

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

Luiz Célio Souza Rocha

MÉTODO DA PONDERAÇÃO ENTRÓPICA PARA
OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO ROBUSTA DE
MODELOS DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA

ITAJUBÁ – MG

2017

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

Luiz Célio Souza Rocha

MÉTODO DA PONDERAÇÃO ENTRÓPICA PARA
OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO ROBUSTA DE
MODELOS DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTA

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção como requisito parcial à obtenção do título de *Doutor em Ciências em Engenharia de Produção*.

Área de concentração: Engenharia de Produção

Orientador: Prof. Anderson Paulo de Paiva, Dr.

ITAJUBÁ – MG

2017

DEDICATÓRIA

*Dedico este trabalho a meus pais,
Luiz e Joana, a meus irmãos,
Rafael e Mariana, a minha esposa
Emanuelly e minhas filhas, Maria
Luiza, Ana Júlia (in memorian) e
Ana Clara.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por me dar forças nos momentos de dificuldade.

Agradeço aos professores da UNIFEI, em especial prof. Dr. Anderson Paulo de Paiva, pelo apoio dado e ensinamentos transmitidos.

Agradeço à minha esposa e a todos meus familiares pelo incentivo.

Agradeço a todos os colegas do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção da UNIFEI.

Agradeço ao IFSULDEMINAS - Câmpus Machado por todo apoio e incentivo.

EPÍGRAFE

*“Minha vida é andar por este país
Pra ver se um dia descanso feliz
Guardando as recordações
Das terras onde passei
Andando pelos sertões
E dos amigos que lá deixei...”*

Herve Cordovil e Luiz Gonzaga

RESUMO

Este trabalho propõe o desenvolvimento, aplicação, avaliação e teste de um método de ponderação para problemas de otimização multiobjetivo baseado em critérios de diversificação. Com este método é possível determinar pesos para as funções objetivo que favoreçam o melhor atendimento das metas individuais com concomitante redução dos erros de previsão para o ponto Pareto ótimo escolhido. Para tanto, as funções de entropia, diversidade e a razão entre as métricas de diversificação e uma métrica de erro são modeladas experimentalmente utilizando-se um arranjo de misturas, no qual, cada componente refere-se ao peso atribuído a cada função. Com o intuito de demonstrar a aplicabilidade do método proposto, sete casos, com características distintas, foram analisados. De maneira geral, as métricas foram capazes de reduzir a variância de previsão, ao definir o vetor de pesos para a definição do ponto Pareto ótimo preferido. Porém, alguns pontos devem ser destacados: a utilização de dois pontos centrais no arranjo experimental, aumenta de modo geral a variância de previsão; modelos matemáticos cujos pontos de ótimo se situam fora da região experimental, prejudicam a redução da variância; algumas métricas geraram pesos iguais a zero para alguns problemas, o que não é desejável em problemas multiobjetivos; em todos os casos analisados, as métricas obtidas pela razão entre medidas de diversificação e erro, foram eficientes em gerar vetor de pesos que levaram à redução da variância de previsão; e, em todos os casos analisados, foi possível verificar que a ponderação afeta a variância de previsão. Diante dos resultados apresentados, conclui-se que as métricas obtidas pela razão entre medidas de diversificação e erro, são as mais robustas, pois, apresentaram resultados mais confiáveis, gerando vetores de pesos que levaram a pontos Pareto ótimos com menor variância de previsão em todos os problemas analisados. Além disso, os resultados obtidos deixam claro que os pesos utilizados no processo de otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida.

Palavras-Chave: Otimização multiobjetivo, Fronteira de Pareto, Ponderação, Variância.

ABSTRACT

This work proposes the development, implementation, evaluation and testing of a weighting method to multiobjective optimization problems based on diversification criteria. With this method it is possible to establish weights to objective functions which promote better meet individual goals with a simultaneous decrease of global optimum prediction errors. For this, the functions entropy and diversity, and the ratio diversification/error are experimentally modeled using an arrangement of mixtures, in which each component refers to the weight assigned to each function. In order to demonstrate the applicability of the proposed method, seven cases with different characteristics were analyzed. In general, the metrics were able to reduce the prediction variance by defining the vector of weights for the preferred Pareto optimum point definition. However, some points should be highlighted: the use of two central points in the experimental arrangement increases the prediction variance in general; mathematical models whose optimal points lie outside the experimental region, impair the reduction of variance; some metrics generated weights equal to zero for some problems, which is not desirable in multiobjective problems; In all cases analyzed, the metrics obtained by the ratio between measures of diversification and error, were efficient in generating vector of weights that led to the reduction of the prediction variance; and, in all analyzed cases, it was possible to verify that the weighting affects the prediction variance. In view of the presented results, it is concluded that the metrics obtained by the ratio between measures of diversification and error are the most robust, since they presented more reliable results, generating vectors of weights that led to Pareto optimal points with lower prediction variance in all problems analyzed. In addition, the results obtained make it clear that the weights used in the multiobjective optimization process have an influence on the prediction variance of obtained response.

Keywords: Multiobjective optimization, Pareto Frontier, Weighting, Variance.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Modelo de pesquisa.....	28
Figura 2.1 – Relação entre o espaço de solução e o espaço das funções objetivo	31
Figura 2.2 – Tipos de eficiência	32
Figura 2.3 – Exemplo de Fronteira de Pareto.....	39
Figura 2.4 – Método de somas ponderadas em problemas convexos e não-convexos.....	48
Figura 2.5 – Descrição Gráfica do Método NBI	51
Figura 2.6 – Entropia no caso de duas possibilidades	62
Figura 2.7 – Modelo geral de um processo	66
Figura 2.8 – Arranjo experimental CCD para dois e três fatores	76
Figura 2.9 – Gráfico de dispersão da variância	82
Figura 2.10 – Região experimental para os experimentos de misturas	83
Figura 2.11 – Arranjos de misturas: a) <i>simplex lattice</i> ; b) <i>simplex</i> centroide	84
Figura 3.1 – Processo de identificação de pesos ótimos	94
Figura 4.1 – Gráficos de efeito principal - Caso 1.....	97
Figura 4.2 – Superfícies de resposta - Caso 1.....	98
Figura 4.3 – Fronteira de Pareto - Caso 1.....	99
Figura 4.4 – Espaço de solução - Caso 1	100
Figura 4.5 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 1	104
Figura 4.6 – Gráficos de efeito principal - Caso 2.....	106
Figura 4.7 – Superfícies de resposta - Caso 2.....	107
Figura 4.8 – Fronteira de Pareto - Caso 2.....	109
Figura 4.9 – Espaço de solução - Caso 2.....	109
Figura 4.10 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 2.....	113
Figura 4.11 – Gráficos de efeito principal - Caso 3.....	115
Figura 4.12 – Superfícies de resposta - Caso 3.....	116
Figura 4.13 – Fronteira de Pareto - Caso 3.....	117
Figura 4.14 – Espaço de solução - Caso 3	118
Figura 4.15 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 3.....	121
Figura 4.16 – Gráficos de efeito principal - Caso 4.....	123
Figura 4.17 – Superfícies de resposta - Caso 4.....	124
Figura 4.18 – Fronteira de Pareto sob diferentes perspectivas - Caso 4.....	126

Figura 4.19 – Espaço de solução - Caso 4.....	127
Figura 4.20 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para $S(x)$ - Caso 4	128
Figura 4.21 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DC - Caso 4	129
Figura 4.22 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DO - Caso 4.....	129
Figura 4.23 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para MAPE - Caso 4.....	130
Figura 4.24 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para $S(x)$ /MAPE - Caso 4.....	130
Figura 4.25 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DC/MAPE - Caso 4	131
Figura 4.26 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DO/MAPE - Caso 4.....	131
Figura 4.27 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para UPV - Caso 4.....	132
Figura 4.28 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 4.....	133
Figura 4.29 – Gráficos de efeito principal - Caso 5.....	135
Figura 4.30 – Superfícies de resposta - Caso 5.....	136
Figura 4.31 – Fronteira de Pareto sob diferentes perspectivas - Caso 5.....	138
Figura 4.32 – Espaço de solução - Caso 5.....	139
Figura 4.33 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para $S(x)$ - Caso 5	140
Figura 4.34 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DC - Caso 5.....	141
Figura 4.35 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DO - Caso 5	141
Figura 4.36 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para MAPE - Caso 5.....	142
Figura 4.37 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para $S(x)$ /MAPE - Caso 5.....	142
Figura 4.38 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DC/MAPE - Caso 5	143
Figura 4.39 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DO/MAPE - Caso 5.....	143
Figura 4.40 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para UPV - Caso 5	144
Figura 4.41 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 5.....	145
Figura 4.42 – Gráficos de efeito principal - Caso 6.....	150
Figura 4.43 – Superfícies de resposta (para $d = 0$) - Caso 6.....	151
Figura 4.44 – Fronteira de Pareto sob diferentes perspectivas - Caso 6.....	153
Figura 4.45 – Espaço de solução - Caso 6.....	154
Figura 4.46 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para $S(x)$ - Caso 6	155
Figura 4.47 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DC - Caso 6.....	156
Figura 4.48 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DO - Caso 6.	156
Figura 4.49 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para MAPE - Caso 6.....	157
Figura 4.50 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para $S(x)$ /MAPE - Caso 6.....	157
Figura 4.51 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DC/MAPE - Caso 6	158
Figura 4.52 – Superfície de resposta e <i>Contour plot</i> para DO/MAPE - Caso 6	158

Figura 4.53 – Superfície de resposta e Contour plot para UPV - Caso 6	159
Figura 4.54 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 6.....	160
Figura 4.55 – Gráficos de efeito principal - Caso 7.....	165
Figura 4.56 – Superfícies de resposta (para $x_3 = 15$, $x_4 = 5$) - Caso 7	166
Figura 4.57 – Fronteira de Pareto sob diferentes perspectivas - Caso 7.....	168
Figura 4.58 – Superfície de resposta e Contour plot para $S(x)$ - Caso 7	170
Figura 4.59 – Superfície de resposta e Contour plot para DC - Caso 7.....	170
Figura 4.60 – Superfície de resposta e Contour plot para DO - Caso 7	171
Figura 4.61 – Superfície de resposta e Contour plot para MAPE - Caso 7	171
Figura 4.62 – Superfície de resposta e Contour plot para $S(x)/MAPE$ - Caso 7.....	172
Figura 4.63 – Superfície de resposta e Contour plot para $DC/MAPE$ - Caso 7	172
Figura 4.64 – Superfície de resposta e Contour plot para $DO/MAPE$ - Caso 7	173
Figura 4.65 – Superfície de resposta e Contour plot para UPV - Caso 7	173
Figura 4.66 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 7.....	175

LISTA DE QUADROS E TABELAS

Quadro 2.1 – Revisão dos métodos de ponderação utilizados na literatura (Parte I)	58
Quadro 2.1 – Revisão dos métodos de ponderação utilizados na literatura (Parte II).....	59
Tabela 4.1 – CCD simulado para duas respostas - Caso 1	96
Tabela 4.2 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 1	96
Tabela 4.3 – Matriz payoff para as funções objetivo - Caso 1	98
Tabela 4.4 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 1	99
Tabela 4.5 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 1	101
Tabela 4.6 – Resumo dos resultados - Caso 1	104
Tabela 4.7 – CCD simulado para duas respostas - Caso 2	105
Tabela 4.8 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 2.....	106
Tabela 4.9 – Matriz payoff para as funções objetivo - Caso 2	108
Tabela 4.10 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 2	108
Tabela 4.11 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 2.....	110
Tabela 4.12 – Resumo dos resultados - Caso 2	112
Tabela 4.13 – CCD simulado para duas respostas - Caso 3	114
Tabela 4.14 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 3.....	114
Tabela 4.15 – Matriz payoff para as funções objetivo - Caso 3	116
Tabela 4.16 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 3	117
Tabela 4.17 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 3.....	119
Tabela 4.18 – Resumo dos resultados - Caso 3	120
Tabela 4.19 – CCD simulado para três respostas - Caso 4.....	122
Tabela 4.20 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 4.....	122
Tabela 4.21 – Matriz payoff para as funções objetivo - Caso 4.....	124
Tabela 4.22 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 4 (Parte I)	125
Tabela 4.22 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 4 (Parte II).....	126
Tabela 4.23 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 4.....	128
Tabela 4.24 – Resumo dos resultados - Caso 4	132
Tabela 4.25 – CCD simulado para três respostas - Caso 5.....	134
Tabela 4.26 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 5.....	134
Tabela 4.27 – Matriz payoff para as funções objetivo - Caso 5	136
Tabela 4.28 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 5 (Parte I)	137

Tabela 4.28 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 5 (Parte II).....	138
Tabela 4.29 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 5.....	140
Tabela 4.30 – Resumo dos resultados - Caso 5.....	145
Tabela 4.31 – Fatores e respectivos níveis - Caso 6.....	148
Tabela 4.32 – CCD para MRR, Ra e Fc - Caso 6.....	148
Tabela 4.33 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 6.....	149
Tabela 4.34 – Matriz payoff para as funções objetivo - Caso 6.....	151
Tabela 4.35 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 6 (Parte I).....	152
Tabela 4.35 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 6 (Parte II).....	153
Tabela 4.36 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 6.....	155
Tabela 4.37 – Resumo dos resultados - Caso 6.....	159
Tabela 4.38 – Intervalos de confiança - Caso 6.....	161
Tabela 4.39 – CCD para y_1 , y_2 e y_3 - Caso 7.....	163
Tabela 4.40 – Fatores e respectivos níveis - Caso 7.....	164
Tabela 4.41 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 7.....	164
Tabela 4.42 – Matriz payoff para as funções objetivo - Caso 7.....	167
Tabela 4.43 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 7 (Parte I).....	167
Tabela 4.43 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 7 (Parte II).....	168
Tabela 4.44 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 7.....	169
Tabela 4.45 – Resumo dos resultados - Caso 7.....	174
Tabela 4.46 – Intervalos de confiança - Caso 7.....	176
Tabela 4.47 – Análise comparativa.....	177

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

AHP	<i>Analytic Hierarchy Process</i> - Processo Analítico Hierárquico
AISI	<i>American Iron and Steel Institute</i>
ANOVA	<i>Analysis of Variance</i> - Análise de Variância
ANP	<i>Analytic Network Process</i> - Processo Analítico em Rede
CCD	<i>Central Composite Design</i> - Arranjo Composto Central
CHIM	<i>Convex Hull of Individual Minima</i> - Envoltória Convexa dos Mínimos Individuais
CV	Coefficiente de Variação
d	profundidade de corte
DOE	<i>Design of Experiments</i> - Projeto e Análise de Experimentos
EPG	Erro Percentual Global
f	avanço
F_c	Força de corte
GRG	Gradiente Reduzido Generalizado
GRIP	<i>Generalized Regression with Intensities of Preference</i>
HRC	Dureza Rockwell C
ISO	<i>International Organization for Standardization</i>
KKT	Karush-Kuhn-Tucker
LINMAP	<i>Linear Programming Technique for Multidimensional Analysis of Preference</i>
MAPE	<i>Mean Absolute Percent Error</i>
MRR	<i>Material Removal Rate</i> - Taxa de Remoção de Material
MS_E	Média Quadrática do Resíduo
MS_R	Média Quadrática da Regressão
NBI	<i>Normal Boundary Intersection</i> - Método de Interseção Normal à Fronteira
OLS	<i>Ordinary Least Squares</i> - Mínimos Quadrados Ordinários
PCBN	<i>Polycrystalline Cubic Boron Nitride</i> - Nitreto Cúbico de Boro Policristalino
R_a	Rugosidade
RSM	<i>Response Surface Methodology</i> - Metodologia de Superfície de Resposta
SPV	Variância de Previsão Escalonada
SS_E	Soma dos Quadrados do Resíduo
SS_R	Soma dos Quadrados da Regressão

TOPSIS	<i>Technique for Order Preference by Similarity to an Ideal Solution</i>
UPV	Variância de Previsão Não-Escalonada
V_c	Velocidade de corte
VDG	Gráfico de Dispersão da Variância

LISTA DE SÍMBOLOS

x	Variável independente
x^*	Ponto de ótimo
i	Índice
j	Índice
$f(.)$	Função objetivo, resposta de interesse
$h(.)$	Restrição de igualdade
$g(.)$	Restrição de desigualdade
X	Variável aleatória
Y	Variável aleatória
\sum	Somatório
P	Probabilidade
μ	Valor esperado, média populacional, multiplicador de Lagrange
E	Valor esperado
σ^2	Variância
V	Variância
σ	Desvio-padrão
a	Constante
b	Constante, nível de aspiração da função objetivo
\int	Integral
π	Pi
$N(\mu, \sigma^2)$	Distribuição normal com média μ e variância σ^2
Z	Variável aleatória normal padrão
$\Phi(.)$	Função de probabilidade acumulada
n	Tamanho de uma amostra aleatória, número de experimentos
\bar{X}	Média amostral
L	Variável aleatória, limite inferior
U	Variável aleatória, limite superior, índice de uniformidade de Shannon
α	Nível de significância, distância axial, escalar, grau de importância da disparidade

T	Variável aleatória com distribuição t , valor alvo da função objetivo
S^2	Variância amostral
$\Gamma(\cdot)$	Função gama
e	Algarismo neperiano
k	Constante, número de variáveis regressoras, número de fatores
u	Constante, graus de liberdade no numerador
χ^2	Distribuição qui-quadrado
F	Variável aleatória, número de pontos fatoriais
v	Constante, graus de liberdade no denominador
H_0	Hipótese nula
H_1	Hipótese alternativa
β	Erro tipo II, grau de importância do balanço, coeficiente
Λ	Vetor de funções objetivo
Ω	Conjunto de soluções viáveis do problema
\mathbb{R}^n	Conjunto de vetores reais n -dimensional
δ	Constante, variável de desvio
$N(x^*, \delta)$	Bola aberta com centro em x^* e raio δ
\mathbf{x}	vetor de variáveis de decisão
\mathbf{d}	Constante, vetor não nulo
ε	Erro aleatório
∇	Gradiente
∇^2	Hessiana
∂	Derivadas parciais
$\ \mathbf{d}\ $	Norma euclidiana do vetor \mathbf{d}
λ	Autovalor, multiplicador de Lagrange
\hat{y}	Resposta estimada
$\hat{\beta}$	Coefficiente estimado
\mathbf{b}	Vetor dos coeficientes
\mathbf{B}	Matriz dos coeficientes ligados aos termos quadráticos
\mathbf{x}_s	Ponto estacionário
\mathbf{I}	Matriz identidade
$L(\cdot)$	Função de Lagrange, função de mínimos quadrados

ω	Vetor de multiplicadores de Lagrange em otimização multiobjetivo
\forall	Para todo e qualquer valor de
w	Pesos associados às funções objetivo
Φ	Matriz <i>payoff</i>
\bar{f}	Função objetivo normalizada
$\bar{\Phi}$	Matriz <i>payoff</i> normalizada
\hat{n}	Unidade de direção normal
$\bar{F}(\mathbf{x})$	Vetor contendo os valores individuais normalizados dos objetivos
D	Distância, disparidade
\bar{h}	Vetor de igualdades ampliado
ξ	Métrica de ponderação baseada em entropia
\ln	Logaritmo natural
y^*	Valor das respostas Pareto ótimas
m	Número de objetivos, grau <i>lattice</i> do arranjo de misturas
$S(\cdot)$	Função entropia
Δ	Diversidade
d_{ij}	Disparidade entre os elementos i e j
ρ	Correlação linear de Pearson
z	Fatores incontroláveis
Var	Variância
H_i	Valor para a variável de decisão relativo ao nível +1
L_o	Valor para a variável de decisão relativo ao nível -1
β	Vetor dos coeficientes ligados aos termos lineares
\mathbf{X}	Matriz experimental
\mathbf{y}	Vetor de valores para uma determinada função
ε	Vetor de erros aleatórios
$\hat{\beta}$	Vetor dos coeficientes estimados
$\hat{\mathbf{y}}$	Vetor de valores estimados para uma determinada função
se	Erro padrão
$\hat{\sigma}^2$	Variância estimada
\mathbf{H}	Matriz chapéu

C_{jj}	jj -ésimo elemento da matriz $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$
R^2	Coefficiente de determinação
R_{adj}^2	Coefficiente de determinação ajustado
cp	Número de pontos centrais
ζ	Simetria
κ	Curtose
Θ	Momento central
\mathbf{M}	Matriz momento
N	Número total de experimentos
\mathbf{x}_b	Variáveis básicas
\mathbf{x}_n	Variáveis não-básicas
$\mathbf{J}(\mathbf{x})$	Matriz Jacobiana
Δ	Correção para um valor

SUMÁRIO

1 – INTRODUÇÃO	21
1.1 – DESCRIÇÃO DO PROBLEMA	21
1.2 – JUSTIFICATIVA	24
1.3 –OBJETIVO DA PESQUISA	26
1.4 – CONTRIBUIÇÕES DA TESE.....	26
1.5 – LIMITAÇÕES DA PESQUISA	26
1.6 – METODOLOGIA DA PESQUISA.....	27
1.7 – ESTRUTURA DO TRABALHO	28
2 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	30
2.1 – OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO	30
2.1.1 – Método da Restrição ϵ (ϵ - <i>constraint method</i>).....	42
2.1.2 – Método da Programação por Objetivos (<i>Goal Programming</i>).....	42
2.1.3 – Método do Critério Global	44
2.1.4 – Método de Somas Ponderadas.....	46
2.1.5 – Método da Interseção Normal à Fronteira (<i>Normal Boundary Intersection</i>)	48
2.2 – MÉTODOS DE PONDERAÇÃO APLICADOS À OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO	53
2.3 – ENTROPIA	60
2.4 – DIVERSIDADE	62
2.5 – MÉTODOS ESTATÍSTICOS PARA MODELAGEM E ANÁLISE DE PROCESSOS.....	66
2.5.1 – Projeto e Análise de Experimentos.....	66
2.5.1.1 – Metodologia de Superfície de Resposta	69
2.5.1.2 – Experimentos por Arranjos de Misturas.....	83
2.6 – ALGORITMO GRADIENTE REDUZIDO GENERALIZADO.....	86
3 – MÉTODO DA PONDERAÇÃO ENTRÓPICA.....	90
4 – APLICAÇÃO DO MÉTODO.....	95
4.1 – CASO 1	95
4.2 – CASO 2	105
4.3 – CASO 3	113
4.4 – CASO 4	121

4.5 – CASO 5	133
4.6 – CASO 6	146
4.7 – CASO 7	162
4.8 – ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE OS CASOS.....	176
5 –CONCLUSÕES.....	179
REFERÊNCIAS	181
ANEXO – ALGUNS CONCEITOS EM ESTATÍSTICA.....	196
A.1 – Variáveis Aleatórias Discretas e Distribuições de Probabilidades	197
A.2 – Variáveis Aleatórias Contínuas e Distribuições de Probabilidades.....	198
A.2.1 – Distribuição Normal	200
A.2.2 – Distribuição t	203
A.2.3 – Distribuição χ^2	205
A.2.4 – Distribuição F	206
A.3 – Testes de hipóteses	207
A.3.1 – Testes de Hipóteses para a Média com Variância Desconhecida.....	208
A.3.2 – Testes de Hipóteses para a Razão de Duas Variâncias.....	209
APÊNDICE – PRODUÇÃO BIBLIOGRÁFICA	211

1 – INTRODUÇÃO

1.1 – DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

Nos dias atuais, onde a competição entre as empresas é constante e muito acirrada, há uma grande cobrança aos gestores por redução de custos e melhoria de parâmetros de qualidade dos produtos e processos.

Neste contexto, qualidade é definida como a adequação de um produto ao seu uso ou à sua finalidade durante um determinado tempo de vida, ao nível mais econômico possível, sendo, portanto, a satisfação do cliente derivada da qualidade do produto (VIJAYARAM *et al.*, 2006). Um produto tem melhor qualidade a partir do momento em que ele é mais adequado ao usuário final.

Kano e Nakagawa (2008) defendem que para alcançar o melhoramento da qualidade do produto, é necessário um sistema tendo, ao menos, as seguintes funções: 1. prever a qualidade do produto pelas condições de operação; 2. detectar falhas e mau funcionamento para prevenir operação indesejável; e 3. determinar melhores condições de operação, visando melhorar a qualidade do produto. A primeira função é realizada pelo desenvolvimento de um algoritmo, sendo este um modelo matemático que relaciona as condições de operação à qualidade do produto. A segunda função é realizada pelo controle estatístico multivariado do processo. A terceira função é realizada pela formulação e resolução de problemas de otimização.

Em diversas áreas, tais como engenharia, computação, economia e comunicação, existe um grande número de complexos problemas de otimização (CHEN *et al.*, 2015) e, por isso, as técnicas de otimização têm evoluído muito nos últimos anos, encontrando ampla aplicação em vários tipos de indústria. Graças à nova geração de poderosos computadores, essas técnicas são capazes de resolver problemas cada vez maiores e mais complexos.

Otimização é o ato de obter o melhor resultado sob dadas circunstâncias. Neste contexto, o objetivo principal da tomada de decisões em processos industriais é minimizar o esforço requerido ao desenvolvimento de determinada tarefa ou maximizar o benefício desejado. “Desde que o esforço requerido ou o benefício desejado em qualquer situação prática possa ser expresso como uma função de certas variáveis de decisão, otimização pode ser definida como o processo de encontrar as condições que dão o valor máximo ou mínimo de uma função” (RAO, 2009, p.1). Esta função é denominada função objetivo.

Entretanto, na maioria dos processos industriais, as relações entre as respostas e as variáveis de decisão são desconhecidas, ou seja, as funções objetivo em problemas reais não

são conhecidas antecipadamente. Então, busca-se encontrar uma aproximação adequada para representar as respostas de interesse como função destas variáveis.

Visando obter essas informações, faz-se necessário projetar e executar experimentos, coletar os dados e analisá-los. Em um experimento planejado são feitas variações propositalmente nas variáveis controláveis do processo, observando os dados de saída resultantes com o intuito de fazer inferências acerca de quais variáveis são responsáveis pelas mudanças observadas. Esses dados são analisados por métodos estatísticos, resultando em conclusões válidas e objetivas.

Segundo Montgomery (2009), quando se tem o objetivo de otimização de determinado problema, a metodologia de superfície de resposta (*Response Surface Methodology* - RSM) deve ser a metodologia escolhida para a definição do arranjo experimental. A RSM é uma coleção de ferramentas matemáticas e estatísticas, utilizada para a modelagem e análise de problemas em que as respostas de interesse são influenciadas por diversas variáveis. Como um dos objetivos da RSM consiste na otimização das respostas, recomenda-se, sempre que possível, representá-las por meio dos modelos de segunda ordem, já que a curvatura apresentada por estes define a localização de um ponto de ótimo.

Apesar de ser considerado uma aproximação adequada para as respostas de interesse, o modelo matemático obtido não consegue representar completamente o processo real. Os valores gerados pelo modelo estimado sempre apresentarão um erro em relação aos valores reais. A magnitude desses erros é mensurada pela variância de previsão do modelo. Assim, a qualidade da previsão de uma resposta depende, em larga extensão, do tamanho da correspondente variância da previsão. Pequenos valores da variância de previsão são desejáveis para previsões confiáveis (KHURI *et al.*, 1996). Desse modo, segundo Myers *et al.* (2009), é importante para um arranjo, ou design, experimental de segunda ordem possuir uma distribuição razoavelmente estável da variância de previsão por toda a região do arranjo experimental, uma vez que o analista não sabe desde o início onde no espaço experimental será necessário fazer previsões ou onde o ótimo se situa.

Por enquanto, tem sido considerada a otimização e previsão de apenas uma resposta de determinado problema que está sendo analisado. Porém, em situações práticas, normalmente existe mais de uma função objetivo a ser analisada de maneira sistemática e simultânea para a resolução de determinado problema, levando à otimização multiobjetivo (HUANG *et al.*, 2006; ADEYEMO e OLOFINTOYE, 2014).

Analisando-se os processos de manufatura constata-se que os diversos parâmetros passíveis de controle, como qualidade, custo e produtividade, conduzem a modelos matemáticos multiobjetivos no intuito de garantir sua otimização.

Em problemas multiobjetivos, é pouco provável que todas as funções sejam minimizadas simultaneamente por uma solução ótima x^* . Em geral, os múltiplos objetivos têm conflitos de interesse. O que se tornou de grande relevância para esses tipos de problemas é o conceito de solução Pareto ótima, também chamada de solução de compromisso. Uma solução viável x^* é Pareto ótima se nenhuma outra solução viável z existe tal que $f_i(z) \leq f_i(x^*)$, $i = 1, 2, \dots, m$, com $f_j(z) < f_j(x^*)$ em, ao menos, um objetivo j . Em outras palavras, um vetor x^* é dito ser Pareto ótimo se nenhuma outra solução z pode ser encontrada que cause uma redução em uma função objetivo, sem causar um aumento simultâneo, em ao menos, um dos outros objetivos. Pareto otimalidade é um conceito equivalente ao de eficiência, não-inferioridade e não-dominância.

Soluções Pareto ótimo ocorrem por causa da natureza conflitante dos objetivos, onde o valor de qualquer função objetivo não pode ser melhorado sem impactar, ao menos, um dos outros. Nesse contexto, um *trade-off* representa abrir mão de um objetivo para melhorar outro (ESKELINEN e MIETTINEN, 2011).

O propósito dos métodos de otimização multiobjetivo é oferecer suporte e caminhos para encontrar a melhor solução de compromisso, na qual o decisor e sua informação de preferência têm papel importante, uma vez que este é tipicamente responsável pela solução final do problema (ESKELINEN e MIETTINEN, 2011). Com o intuito de definir a importância relativa de cada função objetivo, o decisor deve atribuir-lhes diferentes pesos (ZELENY, 1974). Assim, surge a seguinte questão de pesquisa: como auxiliar o tomador de decisão na escolha da melhor ponderação ao se trabalhar com otimização multiobjetivo, visando manter a variância de previsão das respostas para o ponto escolhido tão baixa quanto possível?

Na tentativa de responder a esta questão, diversos critérios podem ser avaliados, como, por exemplo, critérios de diversidade. Dentre os métodos utilizados para a diversificação, a métrica de entropia, proposta por Shannon (1948), é uma das mais importantes. Essencialmente, a entropia mede o grau de incerteza associada com a distribuição de probabilidade, de modo que, quanto mais itens e quanto mais similar for a probabilidade de ocorrência desses itens, maior é a entropia. No contexto da otimização multiobjetivo, o uso da entropia visa distribuir os pesos o mais uniformemente possível entre as funções objetivo que

estão sendo analisadas. Uma vez que a qualidade da previsão de uma resposta depende do tamanho da variância da previsão, a maneira com que a diversificação afeta seu comportamento passa a ser relevante para a obtenção de previsões confiáveis.

1.2 – JUSTIFICATIVA

Em processos industriais onde se deseja a otimização conjunta de múltiplas características, o problema pode ser definido por meio da seguinte formulação:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } \{f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x)\} \\ & \text{Sujeito a: } h_i(x) = 0, i = 1, 2, \dots, l \\ & \quad \quad \quad g_j(x) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \tag{1.1}$$

onde: $f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x)$ são as funções objetivo a serem otimizadas; $h_i(x)$ representam as l restrições de igualdade; e $g_j(x)$ representam as m restrições de desigualdade.

Ao tentar resolver um problema de otimização multiobjetivo se está interessado em encontrar soluções eficientes. Entretanto, geralmente, existem muitas soluções eficientes (um número infinito), formando o conjunto eficiente ou conjunto Pareto ótimo (MIETTINEN, 1999). Segundo Mela *et al.* (2012), denomina-se otimização multiobjetivo o próprio processo de gerar alternativas Pareto ótimas.

Matematicamente, cada ponto Pareto ótimo é uma solução igualmente aceitável para um problema de otimização multiobjetivo (MIETTINEN, 1999), sendo geralmente desejável obter um ponto como solução final. Entretanto, devido à natureza multidisciplinar dos problemas relacionados aos processos industriais que estão intimamente relacionados a vários critérios múltiplos não comensuráveis, determinar qual solução é a melhor escolha para ser implementada pode ser uma tarefa difícil. Segundo Mela *et al.* (2012), denomina-se Tomada de Decisão Multicritério (*Multiple Criteria Decision Making*) o processo de escolher uma solução simples preferida entre todas as alternativas computadas.

Uma vez que dificilmente se conhece o grau de importância a ser atribuído a cada objetivo (SZELAG *et al.*, 2014), a definição dos pesos para cada função acaba sendo feita de maneira subjetiva, influenciada pelas preferências do decisor. Porém, Zeleny (1974), ao propor o seu método de ponderação baseado em entropia para otimização multiobjetivo linear, discute alguns pontos contra essa prática, dentre os quais citam-se: 1. a capacidade humana para chegar a uma avaliação global por intermédio da ponderação e combinando diversos atributos não é muito boa, sendo tal processo de atribuição de pesos instável, subótimo e

frequentemente arbitrário; 2. o número total de todos os possíveis (e identificáveis) critérios ou atributos pode ser muito grande, não sendo plausível esperar que qualquer ser humano possa atribuir pesos a centenas de atributos com alguma confiabilidade; 3. alterações de pesos refletem o fato de que eles são dependentes de um problema particular, ou seja, qualquer particular estrutura de ponderação deve ser aprendida, sendo mais o resultado da análise do que seu *input*. De fato, a obtenção de informações de preferência direta do analista pode ser contraproducente na tomada de decisões no mundo real por causa do alto esforço cognitivo exigido (FIGUEIRA *et al.*, 2009).

Com o intuito de minimizar o esforço na tomada de decisões, muitos trabalhos, dos quais o próprio trabalho de Zeleny (1974) é um exemplo, buscaram a definição de métricas objetivas de ponderação que são aplicáveis à otimização multiobjetivo. Entretanto, ao se trabalhar com otimização multiobjetivo, além da busca pelo ponto que caracteriza a solução final para o problema, o quanto esta solução é confiável surge como ponto central. Portanto, a variância da previsão é uma preocupação importante (ANDERSON-COOK *et al.*, 2009).

De fato, segundo Myers *et al.* (2009), a variância de previsão é o tópico de maior importância para o caso dos arranjos experimentais de segunda ordem, sendo que muitas das propriedades dos designs experimentais são conectados à maneira pela qual os pontos são distribuídos na região de experimentação. Especificamente, essa distribuição de pontos no espaço, determinada pela escolha do arranjo experimental, tem um profundo efeito na distribuição da variância de previsão.

Muitos trabalhos se dedicaram ao tema de seleção do design experimental, como por exemplo, Kiefer (1959), Kiefer e Wolfowitz (1960), Box e Draper (1987), Giovannitti-Jensen e Myers (1989), Myers *et al.* (1992), Borkowski (1995), Khuri *et al.* (1996), Hamada *et al.* (2001), Goldfarb *et al.* (2004), Anderson-Cook *et al.* (2009), entre outros. Esses trabalhos discutem os critérios de otimalidade do design experimental, sendo que a maioria destes são baseados nas características da variância.

Porém, a discussão a respeito de como a ponderação de funções, em otimização multiobjetivo, afeta a variância da previsão não foi realizada, deixando-se claro que contribuições teóricas podem ser dadas ao explorar este tema. Assim, uma vez que a qualidade da previsão depende de sua variância, a maneira com que a ponderação afeta o comportamento da variância de previsão passa a ser relevante para a obtenção de previsões confiáveis.

1.3 – OBJETIVO DA PESQUISA

O objetivo principal desta pesquisa pode ser definido como:

Analisar como a ponderação afeta a variância de previsão ao propor um método, baseado em critérios de diversificação, para a identificação dos pesos ótimos em problemas de otimização multiobjetivo envolvendo modelos de superfície de resposta.

Para que o objetivo geral seja alcançado, propõem-se os seguintes objetivos específicos:

- Modelar, a partir da metodologia de superfície de resposta, as características dos processos nos casos analisados;
- Gerar a fronteira Pareto ótima, a partir dos modelos obtidos com a metodologia de superfície de resposta;
- Utilizar diferentes parâmetros para a identificação do vetor de pesos ótimos a serem utilizados na otimização dos processos nos casos em análise;
- Investigar o comportamento da variância de previsão frente aos diferentes parâmetros de ponderação para otimização multiobjetivo;
- Definir uma rotina de cálculo para o processo de otimização.

1.4 – CONTRIBUIÇÕES DA TESE

Espera-se que a tese possa contribuir para a discussão acerca do método de ponderação em otimização multiobjetivo, assunto este disposto dentro do escopo da Tomada de Decisão Multicritério.

O ineditismo da tese será alcançado ao analisar o comportamento da variância de previsão durante o processo de otimização multiobjetivo e sua relação com a ponderação, assunto este ainda não abordado na literatura.

1.5 – LIMITAÇÕES DA PESQUISA

O presente trabalho apresenta algumas limitações, dentre as quais:

- Somente a metodologia de superfície de resposta é utilizada;
- Utiliza-se somente um tipo de design para a metodologia de superfície de resposta, o Arranjo Composto Central (*Central Composite Design* - CCD). Essa escolha se deve

ao fato de que este é o design mais utilizado para coleta de dados em problemas de superfície de resposta, além de permitir uma razoável quantidade de informação para testar o erro sem envolver um grande número de experimentos;

- Utilizam-se somente funções quadráticas para a modelagem das respostas de interesse, principalmente por sua parcimônia;
- Consideram-se somente dados contínuos para análise;
- Utiliza-se, para a identificação dos pontos de ótimo, o Gradiente Reduzido Generalizado, ficando a localização desses pontos condicionada ao desempenho do algoritmo;
- Utiliza-se como método de otimização multiobjetivo o Método de Interseção Normal à Fronteira (*Normal Boundary Intersection* - NBI), ficando os resultados condicionados ao desempenho deste método. Essa escolha se deve às características de robustez do NBI, mesmo ao se trabalhar com problemas não-convexos;
- Utilizam-se somente duas métricas para a diversificação dos pesos, a entropia (SHANNON, 1948) e a diversidade (STIRLING, 2007).

1.6 – METODOLOGIA DA PESQUISA

A presente pesquisa caracteriza-se por ser de natureza aplicada (BICKMAN e ROG, 2009), com objetivo normativo, e abordagem quantitativa (BERTRAND e FRANSOO, 2002), utilizando como método a pesquisa experimental.

Segundo Bickman e Rog (2009), a pesquisa aplicada busca aumentar o entendimento de um problema com o intuito de contribuir para sua solução. Já Bertrand e Fransoo (2002) definem pesquisa quantitativa como sendo uma pesquisa em que modelos de relações causais entre variáveis de controle e variáveis de desempenho são desenvolvidos, analisados ou testados. A pesquisa quantitativa, segundo Bertrand e Fransoo (2002), pode ser classificada em pesquisa axiomática e pesquisa empírica, sendo a pesquisa empírica primariamente dirigida por resultados e medidas empíricas, resultados estes aplicáveis em processos reais.

Ainda, segundo Bertrand e Fransoo (2002), as pesquisas axiomáticas e empíricas podem ser classificadas em: 1. Axiomáticas normativas: preocupadas em desenvolver políticas, estratégias e ações para melhorar os resultados disponíveis na literatura existente. Este tipo de pesquisa considera como ponto central a solução do modelo; 2. Axiomáticas descritivas: estão primeiramente interessadas em analisar o modelo que conduz o entendimento e explicação das características do mesmo. Nele, o processo de modelagem é o

ponto central; 3. Empíricas descritivas: os pesquisadores estão interessados em criar um modelo que adequadamente descreve relações causais que podem existir na realidade, conduzindo ao entendimento dos processos atuais, ou seja, pesquisadores seguem um ciclo de “conceitualização – modelagem – validação”; 4. Empíricas normativas: existe o interesse em desenvolver políticas, estratégias ou ações para melhorar um sistema real corrente. Pode ser considerada como o tipo mais completo de pesquisa, a qual é conduzida por meio de um ciclo completo de “conceitualização – modelagem – solução do modelo – implementação”, como mostrado na Figura 1.1. Segundo esta classificação, a presente pesquisa caracteriza-se por ser uma pesquisa quantitativa empírica normativa.

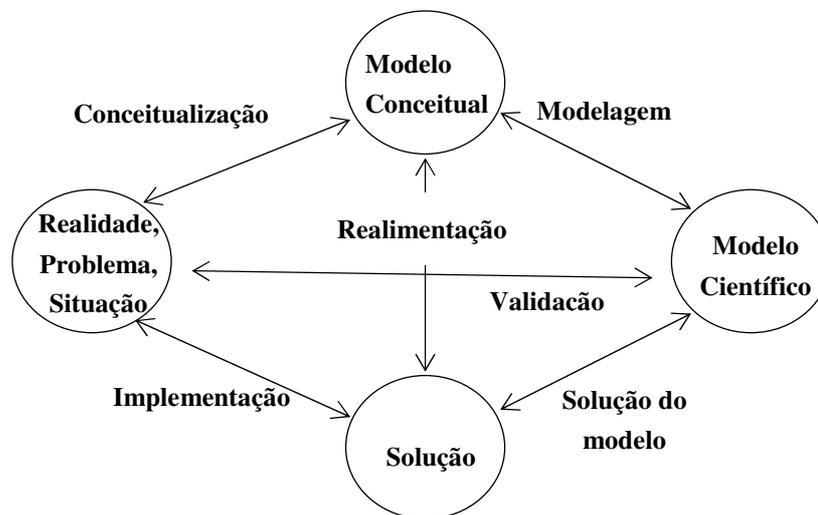


Figura 1.1 – Modelo de pesquisa.
Fonte: Mitroff *et al.* (1974).

1.7 – ESTRUTURA DO TRABALHO

Além deste capítulo introdutório, que teve como objetivo descrever o problema, justificar o trabalho, descrever a metodologia e apresentar o objetivo da pesquisa, a tese será elaborada em outros 4 capítulos, organizados como se segue:

- O Capítulo 2 apresenta a fundamentação teórica que dará subsídios para a realização da pesquisa e discussão de seus resultados. Nele serão abordados os principais métodos de otimização multiobjetivo, os métodos de ponderação aplicados à otimização multiobjetivo e os métodos estatísticos para a análise de processos. Além disso, o arcabouço teórico referente aos conceitos de entropia e diversidade serão trabalhados e o algoritmo de otimização empregado será discutido.
- O Capítulo 3 apresenta a proposta da tese.

- O Capítulo 4 contempla a aplicação do método proposto, onde serão apresentados e discutidos os resultados.
- Por fim, no Capítulo 5, será apresentada a conclusão do presente trabalho, suas contribuições e sugestões para trabalhos futuros.

2 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo apresenta a base teórica necessária para o desenvolvimento da pesquisa, para a geração e discussão de seus resultados. Para tanto apresentam-se, inicialmente, conceitos a respeito do processo de otimização multiobjetivo, com destaque para os métodos não-lineares. Em seguida, os métodos de ponderação aplicados à otimização multiobjetivo existentes na literatura serão discutidos, com o intuito de se fazer uma análise crítica e poder situar a proposta da tese frente à literatura. Além disso, os conceitos de entropia e de diversidade serão trabalhados, uma vez que estes serão utilizados como parâmetros para a definição do vetor de pesos ótimos. Posteriormente, os métodos estatísticos para modelagem e análise de processos serão apresentados, sendo a discussão fomentada, basicamente, pelos conceitos inerentes ao Projeto e Análise de Experimentos (*Design of Experiments – DOE*). Entre as técnicas do DOE, maior atenção será dada à Metodologia de Superfície de Respostas e ao Arranjo de Misturas, uma vez que essas técnicas serão utilizadas no presente trabalho. Por fim, serão apresentadas as características do algoritmo Gradiente Reduzido Generalizado (GRG) que será a ferramenta de busca utilizada para a localização dos pontos de ótimo.

2.1 – OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO

Os problemas de otimização envolvendo processos industriais são frequentemente multiobjetivos, uma vez que envolvem mais de uma característica desejável. Se não existe conflito entre as funções objetivo, então uma solução pode ser encontrada onde cada função objetivo atinge seu ótimo. Nesse caso, nenhum método especial é necessário (MIETTINEN, 1999).

Porém, com frequência, esses objetivos são função do mesmo conjunto de variáveis de decisão e são conflitantes (BARIL *et al.*, 2011). Para estudar os *trade-offs* entre esses objetivos conflitantes e explorar as opções disponíveis, precisa-se formular um problema de otimização com múltiplos objetivos. Uma formulação geral pode ser apresentada como:

$$\underset{x \in \Omega}{\text{Minimizar}} \Lambda = \{f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x)\} \quad (2.1)$$

onde, Λ é o vetor de funções objetivo (f_i) consistindo de k critérios, funções essas que são mutuamente conflitantes. O vetor de variáveis de decisão, x , deve pertencer ao conjunto viável Ω que geralmente inclui as restrições do problema na forma desigualdades ou igualdades:

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_r(x) \leq 0, r \in I, h_q(x) = 0, q \in J\} \quad (2.2)$$

onde, g_r e h_q são as funções de restrição de desigualdade e igualdade, respectivamente, e I e J são os conjuntos de índices contendo tantos elementos quantas restrições de desigualdades e igualdades, respectivamente.

A Figura 2.1 ilustra a relação entre o espaço de solução e o espaço das funções objetivo, considerando duas variáveis de decisão e duas funções objetivo.

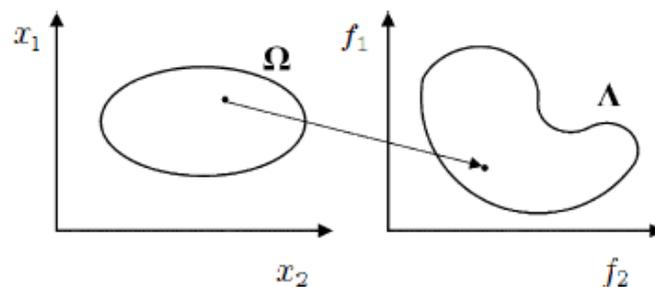


Figura 2.1 – Relação entre o espaço de solução e o espaço das funções objetivo.

Fonte: Istadi e Amin (2005, p.217).

Ao tentar resolver um problema de otimização multiobjetivo, encontrar soluções eficientes é o maior interesse. Uma solução $x^* \in X$ é eficiente, ou eficiente global, se não existe outro ponto $x \in X$ tal que $f(x) \leq f(x^*)$ e $f(x) \neq f(x^*)$.

Como já mencionado, eficiência é um conceito equivalente ao de Pareto otimalidade e não-inferioridade. Além disso, Sampaio (2011) afirma que o conceito de eficiência está estreitamente ligado ao conceito de não-dominância, sendo que este lida com a avaliação da função multiobjetivo numa solução viável em vez da própria solução em sua definição. Dizer que uma solução x^* é eficiente equivale a afirmar que não existe outro ponto viável x tal que os valores das funções objetivo avaliadas nele sejam menores ou iguais, sendo estritamente menor em, pelo menos, uma das funções. Quando um ponto viável não satisfaz essa definição, ele é chamado de ineficiente.

Sampaio (2011) cita que algumas variações do conceito de eficiência são os conceitos de eficiência local, eficiência fraca e eficiência fracamente local. Assim, uma solução $x^* \in X$ é eficiente local se existe $\delta > 0$ tal que x^* é eficiente em $X \cap N(x^*, \delta)$, onde $N(x, \delta) = \{y \mid y \in \mathbb{R}^n, \|x - y\| < \delta\}$. Já uma solução $x^* \in X$ é fracamente eficiente se não existe

outro ponto $x \in X$ tal que $f(x) < f(x^*)$. Ainda, uma solução $x^* \in X$ é fracamente eficiente local se existe $\delta > 0$ tal que x^* é eficiente fraca em $X \cap N(x^*, \delta)$.

A Figura 2.2 mostra exemplos dos quatro tipos de eficiência anteriormente definidos. Observe que, nos exemplos, as soluções eficientes locais, fracamente eficientes e fracamente eficientes locais não são soluções eficientes globais. Além disso, a solução fracamente eficiente não é uma solução eficiente local e a solução fracamente eficiente local não é uma solução fracamente eficiente.

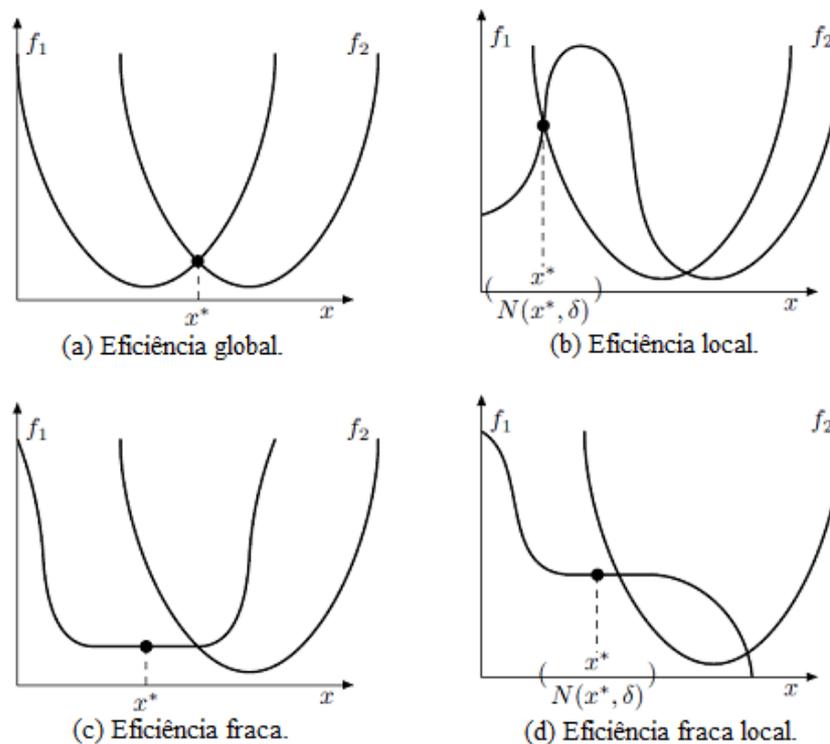


Figura 2.2 – Tipos de eficiência.

Fonte: Sampaio (2011, p.6).

Entretanto, para que um determinado ponto \mathbf{x}^* seja a solução para um problema de otimização, é necessário que este satisfaça algumas condições, as quais denominam-se condições de otimalidade. A situação mais simples para a qual se pode definir as condições de otimalidade é aquela em que se tem uma única função para a qual se deseja encontrar o ponto extremo, ou crítico, sendo que não existem restrições. No caso da otimização irrestrita, a condição necessária de primeira ordem é: para que \mathbf{x}^* seja um minimizador local da função $f(\mathbf{x})$, diferenciável em \mathbf{x}^* , é necessário que $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$.

Neste ponto, recorre-se a Miettinen (1999), que apresenta que uma função $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável em \mathbf{x}^* se:

$$f_i(\mathbf{x}^* + \mathbf{d}) - f_i(\mathbf{x}^*) = \nabla f_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} + \|\mathbf{d}\| \mathcal{E}(\mathbf{x}^*, \mathbf{d}) \quad (2.3)$$

onde $\nabla f_i(\mathbf{x}^*)$ é o gradiente de f_i em \mathbf{x}^* e $\mathcal{E}(\mathbf{x}^*, \mathbf{d}) \rightarrow 0$ assim como $\|\mathbf{d}\| \rightarrow 0$.

Em adição, f_i é continuamente diferenciável em \mathbf{x}^* se todas suas derivadas parciais $\frac{\partial f_i(\mathbf{x}^*)}{\partial x_j}$ ($j = 1, \dots, n$), isto é, todos os componentes do gradiente são contínuos em \mathbf{x}^* .

Ainda em relação à otimização irrestrita, tem-se que a condição necessária de segunda ordem é: para que \mathbf{x}^* seja um mínimo local da função $f(\mathbf{x})$, duas vezes diferenciável em \mathbf{x}^* , é necessário que $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ e que $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ seja positiva semidefinida, ou seja, possua autovalores (λ_l) maiores ou iguais a zero.

Segundo Miettinen (1999), uma função $f_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é duas vezes diferenciável em \mathbf{x}^* se:

$$f_i(\mathbf{x}^* + \mathbf{d}) - f_i(\mathbf{x}^*) = \nabla f_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} + \frac{1}{2} \mathbf{d}^T \nabla^2 f_i(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} + \|\mathbf{d}\|^2 \mathcal{E}(\mathbf{x}^*, \mathbf{d}) \quad (2.4)$$

onde $\nabla f_i(\mathbf{x}^*)$ é o gradiente, a matriz simétrica, $n \times n$, $\nabla^2 f_i(\mathbf{x}^*)$ é uma matriz Hessiana de f_i em \mathbf{x}^* e $\mathcal{E}(\mathbf{x}^*, \mathbf{d}) \rightarrow 0$ assim como $\|\mathbf{d}\| \rightarrow 0$. A matriz Hessiana de uma função duas vezes diferenciável consiste das derivadas parciais de segunda ordem $\frac{\partial^2 f_i(\mathbf{x}^*)}{\partial x_j \partial x_l}$ ($j, l = 1, \dots, n$),

podendo ser apresentada como:

$$\nabla^2 f_i(\mathbf{x}^*) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f_i(\mathbf{x}^*)}{\partial x_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 f_i(\mathbf{x}^*)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f_i(\mathbf{x}^*)}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f_i(\mathbf{x}^*)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Em adição, f_i é duas vezes continuamente diferenciável em \mathbf{x}^* se todas suas derivadas parciais de segunda ordem são contínuas em \mathbf{x}^* .

Retornando às condições de otimalidade em otimização irrestrita, observa-se que as condições apresentadas são apenas necessárias, pois, os termos de primeira e segunda ordem

podem estar nulos, deixando ainda dúvida sobre a natureza de \mathbf{x}^* . Assim, a condição suficiente para que \mathbf{x}^* seja um mínimo local estrito da função $f(\mathbf{x})$, duas vezes diferenciável em \mathbf{x}^* , é $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ e $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ seja positiva definida, ou seja, possua autovalores (λ_i) maiores que zero. Para a análise dos pontos críticos é necessário que as derivadas de segunda ordem da função existam e sejam diferentes de zero, o que pode ser constatado ao realizar uma expansão por série de Taylor em torno do ponto ótimo. Uma vez que a primeira derivada é nula, tem-se que:

$$f_i(\mathbf{x}) - f_i(\mathbf{x}^*) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T \nabla^2 f_i(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \quad (2.6)$$

de maneira que os valores da função nas proximidades do ponto crítico dependem da Hessiana. Resumindo, tem-se a seguinte relação entre os sinais dos autovalores da matriz Hessiana e o ponto crítico: se todos os autovalores forem positivos, tem-se um ponto de mínimo; se todos os autovalores forem negativos, tem-se um ponto de máximo; e se os autovalores apresentarem sinais diferentes, tem-se um ponto de sela. Essa análise ainda permite deduzir a convexidade da função.

