= AdZ + BdY
 \end{aligned} \tag{168}$$

Assim, pode-se escrever: $dY = B^{-1}[dh_j(X) - AdZ] = -B^{-1}AdZ$. Esta é a relação entre as mudanças nas variáveis básicas e não-básicas. Substituindo-se esta expressão nas funções (167), tem-se que:

$$dF(X) = \nabla_z F(X)^T dZ + \nabla_y F(X)^T [-B^{-1}A]dZ$$

$$dF(X) = \left\{ (\nabla_z)^T F(X) + (\nabla_y)^T F(X) - [B^{-1}A]^T \right\} dZ \quad (169)$$

Nota-se claramente, que o problema restrito original se transformou em um problema irrestrito, escrito apenas em função de Z . Utilizando-se estes resultados, pode-se definir o gradiente como:

$$G_R = \frac{d}{dZ} F(X) = \nabla_z F(X) - [B^{-1}A]^T \nabla_y F(X)^T \quad (170)$$

Esta é a formulação para o Gradiente Reduzido Generalizado (GRG) baseado em uma aproximação linear. Com este equacionamento, a direção de busca pode ser escrita como

$$S_X = \begin{Bmatrix} S_Z \\ S_Y \end{Bmatrix}, \text{ com } S_Z = -G_R \text{ e } S_Y = dY. \text{ Para as iterações, deve se utilizar } X^{k+1} = X^k + \alpha S^{k+1},$$

verificando-se em cada passo se X^{k+1} é viável e se $h(X^{k+1}) = 0$. Em seguida, basta resolver $F(X)$ escrito em termos do multiplicador de Lagrange α . Para tanto, deve-se utilizar algum algoritmo unidimensional de busca, tal como o método de Newton.

4.9 – OTIMIZAÇÃO DE MÚLTIPLAS RESPOSTAS

Em grande parte dos produtos e processos, a qualidade não pode ser avaliada por apenas uma característica funcional do produto (Myers e Montgomery, 1995) e a análise individual de um experimento com múltiplas respostas podem conduzir a análise univariada a conclusões sem sentido (Khuri e Cornell, 1996).

A quase totalidade das pesquisas em otimização que utilizam alguma metodologia experimental para múltiplas respostas, trata 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.

Box et al. (1973) chamam a atenção sobre a possível existência de dependências em dados multivariados. Como é usual em análise de regressão, supõe-se que cada observação

possa ser expressa por dois termos: o valor esperado e o erro aleatório. Desse modo, três tipos de dependência podem surgir: (a) entre valores dos erros individuais, (b) entre os valores esperados das respostas ou (c) entre as respostas.

O caso (a) parece ser o mais geral. Por exemplo, ao se considerar a porosidade (y_1) e a resistência (y_2) de um material específico, pode-se argumentar que na medida em que o material é mais poroso ele tende a ter menor resistência (correlação negativa), mesmo considerando fixos os fatores controláveis do processo.

Sobre a dependência entre os valores esperados das respostas, Box et al. (1973) citam estudos onde se esperava alguns relacionamentos teóricos em cada ensaio. Estes relacionamentos esperados das respostas induzem dependências nos dados observados. Este tipo de dependência não deveria ser funcional devido à presença dos erros aleatórios. Contudo, se a análise for realizada sem se levar em conta tal relação, pode-se chegar a resultados sem sentido prático. Na construção dos modelos de regressão, os autores recomendam eliminar respostas que sejam (aproximadamente) combinações lineares de outras e sugerem um estudo prévio sobre os autovalores e autovetores da matriz de variâncias e covariâncias das respostas, para se identificarem possíveis relações lineares entre os valores esperados das respostas.

Esta relação de dependência linear pode ser identificada com a análise de autovalores e autovetores da matriz da soma de quadrados de resíduos dos dados $Sq = DD^T$ (Box et al, 1973; Khuri e Conlon, 1981). A matriz $[D]$ é formada pelos desvios (resíduos) das observações em relação à média. Se o conjunto multivariado possuir p respostas com n observações cada, pode-se escrever que:

$$D = \sum_{r=1}^p \sum_{i=1}^n (x_{ir} - \bar{x}_r)(x_{ir} - \bar{x}_r)^T \quad (171)$$

Considerando-se a matriz de variância-covariância Σ , nota-se que:

$$\Sigma = D(n_r - 1)^{-1} \quad (172)$$

Para dados medidos em escalas diferentes, Johnson e Wichern (2002) recomendam a utilização da matriz de correlação R no lugar de Σ . Assim, pode-se adaptar a proposta de Box et al. (1973), utilizando-se a análise de componentes principais.

A segunda maneira de se identificar as relações de dependência citadas, é avaliar a estrutura de correlação entre elas. Esta será a abordagem desta tese.

4.9.1 - Metodologia de Superfície de Resposta Múltipla

A Metodologia de Superfície de Resposta (MSR) foi desenvolvida para ser utilizada na otimização de variáveis de resposta ajustadas por um conjunto de valores de um determinado rol de fatores, adequado principalmente quando o relacionamento entre as variáveis é desconhecido. Segundo Osborne et al. (1997), embora esta metodologia tenha sido publicada pela primeira vez por Box e Wilson (1951), só foi considerada para otimizar múltiplas respostas alguns anos depois com o estudo de Hoerl (1959). Neste estudo, Hoerl (1959) descreveu duas abordagens possíveis de otimização para múltiplas respostas: uma primeira que combinava todas as funções de resposta em uma função objetivo única, obtida através da média ponderada das respostas originais; um segundo método previa a otimização de uma resposta principal sujeita às funções de restrição criadas pelas demais. Este ainda é o método sugerido por Montgomery (2001). Após a fixação de limites, cada resposta foi otimizada individualmente e utilizando-se gráficos de contorno sobrepostos.

Myers e Carter (1973) apresentaram uma estratégia que ficou conhecida como *Dual*, cujo objetivo era otimizar uma primeira resposta sujeita aos limites da segunda. O método era baseado no conceito de multiplicadores de Lagrange associado com a segunda resposta e seu respectivo valor alvo. Após combinar as duas funções, então, uma função singular seria, posteriormente, otimizada (Del Castillo et al., 1999; Tang e Xu (2002), Miró-Quesada e Del Castillo, 2004).

A seleção dos níveis dos parâmetros que otimizam um conjunto de múltiplas respostas simultaneamente é uma tarefa difícil (Ko et al, 2005). Segundo Jayaram e Ibrahim (1999), nos problemas com múltiplas respostas, o objetivo principal é satisfazer as condições desejadas de todas as respostas, enquanto se minimiza a variabilidade de todas elas simultaneamente. Uma correlação forte entre as respostas torna esta operação impossível. Neste caso, uma solução de compromisso é sempre a solução mais viável (Myers e Montgomery, 1995).

Uma estratégia bastante difundida para problemas de otimização múltipla tem sido o emprego da redução de dimensionalidade. Variadas técnicas têm sido empregadas na tentativa de converter um problema com múltiplas respostas em uma função singular e representativa

do conjunto multivariado, cuja otimização conduza a uma solução razoável para a maioria das respostas originais.

Neste contexto, o método mais utilizado é o *Desirability* (Wu, 2005; Harrington, 1965), que permite o ajuste dos formatos das funções individuais e dos pesos relativos de cada resposta (Derringer e Suich, 1980; Derringer, 1994). Esta função varia entre 0 e 1, dependendo do tipo de otimização desejada e da distância entre o valor ajustado pelo modelo de regressão OLS e os limites para a função (Kim e Jeong, 2003).

Uma vez obtidos todos os modelos do conjunto multivariado de respostas, a localização de uma condição de ótimo que atenda a todas as equações, ou pelo menos, à maioria delas, se torna um problema adicional, uma vez que a localização do ponto de ótimo individual raramente conduzirá a um ótimo geral.

Kros e Mastrangelo (2004) demonstram que quando se misturam respostas com sentidos diferentes de otimização, com a finalidade precípua de se obter uma função-objetivo singular para o conjunto multivariado, os modelos multiplicativos como o *Desirability*, são melhores que os modelos aditivos. Os autores advertem que a mistura de sentidos de otimização nos modelos aditivos pode desviar consideravelmente a resposta final dos valores alvo.

Uma outra abordagem para um conjunto de múltiplas respostas é a proposta por Khuri e Conlon (1981). Os aspectos particulares desta abordagem se iniciam com a identificação e posterior remoção de dependências lineares entre as respostas de interesse. Depois que as ℓ dependências lineares são retiradas, uma regressão múltipla é utilizada sobre as $m-\ell$ respostas remanescentes, originando-se um modelo de segunda ordem para as funções. Cada uma das $m-\ell$ funções é otimizada individualmente, produzindo um vetor de ótimos individuais Φ . Se todas as respostas estimadas alcançarem seus respectivos ótimos para uma mesma combinação de fatores, x^* , então o problema está resolvido. De outro modo, se isto não ocorrer, então uma solução de compromisso deve ser calculada usando a distância entre a resposta estimada e o correspondente valor de ótimo, tal que:

$$\rho[\hat{y}(x) - \phi] = \left[\frac{(\hat{y}(x) - \phi)^T \hat{\Sigma}^{-1} (\hat{y}(x) - \phi)}{z^T(x) (X^T X)^{-1} z(x)} \right]^{1/2} \quad (173)$$

Uma vez que \hat{y}_i são estimativas das funções de resposta, Khuri e Conlon estabelecem que ϕ_i são os resultados de uma variável aleatória. Portanto, a minimização imediata de

$\rho[\hat{y}(x) - \phi]$ pode conduzir a uma solução incorreta se for desconsiderada a aleatoriedade de ϕ . Para incorporar esta aleatoriedade, os pesquisadores introduzem, então, um intervalo de confiança para o ponto de ótimo verdadeiro para as $(m - \ell)$ respostas. O parâmetro ϕ é, então, trocado por um vetor aleatório ζ , e o mínimo de $\rho[\hat{y}(x) - \zeta]$ dentro do espaço experimental R não pode exceder o correspondente limite superior, determinado por:

$$\rho[\hat{y}(x) - \zeta] \leq \min_{x \in R} \left\{ \max_{\eta \in D_\zeta} \rho[\hat{y}(x), \eta] \right\} \quad (174)$$

Neste caso D_ζ é a região de confiança em torno de ζ , e η é um ponto em D_ζ . Segundo Khuri e Conlon (1981) e Osborne et al. (1997), os valores verdadeiros ζ_i estão cobertos pelo intervalo de confiança dado por:

$$\phi_i - g_i(X, \hat{\xi}_i) \sqrt{MS_{i,t\alpha/2,n-p}} \leq \zeta \leq \phi_i + g_i(X, \hat{\xi}_i) \sqrt{MS_{i,t\alpha/2,n-p}}, \quad i = 1, 2, \dots, (m - \ell), \quad (174)$$

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

$$g_i(X, \hat{\xi}_i) = \left[z^T(\hat{\xi}_i) (X^T X)^{-1} z(\hat{\xi}_i) \right]^{1/2} \quad (175)$$

O processo de otimização é realizado iterativamente em vários passos. A métrica de distância ρ é calculada utilizando o procedimento de busca randômica (*Random Search*) controlada de Price, conforme Osborne et al. (1997). Para cada x escolhido pelo algoritmo, ρ é maximizado com relação a η sobre D_ζ utilizando a técnica do gradiente restrito de Carroll (1961), baseado no método do vetor gradiente (*steepest ascent*) dentro da região de interesse, R . As soluções que fornecem os menores valores de ρ são selecionadas. A abordagem procura minimizar a distância do ponto ideal usando pesos gerados pela inversa da matriz de variância-covariância e os intervalos de confiança para o máximo ideal verdadeiro.

Rees et al. (1985) desenvolveram um método para otimização de múltiplas respostas envolvendo MSR e programação por objetivos (*Lexicographic Goal Programming*). Esta abordagem é considerada mais um enfoque de “atendimento” aos valores desejados do que de otimização, uma vez que, para cada resposta, é estabelecida uma amplitude para o valor

desejado. Um programa iterativo de otimização é iniciado com a função de resposta de mais alta prioridade. Isto é seguido pela porção satisfatória que examina cada subsequente resposta para se determinar o ótimo, sujeita às restrições de não existência de amplitude para os valores alvo de cada uma das respostas de mais alta prioridade. Obviamente, este programa necessita de algum algoritmo de auxílio na tomada de decisões para se determinar as prioridades de cada resposta e se identificar os valores objetivos adequados a cada função de resposta.

4.10 – O Método *Desirability*

Para tratar o problema das respostas múltiplas, Derringer e Suich (1980) criaram uma estratégia eficiente de otimização simultânea. O algoritmo criado originalmente por Harrington (1965) e, posteriormente aprimorado pelos pesquisadores, foi denominado de *Desirability* (por não se achar adequado, preferiu-se não se traduzir esta expressão).

Segundo Van Gysegem et al. (2004), o *Desirability* é um método multicritério capaz de avaliar um conjunto de resposta simultaneamente, e que permite a determinação do conjunto de condições mais desejável para as propriedades estudadas.

O princípio é bastante simples: primeiro, deve se estabelecer um relacionamento entre as respostas e as variáveis independentes. Em geral, isto pode ser feito utilizando MSR e OLS. Então, usando a formulação de Harrington (unilateral ou bilateral), cada uma das respostas do conjunto original é transformada, tal que d_i pertença ao intervalo $0 \leq d_i \leq 1$. O valor de d_i aumenta quando a i -ésima resposta se aproxima dos limites impostos.

Combinando as respostas transformadas através de uma média geométrica, encontra-se o índice global D , tal como descreve a equação (176):

$$D = (d_1(Y_1).d_2(Y_2)...d_k(Y_k))^{\frac{1}{k}} \quad (176)$$

O valor de D avalia de maneira geral os níveis do conjunto combinado de respostas. O índice global D também pertence ao intervalo $[0, 1]$ e será maximizado quando todas as respostas se aproximarem o máximo possível de suas especificações. Segundo Osborne et al. (1997) e Rossi (2001), quanto mais próximo de 1 estiver D , mais próximas as respostas originais estarão dos seus respectivos limites de especificação. O ponto de ótimo geral do

sistema é o ponto de ótimo alcançado pela maximização da média geométrica (equação 176), calculada a partir das funções *desirability* individuais.

A utilização da média geométrica tem a vantagem de fazer com que a solução global seja alcançada de maneira balanceada, permitindo que todas as respostas atinjam os valores esperados e forçando o algoritmo a se aproximar das especificações impostas. Caso isto não seja possível, o algoritmo retorna uma solução inviável (e indesejável) para o problema. Na essência, este método condensa um problema de otimização multivariada em um problema univariado. A desvantagem, segundo Khuri e Conlon (1981), é que nesta transformação, a estrutura de variância-covariância das respostas é totalmente ignorada. Outra desvantagem do método segundo Ortiz et al. (2004), é o aumento da não linearidade de D à medida que se considera um número maior de variáveis de respostas. Neste caso, o método pode conduzir a localização de ótimos locais apenas.

O algoritmo de Derringer e Suich (1980) depende do tipo de otimização desejada para a resposta (maximização, normalização ou minimização), dos limites (valores desejados) e das respectivas importâncias de cada resposta, tal como estabelecido pelos Quadros 4.3 e 4.4.

De acordo com Wu (2005) e Murphy et al. (2005), quando se deseja a maximização de uma resposta, a fórmula de transformação empregada é:

$$d_i = \begin{cases} 0 & \hat{Y}_i < LSL \\ \left[\frac{\hat{Y}_i - L_i}{T_i - L_i} \right]^R & L_i \leq \hat{Y}_i \leq T_i \\ 1 & \hat{Y}_i > T_i \end{cases} \quad (177)$$

Onde: L_i e T_i são, respectivamente, o maior e o menor valor aceitáveis para a i -ésima resposta.

O valor de R na equação (177) indica a preponderância dos limites. Valores maiores que a unidade devem ser usados quando a resposta cresce rapidamente acima de L_i . Portanto, d_i aumenta vagarosamente, enquanto o valor da resposta vai sendo maximizado. Logo, para se maximizar D , a i -ésima resposta deve ser bem maior que L_i . Pode-se escolher $R < 1$, quando não for crítico se encontrar valores para a resposta abaixo dos limites fixados.

Quadro 4.3 - Objetivos de otimização no Método de Derringer.

Objetivo	Características	Representação Esquemática
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, $d = 0$	
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 $d = 1$.	
Maximizar	O valor da função <i>desirability</i> aumenta quando o valor da resposta aumenta. Abaixo do limite inferior, $d = 0$; acima do alvo, $d = 1$.	

Quadro 4.4 - Relações de importância entre o Alvo e os Limites no *Desirability*.

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

De outro modo, quando for necessário se minimizar a resposta, a função de transformação será dada por:

$$d_i = \begin{cases} 0 & \hat{Y}_i > LSL \\ \left[\frac{Hi - \hat{Y}_i}{Hi - Ti} \right]^R & Li \leq \hat{Y}_i \leq Ti \\ 1 & \hat{Y}_i < Ti \end{cases} \quad (178)$$

Onde: Hi é valor aceitável mais alto para a i -ésima resposta.

As transformações bilaterais ocorrem quando a resposta de interesse possui duas restrições: uma de máximo e outra de mínimo. Este é o caso onde se deseja atingir um valor alvo. Para este caso a formula de transformação é:

$$d_i = \begin{cases} \left[\frac{\hat{Y}_i - Li}{Ti - Li} \right]^R & Li \leq \hat{Y}_i \leq Ti \\ \left[\frac{Hi - \hat{Y}_i}{Hi - Ti} \right]^R & Ti \leq \hat{Y}_i \leq Hi \\ 0 & \hat{Y}_i < Li \text{ or } \hat{Y}_i > Hi \end{cases} \quad (179)$$

A equação (176) é somente empregada quando todas as respostas têm a mesma importância, caso contrário, deve-se utilizar a equação (180).

$$D = \left[\prod_{i=1}^n d_i^{w_i}(\hat{Y}_i) \right]^{\frac{1}{W}} \quad (180)$$

Onde: w_i são graus de importância individuais e W , a sua soma.

4.11 – CONSIDERAÇÕES FINAIS DO CAPÍTULO

Neste capítulo discutiu-se a maneira como diferentes métodos estatísticos são utilizados para resolver problemas de modelagem de fenômenos representados por múltiplas respostas correlacionadas. Foram apresentadas as deduções matemáticas, as principais estatísticas de teste, as vantagens e as desvantagens de cada um dos métodos, além dos principais arranjos experimentais disponíveis.

Uma vez discutidos os algoritmos de obtenção das funções-objetivo e restrições, apresentou-se um breve relato sobre alguns métodos de otimização múltipla.

No capítulo anterior, foram apresentadas duas características da Análise de Componentes Principais (ACP), particularmente interessantes para a otimização múltipla: (a) a redução de dimensionalidade e (b) o controle da correlação. Confrontando-se estes enfoques, vislumbra-se uma nova abordagem para os problemas com múltiplas respostas correlacionadas. Se não se desejar a utilização de modelos SUR ou MVR, a aplicação do modelo OLS pode se adequada, desde que as respostas originais sejam transformadas em novas variáveis, essencialmente não correlacionadas, tais como os escores dos componentes principais. Assim, o modelo criado estaria isento das influências das correlações residuais sobre a estimação dos coeficientes do modelo de otimização, diminuindo, neste caso, o erro na determinação ou previsão do ponto de ótimo.

Combinando-se estes elementos, o próximo capítulo tratará de uma proposta alternativa híbrida que seja capaz de gerar modelos corretos, do ponto de vista da dependência dos resíduos, ao passo em que consiga reduzir a dimensão do conjunto original de respostas.

Capítulo 5

OTIMIZAÇÃO BASEADA EM COMPONENTES PRINCIPAIS

5.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Nos capítulos anteriores, foram discutidos os conceitos fundamentais e necessários para a criação de um método de otimização que seja compatível com a natureza multivariada dos conjuntos de múltiplas respostas.

No capítulo 1, apresentou-se uma visão geral da natureza multivariada dos processos de soldagem, mostrando porque as características de qualidade destes processos apresentam correlações significativas e fortes. Isto de certa forma caracteriza os processos de soldagem como problemas adequados para a aplicação do enfoque estatístico multivariado.

No capítulo 2, mostrou-se a existência de algumas lacunas nos métodos de otimização múltipla, principalmente quando se trata de um conjunto de múltiplas respostas correlacionadas. Verificou-se que, mesmo as propostas multivariadas existentes, carecem de complementação e de soluções inovadoras para uma série de indagações. Embora não se queira exaurir o assunto, as oportunidades encontradas durante a análise crítica da literatura apontam para a necessidade de uma nova abordagem que seja o quanto possível, mais coerente.

Nos capítulos 3 e 4, foi discutida a teoria que envolve a otimização de processos com múltiplas respostas correlacionadas. A revisão teórica sobre a Análise de Componentes

Principais (ACP), a Metodologia de Superfície de Resposta (MSR), os métodos de aproximação de funções (OLS, WLS, SUR, MVR), os métodos de otimização (GRG) e a análise de *Ridge*.

Considerando-se o problema de pesquisa, as potencialidades e as limitações das técnicas descritas nos capítulos anteriores, o presente capítulo apresentará uma proposta híbrida e multivariada para a metodologia de superfície de resposta, baseando-se na análise de componentes principais e empregando-se o método dos mínimos quadrados ordinários.

5.2 – A PROPOSTA MULTIVARIADA

Nos capítulos anteriores, mostrou-se que o método dos mínimos quadrados ordinários (OLS) falha quando o conjunto de respostas contém correlações altas e significativas. Mostrou-se também, que o tradicional e popular método de otimização múltipla *Desirability* não leva em consideração as estruturas de correlação. Como, em geral, o método *desirability* utiliza funções modeladas por OLS, quando houver a necessidade de se aplicar uma otimização múltipla de um conjunto com respostas correlacionadas, o erro na determinação do ponto de ótimo pode ser grande. Como não se deseja aplicar o método *desirability* modificado (Wu e Hamada, 2000; Wu, 2005) o método de Khuri e Conlon (1981), e nem tão pouco, modelar as funções usando os métodos SUR ou MVR, esta tese apresenta a seguinte proposta:

Utilizar o método dos mínimos quadrados ordinários (OLS) considerando como variável dependente o escore do primeiro componente principal (PC_1) e como variáveis independentes, os fatores experimentais envolvidos, tal que $PC_1 = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$. Como os arranjos experimentais propostos são do tipo *Superfície de Resposta*, a regressão utilizada conduzirá a um modelo quadrático completo (Eq. 80). A análise estatística da significância dos coeficientes poderá conduzir à eliminação dos termos não significativos, conduzindo ao estabelecimento de um modelo quadrático reduzido. Quando um único componente principal não for suficiente para explicar a maior parte da variância do conjunto original, o método OLS poderá ser empregado utilizando-se como variável dependente um índice ponderado (IGM) formado pelos escores dos componentes principais significativos. A ponderação dos escores dos componentes principais significativos se dará pelos seus respectivos autovalores. Para se determinar quais componentes principais devem compor o índice proposto, recomenda-se o emprego dos testes estatísticos descritos no item 3.5 (equações 60 a 67). No

Apêndice C desta pesquisa, há um programa escrito em Matlab 6.5® que pode auxiliar nesta tarefa.

Para encontrar o ponto de ótimo, aplicar o método de otimização não-linear com restrições do Gradiente Reduzido Generalizado (GRG) ao modelo quadrático (completo ou reduzido) dos componentes principais ou do índice ponderado, considerando a restrição do espaço experimental Ω . Eventualmente, restrições adicionais poderão ser consideradas.

Para a finalidade desta tese, a ACP apresenta duas vantagens sobre outras técnicas. A primeira é a capacidade de gerar variáveis de saída para os modelos de regressão que sejam independentes. É interessante lembrar que esta independência é obtida utilizando-se a relação de dependência representada pelas correlações. Da equação (37) do capítulo 3, vem que, por definição, $Cov(Y_i, Y_k) = e_i^T \Sigma e_k = 0 \quad i \neq k$, ou seja, os componentes principais não têm correlação entre si.

A segunda vantagem da ACP é a possibilidade de gerar uma função representativa do conjunto de respostas. Uma prática muito comum na otimização múltipla é buscar uma função singular que condense todas as funções objetivo. É justamente isto que propõe o método *desirability*. Como demonstrado no capítulo 3, é justamente isto que a ACP faz. O primeiro componente principal é a combinação linear das respostas originais que tem máxima variância e que não mantém correlação com outros componentes, como descrevem as equações (36) e (37). Quando um único componente principal não é suficiente para representar uma grande parte da variação do conjunto original, outros componentes menores devem ser usados. Como o que se deseja é uma função singular que combine múltiplas respostas, neste caso haverá a necessidade de se adotar um modelo aditivo ponderado. Esta ponderação deve basear-se na importância de cada componente principal, que pode ser representada pelo respectivo autovalor da matriz de correlação ou covariância. No caso específico dos processos de soldagem, que possuem unidades de medida diferentes, utilizar-se-á a matriz de correlação.

Uma vez estabelecido o escore do primeiro componente principal (PC_1) descrito pela equação (59) ou a função aditiva ponderada, aplica-se sobre os resultados o método de regressão OLS. No caso dos arranjos de superfície de resposta, PC_1 ou o modelo aditivo ponderado serão funções dos fatores experimentais.

Utilizando-se a equação resultante como uma função objetivo, pode-se encontrar o respectivo ponto de ótimo utilizando-se um algoritmo não-linear tal como o GRG. Adicionalmente, para evitar que a solução ótima caia fora da região experimental Ω , deve-se

aplicar uma restrição esférica ou cuboidal, de acordo com o tipo de arranjo experimental utilizado. Outras restrições também poderão ser adicionadas.

5.2.1 - Algumas Particularidades do Método

Quando Bratchell (1989) empregou a abordagem multivariada para avaliar um arranjo de projeto de experimentos, ele apontou uma série de desvantagens e dificuldades do método, entre as quais se destacam: (a) a insuficiência de representação do primeiro componente principal, (b) a possibilidade de conflito de sentidos de otimização entre o primeiro componente principal e as variáveis originais, (c) a representação pobre ocasionada pela pequena estrutura de correlação entre os dados e (d) como incluir ou representar a informação contida nos componentes principais menores.

Além destas questões, agrega-se ao problema de pesquisa uma outra particularidade observada durante a realização desta tese: como transportar para os componentes principais, os limites de especificação das variáveis originais? Uma vez que um componente principal é uma variável latente (não observada) e adimensional, é difícil em um primeiro momento se visualizar tal equivalência.

Uma outra dificuldade levantada durante esta pesquisa trata das direções de otimização. Como definir o sentido de otimização de uma equação em termos dos componentes principais que reflita o sentido esperado pelas funções originais?

Além dos sentidos de maximização e minimização, um problema também insurgente é o das funções bilaterais, ou com duas especificações. Em geral, este tipo de problema é abordado como uma normalização, e utiliza algoritmos que forcem uma solução a cair dentro do intervalo formado pelas especificações.

Uma vez aplicada a transformação das respostas originais através da análise de componentes principais, estabelece-se um conjunto novo de variáveis (componentes principais) que descrevem o comportamento do conjunto original como um todo. Desse modo, também é necessário se estabelecer um sistema de relações entre os componentes principais e as variáveis originais, de maneira a se equacionar os sentidos de otimização.

Nos próximos itens, serão apresentadas algumas respostas possíveis a estas indagações.

5.2.2 – Índice Multivariado

O principal problema abordado por esta pesquisa é o estabelecimento de um procedimento que seja capaz de contornar o aspecto da insuficiência de representação do primeiro componente principal. Embora em alguns casos, a equação de PC_1 seja suficiente, em muitos outros a explicação deste componente não é condizente com a estrutura de correlação. Para os casos, portanto, onde PC_1 não tiver uma representatividade hegemônica, outros componentes principais menores deverão ser utilizados em conjunto com PC_1 .

Como proposta, recomenda-se que se mantenham apenas os componentes principais significativos, ou seja, aqueles componentes que apresentem autovalores maiores do que 1 e/ou que em conjunto, representem 80% da estrutura de variação das respostas originais ou mais. Para confirmar que componentes principais devem integrar a função aditiva ponderada, pode-se empregar os testes de hipótese e os índices fornecidos pelas equações de (60) a (67). Um programa constante do Apêndice C desta tese foi desenvolvido em Matlab 6.5® para realizar os cálculos referentes a estas equações.

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. Avaliando-se a equação (44), nota-se que estas duas opções são similares. O resultado desta ponderação será denominado de “Índice Global Multivariado – (IGM)” e pode ser escrito matematicamente como:

$$IGM = \sum_{i=1}^m [\lambda_i(PC_{S_i})] \quad (181)$$

Onde: m = número de componentes principais significativos, λ_i = i -ésimo autovalor e PC_{S_i} = i -ésimo escore de componente principal.

Considerando-se a explicação acumulada e não os autovalores associados a cada componente principal significativo, o IGM poderá ser escrito como:

$$IGM = \sum_{i=1}^m \left[\frac{\lambda_i}{\left(\sum_{j=1}^p \lambda_j \right)} \cdot (PC_{S_i}) \right] \quad (182)$$

Onde: m = número de componentes principais significativos, λ_i = i -ésimo autovalor e PCs_i = i -ésimo escore de componente principal.

No próximo capítulo, alguns estudos de caso serão utilizados para avaliar se esta proposta é consistente.

5.2.3 - Dirimindo Conflitos no Sentido de Otimização

Um dos problemas de pesquisa abordados por esta tese é a de se fixar direções de otimização para os maiores escores dos componentes principais que sejam condizentes com o sentido de otimização exigido pelas variáveis originais. Apesar dos componentes principais serem variáveis latentes não-correlacionadas, eles também mantêm correlações distintas com as variáveis que as originaram, tal como descreve a equação (46). É muito provável que um componente principal só mantenha correlação significativa com um dado grupo de variáveis, sem sobreposição, ou seja, dificilmente dois componentes principais terão correlações fortes e significativas com as mesmas variáveis. Porém, como saber com que grupo de respostas um PC está relacionado? Para isto sugere-se o emprego de uma das seguintes técnicas estatísticas multivariadas.

- a) Análise de Fator
- b) Cluster Hierárquico baseado nas correlações;
- c) Cluster Hierárquico baseado nos valores de t-student;
- d) Análise de correlações.

Descoberto o melhor agrupamento de variáveis, basta observar o sentido da correlação existente entre elas. Assim, por exemplo, se PC_1 mantiver correlação negativa com algumas variáveis, e se desejar minimizá-las, então a maximização de PC_1 conduz à minimização das mesmas. Se o sentido, porém, for conflitante, deve-se recorrer a uma inversão da superfície de resposta, tal como mostra a figura 5.1. Segundo demonstram Nash e Sofer (1996), não há diferenças fundamentais entre minimização e maximização, uma vez que:

$$\max [f(x)] = \min [-f(x)] \quad (183)$$

A condição necessária para que x_* seja um máximo local é que $\nabla f(x_*) = 0$ e a matriz hessiana $\nabla^2 f(x_*) = 0$. Estas serão condições suficientes se a hessiana for negativa semi-definida.

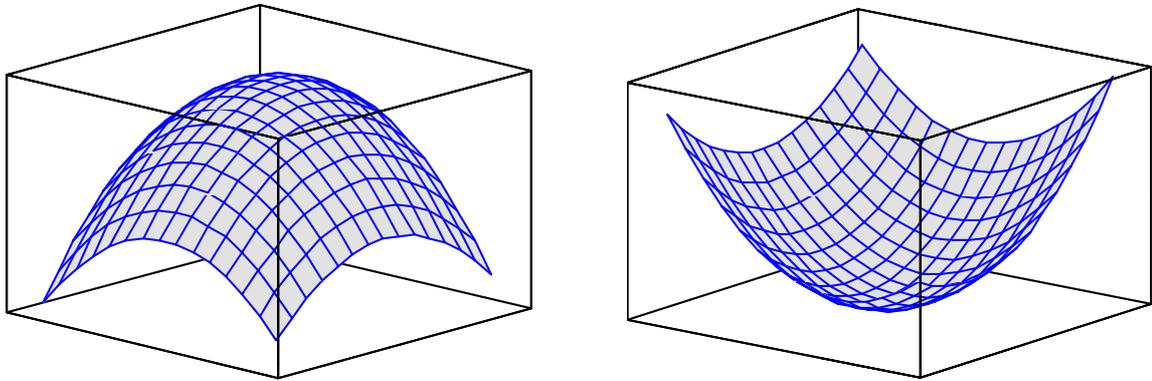


Figura 5.1 – Superfícies de Respostas de $f(x)$ e $-f(x)$.

Assim, se a correlação entre PC_1 (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.

Uma outra alternativa plausível é aplicar-se a relação Sinal-Ruído de Taguchi (Wu, 2005). De acordo com Antony (2000), uma maneira de se adequar os sentidos de otimização de cada resposta é utilizar uma função matemática que transforme todas as variáveis do conjunto de interesse em variáveis que devam ser maximizadas. Para maximização, esta função é dada por:

$$S/R = -10 \log \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{y^2} \right] \quad (183a)$$

Analogamente, no caso em que se deva minimizar a resposta original, a relação Sinal-ruído é escrita como:

$$S/R = -10 \log \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y^2 \right] \quad (183b)$$

Como as relações Sinal-ruído (SR_i) de Taguchi devem ser sempre maximizadas, com este artifício é possível harmonizar os diferentes sentidos de otimização. Em seguida, pode-se padronizar as respostas transformadas com a conseguinte obtenção dos adequados componentes principais.

As figuras 5.2, 5.3 e 5.4 do item 5.3 apresentam fluxogramas destes procedimentos.

5.3 DESCRIÇÃO DO MÉTODO

Como foi apresentado na seção anterior, existem várias estratégias possíveis para se aplicar a abordagem multivariada a problemas de otimização de múltiplas respostas correlacionadas. Para proporcionar uma visão geral sobre o método ora proposto, foram construídos alguns fluxogramas do processo de otimização multivariada. Acredita-se que os passos estabelecidos promovam a obtenção de um ponto de ótimo mais coerente com a natureza multivariada dos dados originais.

Nestes fluxogramas, a letra “A” indica que a etapa do método deve ser executada empregando-se um software estatístico. Nesta tese, utilizou-se o Minitab 14®; entretanto, outros softwares estatísticos também disponibilizam módulos dedicados à construção e análise de arranjos experimentais, tais como o SAS, JMP, SPSS e STATISTICA.

A letra “B” indica que o método deve ser utilizado, empregando-se alguma rotina computacional que realize testes de hipótese multivariados, além do cálculo de alguns índices de mensuração da correlação. A finalidade desta fase do método é avaliar a possibilidade da redução de dimensionalidade e verificar se a estrutura de correlação existente é compatível com a utilização da Análise de Componentes Principais. Nesta tese especificamente, foi utilizado um programa especialmente criado para esta tese. Este programa, que consta da seção de anexos, foi construído em ambiente Matlab 6.5®.

Por fim, a letra “C”, faz menção ao processo de otimização das funções objetivo multivariadas e não-lineares, dotadas de restrição também não lineares. Para resolver o problema de otimização através do algoritmo GRG, utilizou-se o aplicativo SOLVER do software MS-Excel®. Outros softwares como o LINDO, LINGO, MATHEMATICA e MATLAB, também são capazes de fazer tal avaliação.

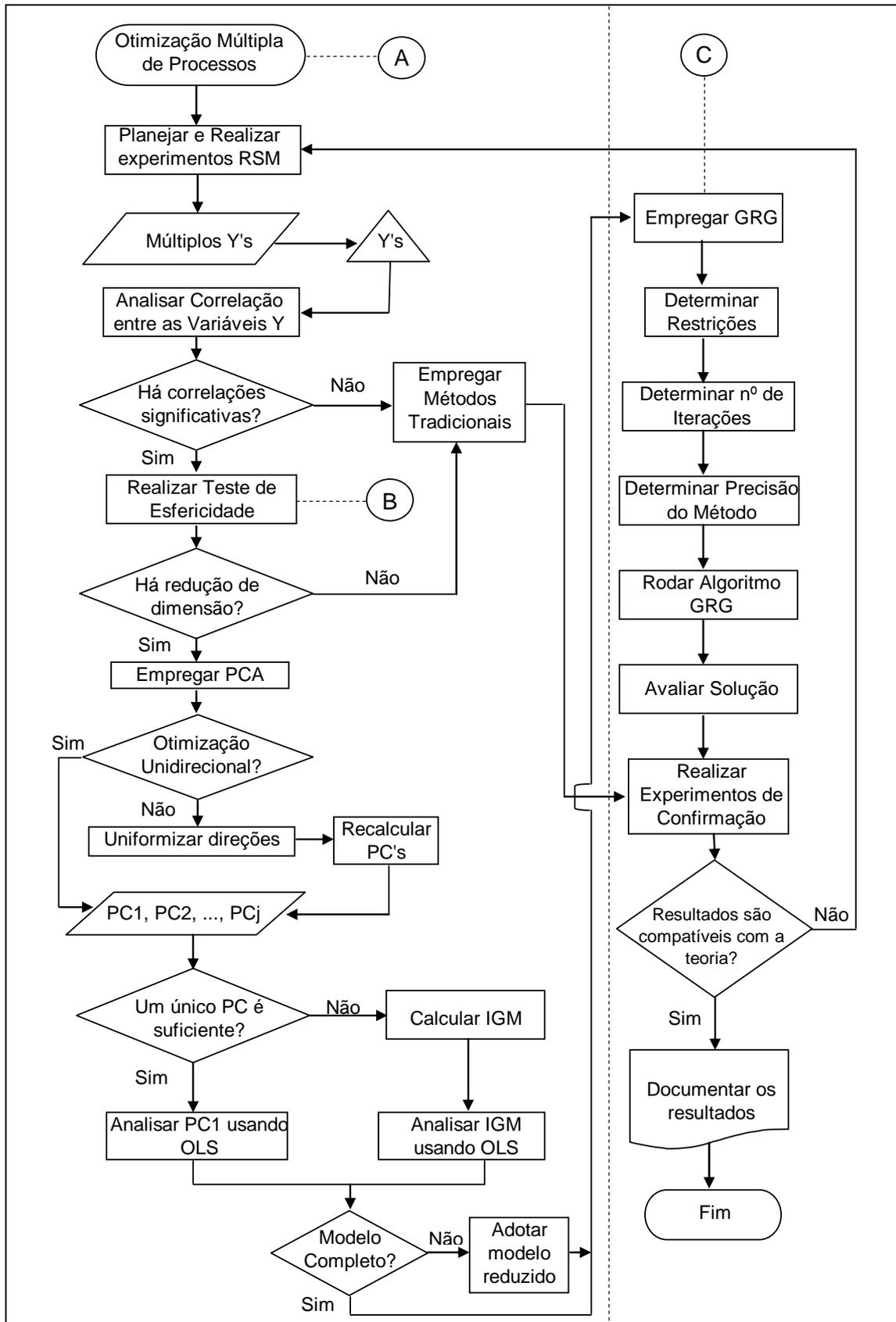


Figura 5.2 – Fluxograma do método de otimização múltipla proposto.

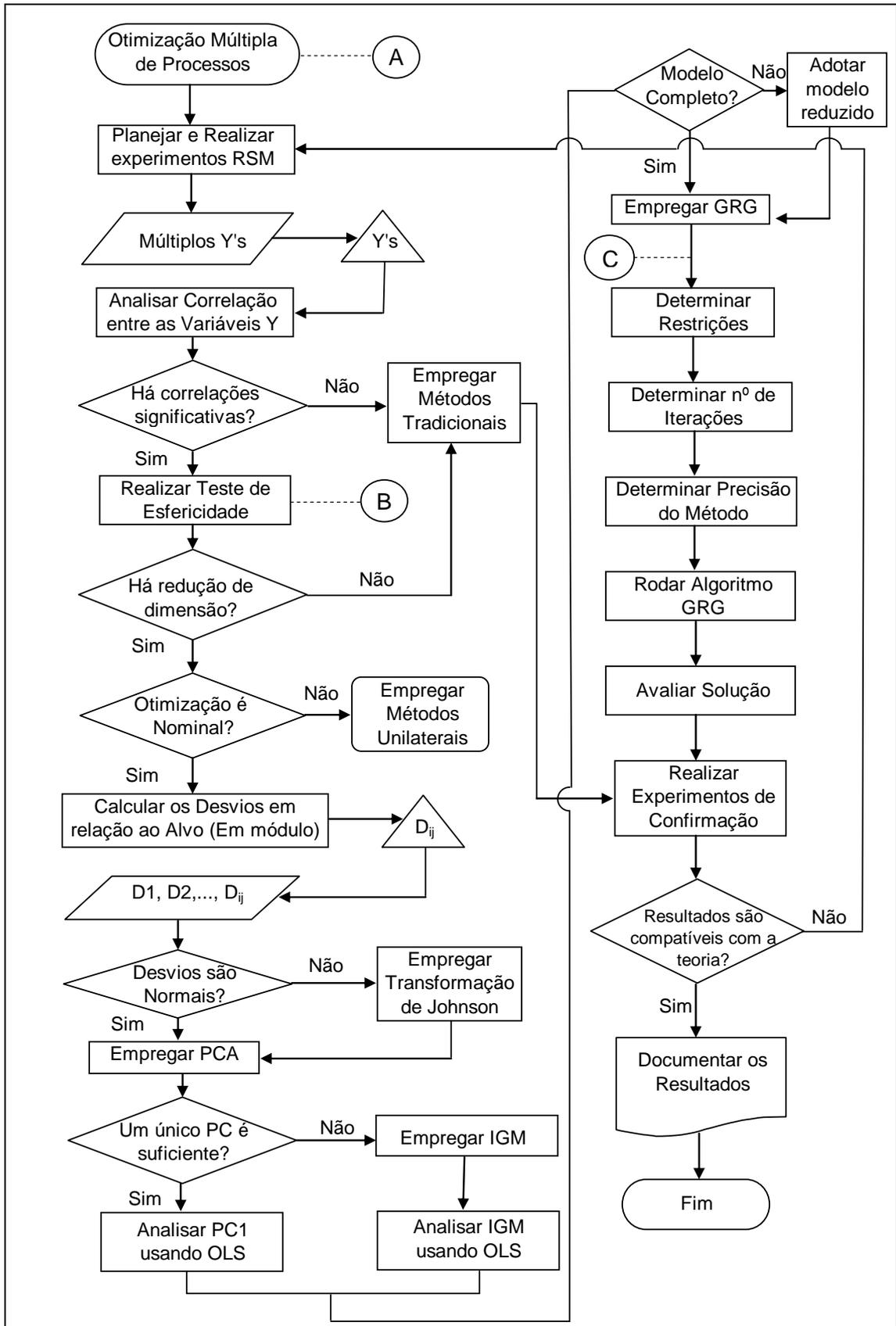


Figura 5.3 – Fluxograma do método adotado para problemas do tipo **Nominal-melhor**.