De maneira similar, ao se trabalhar com a metodologia de superfície de resposta (*Response Surface Methodology* - RSM), a determinação da convexidade de uma função é feita pela caracterização da natureza do ponto estacionário. O ponto estacionário é o nível de x_1, x_2, \dots, x_k , que otimiza a resposta prevista. Esse ponto, se ele existe, será o conjunto de x_1, x_2, \dots, x_k , para o qual a derivada parcial é igual a zero. Uma solução matemática geral para a localização do ponto estacionário pode ser obtido. Considere o modelo de segunda ordem expresso em notação matricial (MYERS *et al.*, 2009):

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}^T \mathbf{b} + \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x} \quad (2.7)$$

onde:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix}, \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \cdots & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ \hat{\beta}_{21}/2 & \hat{\beta}_{22} & \cdots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\beta}_{k1}/2 & \hat{\beta}_{k2}/2 & \cdots & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix} \text{ para } \hat{\beta}_{ij} = \hat{\beta}_{ji} \quad (2.8)$$

A derivada de \hat{y} em função dos elementos do vetor \mathbf{x} igual a zero é:

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b} + 2\mathbf{B}\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (2.9)$$

O ponto estacionário é a solução da Equação 2.9:

$$\mathbf{x}_s = -\frac{1}{2}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b} \quad (2.10)$$

E a resposta prevista no ponto estacionário é:

$$\hat{y}_s = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}_s^T \mathbf{b} \quad (2.11)$$

A natureza do ponto estacionário é determinada pelo sinal dos autovalores (*eigenvalues*) da matriz \mathbf{B} . Os autovalores (λ_i) da matriz \mathbf{B} são a solução para a equação:

$$|\mathbf{B} - \lambda\mathbf{I}| = 0 \quad (2.12)$$

Se os λ_i são todos negativos, então a função é côncava e \mathbf{x}_s é um ponto de máximo. Se os λ_i são todos positivos, então a função é convexa e \mathbf{x}_s é um ponto de mínimo. Entretanto, se os λ_i têm diferentes sinais, a função não é nem côncava nem convexa e \mathbf{x}_s é um ponto de sela.

Considere agora um problema de otimização de uma única função sujeito a restrições de igualdade, $h(\mathbf{x})$, e desigualdade, $g(\mathbf{x})$. A idéia chave para desenvolver as condições de otimalidade necessárias e suficientes para um problema de otimização com restrições é transformá-lo em um problema de otimização sem restrições e aplicar as condições para este caso. Uma forma de fazer esta transformação é por meio da introdução de uma função auxiliar, chamada de função de Lagrange, definida como:

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j h_j(\mathbf{x}) + \sum_{l=1}^m \mu_l g_l(\mathbf{x}) \quad (2.13)$$

onde λ e μ são os multiplicadores de Lagrange associados com as restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente.

Com base na função de Lagrange, pode-se definir a condição necessária de primeira ordem de Karush-Kuhn-Tucker (KKT). Para que \mathbf{x}^* seja um ótimo local do problema com restrições, com $f(\mathbf{x})$, $g(\mathbf{x})$ e $h(\mathbf{x})$ diferenciáveis em \mathbf{x}^* , é necessário que os gradientes das restrições de desigualdade ativas, $\nabla g_l(\mathbf{x}^*)$, e das restrições de igualdade, $\nabla h_j(\mathbf{x}^*)$, sejam linearmente independentes (qualificação de segunda ordem das restrições), e que as seguintes condições sejam satisfeitas:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \mu^*) &= \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^m \lambda_j^* \nabla h_j(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^p \mu_l^* \nabla g_l(\mathbf{x}^*) = 0 \\ h_j(\mathbf{x}^*) &= 0 \\ g_l(\mathbf{x}^*) &\leq 0 \\ \mu_l^* g_l(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad l = 1, 2, \dots, p \\ \mu_l^* &\geq 0 \end{aligned} \tag{2.14}$$

Com relação à condição necessária de segunda ordem de KKT, para que \mathbf{x}^* seja um ótimo local do problema com restrições, com $f(\mathbf{x})$, $g(\mathbf{x})$ e $h(\mathbf{x})$ duas vezes diferenciáveis em \mathbf{x}^* , é necessário que a condição de primeira ordem de KKT seja satisfeita e que a matriz Hessiana da função de Lagrange $\nabla_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \mu^*)$ seja positiva semidefinida para todo vetor não nulo \mathbf{d} , tal que:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}^T \nabla h_j(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \\ \mathbf{d}^T \nabla g_l(\mathbf{x}^*) &= 0 \text{ para as } g_l(\mathbf{x}^*) \text{ ativas} \\ \mathbf{d}^T \nabla_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \mu^*) \mathbf{d} &\geq 0 \end{aligned} \tag{2.15}$$

Ainda, com relação à condição suficiente de segunda ordem de KKT, para que \mathbf{x}^* seja um ótimo local do problema com restrições, com $f(\mathbf{x})$, $g(\mathbf{x})$ e $h(\mathbf{x})$ duas vezes diferenciáveis em \mathbf{x}^* , é suficiente que a condição de primeira ordem de KKT seja satisfeita e que a matriz Hessiana da função de Lagrange $\nabla_{\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \mu^*)$ seja positiva definida para todo vetor não nulo \mathbf{d} , tal que:

$$\begin{aligned}
\mathbf{d}^T \nabla h_j(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \\
\mathbf{d}^T \nabla g_l(\mathbf{x}^*) &= 0 \text{ para as } g_l(\mathbf{x}^*) \text{ ativas } \{g_l(\mathbf{x}^*) = 0 \text{ e } \mu_l^* > 0\} \\
\mathbf{d}^T \nabla g_l(\mathbf{x}^*) &\leq 0 \text{ para as } g_l(\mathbf{x}^*) \text{ inativas } \{g_l(\mathbf{x}^*) < 0 \text{ e } \mu_l^* = 0\} \\
\mathbf{d}^T \nabla_x^2 L(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \mu^*) \mathbf{d} &> 0
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Para o caso de problemas de otimização multiobjetivo, dentre as condições de otimalidade necessárias de primeira ordem existentes, pode-se citar as condições do tipo Fritz John. Considerando que o problema multiobjetivo descrito na Equação 2.1, assim como suas restrições de desigualdade, sejam continuamente diferenciáveis em \mathbf{x}^* , uma condição necessária para \mathbf{x}^* ser uma solução Pareto ótima é que exista vetores $0 \leq \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}^k$ e $0 \leq \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$ para os quais $(\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\mu}) \neq (0, 0)$ tal que:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^k \omega_i \nabla f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^p \mu_l \nabla g_l(\mathbf{x}^*) &= 0 \\
\mu_l g_l(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad l = 1, 2, \dots, p
\end{aligned} \tag{2.17}$$

A diferença entre as condições de otimalidade do tipo Fritz John e do tipo KKT é que o multiplicador da função objetivo ($\boldsymbol{\omega}$) é considerado positivo no último caso. Quando um multiplicador associado a alguma função objetivo é igual ao zero, esta função não desempenha papel algum na condição de otimalidade, o que não é desejado. Para garantir a positividade de $\boldsymbol{\omega}$, condições de qualificação das restrições devem ser assumidas. Com o intuito de apresentar as condições de otimalidade KKT, a qualificação da restrição Kuhn-Tucker é apresentada: considere as funções de restrição g_l do problema multiobjetivo descrito na Equação 2.1 como sendo continuamente diferenciável em \mathbf{x}^* . O problema satisfaz à qualificação da restrição Kuhn-Tucker em \mathbf{x}^* se, para qualquer $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\nabla g_l(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} \leq 0 \quad \forall l \in \{1, \dots, p \mid g_l(\mathbf{x}^*) = 0\}$, exista uma função $\mathbf{a}: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^n$ a qual é continuamente diferenciável em 0, e algum escalar $\alpha > 0$, tal que $\mathbf{a}(0) = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{g}(\mathbf{a}(t)) \leq 0 \quad \forall 0 \leq t \leq 1$ e $\mathbf{a}'(0) = \alpha \mathbf{d}$. Assim, se a condição necessária de primeira ordem de Fritz John satisfizer a qualificação da restrição Kuhn-Tucker, ela é válida como uma condição necessária KKT para Pareto otimalidade, desde que $\boldsymbol{\omega} \neq 0$.

Para a condição suficiente KKT de primeira ordem para a Pareto otimalidade, considerando as funções objetivo e de restrição como convexas e continuamente diferenciáveis em \mathbf{x}^* , é suficiente que exista multiplicadores $0 < \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}^k$ e $0 \leq \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$ tal que:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k \omega_i \nabla f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^p \mu_l \nabla g_l(\mathbf{x}^*) &= 0 \\ \mu_l g_l(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad l = 1, 2, \dots, p \end{aligned} \quad (2.18)$$

Segundo Miettinen (1999), devido ao fato de que, neste caso, o problema de otimização multiobjetivo é tido como convexo, a condição suficiente KKT de primeira ordem provê uma condição suficiente para a Pareto otimalidade global. Entretanto, se a suposição de convexidade for relaxada, a condição descrita na Equação 2.18 é suficiente para que \mathbf{x}^* seja fracamente Pareto ótimo.

As últimas condições de otimalidade para otimização multiobjetivo a serem apresentadas são as condições necessária e suficiente de segunda ordem. Antes, será considerada mais uma condição de qualificação, chamada de condição de regularidade: um ponto \mathbf{x}^* é dito ser um ponto regular se os gradientes das restrições ativas em \mathbf{x}^* são linearmente independentes. Agora, considerando que o problema multiobjetivo descrito na Equação 2.1, assim como suas restrições de desigualdade, sejam duas vezes continuamente diferenciáveis em \mathbf{x}^* , uma condição necessária de segunda ordem para \mathbf{x}^* ser uma solução Pareto ótima é que exista vetores $0 \leq \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}^k$, $\boldsymbol{\omega} \neq 0$, e $0 \leq \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$ tal que:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k \omega_i \nabla f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^p \mu_l \nabla g_l(\mathbf{x}^*) &= 0 \\ \mu_l g_l(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad l = 1, 2, \dots, p \\ \mathbf{d}^T \left(\sum_{i=1}^k \omega_i \nabla^2 f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^p \mu_l \nabla^2 g_l(\mathbf{x}^*) \right) \mathbf{d} &\geq 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde $\mathbf{d} \neq 0$ e $\nabla g_l(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} = 0$.

Miettinen (1999) argumenta que ao se trabalhar com as condições de otimalidade de segunda ordem é preciso algum tipo de qualificação de segunda ordem das restrições. Assim, a regularidade, que é a independência linear dos gradientes das restrições ativas no ponto

considerado, é o tipo de uma qualificação de segunda ordem das restrições que pode garantir um bom resultado, propiciando a estrita positividade de cada multiplicador ϖ .

A autora ainda apresenta a condição suficiente de segunda ordem para a Pareto otimalidade: considerando que o problema multiobjetivo descrito na Equação 2.1, assim como suas restrições de desigualdade, sejam duas vezes continuamente diferenciáveis em \mathbf{x}^* , uma condição suficiente de segunda ordem para \mathbf{x}^* ser uma solução Pareto ótima é que exista vetores $0 \leq \varpi \in \mathbb{R}^k$ e $0 \leq \mu \in \mathbb{R}^p$ para os quais $(\varpi, \mu) \neq (0, 0)$ tal que:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k \varpi_i \nabla f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^p \mu_l \nabla g_l(\mathbf{x}^*) &= 0 \\ \mu_l g_l(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad l = 1, 2, \dots, p \\ \mathbf{d}^T \left(\sum_{i=1}^k \varpi_i \nabla^2 f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^p \mu_l \nabla^2 g_l(\mathbf{x}^*) \right) \mathbf{d} &> 0 \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde $\mathbf{d} \neq 0$, $\nabla g_l(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} = 0$ para as $g_l(\mathbf{x}^*)$ ativas e $\nabla g_l(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} \leq 0$ para as $g_l(\mathbf{x}^*)$ inativas.

Os métodos de otimização multiobjetivo tentam produzir um conjunto de soluções *trade-off* eficientes ou Pareto ótimas, das quais o decisor pode escolher uma. Uma solução é chamada Pareto ótima se nenhum objetivo pode ser melhorado sem sacrificar outro. A Figura 2.3 ilustra uma fronteira eficiente, também chamada fronteira de Pareto, para um problema biobjetivo, sendo que os pontos A e B representam os pontos de ancoragem, ou seja, são as otimizações individuais de cada função objetivo.

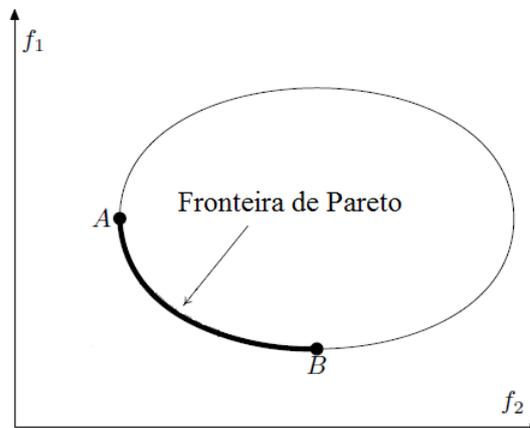


Figura 2.3 – Exemplo de Fronteira de Pareto.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Uma vez que o problema de ponderação da função objetivo é a propriedade característica da otimização multiobjetivo (ROCHA *et al.*, 2015a, 2015b), a maneira como um tomador de decisão está envolvido com a solução deste problema é a base para a sua classificação. Atualmente, uma ampla variedade de técnicas de programação matemática estão disponíveis na literatura (BARIL *et al.*, 2011). De acordo com Hwang e Masud (1979) e Miettinen (1999), essas técnicas são classificadas nas seguintes categorias:

- Métodos sem preferência: são métodos onde nenhuma articulação de informação de preferência é feita (ROCHA *et al.*, 2015a, 2015b), sendo que o problema de otimização multiobjetivo é resolvido usando algum método relativamente simples e a solução obtida é apresentada ao decisor, que pode aceitar ou rejeitar a solução. Esses métodos são adequados para situações onde o decisor não tem qualquer especial expectativa a respeito da solução, ficando satisfeito com qualquer solução ótima. O método do critério global (HWANG e MASUD, 1979; MIETTINEN, 1999; RAO, 2009) está incluído nesta classificação (BARIL *et al.*, 2011).
- Métodos *a priori*: são métodos onde a articulação de informação de preferência é usada *a priori*, isto é, o decisor seleciona o vetor de prioridade das funções objetivo antes de implementar o algoritmo de otimização (ROCHA *et al.*, 2015a, 2015b). Estes métodos tentam quantificar a preferência do tomador de decisão e, utilizando-se desta informação, determinam o melhor ponto de ótimo (BARIL *et al.*, 2011). Como exemplos, podem-se citar a programação por metas (*goal programming*) (DAUER e KRUEGER, 1977; LIU *et al.*, 2012) e a programação lexicográfica (RAO, 2009).
- Métodos interativos: são métodos onde uma progressiva articulação da informação de preferência é usada, isto é, o decisor interage com o programa durante o processo de otimização (ROCHA *et al.*, 2015a, 2015b). Nesses métodos, o decisor participa ativamente do processo de solução iterativo e especifica a informação de preferência gradualmente (BARIL *et al.*, 2011). São exemplos deste tipo de método, o método Tchebycheff (MIETTINEN, 1999) e o método NIMBUS (ESKELINEN e MIETTINEN, 2011), entre outros.
- Métodos *a posteriori*: são métodos onde uma articulação de informação de preferência é feita *a posteriori*, isto é, nenhuma ponderação é especificada pelo usuário, antes ou durante o processo de otimização (ROCHA *et al.*, 2015a, 2015b). Depois de se gerar o conjunto Pareto ótimo, este é apresentado ao decisor que seleciona a solução mais interessante (*most preferred solution*) entre as alternativas. Portanto, pode-se tornar

interessante analisar a totalidade do conjunto de soluções Pareto ótimas com o intuito de selecionar uma para implementação (BARIL et al., 2011). Isto torna-se atrativo para reduzir o tamanho do conjunto de solução e para assistir o decisor na seleção da solução final (TABOADA et al., 2007). São exemplos desta categoria, o método de somas ponderadas (MIETTINEN, 1999), método de métricas ponderadas (ARDAKANI e NOOROSSANA, 2008; ROCHA et al., 2015a), método de restrição ϵ (NAJJARBASHI e LIM, 2015; MAVROTAS, 2009) e o método de interseção normal à fronteira (DAS e DENNIS, 1998; BRITO et al., 2014; ROCHA et al., 2015a, 2015b).

Entretanto, como nenhuma classificação pode ser completa, essas classificações não são absolutas. Sobreposições e combinações de classes são possíveis e alguns métodos podem ser considerados como pertencendo à mais de uma classe (HWANG e MASUD, 1979). Este trabalho considera o método *a posteriori* em consonância com a abordagem "generate first-choose later" (MESSAC e MATTSON, 2002).

Segundo Shahraki e Noorossana (2014), existem duas abordagens para resolver problemas com mais de uma função objetivo. A primeira, baseia-se em converter todas as funções objetivo em uma, reduzindo o problema original a um problema de otimização escalar; portanto, o termo escalarização. Escalarização é a conversão do problema, por agregação dos componentes das funções objetivo em um simples ou família de simples problemas de otimização multiobjetivo, com uma função objetivo de valor real (HWANG e MASUD, 1979). Vários métodos podem ser utilizados com esta finalidade, entre os quais estão o método de somas ponderadas (MIETTINEN, 1999), o método de métricas ponderadas (ARDAKANI e NOOROSSANA, 2008; ROCHA et al., 2015a), a programação por metas (DAUER e KRUEGER, 1977; LIU et al., 2012) e o método de interseção normal à fronteira (DAS e DENNIS, 1998; BRITO et al., 2014; ROCHA et al., 2015a, 2015b). A segunda abordagem, baseia-se em otimizar um objetivo, sujeito aos outros objetivos como restrições (SEVERINO et al., 2012; PAIVA et al., 2007). Neste contexto, a função objetivo considerada mais importante é priorizada, o que dá origem ao termo priorização. São exemplos desta abordagem a programação lexicográfica (RAO, 2009) e o método de restrição ϵ (NAJJARBASHI e LIM, 2015; MAVROTAS, 2009).

Ainda, segundo Shahraki e Noorossana (2014), os métodos que permitem a obtenção do conjunto completo de soluções Pareto ótimas devem ter prioridade em sua utilização uma vez que fornecem ao decisor a habilidade de selecionar a melhor solução dentre as consideradas eficientes.

2.1.1 – Método da restrição ε (ε -constraint method)

Este é um método considerado muito simples e segue o modelo de priorização, ou seja, a função considerada mais importante é escolhida como função objetivo enquanto que as demais funções são tratadas como restrições, com valores compreendidos entre limites previamente estabelecidos. A formulação neste caso pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 & \text{Min } f_i(x) \\
 & \text{Sujeito a: } g_i(x) \leq 0 \\
 & \quad L_j \leq f_j(x) \leq U_j \\
 & \quad i \neq j
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

onde: L_j é o limite inferior e U_j é o limite superior.

O fato de o método ser eficiente em aproximar a fronteira eficiente mesmo em problemas não-convexos é uma vantagem. Porém, a escolha do vetor ε não é uma questão trivial e sua dificuldade aumenta à medida que cresce o número de funções objetivo que se deseja otimizar. Se tal vetor for escolhido de maneira inadequada, os problemas escalarizados a serem resolvidos podem se tornar inviáveis.

2.1.2 – Método da Programação por Objetivos (*Goal Programming*)

Miettinen (1999) cita que as ideias da programação por objetivos foram originalmente introduzidas em Charnes *et al.* (1955), mas o termo "*goal programming*" foi fixado em Charnes e Cooper (1961), sendo este um dos primeiros métodos expressamente criados para otimização multiobjetivo.

Segundo Miettinen (1999), a ideia básica na programação por objetivos é que o decisor especifica níveis de aspiração (otimista) para as funções objetivo e quaisquer desvios destes níveis de aspiração são minimizados. Uma função objetivo, juntamente com um nível de aspiração, forma um objetivo. Denota-se o nível de aspiração da função objetivo $f_i(x)$ por b_i para $i = 1, \dots, k$.

Para problemas de minimização, os objetivos são da forma $f_i(x) \leq b_i$, e a forma $f_i(x) \geq b_i$ para problemas de maximização. Assume-se que os níveis de aspiração são selecionados de maneira que não sejam alcançados simultaneamente.

Segundo Miettinen (1999), é importante notar que os objetivos são da mesma forma das restrições do problema, podendo serem as restrições consideradas como um subconjunto

dos objetivos. Essa forma de formular o problema é chamada *generalized goal programming*. Neste caso, os objetivos podem ser pensados como sendo divididos em flexíveis e inflexíveis, onde as restrições são inflexíveis.

Depois de os níveis de aspiração terem sido alcançados, a tarefa seguinte é minimizar os sub- e sobrevalores (*under and overachievements*) da função objetivo com respeito aos seus níveis de aspiração. Miettinen (1999) afirma que é suficiente estudar as variáveis de desvio $\delta_i = b_i - f_i(x)$. Dependendo do problema, a variável de desvio pode assumir valores positivos ou negativos, sendo apresentada como a diferença entre duas variáveis positivas $\delta_i = \delta_i^- - \delta_i^+$. A partir deste ponto, pelo estudo das variáveis de desvio, pode-se investigar o quão bem cada nível de aspiração é alcançado. Pode-se considerar que $b_i = f_i(x) + \delta_i^- - \delta_i^+$ para todo $i = 1, \dots, k$, onde δ_i^- é um desvio negativo ou sub-valor e δ_i^+ é um desvio positivo ou sobrevalor em relação ao nível de aspiração.

Ainda, é válido que $\delta_i^- \delta_i^+ = 0$ para todo $i = 1, 2, \dots, k$.

Assim, a formulação do *goal programming* para problemas de otimização multiobjetivo leva a (IGNIZIO, 1983; RAO, 2009):

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & \left[\sum_{i=1}^k (\delta_i^- + \delta_i^+)^p \right]^{1/p}, \quad p \geq 1 \\ \text{sujeito a:} \quad & g_i(x) \leq 0 \\ & f_i(x) + \delta_i^- - \delta_i^+ = b_i \\ & \delta_i^- \geq 0 \\ & \delta_i^+ \geq 0 \\ & \delta_i^- \delta_i^+ = 0 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Rao (2009) cita que o valor de p é baseado na função utilidade escolhida pelo analista. Já o valor para o i -ésimo objetivo, b_i , é encontrado por resolver o seguinte problema:

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & f_i(x) \\ \text{sujeito a:} \quad & g_i(x) \leq 0 \end{aligned} \tag{2.23}$$

Se a solução do problema apresentado na Equação 2.23 for x_i^* , então b_i será considerado como $b_i = f_i(x_i^*)$.

Apesar da ação de definir objetivos ser uma maneira fácil e compreensível de tomar decisões, o método apresenta algumas desvantagens. Primeiramente, a especificação dos pesos, na abordagem ponderada, é mais difícil, uma vez que estes não têm um efeito direto na

solução obtida nem possuem um significado físico, isto porque os pesos são pesos relativos oriundos das razões dos coeficientes de ponderação. Além disso, a correta seleção dos níveis de aspiração pode ser difícil, principalmente para o decisor que não conhecer a região viável de determinado problema.

2.1.3 – Método do Critério Global

Segundo Hwang e Masud (1979) o método do critério global é o mais importante método dentro da categoria dos métodos que não usam informações de preferência do decisor.

Nesse método, a distância entre algum ponto de referência e a região objetivo viável é minimizada (MIETTINEN, 1999). Assim, a solução ótima x^* é encontrada pela minimização de um critério global previamente selecionado, tal como a soma dos quadrados dos desvios relativos entre as funções objetivo individuais e uma solução viável ideal. Ao usar o escalonamento dos desvios pela solução viável ideal, permite-se que respostas com diferentes unidades possam ser trabalhadas num mesmo problema. Sua formulação matemática pode ser expressa por (HWANG e MASUD, 1979; RAO, 2009):

$$\text{Min} \sum_{i=1}^k \left[\frac{f_i(x_i^*) - f_i(x)}{f_i(x_i^*)} \right]^p \quad (2.24)$$

Sujeito a: $g_j(x) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m$

Onde: p é uma constante; x_i^* é a solução ideal para a i -ésima função objetivo; e $g_j(x)$ representa as restrições do problema.

Segundo Hwang e Masud (1979), o parâmetro p na Equação 2.24, pode ter muitos valores possíveis, sendo que a solução ótima irá diferir grandemente, de acordo com o critério escolhido. Rao (2009) cita que um valor usual para p é 2.

Esse método apresenta algumas desvantagens, como o problema em determinar qual p resultaria em uma solução que é a mais satisfatória para o decisor. Além disso, se o vetor objetivo global ideal não é conhecido, o método não necessariamente funciona como se espera. Se o vetor objetivo ideal é substituído por algum outro, este deve ser selecionado cuidadosamente. Pontos de referência pessimistas devem ser evitados, uma vez que o método não pode encontrar soluções melhores que o ponto de referência (MIETTINEN, 1999).

Segundo Miettinen (1999) o método do critério global pode ser classificado de maneiras distintas. Isto ocorre, devido ao fato de que se forem adicionados pesos (w) à Equação 2.24, com o intuito de representar diferentes graus de importância, o método deixa

de ser classificado como método sem preferência e passa a ser classificado como sendo um método *a posteriori*, sendo possível, inclusive, a determinação da fronteira de Pareto. A Equação 2.25 apresenta a forma ponderada do método do critério global:

$$\begin{aligned} \text{Min } & \sum_{i=1}^k w_i \left[\frac{f_i(x_i^*) - f_i(x)}{f_i(x_i^*)} \right]^p \\ \text{Sujeito a: } & \sum_{i=1}^k w_i = 1 \\ & g_j(x) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (2.25)$$

A extensão ponderada do método do critério global leva a um outro método: o método da métrica ponderada L_p (MIETTINEN, 1999). Esse método pertence à categoria de métodos *a posteriori*, onde nenhuma ponderação é especificada pelo usuário, antes ou durante o processo de otimização, e é usualmente discutida em referências que trabalham o tema de tomada de decisão multiobjetivo, como Hwang e Masud (1979) e Deb (2001). Ardakani e Noorossana (2008) consideram que o uso do método da métrica ponderada se deve a dois principais fatores: primeiro, este método não requer informações do decisor; segundo, sua aplicação quando comparado a outras técnicas é relativamente mais fácil. Este método se situa entre as técnicas de otimização que combinam múltiplos objetivos em um simples objetivo.

A medida de distância ponderada L_p de qualquer solução x para a solução ideal $f(x^{\max j})$ pode ser minimizada como segue (ARDAKANI e NOOROSSANA, 2008):

$$L_p = \left[\sum_{j=1}^k w_j \left(f_j(x^{\max j}) - f_j(x) \right)^p \right]^{1/p} \quad (2.26)$$

onde, w_j é um peso não-negativo, atribuído pelo decisor à j -ésima função objetivo e p indica a importância de cada desvio da função objetivo do seu valor ideal. Quando $p=1$ é usado, o problema resultante reduz-se a uma soma ponderada dos desvios. Quando $p=2$ é usado, a Distância Euclidiana ponderada de qualquer ponto no espaço objetivo relativo ao seu ponto ideal é minimizada. Quando $p=\infty$ é considerado, o maior desvio $w_j \left(f_j(x^{\max j}) - f_j(x) \right)$ é minimizado, isto é:

$$\text{Min}_x \left\{ \text{Max}_j w_j \left(f_j(x^{\max j}) - f_j(x) \right) \right\} \quad (2.27)$$

que é equivalente a:

$$\begin{aligned} & \text{Min } y \\ & \text{sujeito a: } y \geq w_j (f_j(x^{\max j}) - f_j(x)) \forall j \end{aligned} \quad (2.28)$$

Chankong e Haimes (1983) demonstraram que, quando o método L_p é usado, todas as soluções correspondendo a $1 \leq p \leq \infty$ e $w > 0$ são soluções eficientes. Se, por outro lado, problemas envolvendo o L_p restrito forem considerados, então, de acordo com Miettinen (1999), somente L_∞ leva a soluções Pareto ótimas. Na Equação 2.26, é assumido que as funções objetivo têm a mesma escala. Se as funções objetivo não têm a mesma escala, então cada função objetivo poderia ser escalonada usando uma das seguintes equações (ARDAKANI e NOOROSSANA, 2008):

$$L_p = \left(\sum_{j=1}^k w_j \left[\frac{f_j(x^{\max j}) - f_j(x)}{f_j(x^{\max j})} \right]^p \right)^{1/p} \quad (2.29)$$

ou

$$L_p = \left(\sum_{j=1}^k w_j \left[\frac{f_j(x^{\max j}) - f_j(x)}{f_j(x^{\max j}) - f_j(x^{\min j})} \right]^p \right)^{1/p} \quad (2.30)$$

As vantagens da utilização do método da métrica ponderada L_p consistem no fato de que o método funciona para problemas convexos e não-convexos e a alteração dos parâmetros é mais fácil do que no método da restrição ϵ . As desvantagens são que dependendo do grau de não-convexidade do problema, nem todas soluções Pareto ótimas são encontradas. Além disso, para problemas não-convexos, o sucesso do método depende do conhecimento do vetor de ótimos globais dos objetivos.

2.1.4 – Método de Somas Ponderadas

O método de somas ponderadas é uma das técnicas mais empregadas para a resolução de problemas de otimização multiobjetivo. Segundo Zhang e Yang (2001), isto deve-se à sua

relativa simplicidade e capacidade de interpretação física dos processos que estão sendo analisados.

Este método é caracterizado como uma sequência de problemas em que as funções objetivo são convertidas em um problema de otimização escalar pela minimização da combinação convexa dos diferentes objetivos (KOSKI, 1988; JAHN *et al.*, 1991), ou seja, a função objetivo global é definida por uma combinação linear entre as funções objetivo originais e seus respectivos graus de importância, representados pelos pesos. Em outras palavras, n pesos w_i são escolhidos, tal que $w_i \geq 0$, $i = 1, \dots, n$ e $\sum_{i=1}^n w_i = 1$ e o seguinte problema é resolvido:

$$\begin{aligned} \text{Min}_x \quad & \sum_{i=1}^n w_i f_i(x) = w^T F(x) \\ \text{Sujeito a: } & h_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, l \\ & g_j(x) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \tag{2.31}$$

Onde: $f_i(x)$ são as $n \geq 2$ funções objetivo a serem otimizadas; $h_i(x)$ representam as l restrições de igualdade; e $g_j(x)$ representam as m restrições de desigualdade.

Segue, imediatamente, que o minimizador global x^* do problema anteriormente mencionado, é um ponto Pareto ótimo para o problema multiobjetivo. Se isto não for verdade, então deve haver um x viável que melhore, ao menos, um dos (positivamente ponderados) objetivos, sem aumentar os outros e, portanto, produza um menor valor da soma ponderada (DAS e DENNIS, 1997).

Uma abordagem comum, então, é executar a minimização descrita anteriormente repetidamente, usando uma dispersão uniforme de w , com o intuito de gerar muitos pontos no conjunto Pareto ótimo. Porém, as duas maiores dificuldades com essa prática são as seguintes:

- se a curva de Pareto é não-convexa, não existe qualquer w para o qual a solução do problema de combinação linear permaneça na parte não-convexa;
- até se a curva de Pareto for convexa, uma distribuição uniforme de pesos w , não produz uma distribuição uniforme de pontos na curva de Pareto, o que pode atrapalhar o decisor na tomada de decisão por não deixar claro o comportamento conflitante e os *trade-offs* entre os objetivos.

De acordo com Shin *et al.* (2011), um problema bi-objetivo é convexo se o conjunto viável X é convexo e as funções são também convexas. Quando ao menos uma função objetivo é não-convexa, o problema bi-objetivo se torna não-convexo, gerando uma fronteira

de Pareto não-convexa e descontínua. A principal consequência de uma fronteira de Pareto não-convexa é que pontos na parte côncava não são estimados (DAS e DENNIS, 1997). Essa instabilidade ocorre devido ao fato de que a soma ponderada não é uma função Lipschitziana do peso utilizado (VAHIDINASAB e JADID, 2010). Segundo Clarke (1983), uma função $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é localmente Lipschitziana no ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ se existir um escalar k tal que $|f_i x_1 - f_i x_2| \leq k |x_1 - x_2|$, $\forall x_1, x_2 \in N(x^*, \delta)$, sendo N um espaço métrico, e será contínua se $\delta(f_i x_1 - f_i x_2) \leq k \delta(x_1 - x_2)$, $\forall x_1, x_2 \in N$.

A Figura 2.4 apresenta graficamente problemas com fronteiras convexas e não convexas.

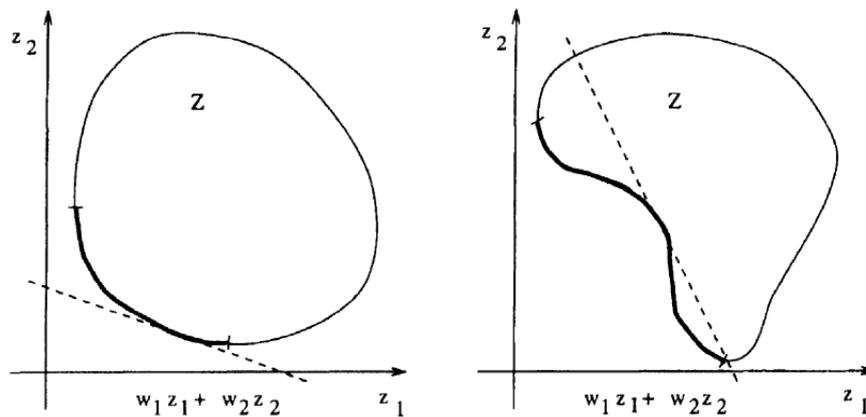


Figura 2.4 – Método de somas ponderadas em problemas convexas e não-convexos.

Fonte: Miettinen (1999, p.80).

Outra desvantagem das somas ponderadas está relacionada à distribuição uniforme das soluções Pareto ótimas, uma vez que, até quando se utiliza vetores de pesos uniformemente distribuídos, a fronteira de Pareto gerada não é nem equispçada, nem uniformemente distribuída (DAS e DENNIS, 1997; VAHIDINASAB e JADID, 2010), o que pode se configurar como fator negativo ao processo de tomada de decisão.

2.1.5 – Método da Interseção Normal à Fronteira (*Normal Boundary Intersection*)

Como já discutido anteriormente, o método de somas ponderadas é amplamente utilizado para a obtenção de soluções Pareto ótimas em problemas multiobjetivo, sendo de fácil implementação e interpretação. Entretanto, se o conjunto de soluções Pareto ótimas for não-convexo, a fronteira passa a ser não convexa e descontínua, formando *clusters* de soluções em regiões de grande curvatura, porém, descontínuas no espaço de solução. Nessas situações, o método de somas ponderadas dificilmente encontra soluções na parte não-convexa. Além disso, este método não é capaz de gerar uma fronteira equispçada, mesmo

que a distribuição dos pesos seja uniforme (SHUKLA e DEB, 2007; VAHIDINASAB e JADID, 2010), o que pode atrapalhar o decisor na tomada de decisão por não deixar claro o comportamento conflitante e os *trade-offs* entre as diferentes funções objetivo.

Para contornar os problemas inerentes à utilização do método de somas ponderadas, Das e Dennis (1998) propuseram o método de interseção normal à fronteira ou *Normal Boundary Intersecção* (NBI). O método NBI é uma rotina de otimização desenvolvida para encontrar soluções Pareto ótimas uniformemente distribuídas e contínuas para um problema multiobjetivo não-linear, independentemente da distribuição dos pesos ou das escalas relativas entre as diversas funções objetivo (DAS e DENNIS, 1998; SHUKLA e DEB, 2007). Essa característica é importante na medida em que torna compreensível o *trade-off* existente entre os objetivos conflitantes, facilitando a tomada de decisão.

O primeiro passo no método NBI compreende o estabelecimento da matriz *payoff* Φ , baseado no cálculo dos mínimos individuais de cada função objetivo. A solução que minimiza a *i*-ésima função objetivo $f_i(x)$ pode ser representada como $f_i^*(x_i^*)$. Quando se substitui o ótimo individual x_i^* nas funções objetivo restantes, tem-se $f_i(x_i^*)$. Em notação matricial, a matriz *payoff* Φ pode ser escrita como (VAHIDINASAB e JADID, 2010; UTYUZHNIKOV *et al.*, 2009):

$$\Phi = \begin{bmatrix} f_1^*(x_1^*) & \cdots & f_1(x_i^*) & \cdots & f_1(x_m^*) \\ \vdots & \ddots & & & \vdots \\ f_i(x_1^*) & \cdots & f_i^*(x_i^*) & \cdots & f_i(x_m^*) \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ f_m(x_1^*) & \cdots & f_m(x_i^*) & \cdots & f_m^*(x_m^*) \end{bmatrix} \quad (2.32)$$

Cada linha da matriz *payoff* Φ é composta por valores mínimos e máximos da *i*-ésima função objetivo $f_i(x)$. Esses valores podem ser usados para normalizar as funções objetivo, principalmente quando estas estão escritas em termos de diferentes escalas ou unidades. Do mesmo modo, escrevendo-se um vetor com o conjunto dos mínimos individuais, $f^U = [f_1^*(x_1^*) \quad \dots, \quad f_i^*(x_i^*) \quad \dots, \quad f_m^*(x_m^*)]^T$, se obtém o ponto de Utopia. Analogamente, juntando os valores máximos de cada função objetivo, $f^N = [f_1^N \quad \dots, \quad f_i^N \quad \dots, \quad f_m^N]^T$, tem-se um conjunto chamado ponto de Nadir. A normalização das funções objetivo pode ser obtida usando esses dois conjuntos, tal como:

$$\bar{f}_i(x) = \frac{f_i(x) - f_i^U}{f_i^N - f_i^U} \quad i = 1, \dots, m \quad (2.33)$$

Essa normalização leva à matriz *payoff* normalizada $\bar{\Phi}$.

De acordo com Vahidinasab e Jadid (2010), as combinações convexas de cada linha da matriz *payoff* formam a Envoltória Convexa dos Mínimos Individuais (*Convex Hull of Individual Minima* – CHIM) ou a linha de Utopia (UTYUZHNIKOV *et al.*, 2009). Ressalta-se que uma distribuição igualmente espaçada de pontos ao longo da linha de utopia não garante uma distribuição uniforme de pontos na fronteira de Pareto. A solução da otimização simples do problema $f_i^*(x_i^*)$ corresponde ao ponto de ancoragem para a fronteira de Pareto (JIA e IERAPETRITOU, 2007; UTYUZHNIKOV *et al.*, 2009).

Considere agora uma ponderação convexa w , tal que Φw_i representa um ponto na CHIM e \hat{n} denota a unidade de direção normal (um vetor coluna de números 1) em relação à CHIM, do ponto Φw_i para a origem; então $\Phi w + D\hat{n}$, com $D \in \mathbb{R}$, representa o conjunto de pontos naquela normal (JIA e IERAPETRITOU, 2007; SHUKLA e DEB, 2007).

O ponto de interseção entre a normal e a fronteira da região viável mais próxima da origem corresponde à maximização da distância entre a linha de Utopia e a fronteira de Pareto. Então, o problema de otimização pode ser escrito como (DAS e DENNIS, 1998):

$$\begin{aligned} & \text{Max}_{(x, D)} && D \\ & \text{sujeito a:} && \bar{\Phi}w + D\hat{n} = \bar{F}(x) \\ & && x \in \Omega \end{aligned} \quad (2.34)$$

onde: $\bar{F}(x)$ é o vetor contendo os valores individuais normalizados dos objetivos; e Ω é o conjunto viável que geralmente inclui as restrições do problema na forma desigualdades ou igualdades.

Este problema de otimização pode ser iterativamente resolvido para diferentes valores de w , criando uma fronteira de Pareto uniformemente distribuída. A Figura 2.5 representa graficamente o Método NBI, onde: \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{e} são calculados como $\bar{\Phi}w_i$.

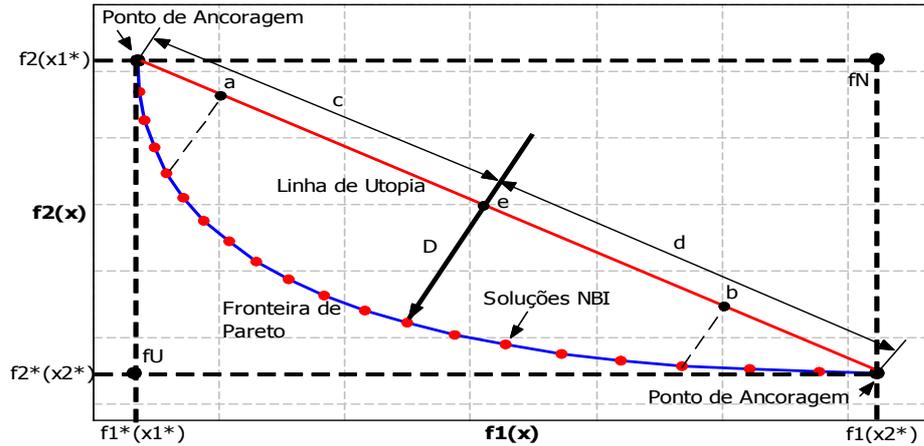


Figura 2.5 – Descrição Gráfica do Método NBI.

Fonte: Brito *et al.* (2014, p.629).

Com o intuito de ilustrar como o NBI está relacionado ao método de somas ponderadas, Das e Dennis (1998) demonstram que, correspondente a cada w_{sp} na soma ponderada existe um w_{NBI} no NBI tal que o NBI tenha a mesma solução da soma ponderada, mas o inverso não é verdadeiro. Em outras palavras, os autores provam que podem existir pontos alcançáveis usando NBI que não são obtidos pela soma ponderada.

Dado um ponto Pareto ótimo x^* , o problema pode ser pensado como sendo restrito por um vetor de igualdades ampliado (\bar{h}), envolvendo igualdades, desigualdades e limites em x^* . Considere $w_{sp} \in (\mathbb{R}_+ \cup \{0\})^n, \sum_1^n w_{sp(i)} = 1$, como a ponderação convexa positiva dos objetivos. Assim, o problema de somas ponderadas para obter um ponto Pareto ótimo é escrito como:

$$\begin{aligned} \text{Min}_x \quad & w_{sp}^T F(x) \\ \text{Sujeito a:} \quad & \bar{h}(x) = 0 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Parte da condição necessária de primeira ordem ou KKT para otimalidade de (x^*, λ^*) para o problema descrito na Equação 2.35 é:

$$\nabla_x F(x^*) w_{sp} + \nabla_x \bar{h}(x^*) \lambda^* = 0 \tag{2.36}$$

Similarmente, se w_{NBI} representa os parâmetros de ponderação no NBI, o problema pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
& \underset{(x, D)}{\text{Min}} && -D \\
& \text{sujeito a:} && F(x) - \Phi_{w_{\text{NBI}}} - D\hat{n} = 0 \\
& && \bar{h} = 0
\end{aligned} \tag{2.37}$$

e parte da condição KKT para a otimalidade de $(x^*, D^*, \lambda^{(1)*}, \lambda^{(2)*})$ é:

$$\begin{aligned}
& \nabla_x F(x^*) \lambda^{(1)*} + \nabla_x \bar{h}(x^*) \lambda^{(2)*} = 0 \\
& -1 + \hat{n}^T \lambda^{(1)*} = 0
\end{aligned} \tag{2.38}$$

onde $\lambda^{(1)} \in \mathbb{R}^n$ representa o vetor dos multiplicadores correspondente à restrição $\Phi_{w_{\text{NBI}}} + D\hat{n} - F(x) = 0$, e $\lambda^{(2)} \in \mathbb{R}^{ne}$ representa os multiplicadores das restrições de igualdade $\bar{h}(x) = 0$.

Agora, suponha que $(x^*, D^*, \lambda^{(1)*}, \lambda^{(2)*})$ é a solução do NBI e $\sum_1^n \lambda_i^{(1)*} \neq 0$. Ao definirmos os componentes do vetor w_{sp} como:

$$w_{\text{sp}} = \frac{\lambda_i^{(1)*}}{\sum_1^n \lambda_i^{(1)*}} \tag{2.39}$$

o problema descrito na Equação 2.35 com o vetor de ponderação convexa descrito na Equação 2.39, tem como solução:

$$\left(x^*, \lambda^* = \frac{1}{\sum_1^n \lambda_i^{(1)*}} \lambda_i^{(2)*} \right) \tag{2.40}$$

Se ambos os lados da Equação 2.38 forem divididos pelo escalar $\sum_1^n \lambda_i^{(1)*}$, considerando que $\bar{h}(x) = 0$, tem-se a equivalência entre as Equações 2.36 e 2.38. Entretanto, se para qualquer i , o sinal de $\lambda_i^{(1)*}$ é oposto ao de $\sum_1^n \lambda_i^{(1)*}$, então o vetor w tem um componente negativo e não se qualifica como um peso para o problema de somas ponderadas. Nesse caso, ou a Pareto otimalidade do ponto $(x^*, D^*, \lambda^{(1)*}, \lambda^{(2)*})$ encontrado pelo NBI é questionável, ou o ponto Pareto ótimo se encontra em uma parte não-convexa do conjunto Pareto ótimo e não pode ser obtido pelo método de somas ponderadas.

Da mesma forma em que a análise apresentada fornece um w_{sp} para o problema de somas ponderadas, dada a solução correspondente no NBI, um ponto no NBI também pode

ser obtido, dada uma solução correspondente na soma ponderada. Para tanto, suponha que (x^*, λ^*) seja a solução para um problema de somas ponderadas e que $(\bar{w}_{\text{NBI}}, D^*)$ seja a solução do sistema linear:

$$\begin{aligned} \Phi w_{\text{NBI}} + D\hat{n} &= F(x) \\ \sum_{i=1}^n w_{\text{NBI}(i)} &= 1 \end{aligned} \quad (2.41)$$

então, (x^*, λ^*) corresponde à solução do NBI com $w_{\text{NBI}} = \bar{w}_{\text{NBI}}$, ou seja, a solução do NBI é:

$$\left(x^*, D^*, \lambda^{(1)*} = \frac{w_{\text{sp}}}{w_{\text{sp}}^T \hat{n}}, \lambda_i^{(2)*} = \frac{\lambda^*}{w_{\text{sp}}^T \hat{n}} \right) \quad (2.42)$$

Se ambos os lados da Equação 2.36 forem divididos por $w_{\text{sp}}^T \hat{n}$, considerando que $\bar{h}(x) = 0$, tem-se a equivalência entre as Equações 2.36 e 2.38. Isso sempre poderá ser feito porque w_{sp} tem componentes não negativos e \hat{n} tem componentes negativos, logo $w_{\text{sp}}^T \hat{n} < 0$. Além disso, observando que $\lambda_i^{(1)*}$ definido na Equação 2.42 satisfaz a $\hat{n}^T \lambda^{(1)*} = 1$, vê-se que as condições KKT para o NBI se mantêm.

Das e Dennis (1998) argumentam que uma desvantagem inerente aos métodos que buscam encontrar um grande número de pontos eficientes em problemas de otimização multiobjetivo é o fato de que estes não são capazes de encontrar pontos globalmente Pareto ótimos. Dessa forma, os pontos gerados pelo NBI são garantidos ser, somente, pontos localmente Pareto ótimos. Ainda assim, diante das características de robustez do NBI, mesmo ao se trabalhar com problemas não-convexos, este será o método utilizado para as análises do presente trabalho.

2.2 – MÉTODOS DE PONDERAÇÃO APLICADOS À OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO

Como mencionado anteriormente, durante o processo de otimização multiobjetivo, um grande número de soluções eficientes podem ser geradas formando a fronteira de Pareto. Devido à complexidade dos processos, que se refletem na formulação e resolução dos problemas matemáticos, a escolha do melhor ponto para ser implementado se torna uma tarefa nada trivial.

Ao atribuírem-se diferentes pesos às funções objetivo representativas das características dos processos que se deseja otimizar, considera-se a importância relativa de cada parâmetro dentro do processo analisado. Isso significa que pesos devem ser atribuídos às funções para indicar sua importância relativa com o intuito de identificar o que realmente importa durante o processo de otimização, elegendo-se, assim, prioridades (IBÁÑES-FORÉS *et al.*, 2014).

A prioridade atribuída aos critérios tem papel vital na obtenção dos resultados e deve ser aplicada com cuidado, uma vez que o resultado final pode variar significativamente, dependendo da importância atribuída a cada objetivo (TABOADA *et al.*, 2007; GAUDREAUULT *et al.*, 2009; PILAVACHI *et al.*, 2009). Isso pode ser um problema, pois, os decisores, frequentemente, não têm certeza sobre os pesos exatos das funções objetivo ou funções de utilidade a serem usados (TABOADA *et al.*, 2007).

Segundo Taboada *et al.* (2007), o conjunto Pareto inclui todas as escolhas racionais, dentre as quais o decisor tem que selecionar a solução final, comparando os diversos objetivos uns contra os outros. A busca é, então, não por uma solução ótima, mas por um conjunto de soluções que são ótimas, no sentido mais amplo, isto é, são Pareto ótimo. Existem várias técnicas para buscar no espaço de solução um conjunto de soluções Pareto ótimo. Possivelmente, a principal desvantagem destes métodos é que o decisor tem muitas soluções dentre as quais escolher. Assim, é necessário fazer a ponte entre as soluções únicas e os conjuntos Pareto ótimo (TABOADA *et al.*, 2007).

A falta de consenso ao se estipular um método de ponderação aceitável torna o processo ainda mais difícil. Isto ocorre devido ao número de métodos que podem ser aplicados e à grande diferença existente entre eles (IBÁÑES-FORÉS *et al.*, 2014).

O tema ponderação tem sido discutido na literatura por pelo menos 40 anos. Zeleny (1974, 1975) ao resolver um problema de otimização multiobjetivo linear, propõe-se a responder as seguintes perguntas: Qual das soluções extremas não-dominadas geradas é preferível? Pode o conjunto de soluções não-dominadas ser reduzido, de modo a consistir de poucos e suficientes pontos, para que a decisão final possa ser realizada? Para responder a tais questionamentos o autor usa o que ele chamou de "tradicional medida de entropia" como parâmetro para medir a importância das funções e definir os pesos a serem utilizados na solução do problema.

Wuwongse *et al.* (1983) propuseram uma abordagem para ajudar a determinar os parâmetros apropriados ao design de sistema de controle linear. No caso em que as especificações desejadas não são dadas explicitamente, essa abordagem usa um método de

otimização interativo para buscar os mais adequados pesos. A desvantagem desta proposta é que o decisor precisa fazer comparações pareadas das curvas de resposta em cada iteração, o que se torna um problema quando muitas iterações são necessárias.

Melachrinoudis (1985) determinou a localização ótima de uma unidade de trabalho indesejável dentro de um ambiente fabril. O autor definiu o problema como a seleção de uma localização, dentro de uma região convexa, que maximiza a mínima distância Euclidiana ponderada, com respeito a todas unidades de trabalho existentes, onde o grau de "indesejabilidade" entre uma unidade de trabalho existente e a nova indesejável entidade é refletida por meio de um fator de ponderação.

Saaty (1990) apresentou uma abordagem de tomada de decisão multicritério chamada *Analytic Hierarchy Process* (AHP), na qual fatores selecionados são agrupados em uma estrutura hierárquica que parte de um objetivo geral para os critérios, subcritérios e alternativas, em níveis sucessivos. Apesar de sua popularidade, esse método tem sido criticado por analistas de decisão. Alguns autores tem apontado que o método desenvolvido por Saaty não otimiza qualquer critério de performance (GRZYBOWSKI, 2012). Porém, segundo Promentilla *et al.* (2008), o *Analytic Network Process* (ANP), que é uma forma generalizada do AHP, tem se tornado uma ferramenta atrativa para entender mais do problema de decisões complexas, uma vez que esta abordagem supera a limitação da estrutura hierárquica linear do AHP.

Figueira *et al.* (2009) apresentaram um método para ranquear um conjunto finito de ações avaliadas em um conjunto finito de critérios. A GRIP (*Generalized Regression with Intensities of Preference*) baseia-se na informação indireta de preferência e no paradigma da regressão ordinal. Esse método pode ser comparado ao AHP, desde que, em ambos os métodos, o tomador de decisão é solicitado a expressar sua intensidade de preferência em termos qualitativo-ordinais. Entretanto, diferentemente do AHP, no GRIP as funções de valor marginais são, justamente, uma representação numérica da informação qualitativa-ordinal original. O princípio da comparação por pares também tem sido usado em modelos mais recentes, como um conjunto de regras de decisão de dominância induzidas por aproximações das relações de preferência compreensivas (SZELAĞ *et al.*, 2014).

Já Taboada *et al.* (2007) propuseram uma abordagem diferenciada. Em seu trabalho, os autores apresentaram duas alternativas para a redução do conjunto Pareto ótimo, a serem utilizadas no estágio de tomada de decisão. A primeira seria por um ordenamento das funções objetivo sem, no entanto, atribuir-lhes valores numéricos e a segunda seria pela utilização da

análise de *cluster* entre os pontos Pareto ótimo. Segundo os autores, ao reduzir-se o conjunto Pareto ótimo facilita-se o processo de tomada de decisão.

Com o passar do tempo, outros métodos para derivar os pesos de prioridade têm sido propostos na literatura, tais como, procedimento de média geométrica (WAN e DONG, 2015; WANG, 2015), métodos baseados em modelos de otimização restrita (GOMES *et al.*, 2013), métodos de tentativa e erro (SAVIER e DAS, 2011), métodos usando *grey decision* (LUO e WANG, 2012; ZHU e HIPEL, 2012; LUO, 2009), métodos usando a lógica *fuzzy* (HUANG *et al.*, 2006; WAN e DONG, 2015; WANG, 2015; RUBIO *et al.*, 2013; TRAN e TRAN, 2007) e métodos usando o *simulated annealing* (TRAN e TRAN, 2007; NARANG *et al.*, 2014).

Monghasemi *et al.* (2015), ao lidarem com a otimização multiobjetivo de problemas *trade-off* entre tempo, custo e qualidade em projetos de construção, usaram a entropia de Shannon (1948) para definir os pesos envolvidos no processo de otimização. De acordo com os autores, a entropia de Shannon pode prover uma avaliação mais confiável dos pesos relativos para os objetivos, na ausência de informações de preferência do tomador de decisão.

Recentemente, Shahhosseini *et al.* (2016), ao otimizar o processo de reforma a vapor do metano para a conversão sustentável deste gás, selecionaram o valor ótimo do processo usando LINMAP (*linear programming technique for multidimensional analysis of preference*), TOPSIS (*technique for order preference by similarity to an ideal solution*), entropia de Shannon e a lógica *fuzzy* como métodos de tomada de decisão, comparando o resultado final obtido com cada método.

Já Rocha *et al.* (2015a) e Rocha *et al.* (2015b), com o intuito de determinar o ponto Pareto ótimo preferível em um problema de otimização multiobjetivo de torneamento vertical, utilizaram o índice de entropia de Shannon (1948) associado a uma medida de erro. Essa mesma métrica foi utilizada em Rocha *et al.* (2016) para a otimização de um processo de torneamento do aço endurecido AISI H13. A métrica de ponderação baseada em entropia, ξ , proposta em Rocha *et al.* (2015a, 2015b) é obtida usando a equação:

$$\begin{aligned} \text{Max. } \xi &= \frac{\text{Entropia}}{\text{EPG}} \\ \text{sujeito a: } & \sum_{i=1}^n w_i = 1 \\ & 0 \leq w_i \leq 1 \end{aligned} \tag{2.43}$$

onde: w_i são os pesos atribuídos aos objetivos a serem otimizados; a entropia na Equação 2.43 é calculada como (SHANNON, 1948):

$$S(x) = -\sum_{i=1}^m w_i \ln w_i \quad (2.44)$$

e o EPG corresponde ao erro percentual global e pode ser calculado como:

$$\text{EPG} = \sum_{i=1}^m \left| \frac{y_i^* - T_i}{T_i} \right| \quad (2.45)$$

onde: y_i^* é o valor das respostas Pareto ótimas; T_i é o alvo definido; e m é o número de objetivos. Ao dividirmos o EPG pelo número de objetivos, m , chega-se ao MAPE (*mean absolute percent error*), conforme apresentado por Montgomery *et al.* (2008):

$$\text{MAPE} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left| \frac{y_i^* - T_i}{T_i} \right| \quad (2.46)$$

Wang *et al.* (2009), ao revisar os métodos de tomada de decisão multicritério aplicados à tomada de decisão em energia sustentável, classificaram os métodos de ponderação em dois grandes grupos: métodos de ponderação subjetivos e métodos de ponderação objetivos. Ponderação subjetiva é suportada por métodos baseados em julgamentos pessoais ou coletivos, geralmente produzidos por painéis de especialistas, método Delphi, comparação pareada, ambos em sua forma original ou incorporada ao AHP ou ao ANP, entre outros (IBÁÑES-FORÉS *et al.*, 2014). Em contraste, métodos de ponderação objetivos estabelecem prioridades de acordo com valores quantitativos, obtidos, principalmente, pela aplicação de modelos estatísticos ou procedimentos que implicitamente calculam os pesos dos critérios. O principal representante desta categoria é o método de entropia apresentado em Zeleny (1974, 1975). Ibáñez-Forés *et al.* (2014), ainda determinam duas outras categorias, ponderação igualmente distribuída e ponderação aleatória, sendo que esta última envolve analisar os resultados sob todas as possíveis combinações de pesos que podem ser atribuídas a cada critério em estudo, normalmente pela utilização de alguma técnica de simulação.