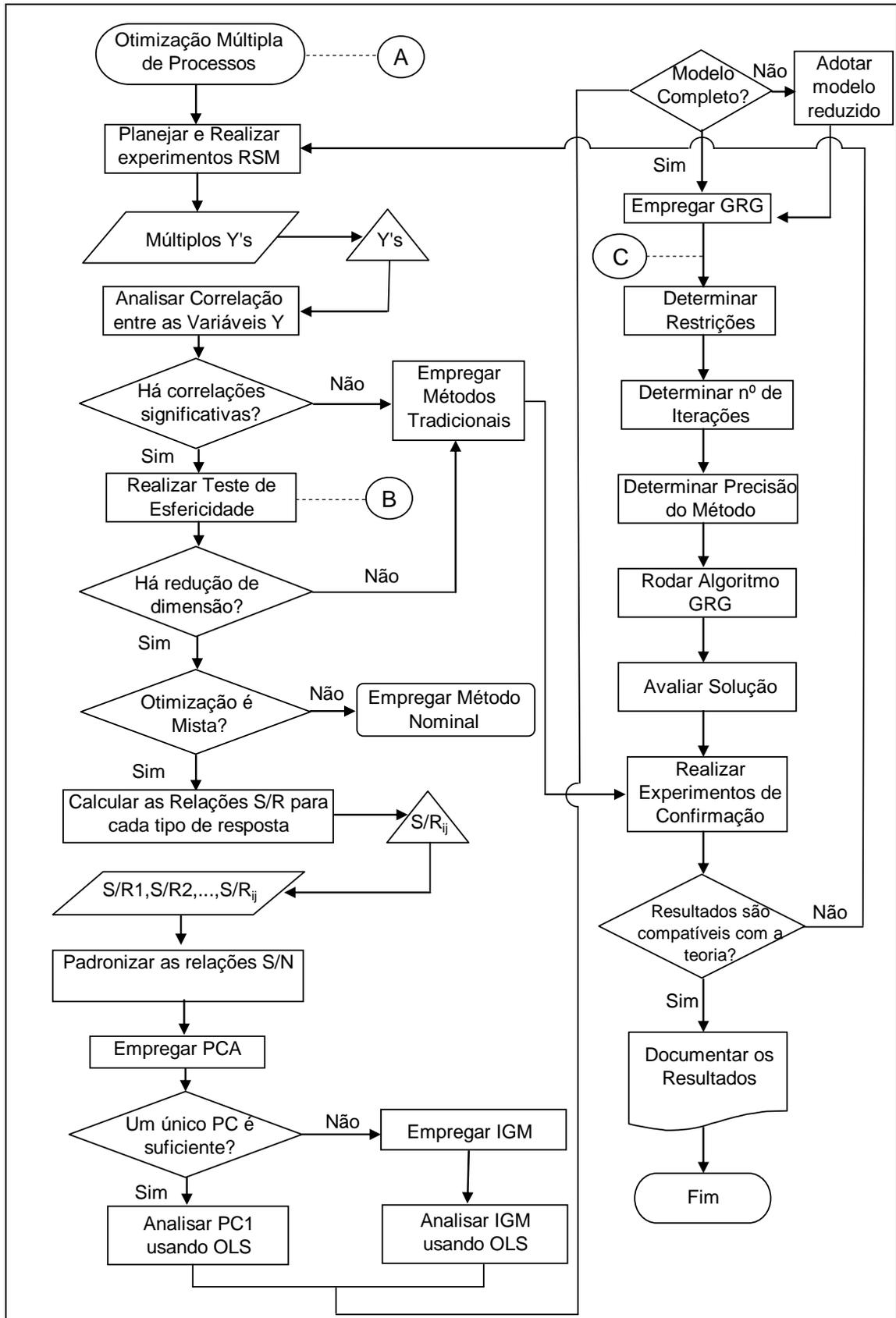


Figura 5.4 – Fluxograma do método adotado para problemas Mistos.

5.3.1 - Otimização com Restrições para as Respostas

O método proposto até agora apresentou apenas alternativas para otimização múltipla irrestrita. Porém, se algumas (ou todas) respostas contiverem restrições explícitas, propõe-se a abordagem adotada por Guanaraj e Murugan (2000) em um problema de otimização não-linear com restrições. Esta abordagem discute a inclusão das restrições na própria função objetivo. Desse modo, nas respostas a serem maximizadas deverão ser adicionados os respectivos limites inferiores, enquanto que, naquelas a serem minimizadas, subtrair-se-ão os respectivos limites superiores. Para os problemas de normalização (aqueles nos quais se deseja um valor alvo) a abordagem possível é a adoção da diferença entre a resposta estimada (\hat{Y}) e o valor do alvo (T). Também é possível se adotar duas equações complementares, uma considerando o limite superior e outra o inferior. A particularidade desta última opção é que, ao serem criadas duas equações distintas através das respectivas adição e subtração dos limites, o conjunto original passará a exibir uma dependência linear (correlação perfeita, $\rho = 1$), independentemente dos valores assumidos pelas constantes. Este artifício torna a abordagem por ACP ainda mais adequada. As outras duas opções seriam: (a) adotar a minimização de $|Y - T|$ ou (b) de $(Y - T)^2$, onde Y é o resultado experimental e T é o valor do alvo. Entretanto, adotando-se o módulo ou o quadrado das diferenças conforme sugerido, uma alteração suficientemente grande na estrutura de correlação e covariância dos dados originais ocorrerá; em algumas situações, uma correlação extremamente forte pode ser extinta com estes dois tipos de transformação.

5.3.2 - Como Introduzir Limites nas Equações

Em um primeiro momento, pode soar estranho que a adição ou a subtração de uma constante ao modelo de regressão polinomial seja algo natural e que não altere substancialmente toda a análise promovida em função do mesmo. Entretanto, cabe ressaltar aqui a base da teoria de Projeto de Experimentos.

Segundo Box et al (1978), o efeito de um fator é a mudança causada na resposta de um experimento quando se altera de -1 para $+1$ o nível de um fator. De maneira semelhante, o coeficiente de um fator é a mudança causada na resposta de um experimento quando um fator se altera de -1 para 0 , ou de 0 para $+1$, ou seja, os efeitos e os coeficientes são determinados meramente em função de um incremento ou decréscimo sofrido pela resposta. Portanto, se a

cada observação do arranjo for adicionada ou subtraída uma mesma constante, apenas o termo independente receberá a influência dessa alteração. Desse modo, quando for necessário se adicionar ou subtrair uma restrição, basta adicioná-la ou removê-la dos resultados do experimento.

Como pode ser demonstrado, com estas alterações tanto a matriz de correlação quanto os autovalores, seus respectivos autovetores e os escores dos componentes principais se mantêm os mesmos. Contudo, quando se adicionar uma dependência linear no sistema de equações, então haverá modificação nos escores.

5.3.2.1 - Demonstração

Considere que uma variável aleatória simples, X_1 , seja multiplicada por uma constante k , então, o valor esperado de X_1 , será dado por:

$$E(kX_1) = k.E(X_1) = k\mu_1 \quad (184)$$

$$Var(kX_1) = E(kX_1 - k\mu_1)^2 = k^2 Var(X_1) = k^2 \sigma_{11} \quad (185)$$

Se X_2 é uma segunda variável aleatória e se a e b são constantes não nulas, então, usando a propriedade da adição na expectância, vem que:

$$\begin{aligned} Cov(aX_1, bX_2) &= E(aX_1 - a\mu_1)(bX_2 - b\mu_2) \\ &= abE(X_1 - \mu_1)(X_2 - \mu_2) \\ &= abCov(X_1, X_2) \end{aligned} \quad (186)$$

Considerando-se:

$$E(aX_1) = aE(X_1) = a\mu_1 \quad (187 \text{ a})$$

$$E(bX_2) = bE(X_2) = b\mu_2 \quad (187 \text{ b})$$

Então:

$$\begin{aligned} Var(aX_1 + bX_2) &= E[(aX_1 + bX_2) - (a\mu_1 + b\mu_2)]^2 \\ &= E[(aX_1 - a\mu_1) + (bX_2 - b\mu_2)]^2 \\ &= E[a^2(X_1 - \mu_1)^2 + b^2(X_2 - \mu_2)^2 + 2ab(X_1 - \mu_1)(X_2 - \mu_2)] \\ &= [a^2 Var(X_1) + b^2 Var(X_2) + 2abCov(X_1, X_2)] \\ &= a^2 \sigma_{11} + b^2 \sigma_{22} + 2ab \sigma_{12} \end{aligned}$$

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

$$\begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = c^T X \quad (188)$$

Analogamente, $E(aX_1 + bX_2) = a\mu_1 + b\mu_2$, se torna:

$$\begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} = c^T \mu \quad (189)$$

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

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{bmatrix}$$

Então, a variância da combinação linear poderá ser escrita como:

$$\text{Var}(aX_1 + bX_2) = \text{Var}(c^T X) = c^T \Sigma c \quad (190)$$

Desde que:

$$\begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a^2 \sigma_{11} + 2ab \sigma_{12} + b^2 \sigma_{22} \quad (191)$$

Os resultados anteriores podem ser estendidos para uma combinação linear de p variáveis aleatórias.

Nota-se, portanto, que se ambas as constantes a e b assumirem simultaneamente o valor (-1), em nada se alterarão as expressões de variância e covariância; por conseguinte, os autovalores e autovetores se manterão.

Fazendo-se, porém, $a = (-1)$ e $b = (+1)$ em (186), obtém-se:

$$\begin{aligned} \text{Cov}(aX_1, bX_2) &= E(aX_1 - a\mu_1)(bX_2 - b\mu_2) = abE(X_1 - \mu_1)(X_2 - \mu_2) = \\ &= -E(X_1 - \mu_1)(X_2 - \mu_2) \\ \text{Cov}(aX_1, bX_2) &= -\sigma_{12} \end{aligned} \quad (192)$$

Da definição de autovalores e autovetores da matriz de correlação vem:

$$\Sigma X = \lambda X \Rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{21} \end{bmatrix} \quad (193)$$

Realizando-se a multiplicação matricial e considerando $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$, pode-se escrever:

$$\begin{cases} \sigma_{11}e_{11} + \sigma_{12}e_{21} = e_{11} \\ \sigma_{12}e_{11} + \sigma_{22}e_{21} = e_{21} \\ e_{11}^2 + e_{21}^2 = 1 \end{cases}$$

Se Σ contiver apenas correlações positivas, então:

$$e_{21} = e_{11} \frac{(1 - \sigma_{11})}{\sigma_{12}} > 0 \quad (194)$$

Ao contrário, ao se multiplicar Y_1 (ou Y_2) por (-1), então, $\sigma_{12} < 0$ e, $e_{21} < 0$.

Uma outra maneira de se demonstrar que a inversão de sinais altera os autovetores é utilizando-se a definição de correlação segundo Johnson e Wichern (2002), e empregando-se

a equação (46) do capítulo 3, onde: $\rho_{Y_i, Y_k} = \frac{e_{ki} \sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}}$. Como λ_i e σ_{kk} são sempre positivos,

quando a correlação entre as respostas (ρ_{Y_i, Y_k}), for negativa, então, $e_{ki} < 0$.

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 representar os pesos das respostas, $c^T X$ representará uma matriz ponderada do conjunto multivariado. Portanto, qualquer ponderação de respostas só é recomendada neste método, posteriormente à transformação por componentes principais.

Examinando-se a influência das adições ou subtrações de constantes, tem-se que:

$$E(X + \xi) = E(X) + E(\xi) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i + \frac{n\xi}{n} = \mu + \xi \quad (195)$$

$$Var(X + \xi) = E[(X_i + \xi_i) - (\mu_i + \xi_i)][(X_k + \xi_k) - (\mu_k + \xi_k)]$$

$$Var(X + \xi) = E[(X_i + \mu_i)(X_k + \mu_k)] \quad (196)$$

A equação (196) demonstra que quando se adiciona (ou se subtrai) uma constante ξ a todos os elementos de X , a média é aumentada deste valor, enquanto que a variância não sofre alteração. Se ξ for negativo, a média é subtraída desse valor, enquanto que a variância também não muda.

Da equação (193) nota-se claramente que, como a matriz de variância-covariância Σ não sofre alterações com a adição ou subtração de constantes, os autovalores permanecem os mesmos, uma vez que o determinante não sofre mudanças. O mesmo pode se dizer dos autovetores.

Logo, as adições ou subtrações de constantes, iguais ou diferentes, a uma ou a várias respostas do conjunto multivariado de estudo não acarretam transformações na análise de autovalores e autovetores, e, conseqüentemente, à proposta de transformação por ACP.

Considere o caso do escore de um componente principal. Conforme já foi demonstrado pela equação (59), o PC_k é dado por $PC_k = [Z][A]$, onde: $[Z]$ é a matriz formada pelos dados originais padronizados e $[A]$ a matriz dos autovetores do conjunto original, tal que:

$$[Z_{ij}] = \frac{Y_{ij} - \bar{Y}_j}{\sigma_{Y_j}} \quad (197)$$

Como já se demonstrou anteriormente, a adição ou subtração de uma constante k qualquer a um conjunto de dados, resulta na adição ou subtração desta constante à média, enquanto que o desvio padrão não se altera. Portanto, ao se adicionar ou subtrair uma constante k à matriz reduzida $[Z]$, obtém-se:

$$[Z_{ij}] = \frac{(Y_{ij} + k) - (\bar{Y}_j + k)}{\sigma_{Y_j}} = \frac{(Y_{ij} - \bar{Y}_j)}{\sigma_{Y_j}} \quad (198)$$

Portanto, como $[Z]$ é função das observações obtidas durante os ensaios realizados segundo um arranjo de projeto de experimentos, esta matriz também não sofrerá as modificações introduzidas pela adição ou subtração das restrições. Assim, nota-se claramente que para representação em componentes principais é indiferente a consideração das restrições impostas a cada resposta do conjunto multivariado original.

Com estas deduções, pode-se assegurar que a proposta de se adicionar ou subtrair limites às respostas originais, ou de se multiplicar uma dada resposta por uma constante negativa, não altera substancialmente a estrutura de correlação dos dados e, por conseguinte, não se alteram significativamente os autovalores e a respectiva explicação provida pelos componentes principais das variáveis ajustadas. Logo, a proposta parece ser coerente.

Estudos de caso do capítulo 6 serão utilizados para avaliar a validade desta abordagem.

5.4 – EQUACIONAMENTOS E ESTRATÉGIAS

Depois de estabelecidas as formas de obtenção das funções objetivo multivariadas, os sistemas de equações seguintes descrevem os possíveis procedimentos de otimização. Nas equações a seguir, [Y] representa a matriz do conjunto de respostas.

Caso 1: O objetivo é maximizar [Y], considerando-se uma correlação positiva entre PC_1 e [Y]. O arranjo é um CCD sem blocos (raio igual a α). Aplicam-se restrições esféricas ou cuboidais.

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad PC_1 = \hat{y} &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \sum \beta_{ij} x_i x_j \\ \text{Sujeito a:} \quad x^T x &\leq \alpha^2 \quad \text{com} \quad -1 \leq x_i \leq +1; \quad i = 1, 2, \dots, k \end{aligned} \quad (199)$$

Caso 2: O objetivo é maximizar [Y], considerando-se uma correlação positiva entre IGM e [Y]. O arranjo é um CCD sem blocos (raio igual a α). Aplicam-se restrições esféricas ou cuboidais.

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad IGM &= \sum_{i=1}^m [\lambda_i (PCs_i)] \\ \text{Sujeito a:} \quad (a) \quad x^T x &\leq \alpha^2, \quad \alpha = 2^{\binom{k}{4}} \\ (b) \quad -1 &\leq x_i \leq +1; \quad i = 1, 2, \dots, k \end{aligned} \quad (200)$$

Caso 3: O objetivo é minimizar [Y], considerando-se uma correlação positiva entre IGM e [Y]. O arranjo é um CCD sem blocos (raio igual a α). Aplicam-se restrições esféricas ou cuboidais.

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad PC_1 = \hat{y} &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \sum \beta_{ij} x_i x_j \\ \text{Sujeito a:} \quad x^T x &\leq \rho^2 \quad \text{com} \quad -2 \leq x_i \leq +2; \quad i = 1, 2, \dots, k \end{aligned} \quad (201)$$

Caso 4: O objetivo é minimizar [Y], considerando-se uma correlação positiva entre IGM e [Y]. O arranjo é um CCD sem blocos (raio igual a α). Aplicam-se restrições esféricas e cuboidais.

$$\begin{aligned}
\text{Minimizar } IGM &= \sum_{i=1}^m [\lambda_i(PCs_i)] \\
\text{Sujeito a: } (a) \quad &x^T x \leq \alpha^2, \quad \alpha = 2^{(k/4)} \\
&(b) \quad -1 \leq x_i \leq +1; \quad i = 1, 2, \dots, k
\end{aligned} \tag{202}$$

Caso 5: Otimização de IGM, utilizando-se um arranjo Box-Behnken. Neste caso, a única mudança é a restrição. Dada a natureza de um arranjo Box-Behnken, é adequado se adotar restrições cuboidais.

$$\begin{aligned}
\text{Minimizar } IGM &= \hat{y} = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \sum \beta_{ij} x_i x_j \\
\text{Sujeito a: } &-1 \leq x_i \leq +1; \quad i = 1, 2, \dots, k
\end{aligned} \tag{203}$$

Caso 6: Otimização de IGM ou PC₁, sujeito à distância axial α referente a um CCD com blocos e restrições adicionais.

$$\begin{aligned}
\text{Maximizar } \hat{y} &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \sum \beta_{ij} x_i x_j \\
\text{Sujeito a: } \quad &x^T x \leq [\alpha_{\text{bloccos}}]^2 \\
&y_j \leq T \quad j = 1, 2, \dots, j
\end{aligned} \tag{204}$$

Onde:

$$\alpha = \left[k \left(1 + \frac{n_{s0}}{n_s} \right) / \left(1 + \frac{n_{c0}}{n_c} \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

5.4.1 Aplicações em Problemas Duais

Vining e Myers (1990), Del Castillo e Montgomery (1993), Copeland e Nelson (1996) e Del Castillo et al. (1996), investigaram um modelo geral para abordar o Projeto Robusto de Taguchi, considerando-se os arranjos de superfície de resposta, tais como o CCD ou o Box-Behnken. A sugestão destes pesquisadores é um modelo de otimização cujo objetivo seja minimizar a variância enquanto se mantém a média do processo o mais próximo possível do valor alvo (T). Esta estratégia foi denominada por Vining e Myers (1990) de *DRS (Dual Response Surface)*. Em termos matemáticos, seu equacionamento pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
\text{Minimizar} \quad & \hat{\sigma} = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j \\
\text{Sujeito a :} \quad & \hat{\mu}(x) = T \\
& \sum_{i=1}^k x_i^2 \leq \rho^2 \quad (a) \quad -1 \leq x_i \leq +1 \quad (b)
\end{aligned} \tag{205}$$

A restrição (a) é uma restrição do tipo esférica, mais apropriada para o arranjo central composto. A restrição (b) é uma restrição cuboidal, adequada para os estudos onde o arranjo experimental de superfície de resposta adotado é o Box-Behnken. Segundo Kim e Cho (2002), o modelo do sistema de otimização descrito pela equação (205) fornece um erro sistemático nulo (desvio em relação ao alvo), com mínima variância.

Para criar um modelo de variância para o processo em estudo, exige-se que o arranjo adotado contenha réplicas das respostas. Portanto, pode-se esperar que, como em geral as réplicas apresentam valores próximos, uma correlação forte entre elas possa existir. Se isto acontecer, pode-se empregar o método de análise de componentes principais para criar uma restrição não-linear multivariada para a variância, ao contrário de se utilizar a média.

É óbvio que este enfoque é muito mais complicado do que simplesmente se adotar a média, mas considerando-se a ênfase deste estudo, esta análise pode satisfazer uma curiosidade científica. Adotando-se a proposta multivariada, a equação (205) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
\text{Minimizar} \quad & \hat{\sigma} = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j \\
\text{Sujeito a :} \quad & IGM(x) = T \\
& \sum_{i=1}^k x_i^2 \leq \rho^2 \quad (a) \quad -1 \leq x_i \leq +1 \quad (b)
\end{aligned} \tag{206}$$

Apesar da não-trivialidade do modelo de otimização proposto pelo sistema de equações (206), o exemplo remete o estudo a uma classe de casos para os quais a restrição pode ser multivariada. Este problema também pode ser utilizado para se estudar um método de transposição dos limites de especificação das respostas originais para o campo dos componentes principais. Uma vez que PC₁ ou IGM são combinações lineares das variáveis de resposta originais uma equação de regressão natural já está estabelecida. De acordo com as combinações lineares obtidas com a equação (7), um componente principal é o produto de cada autovetor pela respectiva variável padronizada. Outrossim, pode-se também estabelecer

uma regressão linear múltipla entre PC_1 ou IGM com as respostas iniciais. Substituindo-se os valores dos limites nesta equação, obtém-se o valor da equação multivariada respectiva. Este procedimento é adotado em um estudo de caso do capítulo 6. A regressão múltipla, por sua vez, deve ser empregada com cautela. Uma vez que se deseja estabelecer uma relação entre um escore de componente principal e um conjunto de preditoras que originalmente são correlacionadas, podem surgir problemas de multicolinearidade, ou seja, uma deficiência na estimação dos coeficientes das variáveis regressoras em função da alta correlação existente entre elas. Assim, recomenda-se avaliar os valores de VIF (*Variance Inflation Factor*) para cada coeficiente do modelo. Valores de VIF maiores que 5 já indicam problema de multicolinearidade. Neste caso, alternativas mais coerentes de estimação dos coeficientes seriam os métodos PLS (*Partial Least Squares*) ou PCR (*Principal Component Regression*) (Hoskuldsson, 1988).

5.5 – CONSIDERAÇÕES FINAIS DO CAPÍTULO

No presente capítulo, mostrou-se o método proposto nesta tese para dar o tratamento adequado aos sistemas de otimização de múltiplas respostas correlacionadas. Definiu-se também um enfoque específico para cada tipo de problema, além de se ter ressaltado a existência de mais do que uma maneira de se atingir os objetivos propostos. Discutiu-se a extensão e o impacto das alterações sugeridas sobre os sistemas de otimização e as variáveis originais e avaliando-se a consistência matemática da proposta. Também foram apresentados alguns fluxogramas que podem servir de orientação para os leitores interessados na aplicação desta abordagem.

No próximo capítulo serão descritos alguns estudos de caso utilizados para validar o método e avaliar sua aplicabilidade.

Capítulo 6

APLICAÇÃO DA METODOLOGIA PROPOSTA

O presente capítulo enfatiza as situações de estudos experimentais onde se tem interesse em construir modelos para múltiplas respostas correlacionadas, funções singulares representativas das respostas originais, bem como a otimização de tais funções através de métodos não-lineares como o GRG.

Para testar e validar o procedimento proposto no capítulo 5, serão utilizados oito arranjos experimentais referentes a processos de soldagem com múltiplas respostas correlacionadas e um caso referente a um processo de usinagem. Parte destes casos foi desenvolvida nos laboratórios da UNIFEI durante o período de doutoramento do pesquisador. Outros casos foram escolhidos na literatura especializada para que se pudessem confrontar os resultados obtidos na proposta com aqueles já validados cientificamente, utilizando-se outros métodos de otimização. No caso dos processos de soldagem e usinagem, as respostas de interesse podem possuir unidades de medida diferentes, portanto, os autovalores e os autovetores utilizados na análise provirão da matriz de correlação dos dados (Johnson e Wichern, 2002).

Nos Apêndices A e B, encontram-se outros exemplos de aplicação geral, representando casos clássicos da literatura de otimização múltipla.

6.1 – CASO Nº. 1 – INSUFICIÊNCIA DO PRIMEIRO COMPONENTE PRINCIPAL PARA UM CONJUNTO DE RESPOSTAS COM CORRELAÇÕES MODERADAS

6.1.1 Visão Geral

Como primeiro estudo de caso, será apresentado um experimento que trata de um processo de soldagem P-GMAW. Neste estudo, cinco respostas de interesse, com correlações de intensidade moderada, foram utilizadas. Este caso retrata também a necessidade de se modelar mais de um componente principal em função da significância do conjunto e do grau de explicação do primeiro componente. O caso ilustra a introdução do IGM – Índice Global Multivariado, uma proposta alternativa para os problemas de otimização com múltiplas respostas correlacionadas.

6.1.2 O Processo GMAW Pulsado

O processo GMAW (*Gas Metal Arc Welding*) é amplamente empregado no ambiente industrial para a soldagem de materiais ferrosos e não-ferrosos. Através da fusão contínua do arame de solda, o processo alcança a coalescência dos metais. Como o processo de transferência é contínuo, um procedimento de soldagem de alta qualidade é necessário.

Quando o processo GMAW opera com correntes de soldagem baixas observa-se um modo de transferência metálica do tipo globular; se, no entanto, a corrente for aumentada acima de um determinado valor de transição, o modo de transferência passa a ser *spray*. De acordo com Praveen *et al.* (2005), o modo de transferência por *spray* oferece uma alta taxa de deposição. Para muitos materiais a corrente mínima é exorbitante. Além disso, o excesso de calor transferido à peça, a largura do cordão e a limitação à soldagens fora de posição são algumas desvantagens do processo. Para contorná-las enquanto se mantém os benefícios do modo *spray*, pode-se empregar a técnica de transferência pulsada (P-GMAW). O processo é caracterizado por uma corrente de soldagem pulsada, compreendida entre o nível básico e de pico, de tal modo que a corrente média esteja sempre abaixo do limite do valor de transição. A

corrente de base é usada para manter o arco aberto, enquanto que a corrente de pico, mantida por um período adequado, garante o destacamento da gota fundida (Praveen et al., 2005).

6.1.3 Arranjo Experimental

Para atingir os objetivos propostos nesta pesquisa, foi utilizada uma fonte de energia trabalhando com uma corrente de imposição pulsada. Um mecanismo automático foi utilizado para mover a tocha na velocidade de soldagem imposta pelo arranjo experimental. Todos os testes foram realizados usando a técnica *Bead on Plate* (BOP) com arame AWS ER 70S-6, diâmetro de 1.2 mm, e metal base aço ABNT 1045 com dimensões 120x40x6 mm. O gás de proteção utilizado foi uma mistura de Argônio + 25% de CO₂ com fluxo constante de 15 l/min. A velocidade de soldagem foi mantida constante em 40 cm/min para todos os testes realizados e a distância bico de contato-peça, de 22.5 mm. A Tabela 6.1 mostra os fatores e respectivos níveis utilizados na construção de uma superfície de resposta do tipo arranjo central composto. Para o fator ciclo ativo (Ca), o tempo de pico (tp) foi mantido em 4 ms enquanto que o tempo de base variou de acordo com o valor desejado para relação dada pela equação (207):

$$Ca = \frac{tp}{(tp + tb)} \quad (207)$$

Após a soldagem, todos os corpos de prova foram seccionados transversalmente, polidos e atacados quimicamente. Então, as características geométricas de penetração (P), reforço (R), largura (W) e área total (A) do cordão de solda foram determinados para cada corpo de prova. O Índice de Convexidade (CI) foi determinado através da relação entre o reforço e a largura do cordão.

Tabela 6.1. Planilha Experimental.

Fatores	Unidade	Níveis					
Corrente de Pico (I_p)	A	245	280	315	350	385	
Corrente de Base (I_b)	A	55	70	85	100	115	
Ciclo Ativo (Ca)	(%)	35	40	45	50	55	
Velocidade de alimentação do arame (V_a)	m/min.	4,5	5,0	5,5	6,0	6,5	

6.1.4 Resultados

A Tabela B.1 do Anexo B mostra os resultados experimentais obtidos com um arranjo central composto para as cinco respostas de interesse. As respostas para os componentes principais PC₁ e PC₂ foram obtidas aplicando-se a equação (59) do capítulo 3. A razão para se escolher PC₁ e PC₂ é o fato de que apenas estes dois componentes principais apresentaram autovalores maiores que a unidade (Figura 6.1). De acordo com as informações da tabela 6.5, o autovalor referente ao primeiro componente principal (λ_1) é igual a 2,98, enquanto que (λ_2) tem valor 1,29.

6.1.5 Análise das Correlações entre as Respostas

Relações de dependência linear surgem naturalmente em experimentos de soldagem, uma vez que algumas respostas podem ser escritas como funções de outras variáveis observadas. Entre as respostas que comumente apresentam correlações significativas podem ser citadas: o Rendimento, Taxa de Fusão, Taxa de deposição, Índice de Respingos, Índice de Convexidade, Diluição, Área da Zona Fundida, dentre outras. Mendes da Silva e Scotti (2006), por exemplo, apresentam vários casos onde as respostas são obtidas pela combinação de variáveis independentes observadas e calculadas, tais como reforço (R), largura do cordão (W), penetração (P) e suas relações, tais como P+R, R/W, W/PR. Scotti et al. (2000) citam também que respostas afetadas da mesma maneira pelos mesmos fatores tendem a ser correlacionadas.

A Tabela 6.2 apresenta os testes de esfericidade e os índices de adequação utilizados nesta pesquisa para se avaliar a possibilidade de emprego da análise de componentes principais. De acordo com disposto no capítulo 2, verifica-se que o conjunto de dados em questão apresenta um nível de correlação compatível com esta proposta.

Tabela 6.2 - Testes e Índices de adequação para aplicação da ACP às respostas.

Teste	Valor Crítico	Valor de Teste	G.L.	Valor P
Isotropia	11,075	25,619	5	0,000
Lawley	16,920	93,156	9	0,000
Bartlett	18,307	134,210	10	0,000
ÍNDICES		I_{CG}	I_D	I_K
		0,007	25,756	2,440

A Tabela 6.3 mostra que as variáveis utilizadas neste experimento apresentam correlações significativas entre si, tanto para os valores observados quanto para os resíduos. Box et al (1973) ressaltam que quando existem estes tipos de dependências, a análise multivariada pode ser uma alternativa viável. A figura 6.1 mostra o número de autovalores significativos utilizando-se a matriz de correlação das respostas. Nota-se que o número adequado de componentes principais para este caso é 2.

Tabela 6.3 - Análise de Correlação das propriedades dos modelos.

	Respostas				Resíduos			
	P	R	W	CI	P	R	W	CI
R	0,019 ^(r) 0,919 ^(p)				-0,366 0,043			
W	0,558 0,001	0,023 0,903			0,436 0,014	-0,454 0,010		
CI	-0,533 0,002	0,337 0,064	-0,849 0,000		-0,601 0,000	0,700 0,000	-0,878 0,000	
A	0,722 0,000	0,331 0,069	0,792 0,000	-0,483 0,006	-0,580 0,001	-0,053 0,777	0,706 0,000	-0,526 0,002

^(r) – Coeficiente de correlação de Pearson; ^(p) – Valor de P (*P-Value*).

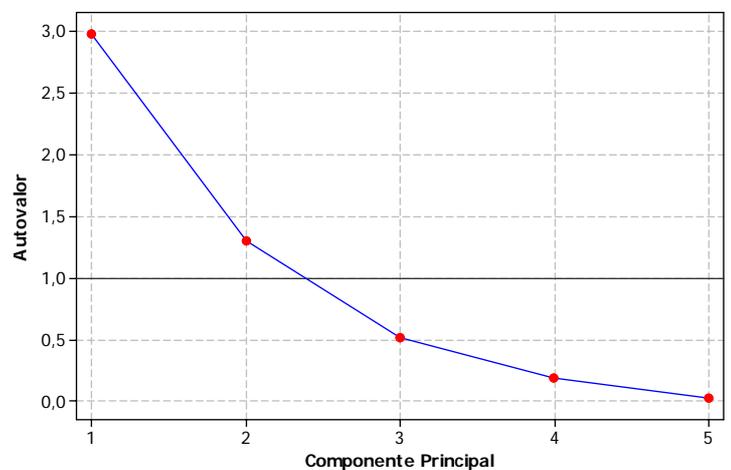


Figura 6.1 - Autovalores significativos.

6.1.6 Análise de Componentes Principais

Os dados da tabela 6.4 foram calculados utilizando as equações de (60) a (67). Ela revela que a adoção dos componentes principais pode conduzir à redução de dimensionalidade do conjunto original e que as correlações existentes são suficientes para se obter um número pequeno de variáveis latentes. Estes testes apontam que os componentes

principais maiores (PC₁ e PC₂) são variáveis bem representativas do conjunto de respostas originais. A Tabela 6.3 demonstra a estrutura de correlação existente entre várias propriedades das respostas observadas e calculadas. Os índices apresentados na tabela 6.2, também revelam um razoável nível de correlação entre as variáveis.

Os autovalores e os autovetores relacionados na tabela 6.4 foram obtidos a partir da matriz de correlação das respostas originais. A razão para tal escolha é que neste estudo de caso, as respostas foram obtidas em unidades de medida diferentes. Observa-se também que os dois primeiros componentes principais representam 85,5% da variação do conjunto original. Além disso, a análise dos autovetores e a análise fatorial revelam uma forte correlação positiva entre PC₁ e as respostas P, W e A, e fortemente negativa com IC, ao passo que PC₂ mantém uma correlação fortemente negativa com R.

Tabela 6.4 - Análise de ACP para a matriz de Correlação das respostas.

	Componentes Principais					Análise Fatorial	
	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5		
Autovalores	2,9775	1,2957	0,5165	0,1856	0,0246	Rotação Varimax	
Proporção	0,5960	0,2590	0,1030	0,0370	0,0050		
Acumulado	0,5960	0,8550	0,9580	0,9950	1,0000		
Respostas	Autovetores					Fator 1	Fator 2
P	0,4680 (0,807) ^s	-0,0730 (-0,083)	0,7900	-0,3190	-0,2250	0,809	-0,062
R	0,0140 (0,024)	-0,8440 (-0,961) ^s	-0,2630	-0,4650	0,0400	0,049	-0,960
W	0,5420 (0,935) ^s	0,0450 (0,052)	-0,4590	0,1340	-0,6900	0,933	0,076
IC	-0,4800 (-0,829) ^s	-0,4040 (-0,460) ^s	0,3060	0,5030	-0,5090	-0,816	-0,482
A	0,5070 (0,875) ^s	-0,3410 (-0,388) ^s	0,0590	0,6400	0,4610	0,885	-0,366

Obs.: O n^o. entre parênteses é o coeficiente de correlação entre a variável de resposta e o componente principal.
(^s): Correlações significativas (P-Value < 5%).

Para a melhoria do processo, as respostas Penetração (P), Largura (W) e Área (A) devem ser maximizadas; enquanto que Reforço (R) e Índice de Convexidade (IC), minimizadas. O gráfico da figura 6.2 mostra um dendograma das respostas originais e dos componentes principais. Por esta análise hierárquica de *Cluster* baseada no coeficiente de correlação entre as respostas, nota-se a formação de dois grupos distintos: o primeiro, formado por PC₁, P, W, CI e A, e o segundo, formado por PC₂ e R. Observando-se também as

correlações existentes entre os componentes principais e as respostas originais descritas na Tabela 6.5, bem como os autovetores da análise fatorial rotacionada, nota-se que ao se maximizar PC_1 , as respostas P, W e A serão maximizadas, enquanto que IC será minimizado. Se PC_2 for maximizado, R será minimizado. Como neste caso específico, um único componente principal pode não ser suficiente para a representação das variáveis originais, duas estratégias são propostas: a) maximizar apenas PC_1 ou b) maximizar IGM, um índice formado por PC_1 e PC_2 , ponderados, respectivamente, por seus autovalores.

Considerando-se o disposto no item (b), vem que:

$$IGM = 2,98.PC_1 + 1,29.PC_2 \quad (208)$$

Observando-se o dendograma da figura 6.2 nota-se como PC_1 e IGM são tão variáveis tão próximas. Este agrupamento foi obtido utilizando-se como medida de distância a correlação entre as variáveis, e considerando o método de Ward (Rencher, 2002) como meio de ligação. Como $\lambda_1 \gg \lambda_2$, PC_1 e IGM terão praticamente o mesmo comportamento. Isto acontecerá sempre que o conjunto de respostas possuírem variáveis com correlações elevadas.

Em ambos os casos, usando o método (GRG), serão impostas restrições esféricas para os níveis dos fatores, de modo que os valores que otimizam as respostas de interesse estejam compreendidos dentro do espaço experimental $-r \leq x_i \leq +r$, tal que $x_i \in \Omega$. Estes limites são iguais ao valor do raio do espaço experimental, que neste caso é 2 (distância axial α).

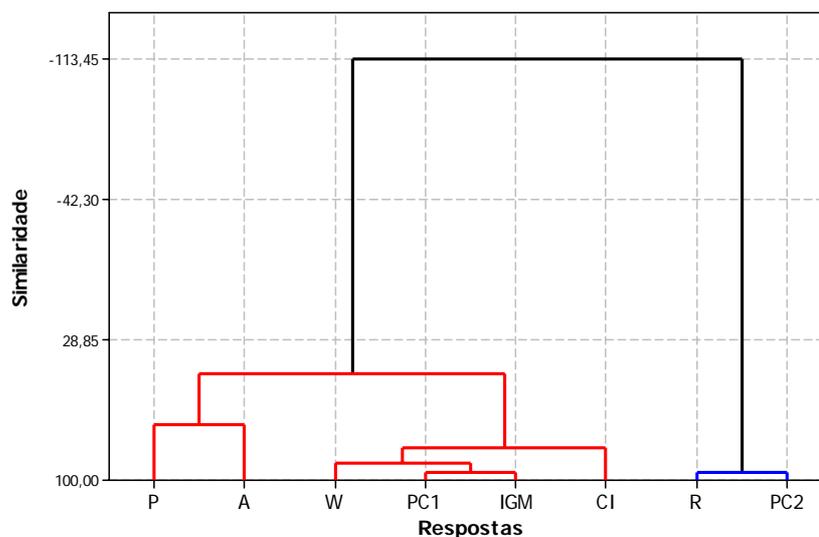


Figura 6.2 - Dendograma para as correlações absolutas entre as respostas.

Nota: Método de Ward.

6.1.7 Modelos Matemáticos Multivariados

Para se obter os modelos matemáticos das funções singulares PC_1 ou IGM, empregou-se o algoritmo de mínimos quadrados ao conjunto de dados obtido com o arranjo de superfície de resposta da Tabela B.1 (Anexo B). A tabela 6.5 descreve todos os coeficientes de um modelo quadrático completo, tal como estabelece a equação (80). Antes de considerar os modelos quadráticos de PC_1 e IGM como duas funções objetivo adequadas à aplicação do GRG, devem ser realizados os testes de significância estatística, verificando-se se os modelos reduzidos são melhores que os modelos completos. A Tabela 6.5 destaca os modelos completos para cada resposta. Embora tenham sido identificados alguns coeficientes não significativos, a sua remoção acarretou uma diminuição brusca da explicação propiciada pelos modelos completos, implicando numa redução de R^2 ajustado e em um aumento considerável da variância do erro residual (S). Deste modo, optou-se por se conduzir o estudo utilizando modelos de segunda ordem completos, avaliados segundo um nível de significância de 5%.

Tabela 6.5 - Análise do modelo quadrático multivariado.

Termo	PC_1				IGM			
	Coef.	Erro Padrão	t_0	p_t	Coef.	Erro Padrão	t_0	p_t
b_0	1,296	0,301	4,304	0,001	2,845	1,037	2,756	0,014
I_p	0,167	0,163	1,025	0,321	0,267	0,560	0,480	0,638
I_b	0,466	0,163	2,866	0,011	1,556	0,560	2,787	0,013
Ca	0,779	0,163	4,789	0,000	1,995	0,560	3,575	0,003
Va	0,834	0,163	5,125	0,000	1,968	0,560	3,529	0,003
I_p^2	-0,259	0,149	-1,742	0,101	-0,597	0,513	-1,169	0,259
I_b^2	-0,191	0,149	-1,282	0,218	0,066	0,513	0,126	0,901
Ca^2	-0,395	0,149	-2,649	0,018	-0,998	0,513	-1,952	0,069
Va^2	-0,829	0,149	-5,564	0,000	-2,146	0,513	-4,199	0,001
$I_p.I_b$	0,344	0,199	1,727	0,103	1,067	0,686	1,561	0,138
$I_p.Ca$	-0,243	0,199	-1,222	0,239	-1,305	0,686	-1,906	0,075
$I_p.Va$	0,872	0,199	4,375	0,000	3,459	0,686	5,055	0,000
$I_b.Ca$	0,329	0,199	1,653	0,118	1,477	0,686	2,158	0,046
$I_b.Va$	-0,044	0,199	-0,224	0,826	-0,297	0,686	-0,434	0,670
$Ca.Va$	0,368	0,199	1,847	0,083	1,857	0,686	2,713	0,015
	R^2 (adj.)	78,7%		S=0,797	R^2 (adj.)	73,7%		S=2,744

As Tabelas 6.6 e 6.7 apresentam uma ANOVA para os modelos quadráticos dos índices PC_1 e IGM. Nestas tabelas, F_0 representa o valor da estatística de teste F e p_F é a área proporcionada por esta estatística. Tanto PC_1 quanto IGM apresentaram resultados

semelhantes na ANOVA. O valor de p_f menor que nível de significância de 5% conduz à rejeição da hipótese nula da regressão, na qual todos os coeficientes do modelo possam ser considerados nulos, indicando que o modelo quadrático completo é significativo. Percebe-se também que, individualmente, as porções linear, quadrática e de interação são individualmente significativas.

Tabela 6.6 - ANOVA do modelo PC₁

Fonte	Graus de Liberdade	Soma de quadrados	Média Quadrática	F ₀	P _f
Regressão	14	79,162	5,654	8,90	0,000
Linear	4	37,143	9,286	14,62	0,000
Quadrática	4	23,081	5,770	9,08	0,001
Interação	6	18,939	3,156	4,97	0,005
Erro Residual	16	10,164	0,635		
Falta de Ajuste	10	7,505	0,750	1,69	0,268
Erro Puro	6	2,659	0,443		
Total	30	89,326			

Tabela 6.7 - ANOVA do modelo IGM

Fonte	Graus de Liberdade	Soma de quadrados	Média Quadrática	F ₀	P _f
Regressão	14	737,44	52,675	6,99	0,000
Linear	4	250,24	62,561	8,31	0,001
Quadrática	4	157,17	39,293	5,22	0,007
Interação	6	330,03	55,005	7,30	0,001
Erro Residual	16	120,49	7,531		
Falta de Ajuste	10	91,34	9,134	1,88	0,227
Erro Puro	6	29,15	4,859		
Total	30	857,94			

Conforme foi estabelecido no capítulo 4, como o valor da estatística de teste F_0 (1,88) é menor que o valor crítico de F para o nível de significância escolhido ($\alpha=5\%$) e os graus de liberdade associados ($F_{(1-\alpha;10;6)}=4,06$), então, aceita-se a hipótese nula de que não há falta de ajuste ao se utilizar os modelos quadráticos completos de PC₁ e IGM.

Outra recomendação descrita no capítulo 4 é quanto à natureza dos resíduos proporcionados pelo modelo. No caso de resíduos das variáveis latentes, não se acredita ser necessária a construção de gráficos de resíduos em relação à ordem ou valor ajustado, uma vez que os componentes principais não foram coletados experimentalmente. Mesmo que haja algum problema no plano dos componentes principais, com certeza ele terá sido causado pelas

respostas originais. Espera-se, entretanto, que os resíduos das variáveis transformadas também tenham ajuste normal, para que as conclusões obtidas sejam válidas. Desse modo, recomenda-se a análise de normalidade dos resíduos provenientes de PC_1 e IGM, utilizando-se o teste de normalidade de Anderson-Darling. Neste teste, a hipótese nula é uma suposição de que os dados seguem uma distribuição normal.

De acordo com a figura 6.3, os valores de p são maiores que o nível de significância adotado ($\alpha=5$), fato que conduz à aceitação da hipótese nula de normalidade dos resíduos.

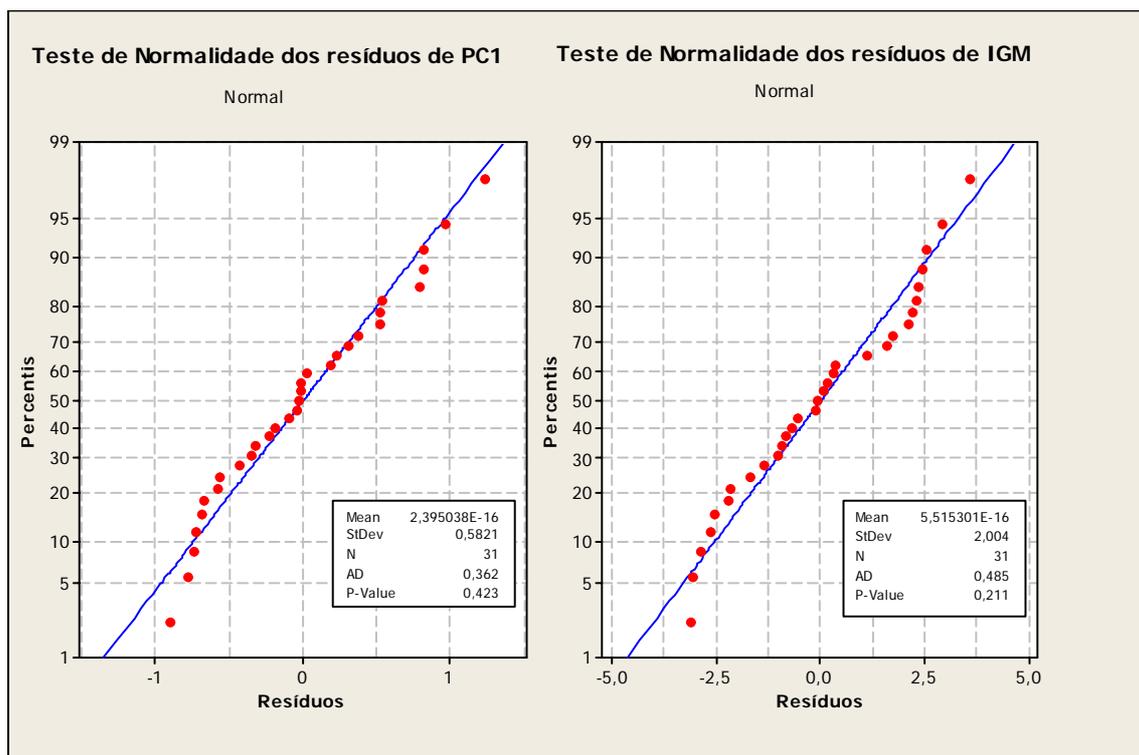


Figura 6.3 – Teste de Normalidade para os resíduos de PC_1 e IGM.

6.1.8 Otimização Multivariada

De acordo com as correlações existentes entre o conjunto original de respostas e as variáveis latentes PC_1 e PC_2 , o problema de otimização pode utilizar as duas abordagens descritas no item 6.1.6. Para o primeiro componente principal, emprega-se a equação (199). Considerando-se também uma função singular aditiva, formada pelos dois primeiros componentes principais e, adotando-se como pesos os autovalores da matriz de correlação descritos pela tabela 6.4, pode-se compor o Índice Global Multivariado (IGM) de acordo com a equação (200). Desse modo o problema de otimização não-linear restrita se torna:

$$\text{Maximizar } IGM = \sum_{i=1}^m [\lambda_i(PCs_i)] = 2,98.PC_1 + 1,29.PC_2 \quad (209)$$

$$\text{Sujeito a: } (a) x^T x \leq \alpha^2, \quad \alpha = 2^{\sqrt{k/4}} \quad (b) -1 \leq x_i \leq +1; \quad i = 1, 2, \dots, k$$

Para se resolver os problemas de otimização não-linear com restrições, propostos pelas equações (200) e (209), pode-se utilizar o aplicativo Solver[®], disponível no software MS-Excel[®]. No Anexo A há uma ilustração desta aplicação.

A Tabela 6.8 ilustra os resultados obtidos com o emprego dos índices multivariados PC₁ e IGM, em comparação com o emprego do método *Desirability* (D).

Tabela 6.8 - Resultados comparativos entre os métodos.

Variável Independente	Restrições Esféricas	Valor Ótimo			
		D	PC ₁ ¹	PC ₁ ²	IGM ³
IP	$-2 \leq I_p \leq +2$	2,000	1,000	1,033	0,856
IB	$-2 \leq I_b \leq +2$	1,003	1,000	1,135	1,299
CA	$-2 \leq C_a \leq +2$	0,839	1,000	0,908	0,907
VA	$-2 \leq V_a \leq +2$	2,000	1,000	0,906	0,870

Variável Dependente		L.I.	N.	L.S.	Valor Ótimo			
P	Maximizar	2,1	2,6	-	2,19	2,35	2,20	2,31
R	Minimizar	-	3	3,5	2,69	2,65	2,69	3,10
W	Maximizar	7	10	-	9,93	9,58	9,72	9,62
CI	Minimizar	-	20	30	21,75	27,77	23,89	27,19
A	Maximizar	25	31	-	27,73	28,74	27,98	28,33

⁽¹⁾ – GRG com restrições cuboidais ($-1 \leq x_i \leq 1$) e esféricas; ^(2,3) – GRG só com restrições esféricas.

L.I.: Limite Inferior; N: Valor Alvo (Nominal); L.S.: Limite Superior.

A Figura 6.4 apresenta as soluções ótimas encontradas com os três métodos, dispostas sobre os gráficos de contorno no plano de PC₁, para cada par de variáveis independentes. Esta figura demonstra a extrema proximidade entre as soluções multivariadas (PC₁ e IGM) em detrimento da solução obtida com o método *Desirability* (D). Para os gráficos de contorno de alguns pares de fatores, nota-se que a solução obtida com o método *desirability* cai fora da região esférica de raio ± 2 , violando a restrição imposta.

A Figura 6.5 apresenta o gráfico de superfície de resposta para o índice multivariado formado pelo primeiro componente principal PC₁.

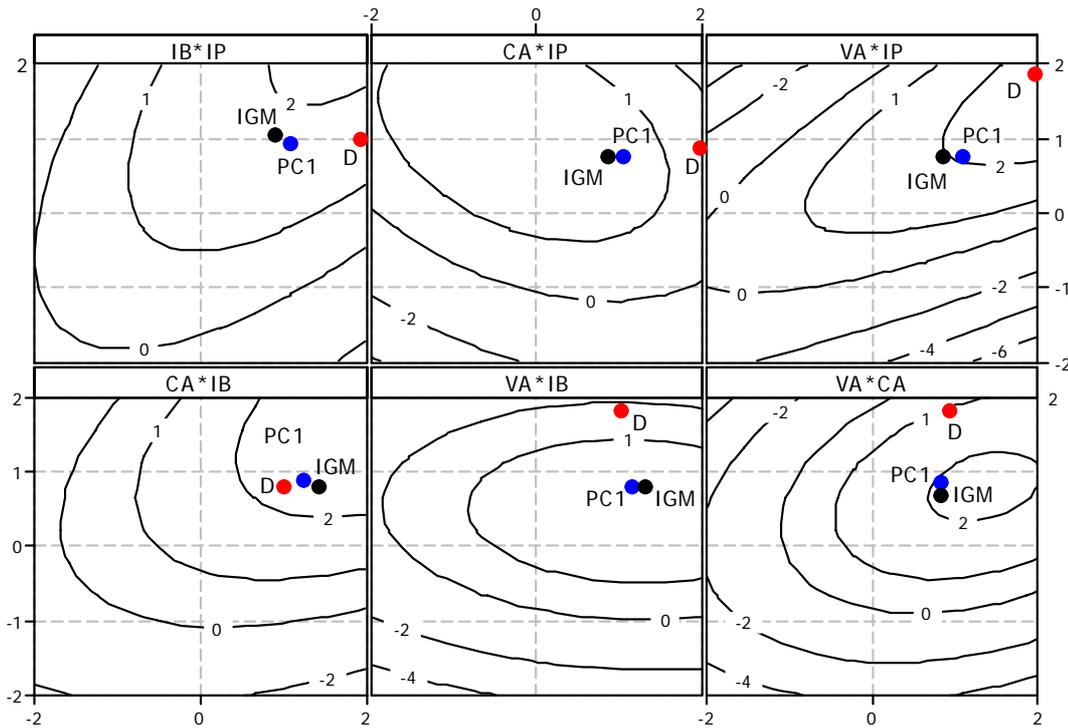


Figura 6.4 - Gráficos de Contorno para PC_1 : sobreposição dos 3 métodos.

Legenda: D: *Desirability*; PC_1 : 1º Componente Principal; IGM: Índice Global Multivariado.

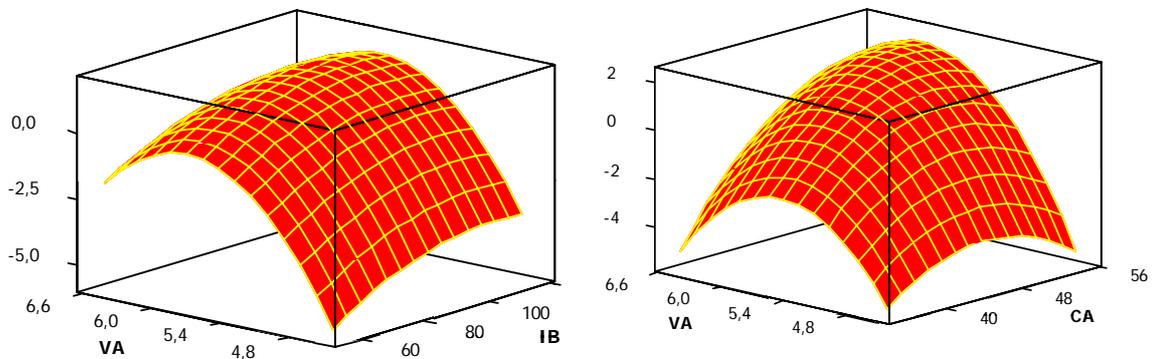


Figura 6.5 – Superfícies de Respostas de PC_1 para alguns pares de Fatores.

6.1.9 Discussões

Comparando-se os resultados da otimização alcançados com o emprego de funções objetivo escritas em termos de PC_1 e IGM tal como descreve a tabela 6.8, nota-se que enquanto se utilizou apenas os modelos completos baseados em PC_1 , não se conseguiu uma solução de compromisso que atendesse às restrições impostas para a resposta “Reforço” (R). Isto se justifica em função da análise de autovalores realizada anteriormente, através da qual se verifica que neste caso, um único componente não é suficiente para representar todas as

respostas do conjunto multivariado. O mesmo se pode dizer da análise de correlações e da análise de fator realizada sobre o conjunto de respostas originais. A resposta reforço é bem representada por PC_2 e não tem correlação significativa com PC_1 . Por sua vez, a otimização isolada de PC_2 conduziria à otimização apenas da resposta Reforço em detrimento das demais respostas. Quando, porém, se empregou o índice global multivariado (IGM), ponderado pelos autovalores, encontrou-se uma solução de compromisso que atendeu satisfatoriamente a todas as restrições impostas para o sistema.

A Tabela 6.9 mostra uma comparação entre os métodos, descrevendo uma avaliação em termos de solução de compromisso, ou seja, que algoritmo proporciona a solução mais adequada (ótimos mais próximos dos limites impostos). Para esta finalidade, utilizou-se a função *desirability* individual.

Tabela 6.9 – Comparação entre métodos.

Método	D (ACP)	D (Tradicional)	Diferença
$PC_1^{2,3}$	0,584355	0,573796	1,8%
PC_1^1	0,593878	0,573796	3,4%
$IGM^{2,3}$	0,580277	0,573796	1,1%

⁽¹⁾ – GRG com restrições cuboidais e esféricas; ^(2,3) – GRG com restrições esféricas.

O método *desirability* permite que as importâncias das respostas sejam consideradas no cálculo do ponto de ótimo para que se alcance uma solução de compromisso. O algoritmo introduz as importâncias individuais das respostas como um expoente positivo compreendido entre $0,1 \leq \xi \leq 10$. Diante disto, poderia se esperar que se as respostas recebessem pesos, a comparação estabelecida da tabela anterior pudesse se alterar favoravelmente em relação ao método tradicional. Neste caso específico, entretanto, as importâncias das respostas só trariam alterações ao sistema, se a importância dada à resposta Índice de Convexidade (IC), fosse superior às demais em 5%. Isto se justifica uma vez que (IC) é uma das respostas que apresentou soluções mais próximas dos valores desejados. Embora a Largura do Cordão (W) também tenha apresentado uma solução melhor, o valor individual do *desirability* para esta função é 1, uma vez que, assim como obtido com as soluções em ACP, a solução ultrapassou o valor inicial desejado. Neste caso, qualquer que seja a importância da resposta, a função *Desirability* global não se altera.

Este exemplo de aplicação demonstrou que a abordagem proposta é viável e que os resultados são satisfatórios. A análise também revelou que um processo de soldagem pode ser bem representado pelos componentes principais de suas respostas de interesse. Neste caso específico, apenas dois componentes principais representam 85,5% da variação total. Os testes e índices indicaram que as correlações entre as respostas eram fortes o suficiente para suportar a abordagem, enquanto que a análise das correlações entre as respostas e os componentes principais dirimiu conflitos nos sentidos de otimização. Observou-se que o IGM é uma função mais adequada para este caso, uma vez que contempla os dois maiores componentes principais. A ponderação dos componentes principais no IGM pelos seus respectivos autovalores demonstrou-se satisfatória. Usando a função *desirability* para a comparação de soluções de compromisso, nota-se que os métodos multivariados se aproximaram mais das restrições impostas às respostas e que estas soluções só se alterariam caso a resposta CI tivesse uma importância 5% maior que todas as demais. Na prática, as respostas P, W e A são mais importantes que CI.

6.2 – CASO Nº. 2: UTILIZAÇÃO DE RESTRIÇÕES NÃO-LINEARES MULTIVARIADAS

6.2.1 Visão Geral

O exemplo a seguir será utilizado para demonstrar a utilização de uma restrição não-linear multivariada em conjunto com as funções objetivo obtidas em termos de (a) PC_1 e (b) IGM.

Outro aspecto importante deste exemplo, é que as funções objetivo multivariadas podem requerer também restrições adicionais, lineares ou não-lineares, univariadas ou multivariadas. Ou seja, além de se utilizar uma equação em termos dos componentes principais para a função objetivo, pode-se utilizar uma equação de componentes principais também como equação de restrição. Outras combinações também são viáveis, como a inclusão de restrições comuns ou de funções objetivo comuns com restrições multivariadas. Fato é que também não se encontrou na literatura qualquer menção sobre a adoção de equações de restrição não-lineares escritas em termos de componentes principais. Acredita-se, portanto, que esta é uma outra contribuição desta pesquisa.

Do ponto de vista do processo de soldagem, este exemplo caracteriza-se pela adoção dos experimentos realizados por Rodrigues (2005), utilizando-se um processo de soldagem FCAW (*Flux Cored Arc welding*). Este processo de soldagem é caracterizado pela coalescência entre metais, obtida através de arco elétrico estabelecido entre a peça a ser soldada e um eletrodo tubular alimentado continuamente. A soldagem com arame tubular se assemelha ao processo GMAW no que diz respeito aos equipamentos e princípios de funcionamento, diferindo-se deste pelo fato de possuir um arame com formato tubular, por onde passa um fluxo. Isto permite ao processo compartilhar o alto fator de trabalho e superar a alta taxa de deposição características da soldagem GMAW. Por outro lado, através da soldagem FCAW é possível obter a alta versatilidade da soldagem com eletrodos revestidos no ajuste de composição química e facilidade de trabalho em campo. A proteção do arco neste processo é feita pelo fluxo interno do arame (metálico ou não metálico) podendo ser, ou não, complementada por um gás de proteção.

O fluxo interno do arame é composto de materiais inorgânicos ou metálicos, que possuem funções, tais como, melhoria das características do arco elétrico, da transferência do metal de solda, proteção à poça de fusão e também em alguns casos, quando necessário, a adição de elementos de liga, além de atuar como formador de escória. A escória formada por este processo, além de proteger a solda durante a solidificação, atua diretamente nas propriedades mecânicas da solda.

Na Tabela 6.10, são listados os parâmetros de controle do processo (Tensão (V), Velocidade de alimentação (Va) e Distância bico de contato-peça (D)) e seus respectivos níveis. Como respostas, foram adotadas a penetração (P), o índice de convexidade (IC), o rendimento (RD), a taxa de deposição (TD) e a diluição do cordão (D). Os resultados experimentais constam da Tabela B.2 do Anexo B.

Tabela 6.10 - Parâmetros de controle do processo e seus níveis.

Parâmetro	Unidade	Níveis				
		-2	-1	0	+1	+2
V (X ₁)	V	26,6	29,0	32,5	36,0	38,4
Va (X ₂)	m/min	8,6	10,0	12,0	14,0	15,4
D (X ₃)	mm	13,3	15,0	17,5	20,0	21,7

6.2.2 - Análise de Correlações entre as respostas

A Tabela 6.11 apresenta os principais testes multivariados e índices de adequação calculados com o conjunto original de respostas.

Para o teste de isotropia, como o valor de p é menor que o nível de significância de 5%, pode-se afirmar que os eixos representativos dos componentes principais não têm a mesma importância, ou seja, PC₁ e PC₂ são significativamente diferentes dos demais. Para o teste de Lawley, o valor de p igual a zero indica a rejeição da hipótese nula, o que comprova que o segundo autovalor (λ_2) é diferente dos demais autovalores menores. A hipótese nula no teste de Bartlett também é rejeitada, indicando que existem correlações significativas entre as respostas do conjunto. Com o índice de convergência I_{CG} próximo de zero, pode-se afirmar que existe uma correlação perfeita entre as variáveis. Os valores dos índices de Divergência e Kulback (I_D e I_K) maiores que zero também indicam uma estrutura de correlação compatível com a utilização da análise de componentes principais.

Tabela 6.11 - Testes e Índices de adequação para aplicação da ACP às respostas.

Testes	Valor Crítico	Valor de Teste	G.L.	P
Isotropia	11,070	95,586	5	0,000
Lawley	16,919	49,678	9	0,000
Bartlett	18,307	72,061	10	0,000
ÍNDICES		I_{CG}	I_D	I_K
		0,0127	13,672	2,184

A Tabela 6.12 apresenta os coeficientes de correlação e respectivos valores de p , para as respostas do conjunto original. Examinando-se estes resultados, verifica-se que existem correlações significativas e fortes em vários pares de resposta. A correlação entre o rendimento da soldagem (RD) e a taxa de deposição (TD), por exemplo, é de 85%.

Tabela 6.12 - Análise de correlação entre as respostas.

	Respostas				Resíduos			
	P	TD	RD	IC	P	TD	RD	IC
TD	0,721 0,000 ¹				0,277 0,237			
RD	0,541 0,014	0,852 0,000			0,028 0,906	0,591 0,006		
IC	-0,027 0,909	0,447 0,048	0,416 0,068		-0,455 0,044	0,115 0,629	0,196 0,408	
D	0,491 0,028	-0,069 0,773	-0,104 0,662	-0,754 0,000	0,447 0,048	0,170 0,473	-0,030 0,901	-0,821 0,000

⁽¹⁾ – Valor de p no teste de hipótese de correlação. H_0 = correlação inexistente, $\alpha=5\%$.

6.2.3 Análise de Componentes Principais

A Figura 6.6 apresenta os autovalores da matriz de correlação das respostas estudadas.

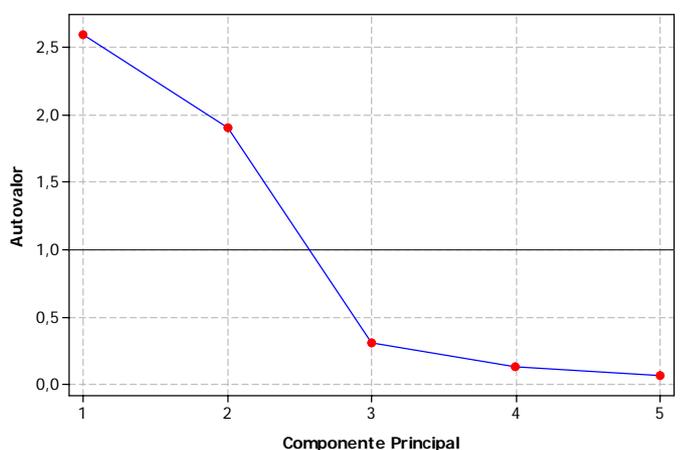


Figura 6.6 – Autovalores da matriz de correlação.

Já a tabela 6.13 apresenta a análise de componentes principais da matriz de correlação das cinco respostas estudadas. Empregou-se, neste caso, a matriz de correlação porque as respostas são representadas por unidades diferentes. Analisando-se os resultados obtidos, nota-se que os dois primeiros componentes principais juntos explicam 90,0% da estrutura de variação das respostas. Ainda de acordo com os critérios de Kaiser e Cattell, estes dois elementos devem ser mantidos na análise, uma vez que possuem autovalores maiores que a unidade e explicação mais do que 80% da variância original.

Os sinais dos autovetores em uma análise de componentes principais refletem o tipo de correlação e a respectiva intensidade, existente entre um dado componente principal e uma variável do conjunto original. Analisando-se os autovetores da tabela 6.13, percebe-se que há uma correlação negativa extremamente forte entre as respostas P, TD, RD e PC₁, enquanto que a resposta IC mantém uma correlação positiva mais forte com PC₂. Por fim, D apresenta uma correlação extremamente forte e negativa com PC₂.

Tabela 6.13 – Análise de componentes principais para as respostas do exemplo 2.

Autovalor	2,5928	1,9075	0,3049	0,1301	0,0646
Proporção	0,519	0,381	0,061	0,026	0,013
Acumulado	0,519	0,900	0,961	0,987	1,000
Respostas	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
P	-0,427	-0,469	0,529	-0,145	-0,545
TD	-0,600	-0,078	0,008	-0,441	0,663
RD	-0,566	-0,026	-0,701	0,314	-0,298
IC	-0,356	0,540	0,476	0,583	0,122
D	0,100	-0,694	0,039	0,589	0,400

A Figura 6.7 apresenta um dendograma das respostas originais e dos componentes principais PC₁, PC₂ e IGM. Este gráfico, obtido a partir de uma análise hierárquica de *Cluster* com agrupamentos calculados segundo o método de Ward, mostra a similaridade entre as variáveis dependentes, segundo seus coeficientes de correlação. Do ponto de vista da otimização, uma função objetivo escrita em termos de PC₁ provavelmente conduzirá as respostas P, TD e RD aos seus valores ótimos, enquanto que se otimizando a função PC₂, as respostas IC e D devem tender para os limites desejados. Na Tabela 6.13 nota-se que a resposta P tem seus autovetores nos planos de PC₁ e PC₂ praticamente iguais; entretanto, PC₁ é uma representação melhor para P porque possui um autovalor maior. A análise de

Cluster da figura 6.7 ilustra esta discussão e serve para dirimir quaisquer dúvidas a respeito da boa representatividade de P por PC1.

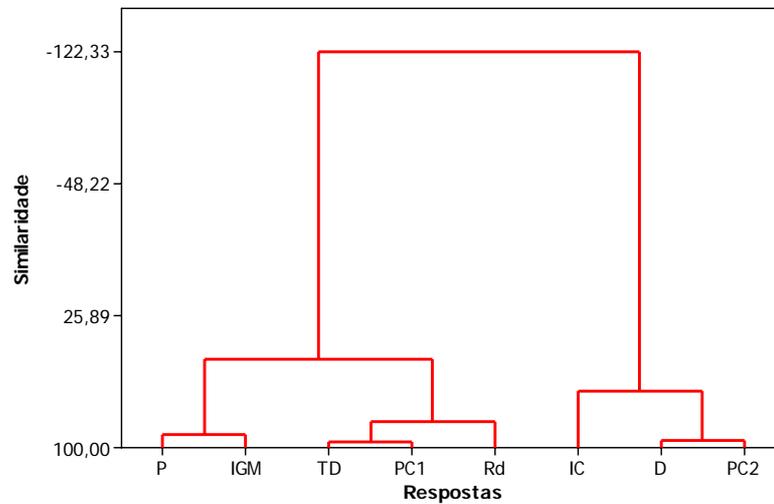


Figura 6.7 - Dendrograma para as correlações absolutas entre as respostas.

Como nesta tese preferiu-se adotar o IGM como função objetivo representativa de sistemas com múltiplos componentes principais, acredita-se que esta função possa servir para otimizar o conjunto de respostas. Como, porém, IGM não mantém correlações fortes com PC₂, IC e D, pode acontecer que esta função objetivo não seja suficiente para otimizar as cinco respostas conjuntamente. Neste caso, pode-se pressupor que PC₂ deva ser utilizada como uma restrição não-linear multivariada para a otimização de IGM.

6.2.4 Modelos Matemáticos Multivariados

A Tabela 6.14 apresenta a relação de coeficientes e respectivas significâncias para os modelos reduzidos de IGM e PC₂.

Tabela 6.14 - Análise do modelo quadrático reduzido multivariado.

Termo	PC ₂				IGM			
	Coef.	Erro Padrão	t ₀	p _t	Coef.	Erro Padrão	t ₀	p _t
b ₀	-0,357	0,1295	-2,761	0,015	-0,588	0,4198	-1,401	0,183
b ₁	-1,251	0,1226	-10,204	0,000	-1,421	0,3972	-3,578	0,003
b ₂	-0,069	0,1226	-0,567	0,580	-4,791	0,3972	-12,063	0,000
b ₃	0,331	0,1226	2,702	0,017	0,837	0,3972	2,108	0,053
b ₁ ²	0,523	0,1182	4,427	0,001	0,861	0,3832	2,246	0,041
b ₁₂	-0,675	0,1602	-4,219	0,001	-1,167	0,5190	-2,249	0,041
	R ² (adj.)	88,4 %		S=0,453	R ² (adj.)	89,9%		S=1,468

Ao se criar a função objetivo e a restrição não-linear para IGM e PC₂ utilizando o método dos mínimos quadrados ordinários, são necessárias algumas verificações quanto ao ajuste e a significância de tais modelos. Assim como no exemplo anterior, foram analisadas as significâncias individuais de cada coeficiente no ajuste proporcionado pelo modelo quadrático completo. Como foram encontrados alguns coeficientes não significativos nos modelos completos de IGM e PC₂, optou-se por modelos reduzidos tal como descrito pela tabela 6.14. Como se observa, os ajustes são altos e os coeficientes individuais, significativos.

As Tabelas 6.15 e 6.16 apresentam, respectivamente, a ANOVA para os modelos quadráticos reduzidos de PC₂ e IGM. Observa-se que os modelos reduzidos não apresentam falta de ajuste, uma vez que os valores de p são maiores que o nível de significância de 5%. A rejeição da hipótese nula na ANOVA dos modelos reduzidos de PC₂ e IGM revela ainda que pelo menos um termo linear, um quadrático e uma interação são significativos para explicar a variabilidade da resposta.

Tabela 6.15 - ANOVA do modelo reduzido de PC₂.

Fonte	Graus de Liberdade	Soma de quadrados	Média Quadrática	F ₀	Pr
Regressão	5	30,6035	6,1207	29,83	0,000
Linear	3	22,9306	7,6435	37,25	0,000
Quadrática	1	4,0211	4,0211	19,60	0,001
Interação	1	3,6518	3,6518	17,80	0,001
Erro Residual	14	2,8727	0,2052		
Falta de Ajuste	9	2,2329	0,2481	1,94	0,241
Erro Puro	5	0,6398	0,1280		
Total	19	33,4762			

Tabela 6.16 - ANOVA do modelo reduzido de IGM.

Fonte	Graus de Liberdade	Soma de quadrados	Média Quadrática	F ₀	Pr
Regressão	5	372,442	74,488	34,57	0,000
Linear	3	350,677	116,892	54,25	0,000
Quadrática	1	10,870	10,870	5,04	0,041
Interação	1	10,895	10,895	5,06	0,041
Erro Residual	14	30,165	2,155		
Falta de Ajuste	9	24,059	2,673	2,19	0,201
Erro Puro	5	6,106	1,221		
Total	19	402,607			

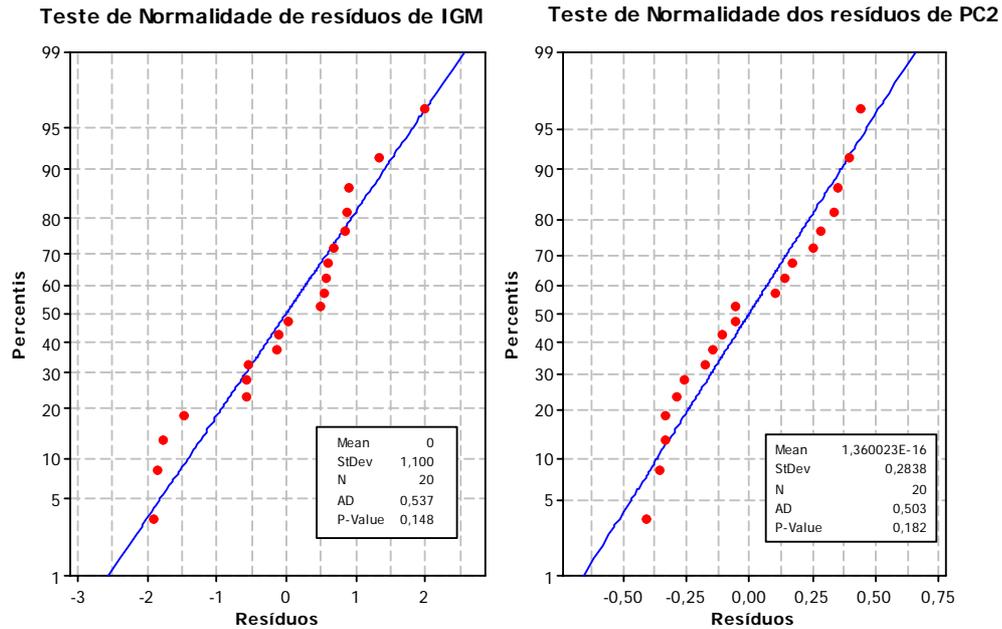


Figura 6.8 – Análise de resíduos de IGM e PC₂.

Assim como no exemplo anterior, a análise de resíduo da figura 6.8 mostra que não há problema de normalidade com os resíduos de IGM e PC₂, uma vez que o valor de p maior que o nível de significância conduz à aceitação da hipótese nula de normalidade.

6.2.5 Otimização Multivariada

Considerando-se as correlações existentes entre as respostas, pode-se pressupor que a minimização de PC₁ conduz à maximização de P, TD e RD, uma vez que estas variáveis mantêm uma correlação negativa com o primeiro componente principal. Porém, como não há correlação entre PC₁, IC e D, não se pode afirmar que a minimização de PC₁ atenda os limites desejados para estas duas respostas. Por outro lado, PC₂ mantém uma correlação forte e positiva com IC e forte negativa com D.

A Tabela 6.17 apresenta a análise das correlações existentes entre os componentes principais e as respostas originais. Observando-se tais correlações, nota-se que a minimização de IGM concorre para a maximização de P, TD e RD e para a minimização de PC₁ e PC₂, e embora não mantenha correlações com IC e D, concorre para a minimização de IC e a maximização de D, uma vez que IGM estabelece uma correlação positiva com PC₂.

Tabela 6.17 – Correlações entre as respostas originais, PC₁, PC₂ e IGM.

	P	TD	RD	IC	D	PC ₁	PC ₂
PC ₁	-0,688	-0,967	-0,911	-0,573	0,160		
	0,001	0,000	0,000	0,008	0,499		
PC ₂	-0,648	-0,107	-0,035	0,746	-0,958	0,000	
	0,002	0,652	0,882	0,000	0,000	1,000	
IGM	-0,928	-0,875	-0,789	-0,086	-0,376	0,846	0,534
	0,000	0,000	0,000	0,718	0,102	0,000	0,015

Diante do exposto, escolheu-se adicionar uma restrição não-linear na forma de PC₂. Para escrever uma restrição multivariada, pode-se uma regressão linear múltipla do tipo $PC_2 = f(P, TD, Rd, IC, D)$. Entretanto, como as variáveis predictoras (P , TD , Rd , IC e D) são correlacionadas, o modelo de regressão linear múltipla pode sofrer o impacto da multicolinearidade (correlação entre as variáveis predictoras). Para medir o incremento da variância de um coeficiente do modelo de regressão quando as variáveis predictoras são correlacionadas, os softwares estatísticos utilizam a função VIF (*Variance Inflation Factor*), tal que:

$$VIF(x_i) = 1/[1 - R^2(x_i)] \quad (210a)$$

Quando o $VIF > 1$, então há correlação entre as predictoras. Quando $VIF > 5-10$ há indício de que os coeficientes de regressão são pobremente estimados em função da correlação das predictoras. Neste caso, recomenda-se a utilização do algoritmo PLS (*Partial Least Squares*) (Hoskuldson, 1988; Geladi e Kowalski, 1986). Os valores de VIF para as variáveis P, TD, Rd, IC e D são respectivamente iguais a: 5,9; 8,4; 3,9; 3,8 e 5,4. Logo, a previsão para PC₂ deve ser estimada usando um modelo PLS, tal como indica a equação (210b).

$$PC_2 = 6,84 - 1,08P - 0,108TD - 0,0112Rd + 0,0529IC - 0,118D \quad (210b)$$

Substituindo-se os limites superiores das cinco respostas (3.5, 5.5, 90, 30, 45) nas variáveis predictoras da equação (210b) obtém-se como restrição, $PC_2 = -2,27$ (b). Como os maiores coeficientes angulares desta equação são negativos, um incremento nos valores da resposta provocaria a diminuição do valor de PC₂. Portanto, como são desejados valores menores que os limites superiores para as cinco respostas originais, valores de PC₂ maiores que -2,27 também atenderiam à restrição imposta. Assim, a restrição multivariada pode ser

escrita como $PC_2 \geq -2,27$. Como restrição adicional, deve-se submeter o problema de minimização de IGM à uma restrição esférica, uma vez que os experimentos foram conduzidos utilizando-se um arranjo central composto com três fatores. Para estas condições, $\alpha = 1,682$. Desse modo, mantendo-se a restrição esférica (a) de $x_i \in \Omega$, o sistema de otimização se torna:

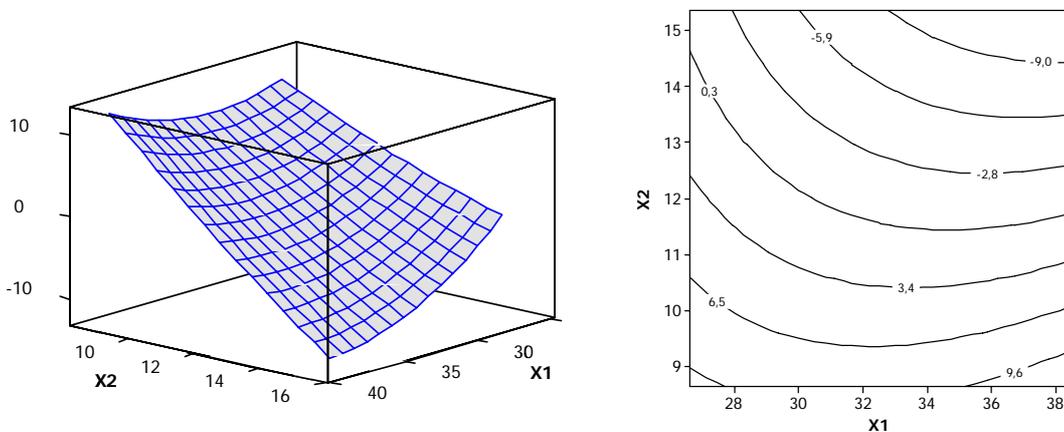
$$\begin{aligned} \text{Minimizar } IGM &= 2,590.PC_1 + 1,907.PC_2 \\ \text{Sujeito a: } & \text{(a) } x^T x \leq \alpha^2, \quad \alpha = 1,682 \\ & \text{(b) } PC_2 \geq -2,27 \end{aligned} \quad (211)$$

A Tabela 6.18 apresenta uma análise comparativa entre a solução obtida com o sistema de otimização da equação (211) e o método *desirability*.

Tabela 6.18 – Análise comparativa de resultados dos métodos de otimização.

Variáveis	Limites	Método	
		D	IGM/PC ₂
V(X ₁)	-1,682 ≤ x ₁ ≤ +1,682	1,543	0,612
Va(X ₂)	-1,682 ≤ x ₂ ≤ +1,682	1,157	1,549
d(X ₃)	-1,682 ≤ x ₃ ≤ +1,682	-1,682	-0,235
P	1,9 ≥ P ≥ 3,5	3,53	3,102
TD	3,8 ≥ TD ≥ 5,5	5,79	5,680
RD	80 ≥ RD ≥ 90	86,24	87,861
IC	22 ≥ IC ≥ 30	21,61	36,420
D	35 ≥ D ≥ 45	49,77	43,392

A Figura 6.9 ilustra a superfície de resposta e o gráfico de contorno para IGM.



(a) Superfície de resposta para IGM.

(b) Gráfico de contornos de IGM.