Utilizando-se estas categorias, realizou-se uma revisão teórica, resumida na forma do Quadro 2.1.

Quadro 2.1 – Revisão dos métodos de ponderação utilizados na literatura (Parte I)

Autores	Ponderação igualmente distribuída	Definição de prioridades							Ponderação aleatória
		Subjetivo					Objetivo		
		Atribuição direta	Painel de especialistas	ANP	AHP	Métodos <i>fuzzy</i>	Entropia	Índice de Capabilidade	
Zeleny (1974)							x		
Zeleny (1975)							x		
Wuwongse <i>et al.</i> (1983)								x	
Melachrinoudis (1985)		x							
Saaty (1990)					x				
Bonano <i>et al.</i> (2000)					x				
Dijkmans (2000)	x								
Geldermann e Rentz (2001)			x			x			
Halog <i>et al.</i> (2001)			x						
Prabhu e Vizayakumar (2001)					x	x			
Vignes (2001)	x								
Derden <i>et al.</i> (2002)	x								
Beccali <i>et al.</i> (2003)			x						
Afgan e Carvalho (2004)								x	
Cziner <i>et al.</i> (2005)					x				
Sadiq <i>et al.</i> (2005)					x	x			
Chowdhury e Husain (2006)					x		x		
Critto <i>et al.</i> (2006)					x				
Doukas <i>et al.</i> (2006)			x						
Huang <i>et al.</i> (2006)						x			
Khelifi <i>et al.</i> (2006)			x						
Pilavachi <i>et al.</i> (2006)								x	
Shehabuddeen <i>et al.</i> (2006)			x						
Begic e Afgan (2007)								x	
Fijal (2007)	x								
Grandinetti <i>et al.</i> (2007)	x								
Krajnc <i>et al.</i> (2007)						x			
Mavrotas <i>et al.</i> (2007)	x								
Taboada <i>et al.</i> (2007)		x							
Tran e Tran (2007)						x		x	
Zeng <i>et al.</i> (2007)					x				
Bollinger e Pictet (2008)			x						
Georgopoulou <i>et al.</i> (2008)	x								
Promentilla <i>et al.</i> (2008)				x					
Schollenberger <i>et al.</i> (2008)	x								
Bréchet e Tulkens (2009)	x								
Cavallaro (2009)		x							
Daim e Intarode (2009)					x				
Gaudreault <i>et al.</i> (2009)		x							
Gómez-López <i>et al.</i> (2009)			x						
Karagiannidis e Perkoulidis (2009)			x						
Karavanas <i>et al.</i> (2009)	x								
Luo (2009)			x		x				
Paiva <i>et al.</i> (2009)	x								

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Quadro 2.1 – Revisão dos métodos de ponderação utilizados na literatura (Parte II)

Autores	Ponderação igualmente distribuída	Definição de prioridades							
		Subjetivo				Objetivo		Ponderação aleatória	
		Atribuição direta	Painel de especialistas	ANP	AHP	Métodos <i>fuzzy</i>	Entropia		Índice de Capabilidade
Pilavachi <i>et al.</i> (2009)			x						
Yang <i>et al.</i> (2009)			x						
Kazagić <i>et al.</i> (2010)	x								
Lin e Shen (2010)					x	x			
Bottero <i>et al.</i> (2011)				x	x				
García e Caballero (2011)	x								
Inoue e Katayama (2011)	x								
San Cristóbal (2011)	x								
Savier e Das (2011)									x
Cristóbal <i>et al.</i> (2012)	x								
De Lange <i>et al.</i> (2012)					x				
Giner-Santonja <i>et al.</i> (2012)				x	x				
Liu e Wen (2012)	x								
Luo e Wang (2012)			x		x				
Severino <i>et al.</i> (2012)		x							
Yu <i>et al.</i> (2012)			x						
Zhu e Hipel (2012)		x				x			
Gomes <i>et al.</i> (2013)		x							
Rubio <i>et al.</i> (2013)						x			
Narang <i>et al.</i> (2014)									x
Shahraki e Noorossana (2014)								x	
Szeląg <i>et al.</i> (2014)						x			
Hein <i>et al.</i> (2015)							x		
Monghasemi <i>et al.</i> (2015)							x		
Rocha <i>et al.</i> (2015a)							x		
Rocha <i>et al.</i> (2015b)							x		
Wan e Dong (2015)						x			
Wang (2015)						x			
Shahhosseini <i>et al.</i> (2016)						x	x		
Rocha <i>et al.</i> (2016)							x		
Howard e Kamper (2016)		x							
Prakash e Barua (2016)					x	x			

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base no Quadro 2.1, percebe-se a dimensão do tema que, mesmo depois de mais de 40 anos de pesquisa, ainda continua sendo relevante. As aplicações encontradas são as mais diversas: setor energético, avaliação de tecnologias aplicadas à sustentabilidade, indústria química, processos de usinagem, avaliação de professores, avaliação da qualidade de serviços aeroportuários, entre outros. É importante ressaltar que, apesar do esforço depreendido para a execução de tal tarefa, não há a intenção de esgotar o tema, principalmente devido às diversas aplicabilidades do tema ponderação. Muitos trabalhos foram incluídos,

apesar de não apresentarem uma discussão a respeito da ponderação, devido ao fato de terem utilizado explicitamente alguns dos métodos citados.

Dentre os trabalhos apresentados, somente Shahraki e Noorossana (2014) se propuseram a avaliar algum parâmetro de variabilidade ao selecionar a melhor solução Pareto ótima. Os autores usam dois critérios para realizar tal seleção: a sensibilidade aos níveis de confiabilidade e o índice de capacidade do processo.

A intenção do presente trabalho de estudar como a ponderação de funções em otimização multiobjetivo afeta a variância da previsão coaduna-se ao fato de apenas este trabalho ter apresentado uma discussão similar.

2.3 – ENTROPIA

A história da palavra "entropia" pode ser delimitada voltando a 1865, quando o físico alemão Rudolf Clausius tentou dar um novo nome à irreversível perda de calor, o que ele previamente chamou de "valor-equivalente" (ZHOU *et al.*, 2013). A palavra foi escolhida, pois, em grego "en+tropia" significa "conteúdo transformativo", ou simplesmente, transformação (BAIERLEIN, 1992). Segundo Pineda (2006), o conceito físico de entropia está relacionado, tanto ao estado de desorganização da matéria, como à tendência de desorganização de toda a matéria, desempenhando um importante papel na termodinâmica onde se afirma que, em um sistema fechado, a entropia nunca diminui, ou seja, seu grau de desorganização pode aumentar mas jamais diminuir. Esse conceito também ajuda a medir a quantidade de ordem e desordem, ou caos (ZHOU *et al.*, 2013).

A palavra entropia pertenceu ao domínio da física até 1948 quando Claude Shannon, enquanto desenvolvendo sua teoria da comunicação, usou o termo para representar uma medida de informação. Shannon buscava uma palavra para descrever sua nova medida de incerteza. A partir desse momento, o conceito de entropia de Shannon tem sido inserido em uma enorme gama de disciplinas, tais como, mecânica, estatística, finanças, transporte, planejamento urbano, teoria da fila, teoria da informação e programação linear e não-linear (FANG *et al.*, 1997).

Essencialmente, a entropia mede o grau de incerteza associada com a distribuição de probabilidade. Assumindo que o conjunto de potenciais resultados de um experimento aleatório é o conjunto $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ e que a distribuição de probabilidade definida em X seja $P = \{p_1, \dots, p_n\}$, com $p_i \in [0, 1]$ e $\sum_i p_i = 1$, uma medida de entropia somente assumiria seu máximo valor quando todos os resultados no espaço são igualmente prováveis, ou seja,

$p_i = 1/n$ para todo i . Dessa maneira, dentre todas as possíveis distribuições de probabilidade, a distribuição uniforme é a que tem a maior incerteza, logo o maior valor para entropia (FANG *et al.*, 1997).

Shannon (1948) propôs alguns axiomas aos quais qualquer medida de incerteza deveria satisfazer: 1. a entropia deveria depender de todos os p_i , $i = 1, 2, \dots, n$; 2. a entropia deveria ser uma função contínua de p_i , $i = 1, 2, \dots, n$; 3. a entropia deveria ser simétrica, de modo que se os p_i , $i = 1, 2, \dots, n$, são meramente permutados, a entropia deveria permanecer a mesma; e 4. a entropia deveria ser uma função monotonicamente crescente de n , ou seja, quanto maior o número de elementos igualmente prováveis, maior a incerteza.

Segundo Zhou *et al.* (2013), quando lidando com distribuições contínuas de probabilidade, a função densidade é avaliada em todos os valores do argumento. Assim, dada uma distribuição contínua de probabilidade com uma função densidade $f(x)$, pode-se definir sua entropia como:

$$S(x) = - \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \ln f(x) dx \quad (2.47)$$

onde: $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$ e $f(x) \geq 0$.

Uma vez que os pesos utilizados na ponderação de funções em otimização multiobjetivo são proporções, $f(x)$ segue uma distribuição discreta de probabilidade. Assim, a Equação 2.47 torna-se (SHANNON, 1948):

$$S(x) = - \sum_{i=1}^m w_i \ln w_i \quad (2.48)$$

onde: w_i são os pesos atribuídos aos objetivos a serem otimizados.

Shannon (1948) provou que, para a medida de entropia ser contínua, monotonicamente crescente em n e com valor máximo para eventos equiprováveis, tal grandeza deveria ser da forma da Equação 2.48. O índice apresentado na Equação 2.48 é também conhecido por índice de entropia de Shannon-Weiner (STIRLING, 1994).

Entre as muitas propriedades desejáveis do índice de entropia de Shannon, pode-se destacar: 1. a entropia de uma distribuição de probabilidade representando um resultado completamente certo é 0, e a entropia de qualquer distribuição de probabilidade representando

resultados incertos é positiva; 2. sua medida é côncava. A Propriedade 1 é desejável, pois, o índice de entropia garante soluções não-nulas. A propriedade 2 é desejável, pois, é muito mais fácil maximizar uma função côncava do que uma não-côncava (FANG *et al.*, 1997). A Figura 2.6 apresenta essas propriedades da entropia, conforme calculado pela Equação 2.48.

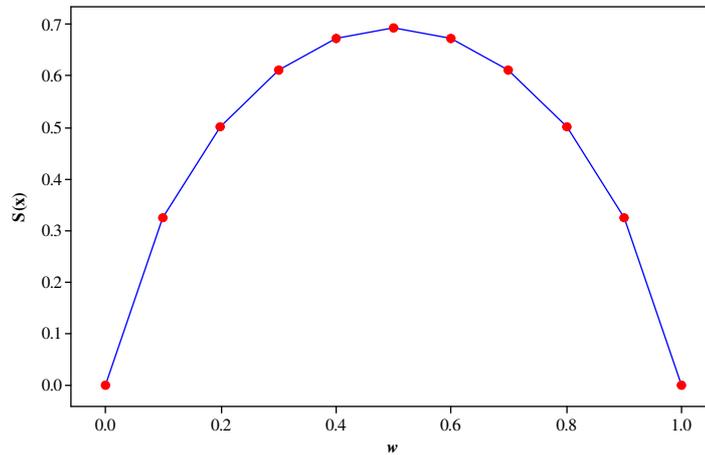


Figura 2.6 – Entropia no caso de duas possibilidades.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Note que, maiores valores de entropia indicam mais aleatoriedade, ou seja, menos informação é expressa.

2.4 – DIVERSIDADE

Segundo Stirling (1994), nossas ações são permeadas de ausência de certeza advinda de várias fontes como conhecimento incompleto, informação contraditória, variabilidade dos dados, imprecisão conceitual, diferentes pontos de referência e inerente indeterminância de muitos processos naturais ou sociais.

Na tentativa de tratar do assunto, surge a teoria da probabilidade. Classicamente, uma probabilidade pode ser atribuída a cada conjunto de possíveis eventos futuros, com base na frequência de ocorrência de eventos passados similares, sob condições comparáveis, sendo, assim, em algum senso objetivo. Porém, graças à deficiência nas informações, esse procedimento tende a ser vulnerável a erro, viés inconsciente ou manipulação (STIRLING, 1994).

De todas as estratégias desenvolvidas para lidar com a ausência de certeza, a melhor é a diversificação. Como já demonstrado, a incerteza depende do número de possíveis resultados em determinado processo, $X = \{x_1, \dots, x_n\}$, e da probabilidade de ocorrência desses resultados, $P = \{p_1, \dots, p_n\}$. Assim, uma forma de lidar com a incerteza seria considerar todas as n possibilidades de resultado, o que levaria à diversificação. Entretanto, o comportamento

dos resultados e suas respectivas probabilidades de ocorrência não são iguais, o que torna complexo o processo de diversificação. Refletindo essa complexidade, os conceitos de diversidade empregados em vários campos da ciência apresentam a combinação de três propriedades, variedade, balanço e disparidade, sendo cada uma delas uma característica necessária, porém, insuficiente da diversidade (STIRLING, 1994).

Segundo Stirling (2007), variedade é o número de categoria nos quais os elementos do sistema são divididos. É a resposta para a pergunta: "Quantos tipos de coisas nós temos?". Considerando-se fixos os outros parâmetros, quanto maior a variedade, maior a diversidade.

Balanço é uma função do padrão de divisão dos elementos por meio das categorias. É a resposta para a pergunta: "Quanto de cada tipo de coisa nós temos?". Considerando-se fixos os outros parâmetros, quanto mais uniforme é o balanço, maior é a diversidade.

Já a disparidade refere-se à maneira e grau em que os elementos podem ser distinguidos. É a resposta para a pergunta: "Quão diferentes de cada outro são os tipos de coisas que nós temos?". Normalmente, baseia-se em alguma medida de distância. Considerando-se fixos os outros parâmetros, quanto mais díspares são os elementos representados, maior é a diversidade.

Stirling (2007) cita dez desejáveis características de uma heurística geral de diversidade (Δ):

- Escala da variedade: onde variedade é igual a 1, Δ tem o valor de zero.
- Monotonicidade da variedade: onde os elementos são uniformemente balanceados e igualmente díspares, Δ aumenta monotonicamente com a variedade.
- Monotonicidade do balanço: para uma dada variedade e disparidade, Δ aumenta monotonicamente com o balanço, ou seja, Δ é máxima quando a distribuição entre os elementos é uniforme.
- Monotonicidade da disparidade: para uma dada variedade e balanço, Δ aumenta monotonicamente com a disparidade agregada entre os elementos.
- Escala da disparidade: onde a disparidade agregada é zero, isto é, todos os elementos são efetivamente idênticos, Δ assume o valor de zero.
- Acomodação aberta: Δ acomoda, simetricamente, qualquer perspectiva em dimensões de diferença sob a qual os elementos podem ser diferenciados.
- Insensibilidade à categorização: para qualquer dada perspectiva em taxonomia, Δ é insensível a categorizações alternativas dos elementos.

- Parcimônia de forma: Δ é tão descomplicado em estrutura e parcimonioso em forma quanto o necessário para atender às condições anteriores.
- Agregação explícita: Δ permite explícita agregação de variedade, balanço e disparidade, por refletir contextos ou perspectivas divergentes usando ponderações.
- Pronta articulação: Δ permite irrestritas articulações de diversidade com outras propriedades, do sistema como um todo ou de seus elementos individuais.

De acordo com Stirling (2007), nenhum índice estabelecido até então satisfazia a todos esses critérios. Para subsidiar essa afirmação, o autor faz um resumo dos índices de medida de diversidade e de suas propriedades.

O índice mais simples e que engloba a variedade é o próprio número de categorias dos elementos, expresso por N (MACARTHUR, 1965). O índice de uniformidade de Shannon, apresentado por Pielou (1969), engloba o balanço e pode ser expresso por:

$$U = -\sum_i \frac{w_i \ln w_i}{\ln N} \quad (2.49)$$

onde: w_i são os pesos envolvidos na ponderação e N o número de categorias dos elementos.

O índice de Shannon (1948), conforme apresentado na Equação 2.48, segundo Stirling (2007), engloba somente as dimensões de variedade e balanço.

Tratando da dimensão disparidade, Solow e Polasky (1994) propuseram a seguinte formulação:

$$f(d_{ij}) = \text{Max}_{i \in S} \{D_w(Si) + d_w(i, Si)\} \quad (2.50)$$

onde: d_{ij} é a disparidade entre dois elementos; $D_w(Si)$ é a disparidade agregada do sistema S ; $d_w(i, Si)$ é a distância de disparidade entre o elemento i e o ponto mais próximo em S .

Assim, Stirling (2007) propôs uma formulação que contemplasse variedade, balanço e disparidade:

$$\Delta = \sum_{ij(i \neq j)} d_{ij}^\alpha (w_i w_j)^\beta \quad (2.51)$$

onde: d_{ij} é a disparidade entre dois elementos; w são os pesos representando a proporção dos elementos i e j ; α e β são termos para se quantificar o grau de importância entre a disparidade e o balanço.

De acordo com Stirling (2007) o caso de referência é aquele que considera $\alpha = \beta = 1$, sendo que neste caso a equação funciona como a medida de Shannon, porém, com a característica adicional de capturar a disparidade.

A disparidade (d_{ij}), como já mencionado, mede o quão diferentes são os objetos analisados. Para tanto, duas medidas são mais amplamente utilizadas: medidas de correlação e medidas de distância.

O método usualmente conhecido para medir a correlação entre duas variáveis é o coeficiente linear de Pearson e pode ser calculado como:

$$\rho = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})(X_i - \bar{X})}{\left[\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 \right]^{1/2}} \quad (2.52)$$

onde σ_{XY} corresponde à covariância entre X e Y ; σ_X corresponde ao desvio-padrão de X ; e σ_Y corresponde ao desvio-padrão de Y .

Altas correlações positivas indicam similaridade e altas correlações negativas indicam disparidade. Dessa forma d_{ij} pode ser definida por: $d_{ij} = 1 - \rho_{ij}$.

Já a medida de distância mais comumente reconhecida é a distância Euclidiana. Essencialmente, a distância Euclidiana é a medida do comprimento de uma linha reta desenhada entre dois objetos quando representada graficamente. Assim, quanto maior a distância entre dois objetos, mais díspares eles são. O cálculo de d_{ij} utilizando uma medida de distância, no contexto da otimização multiobjetivo, pode ser realizado utilizando a distância Euclidiana entre os pontos de ancoragem, ou seja, os pontos que otimizam cada resposta individualmente, sendo calculado como segue:

$$d_{ij} = \sqrt{\left[x_{1_{f_i(x)}}^* - x_{1_{f_j(x)}}^* \right]^2 + \left[x_{2_{f_i(x)}}^* - x_{2_{f_j(x)}}^* \right]^2 + \dots + \left[x_{n_{f_i(x)}}^* - x_{n_{f_j(x)}}^* \right]^2} \quad (2.53)$$

onde: $x_1, x_2 \dots x_n$ são as variáveis de decisão do problema; e $f_i(x)$ e $f_j(x)$ são as funções objetivo.

2.5 – MÉTODOS ESTATÍSTICOS PARA MODELAGEM E ANÁLISE DE PROCESSOS

Existem inúmeros processos industriais, cada um com sua peculiaridade. Na maioria dos casos, dada sua complexidade, não se sabe exatamente, como se dá a influência das variáveis no resultado dos parâmetros do processo, como custo, qualidade e produtividade. De fato, para a maioria dos processos industriais, os relacionamentos matemáticos entre suas variáveis dependentes e independentes são desconhecidos.

Visando obter essas informações, faz-se necessário projetar e executar experimentos, coletar os dados e analisá-los. A experimentação se torna cada vez mais importante à indústria, uma vez que a complexidade dos problemas inerentes ao processo cresce constantemente, graças às inúmeras exigências governamentais, dos consumidores e dos acionistas.

2.5.1 – Projeto e Análise de Experimentos

De acordo com Montgomery (2009), um experimento pode ser definido como um teste ou uma série de testes em que mudanças propositalmente são feitas nas variáveis de entrada de um processo, com o objetivo de observar a forma como as respostas são afetadas pelas mudanças provocadas. O Projeto e Análise de Experimentos (*Design of Experiments – DOE*) é, então, definido como o processo de planejamento dos experimentos para que dados apropriados sejam coletados e depois analisados por métodos estatísticos, resultando em conclusões válidas e objetivas.

Em geral, experimentos são usados para estudar a performance de processos e sistemas, conforme apresentado na Figura 2.7.

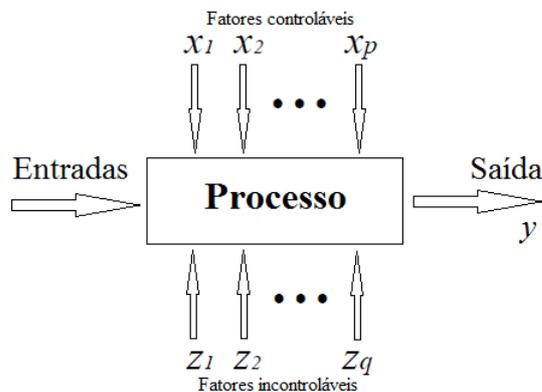


Figura 2.7 – Modelo geral de um processo.
Fonte: modificado de Montgomery (2009).

Normalmente, o processo pode ser visualizado como uma combinação de máquinas, métodos, pessoas e outros recursos que transformam algumas entradas em uma saída que tem uma ou mais respostas observáveis. Algumas das variáveis de processos x_1, x_2, \dots, x_p são controláveis, enquanto outras variáveis z_1, z_2, \dots, z_q são incontroláveis, embora estas possam ser controláveis para o propósito de um teste. Os objetivos do experimento podem incluir o seguinte: 1. determinar quais as variáveis são as mais influentes na resposta y ; 2. determinar como ajustar os valores de x para que y permaneça quase sempre próximo do valor nominal desejado; 3. determinar como ajustar os valores de x para que a variabilidade de y seja pequena; 4. determinar como ajustar os valores de x para que os efeitos das variáveis incontroláveis sejam minimizados.

Como apresentado, experimentos envolvem muitos fatores e, normalmente, um objetivo do analista é determinar a influência que esses fatores têm na resposta de interesse. A abordagem geral para planejar e conduzir o experimento é chamado de estratégia de experimentação. Existem muitas estratégias que um analista poderia usar. Uma abordagem poderia, por exemplo, envolver uma combinação arbitrária dos fatores envolvidos no problema, testá-los e analisar os resultados, alterando os níveis dos fatores para o próximo teste baseado nos resultados do teste atual. Essa abordagem de tentativa e erro, apesar de ser frequentemente utilizada na prática, apresenta algumas desvantagens como, por exemplo, o fato de que a experimentação pode continuar indefinidamente, sem garantia de sucesso e que, mesmo na presença de um resultado satisfatório, não há garantia de que a melhor solução foi encontrada.

Outra estratégia de experimentação que é usada na prática é a abordagem de um fator por vez. Esse método consiste em selecionar um ponto de partida e então, sucessivamente, variar cada fator em sua amplitude com os outros fatores mantidos constantes. A maior desvantagem dessa abordagem é que ela falha em considerar qualquer interação entre os fatores.

A correta abordagem para lidar com muitos fatores é conduzir um experimento fatorial. Nessa abordagem, os fatores são variados juntos ao invés de um por vez. O arranjo experimental oriundo deste método permite ao analista investigar os efeitos individuais de cada fator e determinar se os fatores interagem. Uma característica importante dos arranjos fatoriais é que estes permitem o uso mais eficiente dos dados experimentais. Entretanto, se o intuito é determinar a região em que os fatores levam para a melhor resposta possível, ou seja, se o objetivo é otimizar a resposta, um outro arranjo experimental deve ser executado, cujo

objetivo é desenvolver um modelo empírico do processo para obter uma estimativa mais precisa das condições ótimas de operação. Segundo Montgomery (2009), essa abordagem para otimização do processo é chamada de metodologia de superfície de resposta.

Ainda, segundo Montgomery (2009), os três princípios básicos do planejamento de experimentos são: aleatorização, replicação e blocagem.

A aleatorização é o pilar básico subjacente ao uso de métodos estatísticos em arranjos experimentais. Métodos estatísticos requerem que as observações ou erros sejam variáveis aleatórias independentemente distribuídas. A aleatorização normalmente mantém essa suposição válida, consistindo na execução dos experimentos em ordem aleatória para que os efeitos desconhecidos dos fenômenos sejam distribuídos entre os fatores.

A replicação é a repetição de um mesmo teste várias vezes, criando uma variação na resposta. A replicação tem duas importantes propriedades. Primeiro, a execução de réplicas permite ao analista obter uma estimativa do erro experimental. Essa estimativa do erro se torna a unidade básica de medida para determinar se as diferenças observadas nos dados são realmente estatisticamente diferentes. Segundo, se a média amostral é usada para estimar o efeito de um fator no experimento, a replicação permite ao analista obter uma estimativa mais precisa deste efeito.

A blocagem é uma técnica usada para melhorar a precisão com a qual comparações entre os fatores de interesse são feitas, sendo frequentemente utilizada para reduzir ou eliminar a variabilidade transmitida pelos fatores de ruído, ou seja, fatores que podem influenciar na resposta experimental mas nos quais não se está diretamente interessado. Geralmente um bloco é um conjunto de condições experimentais relativamente homogêneo, de modo que cada nível do fator de ruído se torna um bloco. Desta forma, o analista divide as observações do arranjo estatístico em grupos que são executados em cada bloco. A blocagem deve ser utilizada quando não for possível manter a homogeneidade das condições experimentais. Esta técnica permite avaliar se a falta de homogeneidade interfere nos resultados.

Com relação às suas etapas, o DOE é dividido em: 1. Reconhecimento e declaração do problema; 2. Escolha de fatores, níveis e variações; 3. Seleção da variável de resposta; 4. Escolha do design experimental; 5. Execução do experimento; 6. Análise estatística dos dados; 7. Conclusões e recomendações.

Por fim, segundo Montgomery (2009), as técnicas mais utilizadas de projetos e análise de experimentos compreendem o planejamento fatorial completo, o planejamento fatorial fracionado, os arranjos de Taguchi, a metodologia de superfície de resposta e os experimentos

por arranjo de misturas. No presente trabalho, a metodologia de superfície de resposta e os experimentos por arranjo de misturas serão as técnicas abordadas.

2.5.1.1 – Metodologia de Superfície de Resposta

A Metodologia de Superfície de Resposta (*Response Surface Methodology* - RSM) é uma coleção de ferramentas matemáticas e estatísticas, utilizada para a modelagem e análise de problemas em que as respostas de interesse são influenciadas por diversas variáveis e o objetivo é a otimização destas respostas (MONTGOMERY, 2009).

Considerando que, para a maioria dos processos industriais, as relações entre as respostas e as variáveis independentes são desconhecidas, busca-se, então, encontrar uma aproximação adequada para representar as respostas de interesse como função destas variáveis. Geralmente, funções polinomiais são empregadas para descrever tais relações. Dessa forma, se uma resposta for bem modelada por uma função linear, a relação aproximada pode ser representada pelo seguinte modelo de primeira ordem (MONTGOMERY, 2009):

$$y(x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon_i = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon_i \quad (2.54)$$

onde: $y(x)$ é a resposta de interesse; x_i são as variáveis independentes; β_i são os coeficientes a serem estimados; k é o número de variáveis independentes; ε_i é o erro experimental.

Se a resposta apresentar curvatura, então um polinômio de maior grau deve ser usado, como o modelo de segunda ordem:

$$y(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon_i \quad (2.55)$$

Quase todos os problemas de superfície de resposta utilizam um ou ambos os modelos apresentados e, apesar de ser improvável que o modelo polinomial se comporte como uma aproximação adequada para todo o espaço experimental coberto pelas variáveis independentes, para uma região específica, tais modelos têm se mostrado eficientes (MONTGOMERY, 2009).

Como um dos objetivos da RSM consiste na otimização das respostas, recomenda-se, sempre que possível, representá-las por meio dos modelos de segunda ordem, já que a curvatura apresentada por estes, define a localização de um ponto estacionário. Portanto,

quando a resposta de interesse apresentar um comportamento linear, devem-se utilizar das informações do modelo de primeira ordem para buscar a região de curvatura, utilizando-se, para isso, o método do vetor gradiente (*steepest descent/ascent*) (MONTGOMERY, 2009).

Para se ajustar um modelo de segunda ordem o design experimental deve possuir algumas propriedades. Como o modelo da Equação 2.55 contém $1+2k+k(k-1)/2$ parâmetros, o design experimental deve possuir, no mínimo, este número de pontos distintos e ao menos três níveis para cada variável ou fator. Entretanto, segundo Myers *et al.* (2009), essas propriedades representam as condições mínimas, sendo que as características desejáveis de um design de superfície de resposta são: 1. o design ou arranjo deve resultar em um bom ajuste do modelo aos dados; 2. deve prover suficiente informação que permita um teste de ausência de ajuste; 3. deve permitir que modelos de maior ordem sejam construídos sequencialmente; 4. deve prover uma estimativa do erro experimental puro; 5. deve ser insensível à presença de valores atípicos nos dados; 6. deve ser insensível aos erros no controle dos níveis do design; 7. deve visar a eficiência em custo; 8. deve permitir blocagem; 9. deve permitir que a suposição de homogeneidade da variância seja averiguada; e 10. deve fornecer uma boa distribuição de $\text{Var}[\hat{y}(x)]/\sigma^2$. É importante notar que nem todas as propriedades mencionadas são requeridas em cada aplicação da RSM.

Em muitos casos, ao se trabalhar com a RSM, é conveniente transformar as variáveis do problema em variáveis codificadas (*coded variables*). As variáveis codificadas são definidas como sendo variáveis adimensionais, com média zero e mesmo desvio-padrão. O seguinte esquema de codificação pode ser usado (MYERS *et al.*, 2009):

$$X_{\text{codificado}} = \frac{X_{\text{decodificado}} - (Hi + Lo)/2}{(Hi - Lo)/2} \quad (2.56)$$

onde: *Hi* equivale ao valor para a variável de decisão relativo ao nível +1; e *Lo* equivale ao valor para a variável de decisão relativo ao nível -1.

De maneira semelhante, se houver o intuito de converter os valores codificados em valores decodificados (*uncoded*) basta resolver:

$$X_{\text{decodificado}} = \frac{Hi + Lo}{2} + X_{\text{codificado}} \frac{Hi - Lo}{2} \quad (2.57)$$

A estimação dos coeficientes definidos pelos modelos das Equações 2.54 e 2.55 é tipicamente feita com a utilização do método dos Mínimos Quadrados Ordinários (*Ordinary Least Squares – OLS*). O método dos mínimos quadrados baseia-se na escolha de valores para β_i , de modo que a soma dos quadrados dos erros seja minimizada. A função de mínimos quadrados pode ser escrita como (MYERS *et al.*, 2009):

$$L = \sum_{i=1}^k \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^k \left(y_i - \beta_0 - \sum_{i=1}^k \beta_i x_i \right)^2 \quad (2.58)$$

Em notação matricial a Equação 2.54 pode ser escrita como:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.59)$$

onde:

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}, \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \quad (2.60)$$

Dessa forma, L pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} L &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \end{aligned} \quad (2.61)$$

desde que $\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ seja uma matriz 1x1, ou uma escalar, e sua transposta $(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y})^T = \mathbf{y}^T \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ seja a mesma escalar. Os estimadores de mínimos quadrados devem satisfazer a:

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2\mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = 0 \quad (2.62)$$

que pode ser simplificado a:

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (2.63)$$

A Equação 2.63 representa o conjunto das equações normais de mínimos quadrados na forma matricial. Multiplicando-se ambos os lados da Equação 2.63 pela inversa de $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ tem-se:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (2.64)$$

Com isso, fica construída a função aproximada que relaciona a resposta de interesse com as variáveis do processo, isto é, como a verdadeira 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 (MONTGOMERY, 2009).

Usando o estimador dos mínimos quadrados $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, o vetor de valores ajustados, $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$, pode ser escrito como:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{y} \quad (2.65)$$

onde $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$, é uma matriz simétrica chamada de matriz chapéu, pois transforma \mathbf{y} em $\hat{\mathbf{y}}$, ou matriz de projeção, pois projeta \mathbf{y} perpendicularmente em $\hat{\mathbf{y}}$.

Como o estimador dos mínimos quadrados $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ é uma combinação linear das observações, este é normalmente distribuído com vetor de média $\boldsymbol{\beta}$ e matriz de covariância $\sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$.

As estimativas das variâncias desses coeficientes de regressão são obtidas trocando σ^2 por uma estimativa. Quando σ^2 for trocado por sua estimativa $\hat{\sigma}^2$, a raiz quadrada da variância estimada do j -ésimo coeficiente de regressão é chamada de erro-padrão estimado de $\hat{\beta}_j$ ou $se(\hat{\beta}_j) = \sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}$.

As hipóteses para testar a significância de qualquer coeficiente de regressão individual são $H_0 : \beta_j = 0$ e $H_1 : \beta_j \neq 0$, e a estatística para essas hipóteses é:

$$\frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}}, \quad j = 0, 1, \dots, k \quad (2.66)$$

sendo esta distribuída como t com $n-p$ graus de liberdade, onde n é o número de experimentos, p é igual ao número de regressores (k) mais um, C_{jj} é o jj -ésimo elemento da matriz $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$, e $\hat{\sigma}^2$ é o estimador do erro de variância, obtido da equação:

$$\hat{\sigma}^2 = MS_E = \frac{SS_E}{n-p} \quad (2.67)$$

onde MS_E é a média quadrática do resíduo e SS_E representa a soma do quadrado dos resíduos e é dada por:

$$SS_E = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (2.68)$$

Por isso, um intervalo de confiança de $100(1-\alpha)\%$ para o coeficiente de regressão β_j , $j = 0, 1, \dots, k$, é dado por:

$$\hat{\beta}_j - t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}} \leq \beta_j \leq \hat{\beta}_j + t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}} \quad (2.69)$$

Note que esse intervalo de confiança pode ser escrito em função do erro padrão do coeficiente de regressão $se(\hat{\beta}_j)$ como:

$$\hat{\beta}_j - t_{\alpha/2, n-p} se(\hat{\beta}_j) \leq \beta_j \leq \hat{\beta}_j + t_{\alpha/2, n-p} se(\hat{\beta}_j) \quad (2.70)$$

porque $se(\hat{\beta}_j) = \sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}$.

Pode-se, também, obter um intervalo de confiança para a resposta média em um ponto particular $\mathbf{x}_0^T = [1 \ x_{01} \ x_{02} \ \dots \ x_{0k}]$. A resposta média neste ponto é dada por: $\mu_{y|\mathbf{x}_0} = \mathbf{x}_0^T \boldsymbol{\beta}$ e a resposta média estimada neste ponto é dada por: $\hat{y}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0^T \hat{\boldsymbol{\beta}}$. Este estimador é não-enviesado, pois, $E[\hat{y}(\mathbf{x}_0)] = E(\mathbf{x}_0^T \hat{\boldsymbol{\beta}}) = \mathbf{x}_0^T \boldsymbol{\beta} = \mu_{y|\mathbf{x}_0}$, e a variância de $\hat{y}(\mathbf{x}_0)$ é:

$$\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x}_0)] = \sigma^2 \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0 \quad (2.71)$$

Por isso, um intervalo de confiança de $100(1-\alpha)\%$ para a resposta média em um ponto particular $\mathbf{x}_0^T = [1 \ x_{01} \ x_{02} \ \dots \ x_{0k}]$ é:

$$\hat{y}(\mathbf{x}_0) - t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0} \leq \mu_{y|\mathbf{x}_0} \leq \hat{y}(\mathbf{x}_0) + t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0} \quad (2.72)$$

A função de variância descrita na Equação 2.71 é, com certeza, importante, tanto do ponto de vista das respostas, que devem ter reduzidos valores de variância para serem confiáveis, quanto do ponto de vista do planejamento dos experimentos, onde se utiliza como critério de otimalidade para definição de arranjos a matriz $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$.

Após a construção do modelo, a significância estatística do mesmo deve ser verificada por meio de um procedimento de Análise de Variância (*Analysis of Variance* - ANOVA), que, além da sua significância como um todo, permite também verificar quais entre os termos do modelo são significativos e quais podem ser negligenciados. As hipóteses apropriadas são:

$$\begin{aligned} H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_k = 0 \\ H_1 : \beta_j \neq 0 \text{ para no mínimo um } j \end{aligned} \quad (2.73)$$

A rejeição da hipótese nula implica que no mínimo uma das variáveis regressoras contribui significativamente para o modelo. A estatística de teste para a hipótese nula é:

$$F_0 = \frac{SS_R/k}{SS_E/(n-p)} = \frac{MS_R}{MS_E} \quad (2.74)$$

onde SS_R é a soma dos quadrados da regressão; SS_E é a soma dos quadrados do resíduo, como apresentado na Equação 2.68; e MS_R e MS_E são as médias quadráticas da regressão e do resíduo, respectivamente.

Deve-se rejeitar H_0 se o valor calculado da estatística de teste na Equação 2.74 for maior que $f_{\alpha, k, n-p}$.

Com relação à soma dos quadrados da regressão, esta pode ser representada como:

$$SS_R = \hat{\boldsymbol{\beta}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} - \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2}{n} \quad (2.75)$$

O ajuste é representado pelo coeficiente de determinação (R^2), que representa o percentual dos dados observados na resposta que o modelo matemático consegue explicar. R^2 é definido como:

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_T} = 1 - \frac{SS_E}{SS_T} \quad (2.76)$$

onde SS_T é igual à soma total dos quadrados e pode ser definida como:

$$SS_T = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2}{n} \quad (2.77)$$

Ao se fazer a raiz quadrada do coeficiente de determinação apresentado na Equação 2.76 obtém-se o coeficiente de correlação múltipla, que indica o grau de relacionamento entre as variáveis independentes (x_i) e a variável dependente (y). Segundo Guilford (1950), quando as intercorrelações entre as variáveis independentes é igual a zero, ou seja, não existe multicolinearidade, o quadrado do coeficiente de correlação múltipla será a soma dos quadrados dos coeficientes de correlação de cada variável independente com a dependente. O método usualmente conhecido para medir a correlação entre duas variáveis é o coeficiente linear de Pearson, conforme apresentado na Equação 2.52.

Associado ao coeficiente de determinação, encontra-se o R^2 ajustado ($R^2_{adj.}$), que é uma medida alternativa ao coeficiente de determinação. O R^2 ajustado penaliza a inclusão de regressores pouco explicativos, combatendo a tendência de superestimação da variação atual nos dados, feita pelo R^2 , quando um maior número de variáveis é inserido. O R^2 ajustado pode ser definido como:

$$R^2_{adj} = 1 - \frac{SS_E / (n - p)}{SS_T / (n - 1)} = 1 - \frac{n - 1}{n - p} (1 - R^2) \quad (2.78)$$

onde n é o número de experimentos e p é o número de termos regressores mais um (relacionado ao intercepto).

Para a modelagem das funções de superfície de resposta, o arranjo experimental mais utilizado para a coleta dos dados é o arranjo composto central (*Central Composite Design – CCD*) (MONTGOMERY, 2009). Segundo Myers *et al.* (2009), a escolha do CCD se deve,

pois, este é um design eficiente para a experimentação sequencial, permitindo uma razoável quantidade de informação para testar o erro sem envolver um grande número de experimentos. Além disso, o arranjo acomoda uma região esférica com cinco níveis de cada fator, o que se torna uma vantagem do ponto de vista da região experimental.

O arranjo composto central, para k fatores, é uma matriz formada por três grupos distintos de elementos experimentais: um fatorial completo 2^k ou fracionado 2^{k-p} , sendo p a fração desejada do experimento; um conjunto de pontos centrais (*center points – cp*); e, adicionalmente, um grupo de níveis extremos denominados pontos axiais, dado por $2k$. O número de experimentos necessários é dado pela soma 2^k (ou $k-p$) + cp + $2k$.

A Figura 2.8 representa graficamente o CCD para dois e três fatores.

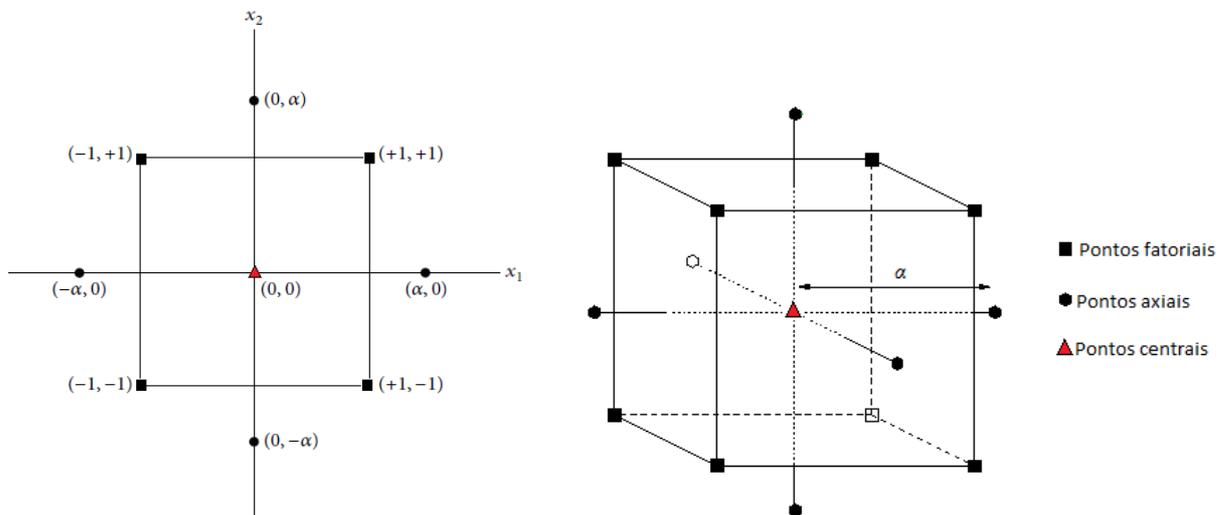


Figura 2.8 – Arranjo experimental CCD para dois e três fatores.
Fonte: modificado de Montgomery e Runger (2011).

De acordo com Montgomery (2009), ao proceder experimentos fatoriais em dois níveis, é usual antecipar o ajuste de um modelo de primeira ordem, mas é importante alertar para a possibilidade de que um modelo de segunda ordem seja realmente o mais apropriado. Por conta disso, o método de replicar pontos centrais para designs 2^k proverá proteção contra os efeitos da curvatura de segunda ordem e permitirá a obtenção de um estimador de erro independente.

Segundo Myers *et al.* (2009), os pontos fatoriais contribuem substancialmente para a estimação de termos lineares, sendo os únicos pontos que contribuem para a estimação dos termos de interação. Já os pontos axiais contribuem para a estimação dos termos quadráticos, sendo que sem estes, somente a soma dos termos quadráticos, $\sum_{i=1}^k \beta_{ii}$, pode ser estimada.

No caso dos arranjos de primeira ordem, a propriedade dominante é a ortogonalidade. Um design ortogonal de primeira ordem é um arranjo para o qual a matriz $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ é uma matriz diagonal. Se duas colunas são ortogonais, os níveis das duas correspondentes variáveis são linearmente independentes. Para um modelo de primeira ordem e uma amostra fixa N , se $X_j \in [-1, +1]$ para $j = 1, 2, \dots, k$, então $\text{Var}(b_i) / \sigma^2$ para $i = 1, 2, \dots, k$ é minimizada se o design é ortogonal e se todos os níveis x_i do design são ± 1 para $i = 1, 2, \dots, k$. Desta forma, os elementos na diagonal de $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ são minimizados por fazer os elementos fora da diagonal principal de $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ igualarem a zero e os elementos da diagonal serem os maiores possível. Uma vez que $\text{Var}(\mathbf{b}) = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ a ortogonalidade leva a designs que minimizam a variância.

Já no caso dos arranjos de segunda ordem, a ortogonalidade deixa de ser um aspecto importante e a estimação dos coeficientes individuais, uma vez que ainda é considerado importante, torna-se secundário, sendo a variância de previsão escalonada (SPV) o tópico de maior importância. Isso decorre do fato de que muitas vezes há menos preocupação com quais variáveis pertencem ao modelo do que com a qualidade de $\hat{y}(\mathbf{x})$ como uma previsão ou estimador de $E[y(\mathbf{x})]$. Assim, segundo Myers *et al.* (2009), as áreas de flexibilidade no uso do CCD residem na seleção da distância axial (α) e do número de pontos centrais (cp). A escolha de α afeta a região de operabilidade e região de interesse. A escolha do número de cp tem influência na distribuição da variância de previsão escalonada (SPV), $N\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})] / \sigma^2$, onde N é o tamanho total da amostra.

Muitas das propriedades dos designs experimentais são conectados à maneira pela qual os pontos são distribuídos na região de experimentação. Especificamente, essa distribuição de pontos no espaço tem um profundo efeito na distribuição da SPV. A distribuição dos pontos do design é muito bem quantificada pelos momentos do design.

A ideia por trás do método dos momentos é igualar os momentos da população, que são definidos em termos de valores esperados, aos correspondentes momentos da amostra. Os momentos da população serão funções de parâmetros desconhecidos. Então, essas equações são resolvidas de modo a resultar estimadores dos parâmetros desconhecidos. Se uma amostra aleatória X_1, X_2, \dots, X_n de distribuição de probabilidades $f(x)$ e o m -ésimo momento da população $E(X^m)$ forem considerados, o correspondente n -ésimo momento da amostra será $(1/n) \sum_{i=1}^n X_i^n$. O primeiro momento da população é $E(X) = \mu$ e o primeiro da amostra é

$(1/n)\sum_{i=1}^n X_i = \bar{X}$ e, ao se igualar os dois momentos, tem-se que a média da amostra é o estimador de momento da média da população.

A partir dos momentos de ordem 2, momentos baseados nos desvios em relação à média, chamados de momentos centrais, podem ser usados, como por exemplo: $\Theta_2 = E[(x - \mu)^2] = \sigma^2$. Tomando como base momentos centrais, duas medidas para caracterizar uma distribuição não-normal podem ser caracterizadas, a simetria (ζ) e a curtose (κ). A simetria, como o próprio nome apresenta, mede a simetria dos dados em torno do valor médio, sendo que valores próximos a zero significam simetria.

$$\zeta = \frac{\Theta_3}{\Theta_2^{3/2}} \quad (2.79)$$

A curtose mede a concentração próximo à média, sendo que, no caso da normalidade, seu valor é 3.

$$\kappa = \frac{\Theta_4}{\Theta_2^2} \quad (2.80)$$

No caso da RSM, os momentos que refletem a geometria do arranjo experimental devem ser uma função do modelo sendo ajustado. De fato, os momentos de importância vêm da matriz momento:

$$\mathbf{M} = \frac{\mathbf{X}^T \mathbf{X}}{N} \quad (2.81)$$

Um design fatorial 2^k ou fatorial fracionado para um modelo de primeira ordem é ortogonal e sua matriz momento é vista como:

$$\mathbf{M} = \frac{\mathbf{X}^T \mathbf{X}}{N} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}_k \quad (2.82)$$

Os momentos fora da diagonal principal são zero devido à ortogonalidade das colunas da matriz \mathbf{X} e os momentos da diagonal principal são todos iguais a 1. Assim, segundo Myers

et al. (2009), os momentos são definidos como: momentos de primeira ordem $(1/N)\sum_{u=1}^N x_{iu}$; momentos de segunda ordem mistos $(1/N)\sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju}$ para $i \neq j$; e momentos de segunda ordem puros $(1/N)\sum_{u=1}^N x_{iu}^2$. Os momentos de primeira ordem e de segunda ordem mistos são chamados de momentos ímpares, uma vez que têm ao menos uma variável com um expoente ímpar. Esses são zero para este design. Os k momentos de segunda ordem puros são os momentos pares e são iguais a 1. Os momentos de segunda ordem mistos são análogos à covariância para o caso dos momentos amostrais em estatística básica, onde o momento de primeira ordem pode ser visto como a média da amostra e os momentos de segunda ordem puros como a variância.

Os momentos do arranjo experimental que exercem importância em caracterizar as propriedades de sua variância são função da ordem do modelo. No caso do design fatorial 2^k ou fatorial fracionado os momentos de segunda ordem são importantes uma vez que \mathbf{M} contém momentos de segunda ordem. Entretanto, no caso do CCD com o correspondente design de segunda ordem, \mathbf{M} contém momentos de quarta ordem. Com base na matrix $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$, os momentos relevantes são:

- Momentos de primeira ordem:

$$[i] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} \quad (2.83)$$

- Momentos de segunda ordem puros:

$$[ii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 \quad (2.84)$$

- Momentos de segunda ordem mistos:

$$[ij] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju} \quad (2.85)$$

- Momentos de terceira ordem puros:

$$[iii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^3 \quad (2.86)$$

- Momentos de terceira ordem mistos:

$$[ijj] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}, \quad [ijk] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} x_{ku} \quad (2.87)$$

- Momentos de quarta ordem puros:

$$[iiii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^4 \quad (2.88)$$

- Momentos de quarta ordem mistos:

$$[iiij] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^3 x_{ju}, \quad [iijj] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2 \quad (2.89)$$

$$[ijkj] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju} x_{ku}, \quad [ijkl] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} x_{ku} x_{lu}$$

Importantes propriedades da variância de um arranjo experimental são determinados pela natureza da matriz momento. Por isso a matriz $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ e portanto $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ são tão importantes em caracterizar as propriedades da variância, isto é, variâncias e covariâncias dos coeficientes de regressão assim como variância da previsão.

Segundo Myers *et al.* (2009), é importante para um design de segunda ordem possuir uma distribuição razoavelmente estável da SPV por toda a região do arranjo experimental, uma vez que o analista não sabe desde o início onde no espaço experimental será necessário fazer previsões ou onde o ótimo se situa. Dessa forma, uma SPV razoavelmente estável provê garantia de que a qualidade de $\hat{y}(x)$ como uma previsão dos valores futuros da resposta é similar por toda a região de interesse. Com essa finalidade, Box e Hunter (1957) desenvolveram a noção de rotacionalidade: um arranjo rotacionável é aquele para o qual a SPV tem o mesmo valor em qualquer dois pontos que estão à mesma distância do centro do arranjo, ou seja, SPV é constante em esferas. A rotacionalidade por si só não garante a estabilidade por toda a região experimental, porém, em muitos casos, esta fornece alguns guias úteis para a escolha dos parâmetros do design, como por exemplo, a escolha de α e do número de *cp* no CCD. É importante notar que, a rotacionalidade ou quase-rotacionalidade é frequentemente facilmente alcançada, sem que para isto outras importantes propriedades do arranjo sejam sacrificadas.

No caso do modelo de segunda ordem, os momentos que afetam a rotacionalidade, ou qualquer propriedade da variância, são momentos de quarta ordem. Assim, as condições necessárias e suficientes para a rotacionalidade são as seguintes: 1. todos os momentos ímpares de quarta ordem são zero; 2. a razão dos momentos $[iiii]/[ijij] = 3$ ($i \neq j$).

A condição 1 se manterá enquanto a porção fatorial for um 2^k completo ou fracionado com resolução V ou maior. Os designs de resolução V são aqueles nos quais nenhum efeito principal ou interação de dois fatores é associado com qualquer outro efeito principal ou interação de dois fatores, mas interações de dois fatores são associados às interações de três fatores. Nesses designs, o balanço entre +1 e -1 nas colunas fatoriais e a ortogonalidade entre certas colunas na matriz \mathbf{X} para o CCD resultará em todos os momentos ímpares sendo zero. Para a condição 2 o que se busca é um valor de α para o qual:

$$\frac{[iiii]}{[ijij]} = \frac{F + 2\alpha^4}{F} = 3 \quad (2.90)$$

o que resulta em:

$$\alpha = \sqrt[4]{F} \quad (2.91)$$

onde F é o número de pontos fatoriais, ou seja, 2^k para um fatorial completo.

A propriedade de rotacionalidade é uma tentativa de produzir estabilidade da SPV, sendo que a rotacionalidade é alcançada por usar α , como descrito na Equação 2.91, independentemente do número de cp . Além disso, alcançar a quase-rotacionalidade para um design pode produzir boa estabilidade para a variância de previsão por toda a região experimental, mesmo se as condições para a rotacionalidade não forem completamente atendidas, ou seja, mudanças em α que não se distanciem muito do valor ideal descrito na Equação 2.91, afetam pouco a estabilidade da variância.

Entretanto, um arranjo rotacionável ou quase-rotacionável, por si só não garante estabilidade da variância para toda a região experimental. Assim, Myers *et al.* (2009) argumentam que o uso de cp fornece razoável estabilidade da SPV para toda a região do arranjo e, por isso, alguns cp para um CCD rotacionável são muito benéficos. Segundo os autores, o uso de um CCD rotacionável com somente um pequeno número de cp não é uma boa prática uma vez que a redução no número de cp afeta consideravelmente a estabilidade da variância de previsão, sendo ideal a utilização de 3 a 5 cp .

A Figura 2.9 apresenta o gráfico de dispersão da variância (VDG) para um CCD, com três fatores, considerando 2, 3, 4 e 5 *cp*. O VDG é uma técnica de avaliação gráfica para avaliar as propriedades da variância de previsão por toda a região experimental e consiste em plotar a variância esperada da estimação em relação à distância do centro do design experimental (Borkowski, 1995). Para tanto, foi utilizada a variância de previsão não-escalada (UPV). A UPV fornece uma medida absoluta da precisão de um design e, nos casos em que se deseja comparar diretamente a variância da previsão, é a medida mais indicada. Pode ser modelada diretamente pela variância da resposta média estimada dividida por σ^2 :

$$\text{UPV} = \text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x}_0)] / \sigma^2 = \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0 \quad (2.92)$$

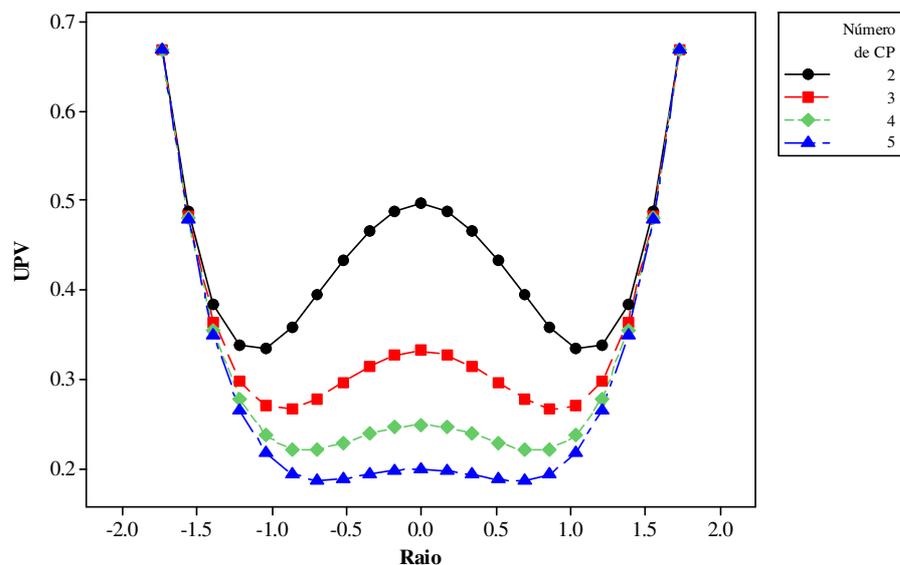


Figura 2.9 – Gráfico de dispersão da variância.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Figura 2.9 fica evidente a influência do número de *cp* na estabilidade da variância de um CCD, de modo que a redução no número de *cp* pode ocasionar considerável aumento na variância.