Figura 6.9 – Representação gráfica de IGM com $d(X_3)$ constante e igual a 17,5.

6.2.6 Discussão

Este exemplo ilustrou a aplicação dos modelos quadráticos reduzidos para os componentes principais e o índice global multivariado. Os resultados demonstram que a abordagem proposta independe do formato do modelo adotado. Além disso, mostrou-se como é possível introduzir equações de restrição escritas em termos de componentes principais. Para estabelecer uma relação entre o segundo componente principal e as variáveis de resposta originais, utilizou-se o algoritmo PLS, uma vez que a regressão linear múltipla revelou problemas de multicolinearidade. Para se descobrir qual é o valor de PC_2 para os respectivos limites superiores das respostas, os mesmos foram substituídos na equação de regressão de $PC_2 = f(P, TD, Rd, IC, D)$. Este artifício não seria necessário se fosse adotada como função a própria combinação linear de PC_2 , onde os autovetores seriam os coeficientes do modelo de regressão sem o termo independente. Entretanto, acredita-se que o modelo de regressão PLS ou mesmo a regressão múltipla sejam mais simples, uma vez que para utilizar a combinação linear haveria a necessidade de se padronizar as variáveis de resposta originais antes de se efetuar a substituição na combinação linear, com a sua conseqüente pré-multiplicação pelos autovetores, tal como demonstra a equação (59) do capítulo 3.

Analisando-se a eficiência do método em comparação com as restrições impostas e o método *desirability*, nota-se que os resultados são bastante razoáveis. Para as respostas P, TD e RD os resultados são satisfatórios e equivalentes ao *desirability*; entretanto, não se conseguiu uma resposta que satisfizesse a restrição da resposta IC e neste caso, o *desirability* foi mais eficaz. Já para a variável de resposta D, a situação é inversa e os níveis ótimos encontrados atendem satisfatoriamente às restrições impostas, ao contrário do método *desirability*.

Cabe ressaltar também, que além do *desirability* atender mais adequadamente a resposta IC, o ponto de ótimo indicado por este método também atende à restrição $x^T x$, imposta à IGM.

Conclui-se, portanto, que de maneira geral a proposta feita nesta pesquisa também foi adequada para este caso de aplicação.

6.3 - CASO Nº. 3: UTILIZAÇÃO DE IGM PARA RESPOSTAS FORTEMENTE CORRELACIONADAS

6.3.1 Visão Geral

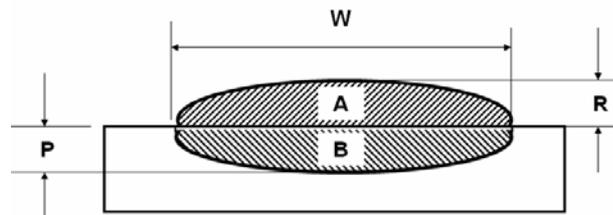
O exemplo a seguir ilustra a aplicação do Índice Global Multivariado (IGM) para otimizar oito características de qualidade de um processo FCAW (*Flux cored arc welding*), utilizado na soldagem de aços inoxidáveis. Este estudo de caso demonstra que, mesmo que o conjunto original contenha correlações fortes e significativas, o primeiro componente principal pode não ser suficiente para representar todas as respostas de interesse. Deste modo, IGM deverá ser uma boa opção. Entretanto, como as correlações são fortes, o primeiro autovalor deverá assumir valores altos, fazendo com que o índice global se comporte de maneira muito semelhante a PC_1 .

As características de qualidade analisadas por Kannan e Murugan (2006a) foram: Penetração (P), Largura do Cordão (W), Reforço (R) e Diluição (D). Segundo os autores, no processo de revestimento por soldagem FCAW, é desejável que a Diluição (D) assuma valores baixos, o que implica numa composição do material depositado muito próxima daquela encontrada no metal de adição, mantendo-se a resistência à corrosão. Segundo Kannan e Murugan (2006b), uma diminuição na diluição aumenta o número de ferrita, o que em termos estatísticos, representa uma correlação negativa altamente significativa. A minimização da diluição implica em uma penetração e reforço mínimos, enquanto a largura tende para um valor mais alto. Utilizando-se também os resultados de Kannan e Murugan (2006b), podem ser elencadas outras respostas de interesse, tais como: o Número de Ferrita calculada (NF_c) em função do diagrama WRC-1992 (Kotechki e Siewert, 1992), o Número de Ferrita medida (NF_m) e os valores de Cromo e Níquel Equivalentes (Cr_{eq} , Ni_{eq}). Segundo os autores, é interessante que os valores do número de ferrita sejam maiores que 30 e menores que 70. Esta restrição permite que a resistência à corrosão não diminua consideravelmente enquanto se mantém boa ductilidade e tenacidade do metal de revestimento.

Para analisar o fenômeno, os pesquisadores utilizaram um arranjo central composto conforme descrito pela Tabela B.3 do Anexo B. Os fatores utilizados foram a corrente de

soldagem I (A), a velocidade de soldagem S (cm/min), a distância bico de contato-peça N (mm) e o ângulo de soldagem T (°).

Do ponto de vista matemático, portanto, o objetivo principal é descobrir quais os níveis dos parâmetros de processo são capazes de minimizar a Diluição (D). Como esta variável de resposta é uma razão entre a área de reforço (A) e a área total, parece claro ao se analisar a figura 6.10 que W, R e P estão relacionados de alguma forma à definição das áreas (A) e (B).



$$(D) = [B/(A+B)] \times 100$$

Figura 6.10 – Geometria do Cordão de Solda.

Assim, pode-se pressupor que o problema de otimização múltipla seja escrito em termos da minimização de Diluição (D) e Penetração (P), e a maximização da largura (W) e do Reforço (R), enquanto o número de ferrita (NF_c e NF_m) permaneça entre 30 e 70. Para fins de comparação, serão monitorados também os valores respectivos para cromo e níquel equivalentes.

6.3.2 Análise das Correlações entre as Respostas

A Tabela 6.19 avalia a estrutura de correlação entre as respostas do exemplo 3. Como se percebe, o conjunto de dados revela pares de respostas com altas correlações.

A Tabela 6.20 mostra os resultados dos testes multivariados aplicados aos dados do exemplo 3. Com o valor de p menor que o nível de significância de 5%, pode-se afirmar sobre o teste de isotropia, que os eixos representativos dos componentes principais não têm a mesma importância, ou seja, PC_1 e PC_2 são significativamente diferentes dos demais. Para o teste de Lawley, o valor nulo de p indica a rejeição da hipótese nula, o que comprova que o segundo autovalor (λ_2) é diferente dos autovalores menores. A hipótese nula no teste de Bartlett também é rejeitada, indicando que existem correlações significativas entre as respostas do conjunto. Com I_{CG} muito próximo de zero, pode-se afirmar que existe uma correlação perfeita entre as variáveis. Os valores de I_D e I_K maiores que zero também indicam uma forte estrutura de correlação. Como todos os testes apontaram na direção de estruturas

significativas de correlação, conclui-se que a análise de componentes principais (ACP) é adequada para este caso.

Tabela 6.19 – Correlações entre as respostas utilizadas no exemplo 3.

	W	P	R	D	FN_c	FN_m	Cr(eq)
P	-0,009						
p	0,962						
R	0,806	-0,179					
p	0,000	0,335					
D	-0,279	0,883	-0,511				
p	0,129	0,000	0,003				
FN_c	0,212	-0,730	0,509	-0,788			
p	0,251	0,000	0,003	0,000			
FN_m	0,079	-0,838	0,402	-0,876	0,858		
p	0,674	0,000	0,025	0,000	0,000		
Cr(eq)	0,308	-0,747	0,507	-0,775	0,902	0,786	
p	0,092	0,000	0,004	0,000	0,000	0,000	
Ni(eq)	0,290	-0,615	0,410	-0,666	0,548	0,588	0,682
p	0,114	0,000	0,022	0,000	0,001	0,001	0,000

Tabela 6.20 – Índices multivariados do exemplo 3.

Teste	Valor Crítico	Valor de Teste	G.L.	Valor de P
Isotropia	31,41	343,80	20	0,000
Lawley	40,11	324,31	27	0,000
Bartlett	41,34	257,36	28	0,000
Índices		I_{CG} 6,06 x 10 ⁻⁵	I_D 32,19	I_K 4,86

6.3.3 Análise de Componentes Principais

As respostas de interesse do processo de soldagem estudado possuem unidades de medida diferentes. Logo, a análise de componentes principais deve ser baseada na matriz de correlação das respostas. A Tabela 6.21 revela que os dois primeiros componentes principais devem ser utilizados para representar as oito respostas estudadas, uma vez que seus autovalores são maiores que um e, conjuntamente, explicam 84,2% da variação do conjunto original de respostas.

Observando-se os autovetores de PC₁, conclui-se que esta variável latente mantém uma correlação positiva com P e D, e uma correlação negativa com as demais variáveis. Assim, a minimização da função objetivo obtida em termos dos componentes principais tem a

tendência de maximizar W e R, enquanto minimiza P e D. Como neste caso λ_1 é muito maior que λ_2 , então, IGM deverá seguir o mesmo comportamento de correlação que PC₁.

Tabela 6.21 – Análise de componentes principais para as respostas do estudo de caso nº. 3.

Autovalor	5,153	1,586	0,526	0,337	0,218	0,082	0,057	0,041
Proporção	0,644	0,198	0,066	0,042	0,027	0,01	0,007	0,005
Acumulado	0,644	0,842	0,908	0,95	0,978	0,988	0,995	1,000
Respostas	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7	PC8
W	-0,162	-0,703	0,069	0,207	0,461	0,44	-0,148	0,063
P	0,372	-0,329	-0,088	-0,416	-0,396	0,127	-0,055	0,63
R	-0,268	-0,584	-0,197	0,033	-0,464	-0,407	0,224	-0,341
D	0,412	-0,076	0,003	-0,508	0,056	0,356	0,159	-0,641
FN_c	-0,399	0,075	-0,395	-0,422	0,019	-0,005	-0,7	-0,107
FN_m	-0,398	0,21	-0,231	0,135	-0,416	0,689	0,278	0,026
Cr_(eq)	-0,406	0,022	-0,067	-0,516	0,417	-0,144	0,558	0,241
Ni_(eq)	-0,334	-0,018	0,857	-0,248	-0,256	0,055	-0,146	-0,04

6.3.4 Modelos Matemáticos Multivariados

A Tabela 6.22 apresenta os modelos quadráticos completos para cada uma das oito respostas de interesse, obtidos com a aplicação do método OLS aos dados da Tabela B.3 do Anexo B.

Tabela 6.22 – Modelos quadráticos completos para as respostas.

Termo	IGM	PC₁	W	P	R	D	FN_c	FN_m	Cr_{eq}	Ni_{eq}
b ₀	1,45	0,23	28,29	0,80	4,48	11,68	26,43	32,00	23,57	12,29
b ₁	4,50	1,05	2,48	0,10	0,13	1,47	-2,46	-3,75	-0,48	-0,08
b ₂	9,91	1,74	-3,28	0,07	-0,48	2,73	-3,13	-4,33	-0,73	-0,20
b ₃	-3,30	-0,65	0,42	-0,05	0,05	-1,04	1,21	1,00	0,42	0,07
b ₄	3,88	0,88	-0,63	0,11	0,05	1,61	-0,88	-1,75	-0,33	-0,19
b ₁ ²	-1,59	-0,31	-0,43	-0,01	0,00	-0,02	0,67	0,73	0,20	0,11
b ₂ ²	-0,19	0,03	1,01	0,02	0,06	0,02	-0,08	-1,52	0,03	0,09
b ₃ ²	-0,54	-0,10	-0,18	-0,01	0,04	-0,22	0,55	0,48	-0,13	0,00
b ₄ ²	0,44	0,09	0,20	-0,02	0,02	0,25	-0,45	-0,40	-0,07	-0,02
b ₁₂	-0,02	-0,02	-0,62	-0,01	0,00	-0,75	-0,56	-0,38	-0,07	0,02
b ₁₃	-0,58	-0,12	-0,25	-0,02	0,01	-0,59	-0,19	0,38	-0,06	0,04
b ₁₄	-1,47	-0,27	-0,12	0,01	0,03	-0,21	0,69	1,38	0,05	0,10
b ₂₃	0,09	-0,01	0,25	0,00	-0,05	0,12	0,31	0,25	0,05	-0,01
b ₂₄	3,83	0,78	0,11	0,06	-0,03	1,48	-1,06	-2,00	-0,34	-0,13
b ₃₄	-0,83	-0,18	0,04	-0,02	-0,01	-0,33	0,56	0,25	0,06	0,01
R ² adj.(%)	89,1	89,2	89,1	81,6	85,2	79,3	75,7	83,8	71,9	37,4

De acordo com a estrutura de correlação entre as respostas e o primeiro componente principal (PC_1), espera-se que a minimização da função obtida em termos de PC_1 conduza à minimização de D e P, e à maximização de W e L.

Depois de um exame cuidadoso, o ajuste quadrático completo revelou-se como a melhor opção de modelo para IGM e PC_1 , com R^2 , ajustado de 89,2% e 89,1%, respectivamente. Os coeficientes destes modelos constam da Tabela 6.22.

6.3.5 Otimização Multivariada

Como a variável latente PC_1 mantém correlações contrárias ao sentido de otimização das respostas originais, a minimização da função objetivo PC_1 , sujeita à restrição não-linear $x \in \Omega$ para $\alpha^2 = 4$, pode ser escrita como:

$$\text{Minimizar } PC_1 = \hat{y} = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j \quad (212)$$

$$\text{Sujeito a : } x^T x \leq 4 \text{ com } -2 \leq x_i \leq +2; \quad i = 1, 2, \dots, k$$

Muito embora, PC_1 represente bem um conjunto original de variáveis, se PC_2 também for considerada, a explicação da estrutura de variância sobe para 84,2%. Portanto, pode-se supor que o índice formado pelos dois componentes principais significativos seja mais adequado. Como $\lambda_1 \gg \lambda_2$, IGM seguirá o mesmo tipo de correlações que PC_1 . Uma análise de correlação pode confirmar esta suposição. Assim, o problema de otimização escrito em termos de (IGM) para o problema de otimização não-linear restrita torna-se:

$$\text{Minimizar } IGM = \sum_{i=1}^m [\lambda_i(PCs_i)] = 5,15PC_1 + 1,58PC_2 \quad (213)$$

$$\text{Sujeito a : } (a) \quad x^T x \leq 4$$

6.3.6 – Discussões

A Tabela 6.23 e a figura 6.11 apresentam os resultados obtidos com a otimização, aplicando-se as propostas IGM, PC_1 e D. Analisando-se os resultados e comparando-os aos limites esperados para estas variáveis, nota-se que os três métodos apresentam soluções viáveis e valores bastante similares para as respostas, embora o ponto de ótimo tenha se

deslocado consideravelmente com o emprego do *desirability*. Enquanto que com o método proposto se obteve uma solução que satisfaz a restrição esférica ($x^T x \leq 4,00$), a solução obtida com o método *desirability* caiu totalmente fora da região experimental Ω ($x^T x = 10,58$).

Também neste caso, o enfoque multivariado de IGM se demonstrou adequado.

Tabela 6.23 – Análise de Resultados

Variáveis	Limites	Método		
		PC ₁	IGM	D
I	$-2 \leq x_1 \leq +2$	-1,566	-1,070	-1,607
S	$-2 \leq x_2 \leq +2$	-1,170	-1,606	-2,000
N	$-2 \leq x_2 \leq +2$	0,378	0,505	-2,000
T	$-2 \leq x_3 \leq +2$	-0,209	0,142	0,743
IGM/PC ₁	Minimizar	-4,437	-23,342	-
W	Maximizar	27,734	31,961	28,900
P	Minimizar	0,510	0,558	0,534
R	Maximizar	4,957	5,344	5,292
D	Minimizar	4,662	4,004	4,907
FN _c	$30 \leq FN_c \leq 70$	35,030	34,330	36,894
FN _m	$30 \leq FN_m \leq 70$	42,361	39,469	47,361
Cr _{eq}	-	25,712	25,624	25,626
Ni _{eq}	-	13,121	13,098	13,047

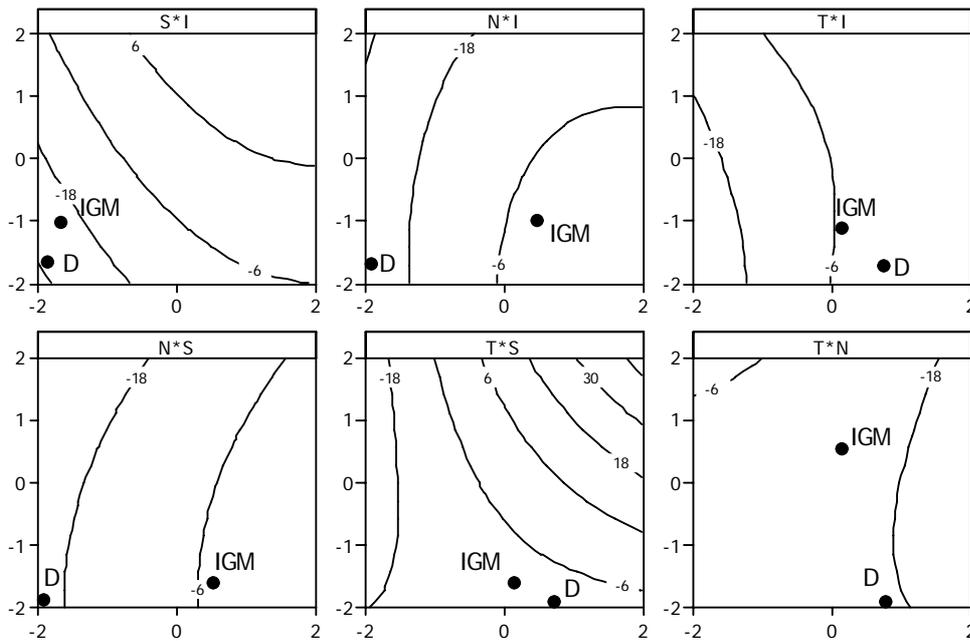


Figura 6.11 – Gráficos de Contorno de IGM e D.

A Figura 6.12(a) ilustra a superfície de resposta para o modelo quadrático completo de IGM, em termos das variáveis independentes I (corrente de soldagem) e N (distância bico de contato-peça), em unidades codificadas.

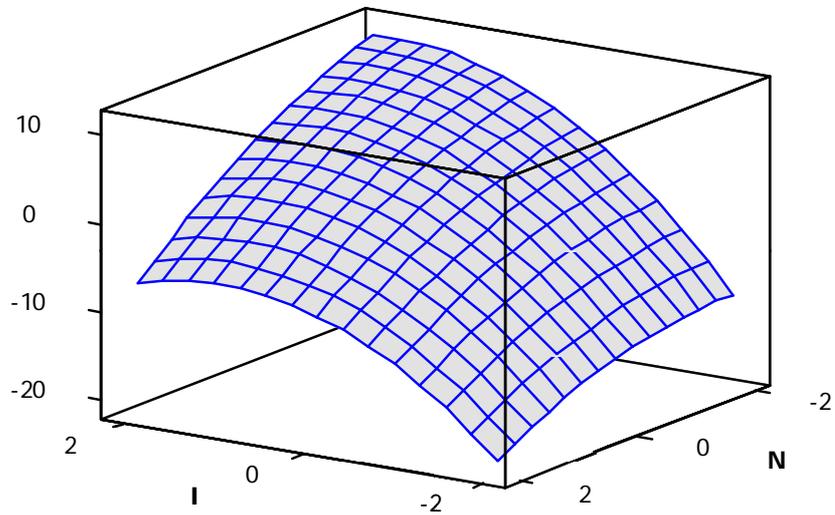


Figura 6.12 (a) – Superfície de Resposta para IGM.

A Figura 6.12(b) apresenta o gráfico de sobreposição dos contornos das oito superfícies de resposta originais e do IGM. A cor branca indica a região de soluções viáveis para o problema de otimização múltipla.

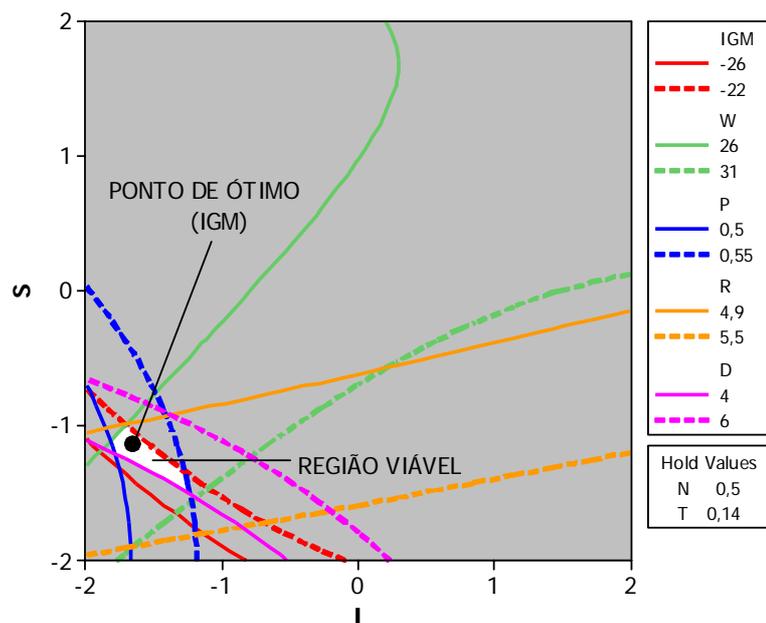


Figura 6.12 (b) – Gráfico de sobreposição dos contornos das superfícies de resposta.

6.4 – CASO Nº4: IGM PONDERADO PELO PERCENTUAL DE EXPLICAÇÃO DOS COMPONENTES PRINCIPAIS

6.4.1 Visão Geral

Este exemplo utiliza os dados de um estudo de Gunaraj e Murugan (2000a e 2000b) sobre a influência da tensão de soldagem (V), taxa de alimentação do arame (F), velocidade de soldagem (S) e distância bico de contato-peça (N) sobre as características de qualidade de um cordão de solda obtidas em um processo por arco submerso (SAW). As respostas de interesse foram: penetração (P), altura do reforço (R), largura do cordão (W), diluição (D), área de penetração (AP), área de reforço (AR) e volume total do cordão (TV). Neste caso, o exemplo será utilizado para ilustrar outras particularidades da abordagem multivariada proposta. Os aspectos relevantes deste estudo caso são:

- a) Criação do índice global multivariado (IGM) baseado na quantidade de variação explicada pelos autovalores, ao contrário de utilizar seus valores numéricos, como se fez nos exemplos anteriores;
- b) Introdução de limites às respostas originais. O estudo procura investigar como a introdução de constantes pode alterar a estrutura de variância e a conseqüente formação dos autovalores, autovetores e componentes principais;
- c) Aplicação da estratégia de inversão de respostas. Para a resposta que apresentar sentido de correlação entre o componente principal e variável original contrário ao sentido desejado de otimização, será aplicada a multiplicação por constantes unitárias negativas;
- d) Introdução de dependências lineares para se representar processos com especificação bilateral (limites superior e inferior);
- e) Utilização da análise de *Ridge* em substituição ao GRG;
- f) Avaliar a existência de alterações significativas para um IGM baseado em todos os componentes principais.

6.4.2 Análise de Correlações entre as Respostas

A tabela 6.24 demonstra alguns dos principais testes de adequação para o emprego da redução de dados através da Análise de Componentes Principais (ACP). A tabela, baseada nos dados de Guanaraj e Murugan (2000) apresenta três testes e três índices.

Tabela 6.24 – Testes e Índices de adequação para aplicação da ACP.

Testes	Valor Crítico	Valor de Teste	G.L.	Valor de P
Isotropia	16,919	73,320	9	0,000
Lawley	23,685	132,936	14	0,000
Bartlett	24,996	227,131	15	0,000
ÍNDICES		I_{CG} 2,34 x 10 ⁻⁴	I_D 59,37	I_K 4,18

Conforme já descrito na revisão bibliográfica, o Teste de Isotropia verifica se um determinado número de eixos não possui variação isotrópica importante, podendo ser desprezado na análise, o que resulta na redução de dimensionalidade. Isto ocorre freqüentemente quando as últimas raízes características são iguais. No presente exemplo, sendo $p = 6$ o número de respostas do arranjo experimental e admitindo-se que apenas $m = 2$ eixos não possuem variação isotrópica, ou seja, apenas PC_1 e PC_2 são significativos, $r = p - m$ é o número de eixos (ou componentes principais) que podem ser descartados na análise. Como o valor de P na tabela 6.24 é menor que o nível de significância adotado para o teste ($\alpha = 5\%$), rejeita-se a hipótese nula de que todos os eixos têm a mesma importância. O teste neste caso indica que apenas os dois maiores componentes principais, PC_1 e PC_2 , devem ser utilizados.

O Teste de Lawley avalia se o autovalor do segundo componente principal (PC_2) é significativamente diferente dos demais autovalores menores. Portanto, a hipótese nula neste caso é que pelo menos duas variáveis são correlacionadas, ou seja, pelo menos o primeiro componente principal é significativo, e que o segundo autovalor não é significativamente diferente dos autovalores remanescentes. Como o valor de P do teste é menor que o nível de significância, rejeita-se a hipótese nula; logo, todas as variáveis podem ser consideradas correlacionadas, o segundo autovalor é importante e o método ACP pode ser aplicado.

Bartlett (1954) estendeu seu teste de esfericidade original para avaliar se o autovalor do primeiro componente principal é diferente dos demais. O teste aplicado neste caso é uma versão modificada por Jackson (1993). Neste teste a hipótese nula declara que todas as variáveis de interesse são não correlacionadas, logo, a ACP não se aplicaria. Novamente,

como o valor de P (Tabela 6.24) é menor que o nível de significância, rejeita-se a hipótese nula e pode-se concluir que a ACP é adequado.

De maneira complementar, outros três índices são usados para ressaltar a estrutura favorável do conjunto estudado. O Índice de Kulbach (I_K) é uma proposta para se avaliar a matriz de correlação. Quando I_K é próximo de zero todas as variáveis são perfeitamente não correlacionadas. Como I_K é bem maior do que zero, nota-se que a correlação entre as respostas é extremamente forte. De maneira análoga, o índice de divergência (I_D) apresenta valores próximos de zero quando as variáveis não possuem correlação.

O Índice de Correlação Generalizada (I_{CG}) é igual ao determinante da matriz de correlação (Todeschini, 1997), e é usado para avaliar a correlação contida em um conjunto de dados. Em princípio, os valores de I_{CG} pertencem ao intervalo $[0; 1]$. Quanto mais próximo de zero, maior e mais perfeita é a correlação entre as variáveis; um I_{CG} próximo de 1 revela a completa falta de correlação.

Examinando-se os resultados destes índices na tabela 6.24, nota-se claramente que o conjunto de dados estudado tem uma estrutura perfeitamente correlacionada e compatível com o estudo proposto. A Tabela 6.25 apresenta os coeficientes de correlação entre as respostas.

Tabela 6.25 – Correlações entre respostas originais e componentes principais.

	P	R	W	AP	AR	D	TV	PC₁
R	0,715 0,000							
W	0,338 0,063	0,420 0,019						
AP	0,667 0,000	0,548 0,001	0,737 0,000					
AR	0,250 0,175	0,380 0,035	0,608 0,000	0,321 0,079				
D	0,317 0,083	0,062 0,742	0,092 0,621	0,537 0,002	-0,484 0,006			
TV	0,532 0,002	0,570 0,001	0,791 0,000	0,739 0,000	0,855 0,000	-0,095 0,610		
PC ₁	0,731 0,000	0,746 0,000	0,823 0,000	0,865 0,000	0,687 0,000	0,138 0,460	0,932 0,000	
PC ₂	0,376 0,037	0,104 0,578	-0,116 0,533	0,400 0,026	-0,681 0,000	0,931 0,000	-0,282 0,124	0,000 1,000

6.4.3 Análise de Componentes Principais

Analisando-se os resultados da tabela 6.26, nota-se que os dois primeiros componentes principais são capazes de representar 80,1% da variação total e que PC₁ mantém uma correlação positiva com todas as variáveis.

Tabela 6.26 – Análise de componentes principais para caso N°. 4.

Autovalor	3,8740	1,7363	0,8425	0,2972	0,1533	0,0863	0,0105
Proporção	0,553	0,248	0,120	0,042	0,022	0,012	0,001
Acumulado	0,553	0,801	0,922	0,964	0,986	0,999	1,000
Respostas	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7
P	0,371	0,285	0,498	-0,500	-0,514	-0,135	-0,017
R	0,379	0,079	0,594	0,646	0,278	-0,057	0,004
W	0,418	-0,088	-0,483	0,437	-0,575	-0,240	-0,067
AP	0,439	0,304	-0,257	-0,068	0,133	0,581	0,537
AR	0,349	-0,517	-0,045	-0,284	0,317	-0,504	0,417
D	0,070	0,707	-0,288	-0,063	0,363	-0,505	-0,145
TV	0,473	-0,214	-0,124	-0,229	0,278	0,270	-0,716

De acordo com a análise de autovalores e autovalores da tabela 6.25 e a análise de *Cluster* da figura 6.13, nota-se que PC₂ está mais associado a variável D.

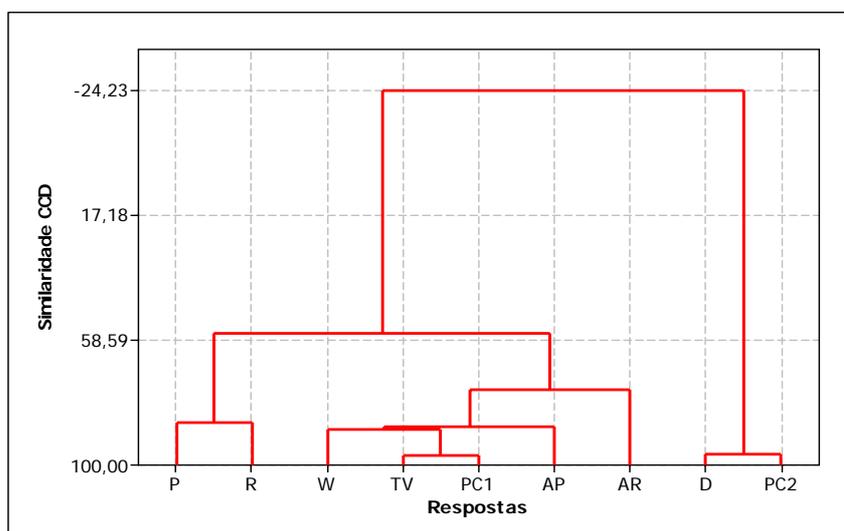


Figura 6.13 – Análise de *Cluster* para respostas e componentes principais.

Porém, este caso tem algumas particularidades. Primeiramente, segundo os autores, deseja-se maximizar a resposta penetração (P) e minimizar as demais variáveis. Como as correlações entre o PC₁ e as variáveis de resposta são todas positivas, surge o primeiro

conflito entre as direções de otimização. Em segundo lugar, deseja-se incluir um limite de especificação para cada resposta. Gunaraj e Murugan (2000a e 2000b) propuseram que para os problemas de maximização, o limite inferior de especificação pode ser introduzido na função objetivo ou nas restrições, somando-se seu valor à média da resposta. Analogamente, para os problemas de minimização, pode-se subtrair o limite superior da média. Para os casos de duas especificações simultâneas, podem-se criar equações para o limite superior e inferior.

Para o problema de conflito de direções, será adotada a proposta do capítulo 4, adequada aos casos nos quais as correlações são inversas aos sentidos de otimização desejados. Assim, para desfazer o conflito das correlações, multiplica-se a variável de interesse por uma constante negativa. Neste caso específico, propõe-se multiplicar a resposta P por (-1). A tabela 6.27 apresenta um resumo das modificações sugeridas.

Tabela 6.27 – Funções objetivo e respectivos limites.

Resposta (Y)	Objetivo	LI	LS	Correlação PC ₁ x Y	Modificação Sugerida
Penetração (P)	Maximizar	3	-	-	-(P+3)
Reforço (R)	Minimizar	-	1,8	+	(R-1,8)
Largura do Cordão (W)	Minimizar	-	15	+	(W-15)
Diluição (D)	Minimizar	-	50	+	(D-50)
Área de Penetração (AP)	Minimizar	-	20	+	(AP-20)
Área de Reforço (AR)	Minimizar	-	22	+	(AR-22)
Volume Total do cordão (TV)	Minimizar	20	45	+	(TV-45) (TV+20)

Após as transformações sugeridas, obtêm-se os resultados da tabela 6.28.

Tabela 6.28 – Análise de Componentes Principais para o caso N° 4

Autovalor	4,777	1,794	0,852	0,310	0,162	0,091	0,014	0,000
Proporção	0,597	0,224	0,107	0,039	0,020	0,011	0,002	0,000
Acumulado	0,597	0,821	0,928	0,967	0,987	0,998	1,000	1,000
Respostas	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7	PC8
-(P+3)	0,312	0,336	0,502	-0,456	-0,564	-0,107	0,026	0,000
R-1,8	-0,325	-0,141	-0,614	-0,627	-0,316	0,066	0,003	0,000
W-15	-0,379	0,033	0,444	-0,521	0,586	0,189	-0,090	0,000
AP-20	-0,382	-0,350	0,245	0,045	-0,114	-0,504	0,634	0,000
AR-22	-0,343	0,462	0,008	0,221	-0,178	0,602	0,476	0,000
D-50	-0,029	-0,696	0,311	0,088	-0,332	0,520	-0,174	0,000
TV-45	-0,441	0,152	0,093	0,185	-0,206	-0,176	-0,408	-0,707
TV+45	-0,441	0,152	0,093	0,185	-0,206	-0,176	-0,408	0,707

Conforme afirmação anterior nota-se que as modificações não introduzem alterações substanciais nas explicações dos autovalores. As alterações observadas mais contundentes se dão nos autovetores quando as variáveis originais são multiplicadas por sinais negativos. Quando, porém, se adicionam as duas equações referentes às restrições bilaterais de TV, um oitavo componente principal é adicionado à análise. Este autovalor é nulo, o que indica a presença de uma dependência linear no conjunto. Por esta razão, a proporção acumulada de variação aumentou em relação à análise anterior com sete componentes.

6.4.4 - Otimização Multivariada

Observando-se as correlações entre as variáveis de respostas e os componentes principais, nota-se que a maximização de PC_1 conduz à maximização de P e à minimização das demais variáveis, enquanto que a maximização de PC_2 conduz à minimização de D. Aplicando-se o algoritmo de mínimos quadrados (OLS) aos dados da Tabela B4 do Anexo B e, considerando-se PC_1 como variável independente e os fatores experimentais v, f, s e n como variáveis independentes, obtêm-se o modelo quadrático completo da equação (214):

$$\begin{aligned}
 PC_1 = & 1,22050 - 0,51722 v - 1,16604 f + 1,67081 s - 0,49840 n - \\
 & - 0,59038 v^2 + 0,15782 f^2 - 0,55883 s^2 - 0,26945 n^2 - 0,08586 vf + \\
 & + 0,11865 vs - 0,06231 vn + 0,34067 fs - 0,14197 fn + 0,14628 sn
 \end{aligned} \quad (214)$$

Na equação (214), v, f, s e n representam os valores codificados dos parâmetros V, F, S e N. Derivando-se esta equação em relação a cada um dos quatro fatores experimentais e igualando-se cada uma delas a zero, obtêm-se as coordenadas do ponto estacionário X_s , que deve satisfazer ao seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \hat{y}}{\partial v} &= -0,51722 - (2) \cdot 0,59038 v - 0,08586 f + 0,11865 s - 0,06231 n = 0 \\
 \frac{\partial \hat{y}}{\partial f} &= -1,16604 + (2) \cdot 0,15782 f - 0,08586 v + 0,34067 s - 0,14197 n = 0 \\
 \frac{\partial \hat{y}}{\partial s} &= 1,67081 - (2) \cdot 0,55883 s + 0,11865 v + 0,34067 f + 0,14628 n = 0 \\
 \frac{\partial \hat{y}}{\partial n} &= -0,49840 - (2) \cdot 0,26945 n - 0,06231 v - 0,14197 f + 0,14628 s = 0
 \end{aligned}$$

Resolvendo-se este sistema de equações obtêm-se os dados da Tabela 6.29.

Tabela 6.29 – Matrizes de coeficientes e Ponto Estacionário (X_s).

b	B₁				X_s
-0,51722	-0,59038	-0,04293	0,059325	-0,03116	-0,16175
-1,16604	-0,04293	-0,15782	0,170335	-0,07099	-3,08819
1,67081	0,059325	0,170335	-0,55883	0,07314	0,54364
-0,4984	-0,03116	-0,07099	0,07314	-0,26945	0,05499

De acordo com Khuri (2003), Montgomery (2001) e Nash e Sofer (1996), quando todos os autovalores da matriz característica $[B_1]$ são negativos e a matriz característica é positiva definida, o ponto estacionário X_s representa um ponto de máximo local. Como o determinante de $[B_1]$ é igual a 0,0081 ($\det[B_1] > 0$), a matriz característica é positiva definida e possui os seguintes autovalores:

$$\lambda_1 = -0,699; \lambda_2 = -0,537; \lambda_3 = -0,255 \text{ e } \lambda_4 = -0,085$$

Logo, o ponto estacionário é um ponto de máximo local.

Entretanto, da tabela 6.29, depreende-se que neste caso não é conveniente se adotar o método do ponto estacionário como sugerido por Montgomery (2001), uma vez que o mesmo cai fora da região experimental Ω , a qual, no espaço das variáveis codificadas v, f, s e n , é uma esfera centrada na origem com raio $r = 2^{(k/4)}$, onde k é o número de experimentos da parte fatorial do arranjo composto central, sem incidência de blocos. Observando-se o ponto estacionário descrito na tabela 6.29, nota-se que como o método não propõe restrições para os valores das variáveis independentes, a solução encontrada não pertence ao intervalo investigado pelo arranjo experimental adotado; portanto, deve-se tomar cuidado ao se utilizar indiscriminadamente o método do ponto estacionário na forma de otimização não-linear irrestrita. Foi por esta razão que nos exemplos anteriores adotaram-se restrições esféricas e cuboidais na utilização do algoritmo GRG.

Aplicando-se o método de otimização com restrições (*Ridge Analysis*), proposto por Khuri (2003), segundo o algoritmo modificado de Draper (1963), e em acordo com o disposto na revisão bibliográfica desta tese, tem-se que:

$$\begin{aligned} & \text{Maximizar } PC_1^* \\ & \text{Sujeito a: } \alpha = (r^T r)^{1/2} \leq 2^{(k/4)} \end{aligned} \quad (215)$$

Na equação (215), PC_1^* é o escore do primeiro componente principal, obtido após as modificações realizadas sobre as respostas originais, tal como sugerido pela tabela 6.28. Repetindo-se, portanto, a otimização considerando como limites para as variáveis independentes os pontos extremos do arranjo central composto adotado para a experimentação $[-2, -2, -2, -2]$, obtém-se as soluções da tabela 6.30. Nesta tabela, λ_L representa os multiplicadores de Lagrange necessários em cada aproximação do método iterativo; r_i representa a matriz dos valores do raio experimental, calculado segundo a equação (142), tomados como restrição em cada uma das iterações de PC_1 para cada um dos quatro fatores estudados (v, f, s e n); y é o valor da função PC_1 avaliada no ponto de ótimo em cada uma das i iterações.

De acordo com o método proposto, os multiplicadores de Lagrange devem ser escolhidos de tal forma que sejam maiores que o autovalor máximo da matriz $[B_1]$, ou seja, $\lambda_L > -0,085$. A Tabela 6.30 apresenta algumas iterações obtidas com o método.

Tabela 6.30 – Iterações no método de *Ridge Analysis*.

λ_L	1,0000	0,5000	0,4000	0,3000	0,2000	0,0900	0,0800	0,7700
v	-0,1618	-0,1690	-0,1783	-0,1873	-0,1945	-0,1939	-0,1928	-0,1924
f	-3,0882	-0,6847	-0,7905	-0,9421	0,1829	-1,7202	-1,8013	-1,8274
s	0,5436	0,6561	0,7043	0,7548	0,7995	0,7986	0,7907	0,7878
n	0,0550	-0,1915	-0,2032	-0,2130	-0,2145	-0,1743	-0,1645	-0,1612
r	0,6650	0,9821	1,0927	1,2400	1,4500	1,9144	1,9834	2,0060
y	2,3700	2,7400	2,8441	2,9631	3,1063	3,3140	3,3368	3,3438

Logo, o ponto de máximo local para a função multivariada é encontrado fazendo-se $\lambda_L = 0,77$, valor que torna r o mais próximo possível da restrição imposta, considerando-se suficiente uma precisão centesimal.

A Figura 6.14 ilustra o comportamento do multiplicador de Lagrange à medida que o raio da região criada pela solução em cada iteração se aproxima da restrição imposta.

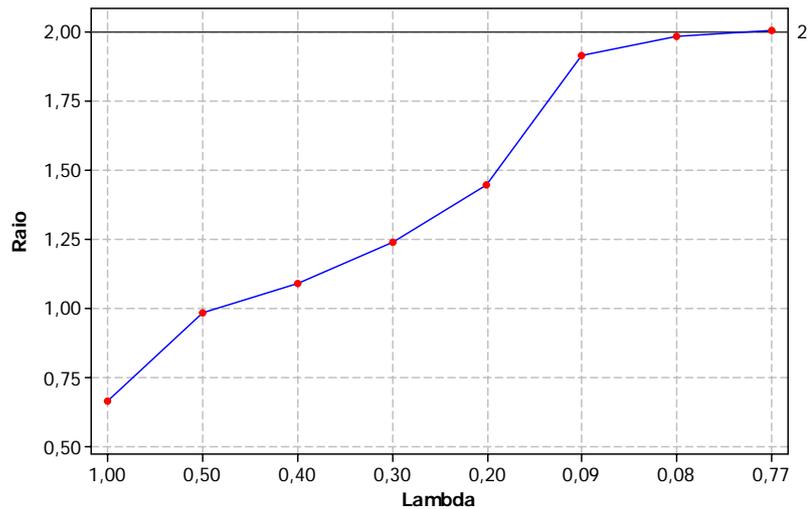


Figura 6.14 – Lambda versus raio do espaço experimental Ω .

A solução encontrada está em unidades codificadas (v, s, f, n). Transformando esta solução para as unidades decodificadas (V, S, F, N) das variáveis de processo, tem-se que:

$$-0,1924 = \frac{V - 28}{2} \Rightarrow V = 27,61(V) \quad -1,8274 = \frac{F - 1,16}{0,23} \Rightarrow F = 0,739(m / \text{min})$$

$$0,7878 = \frac{S - 0,59}{0,08} \Rightarrow S = 0,653(m / \text{min}) \quad -0,1612 = \frac{N - 35}{2,5} \Rightarrow N = 34,597(mm).$$

A tabela 6.31 mostra uma comparação do método multivariado proposto, baseado em PC_1 , com os métodos de otimização de múltiplas respostas com restrições e o método *desirability*.

Tabela 6.31 – Comparação entre os métodos de otimização.

Variável	ACP	Otimização Múltipla (Gunaraj e Murugan, 2000)	<i>Desirability</i>
V (V)	27,610	28,000	28,297
F (m/min)	0,739	0,700	0,700
S (m/min)	0,653	0,640	0,596
N (mm)	34,597	34,600	30,710

A Figura 6.15 apresenta a comparação de soluções entre os métodos ACP e *desirability* no espaço bidimensional de PC_1 .

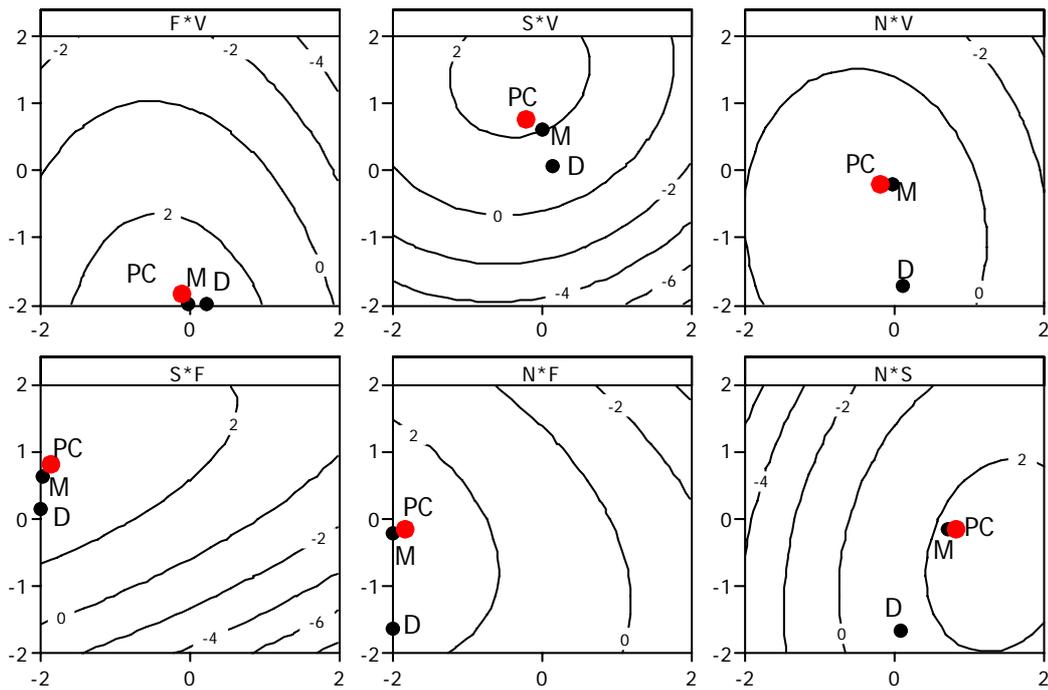


Figura 6.15 – Curvas de nível de PC_1 para cada uma das combinações entre os fatores.

Na figura 6.15, PC é o ponto de ótimo encontrado na otimização da função multivariada PC_1 proposta nesta tese; M é o ponto de ótimo obtido na otimização múltipla, e D , o obtido com a função “*Desirability*” de Derringer e Suich (1980).

Utilizando-se um teste t emparelhado para se comparar a solução por ACP e a solução encontrada por Gunaraj e Murugan (2000b), encontra-se um valor de p igual a 0,464, valor que conduz à aceitação de hipótese nula de igualdade entre as duas soluções. Analisando-se pontualmente, a maior diferença entre os dois métodos é para a variável F (5,57%).

Repetindo-se o procedimento para a equação em PC_2 , encontra-se para um $\lambda_L = 0,533$ ($\lambda_L > \lambda_{\max} = 0,51$) um ponto estacionário igual a (0,98; -0,0743; -0,7535; 1,5816). Este ponto conduz à minimização da diluição ($D = 40,92\%$), o que comprova a afirmação de que a maximização de PC_2 conduz à minimização da diluição (D), conforme se declarou anteriormente, em função da correlação negativa existente entre os dois modelos; entretanto, um valor melhor é obtido com o equacionamento de PC_1 ($D = 38\%$).

Uma questão levantada no capítulo 5 é sobre a possibilidade de se criar IGM considerando-se a explicação acumulada, e não os autovalores associados a cada componente principal significativo. Neste caso, como apenas os dois primeiros componentes principais são significativos, aplicando-se a equação (182), vem que:

$$IGM = 0.597(PC_1) + 0.224(PC_2) \quad (216)$$

Após a substituição, a equação (216) se torna:

$$\begin{aligned} IGM = & 0,55708 - 0,30747 v - 0,89366 f + 1,01001 s - 0,10628 n - \\ & - 0,25039 v^2 + -0,10911 f^2 - 0,24383 s^2 - 0,11623 n^2 - 0,03052 vf + \\ & + 0,07143 vs - 0,01517 vn + +0,15537 fs - 0,00828 fn + 0,04858 sn \end{aligned} \quad (217)$$

Como as transformações anteriores conduziram a uma única direção de otimização, o ponto estacionário da equação (217) representará o um ponto de máximo para o Índice Global Multivariado (IGM). Assim, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} & \text{Maximizar } IGM^* \\ & \text{Sujeito a: } \alpha = (r^T r)^{1/2} \leq 2^{(k/4)} \end{aligned} \quad (218)$$

Na equação (218), IGM* é o valor do índice global calculado com PC₁ e PC₂ obtidos após as transformações sugeridas pela tabela 6.28.

Para se resolver este problema de programação não-linear com restrições, novamente se empregará o método dos multiplicadores de Lagrange. Os autovalores da matriz formada pelos coeficientes dos termos quadráticos e de interação são todos negativos (-0.3092; -0.2239; -0.1138; -0.0727). Assim, a superfície de resposta que representa IGM contém um ponto de máximo. Algumas das iterações do método estão descrita na tabela 6.32.

Tabela 6.32 – Iterações no Método de *Ridge Analysis*.

λ_L	0,077	0,080	0,085	0,090	0,105
v	-0,2607	-0,2600	-0,2588	-0,2563	-0,2537
f	-1,9305	-1,900	-1,8543	-1,7680	-1,6901
s	1,0709	1,0680	1,0631	1,0519	1,0394
n	-0,0888	-0,0880	-0,0878	-0,0868	-0,0858
r	2,225	2,1900	2,1550	2,0749	2,0021
y	2,386	2,3770	2,3600	2,3312	2,3000

Assim, no ponto de estacionário, o valor máximo de IGM é 2,3. Para esta condição, os valores ótimos dos fatores do experimento são dados na tabela 6.33. Para efeito de comparação, repetiram-se os valores da tabela 6.31. Estes resultados também são confrontados utilizando-se o espaço experimental Ω de PC₁. Neste gráfico, IGM representa o ponto de ótimo obtido com o Índice Global Multivariado; PC, o ponto de ótimo obtido a equação de PC₁; M, a solução de Gunaraj e Murugan (2000); D, a solução fornecida pelo

algoritmo *Desirability*, disponível no software Minitab v.14®. A Figura 6.16 apresenta uma comparação entre os métodos.

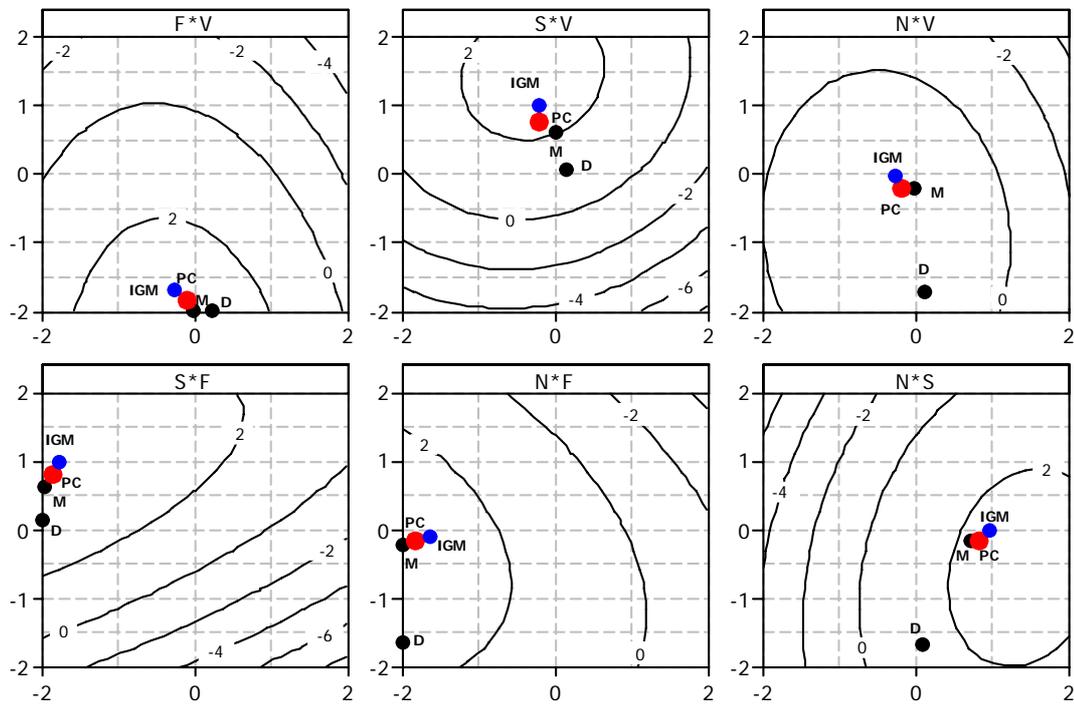


Figura 6.16 – Comparação dos pontos de ótimo obtidos por diferentes métodos.

Tabela 6.33 – Comparação entre os diferentes métodos.

Variável	IGM	PC ₁	Múltipla	<i>Desirability</i>
V (V)	27,490	27,610	28,000	28,297
F (m/min)	0,771	0,739	0,700	0,700
S (m/min)	0,673	0,653	0,640	0,596
N (m/min)	34,780	34,597	34,600	30,710

Utilizando-se uma ANOVA com uma categoria para se testar a igualdade entre os quatro procedimentos, encontra-se um valor de p igual a 1, que conduz à aceitação da hipótese nula de igualdade entre os procedimentos. O próprio gráfico da figura 6.16 mostra a proximidade dos métodos multivariados (IGM e PC₁) com a solução proposta por Gunaraj e Murugan (2000).

Uma outra hipótese que pode ser investigada é a de adotar-se o índice global formado pela soma ponderada de todos os componentes principais que possuem autovalores não-nulos. Os pesos neste caso, também são os percentuais de variação explicadas pelo PC. Procedendo-se dessa forma, vem que:

$$IGM = 0.597(PC_1) + 0.224(PC_2) + 0.107(PC_3) + 0.039(PC_4) + 0.02(PC_5) + 0.01(PC_6) \quad (219)$$

Como os autovalores não-significativos são muito pequenos, a função objetivo de IGM sofrerá alterações muito pequenas. Portanto, o ponto de ótimo não deve sofrer alterações muito importantes.

Aplicando-se o algoritmo de mínimos quadrados à função IGM obtida a partir da equação (219), encontra-se um modelo de segunda ordem cujos autovalores são:

$$\lambda_1 = -0.3331; \lambda_2 = -0.2580; \lambda_3 = 0.1197 \text{ e } \lambda_4 = -0.1116$$

Adotando-se valores para os multiplicadores de Lagrange maiores que o autovalor máximo de IGM e recorrendo-se à análise de *Ridge*, obtém-se a tabela 6.34.

Tabela 6.34 – Iterações no método de *Ridge Analysis* para IGM (Total)

λ_L	0,105	0,100	0,090	0,080	0,077	0,0715
v	-0,1927	-0,1936	-0,1955	-0,1973	-0,1978	-0,1986
f	-1,4860	-1,5136	-1,5724	-1,6364	-1,6567	-1,6955
s	0,9837	0,9910	1,0055	1,0197	1,0239	1,0315
n	-0,1432	-0,1458	-0,5113	-0,1573	-0,1592	-0,1629
r	1,7982	1,8253	1,8827	1,9445	1,9641	2,0011
y	2,1734	2,1835	2,2037	2,2238	2,2297	2,2407

Decodificando-se as coordenadas do ponto de ótimo, obtém-se:

$$V = 27,603; F = 0,770; S = 0,672; N = 34,593$$

Nota-se claramente, que a adoção de todos os componentes principais não-nulos não altera substancialmente o índice global baseado apenas nos componentes principais significativos.

6.4.5 Discussões

Este exemplo ilustrou a aplicação da proposta de tese a um processo de soldagem por arco submerso (SAW), com sete respostas correlacionadas. Embora nem todos os pares de

respostas exibam correlações fortes, a maioria delas é significativa, chegando a coeficientes de correlação da ordem de 86%. De acordo com os testes de hipótese multivariados, o conjunto dados é realmente adequado à aplicação da proposta.

Analisando-se os resultados obtidos, pode-se concluir que a combinação da inversão das correlações com a adição ou subtração de limites de especificação, são procedimentos adequados e viáveis. Verificou-se também que a adoção de dependências lineares para representar os dois limites de especificação da resposta (TV) é um procedimento viável e que não impacta desfavoravelmente sobre o método proposto. Na abordagem multivariada proposta, não é necessário que se excluam as dependências lineares, como no caso do método de Khuri e Conlon (1981), o que se acredita ser uma vantagem.

Verificou-se que índice IGM baseado no percentual de explicação também é um procedimento eficaz e que a busca do ponto de ótimo, utilizando-se o conceito dos multiplicadores de Lagrange (*Ridge Analysis*) é uma alternativa viável.

Por fim, mostrou-se não ser necessária a consideração de todos os componentes principais para se determinar uma condição ótima de operação baseada em funções objetivo multivariadas, uma vez que neste caso os componentes menores agregam uma parte muito pequena da informação. As análises efetuadas com o estudo de caso possibilitaram a avaliação de todas as particularidades dispostas no item 6.4.1.

6.5 – CASO Nº. 5: OBTENÇÃO DE IGM A PARTIR DA RELAÇÃO SINAL-RUÍDO DE TAGUCHI

6.5.1 Visão Geral

Um das maiores dificuldades em se empregar o método multivariado de ACP à problemas de otimização múltipla é a harmonização dos sentidos de direção. Como solução a este problema, apresenta-se agora um estudo de caso para o qual o índice global multivariado pode ser obtido através da relação sinal-ruído de Taguchi. O caso utilizado como exemplo tem como objetivo a otimização simultânea de quatro parâmetros de qualidade de um processo de soldagem GMAW: penetração (P), diluição (D), largura (W) e reforço (R) do cordão de solda. Um CCD para três fatores (Tensão (t), Velocidade de alimentação do Arame (f) e Velocidade de Soldagem (s)), com seis pontos centrais e axiais, com $\alpha = 1,682$, foi utilizado para se determinar a condição ótima de soldagem para um processo MAG (*Metal Active Gas*).

Individualmente, o objetivo do estudo era maximizar P, D, W, mantendo-se R dentro de um intervalo conhecido.

Combinando as diversas respostas, Correia et al. (2005) apresentaram a seguinte função objetivo para o problema:

$$Of(i) = cp \frac{(P_t - p_{\exp(i)})^2}{P_t} + cd \frac{(D_t - d_{\exp(i)})^2}{D_t} + cw \frac{(W_t - w_{\exp(i)})^2}{W_t} + cr \frac{(R_t - r_{\exp(i)})^2}{R_t} \quad (216)$$

Onde: P_t , D_t , W_t e R_t representam os valores alvo desejáveis para as quatro respostas de interesse. Os subscritos $\exp(i)$ representam os valores experimentais obtidos com o CCD para cada uma das respostas, e cp , cd , cw e cr são os pesos de cada uma das respostas. Os pesquisadores adotaram $cp = 0.5$, $cd = 0.3$, $cw = 0.1$ e $cr = 0.1$, respectivamente. Correia et al. (2005) comentam que a minimização da função objetivo descrita pela equação (216) conduz à determinação dos níveis ótimos dos parâmetros de soldagem, os quais tornam as respostas de interesse o mais próximo possível dos valores individuais desejados.

A Tabela 6.35 apresenta os fatores e níveis utilizados no estudo de caso em questão.

Tabela 6.35 – Fatores e níveis do experimento (Correia et al., 2005)

Parâmetro	Níveis				
	-1,682	-1	0	+1	+1,682
Tensão (t) (V)	36	36,8	37,7	38,4	39,1
Velocidade de alimentação (f) (m/min)	3,9	5,4	6,9	8,3	9,7
Velocidade de Soldagem (s) (cm/min)	51,6	55	60	65	68,4

Como as respostas utilizadas neste caso possuem sentidos de otimização diferentes, aplicou-se sobre P, D e W a fórmula da relação Sinal-Ruído para maximização, tal como dado pela equação (183a), segundo o disposto no fluxograma da figura 5.4, do capítulo 5. Como se deseja que o reforço do cordão de solda (R) esteja dentro de um intervalo pré-determinado, com alvo igual a 1,5, optou-se por aplicar uma relação de Sinal-ruído do tipo *minimização* à diferença entre os dados experimentais e o alvo (R-1,5), tal como descrito pela equação (183b). Uma vez que as relações Sinal-ruído (SR_i) devem ser sempre maximizadas, é possível harmonizar os diferentes sentidos de otimização. Em seguida, promoveu-se a normalização das quatro relações, com a conseguinte obtenção dos dois primeiros componentes principais.

6.5.2 Análise de Componentes Principais

Tomando-se por base os dados de Correia et al. (2005), descritos pela Tabela B.5 do Anexo B, obtém-se a análise de componentes principais da tabela 6.36 a seguir. Verifica-se que os dois maiores autovalores referentes ao primeiro e ao segundo componentes principais, respectivamente, são responsáveis pela explicação de 86,8% da estrutura de variância dos dados originais. Como o índice global multivariado é dominado por PC_1 , ele manterá a mesma forma de correlação com as relações sinal-ruído (SN_i). Assim, pode-se supor que a minimização de IGM conduza à maximização das relações SN_i .

Tabela 6.36 – Análise de Componentes principais para o caso N° 5.

Autovalor	2,552	0,921	0,415	0,112
Proporção	0,638	0,230	0,104	0,028
Acumulado	0,638	0,868	0,972	1,000
Respostas	PC1	PC2	PC3	PC4
SR ₁	-0,475	0,616	0,321	0,541
SR ₂	-0,436	-0,600	0,664	-0,095
SR ₃	-0,572	0,308	-0,202	-0,733
SR ₄	0,507	0,408	0,644	-0,402

6.5.3 Otimização Multivariada

O arranjo de superfície de resposta proposto por Correia et al. (2005) é um CCD para 3 fatores, sem blocos. Logo, de acordo com a equação (85), $\alpha = \pm 1,682$.

Aplicando-se o método dos mínimos quadrados ordinários aos valores de IGM, calculado segundo as respostas descritas pela tabela B.5 e a equação (181), pode-se estabelecer o problema de otimização da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar } IGM &= \sum_{i=1}^m [\lambda_i(PC_i)] = 2,55.PC_1 + 0,92.PC_2 \\ \text{Sujeito a: } (a) \quad &x^T x \leq \alpha^2, \quad \alpha = 2^{(k/4)} \end{aligned} \quad (220)$$

O modelo quadrático completo foi aquele que apresentou o melhor ajuste para a representação de IGM e pode ser escrito em termos das variáveis codificadas t , s e f , tal como a equação (220 a):

$$\begin{aligned} IGM &= 1,28 + 0,01t - 2,98f + 2,55s - 1,82t^2 - 0,95f^2 + 0,91s^2 + 0,64tf - \\ &- 0,25ts + 1,92fs \end{aligned} \quad (220 \text{ a})$$

A Tabela 6.37 exhibe os resultados de aplicação do método proposto. Nesta tabela, T, F e S representam os valores decodificados dos parâmetros de soldagem. As colunas MSR e GA representam, respectivamente, o conjunto de resultados obtidos utilizando-se a metodologia de superfície de resposta e algoritmos genéticos (Correia et al, 2005). A coluna D representa os resultados obtidos com o *desirability* e, IGM, os resultados alcançados com esta proposta de tese. Para maiores detalhes sobre Algoritmos genéticos (GA) ver Kim e Rhee (2004).

Tabela 6.37 – Comparação entre os pontos de ótimo obtidos por diferentes métodos.

Resposta	Alvo	MSR	IGM	GA	D
P	5,3	5,5	5,54	5,5	5,3
D	100	93,8	93,34	92,2	97,8
W	8,5	8,3	9,09	6,5	8,64
R	1,5	2,0	1,93	2,2	1,56
Variável	Limites	MSR	IGM	GA	D
T	36,0 < T < 39,1	37,5	37,31	38,4	37,3
F	3,9 < F < 9,7	8,5	9,01	9,7	8,22
S	50 < S < 70	51,6	56,3	64,5	51,59
ρ^2	2,829	4,04	2,829	5,29	3,91

⁽¹⁾ – Aplicação da restrição esférica à função objetivo proposta por Correia et al. (2005).

6.5.4 Discussões

A tabela 6.37 mostra como o método proposto se aproxima razoavelmente da solução apresentada por Correia et al. (2005), sem infringir nenhum dos limites impostos para as variáveis independentes. A solução obtida pela aplicação de algoritmos genéticos (GA) apresenta diferenças um pouco maiores. Segundo Correia et al. (2005), a vantagem do método dos algoritmos genéticos é não ser necessária a construção de modelos para a função objetivo. Neste caso, especificamente, a solução que mais se aproximou dos valores alvo estabelecidos foi aquela fornecida pela função *Desirability*. Observando-se, entretanto, a última linha da tabela 6.37, verifica-se que os valores ótimos obtidos com os métodos não satisfazem à restrição esférica comumente imposta à otimização das funções objetivo singulares, formadas a partir de arranjos centrais compostos rotacionáveis. Assim, as soluções encontradas caem fora da região experimental Ω , o que segundo Montgomery (2001), não é uma escolha muito segura. A Figura 6.17 retrata esta condição. Observa-se que, para alguns pontos, a solução encontra-se nos limites de construção dos gráficos de contorno.

Deste exemplo, pode-se concluir que a proposta estabelecida no fluxograma da figura 5.4 é viável e adequada aos casos onde as múltiplas respostas tenham diferentes sentidos de otimização.

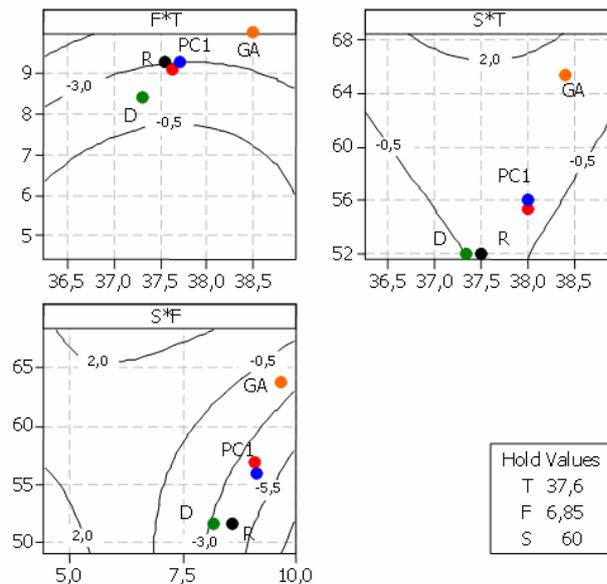


Figura 6.17 – Gráfico comparativo dos métodos.

Legenda: (R) – MSR; (PC₁) – 1º PC; (GA) – Algoritmo Genético; (D) – *Desirability*.

6.6 CASO Nº. 6: ABORDAGEM MULTIVARIADA PARA PROBLEMAS DUAIS

6.6.1 Visão Geral

O estudo de caso nº. 6 será utilizado para se estudar a aplicabilidade desta proposta de tese para os arranjos de superfície de resposta utilizados na análise de projetos robustos. Além disso, será discutida a criação de restrições não-lineares multivariadas para os problemas duais, tal como descrito no item 5.8.1. Em termos matemáticos, seu equacionamento é definido como a equação (206) do capítulo 5.

Como forma alternativa de verificação, uma maneira conjunta de se avaliar a distância em relação ao alvo concomitantemente com o valor da variância para uma dada solução, é a utilização do conceito de “Projeto Robusto” de Taguchi.

Segundo Chandra (2001) e Kim e Cho (2002), o “Projeto Robusto” é um método efetivo de se determinar as condições de ótimo para as variáveis controláveis de um processo através da combinação de técnicas de projeto de experimentos e métodos de otimização, com o objetivo principal de reduzir os custos do processo e melhorar sua qualidade. De acordo com Phadke (1989), Taguchi se utiliza de uma expressão matemática para se computar a relação entre média e desvio denominada de “Função Perda” (Chandra, 2001), ou “Relação Sinal-Ruído”, como cita Montgomery (2003).

Como a perda da qualidade é considerada em termos da assimetria do processo em relação ao valor alvo para a característica de qualidade do produto ou processo, a função perda $L(y)$ pode ser escrita como:

$$L(y) = \begin{cases} k_1(y-T)^2; & y \leq T \\ k_2(y-T)^2; & y > T \end{cases} \quad (221)$$

Os coeficientes k_1 e k_2 são positivos e representam o custo do não-qualidade.

De acordo com Kim e Cho (2002), o valor esperado para função perda (EQL, do inglês *Expected Quality Loss*), pode ser dado por:

$$E[L(y)] = \int_{-\infty}^{\infty} L(y)f_Y(y)dy \quad (222)$$

Onde $f_Y(y)$ representa a função densidade de probabilidade (f.d.p.) do desempenho do produto Y e $L(y)$ é a função perda dada pela equação (221). Assim, a função perda pode ser reescrita como:

$$E[L(y)] = \int_{-\infty}^T L(y)f_Y(y)dy + \int_T^{\infty} L(y)f_Y(y)dy \quad (223)$$

$$EQL = E[L(y)] = \int_{-\infty}^T k_1(y-T)^2 f_Y(y)dy + \int_T^{\infty} k_2(y-T)^2 f_Y(y)dy \quad (224)$$

Transformando Y em uma variável aleatória normal padronizada e usando:

$$\int_r^{\infty} \phi(z)dz = 1 - \Phi(r), \quad \int_r^{\infty} z\phi(z)dz = \phi(r) \quad e \quad \int_r^{\infty} z^2\phi(z)dz = 1 - \Phi(r) + r\phi(r),$$

Fazendo-se:

$$\hat{\sigma}(T - \hat{\mu})\phi\left(\frac{T - \hat{\mu}}{\hat{\sigma}}\right) = \zeta_1 \quad (225)$$

e

$$\Phi\left(\frac{T - \hat{\mu}}{\hat{\sigma}}\right)\left[\hat{\sigma}^2 + (T - \hat{\mu})^2\right] = \zeta_2 \quad (226)$$

Verifica-se que:

$$EQL = E[L(y)] = \left\{k_1\left[\hat{\sigma}^2 + (T - \hat{\mu})^2\right]\right\} - (k_1 - k_2)(\zeta_1 + \zeta_2) \quad (227)$$

Nas equações (225) e (226), $\phi(\cdot)$ e $\Phi(\cdot)$ representam, respectivamente, a função densidade de probabilidade (p.d.f.) e a distribuição acumulada de probabilidade (c.d.f.) e.

Para se verificar se o método proposto nesta tese é adequado para substituir as réplicas da característica Y e a sua respectiva equação para a média, será utilizado o conceito do valor esperado para a função perda.

Para a avaliação numérica da proposta serão utilizados os dados adaptados de Gunaraj e Murugan (2002). Neste exemplo, três parâmetros de processo (Tensão (x_1), Velocidade de soldagem (x_2) e Taxa de alimentação (x_3)) são utilizados para criar uma equação de otimização para a largura da zona de crescimento de grão (GGZ), obtida em função dos

parâmetros utilizados em um processo de soldagem SAW. Segundo Gunaraj e Murugan (2002), a GGZ é uma porção da região supercrítica da ZTA (Zona Termicamente Afetada) e influencia significativamente as propriedades do cordão de solda. A GGZ deve ser tão estreita quanto possível, e um valor alvo para o processo pode ser admitido como $GGZ = 80,0$. Baseado na variância experimental, três réplicas foram simuladas para cada uma das 20 combinações de um arranjo central composto. Para efeito de estudo, o valor alvo para o desvio padrão é 3,0.

Kim e Rhee (2003) também aplicaram a abordagem proposta por Vining e Myers (1990) de utilizar a metodologia de superfície de resposta para alcançar os objetivos da filosofia de Taguchi. A aplicação estudada tratava da otimização da penetração (P) de um cordão de solda obtida com os parâmetros de um processo GMAW. Neste caso específico, foram realizadas cinco réplicas de cada condição experimental, obtidas com arranjo central composto de face centrada ($|\alpha = 1|$), com um ponto central por réplica, para dois fatores: (x_1) a velocidade de alimentação do arame e (x_2), a velocidade de soldagem. Em seguida, foram calculados a média e o desvio padrão de cada experimento. Uma análise deste problema, empregando-se a abordagem multivariada, encontra-se no final desta seção.

6.6.2 Análise de Componentes Principais

De acordo com a análise de componentes principais da Tabela 6.38, realizada utilizando-se os dados adaptados de Gunaraj e Murugan (2002) (Tabela B.6, Anexo B), verifica-se que o primeiro componente principal isoladamente, explica 90% da estrutura de todas as réplicas. Assim, a restrição do problema será escrita em termos de PC_1 .

Tabela 6.38 - Análise de ACP para a matriz de Correlação das respostas.

Autovalores	2,6994	0,2854	0,0153
Proporção	0,900	0,095	0,005
Acumulado	0,900	0,995	1,000
Resposta	Autovetores		
Y1	-0,554	0,774	0,306
Y2	-0,604	0,221	-0,787
Y3	-0,573	-0,621	0,535

6.6.3 Otimização Multivariada

Os valores estimados para as funções de resposta da média e da variância e a equação de regressão em termos do primeiro componente principal (PC₁) são respectivamente:

$$\hat{\mu}(x) = 84,88 + 15,29x_1 + 0,24x_2 + 18,80x_3 - 0,52x_1^2 - 11,80x_2^2 + 0,39x_3^2 + 0,21x_1x_2 + 3,60x_1x_3 - 4,42x_2x_3 \quad (228)$$

$$\hat{\sigma}(x) = 4,53 + 1,84x_1 + 4,28x_2 + 3,73x_3 + 1,16x_1^2 + 4,40x_2^2 + 0,94x_3^2 + 1,20x_1x_2 + 0,73x_1x_3 + 3,49x_2x_3 \quad (229)$$

$$PC_1(x) = -0,60 - 1,01x_1 - 0,03x_2 - 1,36x_3 + 0,06x_1^2 + 0,82x_2^2 + 0,01x_3^2 + 0,14x_1x_2 - 0,08x_1x_3 + 0,41x_2x_3 \quad (230)$$

Usando estas equações, um sistema de otimização para o problema dual pode ser escrito em termos do primeiro principal, como:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & \hat{\sigma}(x) = 4,53 + 1,84x_1 + 4,28x_2 + 3,73x_3 + 1,16x_1^2 + 4,40x_2^2 + \\ & + 0,94x_3^2 + 1,20x_1x_2 + 0,73x_1x_3 + 3,49x_2x_3 \\ \text{Sujeito a:} \quad & PC_1(x) = -0,60 - 1,01x_1 - 0,03x_2 - 1,36x_3 + 0,06x_1^2 + 0,82x_2^2 \\ & + 0,01x_3^2 + 0,14x_1x_2 - 0,08x_1x_3 + 0,41x_2x_3 = T \\ & \sum_{i=1}^k x_i^2 \leq \rho^2 \end{aligned} \quad (230 \text{ a})$$

No sistema de equações (230 a), os valores de T e ρ^2 são, respectivamente, -0,252 e 2,829. O valor do alvo (T) foi encontrado utilizando-se os conceitos fundamentais da análise de componentes principais para um valor de alvo $T = 80$. Os valores padronizados para o alvo em cada réplica são respectivamente: -0.119; 0.459; 0.088. Calculando-se os coeficientes de um modelo de regressão OLS de PC₁ em relação às 3 réplicas, ou considerando a combinação linear dos autovetores da matriz de correlação para o primeiro componente e os valores das réplicas padronizados, encontra-se o valor de T descrito anteriormente.

Tabela 6.39 – Análise comparativa dos métodos.

Modelo	x_1^*	x_2^*	x_3^*	$\hat{\mu}(x^*)$	$\hat{\sigma}(x^*)$	EQL
Vining e Myers (1990)	0,1290	-0,2850	-0,2850	80,000	3,151	19,859
ACP	0,1244	-0,2905	-0,2709	80,167	3,176	19,382

Comparando-se a proposta de Vining e Myers (1990) com a abordagem multivariada da ACP, verifica-se que os resultados referentes ao ponto de ótimo (x_1^* , x_2^* , x_3^*) e o valor de EQL são muito próximos. Logo, a abordagem é viável, apesar de ser mais complexa que a proposta original.

6.6.4 Aplicação ao Estudo de Kim e Rhee (2003)

Como no item anterior, será repetida a abordagem multivariada dual para os dados de Kim e Rhee (2003) (Tabela B.7, Anexo B). Estes dados referem-se à otimização simultânea da média e da variância da penetração (P) de um cordão de solda, obtida através da variação da velocidade de alimentação de arame (x_1) e velocidade de soldagem (x_2) em um processo GMAW. Para cada uma das nove combinações experimentais de um arranjo central composto de face centrada, com um ponto central apenas, foram geradas cinco réplicas da resposta (P), obtidas com a simulação de um fator de ruído formado pela distância entre as juntas a serem soldadas. A amplitude de variação foi estabelecida entre 0,4 e 1,2 mm. Com esta estratégia Kim e Rhee (2003) conseguiram avaliar qual a combinação de fatores e níveis seria capaz de minimizar a influência da variância, enquanto se aproximava a penetração média (\bar{P}) de um valor alvo pré-estabelecido.

A análise de componentes principais para as 5 réplicas revelou um $\lambda_1 = 4,7$ e uma explicação de 94,2% da estrutura de variação só por PC_1 . Usando a abordagem multivariada e considerando como restrição o fato do módulo de α ser igual a 1 para os arranjos centrais compostos de face centrada, um sistema de otimização para o problema dual pode ser escrito em termos do primeiro principal, como:

$$\begin{aligned}
 \text{Minimizar} \quad & \hat{\sigma}(x) = 0,4813 + 0,1174x_1 + 0,0515x_2 - 0,1515x_1^2 + \\
 & \quad \quad \quad + 0,0115x_2^2 + 0,0462x_1x_2 \\
 \text{Sujeito a :} \quad & PC_1(x) = 0,15 - 1,86x_1 + 1,66x_2 - 0,24x_1^2 + 0,01x_2^2 + 0,01x_1x_2 = T \\
 & -1 \leq x_i \leq +1 \quad i = 1, 2, \dots, k
 \end{aligned} \tag{230 b}$$

No sistema de equações (230 b), T pode ser determinado estabelecendo-se uma equação de regressão entre PC_1 e a resposta média, que é a variável representada em termos de componentes principais. Na Tabela 6.40, o índice (a) indica uma comparação dos métodos de Vining e Myers (1990), Kim e Rhee (2003) e a proposta desta tese, para um valor alvo $T = 4$ mm. O índice (b) indica uma comparação dos métodos para um alvo definido como $T = 3,5$

mm e em (c), $T = 3,0$ mm. A proposta de Kim e Rhee (2003) utiliza a minimização da função $MSE = (\hat{\mu} - T)^2 + \hat{\sigma}^2$.

Tabela 6.40 – Análise comparativa dos métodos.

Modelo	x_1^*	x_2^*	T	$\hat{\mu}(x^*)$	$\hat{\sigma}(x^*)$
Vining e Myers (a)	0,988	-0,943	4,0	3,9975	0,3679
Vining e Myers (b)	0,994	0,210	3,5	3,5001	0,4693
Vining e Myers (c)	0,136	0,253	3,0	3,0000	0,5098
Kim e Rhee (a)	1,000	-0,982	4,0	4,0214	0,3623
Kim e Rhee (b)	-0,098	-0,996	3,5	3,4254	0,4329
Kim e Rhee (c)	-1,000	-0,900	3,0	2,9927	0,2169
ACP(a)	1,000	-0,922	-3,479	3,9952	0,4095
ACP(b)	1,000	0,213	-1,593	3,5025	0,4586
ACP(c)	0,756	1,000	0,293	3,0104	0,5464

6.6.5 Discussões

Este exemplo demonstra que as variáveis latentes também podem ser utilizadas como restrições em problemas de otimização não-linear e que a abordagem multivariada pode ser aplicada aos problemas de otimização duais utilizados em projetos robustos.

Embora a abordagem multivariada seja mais complexa que as propostas convencionais, não se pode negar que a alta correlação estabelecida em geral pelas réplicas, favoreça a um procedimento como o proposto. Por outro lado, os dois exemplos mostram como é possível se obter equações de restrição multivariadas para problemas de otimização. Embora tenha sido usado o enfoque dual, acredita-se que em sistemas com um grande número de restrições, a abordagem multivariada possa ser aplicada na obtenção de uma restrição singular, desde que tais equações tenham evidentemente uma estrutura de correlação compatível. Como não se encontrou nada parecido na literatura, acredita-se que esta seja outra contribuição desta pesquisa.

Este caso ilustra também a aplicação do enfoque multivariado a um CCD de face centrada. Depreendem-se dos resultados, que os arranjos de superfície de resposta utilizados nos experimentos são os principais responsáveis pela definição das restrições a serem utilizadas pelos métodos de otimização e reforça-se a hipótese de que a aplicação do método multivariado independe do tipo de arranjo experimental escolhido.

6.7 - CASO Nº. 7: REPRESENTAÇÃO DE RÉPLICAS ATRAVÉS DE COMPONENTES PRINCIPAIS

6.7.1 Visão Geral

A formação das estruturas de correlação tem muitas vezes uma origem natural. Um caso típico dessa situação são as réplicas das respostas utilizadas em estudos experimentais. Por definição, se os resíduos não contêm padrões não-aleatórios, se são normais, independentes e identicamente distribuídos, então, a resposta estudada é adequada para a modelagem do fenômeno de interesse e espera-se que possua apenas erro aleatório. Assim, é evidente que aparecerão correlações fortes entre as réplicas, salvo se algum fator de ruído não interferir significativamente sobre as observações.

Dentro do contexto desta pesquisa, portanto, decidiu-se investigar se a estrutura de correlação entre as réplicas de algumas respostas também poderiam ser utilizadas para a construção de modelos de otimização baseado em componentes principais. Este caso é bem parecido com o estudo anterior.

6.7.2 O Processo RSW – *Resistance Spot Welding*

Para ilustrar esta investigação, será utilizado o trabalho de Darwish e Al-Dekhial (1999). Neste estudo, os pesquisadores investigaram a influência de quatro fatores sobre a área soldada e a resistência à ruptura dos cordões soldados, em um processo de soldagem por resistência (*RSW – Resistance Spot Welding*). A solda ponto é o mais conhecido e freqüente método de soldagem por resistência e pode ser utilizado em uma ampla variedade de aplicações.

Segundo Wainer et al (1992), a junção de duas peças na soldagem por resistência elétrica é feita através da geração de calor, devida à passagem da corrente elétrica e da aplicação de pressão entre as peças. Durante o processo, as peças aquecem-se e ocorre a fusão localizada no ponto de contato na superfície de separação entre ambas. A geração de calor se dá em função da resistência do conjunto à passagem da corrente elétrica.