Por fim, é importante citar que, em problemas de otimização envolvendo superfícies de resposta, utiliza-se uma restrição da região esférica, na forma de $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, com o intuito de que as respostas não se distanciam demasiadamente da região de experimentação, garantindo a validade das respostas estimadas.

2.5.1.2 – Experimentos por Arranjo de Misturas

Nos experimentos de mistura, os fatores são componentes ou ingredientes de uma mistura, e conseqüentemente, seus níveis não são independentes. Por exemplo, se x_1, x_2, \dots, x_p indicam as proporções de p componentes de uma mistura, então (MONTGOMERY, 2009):

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad i = 1, 2, \dots, p$$

e

$$x_1 + x_2 + \dots + x_p = 1 \quad (2.93)$$

A restrição da Equação 2.93 pode ser visualizada graficamente na Figura 2.10 para $k=2$ e $k=3$ componentes. Com dois componentes, a região experimental para os experimentos de misturas considera todos os valores ao longo da reta $x_1 + x_2 = 1$ (Figura 2.10a). No caso de três componentes, esta região é o espaço delimitado pelo triângulo da Figura 2.10b, onde os vértices correspondem às misturas puras, os lados às misturas binárias e a região triangular às misturas completas (MONTGOMERY, 2009). A existência dessas características torna, então, necessário que os experimentos de misturas sejam planejados e conduzidos por meio de arranjos específicos e, nesse contexto, os arranjos simplex têm sido os mais utilizados (CORNELL, 2002).

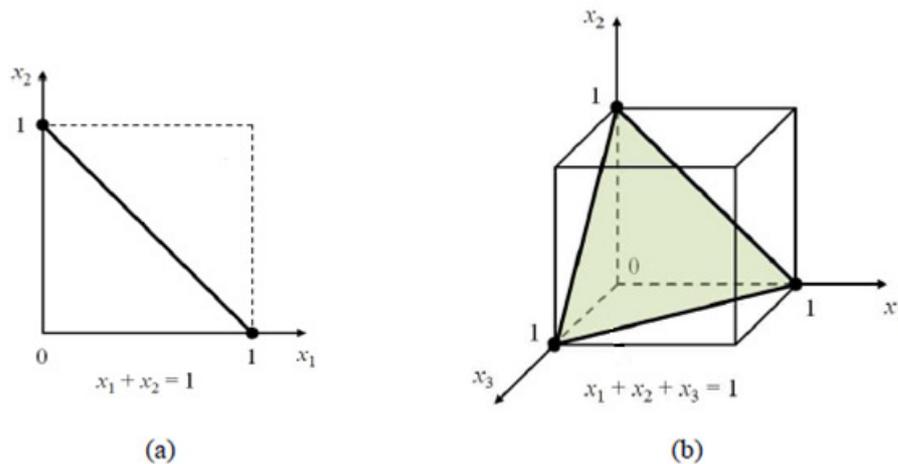


Figura 2.10 – Região experimental para os experimentos de misturas.

Fonte: Montgomery (2009, p.474).

Os arranjos *simplex* são definidos como uma configuração triangular na qual os vértices do triângulo representam as proporções máximas das variáveis de entrada e os pontos interiores a este triângulo descrevem as possíveis combinações destas variáveis. Podem ser de

dois tipos principais: o arranjo *simplex lattice* e o arranjo *simplex* centroide. A representação gráfica dos arranjos *simplex* é demonstrada na Figura 2.11.

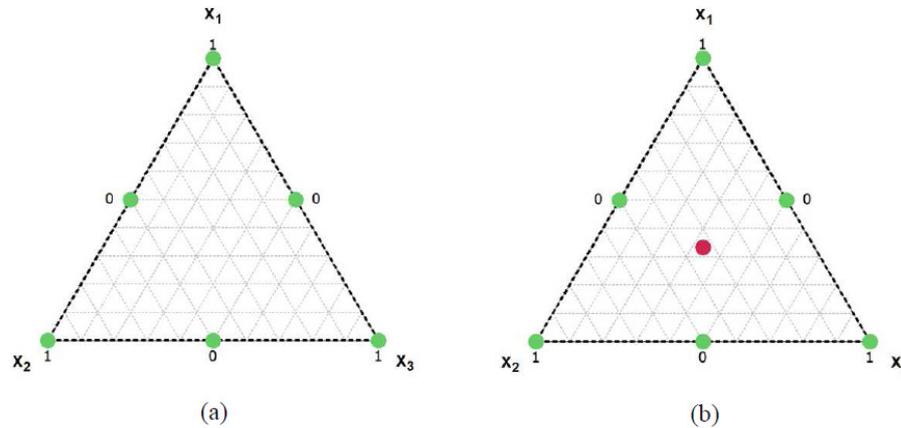


Figura 2.11 – Arranjos de misturas: a) *simplex lattice*; b) *simplex* centroide.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

No *simplex lattice*, as k variáveis de entrada definem pontos cujas proporções assumidas levam em consideração $m + 1$ valores igualmente espaçados entre 0 e 1, de tal forma que (MONTGOMERY, 2009):

$$x_i = 0, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, 1 \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (2.94)$$

e todas as possíveis combinações (misturas) das proporções da Equação 2.94 são utilizadas, sendo m o grau *lattice* do arranjo. O número total de experimentos (N) é dado por:

$$N = \frac{(k + m - 1)!}{m!(k - 1)!} \quad (2.95)$$

Uma alternativa para o *simplex lattice* é o arranjo *simplex* centroide. Para este caso, as k variáveis de entrada são configuradas em $2^k - 1$ pontos, correspondentes a k permutações de $(1, 0, 0, \dots, 0)$, a $\binom{k}{2}$ permutações de $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0\right)$, a $\binom{k}{3}$ permutações de $\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0, \dots, 0\right)$ e o centroide $\left(\frac{1}{k}, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}\right)$ (MONTGOMERY, 2009).

Uma desvantagem dos arranjos *simplex* diz respeito ao fato de que a maioria dos experimentos ocorre nas fronteiras do arranjo, o que faz com que poucos pontos da parte interna sejam testados. Assim, recomenda-se, sempre que possível, aumentar o número de experimentos pela adição de pontos internos aos arranjos, como os pontos centrais e também os pontos axiais. Os pontos axiais poderiam ser definidos como todas as permutações de

$((k+1)/2k, 1/2k, \dots, 1/2k)$, onde k é o número de variáveis de entrada. No caso dos arranjos de misturas, vale destacar que os pontos centrais correspondem ao próprio centroide.

Quanto aos modelos matemáticos utilizados para a representação das respostas, verifica-se que os modelos de misturas apresentam algumas diferenças em relação aos polinômios padrão empregados na RSM, principalmente devido a existência da restrição $x_1 + x_2 + \dots + x_p = 1$. Se β_0 for multiplicado por $x_1 + x_2 + \dots + x_p = 1$ em um modelo de primeira ordem, gera-se o seguinte:

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i = \beta_0 (x_1 + x_2 + \dots + x_p) + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i = \sum_{i=1}^q \beta_i^{\text{canônico}} x_i \quad (2.96)$$

onde $\beta_i^{\text{canônico}} = \beta_0 + \beta_i$.

Isso é chamado de forma canônica do modelo de misturas de primeira ordem (MYERS *et al.*, 2009). As formas padrão dos polinômios canônicos de misturas, ou polinômios de Scheffé, mais difundidos são (MONTGOMERY, 2009):

- Linear:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \quad (2.97)$$

- Quadrática:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j \quad (2.98)$$

- Cúbico completo:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j}^q \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k \quad (2.99)$$

- Cúbico especial:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k \quad (2.100)$$

A estimação dos coeficientes é feita de maneira semelhante à empregada na RSM, o mesmo ocorrendo para a Análise de Variância, análise de resíduos e demais testes estatísticos.

2.6 – ALGORITMO GRADIENTE REDUZIDO GENERALIZADO

O algoritmo Gradiente Reduzido Generalizado (GRG), segundo K oksoy e Doganaksoy (2003),   um dos m etodos gradientes que apresenta maior robustez e efici encia, o que o torna apropriado para a solu ao de uma vasta variedade de problemas. Al em disso, K oksoy (2008) destaca a facilidade de acesso a este algoritmo, ja que al em de poder ser aplicado a diversos problemas de otimiza ao nao-lineares restritos ou irrestritos, geralmente encontra-se dispon ivel em softwares comerciais, como no caso das planilhas eletr onicas do Microsoft Excel®.

O GRG   conhecido como um m etodo primal e frequentemente chamado de m etodo da dire ao viavel. De acordo com Luenberger e Ye (2008), apresenta tr es vantagens significantes: 1. se o processo de busca termina antes da confirma ao do  otimo, o  ultimo ponto encontrado   viavel devido ao fato de que cada ponto gerado   viavel e provavelmente pr oximo do  otimo; 2. se o m etodo gera uma sequ encia convergente, o ponto limite garante, pelo menos, um m inimo local; 3. a maioria dos m etodos primais sao geralmente absolutos, nao dependendo de uma estrutura especial, tal como a convexidade. O algoritmo GRG tamb em apresenta como uma de suas caracter isticas o fato de proporcionar uma adequada converg encia global, principalmente quando inicializado suficientemente pr oximo da solu ao (GABRIELE e RAGSDELL, 1977).

O algoritmo assume o particionamento de todas as entidades vetoriais e matriciais reordenando as variaveis de modo a agrupa-las em variaveis basicas, x_b , e nao-basicas, x_n (MOUATASIM, 2010). Com o intuito de apresentar os conceitos de variaveis basicas e nao-basicas, e por sua maior simplicidade, considere o sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ($m \leq n$). Se \mathbf{A} tem m colunas linearmente independentes, entao a submatriz $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times m}$   uma submatriz base de \mathbf{A} . Logo, as variaveis associadas a submatriz \mathbf{B} sao denominadas variaveis basicas, sendo \mathbf{B} o conjunto dos  indices das variaveis basicas. Al em da submatriz \mathbf{B} , estao presentes em \mathbf{A} , $(n - m)$ colunas que comp oem a

submatriz não-base \mathbf{N} . Logo, as variáveis associadas à submatriz \mathbf{N} são denominadas variáveis não-básicas, sendo \mathbf{N} o conjunto dos índices das variáveis não-básicas.

Agora, considere o seguinte problema de programação não-linear:

$$\begin{aligned} & \text{Min } f(\mathbf{x}) \\ & \text{Sujeito a: } \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ & \quad \mathbf{l} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{u} \end{aligned} \tag{2.101}$$

Como já mencionado, no GRG, as variáveis são agrupadas em variáveis básicas e não-básicas (MOUATASIM, 2010):

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_b \\ \mathbf{x}_n \end{bmatrix}, \mathbf{l} = \begin{bmatrix} \mathbf{l}_b \\ \mathbf{l}_n \end{bmatrix}, \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_b \\ \mathbf{u}_n \end{bmatrix} \tag{2.102}$$

Assumindo que as funções f e h são contínuas e diferenciáveis, o vetor Gradiente pode ser definido por:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = [\nabla^b f(\mathbf{x}) \quad \nabla^n f(\mathbf{x})] \tag{2.103}$$

E a matriz Jacobiana por:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = [\mathbf{J}^B(\mathbf{x}) \quad \mathbf{J}^N(\mathbf{x})] = \begin{bmatrix} \nabla^b h_1(\mathbf{x}) & \nabla^n h_1(\mathbf{x}) \\ \nabla^b h_2(\mathbf{x}) & \nabla^n h_2(\mathbf{x}) \\ \vdots & \vdots \\ \nabla^b h_m(\mathbf{x}) & \nabla^n h_m(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \tag{2.104}$$

Agora, com o intuito de descrever o algoritmo, considere uma primeira solução viável \mathbf{x}^0 , a partir da qual se pode encontrar a k -ésima solução, \mathbf{x}^k . Isto permite o cálculo de $\mathbf{J}(\mathbf{x}^k)$, de modo a satisfazer as hipóteses de não-degenerescência: 1. \mathbf{x}^i está estritamente dentro dos limites \mathbf{l} e \mathbf{u} , $\forall i \in \mathbf{B}$; e 2. $\mathbf{J}(\mathbf{x}_b^k)$ é não singular, ou seja, admite uma inversa e, como toda matriz não singular, possui determinante diferente de zero.

Para calcular a direção de deslocamento das variáveis não-básicas (\mathbf{d}_N), primeiro calculam-se os multiplicadores de Lagrange:

$$\boldsymbol{\mu} = -\nabla f(\mathbf{x}_b^k) [\mathbf{J}(\mathbf{x}_b^k)]^{-1} \tag{2.105}$$

Em seguida, o gradiente reduzido pode ser obtido:

$$\nabla_N^{red.} f = \nabla f(\mathbf{x}_n^k) + \boldsymbol{\mu} [\mathbf{J}(\mathbf{x}_n^k)] \quad (2.106)$$

A partir da Equação 2.106, o gradiente reduzido projetado, $p_j, \forall j \in N$, pode ser definido:

$$p_j = \begin{cases} 0 & \text{se } \begin{cases} \nabla_j^{red.} f < 0 \text{ e } \mathbf{x}_j^k = \mathbf{l}_j \\ \nabla_j^{red.} f > 0 \text{ e } \mathbf{x}_j^k = \mathbf{u}_j \end{cases} \\ \nabla_j^{red.} f & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.107)$$

sendo que se \mathbf{p}_N não for igual a 0, considerar $\mathbf{d}_N = \mathbf{p}_N$.

Para o cálculo da direção de deslocamento das variáveis básicas (\mathbf{d}_B), deve-se considerar a condição:

$$[\mathbf{J}(\mathbf{x}_b^k)] \mathbf{d}_B + [\mathbf{J}(\mathbf{x}_n^k)] \mathbf{d}_N = 0 \quad (2.108)$$

que leva a:

$$\mathbf{d}_B = -[\mathbf{J}(\mathbf{x}_b^k)]^{-1} [\mathbf{J}(\mathbf{x}_n^k)] \mathbf{d}_N \quad (2.109)$$

Um novo ponto \mathbf{x} deverá ser sempre acompanhado de uma correção para obter viabilidade exata nas restrições não lineares, $\mathbf{h}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = 0$. O ponto \mathbf{x} pode ser utilizado como ponto inicial de um método recursivo para encontrar um ponto exatamente viável. O método de Newton consiste em considerar $\mathbf{J}(\mathbf{x}_b^k)$ para calcular a correção:

$$\Delta\mathbf{x}_B = -[\mathbf{J}(\mathbf{x}_b^k)]^{-1} \mathbf{h}(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) \quad (2.110)$$

A busca pelo ponto de ótimo se encerra quando a magnitude do gradiente reduzido atinge o valor de erro desejado (critério de convergência). Caso contrário, uma nova busca é executada para localizar um novo ponto na direção do gradiente reduzido. Este procedimento se repete até que a melhor solução viável seja encontrada (ponto de ótimo).

Este foi o algoritmo utilizado neste trabalho, estando disponível nos pacotes comerciais do Excel[®].

3 – MÉTODO DA PONDERAÇÃO ENTRÓPICA

Como discutido anteriormente, muitas das estratégias de ponderação utilizadas durante o processo de otimização e tomada de decisão confiam, ao menos, em um de seus estágios, em elementos imprecisos e subjetivos. Portanto, a análise dos métodos de ponderação demonstram, desde que uma grande parcela dessas estratégias ainda utilizam elementos passíveis de erro, que contribuições significantes podem ser feitas. Ainda, ao se constatar que na literatura, de todas as fontes consultadas, somente Shahraki e Noorossana (2014) se propuseram a avaliar algum parâmetro de variabilidade ao selecionar a melhor solução Pareto ótima, vislumbra-se um outro *gap* teórico que se pretende explorar com a atual pesquisa: o comportamento da variância de previsão frente às estratégias de ponderação.

O esforço deste trabalho em contribuir com este tópico consistiu em desenvolver uma alternativa para a identificação de pesos ótimos em problemas de otimização multiobjetivo buscando manter a variância de previsão das respostas para o ponto escolhido tão baixa quanto possível. Dando continuidade ao trabalho desenvolvido em Rocha *et al.* (2015a) e Rocha *et al.* (2015b), onde os autores utilizaram o índice de entropia associado a uma medida de erro com o intuito de determinar o ponto Pareto ótimo preferível em um problema de otimização multiobjetivo, utilizou-se uma métrica de mensuração da diversidade, conforme proposto por Stirling (2007) e comparou-se seu resultado com a utilização da métrica proposta nos trabalhos supracitados, além da utilização do índice de entropia de Shannon (1948). Em todas essas possibilidades, o comportamento da variância de previsão foi avaliado.

O uso de métodos estatísticos baseados no DOE se justifica por estes serem importantes técnicas de modelagem de funções objetivo. De fato, para a maioria dos processos industriais, os relacionamentos matemáticos são desconhecidos, o que leva à necessidade de realização de experimentos para obter os coeficientes das múltiplas funções objetivo. Porém, em situações onde já exista um modelo estimado, o método proposto pode ser diretamente aplicado.

A inserção do algoritmo de otimização se dá durante o passo de identificação das soluções ótimas para as respostas e para os pesos, depois delas terem sido modeladas pelas técnicas estatísticas mencionadas anteriormente. O algoritmo GRG é utilizado pelo suplemento do Excel[®] denominado Solver. O NBI é utilizado para a identificação das soluções Pareto ótimas e construção da fronteira de Pareto.

Com o intuito de apresentar a proposta da tese considere o seguinte problema de otimização multiobjetivo:

$$\begin{aligned}
& \underset{x}{\text{Min}} \sum_{i=1}^n w_i f_i(x) \\
& \text{sujeito a: } \sum_{i=1}^n w_i = 1 \\
& \quad w_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, n
\end{aligned} \tag{3.1}$$

onde: $f_i(x)$ são as funções objetivo a serem otimizadas; e w_i são os pesos atribuídos a cada função objetivo.

Visando calcular a variância para a função em análise, o seguinte processo é considerado:

$$\begin{aligned}
\text{Var} \left[\sum_{i=1}^n w_i f_i(x) \right] &= \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial w_i f_i(x)}{\partial f_i(x)} \right]^2 \sigma_{f_i}^2 + 2 \sum_i^n \sum_j^n \left[\frac{\partial w_i f_i(x)}{\partial f_i(x)} \right] \left[\frac{\partial w_j f_j(x)}{\partial f_j(x)} \right] \sigma_{f_i f_j} \\
&= \sum_{i=1}^n w_i^2 \sigma_{f_i(x)}^2 + 2 \sum_i^n \sum_j^n w_i w_j \sigma_{f_i f_j} \\
&= \sum_{i=1}^n w_i^2 \text{Var}[f_i(x)] + 2 \sum_i^n \sum_{i \neq j}^n w_i w_j \rho_{f_i f_j} \sqrt{\text{Var}[f_i(x)] \times \text{Var}[f_j(x)]}
\end{aligned} \tag{3.2}$$

onde $\rho_{f_i f_j}$ é a correlação entre as funções f_i e f_j .

Considerando que se pode calcular a variância de $f_i(x)$ em determinado ponto $\mathbf{x}_0^T = [1 \ x_{01} \ x_{02} \ \dots \ x_{0k}]$, como $\text{Var}[f_i(\mathbf{x}_0)] = \hat{\sigma}_{f_i}^2 \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$, pode-se modificar a Equação 3.2 para:

$$\begin{aligned}
\text{Var} \left[\sum_{i=1}^n w_i f_i(\mathbf{x}_0) \right] &= \sum_{i=1}^n w_i^2 \left[\hat{\sigma}_{f_i}^2 \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0 \right] + \\
& \quad 2 \sum_i^n \sum_{i \neq j}^n w_i w_j \rho_{f_i f_j} \sqrt{\left[\hat{\sigma}_{f_i}^2 \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0 \right] \times \left[\hat{\sigma}_{f_j}^2 \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0 \right]}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Agora considere o termo $\text{Var}[f(\mathbf{x}_0)] = \hat{\sigma}_f^2 \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$ como constante para cada função no ponto determinado. Analisando a primeira parte da Equação 3.3, uma vez que a variância das respostas estimadas depende do quadrado do peso atribuído à cada resposta, uma maneira de minimizar seu valor é pela diversificação, ou seja, pela distribuição uniforme dos pesos entre as funções envolvidas no problema de otimização multiobjetivo. Já na segunda parte da Equação 3.3, pode-se ver que a distribuição uniforme do valor dos pesos

maximiza o valor dessa parte da equação, levando a um maior valor da variância. Dessa forma, a correlação entre as respostas se torna relevante uma vez que correlações positivas entre as respostas tendem a aumentar a variância, enquanto que, correlações negativas tendem a reduzir a variância. Quanto mais existe concentração do valor de algum dos pesos, mais próximo a zero fica esta parte da equação, chegando a zero no caso em que houver algum peso igual a 1, fato que descaracterizaria a função como multiobjetivo.

A proposta segue os seguintes passos:

Passo 1: Projeto Experimental (DOE)

Estabelecimento do planejamento experimental e execução dos experimentos em ordem aleatória.

Passo 2: Modelagem das funções objetivo

Definição das equações usando os dados experimentais.

Passo 3: Formulação do problema de otimização multiobjetivo

Uma vez definidas as funções objetivo, as mesmas são aglutinadas em uma formulação de otimização multiobjetivo, pela abordagem NBI, seguindo a rotina descrita na Equação 2.34.

Passo 4: Definição do arranjo de misturas

Com o intuito de definir os pesos a serem utilizados na rotina de otimização descrita no **Passo 3**, elabora-se um Arranjo de Misturas usando o software Minitab[®] 16. Devido à restrição $\sum_{i=1}^n w_i = 1$, a utilização do Arranjo de Misturas é viável.

Passo 5: Solução do problema de otimização

Solução do problema de otimização do **Passo 3** para cada condição experimental definida no **Passo 4**.

Passo 6: Cálculo das métricas usadas como critério para a ponderação

São calculadas as métricas de entropia ($S(x)$) de Shannon (1948), conforme Equação 2.48 e de diversidade de Stirling (2007), conforme Equação 2.51. Ao se calcular a diversidade (STIRLING, 2007), duas medidas, de correlação e de distância, são utilizadas para definir o parâmetro d_{ij} , conforme Equações 2.52 e 2.53, respectivamente. Ao utilizar a medida de

correlação, a métrica de diversidade será denominada Diversidade Correlação (DC). Ao utilizar a medida de distância entre os ótimos individuais de cada função considerada na otimização multiobjetivo, a métrica de diversidade será denominada Diversidade Ótimo (DO). Além dessas três métricas de diversificação, será calculada uma métrica de erro, o MAPE, conforme Equação 2.46. Seguindo a proposta de Rocha *et al.* (2015a, 2015b), de associar uma medida de dispersão a uma medida de erro, será calculada a razão de cada uma das três métricas de diversificação com o MAPE. O intuito é comparar as métricas descritas entre si, do ponto de vista da redução da variância, sendo que, a métrica de variância considerada, é a variância de previsão não-escalonada (UPV), obtida conforme Equação 2.92.

Passo 7: Modelagem das métricas

Usando os resultados dos cálculos do **Passo 6**, determinam-se os polinômios canônicos de misturas para as métricas descritas.

Passo 8: Definição dos pesos ótimos

Com o intuito de alcançar os pesos ótimos, procede-se a maximização das métricas descritas.

Como o modelo se utiliza de algoritmos para a formulação e solução dos problemas multiobjetivos, este sempre estará sujeito às limitações inerentes a estes algoritmos. No presente estudo, o método NBI é utilizado para a formulação do problema multiobjetivo e o GRG é utilizado para resolver o problema. Pela possibilidade da redução da variância de previsão, é de se supor que uma ponderação baseada em entropia ou diversidade é útil em modelos estimados, tais como os modelos de superfície de resposta.

Uma vez que o procedimento foi realizado e os pesos ótimos alcançados, efetua-se a otimização multiobjetivo visando alcançar os valores ótimos para as variáveis de decisão do problema original.

A Figura 3.1 mostra a proposta passo-a-passo. Posteriormente, para um melhor entendimento, o método proposto será aplicado em alguns casos apresentando diferentes características.

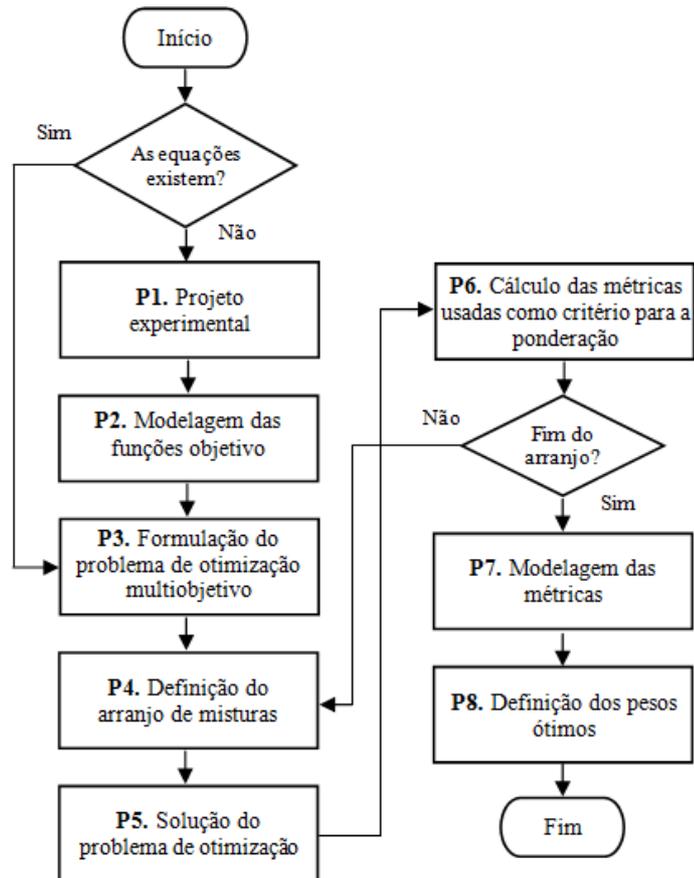


Figura 3.1 – Processo de identificação de pesos ótimos.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

4 – APLICAÇÃO DO MÉTODO

Com o intuito de demonstrar a aplicabilidade do método proposto, alguns casos foram utilizados. Os cinco primeiros casos, contemplam matrizes experimentais simuladas de características para um processo hipotético. Essas matrizes experimentais foram compostas para um CCD com 2 fatores, adicionados de 5 *cp*, considerando três distintas respostas, sendo que o intuito foi a obtenção de funções com diferentes convexidades (2 funções convexas e 1 côncava), com coeficientes de determinação satisfatórios e cujos pontos de ótimo se situassem dentro da região experimental. Essas três respostas foram analisadas duas a duas, nos três primeiros casos. No quarto caso, as três respostas foram analisadas em conjunto. No quinto caso, uma matriz experimental foi simulada, para as mesmas respostas, porém com somente 2 *cp*, sendo as respostas analisadas conjuntamente. Uma vez que Myers *et al.* (2009) não recomendam o uso do CCD com apenas 2 *cp*, por essa prática não garantir uma boa dispersão da variância de previsão por toda a região experimental, analisar como o método proposto se comporta em arranjos deste tipo se torna algo importante.

No sexto caso, o método proposto foi utilizado para otimizar um processo de usinagem para aço endurecido, considerando três funções objetivo e três variáveis de decisão. Nesse caso, as respostas ótimas não se situam na região experimental, ou seja, os ótimos possíveis para as respostas estimadas encontram-se no limite da região experimental, definido por uma restrição da região esférica de forma $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, sendo α a distância axial do CCD. Além disso, o CCD possui 5 *cp*.

No sétimo e último caso, um processo de acoplamento oxidativo do metano foi otimizado pelo método proposto, considerando três funções objetivo e quatro variáveis de decisão. Nesse caso, somente uma das respostas não apresentou seu ótimo dentro da região experimental. Além disso, o CCD possui 2 *cp*.

4.1 – CASO 1

Para a análise do primeiro caso, considere que um determinado processo possua algumas características que dependem basicamente de duas variáveis. Assim, com o intuito de analisar duas de suas características, características essas que se quer minimizar, um conjunto sequencial de experimentos foi estabelecido usando um CCD, construído de acordo com o design de superfície de resposta 2^2 , com 4 pontos axiais e 5 pontos centrais, gerando 13 experimentos. A Tabela 4.1 apresenta o CCD para este processo.

Tabela 4.1 – CCD simulado para duas respostas - Caso 1

N	x_1	x_2	y_1	y_2
1	-1	-1	90	130
2	+1	-1	132	100
3	-1	+1	140	470
4	+1	+1	140	210
5	-1.4142	0	121	240
6	+1.4142	0	119	140
7	0	-1.4142	123	70
8	0	+1.4142	150	490
9	0	0	101	80
10	0	0	112	150
11	0	0	108	100
12	0	0	99	120
13	0	0	107	130

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

A matriz experimental descrita na Tabela 4.1 apresenta algumas propriedades desejáveis para modelos de superfície de resposta de segunda ordem que são pontos axiais definidos como $\alpha = \sqrt[4]{2^k}$ e número de *cp* igual a 5. Segundo Myers *et al.* (2009), isso garante a rotacionalidade e uma boa dispersão da variância de previsão por toda a região experimental. O projeto experimental equivale ao Passo 1 do método proposto.

A análise dos dados experimentais geram a modelagem matemática apresentada na Tabela 4.2, modelagem esta que equivale ao Passo 2 do método proposto.

Tabela 4.2 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 1

Termos	y_1	y_2
Constante	105,400	116,000
x_1	4,896	-53,928
x_2	12,023	130,496
x_1^2	6,612	35,125
x_2^2	14,862	80,125
$x_1 \times x_2$	-10,500	-57,500
p-value	0,003	0,000
R^2 (%)	89,04%	96,36%
R^2 ajustado (%)	81,20%	93,75%

Valores em negrito representam termos significantes nos modelos ($p\text{-value} < 5\%$).

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

A adequação dos modelos foi analisada pela ANOVA. Nesse teste, quando a hipótese nula é rejeitada, significa que ao menos uma das variáveis de decisão contribui

significativamente para a função. Na ANOVA, pequenos valores de *p-value* são desejáveis. Os *p-values* para as funções objetivo em análise mostram uma regressão estatisticamente significativa ao nível de significância de 5%, provando a adequação das funções.

O coeficiente de determinação múltipla (R^2) representa a porcentagem dos dados observados na resposta que podem ser explicados pelo modelo matemático. Nesse caso, os valores de R^2 mostram que os modelos têm um bom ajuste.

O R^2 ajustado penaliza a inclusão de regressores pouco explicativos, combatendo a tendência de superestimação da variação atual nos dados, feita pelo R^2 , quando um maior número de variáveis é inserido. Mesmo ao se trabalhar com o R^2 ajustado, os modelos apresentam valores considerados aceitáveis.

Com o intuito de comparar como cada variável de decisão afeta cada resposta, os gráficos de efeito principal para as duas respostas em análise são mostrados na Figura 4.1.

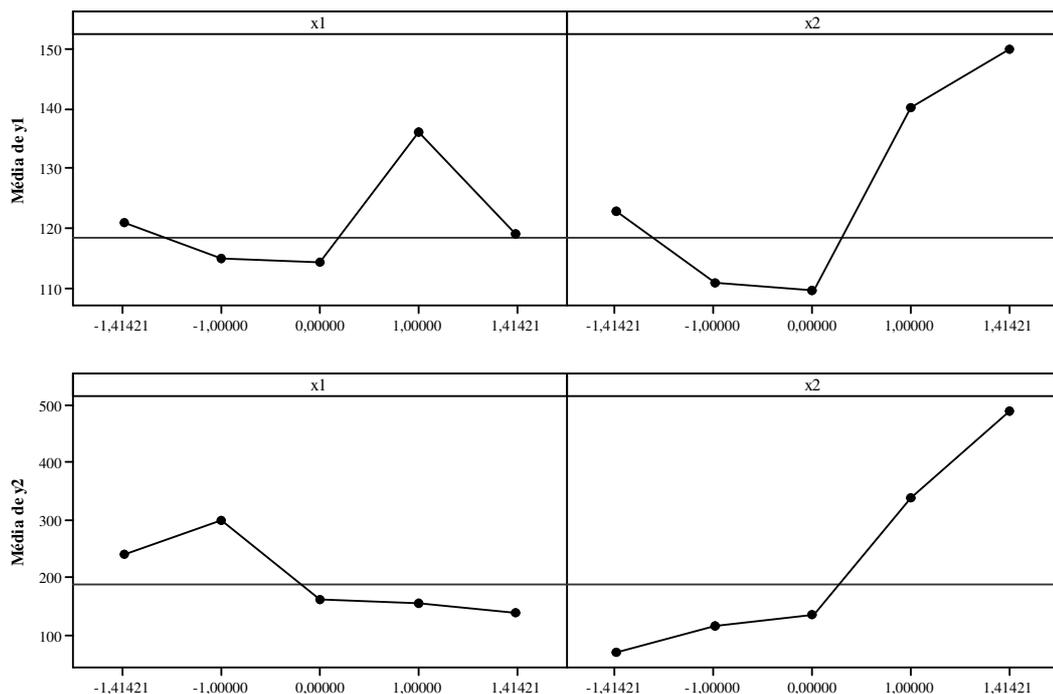


Figura 4.1 – Gráficos de efeito principal - Caso 1.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Figura 4.1, os valores de x_1 e x_2 que minimizariam y_1 são os valores próximos a zero. Porém, com o objetivo de minimizar y_2 , seria necessário aumentar os valores de x_1 e diminuir os valores de x_2 , o que levaria a maiores valores de y_1 . Assim, a Figura 4.1 apresenta a natureza conflitante entre as respostas, uma vez que, a tentativa de minimizar os

valores da primeira, levaria a maiores valores na segunda, o mesmo acontecendo para o contrário.

Visando checar a convexidade das funções, pode-se analisar a natureza do ponto estacionário usando a Equação 2.12. Para y_1 os autovalores são [17,4142; 4,0608] e para y_2 os autovalores são [94,1327; 21,1173], ou seja, os sinais positivos dos autovalores indicam que as funções são convexas e os respectivos pontos estacionários são pontos de mínimo. Nesse caso, uma vez que as funções são convexas, além do NBI, o próprio método de somas ponderadas poderia ser utilizado, pois este teria um bom desempenho. Entretanto, com o intuito de comparar os resultados entre os casos, o NBI será utilizado. A Figura 4.2 apresenta a superfície de resposta para os modelos gerados.

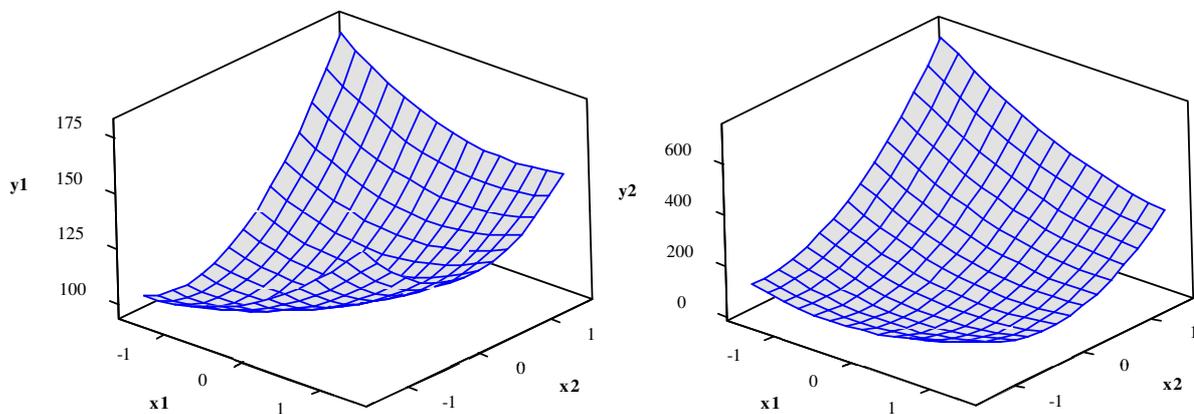


Figura 4.2 – Superfícies de resposta - Caso 1.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Para implementar o NBI, que equivale ao Passo 3 da presente proposta, a matriz *payoff* foi inicialmente estimada, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 4.3. É importante destacar que, os pontos de ótimo das funções em análise estão dentro da região experimental, uma vez que a restrição da região esférica, $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, permanece inativa durante o processo de otimização. Esta constatação pode ser comprovada ao se observar que o valor do multiplicador de Lagrange associado à restrição da região esférica é igual a zero.

Tabela 4.3 – Matriz *payoff* para as funções objetivo - Caso 1

y_1	y_2
98,576	106,410
106,862	62,358

Valores em negrito representam ótimos individuais.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Uma vez implementado o NBI, um arranjo de misturas para os pesos de cada função objetivo (Passo 4) foi definido. Subsequentemente, a solução de otimização do NBI foi obtido para cada condição experimental definida pelo arranjo de misturas (Passo 5). Baseado nesses resultados, procedeu-se, então, ao cálculo das métricas a serem utilizadas para a definição dos pesos ótimos e escolha do ponto Pareto ótimo preferido (*most preferred*) (Passo 6). Os resultados são apresentados na Tabela 4.4, que apresenta um arranjo *simplex lattice* de grau 10.

Tabela 4.4 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 1

Pesos		y_1	y_2	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{MAPE}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$	UPV
w_1	w_2							MAPE	MAPE	MAPE	
1,00	0,00	98,58	106,41	0,00	0,00	0,00	0,35	0,00	0,00	0,00	0,40
0,90	0,10	98,70	96,55	0,33	0,03	0,10	0,27	1,18	0,10	0,36	0,35
0,80	0,20	99,04	88,38	0,50	0,05	0,18	0,21	2,37	0,22	0,84	0,31
0,70	0,30	99,57	81,65	0,61	0,06	0,23	0,16	3,83	0,39	1,45	0,28
0,60	0,40	100,26	76,16	0,67	0,07	0,27	0,12	5,64	0,59	2,22	0,26
0,50	0,50	101,09	71,77	0,69	0,07	0,28	0,09	7,86	0,84	3,13	0,24
0,40	0,60	102,04	68,32	0,67	0,07	0,27	0,07	10,30	1,08	4,05	0,23
0,30	0,70	103,10	65,72	0,61	0,06	0,23	0,05	12,24	1,24	4,65	0,22
0,20	0,80	104,26	63,88	0,50	0,05	0,18	0,04	12,18	1,15	4,30	0,22
0,10	0,90	105,52	62,76	0,33	0,03	0,10	0,04	8,46	0,69	2,59	0,21
0,00	1,00	106,86	62,36	0,00	0,00	0,00	0,04	0,00	0,00	0,00	0,21
0,75	0,25	99,28	84,85	0,56	0,06	0,21	0,18	3,06	0,30	1,13	0,29
0,25	0,75	103,67	64,71	0,56	0,06	0,21	0,04	12,58	1,24	4,63	0,22

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os dados contidos na Tabela 4.4 correspondem aos pontos Pareto ótimos da otimização das respostas y_1 e y_2 . Esse conjunto de pontos forma a fronteira de Pareto para o problema em análise. A Figura 4.2 apresenta graficamente a Fronteira de Pareto obtida.

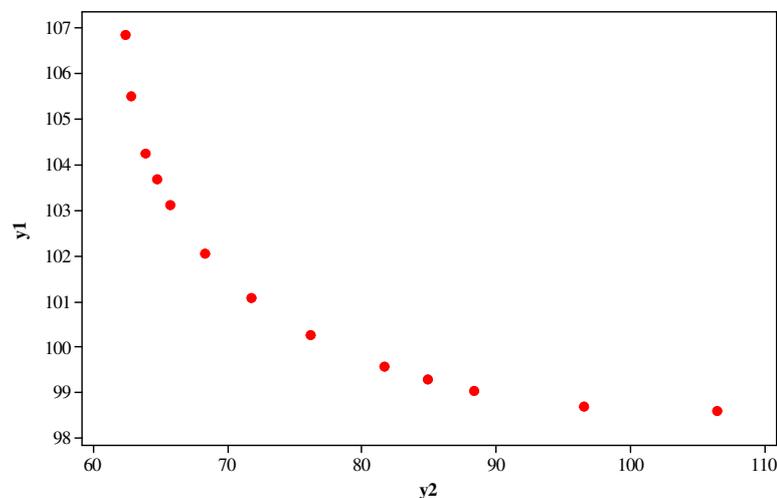


Figura 4.3 – Fronteira de Pareto - Caso 1.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Nota-se na Figura 4.3 que o método de otimização multiobjetivo empregado, o NBI, foi capaz de construir uma fronteira de Pareto com pontos uniformemente distribuídos, o que se torna uma vantagem no processo de tomada de decisão por permitir ao decisor avaliar, de maneira mais fácil, o comportamento *trade-off* e como a priorização de uma resposta afeta a outra. Isto não seria possível se houvesse a aglomeração de soluções em algum ponto, gerando uma fronteira descontínua. Já o arranjo de misturas, ao fornecer uma combinação uniforme dos pesos, favorece a construção da fronteira e a obtenção dos polinômios canônicos de mistura por meio da modelagem das respostas.

Buscando-se visualizar o espaço de solução referente aos pontos Pareto ótimos, apresenta-se a Figura 4.4. Uma vez que a variância da previsão é medida no espaço de solução, ou seja, $UPV = \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$, visualizar como os pontos se distribuem neste espaço é fundamental, pois, pode dar indícios de como a variância se comporta no problema analisado.

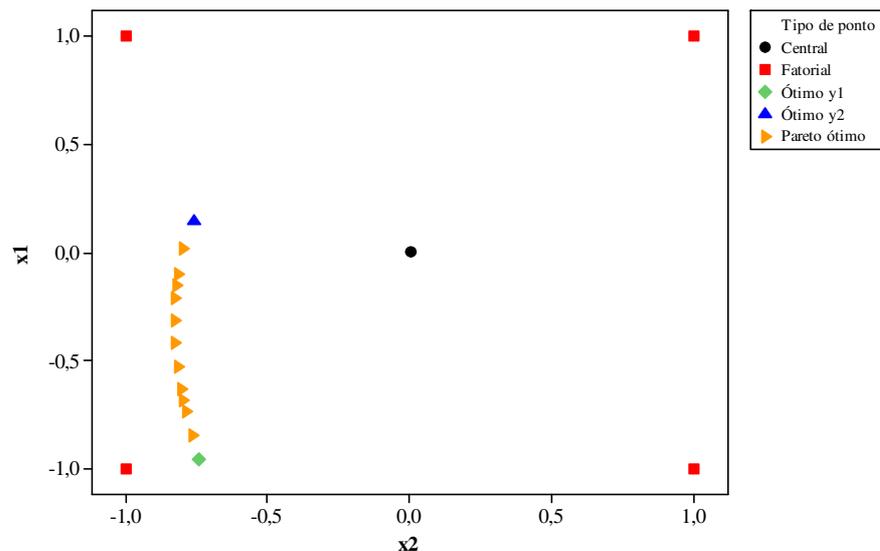


Figura 4.4 – Espaço de solução - Caso 1.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Percebe-se, ao se analisar a Figura 4.4, que a localização dos pontos de solução para a otimização das respostas analisadas encontra-se um pouco distante do centro do espaço experimental. Isto leva as respostas a apresentarem maiores valores para a variância de previsão. Além disso, os pontos que otimizam cada resposta individualmente, não estão à mesma distância do ponto central. Claramente, o ponto que otimiza a resposta y_1 está mais distante do centro, o que acarreta em maiores valores de variância de previsão para esta

reposta quando comparada à y_2 . Outro aspecto importante é que os pesos atribuídos às respostas durante a otimização, influenciam os pontos no espaço de solução, o que dá indícios de que a ponderação tem influência na variância de previsão.

Com base nos dados apresentados na Tabela 4.4, foi realizada uma análise de correlação de Pearson entre as métricas de ponderação e a medida de variância, UPV. Assim, a Tabela 4.5 apresenta os resultados da análise de correlação, juntamente, com seus respectivos *p-values*. Uma vez que os *p-values* indicam o menor nível α em que os dados são significantes, valores menores que 5% indicam correlações estatisticamente significantes.

Tabela 4.5 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 1

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
UPV	Correlação	-0,358	-0,358	-0,358	0,998	-0,687	-0,672	-0,672
	<i>p-value</i>	0,230	0,230	0,230	0,000	0,010	0,012	0,012

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Ao analisar-se a Tabela 4.5 percebe-se, inicialmente, que as métricas de diversificação, $S(x)$, DC e DO, apresentam os mesmos valores de correlação em relação à UPV. Isso ocorre, pois, os valores de diversidade para apenas dois itens se comportam, exatamente, como a medida de entropia.

Ainda, com relação às métricas de diversificação, pode ser observado que, apesar destas apresentarem correlação negativa com a métrica de mensuração da variância de previsão, seu valor não é estatisticamente significativo. Duas são as justificativas para este resultado. Primeiro, recorre-se à Equação 3.3, que apresenta que uma correlação positiva entre as respostas pode favorecer o aumento da variância ao se realizar a diversificação. Ao realizar uma análise de correlação de Pearson entre os valores experimentais apresentados na Tabela 4.1, chega-se ao resultado de correlação entre as respostas de 0,705, significativo ao nível de 5%. Além disso, a disposição dos pontos ótimos no espaço de solução conduz a uma região de maiores valores de variância por estarem situados distantes do centro do espaço experimental.

Com relação à métrica de erro, o MAPE, esta se apresentou como positivamente e significativamente correlacionado à UPV. Uma vez que a UPV é uma medida de variância e a variância é uma medida de dispersão, pontos localizados em regiões de maior UPV tendem a gerar maior erro médio entre as respostas, o que é medido pelo MAPE. Nesse caso, ao se minimizar o MAPE, automaticamente se conduziria a uma região de menor variância, o que

levaria a supor que a métrica de erro seria a mais conveniente ao se propor um método para a definição de pesos ótimos em otimização multiobjetivo, com o intuito de reduzir a variância de previsão da resposta obtida. Porém, esta prática pode levar a atribuição de pesos iguais a zero para as respostas que mais contribuem para aumentar o erro, o que descaracterizaria a otimização multiobjetivo. Isto ocorre, pois, uma função objetivo cujo valor ideal está mais próximo da região objetivo viável, acaba recebendo maior importância (MIETTINEN, 1999).

Tendo isto em conta, a proposta de Rocha *et al.* (2015a, 2015b), de associar uma medida de dispersão a uma medida de erro, foi também analisada. Assim, as razões das métricas de diversificação, $S(x)$, DC e DO, com o MAPE foram analisadas apresentando valores de correlação com a UPV de -0,687, -0,672 e -0,672, respectivamente, valores estes muito próximos ao apresentado por Rocha *et al.* (2016), ao usar estratégia semelhante em um problema de otimização de torneamento de aço endurecido. As correlações negativas e estatisticamente significantes apresentadas por essas métricas, as credenciam como bons parâmetros para a definição de pesos ótimos para o problema de otimização multiobjetivo apresentado, levando a uma redução da variância e, conseqüentemente, a uma resposta robusta do ponto de vista da variabilidade, mantendo a diversificação entre as respostas.

O Passo 7 engloba a modelagem das métricas de ponderação, a partir dos dados apresentados na Tabela 4.4. Assim, seus polinômios canônicos de mistura são:

$$S(x) = 0,0035w_1 + 0,0035w_2 + 2,7310w_1w_2 + 1,1223w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.1)$$

$$DC = 0,295w_1w_2 \quad (4.2)$$

$$DO = 1,1042w_1w_2 \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \text{MAPE} = & 0,3532w_1 + 0,0420w_2 - 0,4376w_1w_2 - 0,0875w_1w_2(w_1 - w_2) - \\ & 0,0274w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$S(x)/MAPE = -0,064w_1 - 0,0408w_2 + 32,154w_1w_2 - 50,437w_1w_2(w_1 - w_2) + 37,192w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.5)$$

$$DC/MAPE = 0,008w_1 - 0,032w_2 + 3,501w_1w_2 - 4,957w_1w_2(w_1 - w_2) + 2,202w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.6)$$

$$DO/MAPE = 0,030w_1 - 0,118w_2 + 13,103w_1w_2 - 18,554w_1w_2(w_1 - w_2) + 8,243w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.7)$$

$$UPV = 0,4025w_1 + 0,2072w_2 - 0,2497w_1w_2 - 0,1270w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,0491w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.8)$$

Cabe destacar que todos os polinômios canônicos de mistura tiveram ótimo ajuste, uma vez que todos possuem R^2 ajustado próximo de 100%. Esse resultado já era esperado para as métricas diretamente calculadas com base nos pesos, como $S(x)$, DC e DO. Entretanto, as métricas de erro, MAPE, e de variância de previsão, UPV, são calculadas pelos valores das respostas e das variáveis de decisão, respectivamente. Mesmo assim, como esses valores variam de acordo com a alteração nos valores dos pesos, seus modelos matemáticos baseados nos pesos também apresentaram R^2 ajustado de 100%. Assim, algo que chama a atenção nesta análise é o fato de que se conseguiu modelar a variância em função dos pesos. Isto ocorre, pois, os pesos interferem no espaço de solução, como pode ser visto na Figura 4.4.

Por fim, executa-se o Passo 8, que consiste na determinação dos pesos a serem utilizados para a escolha do ponto Pareto ótimo preferido. Uma vez que se conhece as características de convexidade e as correlações entre as métricas de ponderação e a UPV, a maximização das métricas de diversificação, assim como a minimização da métrica de erro, são executadas, utilizando para isso o algoritmo GRG. Esse processo executado para cada métrica gera um vetor de pesos ótimos a serem utilizados no problema de otimização original, implementado pelo NBI, gerando uma resposta ótima diferente, permitindo sua comparação. A Tabela 4.6 apresenta um resumo dos resultados obtidos.

Tabela 4.6 – Resumo dos resultados - Caso 1

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
Pesos	w_1	0,500	0,500	0,500	0,108	0,252	0,277	0,277
	w_2	0,500	0,500	0,500	0,892	0,748	0,723	0,723
Variáveis	x_1	-0,421	-0,421	-0,421	0,017	-0,155	-0,185	-0,185
	x_2	-0,828	-0,828	-0,828	-0,799	-0,826	-0,828	-0,828
Respostas	y_1	101,086	101,086	101,086	105,515	103,670	103,354	103,354
	y_2	71,765	71,765	71,765	62,759	64,712	65,243	65,243
UPV		0,242	0,242	0,242	0,211	0,219	0,221	0,221

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Como pode ser observado, os resultados alcançados para as métricas de diversificação $S(x)$, DC e DO são os mesmos. Isso ocorre, pois, para o caso em que são analisadas duas respostas, as métricas de diversidade são semelhantes à métrica de entropia. Com relação à métrica de erro, MAPE, esta obteve o melhor resultado entre todas as métricas no intuito de reduzir a variância de previsão, gerando o vetor de pesos que conduziu as respostas para o ponto com menor variância dentre as métricas avaliadas. Para o caso analisado, o MAPE se apresenta como uma métrica de ponderação plausível, ainda, pelo fato de que a minimização de seu polinômio canônico de mistura não gerou peso igual a zero, mantendo a característica da otimização multiobjetivo. Com relação às métricas medidas pela razão entre as métricas de diversificação e erro, todas tiveram bom desempenho, principalmente quando se considera que o valor máximo de UPV para o problema analisado foi de 0,403. Estas métricas, apesar de gerarem vetor de pesos cujas respostas apresentaram maiores valores para a variância de previsão quando comparadas ao uso do MAPE, geraram respostas mais diversificadas. O uso de DC/MAPE e DO/MAPE geraram, exatamente, a mesma resposta.

Por fim, a Figura 4.5 apresenta os resultados obtidos com a utilização do MAPE e do $S(x)/\text{MAPE}$ diretamente na fronteira Pareto ótima.

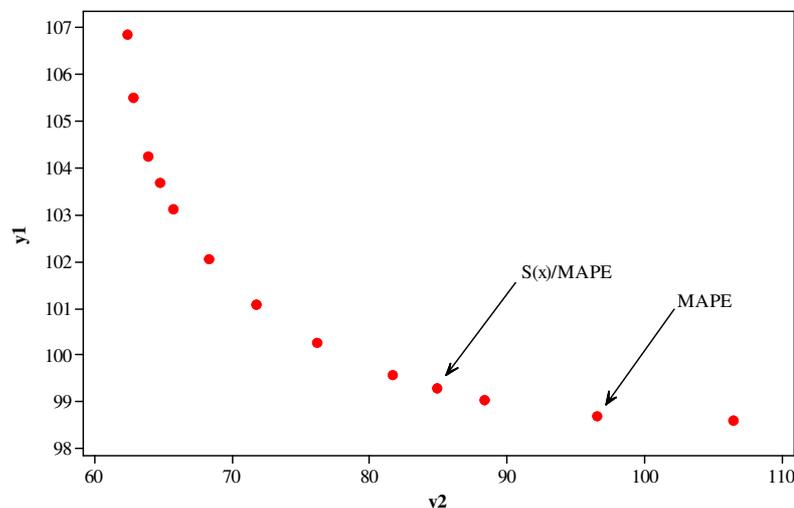


Figura 4.5 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 1.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Como pode ser observado na Figura 4.5, a função y_2 foi priorizada pelas métricas de ponderação utilizadas, uma vez que os maiores pesos gerados foram relativos a essa resposta. Isso ocorreu, principalmente, devido ao fato de que a função y_1 tem seu ótimo em uma região de maior variância. Isso comprova que as métricas de ponderação utilizadas conduziram a respostas robustas, do ponto de vista da variabilidade. Além disso, uma vez que a distribuição dos pesos entre as respostas é responsável pelo deslocamento dos respectivos pontos no espaço de solução, fica evidente que os pesos utilizados no processo de otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida.

4.2 – CASO 2

Para a análise do segundo caso, considere que um determinado processo possua algumas características que dependem basicamente de duas variáveis. Assim, com o intuito de analisar duas de suas características, uma que se deseja maximizar e outra que se deseja minimizar, um conjunto sequencial de experimentos foi estabelecido usando um CCD, construído de acordo com o design de superfície de resposta 2^2 , com 4 pontos axiais e 5 pontos centrais, gerando 13 experimentos. A Tabela 4.7 apresenta o CCD para este processo.

Tabela 4.7 – CCD simulado para duas respostas - Caso 2

N	x_1	x_2	y_1	y_2
1	-1	-1	81	90
2	+1	-1	90	132
3	-1	+1	136	140
4	+1	+1	100	140
5	-1.4142	0	90	121
6	+1.4142	0	83	119
7	0	-1.4142	98	123
8	0	+1.4142	138	150
9	0	0	155	101
10	0	0	165	112
11	0	0	170	108
12	0	0	160	99
13	0	0	153	107

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como no primeiro caso, a matriz experimental apresentada na Tabela 4.7, equivalente ao Passo 1 do método proposto, apresenta as características de rotacionalidade e de boa dispersão da variância de previsão por toda a região experimental.