6.7.3 Arranjo Experimental

Para atingir os objetivos propostos, Darwish e Al-Dekhial (1999) utilizaram um arranjo central composto com 30 experimentos para quatro fatores, com três réplicas para cada uma das duas respostas de interesse: Área de soldagem e Resistência à ruptura. Os fatores e níveis utilizados estão na tabela 6.41 a seguir. Os dados experimentais constam da seção de Anexos B, tabela B.9.

Tabela 6.41. Planilha Experimental.

Fatores	Unidade	Níveis				
Corrente (I)	kA	13,8	15,2	16,6	17,9	19,4
Força (F)	N	756	980	1204	1428	1652
Tempo (T)	ms	75	140	205	270	335
Espessura das chapas (Th)	mm	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5

6.7.4 Análise das Correlações entre as Respostas

A Tabela 6.42 apresenta os resultados de seis testes multivariados para o conjunto de dados formado pelas 6 réplicas em estudo. Os resultados apresentados foram obtidos utilizando-se um programa escrito em Matlab 6.5 ® que consta do Apêndice C desta tese. Este programa foi desenvolvido porque a maioria dos softwares estatísticos não contém os testes e índices de adequação utilizados nesta pesquisa. Adotou-se neste caso, $n = 30$ (número de observações por resposta), para $p = 6$ respostas. Neste caso específico, adotou-se $q = 1$ para se testar a hipótese de que apenas o primeiro autovalor λ_1 (referente à PC_1) é suficiente para representar a estrutura de correlação do conjunto original. Estabeleceu-se como nível de significância $\alpha = 5\%$.

O valor de p menor do que o nível de significância α adotado indica, no caso do teste de Isotropia, que os eixos representativos dos componentes não têm a mesma importância. Para os parâmetros escolhidos, a rejeição da hipótese nula de isotropia revela que o primeiro componente principal é distinto dos demais componentes. Logo, PC_1 é um bom representante do conjunto original. A rejeição da hipótese nula para o teste de Lawley, indica que o segundo autovalor também é diferente dos autovalores menores, entretanto, também é diferente do primeiro autovalor. Já para o teste de Bartlett, a rejeição da hipótese nula indica que as correlações existentes entre as respostas são suficientemente fortes para se adotar uma abordagem multivariada. Para valores próximos de zero de I_{CG} , pode-se afirmar que há uma

correlação quase perfeita entre as variáveis originais. Já os valores de I_D e I_K bem maiores que zero, indicam que a estrutura de correlação apresentada pode ser adequadamente representada por componentes principais.

Tabela 6.42 - Testes e Índices de adequação para aplicação da ACP às respostas.

Testes	Valor Crítico	Valor de Teste	G.L.	Valor P
Isotropia	23,68	427,70	14	0,000
Lawley	23,68	127,85	14	0,000
Bartlett	24,99	264,49	15	0,000
ÍNDICES		I_{CG} 4,076 x 10 ⁻⁵	I_D 39,09	I_K 5,054

Além dos testes descritos pela tabela 6.42, as próprias correlações entre as respostas apresentados na tabela 6.43, indicam que a abordagem multivariada é adequada para o caso. Nota-se que todas as correlações são significativas e fortes.

Tabela 6.43 - Análise de Correlação das propriedades dos modelos.

	FL1	FL2	FL3	A1	A2	A3
FL2	0,947 ^(r) 0,000 ^(p)					
FL3	0,945 0,000	0,964 0,000				
A1	0,799 0,000	0,733 0,000	0,768 0,000			
A2	0,738 0,000	0,677 0,000	0,691 0,000	0,924 0,000		
A3	0,726 0,000	0,685 0,000	0,701 0,000	0,880 0,000	0,926 0,000	
PC1	-0,939 0,000	-0,912 0,000	-0,924 0,000	-0,928 0,000	-0,900 0,000	-0,893 0,000

^(r) – Coeficiente de correlação de Pearson; ^(p) – Valor de P (*P-Value*).

6.7.5 Análise de Componentes Principais

A Tabela 6.44 ilustra a preponderância do primeiro componente principal. Como se pode perceber, PC_1 é suficiente para explicar 83,9% da estrutura de variação das seis respostas.

Além disso, percebe-se que PC_1 mantém correlações fortes e negativas com todas as respostas. Desse modo, como se deseja maximizar a resistência à ruptura do cordão de solda

(F) e também a área soldada (A), o problema de otimização poderá ser escrito em termos da minimização da equação de mínimos quadrados obtida para PC₁.

Tabela 6.44 – Análise de componentes principais para as respostas do exemplo 7.

Autovalor	5,0361	0,7019	0,1181	0,0628	0,0500	0,0311
Proporção	0,8390	0,1170	0,0200	0,0100	0,0080	0,0050
Acumulado	0,8390	0,9560	0,9760	0,9860	0,9950	1,0000
Respostas	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6
F1	-0,418	0,336	-0,136	0,435	-0,702	0,112
F2	-0,406	0,451	0,198	0,078	0,361	-0,676
F3	-0,412	0,413	0,034	-0,391	0,297	0,646
A1	-0,414	-0,313	-0,686	-0,435	-0,080	-0,254
A2	-0,401	-0,469	-0,064	0,612	0,441	0,215
A3	-0,398	-0,443	0,683	-0,297	-0,298	-0,049

6.7.6 Modelos Matemáticos Multivariados

Antes de considerar os modelos quadráticos de PC₁ como uma função objetivo adequada à aplicação do GRG, devem-se realizar os testes de significância estatística, verificando-se se os modelos quadráticos completos são realmente adequados.

A Tabela 6.45 revela que para este caso, o modelo reduzido representa melhor o comportamento não linear de PC₁. Este modelo não contém interações, e só possui um termo quadrático.

De acordo com o que mostra a Tabela 6.46, o modelo reduzido não apresenta falta de ajuste, o que o qualifica como um bom representante da singularidade multivariada representada pelo primeiro componente principal.

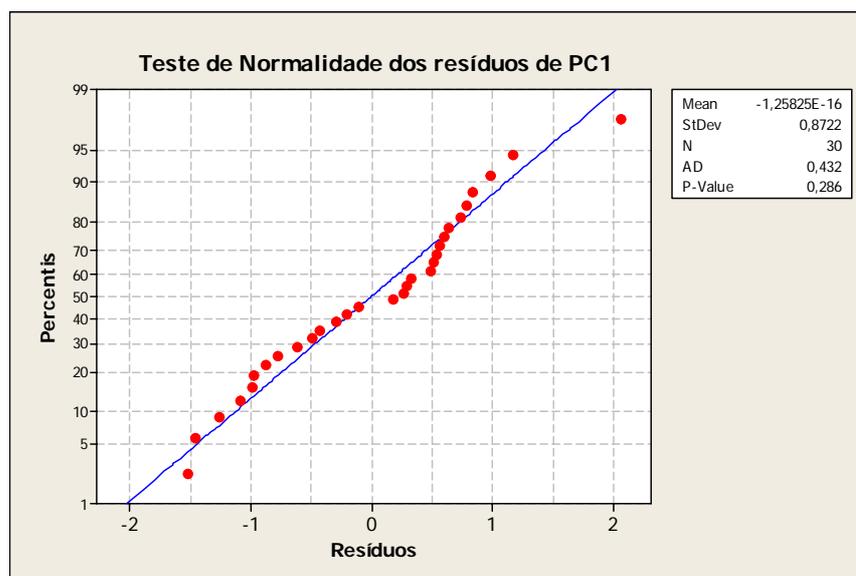
Tabela 6.45 - Análise do modelo quadrático multivariado.

Termo	PC₁			
	Coef.	Erro Padrão	t₀	p_t
b ₀	-0,5120	0,2260	-2,266	0,033
b ₁	-1,9231	0,1957	-9,826	0,000
b ₂	0,7479	0,1957	3,821	0,001
b ₃	-0,3708	0,1957	-1,895	0,070
b ₄	-0,5285	0,1957	-2,700	0,012
b ₄ ²	0,6401	0,1787	3,583	0,002
	R ² (adj.)	81,7%		S=0,951

Tabela 6.46 - ANOVA do modelo PC₁

Fonte	Graus de Liberdade	Soma de quadrados	Média Quadrática	F ₀	p _r
Regressão	5	123,985	24,7969	26,98	0,000
Linear	4	112,186	28,0465	30,51	0,000
Quadrática	1	11,799	11,7987	12,84	0,002
Interação	24	22,062	0,9193	*	*
Erro Residual	19	18,039	0,9494	1,18	0,467
Falta de Ajuste	5	4,023	0,8046		
Erro Puro	29	146,047			
Total	5	123,985	24,7969	26,98	0,000

A Figura 6.18 apresenta o teste de normalidade de Anderson-Darling. Com um valor de p maior que o nível de significância de 5%, pode-se afirmar que os resíduos provenientes do modelo quadrático reduzido de PC₁ seguem distribuição normal. Logo, o modelo é confiável, e deve se passar à fase de otimização.

Figura 6.18 – Análise de resíduos de PC₁.

6.7.7 Otimização Multivariada

De acordo com as correlações existentes entre o conjunto de réplicas das duas respostas de interesse e a variável latente PC₁, o problema de otimização pode ser escrito como o Caso 1 e a equação (199).

Como o experimento realizado foi conduzido segundo um arranjo composto central para 4 fatores, sem blocos, o valor absoluto de α , fornecido pela equação (85), é 2. Levando esta restrição para o problema de minimização de PC_1 , obtêm-se os resultados contemplados pela Tabela 6.47.

Tabela 6.47 - Resultados Comparativos entre os métodos.

Variável Independente	Restrições Esféricas	Valor Ótimo	
		PC_1	D
Corrente (I)	$-2 \leq I \leq +2$	1,823	2,000
Força (F)	$-2 \leq F \leq +2$	-0,709	-0,179
Tempo (T)	$-2 \leq T \leq +2$	0,351	-1,710
Espessura (Th)	$-2 \leq Th \leq +2$	0,226	1,222
Variável Dependente	Objetivo	Valor Ótimo	
F ₁	Maximizar	1258,4	1264
F ₂	Maximizar	1222,9	1223
F ₃	Maximizar	1205,4	1217
A ₁	Maximizar	23,5	26,0
A ₂	Maximizar	24,2	26,7
A ₃	Maximizar	25,3	29,6

6.7.8 Discussões

Os resultados do método multivariado são compatíveis com os resultados alcançados pelo *desirability*, entretanto, apesar das variáveis independentes terem sido encontradas dentro dos limites individuais estabelecidos, o método *desirability* (disponível no Minitab®) fornece valores melhores. No entanto, ao se analisar a restrição esférica para o ponto de ótimo, encontra-se $x^T x = 8,45$, valor bem maior que a restrição imposta ($\rho^2 \leq 4$).

6.8 – CASO Nº. 8: OTIMIZAÇÃO DE IGM BASEADA EM RESTRIÇÕES CUBOIDAIS

6.8.1 Visão Geral

Ao contrário dos casos anteriores onde se empregou um arranjo central composto, este exemplo ilustra a aplicação de componentes principais para a obtenção de uma função objetivo, para qual a restrição não é mais esférica ($x^T x \leq \rho^2$), mas sim, cuboidal. Para restrições cuboidais, os valores ótimos em termos codificados devem pertencer ao intervalo formado por $-1 \leq x_i \leq +1$, com $i = 1, 2, \dots, k$. Desse modo, este exemplo é utilizado para se testar se o procedimento desenvolvido também apresenta resultados satisfatórios quando se adotam apenas restrições cuboidais para a função objetivo multivariada. Novamente, empregar-se-á o conceito de índice global multivariado (IGM) como forma de obtenção da função objetivo.

Em relação aos dados utilizados, este caso trata de um processo de soldagem à Laser de CO₂, otimizado experimentalmente utilizando-se um arranjo de superfície de resposta do tipo Box-Behnken. Utilizando-se os dados de Olabi et al (2006) em conjunto com os resultados apresentados por Benyounis et al (2005a e 2005b), a solução obtida com a análise de componentes principais será comparada com os métodos de Taguchi e redes neurais artificiais empregados pelos pesquisadores em questão.

6.8.2 O Processo de soldagem com Laser de CO₂

Segundo Benyounis et al (2005b), o processo de soldagem com Laser de CO₂ tem adquirido grande importância industrial em razão de suas vantagens sobre outros processos. Este tipo de soldagem se caracteriza pela geração de zona fundida com laterais paralelas, com cordões estreitos e alta penetração. Estas características são obtidas em função da energia ser altamente concentrada.

Como em outros processos, os parâmetros de entrada determinam a forma do cordão de solda em função do controle do calor fornecido à operação. Para se obter cordões de solda com boa qualidade, portanto, a combinação da fonte de energia, da velocidade de soldagem, da distância focal, do gás de proteção dentre outros, devem ser adequadamente selecionados. Assim, a aplicação da metodologia de superfície de resposta é uma alternativa bem apropriada de otimização do processo.

6.8.3 Arranjo Experimental

A Tabela 6.48 mostra os fatores e respectivos níveis utilizados no experimento desenvolvido por Olabi et al (2006) e Benyounis et al (2005a e 2005b). Os resultados obtidos pelos pesquisadores utilizando-se um arranjo de superfície de resposta do tipo Box-Behnken, encontram-se na Tabela B.10 da seção de Anexos desta tese.

Tabela 6.48 - Planilha Experimental.

Fatores	Unidade	Níveis dos Fatores		
Potência do Laser (A)	kW	1,2	1,3125	1,425
Velocidade de Soldagem (B)	cm/min	30	50	70
Posição Focal (C)	mm	0	1,25	2,5

6.8.4 Análise de Componentes Principais

Analisando-se os pares de correlação estabelecidos entre as seis respostas de interesse para o experimento, descritos pela Tabela 6.49, pode-se perceber que a estrutura de dependência favorece a aplicação na análise multivariada.

A Tabela 6.50 apresenta os autovalores e autovetores da matriz de correlação formada com as respostas originais do experimento com soldagem à Laser CO₂. Nela verifica-se que os dois primeiros componentes principais são responsáveis pela explicação de praticamente 80% da variação do conjunto original. Seguindo os critérios de Kaiser e Cattell, apenas os dois primeiros componentes apresentam autovalores maiores que a unidade, o que os habilita a representantes significativos das respostas experimentais.

Tabela 6.49 - Análise de Correlação entre as respostas experimentais.

	P	W	W_{HAZ}	P/W	P/W_{HAZ}	HI	PC₁	PC₂
W	0,331 0,195							
W_{HAZ}	0,736 0,001	0,541 0,025						
P/W	0,309 0,227	-0,767 0,000	-0,095 0,716					
P/W_{HAZ}	0,091 0,728	-0,477 0,053	-0,578 0,015	0,587 0,013				
HI	0,345 0,174	0,470 0,057	0,619 0,008	-0,236 0,362	-0,438 0,079			
PC₁	0,441 0,077	0,850 0,000	0,838 0,000	-0,585 0,014	-0,738 0,001	0,744 0,001		
PC₂	-0,841 0,000	0,205 0,430	-0,463 0,062	-0,762 0,000	-0,377 0,135	-0,188 0,471	0,000 1,000	
IGM	0,079 0,763	0,863 0,000	0,593 0,012	-0,835 0,000	-0,826 0,000	0,612 0,009	0,921 0,000	0,389 0,123

Tabela 6.50 – Análise de componentes principais para as respostas do exemplo 8.

Autovalor	3,0585	1,7224	0,6952	0,4877	0,0217	0,0145
Proporção	0,5100	0,2870	0,1160	0,0810	0,0040	0,0020
Acumulado	0,5100	0,7970	0,9130	0,9940	0,9980	1,0000
Respostas	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6
P	0,2520	-0,6410	-0,3410	0,1490	0,2850	-0,5530
W	0,4860	0,1560	-0,5710	-0,0310	-0,6400	0,0540
W _{HAZ}	0,4790	-0,3520	0,1770	0,3320	0,1620	0,6920
P/W	-0,3340	-0,5810	0,3090	0,0420	-0,6730	-0,0060
P/W _{HAZ}	-0,4220	-0,2870	-0,5610	-0,4320	0,1690	0,4580
HI	0,4250	-0,1430	0,3410	-0,8230	0,0180	-0,0640
P	0,2520	-0,6410	-0,3410	0,1490	0,2850	-0,5530

A Figura 6.19 apresenta um dendograma obtido a partir da análise hierárquica de *Cluster*, com similaridades calculadas através do método de Ward.

Nota-se que a resposta P está associada ao segundo componente principal, enquanto que as demais respostas formam um grupo com PC₁ e IGM. Com estes agrupamentos, é possível posteriormente, se entender como a otimização baseada em componentes principais pode afetar as respostas originais, conduzindo-as aos valores desejados.

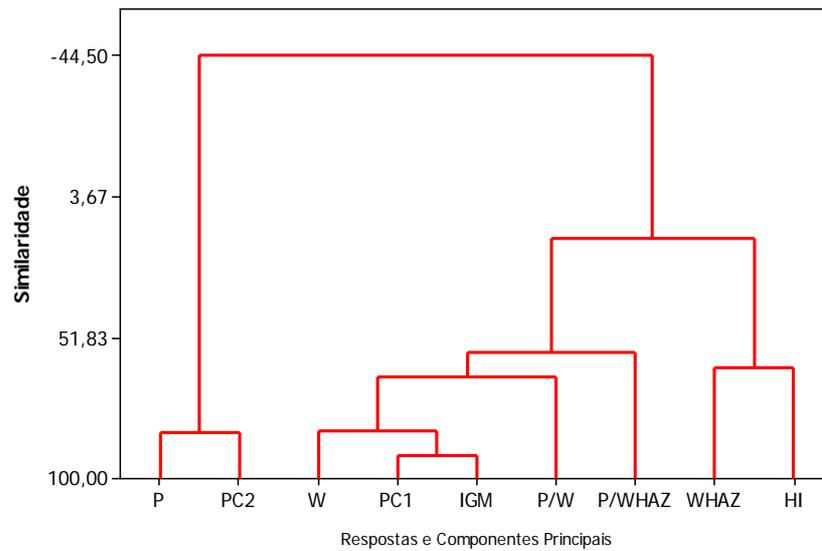


Figura 6.19 - Dendrograma para as correlações absolutas entre as respostas.

Nota: Método de Ward.

6.8.5 Modelo Matemático Multivariado

A estrutura de correlação apresentada pelos dados deste exemplo sugere que apenas o primeiro componente principal não é suficiente para explicar a variabilidade do conjunto original. Assim, novamente recorre-se ao índice global multivariado (IGM), formado a partir dos dois maiores componentes principais dos dados originais, PC_1 e PC_2 , respectivamente. A análise de componentes principais realizada previamente, aponta que a utilização desses dois componentes é responsável pela explicação de 80% da variação do conjunto original.

O índice global multivariado (IGM) apresentado na tabela 6.51 foi obtido, portanto, multiplicando-se cada componente principal pelo seu respectivo autovalor, de acordo com a equação 202 do **Caso 4**, constante do capítulo 5. Assim, IGM é igual a:

$$IGM = 3,06PC_1 + 1,72PC_2 \quad (231)$$

Após se calcular IGM utilizando a equação (231), pode se aplicar sobre as observações resultantes o método OLS. A análise estatística revela que o modelo quadrático completo de IGM não apresenta falta de ajuste e possui um coeficiente de determinação de 92,3% (Tabela 6.51), o que o qualifica como uma função objetivo adequada à representação do conjunto original. A figura 6.20 mostra o comportamento normal dos resíduos de IGM ($P = 0,248$). Logo, o modelo da equação (231) é adequado para a otimização desejada.

Tabela 6.51 - Análise do modelo quadrático multivariado.

Termo	IGM	P/W	P/W _{haz}	HI	P	W	W _{HAZ}
b ₀	-0,092	1,472	7,073	1313,330	3,678	2,419	0,531
b ₁	0,217	0,000	0,327	-58,750	0,457	0,258	0,060
b ₂	-6,126	0,191	0,983	-450,000	-0,530	-0,555	-0,157
b ₃	-4,761	0,425	0,740	0,000	0,544	-0,384	0,030
b ₁ ²	0,653	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
b ₂ ²	-1,749	0,263	0,000	126,670	0,000	-0,309	0,000
b ₃ ²	1,292	0,000	0,000	0,000	0,000	0,302	0,000
b ₁₂	-2,122	0,000	1,005	-51,500	0,000	0,000	-0,080
b ₁₃	-0,405	0,000	-0,132	0,000	0,000	0,000	0,000
b ₂₃	0,255	0,000	0,000	0,000	0,000	0,231	0,000
R ² adj.	92,3 %	91,8 %	77,9 %	99,8%	90,4 %	95,6 %	91,2 %

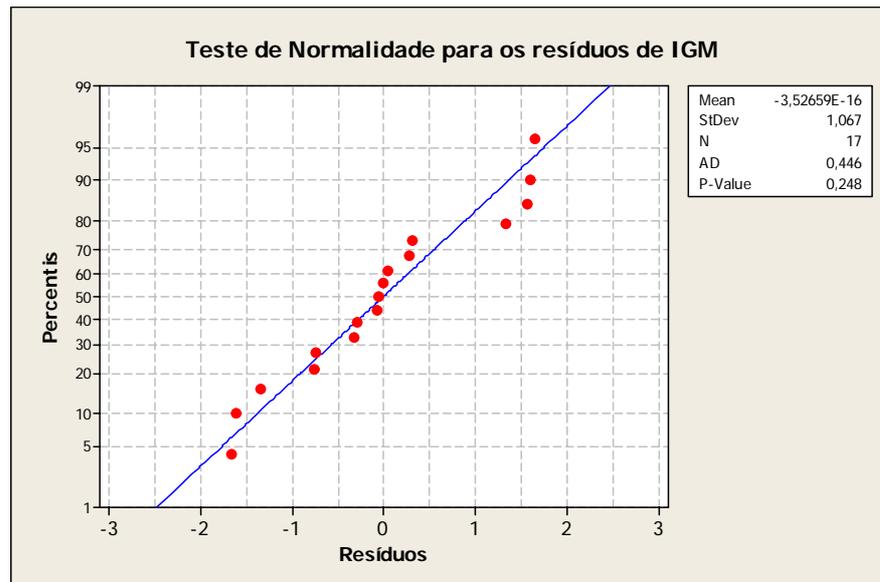


Figura 6.20 – Teste de normalidade para os resíduos de IGM.

6.8.6 Otimização Multivariada

O estudo de Benyounis et al (2005a) foi desenvolvido com o objetivo de se encontrar os parâmetros de processo que maximizassem a penetração (P) e minimizassem a largura da zona fundida (W) e a largura da zona afetada pelo calor (W_{Haz}). Para que isto fosse possível, a quantidade de calor fornecido ao processo (HI) deveria ser mínima. Olabi et al (2006), propuseram, então, que estes objetivos de otimização poderiam ser alcançados com a maximização das razões P/W e P/W_{Haz}. Como o intuito desta tese é tratar um número razoável

de respostas correlacionadas, utilizou-se um conjunto de respostas formado pelos dois trabalhos.

Na análise da tabela 6.49, observa-se que o índice global multivariado (IGM) mantém correlações positivas e significativas com W, W_{Haz} e HI, enquanto que se verifica uma correlação negativa com as razões P/W e P/W_{Haz} . Em virtude deste mecanismo de correlações, é possível que a minimização de IGM conduza às otimizações desejadas para cada resposta individualmente. Como comentado anteriormente, a restrição imposta a IGM será cuboidal. Desse modo, o problema de otimização pode ser escrito como a equação (202) do **Caso 4**, só com a restrição cuboidal.

Considerando os coeficientes de IGM, obtidos através da aplicação do método de mínimos quadrados ordinários, tem-se que:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar } IGM &= -0,09 + 0,22b_1 - 6,13b_2 - 4,76b_3 + 0,65b_1^2 - \\ &\quad - 1,75b_2^2 + 1,29b_3^2 - 2,12b_{12} - 0,41b_{13} + 0,26b_{23} \quad (232) \\ \text{Sujeito a: } & -1 \leq x_i \leq +1; \quad i = 1, 2, \dots, k \end{aligned}$$

A Tabela 6.52 apresenta os resultados comparativos obtidos com o método multivariado e o método de Taguchi associado às redes neurais artificiais.

Tabela 6.52 - Resultados comparativos entre os métodos.

Método	P/W	P/W_{haz}	HI	P	W	W_{HAZ}
IGM	2,351	9,995	879,750	4,149	1,962	0,385
RNA/Taguchi	2,220	9,700	879,750	3,890	1,750	0,401

6.8.7 Discussões

A solução encontrada com método multivariado proposto é exatamente o mesmo encontrado por Olabi et al (2006), ou seja, um ponto de ótimo em termos de unidades codificadas igual a [1,000; 1,000; 1,000], ou, em termos de unidades decodificadas, [1,42 kW; 70 cm/min; 2,5 mm]. A tabela 6.52 mostrou estas semelhanças entre os valores preditos para as respostas originais utilizando-se o modelo IGM e a rede neural artificial (RNA) empregada por Olabi et al (2006). A diferença entre os métodos deve-se basicamente à maneira como os dois algoritmos prevêm observações futuras.

Dos resultados apresentados, depreende-se que a proposta multivariada também pode ser aplicada quando se utilizam arranjos do tipo Box-Behnken, adotando-se como restrição o espaço experimental formado pelo arranjo. Tais restrições são chamadas de cuboidais, uma vez que a solução encontrada deve pertencer ao cubo formado pelos pontos centrais das faces comuns ao arranjo. Embora os trabalhos científicos devam conter-se quanto à impetuosidade das generalizações, o que se quis demonstrar é que a abordagem híbrida multivariada pode ser aplicada em situações diversas. Sua validade, no entanto, dependerá de cada caso específico e dos respectivos resultados obtidos.

6.9 – CASO Nº. 9: FUNÇÕES OBJETIVO MULTIVARIADAS COM MÚLTIPLAS RESTRIÇÕES NÃO-LINEARES APLICADAS A UM PROCESSO DE USINAGEM

6.9.1 Visão Geral

Como último caso a ser estudado, apresenta-se agora um processo de usinagem por torneamento, de um aço duro ABNT 52100. A intenção da pesquisa ao utilizar este exemplo é demonstrar que o procedimento proposto não é exclusivo dos processos de soldagem. Outra particularidade do exemplo é a mudança da restrição não-linear.

Neste exemplo, apresenta-se a função objetivo sendo otimizada segundo uma restrição esférica proveniente de experimento com blocos. Este é um exemplo de aplicação da equação (204) do **Caso 6**.

Além da restrição esférica modificada, o problema apresenta a adição de uma restrição não-linear, obtida com a aplicação do método dos mínimos quadrados ordinários a uma das respostas experimentais. Considerando-se esta restrição de acabamento superficial, deseja-se maximizar a vida da ferramenta, minimizando-se os custos do processo, enquanto se atinge um determinado padrão de qualidade no acabamento.

Outra particularidade é a utilização conjunta de variáveis de processo com variáveis de custo, o que mostra que a abordagem apresentada também é adequada para medir variáveis econômicas dos processos de manufatura.

6.9.2 Arranjo Experimental

Os dados utilizados neste exemplo foram extraídos de Paiva et al. (2005b). Este estudo apresenta um estudo detalhado sobre a aplicação da metodologia de projeto de Experimentos (DOE) na modelagem de fenômenos característicos do processo de usinagem de um aço SAE/ABNT 52100 – 55 HRC, bem como de sua interface com os métodos de otimização da

programação não-linear. Os fatores investigados foram: Velocidade Corte (V_c), avanço (f) e a profundidade de corte (a_p). Como respostas foram estudadas a Vida da Ferramenta (T) em minutos, rugosidade média (R_a), o tempo de corte (T_c), o tempo total de usinagem (T_t) e o custo total da operação (K_p).

Para a operação de acabamento desenvolvida, foi utilizado um Torno CNC Nardini Logic 175, com potência máxima de eixo de 7,5 CV; rotação máxima de 4000 rpm; torre com oito posições e torque máximo de 200 Kgf.m. Como suporte, foi adotado o modelo ISO DCLNL 1616H12. Na usinagem dos corpos de prova, foram empregados insertos de cerâmica mista ($Al_2O_3 + TiC$), classe Sandvik GC 6050, recoberta com TiN, com geometria ISO CNGA 120408 S01525. Os corpos de prova utilizados nos ensaios têm dimensões de 49 mm de diâmetro e 50 mm de comprimento

Para as medições necessárias, utilizou-se um Rugosímetro Taylor Hobson, modelo Surtronic 3⁺ e um Micrômetro Mitutoyo. O desgaste da ferramenta foi monitorado após o décimo passe de usinagem, utilizando-se um microscópio óptico. Utilizou-se como critério do fim de vida, a quebra da ferramenta. A Tabela 6.53 apresenta os fatores e níveis utilizados no arranjo. Os dados experimentais completos constam da Tabela B.8 da seção de Anexos.

Tabela 6.53 – Parâmetros de usinagem utilizados.

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Nível Inferior	Nível Superior
Velocidade de Corte	V_c	m/min	200	240
Avanço	f	mm/rotação	0,05	0,10
Profundidade de Corte	a_p	mm	0,15	0,30

Duas situações foram testadas com o objetivo de minimizar o custo do processo. Tal procedimento implica no aumento da produtividade através da minimização dos tempos produtivos (T_c) e dos tempos totais (T_t) da operação. No primeiro caso deseja-se determinar qual é o mínimo custo para a operação, desde que uma restrição na qualidade do acabamento seja atingida. No segundo caso, deve-se apenas minimizar a função custo.

Para transportar este problema para o campo multivariado, devem-se analisar os autovalores e os autovetores da matriz de correlação das respostas conjuntas, tal como disposto nas tabelas 6.54 e 6.55. Em primeira instância, observa-se que apenas o primeiro componente principal é capaz de explicar 93,5% da estrutura de variância-covariância do conjunto de respostas. Como o segundo autovalor é muito pequeno (0,2397), a modelagem de PC_1 deve ser suficiente para explicar o processo. Para se avaliar qual é o tipo de otimização

que deve ser exigido de PC_1 , basta que sejam avaliadas as correlações entre as respostas originais e o componente principal. Da Tabela 6.55, depreende-se que como todos os autovetores de PC_1 são negativos, que a correlação entre a variável latente e as variáveis originais também seja negativa. Assim, a maximização de PC_1 deve conduzir a minimização dos tempos de operação e do custo do processo. Associada a esta função objetivo multivariada, emprega-se como restrição uma superfície de resposta para a rugosidade média dos corpos de prova usinados. O valor sugerido é $Ra \leq 0,3 \mu m$. Para que o ponto de ótimo caia dentro da região experimental, uma restrição esférica acompanha o sistema. Percebe-se também um autovalor nulo. Esta é uma indicação de dependência linear, que realmente se verifica entre as respostas T_t e T_c .

6.9.3 Análise de Correlações e Componentes Principais

Tabela 6.54 – Análise de correlações.

	Vida	Tc	Tt	Kp
Tc	0,899 0,000			
Tt	0,891 0,000	1,000 0,000		
Kp	0,768 0,000	0,953 0,000	0,960 0,000	
PC1	-0,919 0,000	-0,997 0,000	-0,997 0,000	-0,954 0,000

Tabela 6.55 – Análise de Autovalores e Autovetores da Matriz de Correlação.

Autovalores	3,7396	0,2397	0,0206	0,0000
Proporção	0,935	0,060	0,005	0,000
Acumulado	0,935	0,995	1,000	1,000
Resposta	PC1	PC2	PC3	PC4
Vida (Y1)	-0,475	0,8	0,366	-0,001
Tc (Y2)	-0,515	-0,068	-0,519	0,678
Tt (Y3)	-0,515	-0,109	-0,431	-0,733
Kp (Y4)	-0,493	-0,586	0,641	0,058

6.9.4 Modelagem Matemática Multivariada

Neste estudo de caso, além da função objetivo multivariada, deve-se obter também uma equação para a restrição de acabamento (Rugosidade). Esta equação será estimada utilizando

a Rugosidade (R_a) como variável dependente e os fatores experimentais (V_c , f , a_p) como variáveis independentes. Será empregado na estimação o método dos mínimos quadrados ordinários.

De acordo com a Tabela 6.56, conclui-se que o único fator que exerce influência significativa sobre a rugosidade é o avanço, assim como seu termo quadrático. Entretanto, apesar da velocidade de corte (V_c) e da profundidade de corte (a_p) não serem significativos isoladamente, estes fatores devem ser mantidos, uma vez que a sua atuação conjunta, representada pela interação $V_c.a_p$ é significativa.

Tabela 6.56 – Análise de significância do modelo completo para a rugosidade.

Termo	Coef.	Erro Padrão	t_0	P_t
b_0	0,3563	0,0238	14,985	0,000
V_c	0,0165	0,0131	1,257	0,244
f	0,1360	0,0131	10,381	0,000
a_p	-0,0084	0,0131	-0,639	0,541
V_c^2	0,0228	0,0140	1,627	0,142
f^2	0,0696	0,0140	4,975	0,001
a_p^2	0,0003	0,0140	0,020	0,985
$V_c.f$	-0,0262	0,0169	-1,552	0,159
$V_c.a_p$	0,0500	0,0169	2,957	0,018
$f.a_p$	-0,0175	0,0169	-1,035	0,331
$S = 0,0478$	$R-Sq = 94,9 \%$		$R-Sq (adj) = 89,1 \%$	

A Tabela 6.57 apresenta a ANOVA do modelo quadrático completo para a rugosidade média.

Tabela 6.57 – ANOVA do modelo completo de rugosidade.

Fonte	Graus de Liberdade	Soma de quadrados	Média Quadrática	F_0	P_f
Regressão	9	0,3393	0,0377	16,48	0,000
Linear	3	0,2511	0,0837	36,59	0,000
Quadrática	3	0,0602	0,0201	8,78	0,007
Interação	3	0,0279	0,0093	4,07	0,050
Erro Residual	8	0,0183	0,0023		
Falta de Ajuste	5	0,0097	0,0019	0,68	0,673
Erro Puro	3	0,0086	0,0028		
Total	17	0,3576			

O modelo reduzido apresenta um ajuste de R^2 (adj) de 87,1% e um termo de erro $S = 0,05204$. Mas, se o modelo quadrático completo for considerado, este ajuste sobe para R^2 (adj) de 89,1% e erro $S = 0,04783$. Por esta razão, preferiu-se utilizar o modelo completo.

Procedendo-se de maneira análoga com PC_1 , decorre que o modelo quadrático completo é a opção mais adequada para a representação multivariada do conjunto de respostas original, uma vez que apresenta um R^2 ajustado de 97,2%, e um valor de p para o teste de hipótese referente à falta de ajuste de 0,087. Considerando-se um nível de significância de 5%, aceita-se a hipótese de nula de que o modelo quadrático completo não apresenta falta de ajuste. Estes resultados são apresentados na tabela 6.58 e 6.59.

Tabela 6.58 – Análise de significância do modelo completo de PC_1 .

Termo	PC_1			
	Coef.	Erro Padrão	t_0	p_t
b_0	0,6795	0,1615	4,207	0,003
Vc	0,3642	0,0889	4,094	0,003
f	1,4993	0,0889	16,852	0,000
ap	1,3694	0,0889	15,392	0,000
Vc^2	0,0024	0,0951	0,025	0,981
f^2	-0,4632	0,0951	-4,871	0,001
ap^2	-0,4565	0,0951	-4,801	0,001
Vc.f	-0,1241	0,1148	-1,081	0,311
Vc.ap	-0,1214	0,1148	-1,057	0,321
f.ap	-0,4044	0,1148	-3,521	0,008
	R^2 (adj.)	97,2 %		$S=0,325$

Tabela 6.59 - ANOVA do modelo reduzido de PC_1 .

Fonte	Graus de Liberdade	Soma de quadrados	Média Quadrática	F_0	p_f
Regressão	9	62,729	6,969	66,04	0,000
Linear	3	56,744	18,915	179,22	0,000
Quadrática	3	4,436	1,478	14,01	0,002
Interação	3	1,549	0,516	4,89	0,032
Erro Residual	8	0,844	0,106	*	*
Falta de Ajuste	5	0,766	0,153	5,91	0,087
Erro Puro	3	0,078	0,026		
Total	17	63,574			

6.9.5 Otimização Multivariada

O sistema de otimização adequado para este caso, poderá escrito na forma da equação (231), considerando-se uma função objetivo multivariada, representativa das quatro respostas originais; duas restrições, sendo uma referente ao raio do espaço experimental para o caso bloqueado, e outra, para uma quadrática do acabamento superficial, R_a .

$$\begin{aligned}
 \text{Maximizar } \hat{y} = PC_1 &= 0,679 + 0,364Vc + 1,499f - 1,369a_p + 0,002Vc^2 \\
 &\quad - 0,463f^2 - 0,456a_p^2 - 0,124Vcf + 0,121Vca_p - 0,404fa_p \\
 \text{Sujeito a: } x^T x &\leq \left\{ \left[k \left(1 + \frac{n_{s0}}{n_s} \right) / \left(1 + \frac{n_{c0}}{n_c} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \right\}^2 \\
 R_a &= 0,356 + 0,0165Vc + 0,136f - 0,0084a_p + 0,022780Vc^2 \\
 &\quad + 0,0696f^2 + 0,0003a_p^2 - 0,0262Vcf + 0,0500Vca_p - \\
 &\quad - 0,0175fa_p \leq 0,3
 \end{aligned} \tag{233}$$

A Tabela 6.60 apresenta os resultados obtidos com a abordagem multivariada para o conjunto de respostas oriundas do processo de torneamento do aço ABNT 52100.

Tabela 6.60 – Análise comparativa dos métodos.

Modelo	Vc	f	a_p	PC_1	Vida	Tc	Tt	K_p
Restrição esférica (p/blocos) e rugosidade	-0,398	-0,476	1,510	1,08	8,06	5,89	6,77	14,24
	212,04	0,063	0,338					
Apenas restrição esférica (p/blocos)	1,035	0,976	0,802	2,343	6,42	3,16	4,23	10,04
	240,69	0,099	0,285					

6.9.6 Discussões

Este último exemplo mostrou que a abordagem multivariada também pode ser aplicada à otimização de processos de usinagem, e à variáveis econômicas, tais como o custo operacional (K_p).

Mostrou-se também, que é possível se adicionar restrições não-lineares ao sistema, mesmo que elas não estejam escritas em termos de componentes principais. Além disso, constatou-se também que é viável a utilização de restrições esféricas para arranjos centrais compostos projetados com blocos.

6.10 Comentários Finais do Capítulo

Nos capítulos anteriores, discutiu-se o cenário no qual se insere o problema de pesquisa desta tese. Discutiram-se também todos os conceitos utilizados para a construção de um modelo de otimização múltipla multivariado. Esta discussão, embora longa, permitiu que se estabelecesse uma forte conexão entre a teoria estatística multivariada e a Metodologia de Superfície de Resposta, explicitando as razões que conduziram a pesquisa para este viés.

Ao contrário de utilizar uma demonstração matemática mais profunda, preferiu-se testar e validar o método sugerido com exemplos práticos e casos reais. Tais exemplos trataram quase que exclusivamente, de ilustrar a aplicação da abordagem multivariada em processos de manufatura com múltiplas respostas correlacionadas, mais especificamente, dos processos de soldagem e usinagem. Não obstante disto, acredita-se que muitos outros processos e sistemas possuam também estruturas de correlação suficientemente fortes para receberem tal tratamento. Os resultados alcançados com a aplicação da abordagem multivariada aos exemplos descritos neste capítulo, ressaltam a boa adequação da proposta desta tese à otimização de processos de manufatura com múltiplas respostas correlacionadas.

Observou-se que nem sempre um único componente principal é suficiente para representar bem o conjunto original de dados e que neste caso, um índice que combine os componentes responsáveis pela explicação da maior parte da variação original, demonstrou-se muito eficaz quanto à determinação de pontos de ótimo viáveis. Nos casos onde os componentes principais têm correlações contrárias ao sentido de otimização das variáveis originais, demonstrou-se que a inversão do sentido da correlação é um procedimento viável para resolver tais discrepâncias. No mesmo sentido, a utilização de relações sinal-ruído de Taguchi também se demonstraram adequadas. Os exemplos apresentados ilustraram que o método parece não depender do tipo de arranjo experimental, e que o sistema de restrições pode incluir outros modelamentos. Concluindo-se, acredita-se que os casos apresentados tenham ilustrado adequadamente o método proposto. Embora se saiba que outras abordagens possam ser mais eficientes, mais apropriadas, ou mais fáceis de se aplicar, supõe-se que as respostas dadas algumas indagações que cercam o assunto, tenham sido úteis.

Capítulo 7

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

7.1 Conclusões

Valendo-se da estrutura de correlação existente em alguns conjuntos de múltiplas respostas, demonstrou-se que índices formados a partir de componentes principais são adequados para representar um conjunto de múltiplas respostas. De acordo com o exposto, observando-se a revisão da literatura e os resultados obtidos com os estudos de caso, podem ser destacadas as seguintes conclusões desta pesquisa:

- Na maioria dos casos estudados, um único componente principal não foi suficiente para representar bem o conjunto original de dados. Nesta situação, o Índice Global Multivariado (IGM) demonstrou-se bastante oportuno quanto à determinação de pontos de ótimo viáveis. Como não se encontrou na literatura tal alternativa, acredita-se que a proposta do índice multivariado ponderado seja uma das contribuições desta tese.
- Constatou-se também que, em comparação com outras metodologias, a abordagem proposta não divergiu consideravelmente. Acredita-se, portanto, ter se contornado o problema da insuficiência de explicação do primeiro componente principal e das divergências de direção entre os componentes principais e respostas originais. Tais divergências foram investigadas utilizando-se a análise de correlação e a análise de autovetores da matriz de correlação das respostas originais, empregando-se a

multiplicação por constantes negativas ou relações sinal-ruído de Taguchi como métodos de harmonização dos sentidos de otimização. Não se encontrou na literatura nenhuma referência a este tipo de tratamento, assim como, acerca da construção do IGM, o que sugere que tal procedimento também é inédito.