A análise dos dados experimentais geram a modelagem matemática apresentada na Tabela 4.8, modelagem esta que equivale ao Passo 2 do método proposto.

Tabela 4.8 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 2

Termos	y_1	y_2
Constante	160,600	105,400
x_1	-4,612	4,896
x_2	15,196	12,023
x_1^2	-37,175	6,612
x_2^2	-21,425	14,862
$x_1 \times x_2$	-11,250	-10,500
p-value	0,000	0,003
R^2 (%)	98,30%	89,04%
R^2 ajustado (%)	97,09%	81,20%

Valores em negrito representam termos significantes nos modelos (p -value < 5%).

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

A adequação dos modelos foi analisada pela ANOVA. Os p -values para as funções objetivo em análise mostram uma regressão estatisticamente significativa ao nível de significância de 5%, provando a adequação das funções. Além disso, os valores de R^2 e R^2 ajustado mostram que os modelos têm um bom ajuste.

Com o intuito de comparar como cada variável de decisão afeta cada resposta, os gráficos de efeito principal para as duas respostas em análise são mostrados na Figura 4.6.

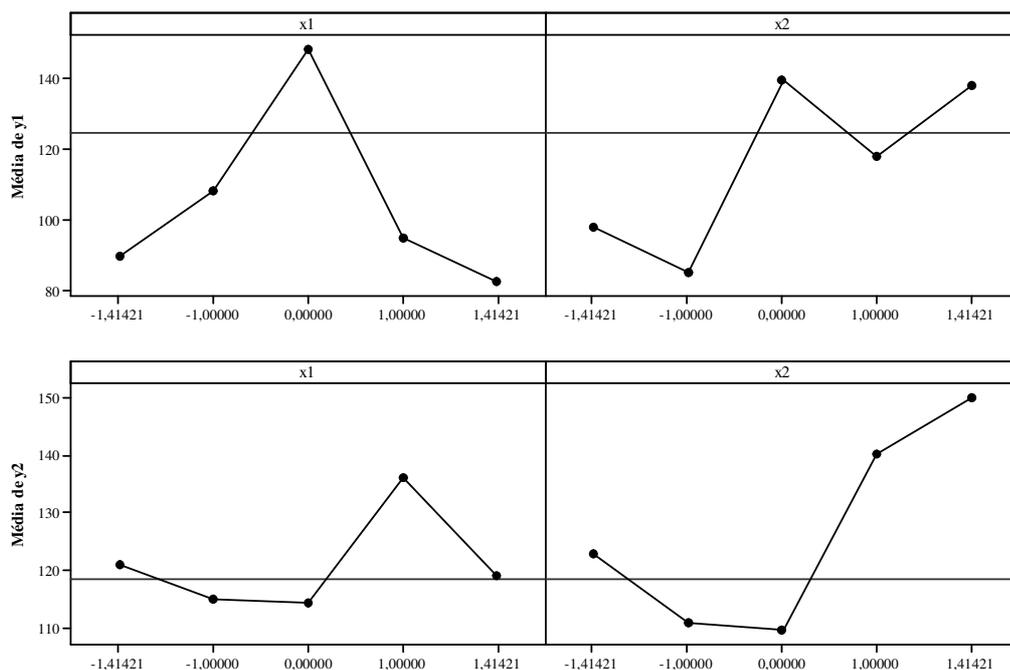


Figura 4.6 – Gráficos de efeito principal - Caso 2.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Figura 4.6, os valores de x_1 e x_2 que maximizariam y_1 são os valores próximos a 0 e a 1,4142, respectivamente. Porém, com o objetivo de minimizar y_2 , seria necessário diminuir os valores de x_2 , o que levaria a menores valores de y_1 . Assim, a Figura 4.6 apresenta a natureza conflitante entre as respostas, uma vez que, a tentativa de maximizar os valores da primeira, levaria a maiores valores na segunda, e a tentativa de minimizar os valores da segunda, levaria a menores valores na primeira.

Visando checar a convexidade das funções, pode-se analisar a natureza do ponto estacionário usando a Equação 2.12. Para y_1 os autovalores são $[-38,9776; -19,6224]$ e para y_2 os autovalores são $[17,4142; 4,0608]$. Os sinais negativos dos autovalores de y_1 indicam que a função é côncava e seu ponto estacionário é um ponto de máximo. Já os sinais positivos dos autovalores de y_2 indicam que a função é convexa e seu ponto estacionário é um ponto de mínimo. Nesse caso, uma vez que as funções apresentam diferentes convexidades, o método de somas ponderadas, por exemplo, não seria adequado para a resolução do problema. Nesse caso, seria necessário um método capaz de identificar os pontos Pareto ótimos inclusive na parte não convexa do problema, como o NBI. A Figura 4.7 apresenta a superfície de resposta para os modelos gerados.

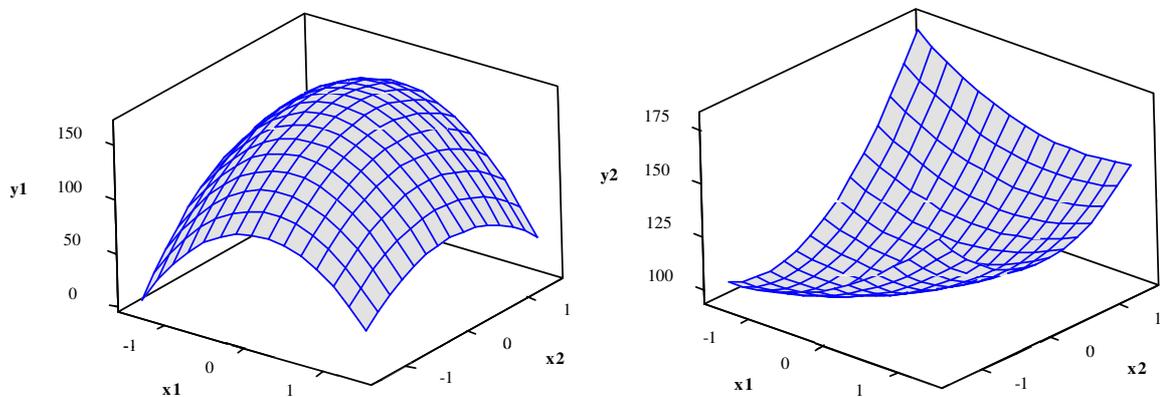


Figura 4.7 – Superfícies de resposta - Caso 2.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Para implementar o NBI, que equivale ao Passo 3 da presente proposta, a matriz *payoff* foi inicialmente estimada, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 4.9. É importante destacar que, os pontos de ótimo das funções em análise estão dentro da região experimental, uma vez que a restrição da região esférica, $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, permanece inativa durante o processo de otimização. Esta constatação pode ser comprovada ao se observar que o valor do multiplicador de Lagrange associado à restrição da região esférica é igual a zero.

Tabela 4.9 – Matriz *payoff* para as funções objetivo - Caso 2

y_1	y_2
163,813	112,256
99,510	98,576

Valores em negrito representam ótimos individuais.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Uma vez implementado o NBI, um arranjo de misturas para os pesos de cada função objetivo (Passo 4) foi definido. Subsequentemente, a solução de otimização do NBI foi obtido para cada condição experimental definida pelo arranjo de misturas (Passo 5). Baseado nesses resultados, procedeu-se, então, ao cálculo das métricas a serem utilizadas para a definição dos pesos ótimos e escolha do ponto Pareto ótimo preferido (*most preferred*) (Passo 6). Os resultados são apresentados na Tabela 4.10, que apresenta um arranjo *simplex lattice* de grau 10.

Tabela 4.10 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 2

Pesos		y_1	y_2	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$S(x)$	DC	DO	UPV
w_1	w_2							MAPE	MAPE	MAPE	
1,00	0,00	163,81	112,26	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00	0,00	0,00	0,19
0,90	0,10	163,35	109,46	0,33	0,11	0,13	0,06	5,74	1,93	2,24	0,19
0,80	0,20	161,78	106,93	0,50	0,19	0,23	0,05	10,31	4,00	4,64	0,20
0,70	0,30	158,89	104,71	0,61	0,25	0,30	0,05	13,24	5,53	6,41	0,19
0,60	0,40	154,51	102,85	0,67	0,29	0,34	0,05	13,43	5,82	6,75	0,19
0,50	0,50	148,56	101,37	0,69	0,30	0,35	0,06	11,42	5,00	5,80	0,19
0,40	0,60	141,11	100,25	0,67	0,29	0,34	0,08	8,66	3,75	4,35	0,19
0,30	0,70	132,29	99,45	0,61	0,25	0,30	0,10	6,07	2,53	2,94	0,21
0,20	0,80	122,29	98,94	0,50	0,19	0,23	0,13	3,89	1,51	1,75	0,25
0,10	0,90	111,31	98,66	0,33	0,11	0,13	0,16	2,02	0,68	0,79	0,31
0,00	1,00	99,51	98,58	0,00	0,00	0,00	0,20	0,00	0,00	0,00	0,40
0,75	0,25	160,52	105,78	0,56	0,23	0,26	0,05	12,07	4,89	5,67	0,20
0,25	0,75	127,43	99,16	0,56	0,23	0,26	0,11	4,93	2,00	2,32	0,23

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os dados contidos na Tabela 4.10 correspondem aos pontos Pareto ótimos da otimização das respostas y_1 e y_2 . Esse conjunto de pontos forma a fronteira de Pareto para o problema em análise. A Figura 4.8 apresenta graficamente a Fronteira de Pareto obtida.

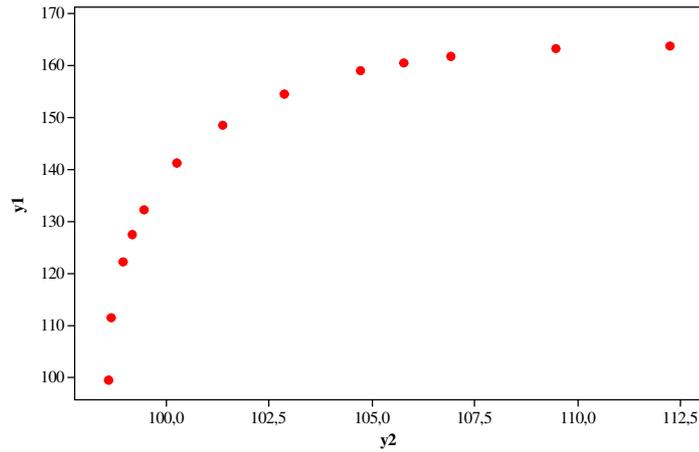


Figura 4.8 – Fronteira de Pareto - Caso 2.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Nota-se na Figura 4.8 que o método de otimização multiobjetivo empregado, o NBI, foi capaz de construir uma fronteira de Pareto com pontos uniformemente distribuídos, o que se torna uma vantagem no processo de tomada de decisão por permitir ao decisor avaliar, de maneira mais fácil, o comportamento *trade-off* e como a priorização de uma resposta afeta a outra. Isto não seria possível se houvesse a aglomeração de soluções em algum ponto, gerando uma fronteira descontínua. Já o arranjo de misturas, ao fornecer uma combinação uniforme dos pesos, favorece a construção da fronteira e a obtenção dos polinômios canônicos de mistura por meio da modelagem das respostas.

Buscando-se visualizar o espaço de solução referente aos pontos Pareto ótimos, apresenta-se a Figura 4.9. Uma vez que a variância da previsão é medida no espaço de solução, ou seja, $UPV = \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$, visualizar como os pontos se distribuem neste espaço é fundamental, pois, pode dar indícios de como a variância se comporta no problema analisado.

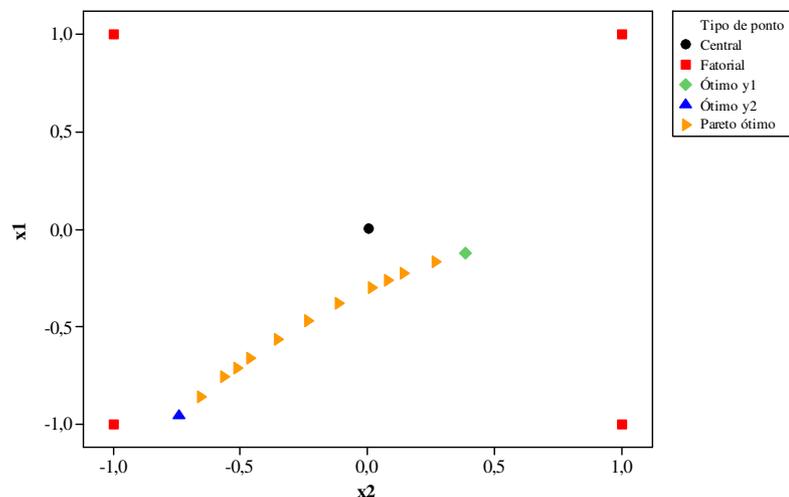


Figura 4.9 – Espaço de solução - Caso 2.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Percebe-se, ao se analisar a Figura 4.9, que os pontos que otimizam cada resposta individualmente, não estão à mesma distância do ponto central. Claramente, o ponto que otimiza a resposta y_2 está mais distante do centro, o que acarreta em maiores valores de variância de previsão para esta resposta quando comparada à y_1 . Outro aspecto importante é que os pesos atribuídos às respostas durante a otimização, influenciam os pontos no espaço de solução, o que dá indícios de que a ponderação tem influência na variância de previsão.

Com base nos dados apresentados na Tabela 4.10, foi realizada uma análise de correlação de Pearson entre as métricas de ponderação e a medida de variância, UPV. Assim, a Tabela 4.11 apresenta os resultados da análise de correlação, juntamente, com seus respectivos *p-values*. Uma vez que os *p-values* indicam o menor nível α em que os dados são significantes, valores menores que 5% indicam correlações estatisticamente significantes.

Tabela 4.11 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 2

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
UPV	Correlação	-0,586	-0,585	-0,585	0,932	-0,638	-0,625	-0,625
	<i>p-value</i>	0,035	0,036	0,036	0,000	0,019	0,022	0,022

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Ao analisar-se a Tabela 4.11 percebe-se, inicialmente, que as métricas de diversificação, $S(x)$, DC e DO, apresentam valores muito próximos de correlação em relação à UPV. Isso ocorre, pois, os valores de diversidade para apenas dois itens se comportam, exatamente, como a medida de entropia.

Com relação às métricas de diversificação, observa-se que estas apresentam correlação negativa e significativa com a métrica de mensuração da variância de previsão, o que pode ser explicado, pois, diferentemente do que ocorreu no primeiro caso analisado, existe uma correlação negativa entre y_1 e y_2 (-0,214), porém não estatisticamente significativa. Além disso, um dos pontos ótimos está situado próximo do centro do espaço experimental, apresentando menores valores de variância.

Com relação ao MAPE, este se apresentou como positivamente e significativamente correlacionado à UPV, resultado muito próximo ao obtido no primeiro caso analisado. Já as razões das métricas de diversificação, $S(x)$, DC e DO, com o MAPE foram analisadas apresentando valores de correlação com a UPV de -0,638, -0,625 e -0,625, respectivamente, todas estatisticamente significantes.

O Passo 7 engloba a modelagem das métricas de ponderação, a partir dos dados apresentados na Tabela 4.10. Assim, seus polinômios canônicos de mistura são:

$$S(x) = 0,0035w_1 + 0,0035w_2 + 2,7310w_1w_2 + 1,1223w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.9)$$

$$DC = 1,2140w_1w_2 \quad (4.10)$$

$$DO = 1,4084w_1w_2 \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} MAPE = 0,0695w_1 + 0,1962w_2 - 0,2882w_1w_2 - 0,0214w_1w_2(w_1 - w_2) + \\ 0,0321w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$S(x)/MAPE = -0,4897w_1 + 0,2213w_2 + 46,1831w_1w_2 + 38,8652w_1w_2(w_1 - w_2) \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} DC/MAPE = -0,207w_1 + 0,179w_2 + 20,333w_1w_2 + 15,817w_1w_2(w_1 - w_2) - \\ 8,200w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} DO/MAPE = -0,240w_1 + 0,207w_2 + 23,588w_1w_2 + 18,349w_1w_2(w_1 - w_2) - \\ 9,512w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned} UPV = 0,1909w_1 + 0,4034w_2 - 0,4283w_1w_2 + 0,3906w_1w_2(w_1 - w_2) - \\ 0,1136w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \end{aligned} \quad (4.16)$$

Cabe destacar que todos os polinômios canônicos de mistura tiveram ótimo ajuste, uma vez que todos possuem R^2 ajustado próximo de 100%. Esse resultado já era esperado para as métricas diretamente calculadas com base nos pesos, como $S(x)$, DC e DO. Entretanto, as métricas de erro, MAPE, e de variância de previsão, UPV, são calculadas pelos

valores das respostas e das variáveis de decisão, respectivamente. Mesmo assim, como esses valores variam de acordo com a alteração nos valores dos pesos, seus modelos matemáticos baseados nos pesos também apresentaram R^2 ajustado de 100%. Assim, algo que chama a atenção nesta análise é o fato de que se conseguiu modelar a variância em função dos pesos. Isto ocorre, pois, os pesos interferem no espaço de solução, como pode ser visto na Figura 4.9.

Por fim, executa-se o Passo 8, que consiste na determinação dos pesos a serem utilizados para a escolha do ponto Pareto ótimo preferido. Uma vez que se conhece as características de convexidade e as correlações entre as métricas de ponderação e a UPV, a maximização das métricas de diversificação, assim como a minimização da métrica de erro, são executadas, utilizando para isso o algoritmo GRG. Esse processo executado para cada métrica gera um vetor de pesos ótimos a serem utilizados no problema de otimização original, implementado pelo NBI, gerando uma resposta ótima diferente, permitindo sua comparação. A Tabela 4.12 apresenta um resumo dos resultados obtidos.

Tabela 4.12 – Resumo dos resultados - Caso 2

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
Pesos	w_1	0,500	0,500	0,500	0,713	0,648	0,614	0,614
	w_2	0,500	0,500	0,500	0,287	0,352	0,386	0,386
Variáveis	x_1	-0,467	-0,467	-0,467	-0,288	-0,339	-0,367	-0,367
	x_2	-0,238	-0,238	-0,238	0,029	-0,055	-0,097	-0,097
Respostas	y_1	148,565	148,565	148,565	159,355	156,791	155,201	155,201
	y_2	101,370	101,370	101,370	104,983	103,694	103,087	103,087
UPV		0,190	0,190	0,190	0,195	0,193	0,192	0,192

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Tabela 4.12, todas as métricas analisadas tiveram bom desempenho, principalmente quando se considera que o valor máximo de UPV para o problema analisado foi de 0,403. Os resultados alcançados para as métricas de diversificação $S(x)$, DC e DO são os mesmos. Isso ocorre, pois, para o caso em que são analisadas duas respostas, as métricas de diversidade são semelhantes à métrica de entropia. O uso de DC/MAPE e DO/MAPE geraram, também, a mesma resposta. Assim como aconteceu no primeiro caso, o MAPE se apresenta como uma métrica de ponderação plausível, pelo fato de que a minimização de seu polinômio canônico de mistura não gerou peso igual a zero. Ainda, cabe destacar que, para o problema analisado, as métricas de diversificação $S(x)$, DC e DO obtiveram os melhores

resultados de UPV, ainda que todas as métricas utilizadas tenham tido performance muito similar para o problema em análise.

Por fim, a Figura 4.10 apresenta os resultados obtidos com a utilização do DC e do DC/MAPE diretamente na fronteira Pareto ótima.

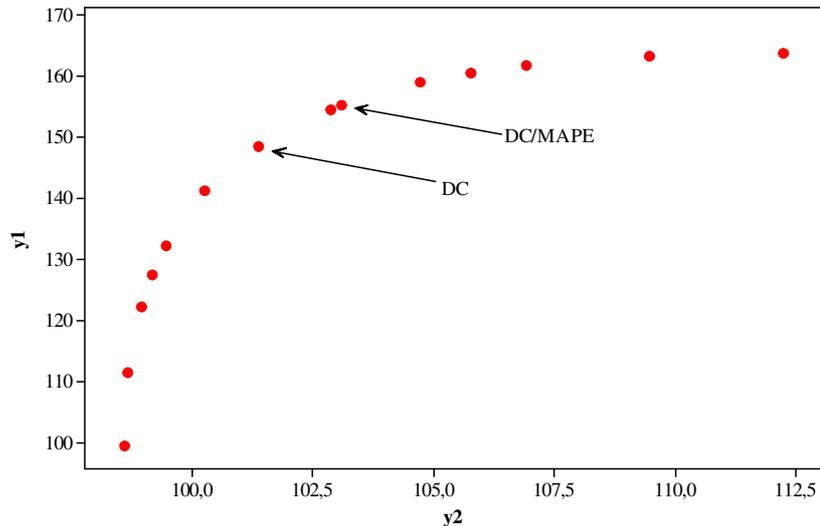


Figura 4.10 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 2.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Como pode ser observado na Figura 4.10, a função y_1 foi priorizada pelas métricas de ponderação que utilizaram o MAPE, uma vez que os maiores pesos gerados foram relativos a essa resposta. Isso ocorreu, principalmente, devido ao fato de que a função y_2 tem seu ótimo em uma região de maior variância. Isso comprova que as métricas de ponderação utilizadas, mesmo quando considerando somente a diversificação, conduziram a respostas robustas, do ponto de vista da variabilidade. Além disso, uma vez que a distribuição dos pesos entre as respostas é responsável pelo deslocamento dos respectivos pontos no espaço de solução, novamente, fica evidente que os pesos utilizados no processo de otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida.

4.3 – CASO 3

Para a análise do terceiro caso, considere que um determinado processo possua algumas características que dependem basicamente de duas variáveis. Assim, com o intuito de analisar duas de suas características, uma que se quer maximizar e outra que se quer minimizar, um conjunto sequencial de experimentos foi estabelecido usando um CCD,

construído de acordo com o design de superfície de resposta 2^2 , com 4 pontos axiais e 5 pontos centrais, gerando 13 experimentos. A Tabela 4.13 apresenta o CCD para este processo.

Tabela 4.13 – CCD simulado para duas respostas - Caso 3

N	x_1	x_2	y_1	y_2
1	-1	-1	81	130
2	+1	-1	90	100
3	-1	+1	136	470
4	+1	+1	100	210
5	-1.4142	0	90	240
6	+1.4142	0	83	140
7	0	-1.4142	98	70
8	0	+1.4142	138	490
9	0	0	155	80
10	0	0	165	150
11	0	0	170	100
12	0	0	160	120
13	0	0	153	130

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como nos casos anteriores, a matriz experimental apresentada na Tabela 4.13, equivalente ao Passo 1 do método proposto, apresenta as características de rotacionalidade e de boa dispersão da variância de previsão por toda a região experimental.

A análise dos dados experimentais geram a modelagem matemática apresentada na Tabela 4.14, modelagem esta que equivale ao Passo 2 do método proposto.

Tabela 4.14 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 3

Termos	y_1	y_2
Constante	160,600	116,000
x_1	-4,612	-53,928
x_2	15,196	130,496
x_1^2	-37,175	35,125
x_2^2	-21,425	80,125
$x_1 \times x_2$	-11,250	-57,500
p-value	0,000	0,000
R^2 (%)	98,30%	96,36%
R^2 ajustado (%)	97,09%	93,75%

Valores em negrito representam termos significantes nos modelos (p -value < 5%).

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

A adequação dos modelos foi analisada pela ANOVA. Os *p-values* para as funções objetivo em análise mostram uma regressão estatisticamente significativa ao nível de significância de 5%, provando a adequação das funções. Além disso, os valores de R^2 e R^2 ajustado mostram que os modelos têm um bom ajuste.

Com o intuito de comparar como cada variável de decisão afeta cada resposta, os gráficos de efeito principal para as duas respostas em análise são mostrados na Figura 4.11.

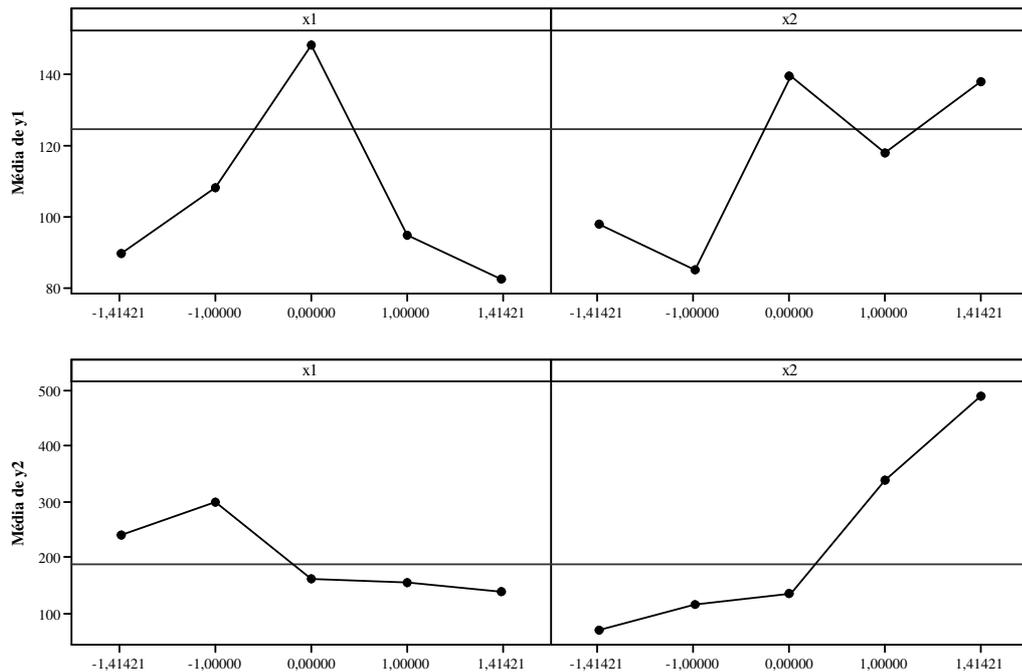


Figura 4.11 – Gráficos de efeito principal - Caso 3.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Figura 4.11, os valores de x_1 e x_2 que maximizariam y_1 são os valores próximos a 0 e a 1,4142, respectivamente. Porém, com o objetivo de minimizar y_2 , seria necessário aumentar os valores de x_1 e diminuir os valores de x_2 , o que levaria a menores valores de y_1 . Assim, a Figura 4.11 apresenta a natureza conflitante entre as respostas, uma vez que, a tentativa de maximizar os valores da primeira, levaria a maiores valores na segunda, e a tentativa de minimizar os valores da segunda, levaria a menores valores na primeira.

Visando checar a convexidade das funções, pode-se analisar a natureza do ponto estacionário usando a Equação 2.12. Para y_1 os autovalores são $[-38,9776; -19,6224]$ e para y_2 os autovalores são $[94,1327; 21,1173]$. Os sinais negativos dos autovalores de y_1 indicam que a função é côncava e seu ponto estacionário é um ponto de máximo. Já os sinais positivos dos autovalores de y_2 indicam que a função é convexa e seu ponto estacionário é um ponto de

mínimo. Nesse caso, uma vez que as funções apresentam diferentes convexidades, o método de somas ponderadas, por exemplo, não seria adequado para a resolução do problema. Nesse caso, seria necessário um método capaz de identificar os pontos Pareto ótimos inclusive na parte não convexa do problema, como o NBI. A Figura 4.12 apresenta a superfície de resposta para os modelos gerados.

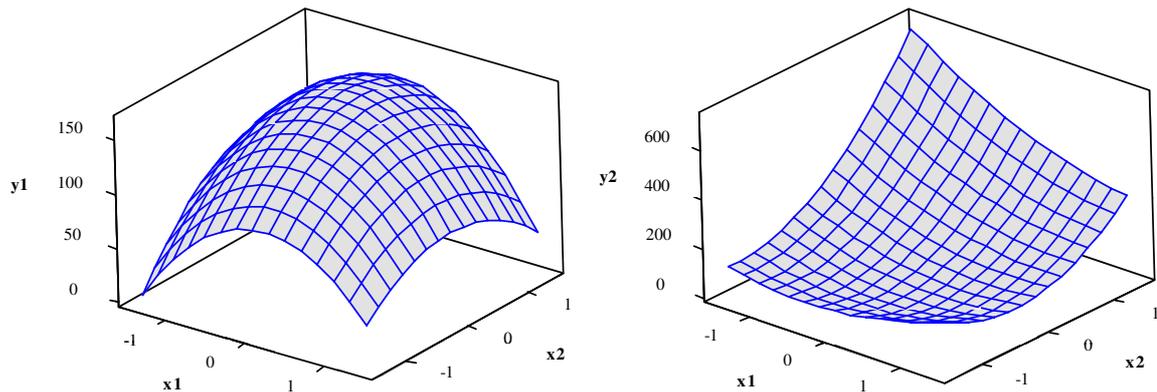


Figura 4.12 – Superfícies de resposta - Caso 3.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Para implementar o NBI, que equivale ao Passo 3 da presente proposta, a matriz *payoff* foi inicialmente estimada, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 4.15. É importante destacar que, os pontos de ótimo das funções em análise estão dentro da região experimental, uma vez que a restrição da região esférica, $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, permanece inativa durante o processo de otimização. Esta constatação pode ser comprovada ao se observar que o valor do multiplicador de Lagrange associado à restrição da região esférica é igual a zero.

Tabela 4.15 – Matriz *payoff* para as funções objetivo - Caso 3

y_1	y_2
163,813	188,044
136,341	62,358

Valores em negrito representam ótimos individuais.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Uma vez implementado o NBI, um arranjo de misturas para os pesos de cada função objetivo (Passo 4) foi definido. Subsequentemente, a solução de otimização do NBI foi obtido para cada condição experimental definida pelo arranjo de misturas (Passo 5). Baseado nesses resultados, procedeu-se, então, ao cálculo das métricas a serem utilizadas para a definição dos pesos ótimos e escolha do ponto Pareto ótimo preferido (*most preferred*) (Passo 6). Os

resultados são apresentados na Tabela 4.16, que apresenta um arranjo *simplex lattice* de grau 10.

Tabela 4.16 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 3

Pesos		y_1	y_2	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{MAPE}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$	UPV
w_1	w_2										
1,00	0,00	163,813	188,044	0,00	0,00	0,00	1,01	0,00	0,00	0,00	0,19
0,90	0,10	163,463	171,042	0,33	0,09	0,11	0,87	0,37	0,10	0,12	0,19
0,80	0,20	162,521	155,135	0,50	0,15	0,19	0,75	0,67	0,20	0,25	0,19
0,70	0,30	161,127	140,064	0,61	0,20	0,25	0,63	0,97	0,32	0,39	0,20
0,60	0,40	159,398	125,612	0,67	0,23	0,28	0,52	1,29	0,44	0,54	0,20
0,50	0,50	157,421	111,619	0,69	0,24	0,29	0,41	1,67	0,57	0,71	0,20
0,40	0,60	155,221	98,037	0,67	0,23	0,28	0,31	2,15	0,73	0,91	0,19
0,30	0,70	152,679	85,089	0,61	0,20	0,25	0,22	2,82	0,92	1,15	0,19
0,20	0,80	149,347	73,602	0,50	0,15	0,19	0,13	3,73	1,13	1,40	0,19
0,10	0,90	144,268	65,346	0,33	0,09	0,11	0,08	3,89	1,02	1,27	0,19
0,00	1,00	136,341	62,358	0,00	0,00	0,00	0,08	0,00	0,00	0,00	0,21
0,75	0,25	161,872	147,509	0,56	0,18	0,22	0,69	0,82	0,26	0,32	0,20
0,25	0,75	151,159	79,075	0,56	0,18	0,22	0,17	3,26	1,03	1,28	0,19

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os dados contidos na Tabela 4.16 correspondem aos pontos Pareto ótimos da otimização das respostas y_1 e y_2 . Esse conjunto de pontos forma a fronteira de Pareto para o problema em análise. A Figura 4.13 apresenta graficamente a Fronteira de Pareto obtida.

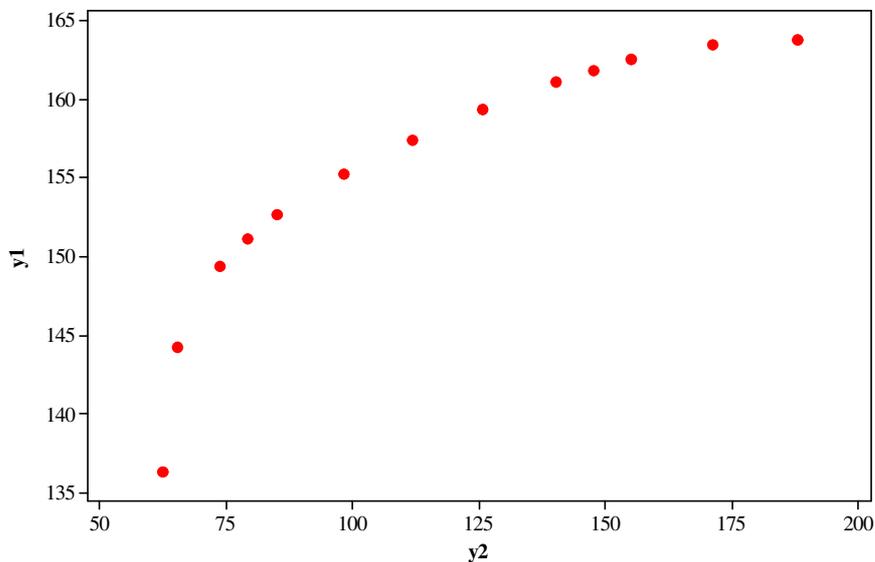


Figura 4.13 – Fronteira de Pareto - Caso 3.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como nos casos apresentados anteriormente, o NBI foi capaz de construir uma fronteira de Pareto com pontos uniformemente distribuídos, o que se torna uma vantagem no processo de tomada de decisão por permitir ao decisor avaliar, de maneira mais fácil, o

comportamento *trade-off* e como a priorização de uma resposta afeta a outra. Isto não seria possível se houvesse a aglomeração de soluções em algum ponto, gerando uma fronteira descontínua. Já o arranjo de misturas, ao fornecer uma combinação uniforme dos pesos, favorece a construção da fronteira e a obtenção dos polinômios canônicos de mistura por meio da modelagem das respostas.

Buscando-se visualizar o espaço de solução referente aos pontos Pareto ótimos, apresenta-se a Figura 4.14. Uma vez que a variância da previsão é medida no espaço de solução, ou seja, $UPV = \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$, visualizar como os pontos se distribuem neste espaço é fundamental, pois, pode dar indícios de como a variância se comporta no problema analisado.

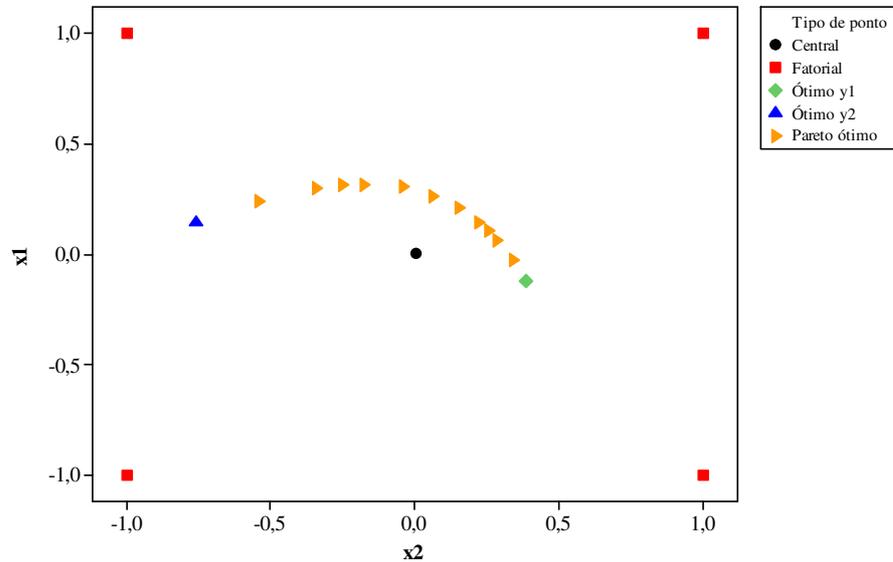


Figura 4.14 – Espaço de solução - Caso 3.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Diferentemente do que ocorreu nos casos anteriormente analisados, desta vez os pontos que otimizam cada resposta individualmente, apesar de não estarem à mesma distância do ponto central, estão bem próximos. Isto acarreta em valores de variância de previsão bem próximos para as respostas analisadas. Novamente, constata-se que, os pesos atribuídos às respostas durante a otimização influenciam os pontos também no espaço de solução, influenciando, assim, a variância de previsão.

Com base nos dados apresentados na Tabela 4.16, foi realizada uma análise de correlação de Pearson entre as métricas de ponderação e a medida de variância, UPV. Assim, a Tabela 4.17 apresenta os resultados da análise de correlação, juntamente, com seus

respectivos *p-values*. Assim como foi feito nos casos anteriores, valores de *p-values* menores que 5% indicam correlações estatisticamente significantes.

Tabela 4.17 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 3

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{MAPE}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$
UPV	Correlação	-0,339	-0,283	-0,283	-0,170	-0,552	-0,544	-0,544
	<i>p-value</i>	0,257	0,348	0,348	0,578	0,050	0,054	0,054

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Tabela 4.17, percebe-se que, apesar de todas as métricas apresentarem correlações negativas com relação à UPV, somente a razão $S(x)/MAPE$ apresentou correlação estatisticamente significativa, ao nível de 5%, com a UPV. As duas outras razões, $DC/MAPE$ e $DO/MAPE$ apresentaram correlações cujas significâncias ficaram no limite dos 5%. Apesar de as respostas analisadas, y_1 e y_2 , não apresentarem qualquer nível de correlação entre si (0,048), as respostas ótimas de cada função estão localizadas em regiões de menor variância, sendo a quase ausência de variabilidade da UPV entre as respostas, um empecilho para a análise de correlação.

O Passo 7 engloba a modelagem das métricas de ponderação, a partir dos dados apresentados na Tabela 4.16. Assim, seus polinômios canônicos de mistura são:

$$S(x) = 0,0035w_1 + 0,0035w_2 + 2,7310w_1w_2 + 1,1223w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.17)$$

$$DC = 0,952w_1w_2 \quad (4.18)$$

$$DO = 1,1791w_1w_2 \quad (4.19)$$

$$MAPE = 1,0094w_1 + 0,0823w_2 - 0,5248w_1w_2 + 0,2862w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,3579w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.20)$$

$$S(x)/MAPE = -0,1988w_1 + 0,3613w_2 + 5,6201w_1w_2 - 13,1765w_1w_2(w_1 - w_2) + 22,4202w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.21)$$

$$DC/MAPE = -0,0466w_1 + 0,0709w_2 + 2,114w_1w_2 - 4,1419w_1w_2(w_1 - w_2) + 5,6036w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.22)$$

$$DO/MAPE = -0,0577w_1 + 0,0879w_2 + 2,6182w_1w_2 - 5,1299w_1w_2(w_1 - w_2) + 6,9402w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.23)$$

$$UPV = 0,1922w_1 + 0,2058w_2 - 0,0126w_1w_2 + 0,0604w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,0803w_1w_2(w_1 - w_2)^2 \quad (4.24)$$

Apesar da pouca variabilidade na variância de previsão entre as repostas analisadas, todos os polinômios canônicos de mistura tiveram ótimo ajuste (R^2 ajustado próximo de 100%). O polinômio com pior ajuste foi o referente à UPV que apresentou R^2 e R^2 ajustado de 91,74% e 87,61%, respectivamente. Esses valores são considerados aceitáveis, sendo possível modelar a variância de previsão em funções dos pesos, para o problema analisado.

Por fim, executa-se o Passo 8, que consiste na determinação dos pesos a serem utilizados para a escolha do ponto Pareto ótimo preferido. Para tanto, as métricas de diversificação são maximizadas, enquanto que a métrica de erro é minimizada, utilizando para isso o algoritmo GRG. Esse processo executado para cada métrica gera um vetor de pesos ótimos a serem utilizados no problema de otimização original, implementado pelo NBI, gerando uma resposta ótima diferente, permitindo sua comparação. A Tabela 4.18 apresenta um resumo dos resultados obtidos.

Tabela 4.18 – Resumo dos resultados - Caso 3

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{MAPE}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$
Pesos	w_1	0,500	0,500	0,500	0,041	0,196	0,212	0,212
	w_2	0,500	0,500	0,500	0,959	0,804	0,788	0,788
Variáveis	x_1	0,266	0,266	0,266	0,186	0,296	0,302	0,302
	x_2	0,062	0,062	0,062	-0,672	-0,350	-0,321	-0,321
Respostas	y_1	157,421	157,421	157,421	139,959	149,193	149,822	149,822
	y_2	111,619	111,619	111,619	62,856	73,214	74,869	74,869
UPV		0,195	0,195	0,195	0,198	0,191	0,191	0,191

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base nos resultados apresentados na Tabela 4.18, as métricas, que associam o parâmetro de diversificação com o de erro, geraram os melhores resultados do ponto de vista da UPV. Porém, todas as métricas geraram valores bem próximos, principalmente devido à pequena amplitude de variação da UPV (0,191 a 0,207). Com relação ao MAPE, este quase gerou um peso igual a zero para o presente problema, priorizando y_2 em detrimento de y_1 . Este resultado não é desejável em problemas de otimização multiobjetivo, pois torna-se quase equivalente a otimizar individualmente a função y_2 .

Por fim, a Figura 4.15 apresenta os resultados obtidos com a utilização de $S(x)$ e de $S(x)/MAPE$ diretamente na fronteira Pareto ótima.

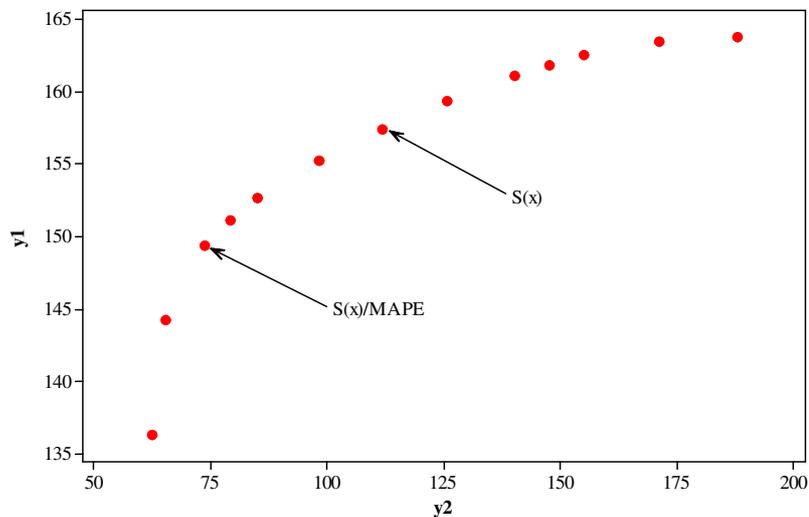


Figura 4.15 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 3.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Como pode ser observado na Figura 4.15, a função y_2 foi priorizada pelas métricas de ponderação que utilizaram o MAPE, uma vez que os maiores pesos gerados foram relativos a essa resposta. Entretanto, as métricas de ponderação utilizadas, mesmo quando considerando somente a diversificação, conduziram a respostas robustas, do ponto de vista da variabilidade. Além disso, uma vez que a distribuição dos pesos entre as respostas é responsável pelo deslocamento dos respectivos pontos no espaço de solução, novamente, fica evidente que os pesos utilizados no processo de otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida, mesmo para este caso que apresentou uma variância de previsão com amplitude muito pequena.

4.4 – CASO 4

Para a análise do quarto caso, considere três características, y_1 , y_2 e y_3 , de um processo, sendo que estas características dependem basicamente de duas variáveis. Com o intuito de

maximizar y_1 e minimizar y_2 e y_3 , um conjunto sequencial de experimentos foi estabelecido usando um CCD, construído de acordo com o design de superfície de resposta 2^2 , com 4 pontos axiais e 5 pontos centrais, gerando 13 experimentos. A Tabela 4.19 apresenta o CCD para este processo.

Tabela 4.19 – CCD simulado para três respostas - Caso 4

N	x_1	x_2	y_1	y_2	y_3
1	-1	-1	81	90	130
2	+1	-1	90	132	100
3	-1	+1	136	140	470
4	+1	+1	100	140	210
5	-1.4142	0	90	121	240
6	+1.4142	0	83	119	140
7	0	-1.4142	98	123	70
8	0	+1.4142	138	150	490
9	0	0	155	101	80
10	0	0	165	112	150
11	0	0	170	108	100
12	0	0	160	99	120
13	0	0	153	107	130

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Segundo Myers *et al.* (2009), o uso de 5 *cp* garante uma boa dispersão da variância de previsão por toda a região experimental, assim como o uso de $\alpha = \sqrt[4]{2^k}$ garante a rotacionalidade, sendo essas duas características essenciais em modelos de superfície de resposta.

A análise dos dados experimentais, correspondentes ao Passo 1, geram a modelagem matemática apresentada na Tabela 4.20, modelagem esta que equivale ao Passo 2 do método proposto.

Tabela 4.20 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 4

Termos	y_1	y_2	y_3
Constante	160,600	105,400	116,000
x_1	-4,612	4,896	-53,928
x_2	15,196	12,023	130,496
x_1^2	-37,175	6,612	35,125
x_2^2	-21,425	14,862	80,125
$x_1 \times x_2$	-11,250	-10,500	-57,500
p-value	0,000	0,003	0,000
R^2 (%)	98,30%	89,04%	96,36%
R^2 ajustado (%)	97,09%	81,20%	93,75%

Valores em negrito representam termos significantes nos modelos (p -value < 5%).

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

A adequação dos modelos foi analisada pela ANOVA. Os *p-values* para as funções objetivo em análise mostram uma regressão estatisticamente significativa ao nível de significância de 5%, provando a adequação das funções. Além disso, os valores de R^2 e R^2 ajustado mostram que os modelos têm um bom ajuste.

Com o intuito de comparar como cada variável de decisão afeta cada resposta, os gráficos de efeito principal para as três respostas em análise são mostrados na Figura 4.16.

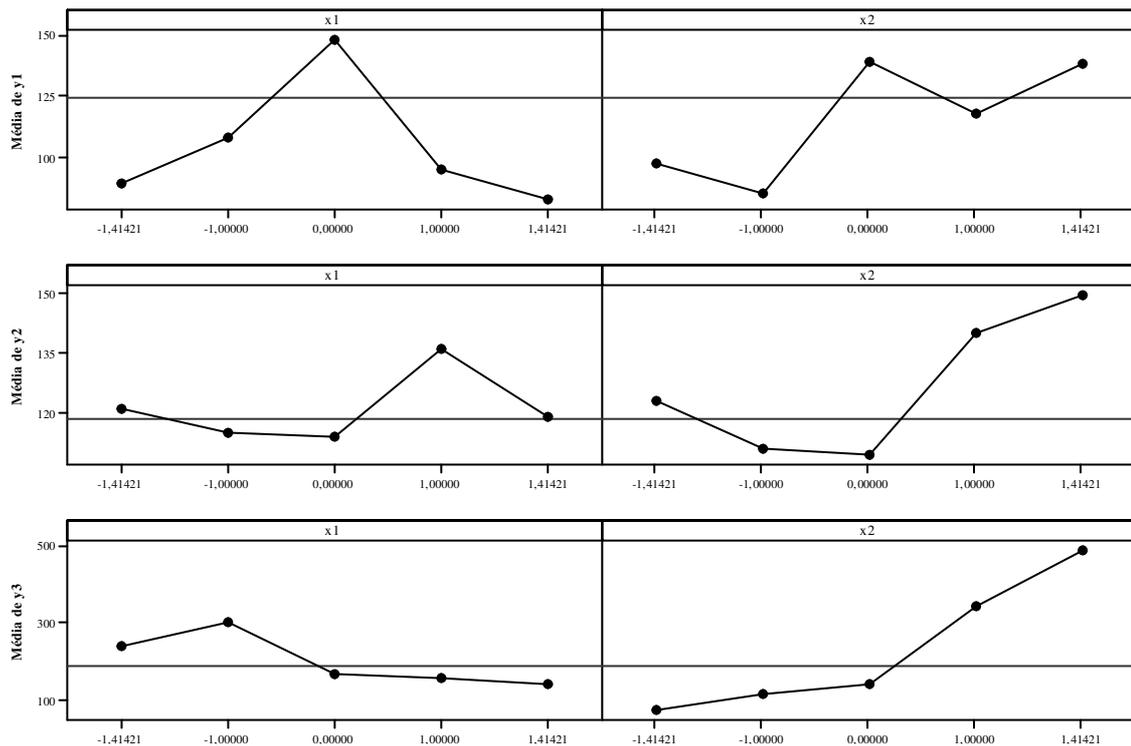


Figura 4.16 – Gráficos de efeito principal - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Figura 4.16, percebe-se a natureza conflitante entre as respostas, uma vez que, na tentativa de maximizar y_1 , aumentar-se-ia o valor das outras respostas que se deseja minimizar.

Visando checar a convexidade das funções, pode-se analisar a natureza do ponto estacionário usando a Equação 2.12. Para y_1 os autovalores são $[-38,9776; -19,6224]$, para y_2 os autovalores são $[17,4142; 4,0608]$ e para y_3 os autovalores são $[94,1327; 21,1173]$. Os sinais negativos dos autovalores de y_1 indicam que a função é côncava e seu ponto estacionário é um ponto de máximo. Já os sinais positivos dos autovalores de y_2 e y_3 indicam que as funções são convexas e seus pontos estacionários são pontos de mínimo. Como ocorreu nos casos 2 e 3, onde as funções envolvidas no problema de otimização multiobjetivo

apresentaram diferentes convexidades, o NBI será o método utilizado para a resolução do problema. A Figura 4.17 apresenta a superfície de resposta para os modelos gerados.

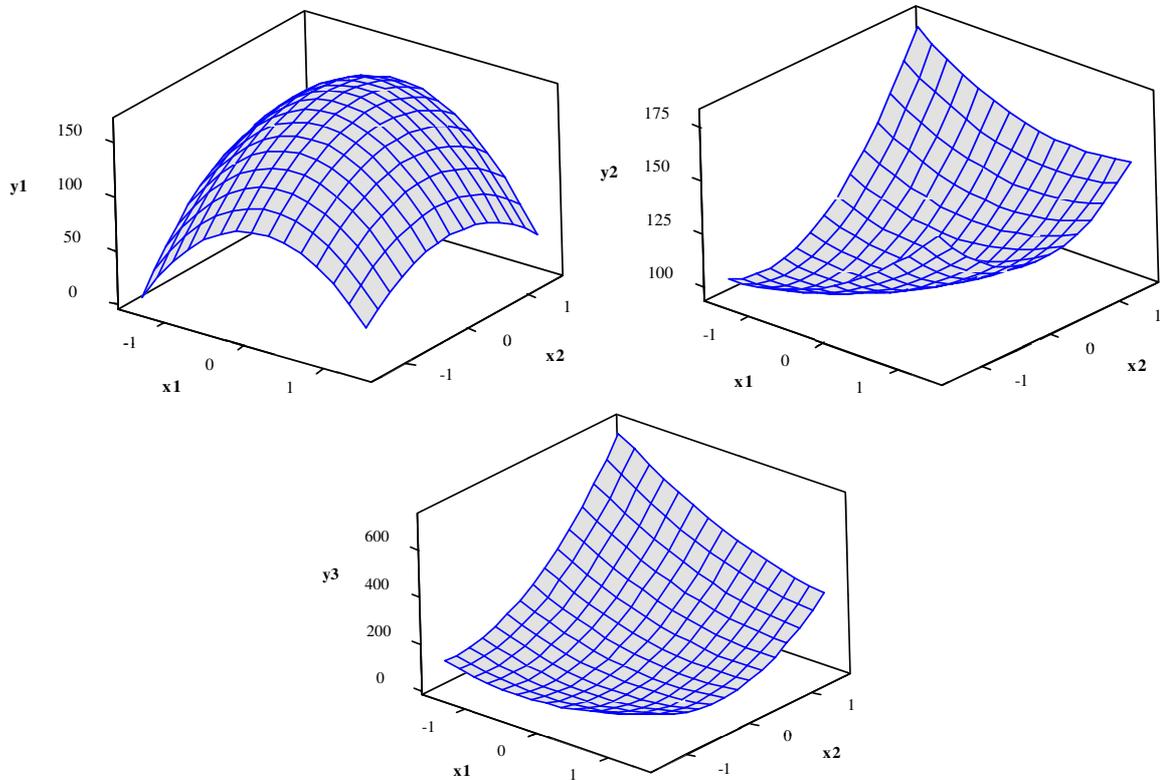


Figura 4.17 – Superfícies de resposta - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Para implementar o NBI, que equivale ao Passo 3 da presente proposta, a matriz *payoff* foi inicialmente estimada, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 4.21. É importante destacar que, os pontos de ótimo das funções em análise estão dentro da região experimental, uma vez que a restrição da região esférica, $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, permanece inativa durante o processo de otimização. Esta constatação pode ser comprovada ao se observar que o valor do multiplicador de Lagrange associado à restrição da região esférica é igual a zero.

Tabela 4.21 – Matriz *payoff* para as funções objetivo - Caso 4

y_1	y_2	y_3
163,813	112,256	188,044
99,510	98,576	106,410
136,341	106,862	62,358

Valores em negrito representam ótimos individuais.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Uma vez implementado o NBI, um arranjo de misturas para os pesos de cada função objetivo (Passo 4) foi definido. Subsequentemente, a solução de otimização do NBI foi obtido para cada condição experimental definida pelo arranjo de misturas (Passo 5). Baseado nesses resultados, procedeu-se, então, ao cálculo das métricas a serem utilizadas para a definição dos pesos ótimos e escolha do ponto Pareto ótimo preferido (Passo 6). Os resultados são apresentados na Tabela 4.22, que apresenta um arranjo *simplex lattice* de grau 10.