- Ao longo do estudo, observou-se que as restrições não-lineares auxiliaram os algoritmos na busca de uma região definida pelos componentes principais, que contivesse as soluções viáveis das funções univariadas.
- De acordo com os resultados, notou-se que as restrições esféricas são mais adequadas quando utilizadas com arranjos centrais compostos (CCD), e que as restrições cuboidais são mais apropriadas para os arranjos do tipo Box-Behnken ou CCD de face centrada. Observou-se, entretanto, que a metodologia proposta parece ser independente do tipo de arranjo experimental utilizado.
- O algoritmo de otimização não-linear GRG e o Método de Draper (*Ridge Analysis*) demonstraram-se eficientes e apresentaram resultados conflitantes.
- Quanto à natureza dos modelos, foram obtidos resultados satisfatórios tanto com modelos quadráticos completos quanto com modelos reduzidos.
- A substituição de variáveis originais por componentes principais demonstrou-se viável tanto para funções objetivo quanto para restrições. Além disso, combinações mistas, com restrições normais ou funções objetivo comuns, também se demonstraram possíveis.

Embora os resultados apresentados tenham tratado de processos específicos, acredita-se, sem exagero de extrapolação ou generalização, que procedimentos semelhantes sejam adequados a outros processos que envolvam múltiplas respostas correlacionadas.

7.2 Sugestões para trabalhos futuros

Considerando a delimitação da pesquisa e os resultados satisfatórios obtidos, podem-se sugerir os seguintes estudos, cujo conteúdo está além do escopo deste estudo:

- a) Aplicar o método multivariado a arranjos fatoriais fracionados, substituindo-se as respostas originais pelo índice global multivariado. O procedimento pode ser estendido também para os arranjos ortogonais de Taguchi.
- b) Aplicar o método aos arranjos experimentais exploratórios, tais como Plackett-Burman, incrementado com pontos centrais. Tais arranjos poderiam ser utilizados para analisar a significância de efeitos principais dos fatores em termos de IGM. Assim, poderiam ser abordados os processos que possuem múltiplas variáveis independentes e dependentes, simultaneamente.
- c) Estudar uma alternativa multivariada para o método do vetor gradiente (*Steepest Ascent/Descent*). Supondo-se que o primeiro arranjo fatorial (exploratório, fracionado ou completo) não detecte curvatura significativa para as respostas de interesse, vetores de um modelo linear de primeira ordem para componentes principais, também poderiam ser investigados.
- d) Estender o procedimento aos arranjos de Mistura;
- e) Aplicar o IGM para problemas de múltiplas restrições. Desde que tal sistema de equações tenha uma correlação compatível, o procedimento pode ser empregado;
- f) Realizar uma comparação da aplicação dos índices multivariados com a Análise Envoltória de Dados (DEA);
- g) Estender a aplicação aos problemas com múltiplos duais, ou seja, processos onde várias características devem ser otimizadas quanto à média e à variância, simultaneamente;
- h) Utilizar Algoritmos Genéticos para a otimização das funções objetivo multivariadas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALLEN, T. T., RICHARDSON, R. W., TAGLIABUE, D. P., MAUL, G. P. (2002), “Statistical Process Design for Robotic GMA Welding of Sheet Metal”, *Welding Journal - Supplement*, v 5, pp. 69-77.
- ANDERSON, T. W. (1963), “Asymptotic Theory for Principal Component Analysis”. *Annals of Mathematical Statistics*, v 34, pp. 122-148.
- ANTONY, J. (2000), “Multiresponse Optimization in Industrial Experiments using Taguchi’s Quality Loss Function and Principal Component Analysis”, *Quality and Reliability Engineering International*, v 16, pp. 3-8.
- BARBETTA, P. A. (1998), *Construção de Modelos para Médias e Variâncias na Otimização Experimental de Produtos e Processos*. Tese de Doutorado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Santa Catarina, 244p.
- BARTLETT, M. S. (1954), “A Note on the Multiplying Factors for Various χ^2 Approximations”. *Journal of Royal Statistical Society*, nº 16, pp. 296-298.
- BENYOUNIS, K. Y., OLABI, A. G., HASHMI, M. S. J. (2005a), “Effect of Laser Welding Parameters on the Heat Input and Weld-Bead Profile”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 164-165, pp. 978-985.
- BENYOUNIS, K. Y., OLABI, A. G., HASHMI, M. S. J. (2005b), “Optimizing the Laser-Welded Butt Joints of Medium Carbons Steel Using RSM”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 164-165, pp. 986-989.

- BERGMAN, R., JOHANSSON, M. E., LUNDSTEDT, T., SEIFERT, E., ABERG, J. (1998)**, “Optimization of a Granulation and Tableting Process by Sequential Design and Multivariate Analysis”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v 44, pp.271-286.
- BONANNI, C. G. (2005)**, *Uso Combinado das Técnicas DOE e Simulação de Monte Carlo em um Processo de Soldagem MIG/MAG Pulsado*, Dissertação de Mestrado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Itajubá, 104p.
- BOX, G. E. P., BEHNKEN, D. W. (1960)**, “Some New Three-Level Designs for the Study of Quantitative Variables”, *Technometrics*, v 2, pp.455–475.
- BOX, G. E. P., DRAPER, N. R. (1987)**, *Empirical Model-Building and Response Surfaces*, John Wiley & Sons, 1 ed., 650p.
- BOX, G. E. P., HUNTER, W. G., MacGREGOR, J. F., ERJAVEC, J. (1973)**, “Some Problems Associated with the Analysis of Multiresponse Data”, *Technometrics*, v 15, n 1, pp.33-51.
- BOX, G. E. P., HUNTER, W. G., HUNTER, J. S. (1978)**, *Statistics for Experimenters*, John Wiley & Sons, 1 ed., 690p.
- BOX, G. E. P., WILSON, K. B. (1951)**, “On the Experimental Attainment of Optimum Conditions”, *Journal of the Royal Statistical Society, XIII*, v 1, Série B, pp. 1-45.
- BRATCHELL, N. (1989)**, “Multivariate Response Surface Modelling by Principal Components Analysis”, *Journal of Chemometrics*, v 3, pp. 579-588.
- CARERI, M. , MANGIA, A., MORI, G., MUSCI, M. (1999)**, “A New Multivariate Approach for the Optimisation of the Simultaneous Distillation-Extraction Technique for Free Fatty Acids Using a Face Centered Cube Experimental Design: Application to Parmigiano-Reggiano Cheese”, *Analytica Chimica Acta*, v 386, pp. 169-180.
- CARLSON, R., NORDAHL, Å., BARTH, T., MYKLEBUST, R. (1992)**, “An Approach to Evaluating Screening Experiments when Several Responses are Measured”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v 12, pp. 237-255.

- CARROL, C. W. (1961)**, “The Created Response Surface Technique for Optimizing Nonlinear Constrained Systems”, *Operations Research*, v 9, pp. 169-185.
- CASALINO, G., CURCIO, F., MINUTOLO, M. C. F. (2005)**, “Investigation on Ti6Al4V Laser Welding using Statistical and Taguchi Approaches”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 167, pp. 422-428.
- CATTEL, R. B. (1966)**, “The Screen Test for the Number of Factors”, *Multivariate Behavior Research*, V. 1, pp. 245-276.
- CHANDRA, M. J. (2001)**, *Statistical Quality Control*, CRC Press LLC, Boca Raton, Florida, 279p.
- CHIAO, C. H., HAMADA, M. (2001)**, “Analyzing Experiments with Correlated Multiple Responses”, *Journal of Quality Technology*, v 33, n 4, pp. 451-465.
- CH’NG, C. K., QUAH, S. H., LOW, H. C. (2005a)** “A New Approach for Multiple-Response Optimization”, *Quality Engineering*, v 17, n 4, pp. 621-626.
- CH’NG, C. K., QUAH, S. H., LOW, H. C. (2005b)**, “The MM-Estimator in Response Surface Methodology”, *Quality Engineering*, v 17, pp. 561-565.
- COPELAND, K. A., K., NELSON, P. R. (1996)**, “Dual Response Optimization via Direct Function Minimization”, *Journal of Quality Technology*, v 28, n 3, pp.331-336.
- CORREIA, D. S., GONÇALVES, C. V., CUNHA JR., S. S., FERRARESI, V. A. (2005)**, “Comparison Between Genetic Algorithms and Response Surface Methodology in GMAW Welding Optimization”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 160, pp. 70-76.
- DA SILVA, R. R., CALÔBA, L. P., SIQUEIRA, M. H. S., REBELLO, J. M. A. (2004)**, “Pattern Recognition of Weld Defects Detected by Radiographic Test”, *NDT&E International*, v 37, pp. 461-470.

- DARWISH, S. M., AL-DEKHAL, S. D. (1999)**, “Statistical Models for Spot Welding of Commercial Aluminium Sheets”, *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, v 39, pp. 1589-1610.
- DEL CASTILLO, E., MONTGOMERY, D. C. (1993)**, “A Nonlinear Programming Solution to the Dual Response Problem”, *Journal of Quality Technology*, v 28, n 2, pp. 331-336.
- DEL CASTILLO, E., MONTGOMERY, D. C., McCARVILLE, D. R. (1996)**, “Modified Desirability Functions for Multiple Response Optimization”, *Journal of Quality Technology*, v 28, n 3, pp. 337-345.
- DEL CASTILLO, E., FAN, S. K., SEMPLE, J. (1999)**, “Optimization for Dual Response Systems: A Comprehensive Procedure for Degenerate and Nondegenerate Problems”, *European Journal of Operational Research*, n 112, pp. 174-186.
- DERRINGER, G. (1994)**. “A Balancing Act: Optimizing a Product’s Properties”, *Quality Progress*, v 6, pp. 51–58.
- DERRINGER, G., SUICH, R. (1980)**, “Simultaneous Optimization of Several Response Variables”, *Journal of Quality Technology*, v 12, n 4, pp.214-219.
- DRAPER, N. R., (1963)**, “Ridge Analysis of Response Surfaces”, *Technometrics*, n 5, pp. 315-324.
- ELLEKJAER, M. R., ILENG, M. A., NAES, T. (1995a)**, “The Use of Experimental Design and Multivariate Analysis in Product Improvement” *Report Series in Quality and Productivity*, Center for Quality and Productivity Improvement – University of Wisconsin, Report n 124, v 1, pp. 1-18.
- ELLEKJAER, M. R., FULLER, H., M. A., LOADSTEIN, K. (1995b)**, “Analysis of Unreplicated Split-Plot Experiments in Multiple responses”, *Report Series in Quality and Productivity*, Center for Quality and Productivity Improvement – University of Wisconsin, Report n 129, v 7, pp. 1-20.

- ELLEKJAER, M. R., ILENG, M. A., NAES, T. (1996)**, “A Case Study of the use of Experimental Design and Multivariate Analysis in Product Improvement”, *Food Quality and Preference*, v 7, n 1, pp. 29-36.
- FABER, N. K. M. (1999)**, “Modification of Malinowski’s *F*-test for Pseudo Rank Estimation Revisited”, *Computer & Chemistry*, v 23, pp. 565-570.
- FOGLIATTO, F. S., ALBIN, S. L. (2000)**, “Variance of Predicted Response as an Optimization Criterion in Multiresponse Experiments”, *Quality Engineering*, v 12, n 4, pp. 523-533.
- FORSTER, E., BATHE, R. V. (1990)**, “Avoiding Possible Confusion in Usual Methods of Steepest Ascent Calculation”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v 9, pp. 207-215.
- FUNG, C. P. (2006)**, “Multi-Response Optimization of Impact Performances in Fiber-Reinforced Poly (butylene terephthalate)”, *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, v 19, n 2, pp. 191-205.
- FUNG, C. P., KANG, P. C. (2005)**, “Multi-response Optimization in Friction Properties of PBT Composites using Taguchi Method and Principal Component Analysis”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 170, n 3, pp. 602-610.
- GABRIELSSON, J., NYSTRÖM, Å., LUNDSTEDT, T. (2003a)**, “Multivariate Methods in the Developing an Evolutionary Strategy for Tablet Formulation”, *Drug Development and Industrial Pharmacy*, v 26, n 3, pp. 275-296.
- GABRIELSSON, J., LINDBERT, N. O., PÅLSSON, M., NICKLASSON, F., SJÖSTRÖM, M., LUNDSTEDT, T. (2003b)**, “Multivariate Methods in the Development of a New Tablet Formulation”, *Drug Development and Industrial Pharmacy*, v 29, n 10, pp. 1053-1075.
- GELADI, P., KOWALSKI, B. (1986)**, “Partial Least Squares Regression: A tutorial”, *Analytica Chimica Acta*, v 185, pp. 1-17.

- GOMES, M. O., COSTA, S. C. (2004)**, “A Utilização da Análise de Superfície de Resposta na Verificação da Influência dos Parâmetros no Processo de Corte por Plasma a Ar Comprimido”, *Revista Pesquisa e Desenvolvimento Engenharia de Produção*, n 2, p. 54-68.
- GUNARAJ, V., MURUGAN, N. (1999a)**, “Application of Response Surface Methodology for Predicting Weld Bead Quality in Submerged Arc Welding of Pipes”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 88, pp.266-275.
- GUNARAJ, V., MURUGAN, N. (1999b)**, “Prediction and Comparison of the Area of the Heat-Affected Zone for the Bead-on-Plate and Bead-on-Joint in Submerged Arc Welding of Pipes”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 95, pp.246-261.
- GUNARAJ, V., MURUGAN, N. (2000a)**, “Prediction and Optimization of Weld Bead Volume for the Submerged Arc Process – Part 1”, *Welding Research Supplement - Welding Journal*, v 10, pp.286-294.
- GUNARAJ, V., MURUGAN, N. (2000b)**, “Prediction and Optimization of Weld Bead Volume for the Submerged Arc Process – Part 2”, *Welding Research Supplement - Welding Journal*, v 11, pp.331-338.
- GUNARAJ, V., MURUGAN, N. (2002)**, “Prediction of Heat-Affected Zone Characteristics in Submerged Arc Welding of Structural Steel Pipes”, *Welding Research Supplement - Welding Journal*, v 3, pp.45-53.
- GUNARAJ, V., MURUGAN, N. (2005)**, “Prediction and Control of Weld Bead Geometry and Shape Relationship in Submerged Arc Welding of Pipes”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 168, pp. 478-487.
- GUTTMAN, L. (1954)**, “Some Necessary Conditions for Common Factor Analysis”, *Psychometrika*, v 19, pp. 149-161.
- HARB, A. G. (2005)**. *As Competências Organizacionais nos Segmentos de Hipermercado e Supermercado no Brasil*, Tese de Doutorado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Santa Catarina, 233p.

- HARRINGTON, E. C. (1965)**, “The Desirability Function”, *Industrial Quality Control*, n 21, pp. 494-498.
- HAYKIN, S. (1994)**, *Neural Networks – A Comprehensive Foundation*. IEEE press. Ontário.
- HOERL, A. E. (1959)**, “Optimum Solution of Many Variables Equations”, *Chemical Engineering Progress*, v 55, n 11, pp.69-78.
- HOSKULDSSON, A. (1988)**, “PLS Regression Methods”, *Journal of Chemometrics*, v 2, pp. 211-228.
- HOTELLING, H. (1933)**, “Analysis of a Complex of Statistical Variables into Principal Components”, *Journal of Educational Psychology*, v. 24, pp. 417-441.
- HSU, C. M. (2001)**, “Solving Multi-Response Problems Through Neural Networks And Principal Component Analysis”, *Journal of the Chinese Institute of Industrial Engineers*, v 18, n 5, pp. 47-54.
- HSU, C. M. (2004)**, “An Integrated Approach to Enhance the Optical Performance of Couplers Based on Neural Networks, Desirability Functions and Tabu Search”, *International Journal of Production Economics*, v 92, pp. 241-254.
- HWANG, C. L., YOON, K. (1981)**, *Multiple Attribute Decision Making: Method and Applications. A State-of-the-Art Survey*, Springer-Verlag, New York, 546p.
- JACKSON, D. A. (1993)**, “Stopping Rules in Principal Component Analysis. A Comparison of Heuristical and Statistical Approaches”. *Ecology*, v 74, pp. 2204-2214.
- JAYARAM, J. S. R., IBRAHIM, Y. (1999)**, “Multiple Response Robust Design and Yield Maximization”, *International Journal of Quality and Reliability Management*, v 16, n 9, pp. 826-837.
- JOHNSON, M. (2002)**, “Waverform Base Clustering and Classification of AE Transients in Composite Laminates using Principal Component Analysis”, *NDT&E International*, v 35, pp. 367-376.

- JOHNSON, R. A., WICHERN, D. W. (2002)**, *Applied Multivariate Statistical Analysis*, New Jersey: Prentice-Hall, Inc., 5 ed., 797p.
- KANNAN, T., MURUGAN, N. (2006a)**, “Effect of Flux Cored Arc Welding Process Parameters on Duplex Stainless Steel Clad Quality”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 176, pp. 230-239.
- KANNAN, T., MURUGAN, N. (2006b)**, “Prediction of Ferrite Number of Duplex Stainless Steel Clad Metals Using RSM”, *Welding Journal*, v 5, pp.91-100.
- KHURI, A. I., CONLON, M. (1981)**, “Simultaneous Optimization of Multiple Responses Represented by Polynomial Regression Functions”, *Technometrics*, v 23, n 4, pp. 363-375.
- KHURI, A. I., CORNELL, J. A. (1996)**, *Response Surfaces: Designs and Analyses*, Marcel Dekker Inc, 2 ed, New York, USA, 510p.
- KHURI, A. I. (2003)**, *Advanced Calculus with application in Statistics*, John Wiley & Sons, 2 ed., New York, USA, 704p.
- KIM, Y. J., CHO, B. R. (2002)**, “Development of Priority-Based Robust Design”, *Quality Engineering*, v 14, n 3, pp. 355-363.
- KIM, I. J., JEONG, K. J. (2003)**, “Interactive Desirability Function Approach Multi-response Surface Optimization”, *International Journal of Reliability, Quality and Safety Engineering*, v 10, n 2, pp. 205-217.
- KIM, K. J., LIN, D. K. J. (2000)**, “Simultaneous Optimization of Mechanical Properties of Steel by Maximizing Exponential Desirability Functions”, *Applied Statistics*, v 49, pp. 311-325.
- KIM, I. S., KWON, W. H., SIORES, E. (1996)**, “An Investigation of a Mathematical Model for Predicting Weld Bead Geometry”, *Canadian Metallurgical Quarterly*, v 35, n 4, pp. 385-392.

- KIM, D., RHEE, S., PARK, H. (2002)**, “Modelling and Optimization of a GMA Welding Process by Genetic Algorithm and Response Surface Methodology”, *International Journal of Production Research*, v 40, n 7, pp. 1699 – 1711.
- KIM, I. S., SON, K. J., YANG, Y. S., YARAGADA, P. K. D. V. (2003)**, “Sensitivity Analysis for Process Parameters in GMA Welding Process Using a Factorial Design Method”, *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, v 43, pp. 763-769.
- KIM, D., KANG, M., RHEE, S. (2005)**, “Determination of Optimal Welding Conditions With a Controlled Random Search Procedure”, *Welding Journal*, v 8, pp. 125-130.
- KIM, D., PARK, H., RHEE, S. (2005)**, “Optimization of Welding Parameters for Resistance Spot Welding of TRIP Steel with Response Surface Methodology”, *International Journal of Production Research*, v 43, n 21, pp. 4643–4657.
- KIM, D., RHEE, S. (2003)**, “Optimization of a Gas Metal Arc Welding Process using the Dual Response Approach”, *International Journal of Production Research*, v 41, n 18, pp. 4505-4515.
- KIM, D., RHEE, S. (2004)**, “Optimization of a Gas Metal Arc Welding Process using the Desirability Function and the Genetic Algorithm”, *Journal of Engineering Manufacture*, v 218, n 1, pp. 35-41.
- KO, Y. H., KIM, K. J., JUN, C. H. (2005)**, “A New Loss Function-Based Method for Multiresponse Optimization”, *Journal of Quality Technology*, v 37, n 1, pp. 50-59.
- KÖKSOY, O., DOGANAKSOY, N. (2003)**, “Joint Optimization of Mean and Standard Deviation Using Response Surface Methods”, *Journal of Quality Technology*, v 35, n 3, pp. 237-334.
- KOLEVA, E. (2001)**, “Statistical Modeling and Computer Programs for Optimization of the Electron Beam Welding of Stainless Steel”, *Vacuum*, v 62, pp. 151-157.
- KOTECKI, D. J., SIEWERT, T. A. (1992)**, “WRC-1992 Constitution Diagram for Stainless Steel Weld Metals: A Modification of the WRC-1988 Diagram”, *Welding Journal*, v 57, n 4, pp. 171-178.

- KROS, J. F., MASTRANGELO, C. M. (2004)**, “Comparing Multi-response Design Methods with Mixed Responses”, *Quality and Reliability Engineering International*, v 20, pp. 527-539.
- LAMAR, M. V., BHUIYAN, M. S., IWATA, A. (2003)**, *Reconhecimento de Posturas Manuais usando Redes Neurais*. VI Congresso Brasileiro de Redes Neurais, pp. 307-312, São Paulo.
- LANGSRUD, Ø. (2001)**, “Identifying Significant Effects in Fractional Factorial Multiresponse Experiments”, *Technometrics*, v 43, n 4, pp. 415-424.
- LANGSRUD, Ø. (2002)**, “50-50 Multivariate analysis of Variance for Collinear responses”, *The Statistician*, v 51, part 3, pp. 305-317.
- LASDON, L. S., WAREN, A. D., JAIN, A., RATNER, M. (1978)**, “Design and Testing of a Generalized Reduced Gradient Code for Nonlinear Programming”, *ACM Transactions on Mathematical Software*, v 4, n 1, pp. 34-50.
- LAWLEY, D. N. (1956)**, “Tests of the Significance for the Latent Roots of Covariance and Correlation Matrices”. *Biometrika*, v 43, pp.128-136.
- LIAO, H. C. (2003)**, “Using PCR-TOPSIS to Optimise Taguchi’s Multi-Response Problem”, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v 22, pp.649-655.
- LIAO, H. C. (2004)**, “A Data Envelopment Analysis Method for Optimising Multi-Response Problem With Censored Data in Taguchi Method”, *Computer & Industrial Engineering*, v 46, pp.817-835.
- LIAO, H. C. (2005)**, “Multi-response Optimization using Weighted Principal Components”, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v 27, n 7, pp. 720-725.
- LIN, J. F., CHOU, C. C. (2002)**, “The response surface method and the analysis of mild oxidational wear”, *Tribology International*, v 35, pp. 771–785.

- LINGVALL, F., STEPINSKI, T. (2000)**, “Automatic Detecting and Classifying Defects During Eddy Current Inspection of Riveted Lap-Joints”, *NDT&E International*, v 33, pp. 47–55.
- LOPES, L. F. D. (2001)**, *Análise de Componentes Principais Aplicada à Confiabilidade de Sistemas Complexos*. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, Florianópolis, 138 p.
- LUNER, J. (1994)**, “Achieving Continuous Improvement with the Dual Response Approach: A Demonstration of the Roman Catapult”, *Quality Engineering*, Vol. 6, pp. 691-705.
- MAGNUS, E. M., BRÅTHEN, E., SAHLSTRÖM, S., FAERGSTAD, E. M., ELLEKAJAER, M. R. (1997)**, “Effects of Wheat Variety and Processing Conditions in Experimental Bread Baking Studied by Univariate and Multivariate Analyses”, *Journal of Cereal Science*, v 25, pp. 289-301.
- MARDIA, K.V.; KENT, J.T., BIBBY, J.M. (1979)**, *Multivariate analysis*, Londres: Academic Press.
- MAYS, D. P. (2001)**, “The Impact of Correlated Responses and Dispersion effects on optimal Three Level Factorial Designs”, *Communications in Statistics – Simulation and Computation*, v 30, n 1, pp. 185-194.
- MENDES DA SILVA, C. L., SCOTTI, A. (2006)**, “The Influence of Double Pulse on Porosity Formation in Aluminum GMAW”, *Journal of Materials Processing Technology*, v. 171, pp. 366-372.
- MENG, T. K., BUTLER, C. (1997)**, “Solving Multiple Response Optimisation Problems using Adaptive Neural Networks”, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v 13, n 9, pp. 666 – 675.
- MINGOTI, S. A. (2001)**, “Pareto Chart and Principal Components Analysis Combined”, *Revista Produto & Produção*, v 5, n 1, pp. 21-29.

- MIRÓ-QUESADA, G., DEL CASTILLO, E. (2004)**, ‘Two Approaches for Improving the Dual Response Method in Robust Parameter Design’, *Journal of Quality Technology*, v 36, n 2, pp. 154-168.
- MOHAMMAD, W., BRERETON, R. G. (2004)**, ‘Determination of the Number of Significant Components in Liquid Chromatography Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy’, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v 72, pp. 133-151.
- MONTGOMERY, D. C. (2001)**, *Design and Analysis of Experiments*, John Wiley & Sons, 5 ed., 699p.
- MONTGOMERY, D. C., RUNGER, G. C. (2003)**, *Estatística Aplicada e Probabilidade para Engenheiros*, LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2 ed., 570p.
- MURPHY, T. E. (2004)**, *Multivariate Quality Control Using Loss-Scaled Principal Components*, PhD. Thesis, Industrial and Systems Engineering, Georgia Institute of Technology, 248p.
- MURPHY, T. E., TSUI, K. L., ALLEN, J. K. (2005)**, ‘A Review of Robust Design Methods for Multiple Responses’, *Research in Engineering Design*, v 15, pp. 201-215.
- MYERS, R. H., CARTER Jr., W. H. (1973)**, ‘Response Surface Techniques for Dual Response Systems’, *Technometrics*, v 15, n 2, pp.301-317.
- MYERS, R. H., MONTGOMERY, D. C. (1995)**, *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Design of Experiments*, 2 ed, Wiley – Interscience, New York, USA, 700p.
- NASH, S. G., SOFER, A. (1996)**, *Linear and Nonlinear Programming*, 1. ed., McGraw-Hill Companies, Inc., 692p.
- NILO JR., L. P. (2003)**, *Otimização de um Processo de Solda MIG/MAG para Aplicação na Indústria Automobilística Através da Utilização da Técnica de Projeto e Análise de Experimentos*, Dissertação de Mestrado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Itajubá, 111p.

- OLABI, A. G., CASALINO, G., BENYOUNIS, K. Y., HASHMI, M. S. J. (2006)**, “An ANN and Taguchi Algorithms Integrated Approach to the Optimization of CO₂ Laser Welding”, *Advances in Engineering Software* – Article in press.
- OLIVEIRA, L. M. (2005)**, *Uma Investigação da Influência dos Parâmetros de Pulso em Soldagem com Eletrodo Tubular com Proteção Gasosa*, Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, 103p.
- ORTIZ, F. Jr., SIMPSON, J. R., PIGNATIELLO, J. J. Jr., HEREDIA-LANGNER, A. (2004)**, “A Genetic Algorithm Approach to Multiple-Response Optimization”, *Journal of Quality Technology*, v 36, n 4, pp. 432-450.
- OSBORNE, D. M., ARMACOST, R. L., PET-EDWARDS, J. (1997)**, “State of the Art in Multiple Response Surface Methodology”, 1997 *IEEE International Conference on Computational Cybernetics and Simulation*, v 4, pp. 3833-3838.
- PAIVA, A. P. (2004)**, *Estudo da Minimização de Erro nas Medições de Concentração de Emulsões por Titração Karl-Fischer utilizando-se Projeto de Experimentos*, Itajubá, 215p. Dissertação de Mestrado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Itajubá.
- PAIVA, A. P., COSTA, S. C., BALESTRASSI, P. P. (2005a)**, “Optimization of a Multi-response GMAW-P Process by Design of Experiments and Principal Component Analysis”, *Anais do XVIII COBEM - International Congress of Mechanical Engineering*, Ouro Preto, MG, Brasil.
- PAIVA, A. P., FERREIRA, J. R., BALESTRASSI, P. P. (2005b)**, “Aplicação da Metodologia de Projeto de Experimentos aos Parâmetros de Usinagem do Aço SAE/ABNT 52100 com Ferramentas Cerâmicas Mistas”, *Anais do 7º CIBIM - Congresso Ibero-americano de Engenharia Mecânica*, México D.F., 12 a 14 de Outubro de 2005, pp. 233.
- PERES-NETO, P. R., JACKSON, D. A., SOMERS, K. M. (2005)**, “How Many Principal Components? Stopping Rules for Determining the Number of Non-Trivial Axes Revisited”. *Computational Statistics & Data Analysis*, v 49, p. 974-997.

- PETERSON, J. J. (2004)**, “A Posterior Predictive Approach to Multiple Response Surface Optimization”, *Journal of Quality Technology*, v 36, n 2, pp. 139-153.
- PHADKE, M. S. (1989)**, *Quality Engineering Using Robust Design*, Prentice-Hall: Englewood Cliffs, New Jersey, 480p.
- PIGNATIELLO, J. J. JR. (1993)**, “Strategies for Robust Multiresponse Quality Engineering”, *IIE Transactions*, v 25, pp. 5-15.
- PRAVEEN, P., YARLAGADDA, P. K. D. V., KANG, M. J. (2005)**, “Advancements in Pulse Gas Metal Arc Welding”, *Journal of Materials Processing Technology*, Article in Press.
- REES, L. P., CLAYTON, E. R., TAYLOR, B. W., III. (1985)**, “Solving Multiple Response Simulation Models Using Modified Response Surface Methodology Within a Lexicographic Goal Programming Framework”, *IIE Transactions*, v 17, n 1, pp. 47-57.
- RENCHER, A.C. (2002)**, *Methods of Multivariate Analysis*. John Wiley and Sons, 2 ed., 740p.
- REDDY, P. B. S., NISHIMA, K., SUBASH BABU, A. (1997)**, “Unification of Robust Design and Goal Programming for Multiresponse Optimization – A Case Study”, *Quality and Reliability Engineering International*, v 13, pp. 371-383.
- RIBARDO, C. (2000)**, *Desirability Functions for Comparing Parameter Optimization Methods and for Addressing Process Variability Under Six Sigma Assumptions*. PhD Dissertation. Ohio State University - Industrial, Welding & Systems Engineering, Columbus, Ohio, 223p.
- RIBARDO, C., ALLEN, T. T. (2003)**, “An Alternative Desirability Function for Achieving ‘Six Sigma’ Quality”, *Quality and Reliability Engineering International*, v 19, n 3, pp. 227-240.
- RODRIGUES, L. O. (2005)**, *Análise e Otimização de Parâmetros na Soldagem com Arame Tubular*, Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, 82p.

- ROSSI, F. (2001)**, “Blending Response Surface Methodology and Principal Components Analysis to Match a Target Product”, *Food Quality and Preference*, v 12, pp. 457-465.
- RUEDA, E., CRUZ ORTIZ, M., SARABIA, L. A., HERRERO, A. (2003)**, “Optimization Using a Surface Response Methodology of a System With Drift – Application to a Flow Analysis System With Electrochemical Detection”, *Analytica Chimica Acta*, v 498, pp. 119-131.
- SANDSTROM, K. J. M., CARLSON, R., SUNESSOM, A. L., LEVIN, J. O., TURNER, A. P. F. (2001)**, “Multivariate Evaluation of Factors Influencing the Performance of a Formic Acid Biosensor for Use in Air Monitoring”, *The Analyst – The Royal Society of Chemistry*, v 126, pp. 2008-2014.
- SAHNI, N. S., EIDE, O., NAES, T. (1999)**, “An application of Multivariate Analysis in Product Development in the Food Industry”, *Quality Engineering*, v 11, n 4, pp. 579-586.
- SCOTTI, A., ROSA, L. A. A. (1997)**, “Influence of Oscillation Parameter on Crack Formation in Automatic Fe-B Hardfacing”, *Journal of Materials Processing Technology*, n. 65, pp. 272-280.
- SCOTTI, A., DUTRA, J. C., FERRARESI, V. A. (2000)**, “The Influence of Parameter Settings on Cathodic Self-Etching”, *Journal of Materials Processing Technology*, n 100, pp. 179-187.
- SCREMIN, M. A. A. (2003)**, *Método para Seleção do Número de Componentes Principais com base na Lógica Difusa*. Tese de Doutorado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Santa Catarina, 124p.
- SHAH, H. K., MONTGOMERY, D. C., CARLYLE, W. M. (2004)**, “Response Surface Modelling and Optimization in Multiresponse Experiments Using Seemingly Unrelated Regressions”, *Quality Engineering*, v 16, n 3, p. 387-397.

- SHOPHIAN, A., TIAN, G. Y., TAYLOR, D., RUDLIN, J. (2003)**, “A Feature Extraction Technique Based on ACP for Pulsed Eddy Current NDT”, *NDT&E International*, v 36, pp. 37-41.
- SONG, Y. A., PARK, S., CHAE, S. W. (2005)**, “3D Welding and Milling: Part II – Optimization of the 3D Welding Process Using Experimental Design Approach”, *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, v 45, pp. 1063-1069.
- SOUZA, A. M., (2000)**. *Monitoração e Ajuste de Realimentação em Processos Produtivos Multivariados*. Tese de Doutorado em Engenharia de Produção, Universidade Federal de Santa Catarina, 166p.
- SOUZA FILHO, J. B. O. (2002)**. *Análise de Componentes Principais em Sistemas de Sonar*. Dissertação de Mestrado em Engenharia Elétrica, COPPE/UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 171p.
- SRIVASTAVA, V. K., GILES, D. E. A. (1987)**, *Seemingly Unrelated Regression Equations Models*, New York, NY, Marcel Dekker, Inc., 1 ed., 374p.
- SU, C. T., TONG, L. I. (1997)**, “Multiresponse Robust Design by Principal Component Analysis”, *Total Quality Management*, v 8, n 6, pp. 409-416.
- SUN, Z., BEBIS, G., MILLER, R. (2004)**, “Object Detection Using Feature Subset Selection”, *Pattern Recognition*, v 37, pp. 2165-2176.
- SWINIARSKI, R. W., SKOWRON, A. (2003)**, “Rough Set Methods in Feature Selection and Recognition”, *Pattern Recognition Letters*, v 24, pp. 833-849.
- TARNG, Y. S., JUANG, S. C., CHANG, C. H. (2002)**, “The Use of the Grey-Based Taguchi Methods to Determine Submerged Arc Welding Process Parameters in Hard Facing”, *Journal of Materials Processing Technology*, v 128, pp. 1-6.
- TODESCHINI, R. (1997)**, “Data Correlation, Number of Significant Principal Components and Shape of Molecules. The K Correlation Index”. *Analytica Chimica Acta*, n 348, pp. 419-430.

- TANG, L. C., XU, K. (2002)**, “A Unified Approach for Dual Response Surface Optimization”. *Journal of Quality Technology*, v 34, n 4, pp. 437-447.
- TINO, V. F. (2005)**. *Utilização de Análise de Componentes Principais para a Regulagem de Máquinas de Injeção Plástica*. Dissertação de Mestrado em Engenharia Elétrica, COPPE/UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 90p.
- TONG, L. I., HSIEH, K. L. (2001)**, “A Novel Means of Applying Neural Networks to Optimize the Multiresponse Problem”, *Quality Engineering*, v 13, n 1, pp.11-18.
- TONG, L. I., WANG, C. H., CHEN, C. C., CHEN, C. T. (2004)**, “Dynamic Multiple Responses by Ideal Solution Analysis”, *European Journal of Operational Research*, n 156, pp. 433-444.
- TONG, L., WANG, C. H., CHEN, H. C. (2005)**, “Optimization of Multiple Responses Using Principal Component Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution”, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v 27, pp. 407-414.
- TSEO, C. L., DENG, J. C., CORNELL, J. A., KHURI, A. I., SCHMIDT, R. H. (1983)**, “Effect of Washing Treatment on Quality of Minced Mullet Flesh”, *Journal of Food Science*, v 48, pp. 163-167.
- UOSUKAINEN, E., LAMSA, M., LINKO, Y. Y., LEISOLA, M. (1999)**, “Optimization of Enzymatic Transesterification of Rapeseed Oil Ester Using Response Surface and Principal Component Methodology”, *Enzyme and Microbial Technology*, v 25, pp. 236-243.
- VAN GYSEGHEM, E., JIMIDAR, M., SNEYERS, R., REDLICH, D., VERHOEVEN, E., MASSART, D. L., VANDER HEYDEN, Y. (2004)**, “Selection of Reversed-Phase Liquid Chromatographic Columns with Diverse Selectivity Towards the Potential Separation of Impurities in Drugs”, *Journal of Chromatography A*, n 1042, pp. 69-80.
- VINING, G., MYERS, R. H. (1990)**, “Combining Taguchi and Response Surface Philosophies: A Dual Response Approach”, *Journal of Quality Technology*, v 22, n 1, pp. 38-44.

- WAINER, E., BRANDI, S. D., MELLO, F. D. H. (1992)**, *Soldagem: Processos e Metalurgia*. Ed. Edgard Blucher Ltda, São Paulo, 494p.
- WANG, X., PALIWAL, K. K. (2003)**, “Feature Extraction and Dimensionality Reduction Algorithms and Their Application in Vowel Recognition”, *Pattern Recognition*, v 36, pp. 2429-2439.
- WARNE, K., PRASAD, G., REZVANI, S., MAGUIRE, L. (2004)**, “Statistical and Computational Intelligence Techniques for Inferential Model Development: a Comparative Evaluation and a Novel Proposition for Fusion”, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, v 17, n 8, pp. 871-886.
- WYCKOFF, J. (1998)**, “Combining Noise Factors and Process Parameters in a Response Surface”, 6th Annual Black Belt Symposium, Dallas, Texas, 23p. Em: <http://www.osti.gov/energycitations/servlets/purl/webviewable/16831>. Acesso em: 10/03/2006.
- WOLD, S. (1978)**, “Cross-Validatory Estimation of the Number of Components in Factor and Principal Components Models”, *Technometrics*, v 20, n 4, pp. 397-405.
- WU, F. C. (2005)**, “Optimization of Correlated Multiple Quality Characteristics Using Desirability Function”, *Quality Engineering*, v 17, n 1, pp. 119-126.
- WU, F. C. J., HAMADA, M. (2000)**. *Experiments: Planning, Analysis, and Parameter Design Optimization*. Wiley-Interscience, 664p.
- YACOUB, F., MacGREGOR, J. F. (2004)**, “Product Optimization and Control in the Latent Variable Space of Nonlinear PLS Models”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v 70, pp. 63-74.
- YANG, T., CHOU, P. (2005)**, “Solving a Multiresponse Simulation-Optimization Problem with Discrete Variables Using a Multiple-Attribute Decision-Making Method”, *Mathematics and Computers in Simulation*, v 68, pp. 9-21.

- YIH-FONG, T. (2005)**, “A Hybrid Approach to Optimize Multiple Performance Characteristics of High-Speed Computerized Numerical Control Milling Tool Steels”, *Materials and Design*. Article in Press. Disponível *online* em 15 de agosto de 2005.
- ZHANG, A., LIN, J. (2005)**, “Fault Feature Separation Using Wavelet-ICA Filter”, *NDT&E International*, v 38, pp. 421-427.
- ZELLNER, A. (1962)**, “An Efficient Method of Estimating Seemingly Unrelated Regressions and Tests for Aggregation Bias”, *American Statistical Association Journal*, v 57, pp. 348-368.

APÊNDICES

APÊNDICE A: Dados de Tseo *et al.* (1983) *apud* Shah *et al.* (2004).

Este exemplo adicional ilustra a aplicação do procedimento proposto nesta tese aos dados de Tseo *et al.* (1983). O objetivo da utilização deste caso é comparar a abordagem multivariada proposta, com o estudo de Shah *et al.* (2004), que utilizou o modelo de regressão SUR reduzido.

Tabela A.1 – Análise de Componentes Principais para os dados de Tseo *et al.* (1983).

	Componente Principal			
	PC1	PC2	PC3	PC4
Autovalores	2,5719	0,9758	0,3975	0,0548
Proporção	0,643	0,244	0,099	0,014
Acumulado	0,643	0,887	0,986	1,000
	Autovetores			
Y1	0,585	0,196	0,372	-0,694
Y2	-0,597	-0,031	-0,370	-0,711
Y3	-0,526	-0,036	0,850	0,001
Y4	0,155	-0,980	0,055	-0,116

Nota-se que Y1, Y2 e Y3 possuem correlações moderadas e fortes, porém, significativas ($P\text{-Value} < 5\%$). O mesmo não ocorre com Y4. Entretanto, para efeitos de comparação entre o método proposto e os resultados de Shah *et al.* (2005), em uma primeira abordagem, Y4 será mantido no conjunto. A tabela A.2 apresenta as direções de otimização e os limites desejados.

Observando-se as correlações entre os componentes principais e as variáveis dependentes originais, pode-se afirmar que, maximizando-se uma equação em termos de PC1, Y1 será maximizada, enquanto que Y2 e Y3 serão minimizadas. Se Y4 for multiplicada por (-1), então, a maximização de (-Y4) será igual à minimização de Y4.