Tabela 4.22 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 4 (Parte I)

Pesos			y_1	y_2	y_3	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$S(x)$	DC	DO	UPV
w_1	w_2	w_3								MAPE	MAPE	MAPE	
1,00	0,00	0,00	164	112	188	0,00	0,00	0,00	0,72	0,00	0,00	0,00	0,19
0,90	0,10	0,00	163	109	169	0,33	0,11	0,13	0,61	0,54	0,18	0,21	0,19
0,90	0,00	0,10	163	111	171	0,33	0,09	0,11	0,62	0,52	0,14	0,17	0,19
0,80	0,20	0,00	162	107	152	0,50	0,19	0,23	0,51	0,98	0,38	0,44	0,20
0,80	0,10	0,10	163	108	152	0,64	0,18	0,22	0,51	1,25	0,34	0,43	0,20
0,80	0,00	0,20	163	110	155	0,50	0,15	0,19	0,54	0,93	0,28	0,35	0,19
0,70	0,30	0,00	159	105	137	0,61	0,25	0,30	0,43	1,42	0,59	0,69	0,19
0,70	0,20	0,10	161	106	135	0,80	0,24	0,30	0,42	1,93	0,58	0,73	0,20
0,70	0,10	0,20	162	107	136	0,80	0,22	0,29	0,42	1,89	0,53	0,67	0,20
0,70	0,00	0,30	161	109	140	0,61	0,20	0,25	0,46	1,34	0,44	0,54	0,20
0,60	0,40	0,00	155	103	125	0,67	0,29	0,34	0,37	1,83	0,79	0,92	0,19
0,60	0,30	0,10	158	104	120	0,90	0,28	0,36	0,34	2,65	0,84	1,05	0,20
0,60	0,20	0,20	160	105	119	0,95	0,27	0,35	0,33	2,88	0,82	1,08	0,20
0,60	0,10	0,30	161	106	120	0,90	0,25	0,33	0,34	2,62	0,74	0,96	0,20
0,60	0,00	0,40	159	109	126	0,67	0,23	0,28	0,38	1,77	0,60	0,74	0,20
0,50	0,50	0,00	149	101	116	0,69	0,30	0,35	0,33	2,12	0,93	1,08	0,19
0,50	0,40	0,10	153	102	110	0,94	0,30	0,38	0,28	3,31	1,06	1,35	0,19
0,50	0,30	0,20	157	103	106	1,03	0,30	0,40	0,26	3,96	1,13	1,52	0,20
0,50	0,20	0,30	159	104	104	1,03	0,28	0,38	0,25	4,07	1,11	1,52	0,20
0,50	0,10	0,40	159	106	106	0,94	0,26	0,35	0,27	3,52	0,98	1,31	0,20
0,50	0,00	0,50	157	108	112	0,69	0,24	0,29	0,31	2,25	0,77	0,96	0,20
0,40	0,60	0,00	141	100	110	0,67	0,29	0,34	0,30	2,21	0,96	1,11	0,19
0,40	0,50	0,10	147	101	102	0,94	0,30	0,38	0,25	3,73	1,17	1,52	0,19
0,40	0,40	0,20	151	101	96	1,05	0,29	0,41	0,22	4,88	1,36	1,89	0,19
0,40	0,30	0,30	154	102	93	1,09	0,29	0,41	0,19	5,63	1,48	2,12	0,19
0,40	0,20	0,40	156	103	91	1,05	0,27	0,39	0,19	5,65	1,46	2,09	0,20
0,40	0,10	0,50	157	105	93	0,94	0,25	0,35	0,20	4,73	1,27	1,74	0,20
0,40	0,00	0,60	155	107	98	0,67	0,23	0,28	0,24	2,84	0,96	1,19	0,19
0,30	0,70	0,00	132	99	106	0,61	0,25	0,30	0,30	2,04	0,85	0,99	0,21
0,30	0,60	0,10	138	100	97	0,90	0,26	0,36	0,24	3,71	1,09	1,47	0,20
0,30	0,50	0,20	143	100	90	1,03	0,27	0,39	0,20	5,24	1,37	2,00	0,19
0,30	0,40	0,30	147	101	85	1,09	0,27	0,41	0,16	6,69	1,64	2,50	0,19
0,30	0,30	0,40	151	102	82	1,09	0,26	0,40	0,14	7,72	1,83	2,84	0,19
0,30	0,20	0,50	153	103	80	1,03	0,25	0,37	0,13	7,76	1,85	2,80	0,19
0,30	0,10	0,60	154	105	81	0,90	0,23	0,32	0,14	6,39	1,60	2,28	0,19
0,30	0,00	0,70	153	107	85	0,61	0,20	0,25	0,17	3,57	1,17	1,45	0,19
0,20	0,80	0,00	122	99	104	0,50	0,19	0,23	0,31	1,61	0,63	0,73	0,25
0,20	0,70	0,10	129	99	95	0,80	0,21	0,30	0,25	3,23	0,85	1,20	0,22
0,20	0,60	0,20	134	100	87	0,95	0,22	0,35	0,20	4,81	1,11	1,77	0,21
0,20	0,50	0,30	139	100	81	1,03	0,22	0,38	0,16	6,54	1,41	2,40	0,20
0,20	0,40	0,40	143	101	77	1,05	0,22	0,38	0,13	8,30	1,73	3,02	0,19
0,20	0,30	0,50	146	102	73	1,03	0,21	0,37	0,11	9,70	2,00	3,47	0,19
0,20	0,20	0,60	148	103	71	0,95	0,20	0,33	0,10	9,97	2,08	3,47	0,19
0,20	0,10	0,70	149	104	71	0,80	0,18	0,27	0,10	8,31	1,85	2,80	0,19
0,20	0,00	0,80	149	106	74	0,50	0,15	0,19	0,12	4,35	1,32	1,64	0,19
0,10	0,90	0,00	111	99	105	0,33	0,11	0,13	0,33	0,98	0,33	0,38	0,31
0,10	0,80	0,10	118	99	95	0,64	0,13	0,21	0,27	2,38	0,48	0,79	0,27

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Tabela 4.22 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 4 (Parte II)

Pesos			y_1	y_2	y_3	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$S(x)$	DC	DO	UPV
w_1	w_2	w_3								MAPE	MAPE	MAPE	
0,10	0,70	0,20	123	99	87	0,80	0,15	0,28	0,22	3,72	0,67	1,28	0,24
0,10	0,60	0,30	128	100	80	0,90	0,15	0,32	0,17	5,21	0,90	1,85	0,22
0,10	0,50	0,40	133	100	75	0,94	0,16	0,34	0,14	6,84	1,14	2,45	0,21
0,10	0,40	0,50	136	101	71	0,94	0,16	0,34	0,11	8,48	1,39	3,02	0,20
0,10	0,30	0,60	139	102	68	0,90	0,15	0,31	0,09	9,76	1,59	3,39	0,20
0,10	0,20	0,70	141	103	66	0,80	0,13	0,27	0,08	10,05	1,66	3,32	0,19
0,10	0,10	0,80	143	105	65	0,64	0,11	0,20	0,08	8,47	1,48	2,61	0,19
0,10	0,00	0,90	144	106	65	0,33	0,09	0,11	0,08	3,99	1,05	1,30	0,19
0,00	1,00	0,00	100	99	106	0,00	0,00	0,00	0,37	0,00	0,00	0,00	0,40
0,00	0,90	0,10	106	99	97	0,33	0,03	0,10	0,30	1,08	0,09	0,33	0,35
0,00	0,80	0,20	112	99	88	0,50	0,05	0,18	0,25	2,03	0,19	0,72	0,31
0,00	0,70	0,30	117	100	82	0,61	0,06	0,23	0,20	3,02	0,31	1,15	0,28
0,00	0,60	0,40	121	100	76	0,67	0,07	0,27	0,17	4,04	0,43	1,59	0,26
0,00	0,50	0,50	125	101	72	0,69	0,07	0,28	0,14	5,01	0,53	2,00	0,24
0,00	0,40	0,60	128	102	68	0,67	0,07	0,27	0,12	5,77	0,61	2,27	0,23
0,00	0,30	0,70	131	103	66	0,61	0,06	0,23	0,10	6,06	0,61	2,30	0,22
0,00	0,20	0,80	133	104	64	0,50	0,05	0,18	0,09	5,54	0,52	1,96	0,22
0,00	0,10	0,90	135	106	63	0,33	0,03	0,10	0,08	3,84	0,31	1,17	0,21
0,00	0,00	1,00	136	107	62	0,00	0,00	0,00	0,08	0,00	0,00	0,00	0,21
0,33	0,33	0,33	151	102	86	1,10	0,27	0,41	0,16	6,76	1,68	2,52	0,19
0,67	0,17	0,17	162	106	129	0,87	0,25	0,32	0,39	2,25	0,64	0,82	0,20
0,17	0,67	0,17	129	99	89	0,87	0,19	0,31	0,22	3,98	0,89	1,43	0,22
0,17	0,17	0,67	147	104	69	0,87	0,17	0,29	0,09	10,11	2,01	3,41	0,19

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os dados contidos na Tabela 4.22 correspondem aos pontos Pareto ótimos da otimização das respostas y_1 , y_2 e y_3 . Esse conjunto de pontos forma a fronteira de Pareto para o problema em análise. A Figura 4.18 apresenta graficamente a Fronteira de Pareto obtida.

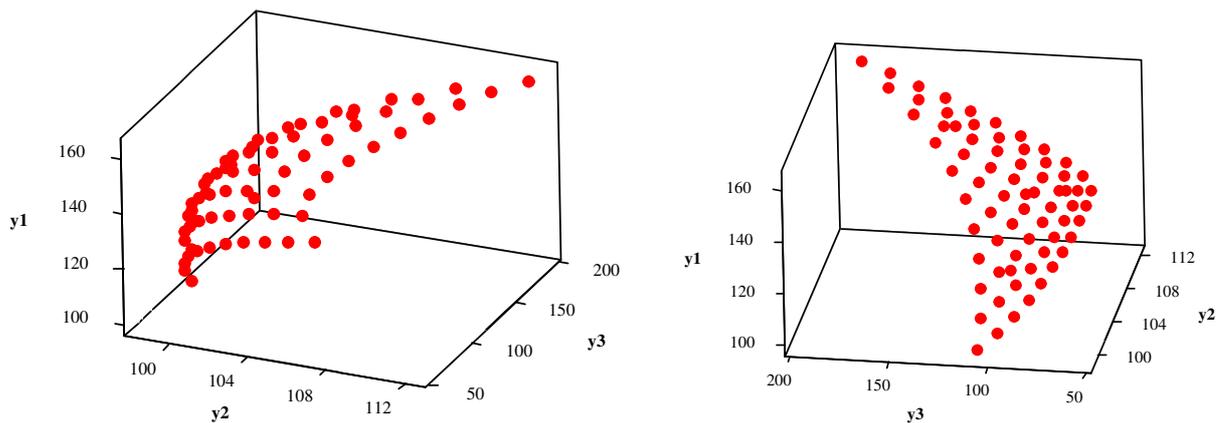


Figura 4.18 – Fronteira de Pareto sob diferentes perspectivas - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como nos casos apresentados anteriormente, o NBI foi capaz de construir uma fronteira de Pareto com pontos uniformemente distribuídos, o que se torna uma vantagem no processo de tomada de decisão por permitir ao decisor avaliar, de maneira mais fácil, o

comportamento *trade-off* e como a priorização de uma resposta afeta a outra. Isto não seria possível se houvesse a aglomeração de soluções em algum ponto, gerando uma fronteira descontínua. Já o arranjo de misturas, ao fornecer uma combinação uniforme dos pesos, favorece a construção da fronteira e a obtenção dos polinômios canônicos de mistura por meio da modelagem das respostas.

Buscando-se visualizar o espaço de solução referente aos pontos Pareto ótimos, apresenta-se a Figura 4.19. Uma vez que a variância da previsão é medida no espaço de solução, ou seja, $UPV = \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$, visualizar como os pontos se distribuem neste espaço é fundamental, pois, pode dar indícios de como a variância se comporta no problema analisado.

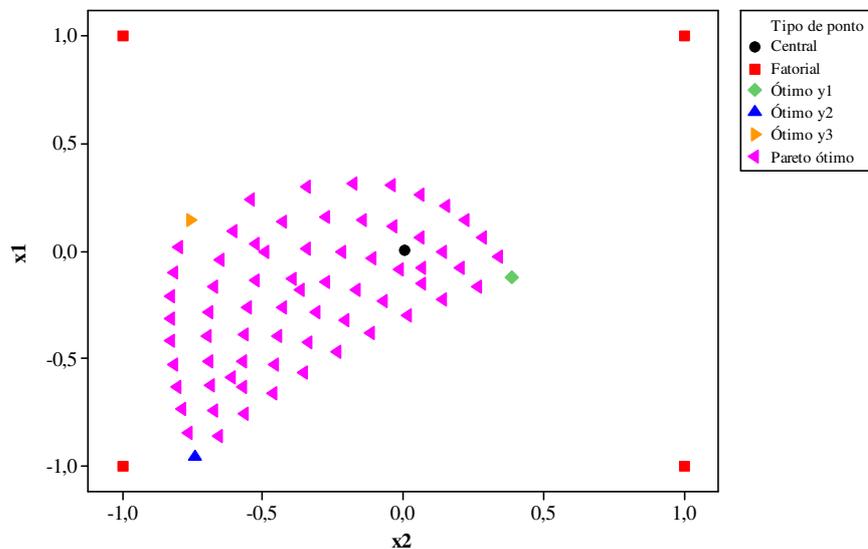


Figura 4.19 – Espaço de solução - Caso 4.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Ao se analisar a Figura 4.19, constata-se que os pontos se deslocam no espaço de solução, à medida que os pesos são alterados no processo de otimização. Isto permitirá, assim como ocorreu nos casos anteriores, a modelagem do polinômio canônico de misturas da UPV em função dos pesos relacionados a cada resposta analisada. Além disso, é possível perceber que os pontos de ótimo de cada resposta estão localizados em diferentes regiões no espaço experimental, sendo que o ponto ótimo de y_1 é o mais próximo do centro e o ponto ótimo de y_2 é o mais distante. Isto conduz y_1 a menores valores de UPV e y_2 a maiores valores de UPV.

Com base nos dados apresentados na Tabela 4.22, foi realizada uma análise de correlação de Pearson entre as métricas de ponderação e a medida de variância, UPV. Assim, a Tabela 4.23 apresenta os resultados da análise de correlação, juntamente, com seus respectivos *p-values*. Assim como foi feito nos casos anteriores, valores de *p-values* menores que 5% indicam correlações estatisticamente significantes.

Tabela 4.23 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 4

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
UPV	Correlação	-0,462	-0,561	-0,488	0,032	-0,316	-0,501	-0,339
	<i>p-value</i>	0,000	0,000	0,000	0,795	0,008	0,000	0,004

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Tabela 4.23, percebe-se que todas as métricas de diversificação, inclusive quando relacionadas à métrica de erro, apresentaram correlação negativa e estatisticamente significativa com a UPV. Dessa forma, a maximização dessas métricas conduz a uma redução da variância de previsão medida pela UPV. Para o presente problema, a correlação entre as respostas y_2 e y_3 de 0,705, significativa ao nível de 5%, não prejudicou a tendência de redução da variância pela diversificação.

A única métrica analisada que não apresentou correlação com a UPV foi a métrica de erro, MAPE. Uma vez que muitos dos pontos Pareto ótimos gerados se localizam em uma região de baixa variância, como pode ser visto na Figura 4.19, a análise de correlação para esta métrica foi prejudicada.

O Passo 7 engloba a modelagem das métricas de ponderação, a partir dos dados apresentados na Tabela 4.22. Assim, seus polinômios canônicos de mistura, com seus respectivos superfícies de resposta e *contour plot* são:

$$\begin{aligned}
 S(x) = & -0,0074w_1 - 0,0074w_2 - 0,0074w_3 + 2,7705w_1w_2 + 2,7705w_1w_3 + \\
 & 2,7705w_2w_3 + 5,4207w_1w_1w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_3w_3 + \\
 & 1,4619w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 1,4619w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 1,4619w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned} \quad (4.25)$$

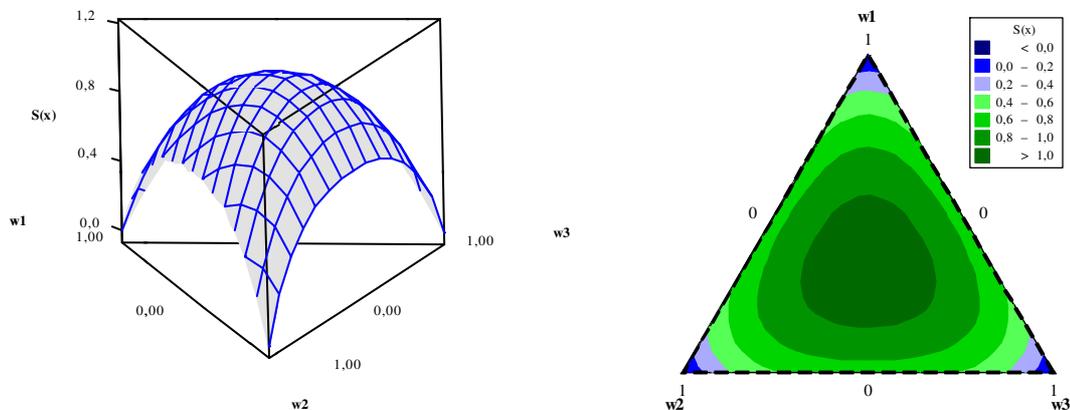


Figura 4.20 – Superfície de resposta e *Contour plot* para $S(x)$ - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$DC = 1,214w_1w_2 + 0,952w_1w_3 + 0,295w_2w_3 \quad (4.26)$$

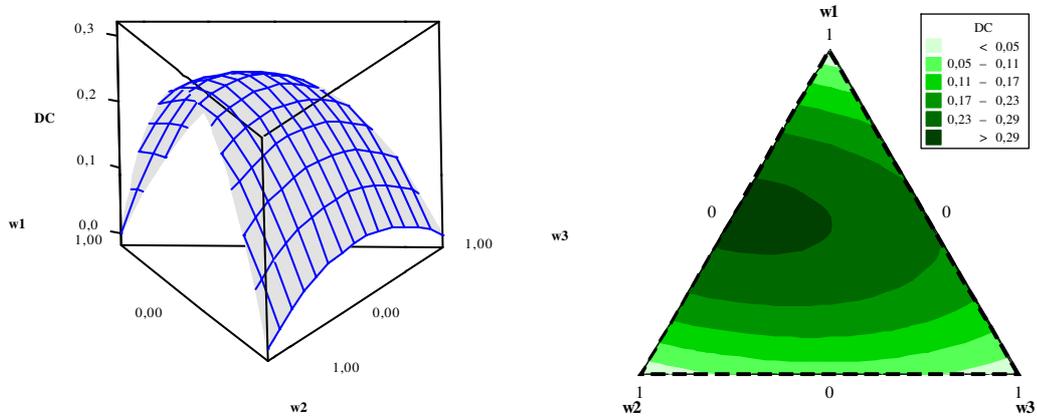


Figura 4.21 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DC - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$DO = 1,4084w_1w_2 + 1,1791w_1w_3 + 1,1042w_2w_3 \quad (4.27)$$

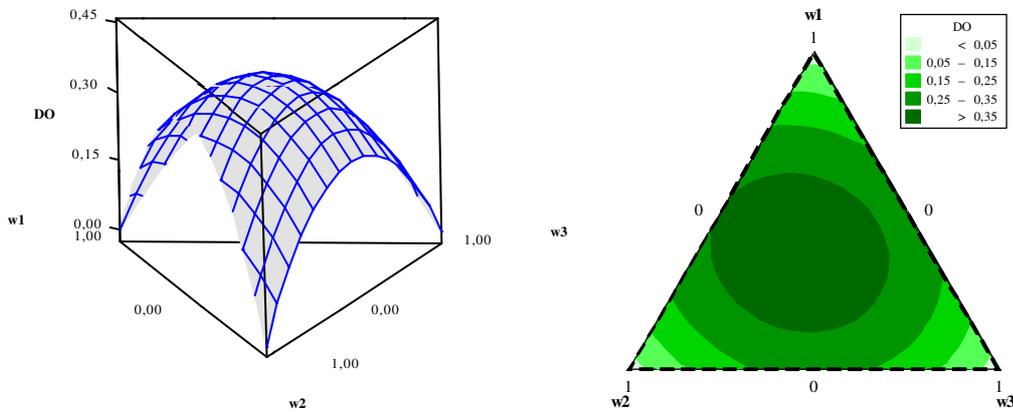


Figura 4.22 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DO - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned} MAPE = & 0,718w_1 + 0,366w_2 + 0,083w_3 - 0,863w_1w_2 - 0,375w_1w_3 - \\ & 0,339w_2w_3 - 0,050w_1w_2(w_1 - w_2) + 0,223w_1w_3(w_1 - w_3) - \\ & 0,076w_2w_3(w_2 - w_3) - 1,729w_1w_1w_2w_3 - 0,372w_1w_2w_2w_3 - \\ & 1,983w_1w_2w_3w_3 + 0,121w_1w_2(w_1 - w_2)^2 - 0,220w_1w_3(w_1 - w_3)^2 - \\ & 0,045w_2w_3(w_2 - w_3)^2 \end{aligned} \quad (4.28)$$

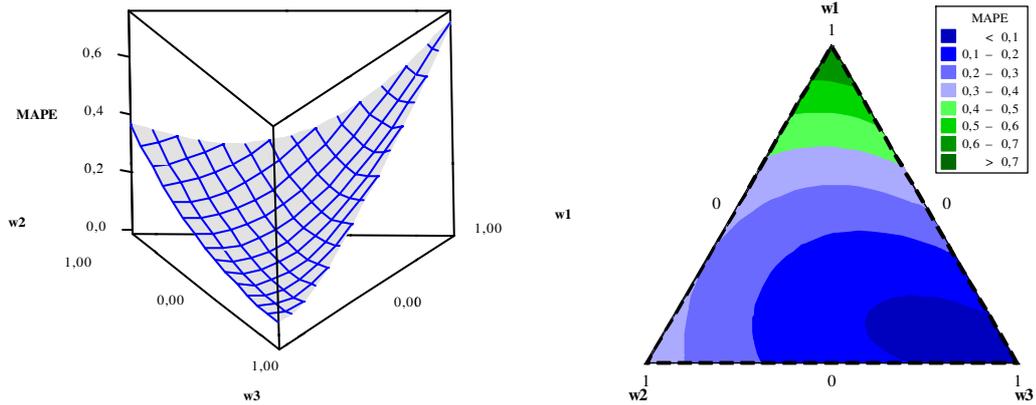


Figura 4.23 – Superfície de resposta e *Contour plot* para MAPE - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 S(x)/MAPE = & -0,513w_1 + 0,086w_2 - 0,095w_3 + 9,814w_1w_2 + 7,834w_1w_3 + \\
 & 19,588w_2w_3 - 16,483w_1w_3(w_1 - w_3) - 22,203w_2w_3(w_2 - w_3) - \\
 & 86,415w_1w_1w_2w_3 + 93,372w_1w_2w_2w_3 + 221,784w_1w_2w_3w_3 + \\
 & 36,169w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 14,674w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.29}$$

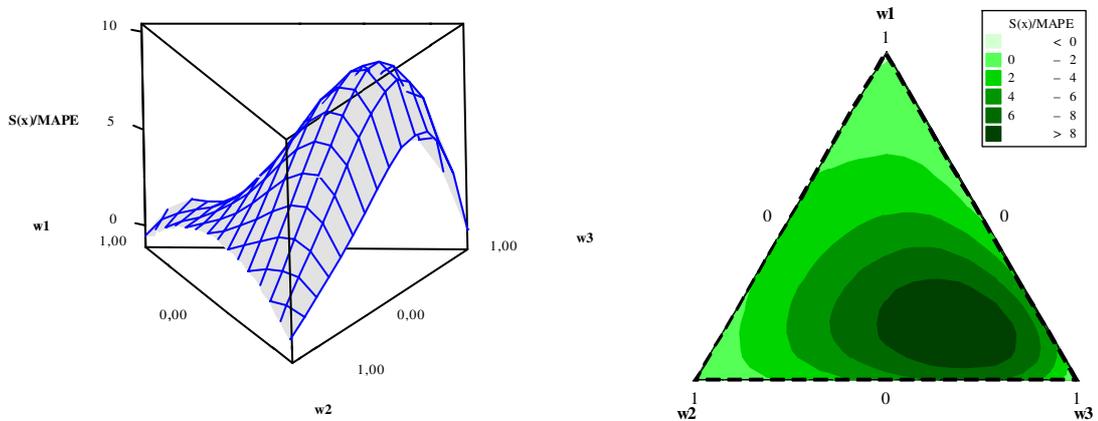


Figura 4.24 – Superfície de resposta e *Contour plot* para $S(x)/MAPE$ - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 DC/MAPE = & -0,013w_1 + 0,051w_2 + 0,006w_3 + 3,835w_1w_2 + 2,782w_1w_3 + \\
 & 1,945w_2w_3 - 1,132w_1w_2(w_1 - w_2) - 5,330w_1w_3(w_1 - w_3) - \\
 & 2,321w_2w_3(w_2 - w_3) - 7,635w_1w_1w_2w_3 + 14,440w_1w_2w_2w_3 + \\
 & 48,342w_1w_2w_3w_3 - 2,662w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 6,798w_1w_3(w_1 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.30}$$

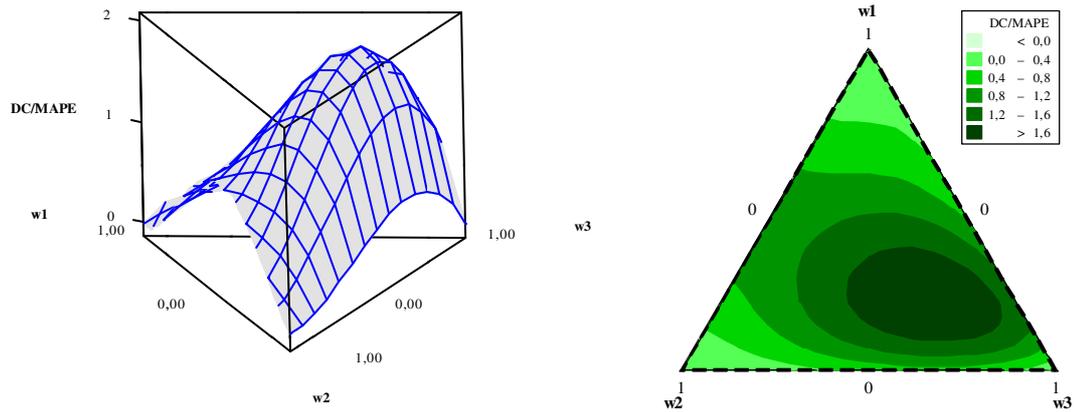


Figura 4.25 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DC/MAPE - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 \text{DO/MAPE} = & -0,12w_1 + 0,16w_2 - 0,03w_3 + 4,51w_1w_2 + 3,53w_1w_3 + \\
 & 7,78w_2w_3 - 6,23w_1w_3(w_1 - w_3) - 8,00w_2w_3(w_2 - w_3) - \\
 & 31,32w_1w_1w_2w_3 + 29,07w_1w_2w_2w_3 + 62,66w_1w_2w_3w_3 - \\
 & 3,06w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 10,08w_1w_3(w_1 - w_3)^2
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

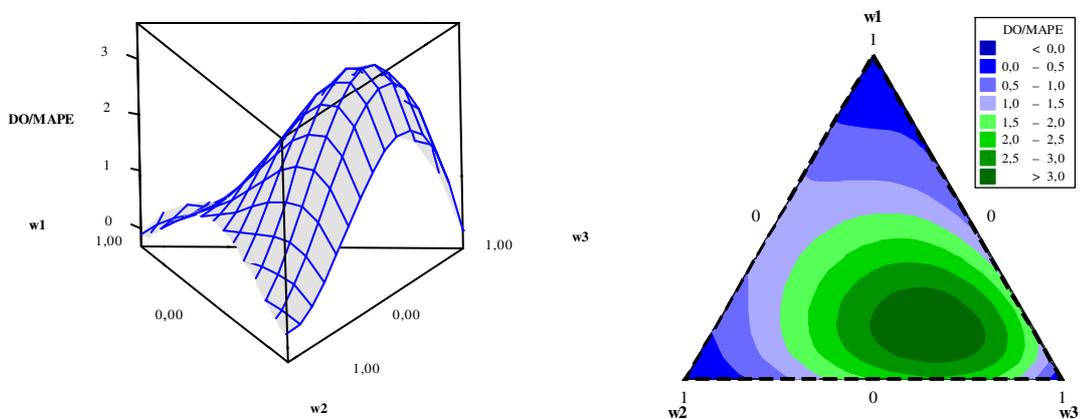


Figura 4.26 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DO/MAPE - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 \text{UPV} = & 0,193w_1 + 0,403w_2 + 0,207w_3 - 0,431w_1w_2 - 0,012w_1w_3 - \\
 & 0,253w_2w_3 + 0,379w_1w_2(w_1 - w_2) + 0,058w_1w_3(w_1 - w_3) - \\
 & 0,124w_2w_3(w_2 - w_3) + 0,997w_1w_1w_2w_3 - 0,580w_1w_2w_2w_3 - \\
 & 0,405w_1w_2w_3w_3 - 0,132w_1w_2(w_1 - w_2)^2 - 0,123w_1w_3(w_1 - w_3)^2 - \\
 & 0,051w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned} \tag{4.32}$$

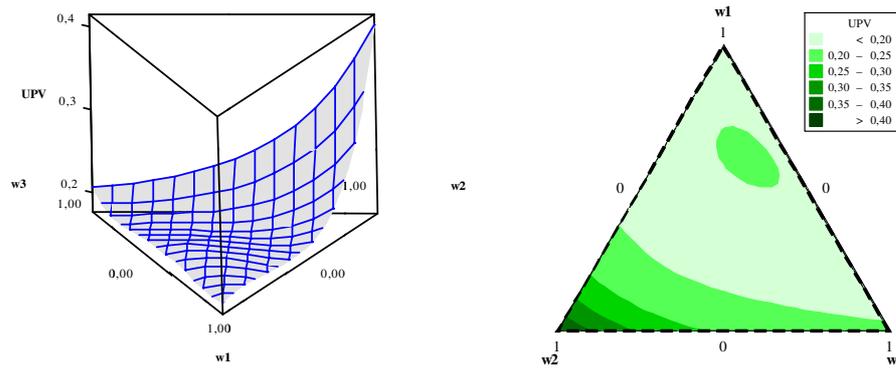


Figura 4.27 – Superfície de resposta e *Contour plot* para UPV - Caso 4.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Cabe destacar que todos os polinômios canônicos de mistura tiveram ótimo ajuste, uma vez que todos possuem R^2 ajustado próximo de 100%. Esse resultado já era esperado para as métricas diretamente calculadas com base nos pesos, como $S(x)$, DC e DO. Entretanto, as métricas de erro, MAPE, e de variância de previsão, UPV, são calculadas pelos valores das respostas e das variáveis de decisão, respectivamente. Mesmo assim, como esses valores variam de acordo com a alteração nos valores dos pesos, seus modelos matemáticos baseados nos pesos também apresentaram R^2 ajustado de 100%. Assim, algo que chama a atenção nesta análise é o fato de que se conseguiu modelar a variância em função dos pesos. Isto ocorre, pois, os pesos interferem no espaço de solução, como pode ser visto na Figura 4.19.

Por fim, executa-se o Passo 8, que consiste na determinação dos pesos a serem utilizados para a escolha do ponto Pareto ótimo preferido. Uma vez que se conhece as características de convexidade e as correlações entre as métricas de ponderação e a UPV, a maximização das métricas de diversificação, assim como a minimização da métrica de erro, são executadas, utilizando para isso o algoritmo GRG. Esse processo executado para cada métrica gera um vetor de pesos ótimos a serem utilizados no problema de otimização original, implementado pelo NBI, gerando uma resposta ótima diferente, permitindo sua comparação. A Tabela 4.24 apresenta um resumo dos resultados obtidos.

Tabela 4.24 – Resumo dos resultados - Caso 4

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
Pesos	w_1	0,333	0,492	0,369	0,073	0,153	0,216	0,155
	w_2	0,333	0,472	0,354	0,109	0,241	0,226	0,270
	w_3	0,333	0,036	0,277	0,819	0,606	0,557	0,575
Variáveis	x_1	-0,180	-0,424	-0,214	0,062	-0,071	-0,035	-0,107
	x_2	-0,366	-0,239	-0,332	-0,665	-0,580	-0,478	-0,586
Respostas	y_1	151,042	149,889	151,669	141,074	144,245	148,362	143,716
	y_2	101,632	101,426	101,553	104,739	102,677	102,709	102,346
	y_3	85,977	112,732	90,563	63,821	68,906	72,892	69,640
UPV		0,191	0,190	0,192	0,195	0,191	0,190	0,191

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base nos resultados apresentados na Tabela 4.24, as métricas que obtiveram melhor performance em reduzir a UPV foram DC e DC/MAPE. Porém, a métrica DC, ao considerar a correlação entre as respostas y_2 e y_3 , quase zerou o peso atribuído à resposta y_3 . Se a amplitude de variação da UPV para este problema (0,190 a 0,403) for considerada, pode-se afirmar que todas as métricas analisadas tiveram bom desempenho.

Por fim, a Figura 4.28 apresenta os resultados obtidos com a utilização de DC e de DC/MAPE diretamente na fronteira Pareto ótima.

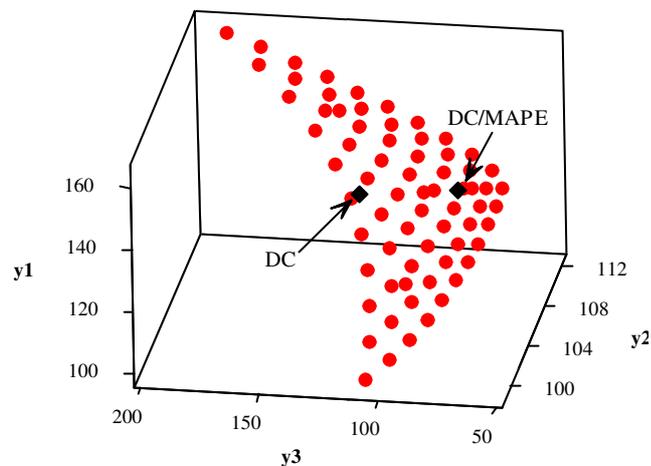


Figura 4.28 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 4.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Como pode ser observado na Figura 4.28, a métrica DC/MAPE permitiu a mesma redução na variância de previsão, quando comparada à DC, porém com uma maior diversificação. Isto permitiu melhorar os valores de y_3 , sem prejudicar, demasiadamente, os valores de y_1 e y_2 . Além disso, uma vez que a distribuição dos pesos entre as respostas é responsável pelo deslocamento dos respectivos pontos no espaço de solução, fica evidente que os pesos utilizados no processo de otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida.

4.5 – CASO 5

Para a análise do quinto caso, considere as mesmas três características, y_1 , y_2 e y_3 , conforme apresentado no caso anterior, sendo que estas características dependem basicamente de duas variáveis. Com o intuito de maximizar y_1 e minimizar y_2 e y_3 , um conjunto sequencial de experimentos foi estabelecido usando um CCD, construído de acordo com o design de

superfície de resposta 2^2 , com 4 pontos axiais e 2 pontos centrais, gerando 10 experimentos. A Tabela 4.25 apresenta o CCD para este processo.

Tabela 4.25 – CCD simulado para três respostas - Caso 5

N	x_1	x_2	y_1	y_2	y_3
1	-1	-1	81	90	130
2	+1	-1	90	132	100
3	-1	+1	136	140	470
4	+1	+1	100	140	210
5	-1.4142	0	90	121	240
6	+1.4142	0	83	119	140
7	0	-1.4142	98	123	70
8	0	+1.4142	138	150	490
9	0	0	170	101	130
10	0	0	153	99	150

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Segundo Myers *et al.* (2009), o uso de 2^{cp} não é recomendável por não garantir uma boa dispersão da variância de previsão por toda a região experimental. Já o uso de $\alpha = \sqrt[4]{2^k}$ garante a rotacionalidade. Um arranjo rotacionável é aquele para o qual a variância de previsão tem o mesmo valor em qualquer dois pontos que estão à mesma distância do centro do arranjo, ou seja, a variância de previsão é constante em esferas.

A análise dos dados experimentais, correspondentes ao Passo 1, geram a modelagem matemática apresentada na Tabela 4.26, modelagem esta que equivale ao Passo 2 do método proposto.

Tabela 4.26 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 5

Termos	y_1	y_2	y_3
Constante	161,500	100,000	140,000
x_1	-4,612	4,896	-53,928
x_2	15,196	12,023	130,496
x_1^2	-37,625	9,313	23,125
x_2^2	-21,875	17,563	68,125
$x_1 \times x_2$	-11,250	-10,500	-57,500
p-value	0,002	0,032	0,003
R^2 (%)	97,97%	91,02%	97,17%
R^2 ajustado (%)	95,43%	79,79%	93,62%

Valores em negrito representam termos significantes nos modelos (p -value < 5%).

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

A adequação dos modelos foi analisada pela ANOVA. Os *p-values* para as funções objetivo em análise mostram uma regressão estatisticamente significativa ao nível de significância de 5%, provando a adequação das funções. Além disso, os valores de R^2 e R^2 ajustado mostram que os modelos têm um bom ajuste. Nota-se que, o uso de 2 pontos centrais no arranjo experimental, quando comparado ao uso de 5 pontos centrais, não prejudicou a modelagem das funções, pois, os modelos se mostram bem próximos nos dois casos.

Com o intuito de comparar como cada variável de decisão afeta cada resposta, os gráficos de efeito principal para as três respostas em análise são mostrados na Figura 4.29.

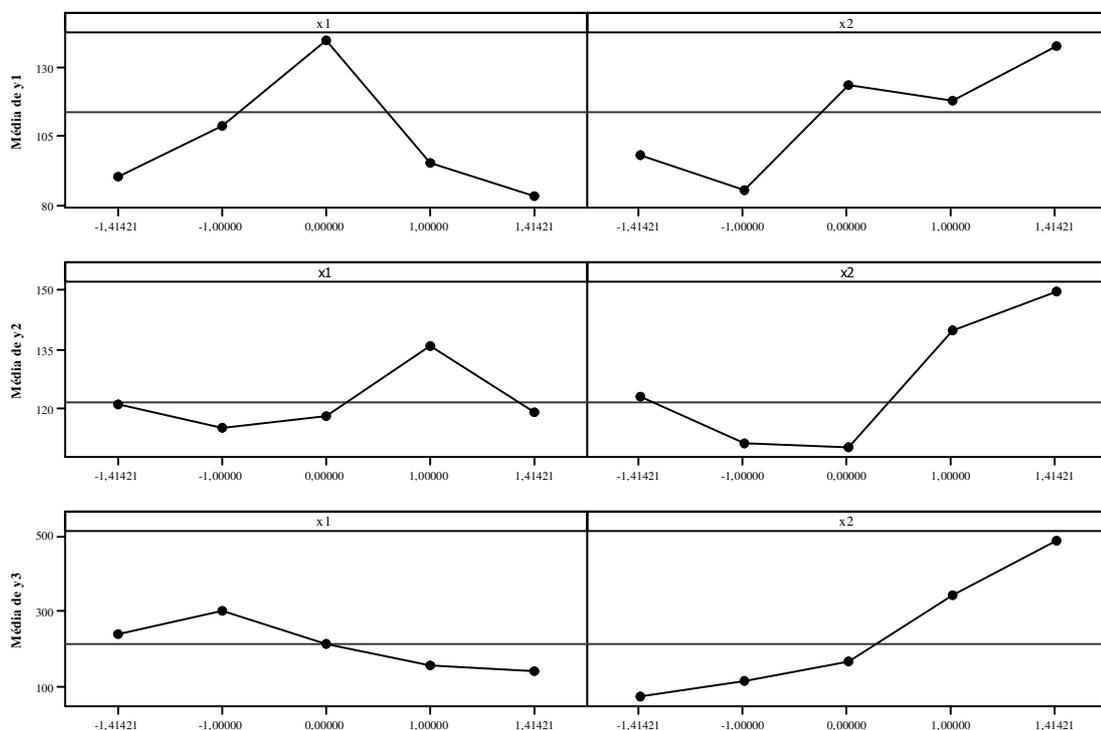


Figura 4.29 – Gráficos de efeito principal - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os gráficos de efeito principal para as funções modeladas com 2 cp têm o mesmo comportamento quando se compara ao gráfico para as funções modeladas com 5 cp, apresentado na Figura 4.16. Assim, de forma similar ao caso anterior, percebe-se a natureza conflitante entre as respostas, uma vez que, na tentativa de maximizar y_1 , aumentar-se-ia o valor das outras respostas que se deseja minimizar.

Visando checar a convexidade das funções, pode-se analisar a natureza do ponto estacionário usando a Equação 2.12. Para y_1 os autovalores são $[-39,4276; -20,0724]$, para y_2 os autovalores são $[20,1142; 6,7608]$ e para y_3 os autovalores são $[82,1327; 9,1173]$. Os sinais negativos dos autovalores de y_1 indicam que a função é côncava e seu ponto estacionário é um

ponto de máximo. Já os sinais positivos dos autovalores de y_2 e y_3 indicam que as funções são convexas e seus pontos estacionários são pontos de mínimo. Novamente, as diferentes convexidades das funções objetivo justificam o uso do NBI. A Figura 4.30 apresenta a superfície de resposta para os modelos gerados.

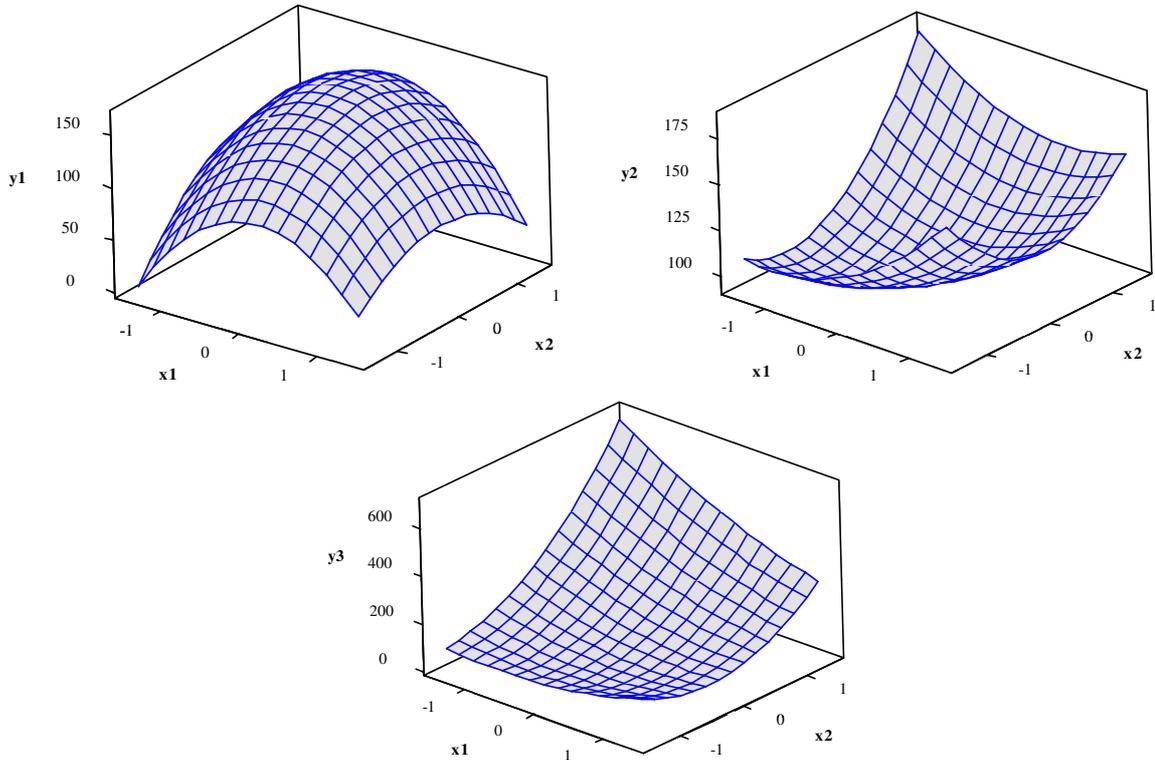


Figura 4.30 – Superfícies de resposta - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Para implementar o NBI, que equivale ao Passo 3 da presente proposta, a matriz *payoff* foi inicialmente estimada, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 4.27. Assim como ocorreu no caso anterior, os pontos de ótimo das funções em análise estão dentro da região experimental, uma vez que a restrição da região esférica, $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, permanece inativa durante o processo de otimização. Esta constatação pode ser comprovada ao se observar que o valor do multiplicador de Lagrange associado à restrição da região esférica é igual a zero.

Tabela 4.27 – Matriz *payoff* para as funções objetivo - Caso 5

y_1	y_2	y_3
164,641	107,064	208,219
136,300	95,615	111,960
125,179	104,314	77,478

Valores em negrito representam ótimos individuais.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Uma vez implementado o NBI, um arranjo de misturas para os pesos de cada função objetivo (Passo 4) foi definido. Subsequentemente, a solução de otimização do NBI foi obtido para cada condição experimental definida pelo arranjo de misturas (Passo 5). Baseado nesses resultados, procedeu-se, então, ao cálculo das métricas a serem utilizadas para a definição dos pesos ótimos e escolha do ponto Pareto ótimo preferido (Passo 6). Os resultados são apresentados na Tabela 4.28, que apresenta um arranjo *simplex lattice* de grau 10.

Tabela 4.28 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 5 (Parte I)

Pesos			y_1	y_2	y_3	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{MAPE}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$	UPV
w_1	w_2	w_3								MAPE	MAPE	MAPE	
1,00	0,00	0,00	165	107	208	0,00	0,00	0,00	0,60	0,00	0,00	0,00	0,45
0,90	0,10	0,00	165	105	192	0,33	0,10	0,09	0,53	0,62	0,18	0,17	0,47
0,90	0,00	0,10	164	106	188	0,33	0,06	0,12	0,51	0,64	0,12	0,24	0,46
0,80	0,20	0,00	164	103	177	0,50	0,17	0,16	0,45	1,10	0,37	0,35	0,48
0,80	0,10	0,10	163	104	172	0,64	0,14	0,19	0,44	1,46	0,32	0,44	0,48
0,80	0,00	0,20	162	105	169	0,50	0,11	0,22	0,43	1,15	0,24	0,50	0,47
0,70	0,30	0,00	163	102	162	0,61	0,22	0,21	0,39	1,58	0,57	0,53	0,49
0,70	0,20	0,10	163	102	157	0,80	0,20	0,25	0,37	2,18	0,55	0,67	0,49
0,70	0,10	0,20	162	103	154	0,80	0,17	0,27	0,36	2,22	0,48	0,76	0,48
0,70	0,00	0,30	160	104	153	0,61	0,14	0,29	0,36	1,68	0,38	0,79	0,47
0,60	0,40	0,00	162	100	149	0,67	0,25	0,24	0,33	2,06	0,78	0,72	0,50
0,60	0,30	0,10	162	100	143	0,90	0,24	0,28	0,30	2,96	0,79	0,92	0,50
0,60	0,20	0,20	161	101	139	0,95	0,22	0,31	0,29	3,25	0,75	1,05	0,49
0,60	0,10	0,30	159	102	137	0,90	0,19	0,32	0,29	3,09	0,67	1,12	0,48
0,60	0,00	0,40	157	104	136	0,67	0,16	0,33	0,30	2,27	0,54	1,10	0,46
0,50	0,50	0,00	160	99	137	0,69	0,26	0,25	0,28	2,51	0,96	0,89	0,49
0,50	0,40	0,10	160	99	130	0,94	0,26	0,29	0,25	3,79	1,04	1,17	0,50
0,50	0,30	0,20	160	100	126	1,03	0,25	0,32	0,23	4,43	1,06	1,40	0,49
0,50	0,20	0,30	158	101	123	1,03	0,23	0,34	0,22	4,58	1,01	1,53	0,49
0,50	0,10	0,40	156	102	121	0,94	0,20	0,35	0,22	4,21	0,89	1,55	0,47
0,50	0,00	0,50	154	103	120	0,69	0,17	0,34	0,23	3,01	0,72	1,47	0,45
0,40	0,60	0,00	157	97	128	0,67	0,25	0,24	0,24	2,84	1,07	0,99	0,47
0,40	0,50	0,10	158	98	120	0,94	0,26	0,29	0,21	4,58	1,24	1,39	0,48
0,40	0,40	0,20	157	98	115	1,05	0,25	0,32	0,18	5,71	1,36	1,74	0,48
0,40	0,30	0,30	156	99	111	1,09	0,24	0,34	0,17	6,36	1,39	2,00	0,48
0,40	0,20	0,40	155	100	108	1,05	0,22	0,35	0,16	6,43	1,34	2,14	0,47
0,40	0,10	0,50	153	101	105	0,94	0,19	0,35	0,16	5,81	1,19	2,13	0,45
0,40	0,00	0,60	151	102	104	0,67	0,16	0,33	0,17	4,05	0,96	1,96	0,44
0,30	0,70	0,00	153	97	120	0,61	0,22	0,21	0,21	2,89	1,05	0,98	0,45
0,30	0,60	0,10	154	97	113	0,90	0,23	0,26	0,18	5,07	1,31	1,46	0,46
0,30	0,50	0,20	154	97	106	1,03	0,23	0,30	0,15	6,75	1,54	1,95	0,46
0,30	0,40	0,30	153	98	102	1,09	0,23	0,32	0,14	8,04	1,70	2,38	0,46
0,30	0,30	0,40	152	99	98	1,09	0,22	0,33	0,12	8,80	1,76	2,70	0,45
0,30	0,20	0,50	151	100	95	1,03	0,20	0,33	0,12	8,83	1,70	2,84	0,44
0,30	0,10	0,60	150	101	92	0,90	0,17	0,32	0,11	7,93	1,52	2,78	0,43
0,30	0,00	0,70	148	102	91	0,61	0,14	0,29	0,11	5,40	1,23	2,52	0,41
0,20	0,80	0,00	148	96	116	0,50	0,17	0,16	0,20	2,52	0,85	0,79	0,42
0,20	0,70	0,10	149	96	107	0,80	0,19	0,21	0,16	4,95	1,15	1,31	0,43
0,20	0,60	0,20	149	97	101	0,95	0,20	0,25	0,14	7,00	1,45	1,87	0,43
0,20	0,50	0,30	149	97	96	1,03	0,20	0,28	0,12	8,80	1,70	2,42	0,42
0,20	0,40	0,40	148	98	92	1,05	0,19	0,30	0,10	10,15	1,88	2,86	0,42
0,20	0,30	0,50	147	99	88	1,03	0,18	0,30	0,10	10,82	1,93	3,13	0,41
0,20	0,20	0,60	145	100	86	0,95	0,16	0,28	0,09	10,56	1,83	3,16	0,40
0,20	0,10	0,70	144	101	84	0,80	0,14	0,26	0,09	9,12	1,58	2,93	0,39
0,20	0,00	0,80	142	102	82	0,50	0,11	0,22	0,09	5,66	1,20	2,46	0,38
0,10	0,90	0,00	143	96	113	0,33	0,10	0,09	0,20	1,65	0,48	0,45	0,39
0,10	0,80	0,10	144	96	104	0,64	0,12	0,15	0,16	4,02	0,75	0,93	0,39

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Tabela 4.28 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 5 (Parte II)

Pesos			y_1	y_2	y_3	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{MAPE}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$	UPV
w_1	w_2	w_3											
0,10	0,70	0,20	144	96	98	0,80	0,14	0,19	0,13	6,09	1,04	1,46	0,39
0,10	0,60	0,30	143	97	92	0,90	0,15	0,22	0,11	7,99	1,31	1,99	0,39
0,10	0,50	0,40	143	98	88	0,94	0,15	0,24	0,10	9,51	1,52	2,43	0,38
0,10	0,40	0,50	141	99	85	0,94	0,15	0,24	0,09	10,39	1,62	2,69	0,38
0,10	0,30	0,60	140	100	83	0,90	0,14	0,23	0,09	10,41	1,57	2,72	0,37
0,10	0,20	0,70	138	101	81	0,80	0,12	0,21	0,09	9,41	1,38	2,48	0,36
0,10	0,10	0,80	136	102	79	0,64	0,09	0,17	0,09	7,34	1,06	1,99	0,35
0,10	0,00	0,90	134	103	78	0,33	0,06	0,12	0,09	3,55	0,65	1,34	0,35
0,00	1,00	0,00	136	96	112	0,00	0,00	0,00	0,21	0,00	0,00	0,00	0,36
0,00	0,90	0,10	137	96	103	0,33	0,03	0,06	0,17	1,97	0,19	0,37	0,36
0,00	0,80	0,20	138	96	96	0,50	0,06	0,11	0,14	3,66	0,42	0,80	0,36
0,00	0,70	0,30	137	97	91	0,61	0,07	0,14	0,12	5,20	0,64	1,23	0,36
0,00	0,60	0,40	137	98	87	0,67	0,09	0,16	0,10	6,45	0,82	1,58	0,36
0,00	0,50	0,50	135	99	84	0,69	0,09	0,17	0,10	7,18	0,92	1,78	0,35
0,00	0,40	0,60	134	100	81	0,67	0,09	0,16	0,09	7,25	0,92	1,77	0,35
0,00	0,30	0,70	132	101	80	0,61	0,07	0,14	0,09	6,58	0,81	1,55	0,35
0,00	0,20	0,80	130	102	78	0,50	0,06	0,11	0,10	5,22	0,60	1,14	0,34
0,00	0,10	0,90	128	103	78	0,33	0,03	0,06	0,10	3,19	0,32	0,61	0,34
0,00	0,00	1,00	125	104	77	0,00	0,00	0,00	0,11	0,00	0,00	0,00	0,34
0,33	0,33	0,33	154	99	103	1,10	0,23	0,34	0,14	7,78	1,64	2,38	0,46
0,67	0,17	0,17	162	102	150	0,87	0,20	0,28	0,34	2,56	0,59	0,82	0,49
0,17	0,67	0,17	148	96	102	0,87	0,18	0,22	0,14	6,15	1,25	1,58	0,42
0,17	0,17	0,67	143	101	83	0,87	0,14	0,25	0,09	10,13	1,67	2,97	0,38

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os dados contidos na Tabela 4.28 correspondem aos pontos Pareto ótimos da otimização das respostas y_1 , y_2 e y_3 . Esse conjunto de pontos forma a fronteira de Pareto para o problema em análise. A Figura 4.31 apresenta graficamente a Fronteira de Pareto obtida.

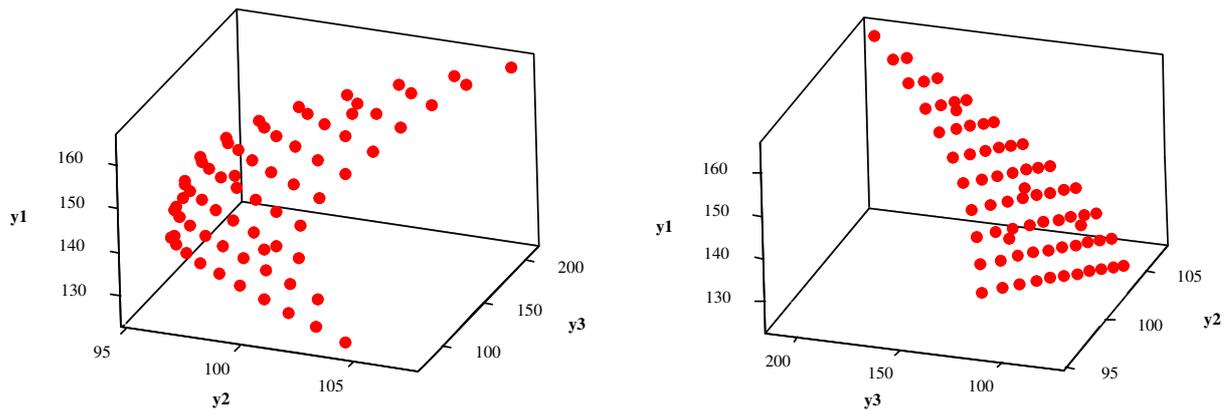


Figura 4.31 – Fronteira de Pareto sob diferentes perspectivas - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como nos casos apresentados anteriormente, o NBI foi capaz de construir uma fronteira de Pareto com pontos uniformemente distribuídos, o que se torna uma vantagem no processo de tomada de decisão por permitir ao decisor avaliar, de maneira mais fácil, o comportamento *trade-off* e como a priorização de uma resposta afeta a outra. Isto não seria

possível se houvesse a aglomeração de soluções em algum ponto, gerando uma fronteira descontínua. Já o arranjo de misturas, ao fornecer uma combinação uniforme dos pesos, favorece a construção da fronteira e a obtenção dos polinômios canônicos de mistura por meio da modelagem das respostas.