Neste caso, propõe a adoção apenas de PC₁. Existem duas razões para isto: primeiramente, apenas λ_1 é superior à unidade; segundo, mesmo sendo o segundo autovalor muito próximo de 1 ($\lambda_2 = 0,9758$), a equação de regressão por mínimos quadrados em função de PC2 apresenta um R² ajustado igual a zero, o que indica a completa inadequação do modelo.

Os limites e as restrições para as variáveis dependentes e independentes presentes nos modelos estão contemplados na tabela A.2.

Tabela A.2 – Condições de otimização para os dados de Tseo *et al* (1983).

Resposta	Direção de otimização e Restrições	
Y1	Maximizar	$Y1 \geq 1,7$
Y2	Minimizar	$Y2 \leq 21$
Y3	Minimizar	$Y3 \leq 20$
Y4	Minimizar	$Y4 \geq 45$
Variáveis	Limite Inferior	Limite Superior
X1	-1	+1
X2	-1	+1
X3	-1	+1

Tabela A.3 – Testes e Índices de adequação para aplicação da ACP

Testes	Valor Crítico	Valor de Teste	G.L.	Valor P
Isotropia	11,0705	130,652	5	0,0000
Lawley	11,0705	23,2308	5	0,0003
Bartlett	12,5916	40,197	6	0,0000
ÍNDICES		ICG	ID	IK
		0,05	11,0827	1,4529

Tabela A.4– Modelos de regressão completos obtidos por mínimos quadrados ordinários.

Termo do Modelo	Coeficientes de Regressão (Modelo Completo)					
	Y1	Y2	Y3	Y4	PC1 ⁽⁴⁾	PC1 ⁽³⁾
Constante	1,88010 ^(s)	21,2616 ^(s)	17,9326 ^(s)	50,7343	1,50156 ^(s)	1,46515 ^(s)
x_1	-0,09739 ^(s)	5,6151 ^(s)	0,7442	2,2167	-0,81464 ^(s)	-0,89240 ^(s)
x_2	-0,00090	-0,2180	-0,0120	0,4110	0,02390	0,01174
x_3	0,00905	-1,1808	-1,0711	0,4889	0,26998	0,25800
x_1^2	-0,10287 ^(s)	8,1529 ^(s)	3,4525 ^(s)	-3,2351 ^(s)	-1,51802 ^(s)	-1,43885 ^(s)
x_2^2	0,00143	0,4260	0,8008	0,5603	-0,10957	-0,12708
x_3^2	0,00320	0,9793	1,5786 ^(s)	0,4896	-0,24155	-0,25788
x_1x_2	-0,02625	2,5800	1,8000 ^(s)	-0,2862	-0,52396 ^(s)	-0,52094 ^(s)
x_1x_3	-0,00375	-0,5800	2,1000 ^(s)	0,8512	-0,22871	-0,25642
x_2x_3	-0,00625	0,4125	-0,5750	0,1487	0,02613	0,02162
S	0,04774	2,836	2,111	5,308	0,3480	0,4599
R ² (adj.)	87,6 %	90,6 %	72,4 %	0,0 % ^(*)	95,3 %	91,7 %

^(s) – Valor de P < 0,05, indicando efeito significativo.

^(*) – Adotando-se o modelo reduzido, a explicação melhora substancialmente.

Tabela A.5 – Análise comparativa entre os resultados de Shah *et. al.* (2004) e o método proposto.

C	Valor Desejado	Valor Ótimo		
		Shah	ACP ⁽⁴⁾	ACP ⁽³⁾
X1	$-1 \leq x_1 \leq +1$	-0,500	-0,4505	-0,5043
X2	$-1 \leq x_2 \leq +1$	1,000	1,0000	1,0000
X3	$-1 \leq x_3 \leq +1$	0,780	1,0000	1,0000
Y1	$Y1 \geq 1,7$	1,907	1,9074	1,90735
Y2	$Y2 \leq 21$	20,295	20,3276	20,2890
Y3	$Y3 \leq 20$	17,648	17,2625	17,1900
Y4	$Y4 \geq 45$	49,894	50,0663	49,7685

(*) – Número de Componentes utilizados.

Os resultados exibidos na Tabela A.5 demonstram que o método multivariado proposto é bastante adequado, também quando comparado à modelagem SUR reduzida.

APÊNDICE B

Os dados de Tong e Hsieh (2001) são utilizados para se estudar a proposta de otimização com componentes principais para respostas originais do tipo NTB (*Nominal-the-Best*). Neste caso, especificamente, deseja-se que todas as respostas se aproximem o máximo possível dos seus respectivos valores alvo. Estes limites estão dispostos na tabela B.2.

Seguindo o fluxograma sugerido pela figura 5.3 do capítulo 5, nos casos onde todas as respostas devam atingir um valor alvo, pode-se empregar como variáveis independentes as diferenças entre os valores experimentais observados e os respectivos alvos de cada resposta, tomada em valor absoluto. Se alguma das diferenças não apresentar distribuição normal, uma transformação do tipo Johnson poderia corrigir as discrepâncias.

Para avaliar se a aplicação da análise de componentes principais é viável, procede-se, então, à análise de autovalores e autovetores dessa matriz de diferenças absolutas normalizadas. Os resultados encontram-se na tabela B.1.

Tabela B.1 – Análise de Autovalores e Autovetores da Matriz de Correlação.

Autovalores	4,8104	0,7213	0,3474	0,0785	0,0355	0,0069
Proporção	0,802	0,12	0,058	0,013	0,006	0,001
Acumulado	0,802	0,922	0,98	0,993	0,999	1,000
Resposta	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6
D1_N	-0,264	-0,958	0,085	0,049	0,027	-0,04
D2	-0,443	0,052	-0,135	-0,663	-0,551	0,199
D3	-0,439	0,147	0,274	-0,377	0,754	0,003
D4	-0,404	0,055	-0,758	0,353	0,203	0,306
D5	-0,449	0,162	-0,033	0,212	-0,172	-0,834
D6	-0,419	0,168	0,57	0,497	-0,237	0,411

Percebe-se claramente que a proporção de variância explicada por PC₁ é de 80,2%, e de PC₁ e PC₂ em conjunto, de 92,2%. Assim, adotando-se o IGM, mais de 90% da estrutura de variância do conjunto original de seis respostas seria explicada apenas pelos dois maiores componentes principais.

A análise da tabela B.2 demonstra que a abordagem “A” é aquela que apresentou o menor desvio absoluto médio em relação aos valores dos respectivos alvos de cada resposta. Pode se notar que, exceto pelo valor alcançado por Y4, para as demais respostas o método multivariado proposto é melhor que o método *Desirability* modificado (MDF) e uma Rede

Neural Artificial MLP (*Multilayer Perceptron*) quando se trata de se aproximar de um valor alvo específico.

Este exemplo demonstra claramente a eficiência do método para problemas de normalização.

Tabela B.2 – Resultados da aplicação da função objetivo em termos de IGM.

Abordagem	X1	X2	X3	Tipos de Restrição			
A	0,596 ¹ 91,919 ²	1,000 387,500	1,000 300,000	$-1 \leq x_i \leq +1$			
B	0,204 84,089	0,666 366,627	0,717 285,868				
C	0,306 86,127	0,873 379,553	1,070 303,486	$x'x \leq 2$			
D	0,385 87,703	0,997 387,312	1,363 318,148				
E	0,321 86,428	0,947 384,184	1,000 300,000	$-1 \leq x_i \leq +1$ $x'x \leq 2$			
F	0,335 86,702	0,922 382,611	1,174 308,719				
Respostas	Y1	Y2	Y3	Y4	Y5	Y6	Desvio
A	189,266	183,005	184,777	198,405	179,480	193,486	4,23
B	189,337	168,648	168,363	183,890	165,550	178,050	11,03
C	187,215	180,118	182,584	191,607	175,750	190,856	4,47
D	184,165	188,950	194,370	195,795	183,091	200,415	7,05
E	187,470	180,555	182,063	194,093	176,454	190,635	4,70
F	186,210	183,338	186,790	193,325	178,485	194,378	4,41
MDF	186,900	173,000	170,100	190,000	170,900	182,400	7,78
RNA	187,400	181,000	178,600	190,300	173,100	186,100	4,38
ALVO	190,000	185,000	185,000	190,000	185,000	185,000	-

⁽¹⁾ – Valor codificado; ⁽²⁾ – Valor decodificado.

APÊNDICE C

Programa aplicado ao Exemplo 3.

```

%UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBA - UNIFEI
%Instituto de Engenharia Mecânica - IEM
%Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica - DOUTORADO.

%%TESTES DE HIPÓTESE E PRINCIPAIS ÍNDICES MULTIVARIADOS%%

%Este programa permite o cálculo dos testes de esfericidade, isotropia,
%convergência, divergência e número de componentes principais
%significativos. O programa serve para avaliar a coerência
%na aplicação da ACP aos arranjos MSR, com o intuito de
%otimizar processos com múltiplas respostas correlacionadas.

%%ENTRADA DE DADOS %%

% DADOS: Kannan e Murugan (2006a e 2006b) - ANEXO D

% Parâmetros de inicialização:

n = 31; % número de experimentos no CCD.
p = 8; % número de variáveis de resposta.
q = 2; % número de autovalores significativos (por hipótese).
r = p-q; % número de autovalores hipoteticamente iguais.
alfa= 0.05; % Nível de Significância do Teste

% MATRIZES DE ENTRADA (CORRELAÇÃO OU COVARIÂNCIA)

% Matriz CORRELAÇÃO

R =[1.0000  -0.0088   0.8060  -0.2787   0.2123   0.0788   0.3077   0.2899;
   -0.0088   1.0000  -0.1791   0.8826  -0.7296  -0.8377  -0.7469  -0.6152;
    0.8060  -0.1791   1.0000  -0.5114   0.5089   0.4023   0.5075   0.4097;
   -0.2787   0.8826  -0.5114   1.0000  -0.7880  -0.8759  -0.7755  -0.6655;
    0.2123  -0.7296   0.5089  -0.7880   1.0000   0.8583   0.9025   0.5480;
    0.0788  -0.8377   0.4023  -0.8759   0.8583   1.0000   0.7858   0.5876;
    0.307  -0.7469   0.5075  -0.7755   0.9025   0.7858   1.0000   0.6822;
    0.2899  -0.6152   0.4097  -0.6655   0.5480   0.5876   0.6822   1.0000];

% Matriz COVARIÂNCIA

S=[16.5489  -0.0063   1.5471  -4.2467   3.7816   2.0201   1.3367   0.4716;
   -0.0063   0.0307  -0.0148   0.5797  -0.5600  -0.9257  -0.1398  -0.0431;
    1.5471  -0.0148   0.2227  -0.9040   1.0512   1.1965   0.2557   0.0773;
   -4.2467   0.5797  -0.9040  14.0312  -12.9213  -20.6791  -3.1021  -0.9968;
    3.7816  -0.5600   1.0512  -12.9213  19.1656  23.6817   4.2193   0.9593;
    2.0201  -0.9257   1.1965  -20.6791  23.6817  39.7226   5.2888   1.4809;
    1.3367  -0.1398   0.2557  -3.1021   4.2193   5.2888   1.1405   0.2913;
    0.4716  -0.0431   0.0773  -0.9968   0.9592   1.4809   0.2913   0.1599];

%%TESTE DE ISOTROPIA %%

lambdas = sort(eig(S));
% FLIPUD: comando que inverte a ordem dos elementos de CIMA para BAIXO.
lambdaS = flipud(lambdas)';
lbdS = lambdaS(:,q+1:p);
logs1 = log(lbdS);
log1 = sum(logs1);
soma_lbdS = sum(lbdS);
log2 = log(soma_lbdS/r);
Chi_quad = -(n-1)*log1+(n-1)*r*(log2);
df_iso = 0.5*r*(r+1)-1;
Chi2_isot = chi2inv(1-alfa,df_iso);
P_Value_Isot=1-chi2cdf(Chi_quad,df_iso);

%%TESTE DE LAWLEY %%

```

```

k=rank(R);
V=eye(k); % Cria uma matriz identidade.
L = R - V; % Anula a diagonal.
LL=L./(k-1); % Divide todos os elementos da matriz com diagonal nula por k.
Ls1=sum(LL,2); % Encontra as medias de cada linha, excetuando-se a diagonal.

% Matriz formada apenas pelos valores acima da diagonal principal:
for i = 1:k
    for j = 1:k
        if i<j
            x(i,j) = R(i,j);
        else
            x(i,j) = 0;
        end
    end
end

s=sparse(x); % Matriz Esparsa (arquivo apenas os valores nao-nulos)
s1=sum(s);
s2=sum(s1);
y=2/(k*(k-1))*s2;
F=full(y);

% Soma de Quadrados no Teste de Lawley (Jonhson & Wichern, 1992, pg. 387)
full(s);
SS = (x-F).^2;

% Matriz formada apenas pelos valores acima da diagonal principal para SS:
for i = 1:k
    for j = 1:k
        if i<j
            XX(i,j) = SS(i,j);
        else
            SS(i,j) = 0;
        end
    end
end

aa=sparse(XX); % Matriz Esparsa (arquivo apenas os valores nao-nulos)
aa1=sum(aa);
aa2=sum(aa1);
Faa=full(aa2);

% Construção da Função Gama:
gamma = ((p-1)^2*(1-(1-F)^2))/(p*(p-2)*(1-F)^2);

% Estatística de Teste de Lawley (T)
RR = (Ls1-F).^2;
RR1 = sum(RR,1);

T = ((n-1)/(1-F)^2)*(Faa-(gamma*RR1)); % Estatística de Teste
df = (p+1)*(p-2)/2; % Graus de liberdade do Teste
Chi2 = chi2inv(1-alfa,df);
P_Value_Lawley=1-chi2cdf(T,df); % P-Value do Teste

%%%%%% TESTE DE ESFERICIDADE DE BARTLETT %%%%%%%

Chi_sphere=-(n-((2*p+11)/6))*log(det(R));
df_sphere=p*(p-1)*0.5;
Chi2_sphere= chi2inv(1-alfa,df_sphere);
P_Value_sphere=1-chi2cdf(Chi_sphere,df_sphere);

% ÍNDICE DE DIVERGÊNCIA (ID)
ID = 0.5*trace(inv(R));

```

```

% ÍNDICE DE KULBACH (IK)

IK = -0.5*log(det(R));

% Saída de Resultados

fprintf(1,'***** ANÁLISE DE RESULTADOS *****\n');
fprintf(1,'
                                \n');
fprintf(1,'          TESTE DE ISOTROPIA          \n');
fprintf(1,'
                                \n');
disp ('   Teste      Critico      df      P_Value')
disp ([Chi_quad Chi2_isot df_iso P_Value_Isot]);
fprintf(1,'
                                \n');
fprintf(1,'          TESTE DE LAWLEY\n');
fprintf(1,'
                                \n');
disp ('   Critico      Teste      df      P_Value')
disp ([Chi2 T df P_Value_Lawley]);
fprintf(1,'
                                \n');
fprintf(1,'   TESTE DE ESFERICIDADE DE BARTLETT\n');
fprintf(1,'
                                \n');
disp ('   Critico      Teste      df      P_Value')
disp ([Chi2_sphere Chi_sphere df_sphere P_Value_sphere]);
fprintf(1,'
                                \n');
disp ('Índice de Correlação Generalizada (ICG)');disp ([det(R)]);
fprintf(1,'
                                \n');
disp ('Índice de Divergência (ID)');disp ([ID]);
fprintf(1,'
                                \n');
disp ('Índice de Kulbach (IK)');disp ([IK]);
fprintf(1,'
                                \n');

```

EXEMPLO DA SAÍDA DO PROGRAMA

```
>> ***** ANALISE DE RESULTADOS *****
```

TESTE DE ISOTROPIA

Teste	Critico	df	P_Value
344.2433	31.4104	20.0000	0.000

TESTE DE LAWLEY

Critico	Teste	df	P_Value
40.1133	324.3228	27.0000	0.000

TESTE DE ESFERICIDADE DE BARTLETT

Critico	Teste	df	P_Value
41.3371	257.3801	28.0000	0.000

Índice de Correlação Generalizada (ICG)
6.0525e-005

Índice de Divergencia (ID)
32.1931

Índice de Kulbach (IK)
4.8562

ANEXOS

ANEXO A – Utilização do aplicativo Solver do MS-Excel®

Dados do Exemplo N° 1. (Item 5.1)

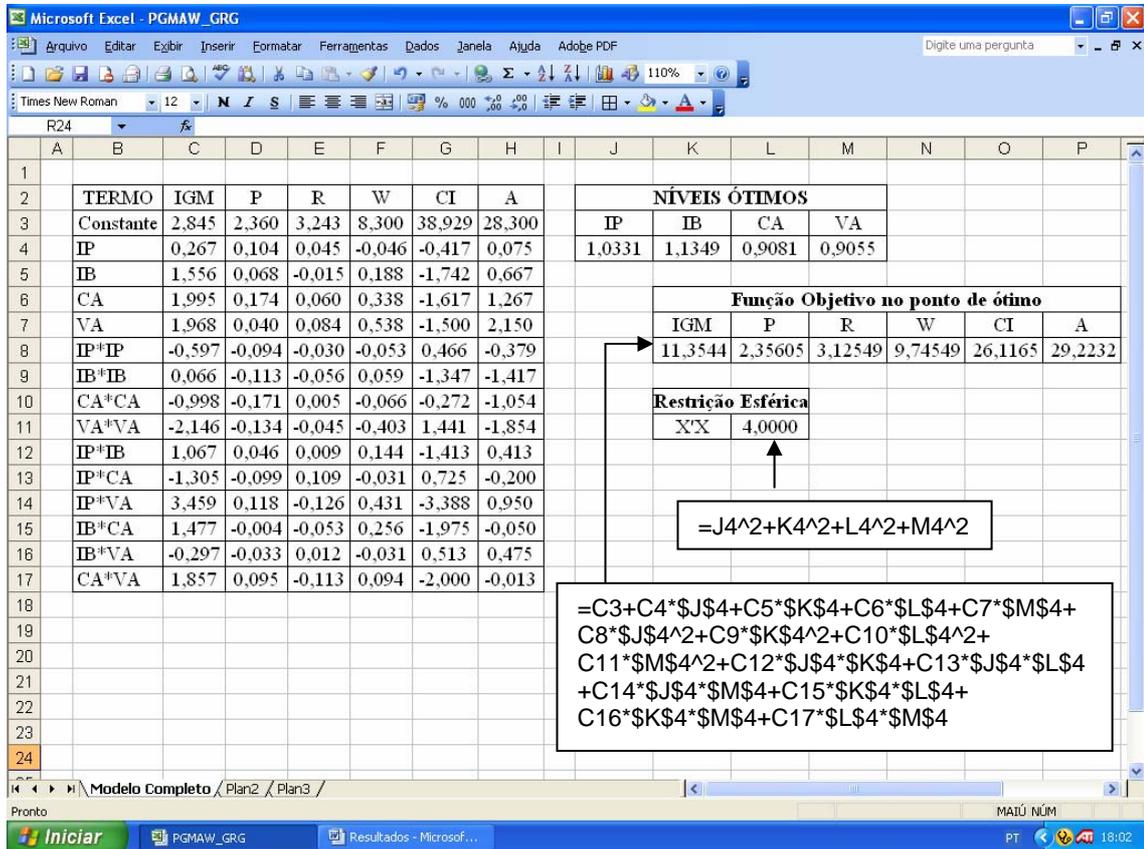


Figura A.1 – Planilha do Solver



Figura A.2 – Parâmetros do Solver

ANEXO B – Tabelas de Dados

Tabela B1. Resultados Experimentais com o Arranjo Central Composto.

Fatores					Respostas					Componentes Principais	
N	Ip	Ib	Ca	Va	P	R	W	CI	A	PC1	PC2
1	280	70	40	5	1,60	2,87	7,7	37,2	20,7	-1,031	1,677
2	350	70	40	5	1,60	2,90	6,6	44,4	19,0	-2,627	1,085
3	280	100	40	5	1,70	2,80	7,0	39,6	20,7	-1,556	1,703
4	350	100	40	5	1,87	3,10	6,3	43,0	18,7	-2,339	0,366
5	280	70	50	5	1,90	3,00	7,3	41,6	23,2	-0,927	0,491
6	350	70	50	5	1,66	3,70	6,0	52,5	20,9	-3,366	-2,941
7	280	100	50	5	1,96	2,90	8,1	35,5	21,5	-0,021	1,565
8	350	100	50	5	1,90	3,30	7,9	38,0	22,8	-0,254	-0,333
9	280	70	40	6	1,20	3,48	7,3	46,0	20,7	-2,619	-1,369
10	350	70	40	6	1,90	3,10	8,1	38,9	24,9	0,065	0,194
11	280	100	40	6	1,22	3,50	7,2	48,3	23,0	-2,547	-1,860
12	350	100	40	6	1,95	3,10	8,6	35,9	27,0	1,020	0,252
13	280	70	50	6	2,10	3,20	8,1	39,2	25,7	0,427	-0,342
14	350	70	50	6	2,08	3,20	8,7	36,4	25,1	0,949	-0,025
15	280	100	50	6	1,96	3,00	8,4	36,4	25,5	0,646	0,735
16	350	100	50	6	2,30	3,20	9,2	28,5	28,4	2,771	0,277
17	245	85	45	5,5	1,85	3,00	8,8	40,0	29,0	0,890	0,158
18	385	85	45	5,5	2,29	3,12	8,1	38,1	27,0	0,967	-0,101
19	315	55	45	5,5	1,79	2,91	8,5	34,5	21,7	0,117	1,643
20	315	115	45	5,5	2,20	3,00	9,3	29,1	26,0	2,289	1,270
21	315	85	35	5,5	1,42	3,00	7,6	39,5	22,3	-1,323	0,862
22	315	85	55	5,5	2,10	3,40	9,2	32,7	28,3	2,098	-0,797
23	315	85	45	4,5	1,80	2,80	6,0	46,4	17,4	-3,145	1,397
24	315	85	45	6,5	2,02	3,20	8,1	39,5	26,8	0,444	-0,453
25	315	85	45	5,5	2,60	3,25	8,8	36,2	30,7	2,527	-0,840
26	315	85	45	5,5	2,10	3,30	8,1	40,7	27,6	0,557	-1,036
27	315	85	45	5,5	2,20	3,30	8,7	38,1	28,9	1,491	-0,940
28	315	85	45	5,5	2,50	3,10	8,0	38,8	26,9	1,110	-0,119
29	315	85	45	5,5	2,32	3,35	7,8	42,0	28,0	0,608	-1,437
30	315	85	45	5,5	2,40	3,30	8,3	39,8	30,1	1,525	-1,253
31	315	85	45	5,5	2,40	3,10	8,4	36,9	25,9	1,259	0,170

Tabela B.2 - Resultados Experimentais com o Arranjo Central Composto.

A	B	C	P	TD	Rd	IC	D	PC1	PC2
29,00	10,00	15,00	1,89	3,62	82,49	32,1	38,76	1,550	0,604
36,00	10,00	15,00	1,93	3,49	79,47	21,68	44,26	2,825	-0,591
29,00	14,00	15,00	2,40	5,14	86,83	55,49	30,26	-2,257	2,078
36,00	14,00	15,00	2,88	5,28	86,03	26,1	45,13	-1,373	-1,757
29,00	10,00	20,00	1,55	3,74	82,82	29,58	35,51	1,737	1,206
36,00	10,00	20,00	1,94	3,65	82,50	25,52	43,23	1,778	-0,329
29,00	14,00	20,00	1,91	5,40	86,12	50,57	26,95	-1,698	2,719
36,00	14,00	20,00	2,85	4,90	85,58	24,7	43,67	-0,891	-1,580
26,61	12,00	17,50	1,90	4,63	86,21	50	26,88	-1,050	2,790
38,39	12,00	17,50	2,40	4,59	84,10	23,8	42,11	0,184	-0,906
32,50	8,64	17,50	1,60	3,11	80,90	30,5	35,22	2,567	0,644
32,50	15,36	17,50	3,10	6,06	89,12	45,8	44,37	-3,651	-0,260
32,50	12,00	13,30	2,80	4,88	84,50	25,05	41,66	-0,603	-1,256
32,50	12,00	21,70	1,90	4,65	86,42	23,75	35,05	-0,066	0,433
32,50	12,00	17,50	1,90	4,55	86,05	27,27	42,43	0,112	-0,236
32,50	12,00	17,50	2,28	4,25	83,51	24,91	42,19	0,695	-0,683
32,50	12,00	17,50	2,30	4,37	84,82	26,85	42,65	0,190	-0,684
32,50	12,00	17,50	2,15	4,18	86,49	26,79	39,8	0,036	-0,187
32,50	12,00	17,50	2,30	4,22	85,79	25,06	44,3	0,165	-0,968
32,50	12,00	17,50	2,35	4,50	86,08	27,15	45,1	-0,249	-1,040

Tabela B.3 – Dados experimentais de Kannan e Murugan (2006 a, b)

N	W	P	R	D	FNc	FNm	Cr_{eq}	Ni_{eq}	IGM
1	29,50	0,61	4,97	7,86	33,00	37,00	24,71	12,81	-14,19
2	36,62	0,73	5,00	12,10	27,00	31,00	24,20	12,80	-5,37
3	24,20	0,63	4,23	11,35	31,00	36,00	24,31	12,74	-5,57
4	28,00	0,77	4,27	11,98	22,00	24,00	22,85	12,32	8,43
5	30,00	0,57	5,00	6,54	33,00	38,00	25,09	13,08	-17,68
6	34,98	0,67	5,29	8,82	28,00	34,00	24,23	12,85	-10,88
7	25,59	0,58	4,18	9,69	29,00	37,00	24,43	13,17	-8,08
8	29,51	0,70	4,20	11,16	24,00	25,00	23,32	12,21	6,12
9	28,34	0,73	5,00	8,97	30,00	38,00	24,63	12,86	-11,76
10	34,50	0,97	5,10	13,75	29,00	31,00	23,82	12,12	-0,38
11	24,00	1,00	4,00	18,52	21,00	21,00	22,03	11,73	20,94
12	27,80	1,20	4,34	20,58	19,00	20,00	21,76	11,74	23,41
13	29,26	0,60	5,08	7,46	32,00	37,00	24,96	12,73	-14,76
14	34,80	0,80	5,28	9,14	29,00	34,00	24,20	12,73	-9,58
15	25,30	0,97	4,00	18,00	28,00	25,00	23,17	11,59	14,12
16	27,70	1,00	4,20	14,80	20,00	24,00	21,92	12,23	15,35
17	20,15	0,40	3,98	5,86	34,00	47,00	25,23	12,75	-15,48
18	31,00	1,07	4,90	16,48	24,00	25,00	22,97	12,66	6,47
19	39,53	0,70	5,68	5,31	33,00	36,00	24,76	12,78	-18,58
20	23,10	1,00	3,63	17,35	19,00	18,00	22,07	12,48	20,74
21	25,10	0,83	4,32	11,71	24,00	33,00	21,02	12,17	9,27
22	28,00	0,63	4,81	9,01	33,00	37,00	24,53	12,32	-9,92
23	30,20	0,56	4,17	10,54	25,00	34,00	23,31	12,29	1,46
24	26,00	0,87	4,87	13,98	24,00	29,00	22,72	12,09	5,75
25	27,88	0,70	4,55	10,33	29,00	32,00	23,75	12,28	-2,01
26	29,42	0,83	4,34	13,60	25,00	30,00	23,70	12,80	2,19
27	28,00	0,77	4,50	10,73	30,00	33,00	24,17	12,28	-2,65
28	27,90	0,87	4,50	11,71	28,00	33,00	23,74	12,17	0,99
29	29,20	0,83	4,32	13,76	25,00	30,00	23,40	12,25	5,52
30	27,80	0,79	4,58	10,99	24,00	33,00	23,10	11,94	3,90
31	27,80	0,80	4,57	10,67	24,00	33,00	23,14	12,28	2,22

Tabela B4 – Arranjo Central Composto. Dados de Guanaraj e Murugan (2000).

N	V	F	S	N	P	R	W	AP	AR	D	TV
1	-1	-1	-1	-1	3,52	1,7	10,15	20,7	24,48	42,4	48,8
2	1	-1	-1	-1	3,4	1,51	13,47	22,1	21,52	46,8	47,3
3	-1	1	-1	-1	4,75	2,32	11,05	24,5	22,8	47,5	51,5
4	1	1	-1	-1	4,1	1,85	15,64	26,3	24,15	50,3	52,2
5	-1	-1	1	-1	3,25	1,38	8,28	18,3	23,17	40,7	44,9
6	1	-1	1	-1	3,18	1,18	10,1	19,5	23,42	41,9	46,5
7	-1	1	1	-1	3,52	1,5	9,15	21,5	18,9	48,6	44,3
8	1	1	1	-1	3,33	1,82	9,86	23,2	19,25	49,8	46,6
9	-1	-1	-1	1	3,85	1,61	10,66	20,2	27,48	39,4	51,3
10	1	-1	-1	1	3,6	1,48	14,55	21,8	26,24	40,5	53,8
11	-1	1	-1	1	4,1	1,92	13,38	23,1	27,82	42,1	54,9
12	1	1	-1	1	3,8	1,8	15,96	26,5	31,16	42,9	61,8
13	-1	-1	1	1	3,2	1,37	8,7	17,7	24,52	38,6	45,5
14	1	-1	1	1	3,0	1,1	9,28	18,9	25,34	39,7	47,6
15	-1	1	1	1	4,1	1,75	9,01	20,3	25,55	40,8	49,8
16	1	1	1	1	3,88	1,5	10	21,1	23,87	42,3	49,1
17	-2	0	0	0	4,1	1,62	10,28	19,4	24,25	41,1	47,2
18	2	0	0	0	3,75	1,43	15,3	25,4	29,45	42,9	59,2
19	0	-2	0	0	3,26	1,41	9,95	19,1	17,95	38,1	40,1
20	0	2	0	0	4,97	1,75	10,96	27,7	21,53	51	54,3
21	0	0	-2	0	4,25	2,3	16,11	25,3	31,33	41,3	61,2
22	0	0	2	0	3,48	1,4	8,5	18,4	21,05	43	42,8
23	0	0	0	-2	3,82	1,31	11,17	22,5	19,68	48,7	46,2
24	0	0	0	2	3,58	1,27	12,05	23,2	27,83	42,5	54,6
25	0	0	0	0	3,45	1,15	11,2	20,9	21,8	47,1	44,4
26	0	0	0	0	3,47	1,3	10,58	21,7	21,4	46,5	46,6
27	0	0	0	0	3,66	1,27	9,92	21,9	19,8	48,2	45,4
28	0	0	0	0	3,6	1,31	11,13	21,2	19,9	47,6	44,5
29	0	0	0	0	3,3	1,16	10,56	20,5	21,1	45,7	44,9
30	0	0	0	0	3,6	1,27	10,84	22,6	21,5	47,3	47,8
31	0	0	0	0	3,92	1,45	11,05	22,1	24,6	48,5	47,6

Tabela B.5 – Conjunto de dados de Correia et al (2005).

n	P	D	W	R	n	P	D	W	R
1	3,5	81,8	5,1	1,2	11	11	3,1	79,7	3,8
2	3,8	79,6	4,7	1,3	12	12	5,5	90,8	7,8
3	5,1	91,3	9,1	1,8	13	13	4,3	88,0	6,1
4	5,3	90,4	9,1	1,6	14	14	3,8	69,0	4,0
5	3,0	79,4	4,8	1,0	15	15	4,0	74,3	5,5
6	3,1	79,6	4,6	1,5	16	16	3,9	78,0	5,6
7	4,5	70,9	7,0	1,3	17	17	4,0	72,1	6,2
8	4,5	69,6	6,8	1,1	18	18	4,0	73,3	6,3
9	3,5	84,2	6,7	2,0	19	19	3,8	73,5	6,2
10	3,5	88,3	6,2	1,8	20	20	3,4	76,3	5,9

Tabela B.6 – Análise de resultados do caso N° 6.

n	Fatores			Largura			Média	D.P.	PC ₁
	X ₁	X ₂	X ₃	Y ₁	Y ₂	Y ₃	\bar{Y}	σ	
1	-1	-1	-1	39	34	42	38,3	4,0	2,821
2	1	-1	-1	60	53	68	60,3	7,5	1,216
3	-1	1	-1	52	44	45	47,0	4,4	2,180
4	1	1	-1	78	64	65	69,0	7,8	0,575
5	-1	-1	1	80	71	91	80,7	10,0	-0,269
6	1	-1	1	113	104	127	114,7	11,6	-2,768
7	-1	1	1	97	68	60	75,0	19,5	0,158
8	1	1	1	130	79	75	94,7	30,7	-1,229
9	-1,682	0	0	59	51	60	56,7	4,9	1,480
10	1,682	0	0	115	102	117	111,3	8,1	-2,524
11	0	-1,682	0	50	43	57	50,0	7,0	1,975
12	0	1,682	0	88	49	43	60,0	24,4	1,290
13	0	0	-1,682	54	50	60	54,7	5,0	1,619
14	0	0	1,682	122	109	119	116,7	6,8	-2,924
15	0	0	0	87	78	89	84,7	5,9	-0,576
16	0	0	0	86	79	85	83,3	3,8	-0,490
17	0	0	0	88	81	87	85,3	3,8	-0,637
18	0	0	0	89	82	87	86,0	3,6	-0,688
19	0	0	0	86	79	88	84,3	4,7	-0,559
20	0	0	0	88	79	90	85,7	5,9	-0,650

Nota: Dimensões em 10⁻² mm; D.P. = Desvio Padrão.

Tabela B.7 – Dados experimentais (Kim e Rhee, 2003)

Fator	Denominação	-1	0	1
x1	Velocidade de alimentação do arame (mm/s)	60	75	90
x2	Velocidade de Soldagem (mm/s)	6	8	10

x1	x2	Y1	Y2	Y3	Y4	Y5	Ym	Ysd
-1	-1	2,7	2,9	3,1	3,1	3,4	3,04	0,2608
0	-1	3	3,2	3,3	3,6	4	3,42	0,3899
1	-1	3,6	3,8	4,2	4,3	4,5	4,08	0,3701
-1	0	2,4	2,6	2,6	2,7	2,8	2,62	0,1483
0	0	2,5	2,7	3	3,5	3,8	3,1	0,5431
1	0	2,9	3,3	3,6	3,7	4,1	3,52	0,4494
-1	1	1,9	1,9	2,2	2,2	2,5	2,14	0,251
0	1	1,8	2,4	2,7	2,9	3,2	2,6	0,5339
1	1	2,6	2,7	3,2	3,5	3,9	3,18	0,545

Tabela B.8 – Dados experimentais da usinagem de um aço 52100 (Paiva et al, 2005)

N	Vc	f	a_p	Vida	Tc	Tt	K_p
1	200	0,05	0,15	16,75	15,39	16,93	22,39
2	240	0,05	0,15	11,5	12,83	14,44	21,74
3	200	0,1	0,15	9,85	7,7	9,12	15,78
4	240	0,1	0,15	8,5	6,41	7,79	14,33
5	200	0,05	0,3	11,5	7,7	9,03	14,58
6	240	0,05	0,3	7,45	6,41	7,92	16,04
7	200	0,1	0,3	8,2	3,85	5,09	10,81
8	240	0,1	0,3	6,25	3,21	4,43	10,05
9	220	0,075	0,225	8,6	6,22	7,66	15,02
10	220	0,075	0,225	6,8	6,22	7,66	15,02
11	187,34	0,075	0,225	10,1	7,3	8,65	14,49
12	252,66	0,075	0,225	7,6	5,42	6,9	15,1
13	220	0,03418	0,225	17,5	13,65	15,16	21
14	220	0,11583	0,225	7,2	4,03	5,17	9,63
15	220	0,075	0,10253	12	13,65	15,37	23,66
16	220	0,075	0,34748	6,7	4,03	5,45	13,34
17	220	0,075	0,225	7,2	6,22	7,66	15,02
18	220	0,075	0,225	9,1	6,22	7,66	15,02

Tabela B9 - Dados de Darwish e Al-Dekhial (1999)

N	FL1	FL2	FL3	A1	A2	A3
1	695	768	750	13,8	12,5	12,7
2	930	1000	878	16,5	17,2	19,2
3	674	754	689	11,0	10,5	10,5
4	816	809	868	16,9	14,2	14,3
5	719	790	698	12,0	13,5	11,2
6	960	969	990	18,6	22,2	22,2
7	702	772	642	11,6	9,1	12,0
8	902	894	960	18,0	15,2	17,5
9	688	808	779	13,0	12,0	10,5
10	1275	1184	1135	22,5	24,0	20,7
11	612	592	564	11,3	11,7	10,5
12	966	945	871	15,0	14,7	15,0
13	749	650	720	11,0	12,0	10,5
14	1082	1060	1018	22,0	21,5	21,5
15	819	870	878	12,8	11,7	14,0
16	940	980	961	23,5	22,7	18,5
17	821	801	807	15,2	17,7	18,7
18	853	929	833	15,1	16,9	16,2
19	1020	1074	1078	16,4	16,0	15,0
20	954	951	978	16,1	16,6	15,7
21	732	672	639	12,0	11,8	12,3
22	1416	1320	1336	26,0	25,3	25,0
23	1040	1140	1046	19,5	22,3	21,3
24	798	792	696	11,5	13,0	12,0
25	840	736	704	17,8	16,5	15,0
26	964	988	968	17,3	19,5	19,5
27	356	380	371	14,0	16,8	16,0
28	790	770	758	17,3	18,0	18,8
29	1088	1052	1000	19,1	20,3	17,3
30	814	696	664	17,5	18,1	16,8

Nota: FL = tensão de ruptura do material; A = área do ponto soldado.

Tabela B.10 – Dados de Olabi et al (2006) e Benyounis et al (2005 a, b)

N	Box Behnken			Respostas Originais						Componentes Principais		
	A	B	C	P	W	W _{HAZ}	P/W	P/W _{HAZ}	HI	PC ₁	PC ₂	IGM
1	-1	-1	0	3,572	2,358	0,561	1,515	6,367	1920	0,87	0,14	2,92
2	1	-1	0	4,322	2,805	0,872	1,541	4,956	2280	3,52	-1,10	8,89
3	-1	1	0	2,705	1,342	0,392	2,016	6,901	823	-2,63	0,60	-7,02
4	1	1	0	3,651	1,852	0,384	1,971	9,508	977	-2,66	-0,82	-9,54
5	-1	0	-1	2,655	2,761	0,453	0,962	5,861	1152	0,43	2,69	5,95
6	1	0	-1	3,888	3,381	0,569	1,150	6,833	1368	1,52	0,72	5,90
7	-1	0	1	3,813	2,087	0,511	1,827	7,462	2100	0,03	-0,86	-1,39
8	1	0	1	4,539	2,572	0,574	1,765	7,908	900	-0,30	-1,25	-3,05
9	0	-1	-1	3,905	3,681	0,625	1,061	6,248	2100	2,98	0,69	10,32
10	0	1	-1	2,367	1,982	0,375	1,400	6,312	900	-1,43	2,24	-0,51
11	0	-1	1	4,987	2,423	0,762	2,058	6,545	1260	1,02	-2,46	-1,10
12	0	1	1	3,824	1,649	0,413	2,319	9,259	1260	-2,61	-1,70	-10,90
13	0	0	0	3,712	2,625	0,531	1,414	6,991	1260	0,28	0,37	1,48
14	0	0	0	3,872	2,282	0,562	1,697	6,890	1260	-0,06	-0,39	-0,84
15	0	0	0	3,586	2,567	0,466	1,397	7,695	1260	-0,31	0,50	-0,09
16	0	0	0	3,505	2,413	0,478	1,453	7,333	1260	-0,34	0,51	-0,17
17	0	0	0	3,626	2,293	0,506	1,581	7,166	1260	-0,35	0,12	-0,85

Tabela B11 –Dados de Tseo *et. al.* (1983) apud Shah *et. al.* (2005).

N	X1	X2	X3	Y1	Y2	Y3	Y4	PC1
1	-1	-1	-1	1,83	29,31	29,5	50,36	-0,7598
2	1	-1	-1	1,73	39,32	19,4	48,16	-0,5792
3	-1	1	-1	1,85	25,16	25,7	50,72	0,10242
4	1	1	-1	1,67	40,18	27,1	46,69	-1,9462
5	-1	-1	1	1,86	29,82	21,4	50,09	0,39002
6	1	-1	1	1,77	32,2	24	50,61	-0,4776
7	-1	1	1	1,88	22,01	19,6	50,36	1,22343
8	1	1	1	1,66	40,02	25,1	50,42	-1,6067
9	-1,682	0	0	1,81	33	24,2	29,31	-1,0131
10	1,682	0	0	1,37	51,59	30,6	50,67	-4,3189
11	0	-1,682	0	1,85	20,35	20,9	48,75	0,98272
12	0	1,682	0	1,92	20,53	18,9	52,7	1,65269
13	0	0	-1,682	1,88	23,85	23	50,19	0,65449
14	0	0	1,682	1,9	20,16	21,2	50,86	1,23431
15	0	0	0	1,89	21,72	18,5	50,84	1,44364
16	0	0	0	1,88	21,21	18,6	50,93	1,42284
17	0	0	0	1,87	21,55	16,8	50,98	1,59496