Buscando-se visualizar o espaço de solução referente aos pontos Pareto ótimos, apresenta-se a Figura 4.32. Uma vez que a variância da previsão é medida no espaço de solução, ou seja, $UPV = \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$, visualizar como os pontos se distribuem neste espaço é fundamental, pois, pode dar indícios de como a variância se comporta no problema analisado.

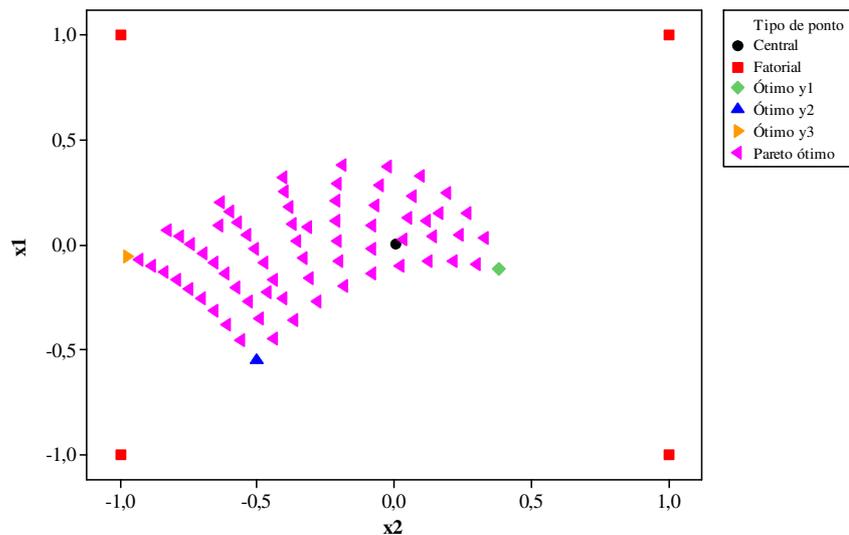


Figura 4.32 – Espaço de solução - Caso 5.
Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Ao se analisar a Figura 4.32, constata-se que os pontos se deslocam no espaço de solução, à medida que os pesos são alterados no processo de otimização. Isto permitirá, assim como ocorreu nos casos anteriores, a modelagem do polinômio canônico de misturas da UPV em função dos pesos relacionados a cada resposta analisada. Além disso, é possível perceber que os pontos de ótimo de cada resposta estão localizados em diferentes regiões no espaço experimental, sendo que o ponto ótimo de y_1 é o mais próximo do centro. Neste caso, diferentemente dos casos anteriores, como somente 2 cp são utilizados, maiores valores de UPV são esperados para y_1 . Conforme apresentado no gráfico de dispersão da variância (Figura 2.9), ao se utilizar 2 cp , o comportamento da UPV altera-se completamente, tornando o centro do arranjo uma região com altos valores de UPV.

Com base nos dados apresentados na Tabela 4.28, foi realizada uma análise de correlação de Pearson entre as métricas de ponderação e a medida de variância, UPV. Assim, a Tabela 4.29 apresenta os resultados da análise de correlação, juntamente, com seus

respectivos *p-values*. Assim como foi feito nos casos anteriores, valores de *p-values* menores que 5% indicam correlações estatisticamente significantes.

Tabela 4.29 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 5

		<i>S(x)</i>	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{MAPE}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$
UPV	Correlação	0,390	0,761	0,581	0,652	-0,345	-0,011	-0,206
	<i>p-value</i>	0,001	0,000	0,000	0,000	0,003	0,930	0,087

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Tabela 4.29, percebe-se que as métricas de diversificação apresentaram correlação positiva e estatisticamente significativa com a UPV, o que vai de encontro aos conceitos teóricos apresentados, de que a diversificação reduziria a variância de previsão. Isto acontece no presente caso, pois, os pontos Pareto ótimos tem suas soluções distribuídas em uma região central do arranjo experimental, região esta que apresenta altos valores de variância de previsão, uma vez que 2 *cp* são utilizados. Já a métrica de erro, MAPE, apresentou correlação positiva e estatisticamente significativa com a UPV, o que indica que a minimização do MAPE pode levar a respostas robustas, do ponto de vista da variância. Ao se analisarem as razões entre as métricas de diversificação e de erro, somente a razão *S(x)*/MAPE apresentou correlação negativa e estatisticamente significativa, ao nível de 5%, com a UPV.

O Passo 7 engloba a modelagem das métricas de ponderação, a partir dos dados apresentados na Tabela 4.28. Assim, seus polinômios canônicos de mistura, com seus respectivos superfícies de resposta e *contour plot* são:

$$\begin{aligned}
 S(x) = & -0,0074w_1 - 0,0074w_2 - 0,0074w_3 + 2,7705w_1w_2 + 2,7705w_1w_3 + \\
 & 2,7705w_2w_3 + 5,4207w_1w_1w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_3w_3 + \\
 & 1,4619w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 1,4619w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 1,4619w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.33}$$

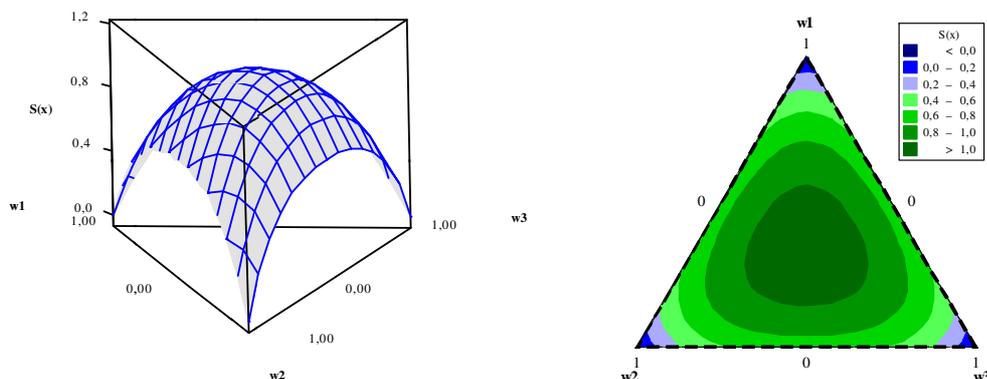


Figura 4.33 – Superfície de resposta e *Contour plot* para *S(x)* - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$DC = 1,059w_1w_2 + 0,663w_1w_3 + 0,357w_2w_3 \quad (4.34)$$

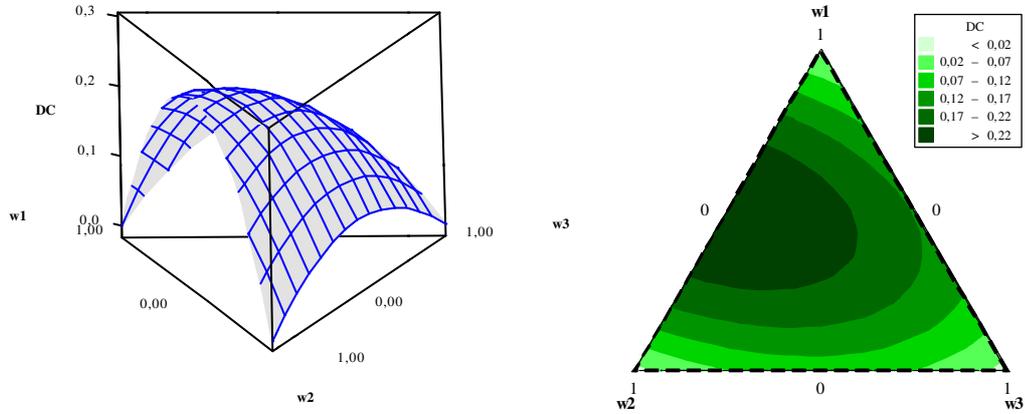


Figura 4.34 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DC - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$DO = 0,9831w_1w_2 + 1,3589w_1w_3 + 0,6859w_2w_3 \quad (4.35)$$

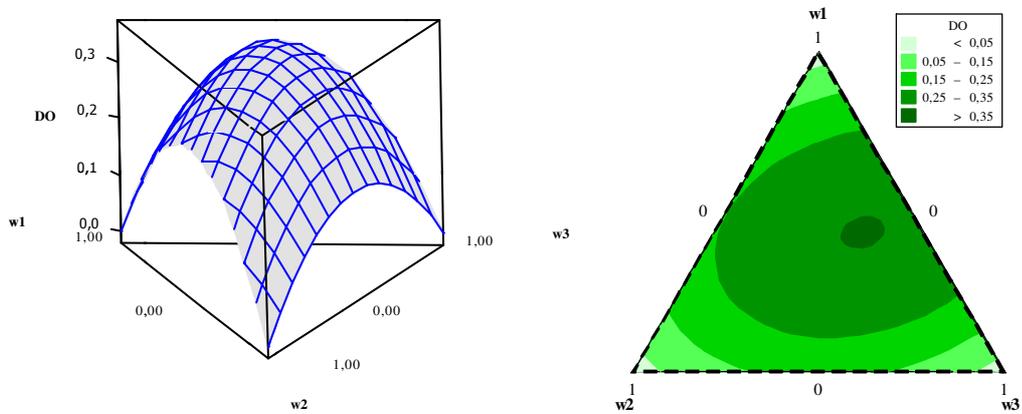


Figura 4.35 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DO - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned} MAPE = & 0,598w_1 + 0,204w_2 + 0,112w_3 - 0,502w_1w_2 - 0,516w_1w_3 - \\ & 0,246w_2w_3 + 0,108w_1w_2(w_1 - w_2) + 0,294w_1w_3(w_1 - w_3) - \\ & 0,083w_2w_3(w_2 - w_3) - 1,027w_1w_1w_2w_3 - 0,289w_1w_2w_2w_3 - \\ & 0,396w_1w_2w_3w_3 + 0,110w_1w_2(w_1 - w_2)^2 - 0,149w_1w_3(w_1 - w_3)^2 \end{aligned} \quad (4.36)$$

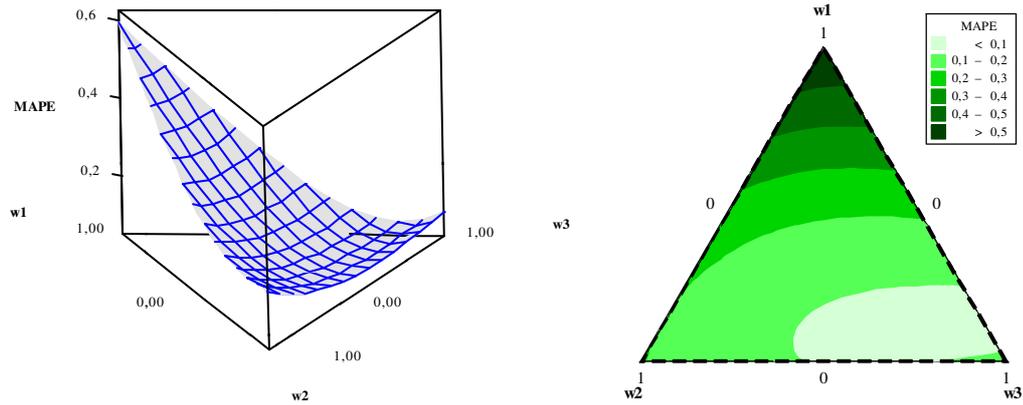


Figura 4.36 – Superfície de resposta e *Contour plot* para MAPE - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 S(x)/MAPE = & -0,27w_1 + 0,01w_2 - 0,30w_3 + 10,81w_1w_2 + 12,78w_1w_3 + \\
 & 29,24w_2w_3 - 5,83w_1w_2(w_1 - w_2) - 22,25w_1w_3(w_1 - w_3) - \\
 & 10,14w_2w_3(w_2 - w_3) - 103,46w_1w_1w_2w_3 + 102,47w_1w_2w_2w_3 + \\
 & 193,13w_1w_2w_3w_3 + 6,00w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 30,90w_1w_3(w_1 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.37}$$

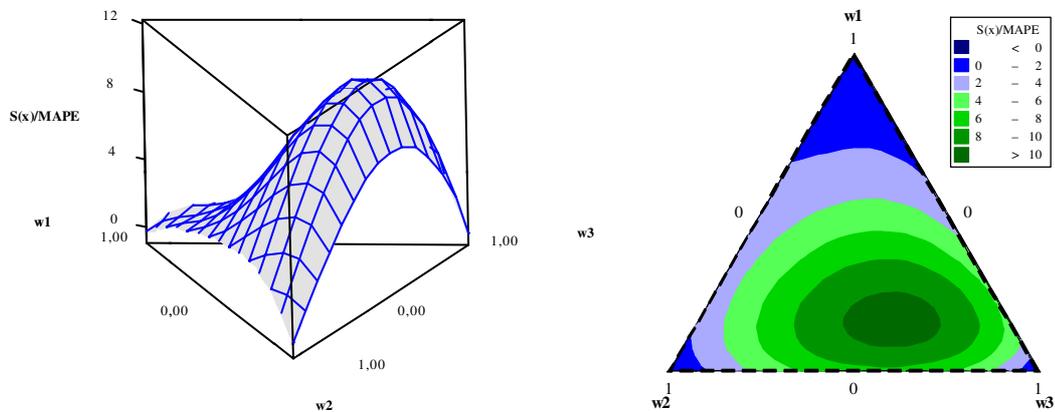


Figura 4.37 – Superfície de resposta e *Contour plot* para $S(x)/MAPE$ - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 DC/MAPE = & 0,002w_1 - 0,011w_2 - 0,064w_3 + 3,898w_1w_2 + 3,109w_1w_3 + \\
 & 3,802w_2w_3 - 2,503w_1w_2(w_1 - w_2) - 4,897w_1w_3(w_1 - w_3) - \\
 & 1,188w_2w_3(w_2 - w_3) - 12,985w_1w_1w_2w_3 + 20,733w_1w_2w_2w_3 + \\
 & 29,527w_1w_2w_3w_3 + 3,897w_1w_3(w_1 - w_3)^2 - 1,412w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.38}$$

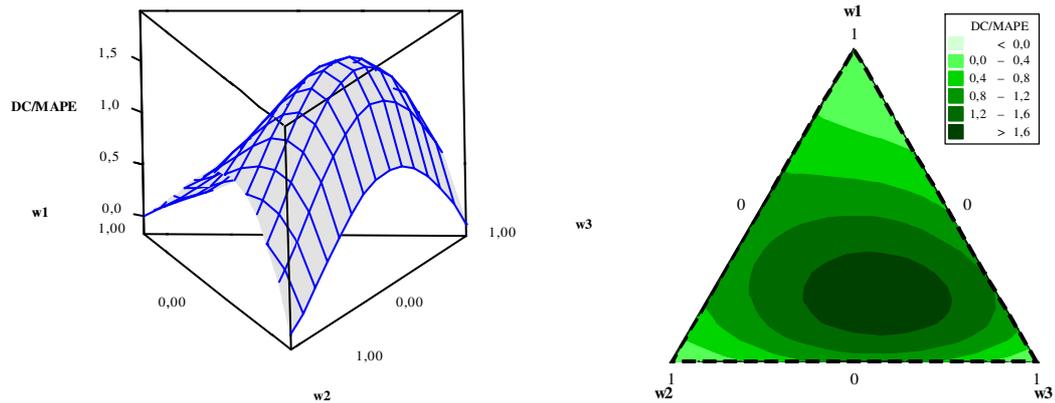


Figura 4.38 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DC/MAPE - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 \text{DO/MAPE} = & -0,005w_1 - 0,006w_2 - 0,132w_3 + 3,661w_1w_2 + 6,426w_1w_3 + \\
 & 7,298w_2w_3 - 2,224w_1w_2(w_1 - w_2) - 10,036w_1w_3(w_1 - w_3) - \\
 & 2,302w_2w_3(w_2 - w_3) - 20,259w_1w_1w_2w_3 + 19,373w_1w_2w_2w_3 + \\
 & 42,569w_1w_2w_3w_3 + 7,898w_1w_3(w_1 - w_3)^2 - 2,471w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned} \tag{4.39}$$

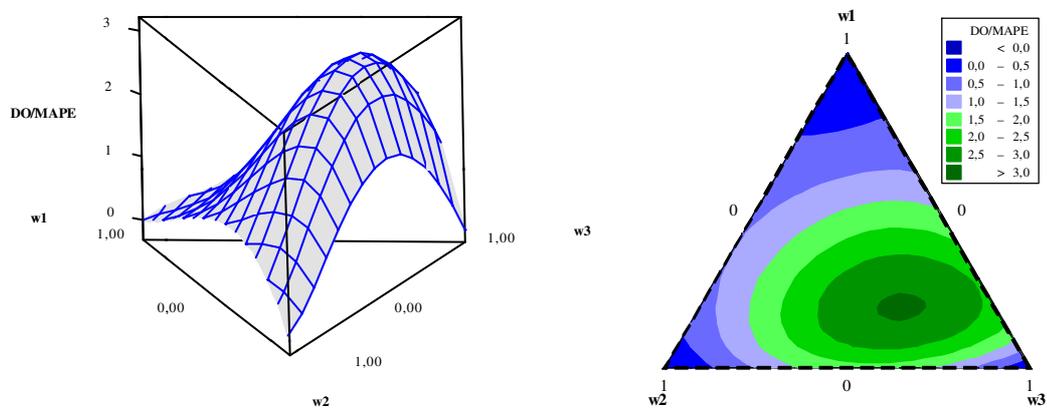


Figura 4.39 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DO/MAPE - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 \text{UPV} = & 0,4527w_1 + 0,3618w_2 + 0,3412w_3 + 0,3346w_1w_2 + 0,2335w_1w_3 + \\
 & 0,0436w_1w_2(w_1 - w_2) + 0,0932w_1w_3(w_1 - w_3) + 0,0650w_2w_3(w_2 - w_3) + \\
 & 1,3127w_1w_1w_2w_3 - 0,2879w_1w_2w_3w_3 - 0,2169w_1w_2(w_1 - w_2)^2 - \\
 & 0,2541w_1w_3(w_1 - w_3)^2
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

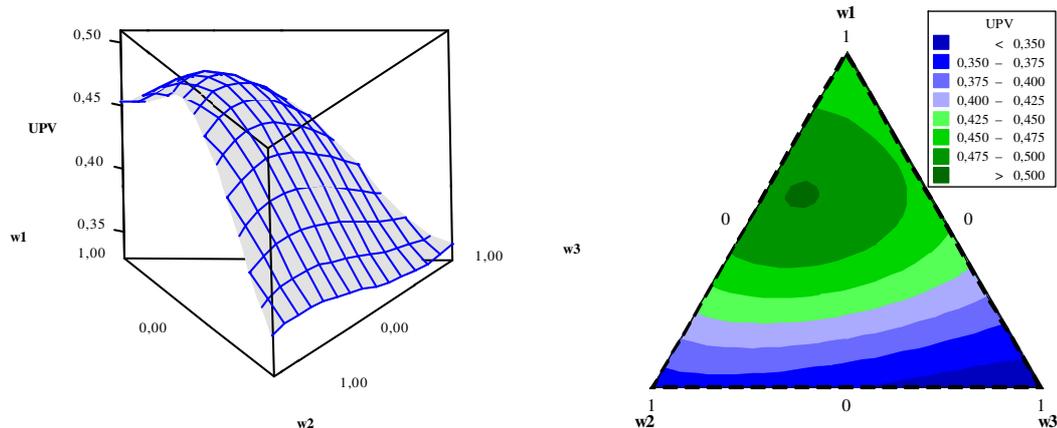


Figura 4.40 – Superfície de resposta e *Contour plot* para UPV - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como ocorreu no caso anterior, todos os polinômios canônicos de mistura tiveram ótimo ajuste, uma vez que todos possuem R^2 ajustado próximo de 100%. Além disso, a UPV foi modelada em função dos pesos, provando que a variância de previsão depende dos pesos atribuídos às funções durante o processo de otimização multiobjetivo. Porém, o comportamento da variância foi alterado. Quando se comparam as Figuras 4.27 e 4.40, relativas à UPV para os problemas com 5 e 2 *cp*, respectivamente, observa-se que o peso atribuído à resposta y_1 , w_1 , responsável por reduzir a variância, passa a ser responsável pelo aumento da variância para o caso em que se utiliza 2 *cp*. Isso ocorre, pois, o ótimo da resposta y_1 se situa mais próximo ao centro do arranjo experimental. Assim, com a mudança da distribuição da variância de previsão causada pela diminuição do número de pontos centrais, o ponto de ótimo da resposta y_1 passa a se situar em uma região de altos valores para a variância de previsão.

Por fim, executa-se o Passo 8, que consiste na determinação dos pesos a serem utilizados para a escolha do ponto Pareto ótimo preferido. A maximização das métricas de diversificação, assim como a minimização da métrica de erro, são executadas, utilizando para isso o algoritmo GRG. Esse processo executado para cada métrica gera um vetor de pesos ótimos a serem utilizados no problema de otimização original, implementado pelo NBI, gerando uma resposta ótima diferente, permitindo sua comparação. A Tabela 4.30 apresenta um resumo dos resultados obtidos.

Tabela 4.30 – Resumo dos resultados - Caso 5

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	DC	DO
						MAPE	MAPE	MAPE
Pesos	w_1	0,333	0,500	0,437	0,115	0,156	0,204	0,194
	w_2	0,333	0,500	0,162	0,168	0,312	0,329	0,255
	w_3	0,333	0,000	0,401	0,717	0,531	0,468	0,551
Variáveis	x_1	0,084	-0,137	0,241	0,033	0,005	0,031	0,068
	x_2	-0,314	-0,081	-0,154	-0,730	-0,607	-0,525	-0,565
	y_1	154,214	159,927	155,767	138,814	144,231	147,501	145,883
Respostas	y_2	98,713	98,529	100,673	101,015	99,232	98,857	99,589
	y_3	102,885	137,045	112,008	80,661	85,794	89,563	86,678
	UPV	0,463	0,491	0,471	0,362	0,392	0,413	0,402

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base nos resultados apresentados na Tabela 4.30 e considerando que, para o problema analisado, o máximo valor de UPV foi 0,497, pode-se afirmar que as métricas de diversificação obtiveram um resultado indesejável, pois, o ponto Pareto ótimo obtido com a utilização dessas métricas levaria a uma região de máxima variância de previsão. As métricas que obtiveram melhor performance em reduzir a UPV foram MAPE e $S(x)/\text{MAPE}$. Além disso, a utilização dessas métricas manteve a diversificação, sem a tendência de zerar algum dos pesos.

Por fim, a Figura 4.41 apresenta os resultados obtidos com a utilização de MAPE e de $S(x)/\text{MAPE}$ diretamente na fronteira Pareto ótima.

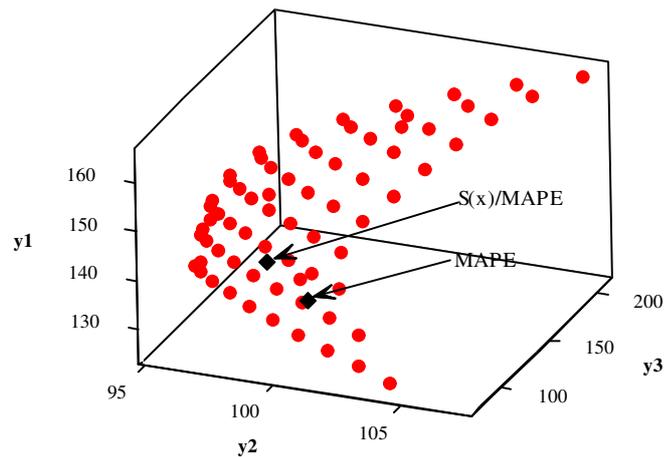


Figura 4.41 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 5.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Como discutido anteriormente, o uso de 2 *cp* no arranjo experimental, ao invés de 5 *cp*, aumentou consideravelmente a variância de previsão, medida em UPV, principalmente no centro do arranjo. Mesmo assim, o uso das métricas MAPE e $S(x)/\text{MAPE}$ gerou um vetor de

pesos que levou as respostas a uma região de mínima variância para o problema em análise, sendo que a métrica de erro, MAPE, foi a que obteve o melhor resultado. Apesar da alteração no comportamento da variância, foi possível, assim como no caso anterior, modelar a UPV em função dos pesos, comprovando que os pesos utilizados no processo de otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida, mesmo para o caso em que se utilizou um menor número de pontos centrais no arranjo experimental.

4.6 – CASO 6

Para a análise do sexto caso, o método proposto neste trabalho foi empregado para otimizar o processo de usinagem para o aço endurecido AISI H13 usando uma ferramenta de nitreto cúbico de boro policristalino (*Polycrystalline Cubic Boron Nitride – PCBN*) com geometria *wiper*.

O torneamento de precisão do aço endurecido, isto é, processo de torneamento para materiais que são endurecidos acima de 45 HRC (BOUACHA *et al.*, 2010), tem sido estudado por mais de 35 anos (TÖNSHOFF *et al.*, 2000). Esse grande número de estudos foi desenvolvido utilizando muitos tipos de material e como o atual estado do conhecimento neste campo não permite generalizar os resultados obtidos e prever o comportamento de outros materiais (BOUACHA *et al.*, 2010), a pesquisa em torneamento de materiais duros é continuada (HUANG *et al.*, 2007; LAHIFF *et al.*, 2007). Assim, até o presente momento, considerável atenção tem sido dada ao entendimento desse processo.

Quando comparado ao tradicional processo de retífica, o processo de torneamento de materiais duros apresenta algumas vantagens, tais como, reduzir o custo de produção, reduzir o tempo de *setup*, é um processo de usinagem flexível, diminuir o tempo de produção, eliminar o fluido de corte, melhorar a integridade da superfície e melhorar a qualidade geral do produto (TÖNSHOFF *et al.*, 2000; ÖZEL *et al.*, 2007; GAITONDE *et al.*, 2009; BOUACHA *et al.*, 2010; MANDAL *et al.*, 2011; PAIVA *et al.*, 2007; PAIVA *et al.*, 2012; BOUACHA *et al.*, 2014). Esse processo é amplamente usado na indústria automotiva, aeroespacial, indústria de motores, rolamentos, ferramentas de corte, entre outras (ÖZEL *et al.*, 2007; BOUACHA *et al.*, 2010; PAIVA *et al.*, 2012; BOUACHA *et al.*, 2014).

No acabamento de torneamento duro, a alta dureza das peças, as grandes forças de corte e as altas temperaturas na interface ferramenta de corte-peça, impõem às ferramentas requisitos extremos de rigidez e resistência ao desgaste (BOUACHA *et al.*, 2014). Devido a esta condição, PCBN tem provado ser melhor para produzir partes precisas do que revestimento de micro-grãos de carbonetos e cerâmicas (POULACHON *et al.*, 2001). Sendo o

segundo material mais duro conhecido pelo homem só perdendo em termos de dureza para o diamante (HARRIS *et al.*, 2004; ANGSEYD *et al.*, 2009), com alta dureza inclusive a altas temperaturas, o PCBN tem alta estabilidade térmica e alta condutividade térmica (HEATH, 1986; KÖNIG *et al.*, 1984; BROOKES, 1986; HERZOG, 1977).

Sobre a contribuição da geometria da ferramenta para o melhoramento do processo de torneamento duro, alguns autores apresentam o uso de ferramentas com geometria *wiper* (ÖZEL *et al.*, 2007; GAITONDE *et al.*, 2009; GRZESIK, 2009; PAIVA *et al.*, 2012; CORREIA e DAVIM, 2011). Devido à sua geometria tri-radial (ÖZEL *et al.*, 2007), é possível dobrar o avanço (*feed rate*), aumentando a produtividade e também mantendo a rugosidade tão baixa quanto possível (ÖZEL *et al.*, 2007; PAIVA *et al.*, 2012; CORREIA e DAVIM, 2011).

Os benefícios potenciais promovidos pelo torneamento duro para a qualidade da superfície e o aumento da taxa de produtividade dependem, intrinsecamente, de um ótimo ajuste dos parâmetros do processo tal como velocidade de corte (V_c), avanço (f) e profundidade de corte (d). Esses parâmetros são diretamente responsáveis por muitas das propriedades previsíveis da usinagem como desgaste da ferramenta, vida da ferramenta, acabamento da superfície e quantidade de material removido (ÖZEL *et al.*, 2007; PAIVA *et al.*, 2012; ÖZEL *et al.*, 2005; CORREIA e DAVIM, 2011).

Assim, para esse caso foram consideradas como funções objetivo a taxa de remoção de material (*Material Removal Rate – MRR*), um parâmetro de rugosidade da superfície (R_a) e a força de corte (F_c), usando como variáveis de decisão a velocidade de corte (V_c), o avanço (f) e a profundidade de corte (d), no torneamento do aço endurecido AISI H13 utilizando ferramenta de PCBN com geometria *wiper*.

Foram utilizadas informações de testes de torneamento a seco do aço endurecido AISI H13, provenientes do trabalho de Campos (2015). Os experimentos foram realizados em um torno CNC com máxima velocidade de rotação de 4500 rpm e motor do eixo-árvore com 18 kW de potência. As peças usadas no processo de torneamento foram feitas com dimensão de $\varnothing 50 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$. Todas elas foram previamente temperadas em uma atmosfera a vácuo a 1000–1040 °C. Depois desse tratamento, uma dureza média de 54 ± 1 HRC foi obtida. Ferramenta de PCBN (cBN + TiC), Ref. PCBN7025 (segundo norma ISO-CNGA 120408 S01030 AWG) foi usada para usinagem do aço endurecido AISI H13.

Calculou-se a taxa de material removido (*MRR*) como o volume de material removido dividido pelo tempo gasto para removê-lo. A medida de rugosidade da superfície (R_a) nas superfícies torneadas, de acordo com a norma ISO 4287/1, foi obtida por meio do rugosímetro

de agulha Hommeltester-T 1000. A medição e a aquisição da forças de corte principal (F_c) foi efetuada por meio do dinamômetro piezoelétrico Kistler 9121, amplificador de carga Kistler 5019 e do seu respectivo sistema de aquisição de dados *Dynoware Software Data Acquisition*.

Adotando essas condições experimentais, as peças foram usinadas usando os parâmetros definidos na Tabela 4.31. As variáveis de decisão foram analisadas de forma codificada (*coded*), com o intuito de reduzir a variância. Para esta finalidade, a Equação 2.56 foi utilizada.

Tabela 4.31 – Fatores e respectivos níveis - Caso 6

Fatores	Símbolo	Níveis				
		-1,682	-1	0	1	1,682
Velocidade de corte (m/min)	V_c	57,38	100	162,5	225	267,62
Avanço (mm/rotação)	f	0,06	0,10	0,16	0,22	0,26
Profundidade de corte (mm)	d	0,09	0,15	0,24	0,33	0,39

Fonte: modificado de Campos (2015).

Um conjunto sequencial de experimentos foi estabelecido usando um CCD, construído de acordo com o design de superfície de resposta 2^3 , com 6 pontos axiais e 5 pontos centrais, gerando 19 experimentos. A Tabela 4.32 apresenta o CCD para este processo.

Tabela 4.32 – CCD para MRR , Ra e F_c - Caso 6

N	V_c (m/min)	f (mm/rot)	d (mm)	MRR (cm^3/min)	Ra (μm)	F_c (N)
1	-1	-1	-1	1,50	0,13	342,44
2	+1	-1	-1	3,38	0,09	238,62
3	-1	+1	-1	3,38	0,52	434,36
4	+1	+1	-1	7,59	0,26	243,65
5	-1	-1	+1	3,30	0,14	446,41
6	+1	-1	+1	7,43	0,12	246,74
7	-1	+1	+1	7,43	0,48	454,54
8	+1	+1	+1	16,71	0,45	248,45
9	-1.682	0	0	2,24	0,29	497,71
10	+1.682	0	0	10,44	0,15	226,56
11	0	-1.682	0	2,24	0,12	325,65
12	0	+1.682	0	10,44	0,54	362,56
13	0	0	-1.628	2,34	0,15	332,67
14	0	0	+1.682	10,33	0,15	365,98
15	0	0	0	6,34	0,15	338,75
16	0	0	0	6,34	0,16	336,93
17	0	0	0	6,34	0,14	337,77
18	0	0	0	6,34	0,17	335,69
19	0	0	0	6,34	0,16	339,13

Fonte: Adaptado de Campos (2015).

Segundo Myers *et al.* (2009), o uso de 5 *cp* garante uma boa dispersão da variância de previsão por toda a região experimental, assim como o uso de $\alpha = \sqrt[4]{2^k}$ garante a rotacionalidade, sendo essas duas características essenciais em modelos de superfície de resposta.

A análise dos dados experimentais, correspondentes ao Passo 1, geram a modelagem matemática apresentada na Tabela 4.33, modelagem esta que equivale ao Passo 2 do método proposto.

Tabela 4.33 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 6

Termos	<i>MRR</i> (cm³/min)	<i>Ra</i> (μm)	<i>Fc</i> (N)
Constante	6,340	0,155	338,460
<i>Vc</i>	2,438	-0,042	-84,667
<i>f</i>	2,438	0,142	12,363
<i>D</i>	2,378	0,014	14,139
<i>Vc</i> ²	0,000	0,030	4,217
<i>f</i> ²	0,000	0,069	-2,158
<i>d</i> ²	-0,001	0,005	-0,312
<i>Vc</i> x <i>f</i>	0,935	-0,029	-11,661
<i>Vc</i> x <i>d</i>	0,915	0,031	-13,904
<i>f</i> x <i>d</i>	0,915	0,014	-10,889
p-value	0,000	0,000	0,000
<i>R</i> ² (%)	99,62%	96,35%	97,66%
<i>R</i> ² ajustado (%)	99,24%	92,71%	95,33%

Valores em negrito representam termos significantes nos modelos (*p-value* < 5%).

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

A adequação dos modelos foi analisada pela ANOVA. Os *p-values* para as funções objetivo em análise mostram uma regressão estatisticamente significativa ao nível de significância de 5%, provando a adequação das funções. Além disso, os valores de *R*² e *R*² ajustado mostram que os modelos têm um bom ajuste.

Com o intuito de comparar como cada variável de decisão afeta cada resposta, os gráficos de efeito principal para as três respostas em análise são mostrados na Figura 4.42.

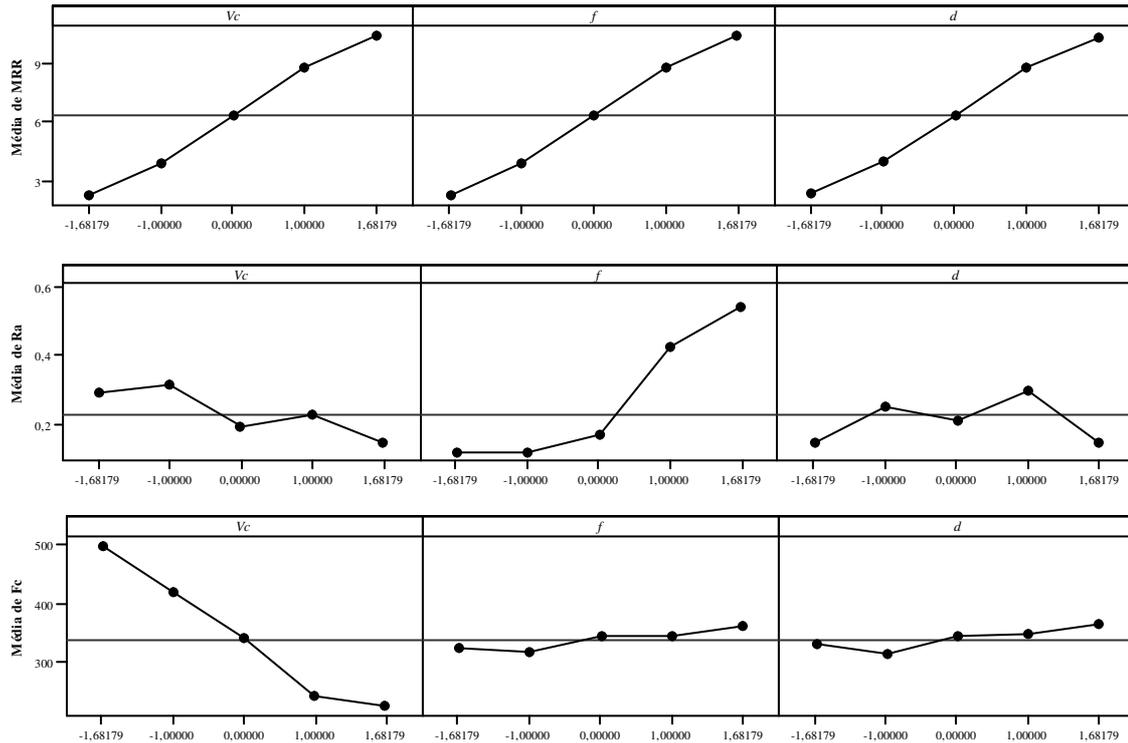


Figura 4.42 – Gráficos de efeito principal - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

De acordo com esta análise, os três fatores Vc , f e d são igualmente significantes para MRR , sendo que todos colaboram para seu aumento. Já para Ra e Fc , o fator mais significativo para sua redução foi Vc . Em se tratando do ponto de vista de Vc , não existiria conflitos entre as respostas, pois, à medida em que se aumenta Vc , aumenta-se MRR , objetivo que se deseja maximizar, e se diminui Ra e Fc , objetivos que se deseja minimizar. Porém, quando se analisa f , observa-se que a tentativa de aumentar MRR , que é um parâmetro de produtividade, comprometeria Ra , que é um parâmetro de qualidade, o que mostra a natureza conflitante dos objetivos.

Visando checar a convexidade das funções, pode-se analisar a natureza do ponto estacionário usando a Equação 2.12. Para MRR os autovalores são $[0,9215; -0,4671; -0,4550]$, para Ra os autovalores são $[0,0739; 0,0352; -0,0042]$ e para Fc os autovalores são $[-11,7959; 9,5667; 3,9751]$. Os diferentes sinais dos autovalores das respostas indicam que as funções não são nem côncavas nem convexas e seus respectivos pontos estacionários são pontos de sela. Novamente, as diferentes convexidades das funções objetivo justificam o uso do NBI. A Figura 4.43 apresenta a superfície de resposta para os modelos gerados.

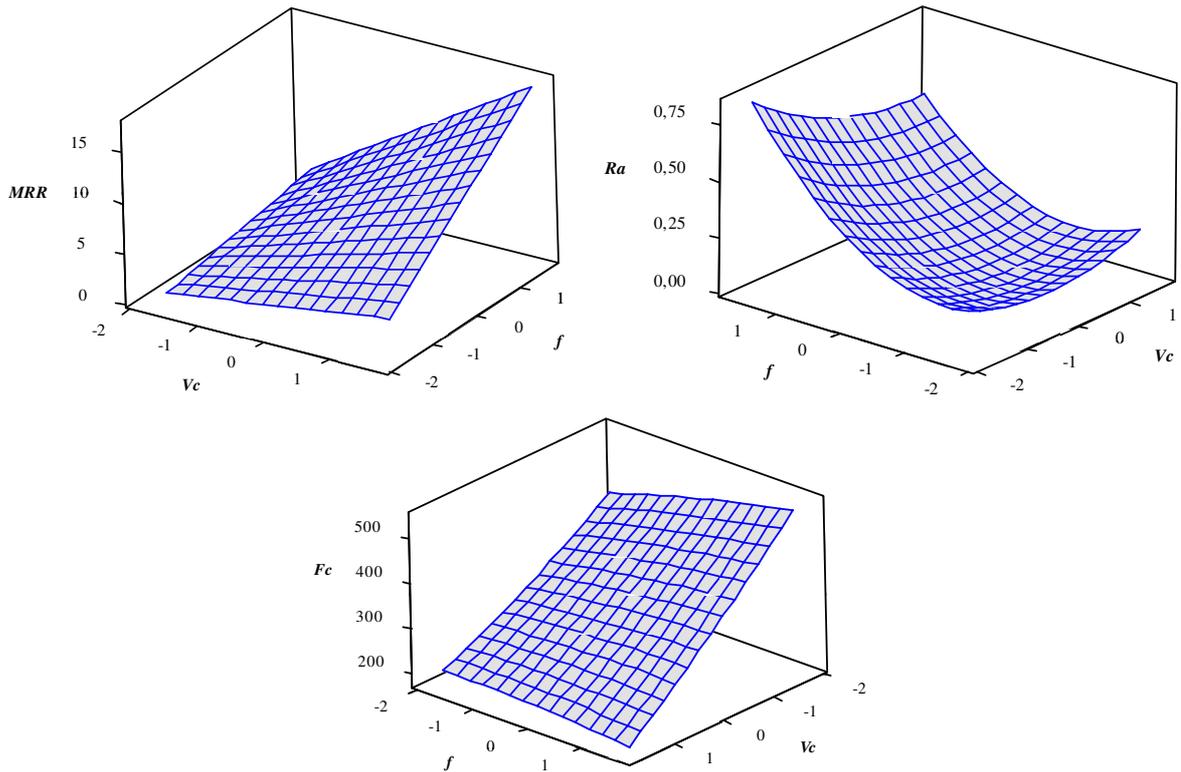


Figura 4.43 – Superfícies de resposta (para $d = 0$) - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Para implementar o NBI, que equivale ao Passo 3 da presente proposta, a matriz *payoff* foi inicialmente estimada, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 4.34. Diferentemente do que ocorreu nos casos anteriores, os pontos de ótimo das funções em análise não estão dentro da região experimental, uma vez que a restrição da região esférica, $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, permanece ativa durante o processo de otimização. Esta constatação pode ser comprovada ao se observar que o valor do multiplicador de Lagrange associado à restrição da região esférica é diferente de zero, ao se otimizar individualmente as respostas em análise.

Tabela 4.34 – Matriz *payoff* para as funções objetivo - Caso 6

<i>MRR</i>	<i>Ra</i>	<i>Fc</i>
15,99	0,379	248,76
3,02	0,061	253,60
12,26	0,208	205,92

Valores em negrito representam ótimos individuais.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Uma vez implementado o NBI, um arranjo de misturas para os pesos de cada função objetivo (Passo 4) foi definido. Subsequentemente, a solução de otimização do NBI foi obtido

para cada condição experimental definida pelo arranjo de misturas (Passo 5). Baseado nesses resultados, procedeu-se, então, ao cálculo das métricas a serem utilizadas para a definição dos pesos ótimos e escolha do ponto Pareto ótimo preferido (Passo 6). Os resultados são apresentados na Tabela 4.35, que apresenta um arranjo *simplex lattice* de grau 10.

Tabela 4.35 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 6 (Parte I)

Pesos			MRR	Ra	Fc	S(x)	DC	DO	MAPE	S(x)	DC	DO	UPV
w ₁	w ₂	w ₃								MAPE	MAPE	MAPE	
1,00	0,00	0,00	15,99	0,379	249	0,00	0,00	0,00	1,80	0,00	0,00	0,00	0,61
0,90	0,10	0,00	15,67	0,320	244	0,33	0,06	0,25	1,48	0,22	0,04	0,17	0,61
0,90	0,00	0,10	15,93	0,353	243	0,33	0,13	0,11	1,65	0,20	0,08	0,07	0,61
0,80	0,20	0,00	14,95	0,272	241	0,50	0,10	0,44	1,23	0,41	0,08	0,36	0,61
0,80	0,10	0,10	15,43	0,299	239	0,64	0,17	0,34	1,36	0,47	0,12	0,25	0,61
0,80	0,00	0,20	15,79	0,330	237	0,50	0,23	0,20	1,52	0,33	0,15	0,13	0,61
0,70	0,30	0,00	13,95	0,232	240	0,61	0,13	0,58	1,03	0,59	0,13	0,57	0,61
0,70	0,20	0,10	14,58	0,255	237	0,80	0,20	0,51	1,13	0,71	0,17	0,45	0,61
0,70	0,10	0,20	15,13	0,280	234	0,80	0,25	0,41	1,25	0,64	0,20	0,32	0,61
0,70	0,00	0,30	15,56	0,308	232	0,61	0,30	0,26	1,40	0,44	0,21	0,19	0,61
0,60	0,40	0,00	12,70	0,199	240	0,67	0,15	0,67	0,87	0,77	0,17	0,76	0,61
0,60	0,30	0,10	13,47	0,218	236	0,90	0,22	0,63	0,95	0,94	0,23	0,66	0,61
0,60	0,20	0,20	14,16	0,239	233	0,95	0,27	0,56	1,05	0,91	0,26	0,53	0,61
0,60	0,10	0,30	14,77	0,263	230	0,90	0,31	0,45	1,16	0,77	0,27	0,39	0,61
0,60	0,00	0,40	15,27	0,289	227	0,67	0,34	0,30	1,29	0,52	0,26	0,23	0,61
0,50	0,50	0,00	11,26	0,171	242	0,69	0,15	0,69	0,76	0,92	0,20	0,92	0,47
0,50	0,40	0,10	12,12	0,188	237	0,94	0,22	0,69	0,82	1,15	0,27	0,85	0,59
0,50	0,30	0,20	12,94	0,205	233	1,03	0,27	0,66	0,89	1,16	0,31	0,74	0,61
0,50	0,20	0,30	13,69	0,225	229	1,03	0,31	0,58	0,98	1,06	0,32	0,59	0,61
0,50	0,10	0,40	14,36	0,247	226	0,94	0,34	0,46	1,08	0,88	0,32	0,43	0,61
0,50	0,00	0,50	14,91	0,272	223	0,69	0,35	0,31	1,19	0,58	0,30	0,26	0,61
0,40	0,60	0,00	9,76	0,145	243	0,67	0,15	0,67	0,65	1,04	0,23	1,03	0,33
0,40	0,50	0,10	10,65	0,161	239	0,94	0,21	0,70	0,71	1,33	0,30	0,99	0,40
0,40	0,40	0,20	11,51	0,177	234	1,05	0,26	0,70	0,77	1,37	0,34	0,91	0,50
0,40	0,30	0,30	12,37	0,194	230	1,09	0,30	0,66	0,83	1,30	0,36	0,78	0,61
0,40	0,20	0,40	13,17	0,212	226	1,05	0,33	0,57	0,91	1,16	0,36	0,63	0,61
0,40	0,10	0,50	13,89	0,232	222	0,94	0,34	0,45	1,00	0,94	0,34	0,45	0,61
0,40	0,00	0,60	14,50	0,256	219	0,67	0,34	0,30	1,11	0,61	0,31	0,27	0,61
0,30	0,70	0,00	8,22	0,120	245	0,61	0,13	0,58	0,55	1,12	0,24	1,07	0,28
0,30	0,60	0,10	9,13	0,135	240	0,90	0,19	0,65	0,60	1,49	0,32	1,09	0,32
0,30	0,50	0,20	10,02	0,151	236	1,03	0,24	0,68	0,66	1,56	0,37	1,04	0,37
0,30	0,40	0,30	10,90	0,167	231	1,09	0,28	0,68	0,72	1,51	0,39	0,94	0,44
0,30	0,30	0,40	11,76	0,183	227	1,09	0,30	0,63	0,79	1,39	0,39	0,80	0,55
0,30	0,20	0,50	12,60	0,200	222	1,03	0,31	0,55	0,85	1,21	0,37	0,64	0,61
0,30	0,10	0,60	13,37	0,219	219	0,90	0,31	0,42	0,93	0,96	0,33	0,45	0,61
0,30	0,00	0,70	14,03	0,241	215	0,61	0,30	0,26	1,03	0,59	0,29	0,25	0,61
0,20	0,80	0,00	6,61	0,097	247	0,50	0,10	0,44	0,46	1,10	0,22	0,97	0,28
0,20	0,70	0,10	7,57	0,111	242	0,80	0,16	0,55	0,50	1,59	0,32	1,09	0,29
0,20	0,60	0,20	8,49	0,126	238	0,95	0,21	0,61	0,56	1,70	0,37	1,10	0,32
0,20	0,50	0,30	9,39	0,141	233	1,03	0,24	0,64	0,61	1,68	0,40	1,04	0,36
0,20	0,40	0,40	10,27	0,157	228	1,05	0,27	0,63	0,67	1,56	0,39	0,93	0,42
0,20	0,30	0,50	11,14	0,173	224	1,03	0,28	0,58	0,74	1,40	0,37	0,79	0,50
0,20	0,20	0,60	12,00	0,189	219	0,95	0,27	0,49	0,80	1,18	0,34	0,61	0,60
0,20	0,10	0,70	12,81	0,207	215	0,80	0,26	0,36	0,87	0,92	0,29	0,42	0,61
0,20	0,00	0,80	13,52	0,228	212	0,50	0,23	0,20	0,97	0,52	0,23	0,20	0,61
0,10	0,90	0,00	4,92	0,076	250	0,33	0,06	0,25	0,38	0,85	0,14	0,65	0,35
0,10	0,80	0,10	5,93	0,088	245	0,64	0,12	0,39	0,42	1,52	0,27	0,93	0,33
0,10	0,70	0,20	6,90	0,102	240	0,80	0,16	0,49	0,46	1,73	0,35	1,05	0,33
0,10	0,60	0,30	7,84	0,116	235	0,90	0,20	0,55	0,52	1,74	0,38	1,07	0,34
0,10	0,50	0,40	8,75	0,131	230	0,94	0,22	0,57	0,57	1,65	0,38	1,01	0,37
0,10	0,40	0,50	9,64	0,147	225	0,94	0,22	0,56	0,63	1,50	0,36	0,89	0,42

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Tabela 4.35 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 6 (Parte II)

Pesos			MRR	Ra	Fc	S(x)	DC	DO	MAPE	S(x)	DC	DO	UPV
w ₁	w ₂	w ₃								MAPE	MAPE	MAPE	
0,10	0,30	0,60	10,52	0,163	221	0,90	0,22	0,51	0,69	1,30	0,32	0,73	0,48
0,10	0,20	0,70	11,38	0,179	216	0,80	0,20	0,41	0,75	1,06	0,27	0,55	0,56
0,10	0,10	0,80	12,22	0,196	212	0,64	0,17	0,28	0,82	0,78	0,21	0,34	0,61
0,10	0,00	0,90	12,95	0,216	208	0,33	0,13	0,11	0,91	0,36	0,14	0,12	0,61
0,00	1,00	0,00	3,02	0,061	254	0,00	0,00	0,00	0,35	0,00	0,00	0,00	0,61
0,00	0,90	0,10	4,20	0,069	247	0,33	0,06	0,17	0,35	0,92	0,16	0,49	0,48
0,00	0,80	0,20	5,25	0,080	242	0,50	0,10	0,31	0,38	1,30	0,27	0,80	0,42
0,00	0,70	0,30	6,23	0,093	237	0,61	0,14	0,41	0,43	1,43	0,32	0,95	0,40
0,00	0,60	0,40	7,18	0,107	232	0,67	0,16	0,46	0,48	1,42	0,33	0,98	0,39
0,00	0,50	0,50	8,10	0,122	227	0,69	0,16	0,48	0,53	1,31	0,31	0,91	0,41
0,00	0,40	0,60	9,00	0,137	223	0,67	0,16	0,46	0,59	1,15	0,27	0,79	0,44
0,00	0,30	0,70	9,88	0,153	218	0,61	0,14	0,41	0,65	0,95	0,21	0,63	0,49
0,00	0,20	0,80	10,75	0,169	214	0,50	0,10	0,31	0,71	0,71	0,15	0,44	0,56
0,00	0,10	0,90	11,60	0,186	209	0,33	0,06	0,17	0,77	0,42	0,08	0,22	0,61
0,00	0,00	1,00	12,26	0,208	206	0,00	0,00	0,00	0,88	0,00	0,00	0,00	0,61
0,33	0,33	0,33	11,68	0,181	229	1,10	0,30	0,66	0,78	1,41	0,38	0,85	0,53
0,67	0,17	0,17	14,65	0,257	235	0,87	0,24	0,50	1,14	0,76	0,21	0,44	0,61
0,17	0,67	0,17	7,66	0,113	240	0,87	0,18	0,56	0,51	1,71	0,35	1,10	0,31
0,17	0,17	0,67	12,08	0,192	217	0,87	0,25	0,43	0,81	1,07	0,30	0,53	0,61

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os dados contidos na Tabela 4.35 correspondem aos pontos Pareto ótimos da otimização das respostas *MRR*, *Ra* e *Fc*. Esse conjunto de pontos forma a fronteira de Pareto para o problema em análise. A Figura 4.44 apresenta graficamente a Fronteira de Pareto obtida.

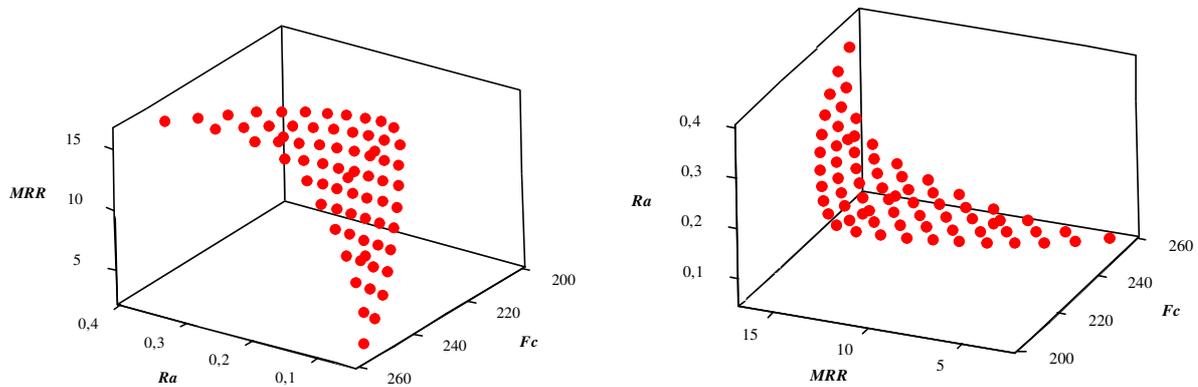


Figura 4.44 – Fronteira de Pareto sob diferentes perspectivas - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como nos casos apresentados anteriormente, o NBI foi capaz de construir uma fronteira de Pareto com pontos uniformemente distribuídos, o que se torna uma vantagem no processo de tomada de decisão por permitir ao decisor avaliar, de maneira mais fácil, o comportamento *trade-off* e como a priorização de uma resposta afeta a outra. Isto não seria possível se houvesse a aglomeração de soluções em algum ponto, gerando uma fronteira

descontínua. Já o arranjo de misturas, ao fornecer uma combinação uniforme dos pesos, favorece a construção da fronteira e a obtenção dos polinômios canônicos de mistura por meio da modelagem das respostas.

Buscando-se visualizar o espaço de solução referente aos pontos Pareto ótimos, apresenta-se a Figura 4.45. Uma vez que a variância da previsão é medida no espaço de solução, ou seja, $UPV = \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$, visualizar como os pontos se distribuem neste espaço é fundamental, pois, pode dar indícios de como a variância se comporta no problema analisado.

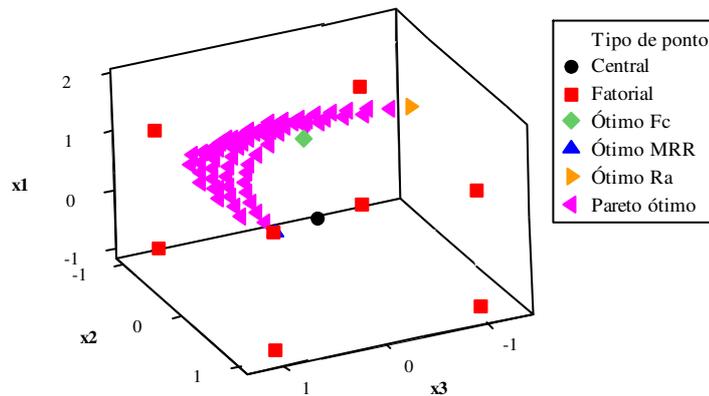


Figura 4.45 – Espaço de solução - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Ao se analisar a Figura 4.45, constata-se que os pontos se deslocam no espaço de solução, à medida que os pesos são alterados no processo de otimização. Isto permitirá, assim como ocorreu nos casos anteriores, a modelagem do polinômio canônico de misturas da UPV em função dos pesos relacionados a cada resposta analisada. É possível perceber que os pontos Pareto ótimos estão distribuídos na extremidade do arranjo experimental, o que já era esperado uma vez que os pontos de ótimo das respostas individuais atingiram a restrição da região esférica. Conforme apresentado no gráfico de dispersão da variância (Figura 2.9), quanto mais se distancia do centro do arranjo experimental, maiores são os valores para variância de previsão, no caso de arranjos com 5 *cp*. Assim, para o problema em análise, são esperados altos valores para a variância de previsão.

Com base nos dados apresentados na Tabela 4.35, foi realizada uma análise de correlação de Pearson entre as métricas de ponderação e a medida de variância, UPV. Assim, a Tabela 4.36 apresenta os resultados da análise de correlação, juntamente, com seus respectivos *p-values*. Assim como foi feito nos casos anteriores, valores de *p-values* menores que 5% indicam correlações estatisticamente significantes.

Tabela 4.36 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 6

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
UPV	Correlação	-0,139	0,255	-0,372	0,718	-0,710	-0,388	-0,817
	<i>p-value</i>	0,251	0,033	0,002	0,000	0,000	0,001	0,000

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Tabela 4.36, percebe-se que a métrica de entropia ($S(x)$) não apresentou correlação estatisticamente significativa com a UPV e a métrica DC apresentou correlação positiva e estatisticamente significativa, de modo que sua maximização, visando aumentar a diversificação, levaria a uma região de maior UPV. Claramente, o fato de que os ótimos individuais das respostas, assim como muitos pontos Pareto ótimos, estão na extremidade do arranjo prejudicou a tendência de redução da variância pelas métricas de diversificação. Já o MAPE apresentou correlação positiva e estatisticamente significativa com UPV, não sendo afetado pelo fato de as soluções estarem na extremidade do arranjo experimental. Dessa forma, as métricas obtidas pela razão entre as medidas de diversificação e a medida de erro apresentaram correlações negativas e estatisticamente significativas, conforme desejável no intuito de maximizar a diversificação, reduzindo a variância de previsão.

O Passo 7 engloba a modelagem das métricas de ponderação, a partir dos dados apresentados na Tabela 4.35. Assim, seus polinômios canônicos de mistura, com seus respectivos superfícies de resposta e *contour plot* são:

$$\begin{aligned}
 S(x) = & -0,0074w_1 - 0,0074w_2 - 0,0074w_3 + 2,7705w_1w_2 + 2,7705w_1w_3 + \\
 & 2,7705w_2w_3 + 5,4207w_1w_1w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_3w_3 + \\
 & 1,4619w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 1,4619w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 1,4619w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned} \quad (4.41)$$

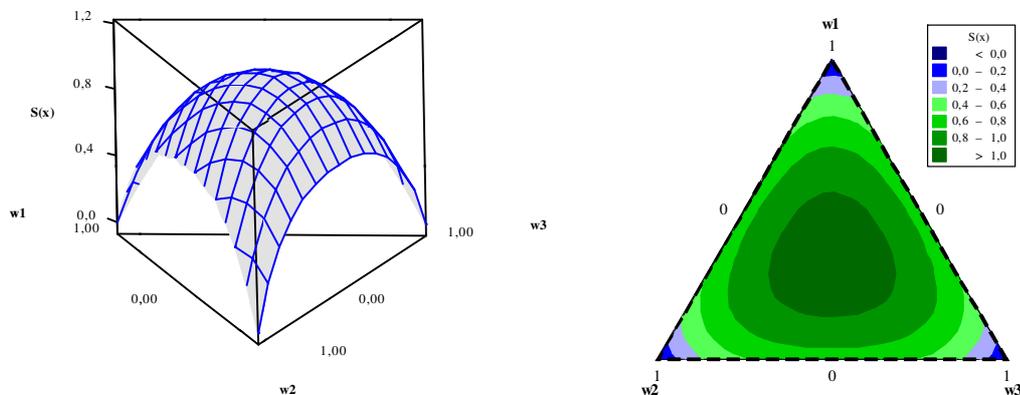


Figura 4.46 – Superfície de resposta e *Contour plot* para $S(x)$ - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\text{DC} = 0,617w_1w_2 + 1,410w_1w_3 + 0,648w_2w_3 \quad (4.42)$$

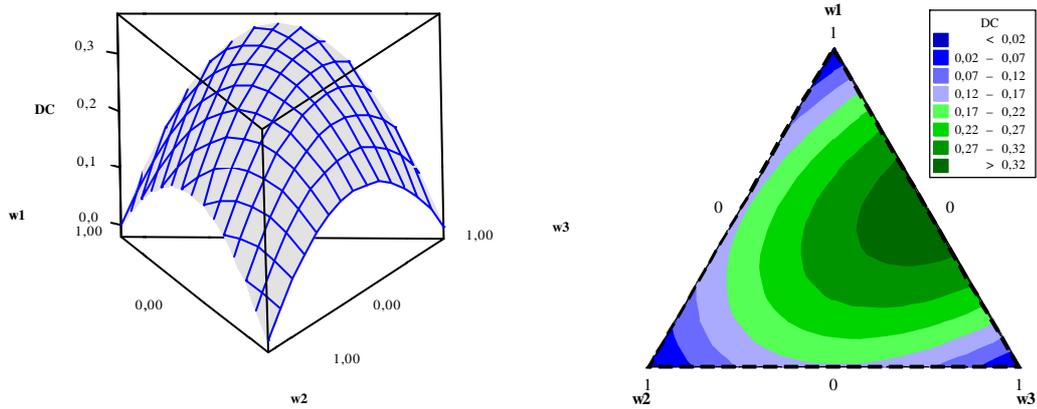


Figura 4.47 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DC - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$DO = 2,777w_1w_2 + 1,236w_1w_3 + 1,931w_2w_3 \tag{4.43}$$

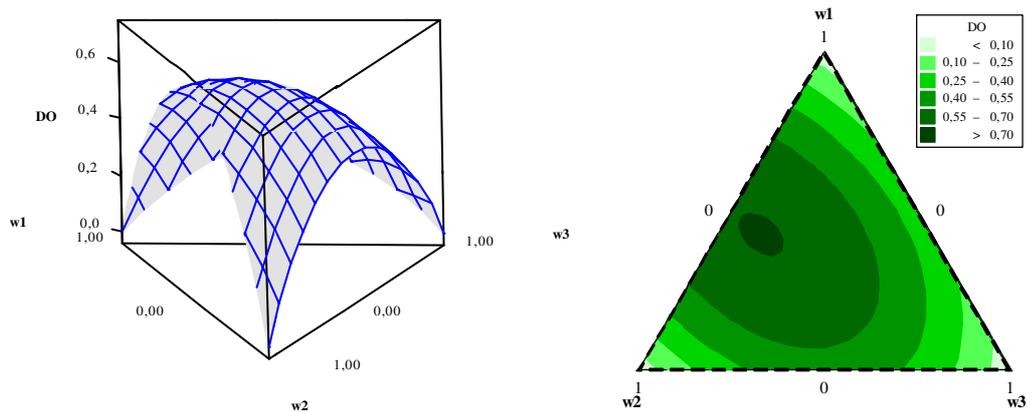


Figura 4.48 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DO - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned} MAPE = & 1,800w_1 + 0,346w_2 + 0,870w_3 - 1,282w_1w_2 - 0,567w_1w_3 - \\ & 0,310w_2w_3 - 0,555w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,050w_1w_3(w_1 - w_3) - \\ & 0,056w_2w_3(w_2 - w_3) - 0,527w_1w_1w_2w_3 + 1,573w_1w_2w_2w_3 - \\ & 0,465w_1w_2(w_1 - w_2)^2 - 0,046w_1w_3(w_1 - w_3)^2 - 0,234w_2w_3(w_2 - w_3)^2 \end{aligned} \tag{4.44}$$

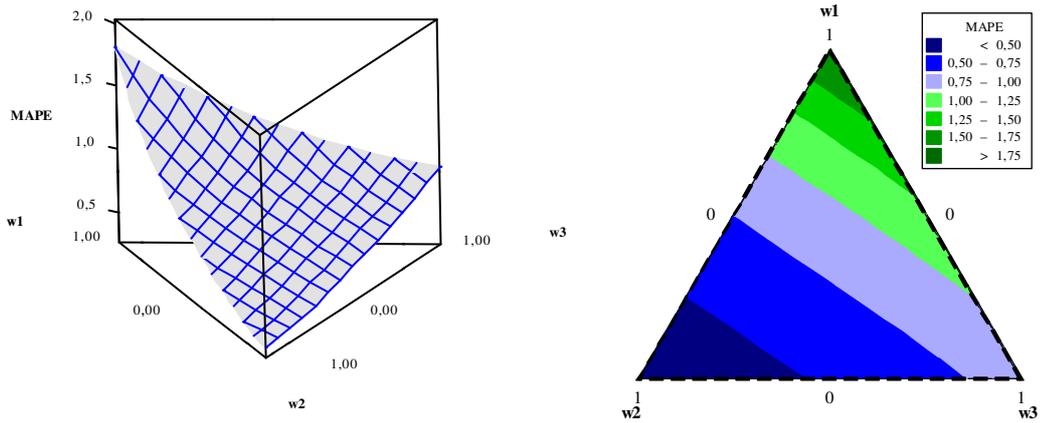


Figura 4.49 – Superfície de resposta e *Contour plot* para MAPE - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 S(x)/MAPE = & -0,052w_1 + 0,034w_2 - 0,013w_3 + 3,663w_1w_2 + 2,437w_1w_3 + \\
 & 5,145w_2w_3 - 3,213w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,802w_1w_3(w_1 - w_3) + \\
 & 2,981w_2w_3(w_2 - w_3) + 6,824w_1w_2w_3 + 8,562w_1w_2w_3 + \\
 & 3,635w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 1,475w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 3,505w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.45}$$

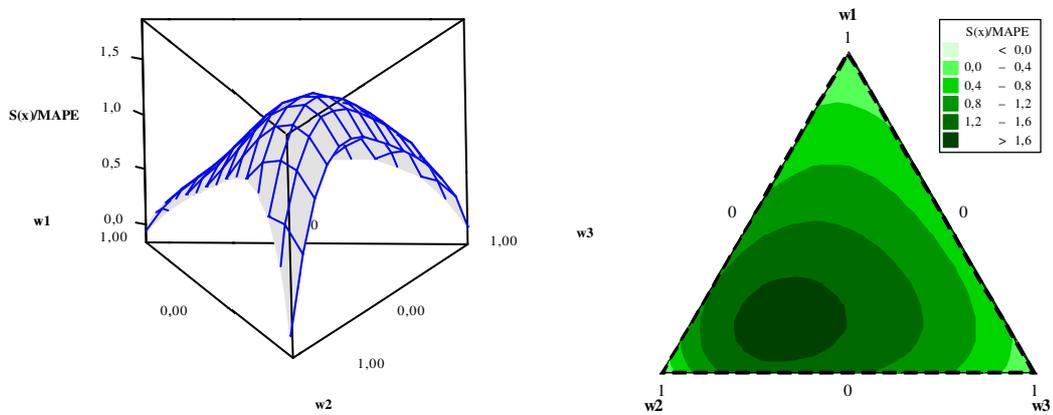


Figura 4.50 – Superfície de resposta e *Contour plot* para $S(x)/MAPE$ - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 DC/MAPE = & -0,0017w_1 + 0,0014w_2 - 0,0004w_3 + 0,8162w_1w_2 + 1,1867w_1w_3 + \\
 & 1,2235w_2w_3 - 0,6797w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,4412w_1w_3(w_1 - w_3) + \\
 & 0,6334w_2w_3(w_2 - w_3) + 0,5786w_1w_2w_3 + 1,3107w_1w_2w_3 + \\
 & 0,3107w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 0,0327w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 0,1985w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.46}$$

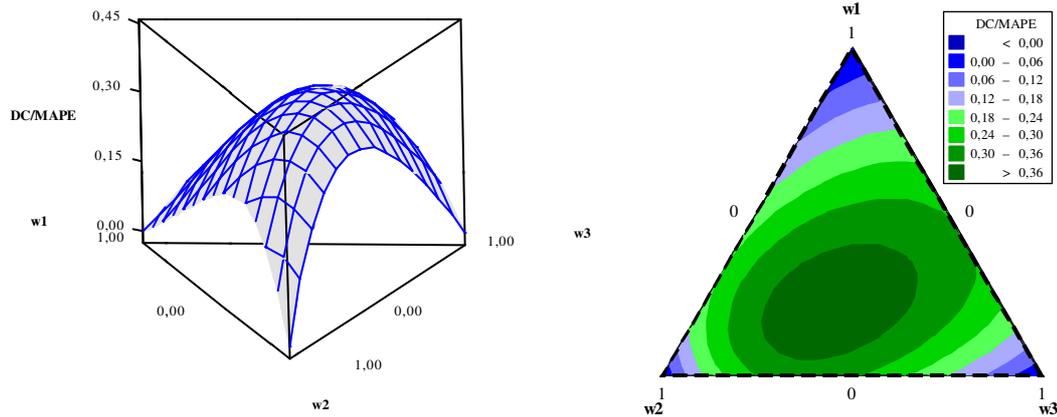


Figura 4.51 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DC/MAPE - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 DO/MAPE = & -0,002w_1 + 0,007w_2 + 3,672w_1w_2 + 1,033w_1w_3 + 3,647w_2w_3 - \\
 & 3,101w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,416w_1w_3(w_1 - w_3) + 1,883w_2w_3(w_2 - w_3) - \\
 & 6,183w_1w_2w_3 - 0,657w_1w_2w_3w_3 + 1,308w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + \\
 & 0,551w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.47}$$

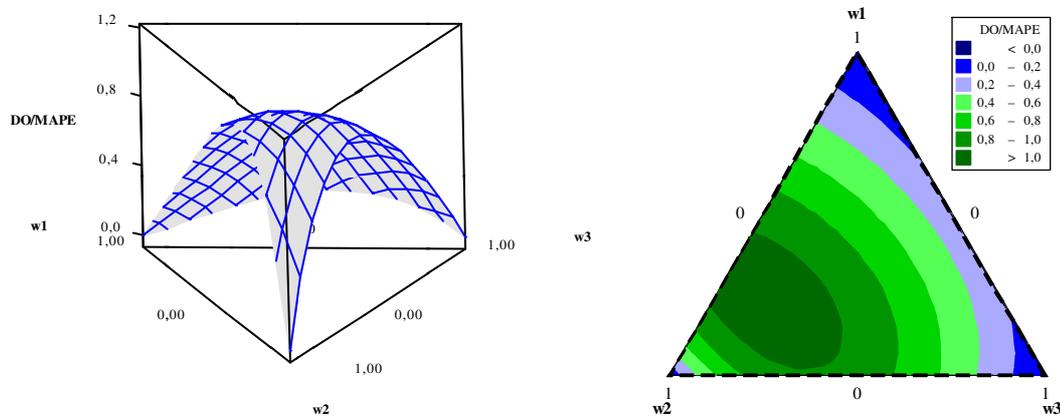


Figura 4.52 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DO/MAPE - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 UPV = & 0,598w_1 + 0,614w_2 + 0,611w_3 - 0,505w_1w_2 - 0,860w_2w_3 + \\
 & 1,943w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,670w_2w_3(w_2 - w_3) + 2,636w_1w_2w_3 + \\
 & 2,427w_1w_2w_3w_3 - 1,536w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 0,337w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.48}$$

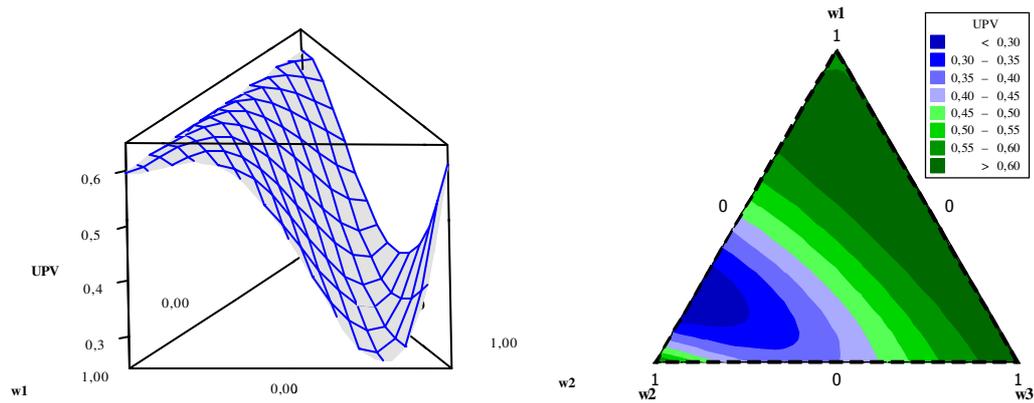


Figura 4.53 – Superfície de resposta e *Contour plot* para UPV - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como ocorreu nos casos anteriores, todos os polinômios canônicos de mistura tiveram ótimo ajuste, uma vez que todos possuem R^2 ajustado próximo de 100%. Além disso, a UPV foi modelada em função dos pesos, provando que a variância de previsão depende dos pesos atribuídos às funções durante o processo de otimização multiobjetivo, mesmo para o presente caso que apresenta os pontos de ótimo das funções na extremidade do arranjo experimental, algo que não é desejável em modelos de superfície de resposta.

Por fim, executa-se o Passo 8, que consiste na determinação dos pesos a serem utilizados para a escolha do ponto Pareto ótimo preferido. A maximização das métricas de diversificação, assim como a minimização da métrica de erro, são executadas, utilizando para isso o algoritmo GRG. Esse processo executado para cada métrica gera um vetor de pesos ótimos a serem utilizados no problema de otimização original, implementado pelo NBI, gerando uma resposta ótima diferente, permitindo sua comparação. A Tabela 4.37 apresenta um resumo dos resultados obtidos.

Tabela 4.37 – Resumo dos resultados - Caso 6

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
Pesos	w_1	0,333	0,500	0,428	0,000	0,153	0,207	0,230
	w_2	0,333	0,000	0,457	0,976	0,600	0,455	0,631
	w_3	0,333	0,500	0,115	0,024	0,247	0,338	0,140
Variáveis	x_1	1,364	1,327	1,269	0,933	1,300	1,363	1,250
	x_2	-0,219	0,435	-0,267	-0,561	-0,352	-0,280	-0,361
	x_3	0,826	0,938	0,828	-1,260	-0,014	0,358	0,098
Respostas	MRR	11,678	14,914	11,194	3,331	8,181	9,829	8,401
	Ra	0,181	0,272	0,171	0,062	0,121	0,149	0,124
	Fc	229,283	223,045	237,582	251,983	236,236	231,043	239,798
UPV		0,528	0,607	0,461	0,588	0,326	0,382	0,305

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base nos resultados apresentados na Tabela 4.37, as razões entre as métricas de diversificação e a métrica de erro tiveram o melhor desempenho em definir o ponto Pareto ótimo preferido com menor variância de previsão. Isto já era esperado devido aos valores de correlação negativa entre essas métricas e a UPV, conforme apresentado na Tabela 4.36. Entretanto, a métrica de erro, MAPE, que havia apresentado valor de correlação positivo com a UPV, não obteve boa performance. Isto se deve ao fato de que esta métrica, ao ser minimizada, praticamente alocou todo o peso em somente uma resposta, Ra . Dessa forma, o ponto Pareto ótimo escolhido se aproximou muito da extremidade do arranjo experimental, região esta com alto valor de UPV. Uma vez que a amplitude da UPV para o presente problema foi de 0,279 a 0,607, considera-se que as razões entre as métricas de diversificação e a métrica de erro, conseguiram conduzir as respostas para uma região de mínima variância. A Figura 4.54 apresenta os resultados obtidos com a utilização de $S(x)/MAPE$ e de $DO/MAPE$ diretamente na fronteira Pareto ótima.

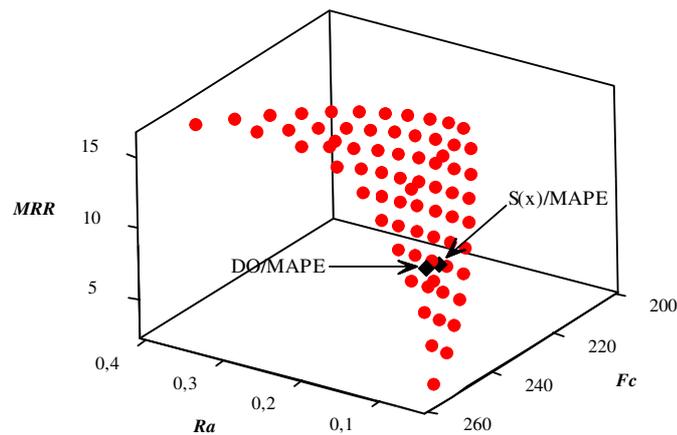


Figura 4.54 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 6.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Como discutido anteriormente, o fato de os pontos ótimos das respostas otimizadas no presente caso estarem na extremidade do arranjo experimental, faz com que as respostas Pareto ótimas apresentem um aumento considerável na variância de previsão. Mesmo assim, o uso das métricas $S(x)/MAPE$ e $DO/MAPE$ gerou um vetor de pesos que levou as respostas a uma região de mínima variância para o problema em análise, sendo que a razão $DO/MAPE$ foi a que obteve o melhor resultado. Apesar de a fronteira de Pareto estar localizada em uma região de maiores valores de variância de previsão, foi possível, assim como no caso anterior, modelar a UPV em função dos pesos, comprovando que os pesos utilizados no processo de

otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida, mesmo para o caso em que as respostas não apresentaram seu ponto estacionário dentro do arranjo experimental.

Por fim, com o objetivo de visualizar o impacto da variância de previsão nas respostas obtidas, gera-se o intervalo de confiança para cada resposta, considerando as métricas com melhor performance em reduzir a variância, $S(x)/MAPE$ e $DO/MAPE$, além de DO , que foi a métrica de diversificação com melhor performance neste caso, e a métrica de erro, $MAPE$. Uma vez que o presente caso apresenta um problema real, em que as respostas apresentam interpretação física, essa análise se torna relevante.

O intervalo de confiança é o intervalo de valores que contém a média da população, com certa probabilidade, sendo válido para uma confiança de $100(1 - \alpha)\%$. Para o cálculo do intervalo de confiança, a Equação 2.72 será utilizada. A Tabela 4.38 apresenta os intervalos de confiança associados aos pontos ótimos alcançados com cada métrica, considerando-se $\alpha = 5\%$, além do coeficiente de variação (CV) para cada resposta obtida.

Tabela 4.38 – Intervalos de confiança - Caso 6

<i>MRR</i>	Limite Inferior	Média	Limite Superior	Desvio-padrão	CV
DO	10,683	11,194	11,704	0,226	0,020
MAPE	2,755	3,331	3,908	0,255	0,077
$S(x)/MAPE$	7,751	8,181	8,610	0,190	0,023
$DO/MAPE$	7,986	8,401	8,815	0,183	0,022
<i>Ra</i>	Limite Inferior	Média	Limite Superior	Desvio-padrão	CV
DO	0,109	0,170847	0,233027	0,027	0,161
MAPE	0,000	0,06239	0,132624	0,031	0,498
$S(x)/MAPE$	0,069	0,121156	0,173473	0,023	0,191
$DO/MAPE$	0,073	0,123879	0,174424	0,022	0,180
<i>Fc</i>	Limite Inferior	Média	Limite Superior	Desvio-padrão	CV
DO	211,680	237,582	263,485	11,450	0,048
MAPE	222,725	251,983	281,241	12,934	0,051
$S(x)/MAPE$	214,442	236,236	258,030	9,634	0,041
$DO/MAPE$	218,742	239,798	260,854	9,308	0,039

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base nos intervalos de confiança para cada resposta, percebe-se que os valores obtidos com a métrica $DO/MAPE$ são os menores, logo apresentam menor variabilidade e maior confiabilidade para o caso analisado. Com relação ao CV, percebe-se que a métrica com maiores valores para cada resposta foi o $MAPE$, o que já era esperado, pois, esta métrica

gerou um ponto Pareto ótimo em uma região com alto valor para a variância de previsão. Ainda com relação ao CV, a resposta *Ra* apresentou os maiores valores, sendo, por isso, considerada a resposta mais difícil de se controlar para o problema em análise.

4.7 – CASO 7

Para a análise do sétimo caso, o método proposto neste trabalho foi empregado para otimizar um processo de acoplamento oxidativo do metano, a partir do gás natural de baixo valor de mercado. Na composição do gás natural, pode ser encontrada uma mistura de vários hidrocarbonetos, tais como, metano (CH_4), etano (C_2H_6), propano (C_3H_8), butano (C_4H_{10}) e diluentes inertes, tais como o dióxido de carbono (CO_2) (FARZANEH-GORD *et al.*, 2015). Entre as grandes reservas de gás natural disponíveis pelo mundo, existem quantidades significativas de gás natural de baixo valor de mercado, contendo altas concentrações de dióxido de carbono. Devido à dificuldade de transporte desse tipo de produto, 11% do gás é reinjetado e outros 4% são queimados ou liberados na atmosfera, o que se configura um desperdício de uma fonte de hidrocarbonetos (ESCHE *et al.*, 2015).

Segundo Istadi e Amin (2006), a alta razão dióxido de carbono/metano (CO_2/CH_4) existente no gás natural de baixo valor deveria ser estrategicamente utilizado para a produção de químicos com alto valor agregado, tais como hidrocarbonetos de maiores moléculas e combustíveis líquidos, sem ter de separar o dióxido de carbono primeiro. Assim, a rota direta que converte o metano em hidrocarbonetos de maior molécula em um passo por reações de acoplamento oxidativo do metano, por ser mais economicamente atrativa, tem sido intensivamente estudada (SHAHHOSSEINI *et al.*, 2016).

Embora a reação de acoplamento oxidativo do metano seja uma reação altamente exotérmica, esta requer uma temperatura elevada e um catalisador adequado. Nesse contexto, Istadi e Amin (2005) e Istadi e Amin (2006) propuseram utilizar catalisadores à base de óxido de cério (CeO_2) misturados com óxido de cálcio (CaO) e óxido de manganês (MnO) na otimização multiobjetivo do processo de acoplamento oxidativo do metano por dióxido de carbono. De acordo com esses autores, os parâmetros ótimos de operação, tais como razão CO_2/CH_4 , temperatura do reator e a composição do catalisador à base de CeO_2 fornecem informação essencial para o processo industrial de acoplamento oxidativo do metano por dióxido de carbono.

Assim, para o presente caso, são consideradas como respostas a porcentagem de conversão do metano, a porcentagem de seletividade do hidrocarboneto e a porcentagem de produtividade do hidrocarboneto. As variáveis de decisão são razão CO_2/CH_4 , temperatura do

reator, porcentagem de CaO no catalisador à base de CeO₂ e porcentagem de MnO no catalisador à base de CeO₂. Os catalisadores foram preparados pelo método de impregnação convencional, como descrito por Istadi e Amin (2006). A porcentagem de conversão do metano, a porcentagem de seletividade do hidrocarboneto e a porcentagem de produtividade do hidrocarboneto são expressas como carbono no metano, como definido por Wang *et al.* (1999).

Com o intuito de maximizar as respostas analisadas, um conjunto sequencial de experimentos foi estabelecido usando um CCD, construído de acordo com o design de superfície de resposta 2⁴, com 8 pontos axiais e 2 pontos centrais, gerando 26 experimentos. A Tabela 4.39 apresenta o CCD para este processo, no qual x_1 representa a razão CO₂/CH₄, x_2 a temperatura do reator, x_3 a porcentagem de CaO no catalisador, x_4 a porcentagem de MnO no catalisador, y_1 a porcentagem de conversão do metano, y_2 a porcentagem de seletividade do hidrocarboneto e y_3 representa a porcentagem de produtividade do hidrocarboneto. Ainda, segundo Istadi e Amin (2005), as condições experimentais fixas são: peso do catalisador igual a 2g; fluxo de alimentação total igual a 100 ml/minuto; e pressão total igual a 1 atm.

Tabela 4.39 – CCD para y_1 , y_2 e y_3 - Caso 7

N	x_1	x_2	x_3	x_4	y_1	y_2	y_3
1	-1	-1	-1	-1	2.63	69.01	1.82
2	+1	-1	-1	-1	2.68	60.20	1.61
3	-1	+1	-1	-1	7.95	32.71	2.60
4	+1	+1	-1	-1	9.74	18.73	1.82
5	-1	-1	+1	-1	1.76	24.62	0.43
6	+1	-1	+1	-1	2.92	55.95	1.63
7	-1	+1	+1	-1	9.92	27.84	2.76
8	+1	+1	+1	-1	13.41	16.21	2.17
9	-1	-1	-1	+1	2.20	78.15	1.72
10	+1	-1	-1	+1	2.29	78.37	1.80
11	-1	+1	-1	+1	7.80	35.98	2.81
12	+1	+1	-1	+1	8.70	33.12	2.88
13	-1	-1	+1	+1	1.25	42.64	0.53
14	+1	-1	+1	+1	1.55	64.79	1.00
15	-1	+1	+1	+1	9.03	34.62	3.13
16	+1	+1	+1	+1	10.89	30.78	3.35
17	-2	0	0	0	2.27	70.51	1.60
18	+2	0	0	0	2.47	65.18	1.61
19	0	-2	0	0	0.54	24.30	0.13
20	0	+2	0	0	16.59	14.32	2.38
21	0	0	-2	0	4.33	74.63	3.23
22	0	0	+2	0	3.70	66.30	2.45
23	0	0	0	-2	4.71	74.07	3.49
24	0	0	0	+2	4.53	75.24	3.41
25	0	0	0	0	4.81	72.58	3.49
26	0	0	0	0	5.06	75.64	3.83

Fonte: Istadi e Amin (2006).

As variáveis de decisão foram analisadas de forma codificada (*coded*), com o intuito de reduzir a variância. Para esta finalidade, a Equação 2.56 foi utilizada. Adotando essas condições experimentais, os experimentos foram realizados usando os parâmetros definidos na Tabela 4.40.

Tabela 4.40 – Fatores e respectivos níveis - Caso 7

Fatores	Símbolo	Níveis				
		-2	-1	0	1	2
Razão CO ₂ /CH ₄	x_1	1	1.5	2	2.5	3
Temperatura do reator (°K)	x_2	973	1048	1123	1198	1273
CaO (%)	x_3	5	10	15	20	25
MnO (%)	x_4	1	3	5	7	9

Fonte: Istadi e Amin (2006).

Segundo Myers *et al.* (2009), o uso de 2 *cp* não é recomendável por não garantir uma boa dispersão da variância de previsão por toda a região experimental. Já o uso de $\alpha = \sqrt[4]{2^k}$ garante a rotacionalidade. Um arranjo rotacionável é aquele para o qual a variância de previsão tem o mesmo valor em qualquer dois pontos que estão à mesma distância do centro do arranjo, ou seja, a variância de previsão é constante em esferas.

A análise dos dados experimentais, correspondentes ao Passo 1, geram a modelagem matemática apresentada na Tabela 4.41, modelagem esta que equivale ao Passo 2 do método proposto.

Tabela 4.41 – Modelos matemáticos para as funções objetivo - Caso 7

Termos	y_1	y_2	y_3
Constante	4,9350	74,1100	3,6600
x_1	0,4183	0,0800	0,0200
x_2	3,8442	-10,9875	0,6450
x_3	0,2283	-5,2283	-0,1508
x_4	-0,3192	3,9800	0,0925
$x_1 x_1$	-0,4700	-3,9140	-0,5610
$x_2 x_2$	1,0788	-16,0477	-0,6485
$x_3 x_3$	-0,0588	-3,2590	-0,2523
$x_4 x_4$	0,0925	-2,2115	-0,0998
$x_1 x_2$	0,4025	-4,8250	-0,1638
$x_1 x_3$	0,2488	3,9650	0,1338
$x_1 x_4$	-0,2088	1,1725	0,0763
$x_2 x_3$	0,7113	5,4150	0,2913
$x_2 x_4$	-0,1188	-0,9475	0,2038
$x_3 x_4$	-0,2050	0,2025	-0,0212
p-value	0,000	0,030	0,000
R^2 (%)	97,47%	80,29%	94,82%
R^2 ajustado (%)	94,24%	55,21%	88,22%

Valores em negrito representam termos significantes nos modelos ($p\text{-value} < 5\%$).

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

A adequação dos modelos foi analisada pela ANOVA. Os p -values para as funções objetivo em análise mostram uma regressão estatisticamente significativa ao nível de significância de 5%, provando a adequação das funções. Os valores de R^2 mostram que os modelos têm um bom ajuste. Entretanto, quando se analisa o R^2 ajustado, a resposta y_2 , referente à porcentagem de seletividade do hidrocarboneto, apresenta um valor baixo (55,21%). Isto mostra que a inclusão de algumas variáveis não favoreceram o ajuste do modelo. Mesmo assim, para efeito de comparação, se optou por manter todas as variáveis no modelo.

Com o intuito de comparar como cada variável de decisão afeta cada resposta, os gráficos de efeito principal para as três respostas em análise são mostrados na Figura 4.55.

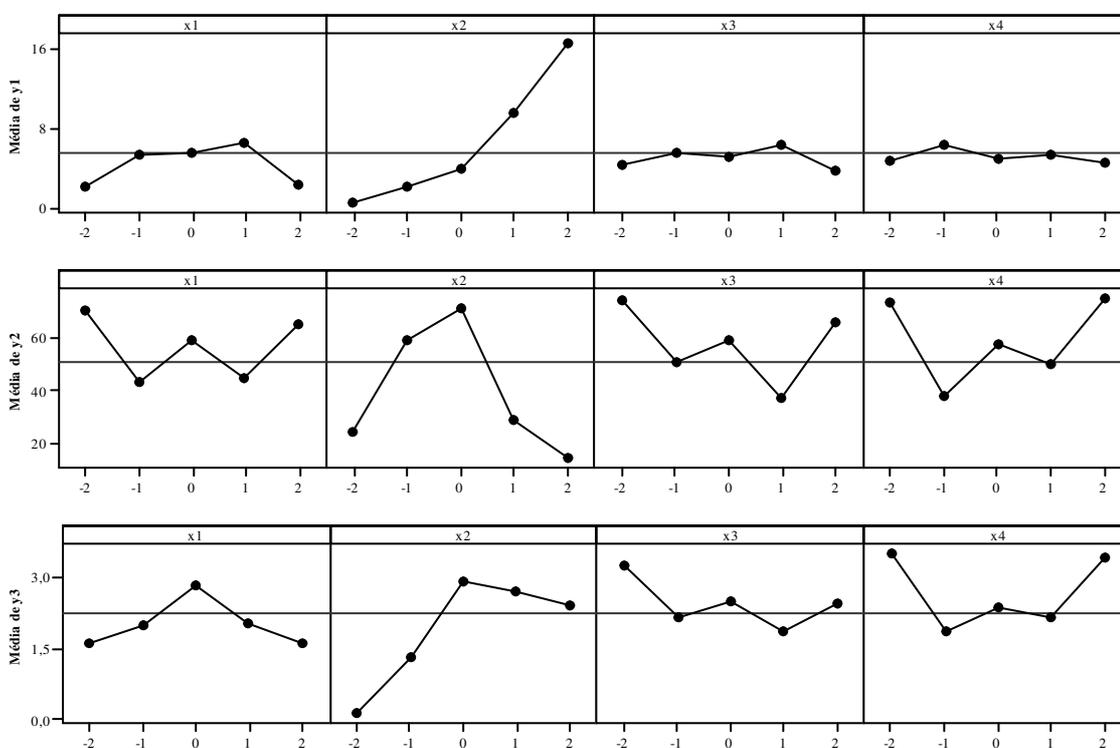


Figura 4.55 – Gráficos de efeito principal - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

De acordo com esta análise, a temperatura do reator (x_2) é o fator mais significativo no aumento da conversão de CH_4 (y_1). Porém, ao aumentar a temperatura do reator a um valor superior a 1123°K, há uma diminuição da seletividade (y_2) e da produtividade (y_3). Assim, com o objetivo de aumentar y_1 , se estaria reduzindo y_2 e y_3 , o que mostra a natureza conflitante dos objetivos.

Visando checar a convexidade das funções, pode-se analisar a natureza do ponto estacionário usando a Equação 2.12. Para y_1 os autovalores são [1.2205; -0.5222; -0,1821; 0.1263], para y_2 os autovalores são [-17.1859; -4.6067; -2.3090; -1.3305] e para y_3 os autovalores são [-0.7656; -0.5133; -0.2047; -0.0781]. Os diferentes sinais dos autovalores de y_1 indicam que a função não é nem côncava nem convexa e seu ponto estacionário é um ponto de sela. Os sinais negativos dos autovalores de y_2 e y_3 indicam que as funções são côncavas e seus respectivos pontos estacionários são pontos de máximo. Novamente, as diferentes convexidades das funções objetivo justificam o uso do NBI. A Figura 4.56 apresenta a superfície de resposta para os modelos gerados.

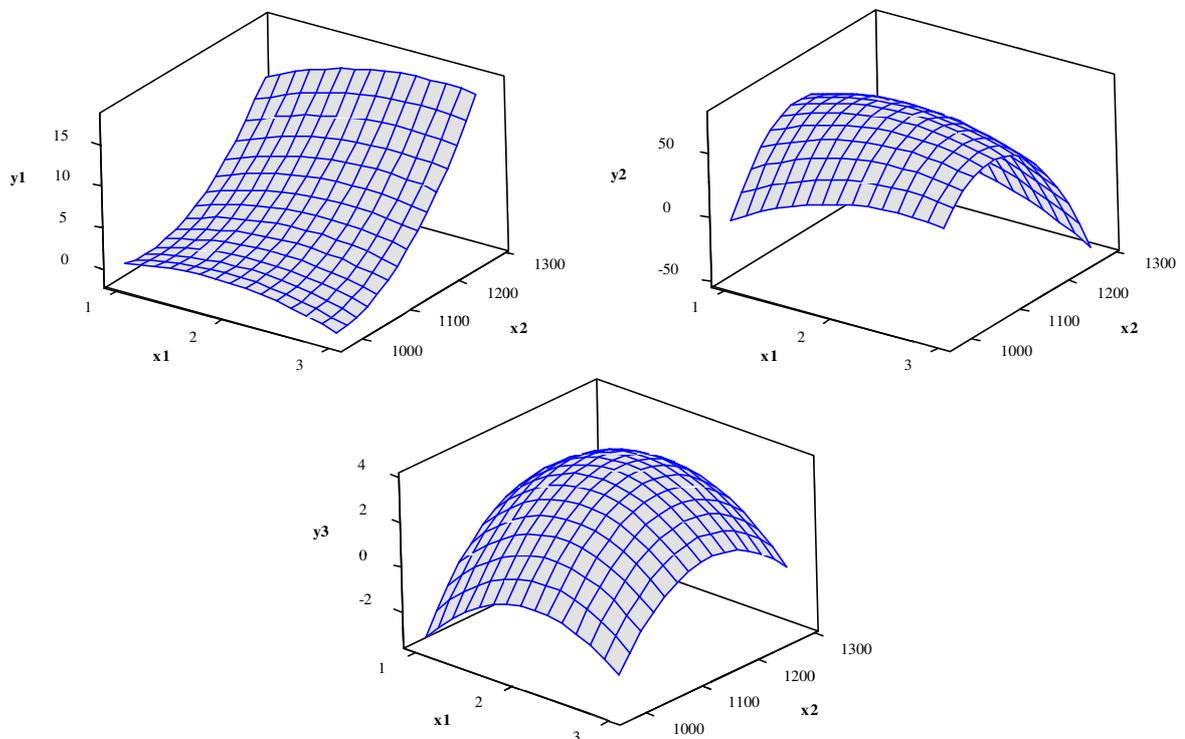


Figura 4.56 – Superfícies de resposta (para $x_3 = 15$, $x_4 = 5$) - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Para implementar o NBI, que equivale ao Passo 3 da presente proposta, a matriz *payoff* foi inicialmente estimada, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 4.42. O ponto de ótimo da função de conversão de CH_4 (y_1) não está dentro da região experimental, e os pontos de ótimo das funções de seletividade (y_2) e produtividade (y_3) situam-se dentro da região experimental. Isto pode ser provado se observar que o valor do multiplicador de Lagrange associado à restrição da região esférica, $\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \alpha^2$, é diferente de zero, ao se otimizar individualmente y_1 , sendo igual a zero no caso das outras duas funções.

Tabela 4.42 – Matriz *payoff* para as funções objetivo - Caso 7

y_1	y_2	y_3
17,12	0,00	2,62
3,38	82,61	2,94
7,79	59,63	3,93

Valores em negrito representam ótimos individuais.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Uma vez implementado o NBI, um arranjo de misturas para os pesos de cada função objetivo (Passo 4) foi definido. Subsequentemente, a solução de otimização do NBI foi obtido para cada condição experimental definida pelo arranjo de misturas (Passo 5). Baseado nesses resultados, procedeu-se, então, ao cálculo das métricas a serem utilizadas para a definição dos pesos ótimos e escolha do ponto Pareto ótimo preferido (Passo 6). Os resultados são apresentados na Tabela 4.43, que apresenta um arranjo *simplex lattice* de grau 10.

Tabela 4.43 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 7 (Parte I)

Pesos			y_1	y_2	y_3	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$	UPV
w_1	w_2	w_3								MAPE	MAPE	MAPE	
1,00	0,00	0,00	17,12	0,00	2,62	0,00	0,00	0,00	0,44	0,00	0,00	0,00	0,58
0,90	0,10	0,00	16,17	10,21	2,69	0,33	0,15	0,31	0,42	0,78	0,36	0,74	0,58
0,90	0,00	0,10	16,49	7,38	2,78	0,33	0,05	0,18	0,41	0,79	0,11	0,43	0,58
0,80	0,20	0,00	14,99	19,38	2,75	0,50	0,26	0,55	0,40	1,26	0,66	1,38	0,58
0,80	0,10	0,10	15,40	16,94	2,84	0,64	0,18	0,45	0,39	1,64	0,46	1,15	0,58
0,80	0,00	0,20	15,73	14,12	2,93	0,50	0,08	0,31	0,39	1,29	0,21	0,80	0,58
0,70	0,30	0,00	13,68	27,92	2,79	0,61	0,34	0,72	0,38	1,59	0,90	1,87	0,58
0,70	0,20	0,10	14,14	25,68	2,89	0,80	0,28	0,65	0,38	2,13	0,75	1,74	0,58
0,70	0,10	0,20	14,53	23,16	2,98	0,80	0,20	0,55	0,37	2,16	0,55	1,49	0,58
0,70	0,00	0,30	14,86	20,34	3,07	0,61	0,11	0,41	0,37	1,66	0,29	1,11	0,58
0,60	0,40	0,00	12,25	35,91	2,81	0,67	0,39	0,82	0,38	1,78	1,04	2,17	0,58
0,60	0,30	0,10	12,72	33,78	2,91	0,90	0,35	0,79	0,37	2,43	0,95	2,14	0,58
0,60	0,20	0,20	13,16	31,47	3,01	0,95	0,29	0,72	0,36	2,63	0,80	2,00	0,54
0,60	0,10	0,30	13,56	28,96	3,11	0,90	0,22	0,61	0,36	2,52	0,61	1,73	0,51
0,60	0,00	0,40	13,90	26,22	3,20	0,67	0,12	0,47	0,35	1,91	0,35	1,33	0,50
0,50	0,50	0,00	10,70	43,38	2,83	0,69	0,41	0,86	0,38	1,84	1,09	2,27	0,52
0,50	0,40	0,10	11,21	41,40	2,93	0,94	0,39	0,86	0,37	2,58	1,05	2,35	0,48
0,50	0,30	0,20	11,70	39,32	3,04	1,03	0,35	0,82	0,36	2,89	0,97	2,31	0,45
0,50	0,20	0,30	12,16	37,10	3,14	1,03	0,29	0,75	0,35	2,96	0,83	2,16	0,42
0,50	0,10	0,40	12,57	34,68	3,23	0,94	0,22	0,64	0,34	2,76	0,64	1,87	0,40
0,50	0,00	0,50	12,94	32,01	3,32	0,69	0,13	0,49	0,34	2,06	0,38	1,45	0,40
0,40	0,60	0,00	9,10	50,60	2,84	0,67	0,39	0,82	0,38	1,78	1,04	2,17	0,42
0,40	0,50	0,10	9,64	48,77	2,95	0,94	0,39	0,86	0,37	2,58	1,06	2,35	0,40
0,40	0,40	0,20	10,17	46,85	3,05	1,05	0,37	0,86	0,35	2,98	1,04	2,42	0,38
0,40	0,30	0,30	10,67	44,84	3,16	1,09	0,33	0,82	0,34	3,17	0,96	2,38	0,36
0,40	0,20	0,40	11,15	42,69	3,26	1,05	0,28	0,74	0,33	3,15	0,83	2,21	0,35
0,40	0,10	0,50	11,58	40,35	3,36	0,94	0,21	0,62	0,33	2,88	0,64	1,91	0,34
0,40	0,00	0,60	11,96	37,76	3,45	0,67	0,12	0,47	0,32	2,09	0,39	1,45	0,34
0,30	0,70	0,00	7,46	57,67	2,84	0,61	0,34	0,72	0,38	1,60	0,91	1,89	0,36
0,30	0,60	0,10	8,03	55,94	2,95	0,90	0,36	0,79	0,37	2,44	0,98	2,15	0,34
0,30	0,50	0,20	8,58	54,15	3,06	1,03	0,36	0,82	0,35	2,90	1,00	2,32	0,33
0,30	0,40	0,30	9,12	52,28	3,17	1,09	0,34	0,82	0,34	3,18	0,99	2,39	0,32
0,30	0,30	0,40	9,64	50,33	3,28	1,09	0,30	0,77	0,33	3,29	0,92	2,33	0,32
0,30	0,20	0,50	10,13	48,25	3,38	1,03	0,25	0,69	0,32	3,20	0,79	2,15	0,31
0,30	0,10	0,60	10,58	45,99	3,48	0,90	0,19	0,57	0,31	2,87	0,61	1,82	0,31

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Tabela 4.43 – Arranjo de misturas e cálculos das métricas - Caso 7 (Parte II)

Pesos			y ₁	y ₂	y ₃	S(x)	DC	DO	MAPE	S(x)	DC	DO	UPV
w ₁	w ₂	w ₃								MAPE	MAPE	MAPE	
0,30	0,00	0,70	10,97	43,46	3,58	0,61	0,11	0,41	0,31	1,98	0,35	1,33	0,31
0,20	0,80	0,00	5,82	64,68	2,85	0,50	0,26	0,55	0,38	1,30	0,68	1,43	0,32
0,20	0,70	0,10	6,40	63,01	2,96	0,80	0,30	0,65	0,37	2,17	0,80	1,76	0,32
0,20	0,60	0,20	6,97	61,30	3,07	0,95	0,31	0,72	0,36	2,66	0,88	2,02	0,31
0,20	0,50	0,30	7,53	59,54	3,18	1,03	0,31	0,75	0,34	3,00	0,91	2,18	0,31
0,20	0,40	0,40	8,07	57,72	3,29	1,05	0,30	0,74	0,33	3,19	0,90	2,23	0,31
0,20	0,30	0,50	8,60	55,82	3,40	1,03	0,27	0,69	0,32	3,23	0,84	2,16	0,31
0,20	0,20	0,60	9,10	53,80	3,51	0,95	0,22	0,60	0,31	3,08	0,72	1,95	0,32
0,20	0,10	0,70	9,57	51,60	3,61	0,80	0,16	0,48	0,30	2,67	0,54	1,59	0,32
0,20	0,00	0,80	9,97	49,11	3,70	0,50	0,08	0,31	0,29	1,70	0,28	1,06	0,32
0,10	0,90	0,00	4,19	71,78	2,86	0,33	0,15	0,31	0,39	0,84	0,38	0,80	0,31
0,10	0,80	0,10	4,77	70,11	2,97	0,64	0,20	0,45	0,37	1,71	0,54	1,20	0,31
0,10	0,70	0,20	5,34	68,43	3,08	0,80	0,24	0,55	0,36	2,24	0,66	1,53	0,31
0,10	0,60	0,30	5,92	66,73	3,19	0,90	0,26	0,61	0,34	2,60	0,74	1,77	0,32
0,10	0,50	0,40	6,48	64,99	3,30	0,94	0,26	0,63	0,33	2,84	0,79	1,91	0,33
0,10	0,40	0,50	7,03	63,20	3,41	0,94	0,25	0,62	0,32	2,96	0,78	1,94	0,34
0,10	0,30	0,60	7,57	61,33	3,52	0,90	0,22	0,57	0,31	2,93	0,72	1,85	0,35
0,10	0,20	0,70	8,08	59,36	3,63	0,80	0,18	0,47	0,30	2,71	0,61	1,61	0,36
0,10	0,10	0,80	8,55	57,20	3,73	0,64	0,12	0,34	0,29	2,23	0,42	1,20	0,36
0,10	0,00	0,90	8,95	54,68	3,82	0,33	0,05	0,18	0,28	1,16	0,17	0,63	0,34
0,00	1,00	0,00	3,38	82,61	2,94	0,00	0,00	0,00	0,35	0,00	0,00	0,00	0,40
0,00	0,90	0,10	3,96	80,97	3,06	0,33	0,07	0,17	0,34	0,96	0,21	0,51	0,58
0,00	0,80	0,20	4,36	78,47	3,15	0,50	0,13	0,31	0,33	1,51	0,38	0,93	0,58
0,00	0,70	0,30	4,74	75,87	3,24	0,61	0,17	0,40	0,33	1,87	0,51	1,24	0,58
0,00	0,60	0,40	5,11	73,27	3,34	0,67	0,19	0,46	0,32	2,09	0,59	1,43	0,58
0,00	0,50	0,50	5,49	70,68	3,43	0,69	0,20	0,48	0,32	2,18	0,62	1,52	0,58
0,00	0,40	0,60	5,90	68,22	3,52	0,67	0,19	0,46	0,31	2,16	0,61	1,48	0,32
0,00	0,30	0,70	6,37	66,08	3,63	0,61	0,17	0,40	0,30	2,02	0,55	1,34	0,35
0,00	0,20	0,80	6,94	64,36	3,74	0,50	0,13	0,31	0,29	1,74	0,44	1,07	0,42
0,00	0,10	0,90	7,54	62,77	3,85	0,33	0,07	0,17	0,27	1,19	0,26	0,63	0,41
0,00	0,00	1,00	7,79	59,62	3,93	0,00	0,00	0,00	0,27	0,00	0,00	0,00	0,31
0,33	0,33	0,33	9,81	49,17	3,20	1,10	0,33	0,81	0,34	3,24	0,97	2,39	0,33
0,67	0,17	0,17	13,96	26,85	2,96	0,87	0,26	0,65	0,37	2,35	0,71	1,76	0,58
0,17	0,67	0,17	6,23	64,24	3,04	0,87	0,28	0,65	0,36	2,40	0,79	1,79	0,31
0,17	0,17	0,67	8,92	54,95	3,58	0,87	0,19	0,53	0,30	2,88	0,63	1,75	0,33

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os dados contidos na Tabela 4.43 correspondem aos pontos Pareto ótimos da otimização das funções de conversão de CH₄ (y₁), de seletividade (y₂) e de produtividade de hidrocarboneto (y₃). Esse conjunto de pontos forma a fronteira de Pareto para o problema em análise. A Figura 4.57 apresenta graficamente a Fronteira de Pareto obtida.

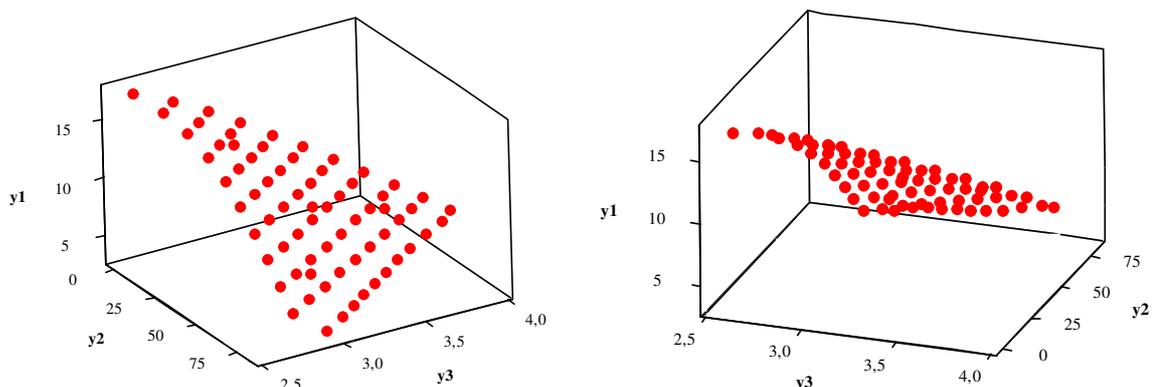


Figura 4.57 – Fronteira de Pareto sob diferentes perspectivas - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como nos casos apresentados anteriormente, o NBI foi capaz de construir uma fronteira de Pareto com pontos uniformemente distribuídos, o que se torna uma vantagem no processo de tomada de decisão por permitir ao decisor avaliar, de maneira mais fácil, o comportamento *trade-off* e como a priorização de uma resposta afeta a outra. Isto não seria possível se houvesse a aglomeração de soluções em algum ponto, gerando uma fronteira descontínua. Já o arranjo de misturas, ao fornecer uma combinação uniforme dos pesos, favorece a construção da fronteira e a obtenção dos polinômios canônicos de mistura por meio da modelagem das respostas.

Uma vez que a variância da previsão é medida no espaço de solução, visualizar como os pontos se distribuem neste espaço seria de grande importância. Entretanto, por se tratar de um problema com quatro variáveis de decisão, a avaliação gráfica não se aplica. Baseando-se somente no fato de que uma das respostas apresenta seu ótimo na extremidade do arranjo experimental e que o caso analisado possui somente 2 *cp* em seu arranjo experimental, altos valores de variância de previsão são esperados. Assim, com o intuito de realizar uma análise preliminar a respeito do comportamento da variância de previsão, foi realizada uma análise de correlação de Pearson entre as métricas de ponderação e a medida de variância, UPV, com base nos dados apresentados na Tabela 4.43, gerando a Tabela 4.44. Valores de *p-values* menores que 5% indicam correlações estatisticamente significantes.

Tabela 4.44 – Correlação de Pearson entre as métricas e a variância - Caso 7

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$
UPV	Correlação	-0,318	-0,103	-0,161	0,500	-0,407	-0,189	-0,266
	<i>p-value</i>	0,007	0,398	0,182	0,000	0,000	0,117	0,026

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Os resultados apresentados na Tabela 4.44 mostram que, das métricas de diversificação, somente $S(x)$ apresentou correlação estatisticamente significativa, apesar de todas terem apresentado correlação negativa com UPV. Das métricas obtidas pela razão diversificação/erro obtiveram significância estatística $S(x)/\text{MAPE}$ e DO/MAPE . Essa significância estatística ocorreu muito em função da métrica de erro MAPE que, em termos absolutos, apresentou o maior valor para correlação e com significância estatística.

O Passo 7 engloba a modelagem das métricas de ponderação, a partir dos dados apresentados na Tabela 4.43. Assim, seus polinômios canônicos de mistura, com seus respectivos superfícies de resposta e *contour plot* são:

$$\begin{aligned}
 S(x) = & -0,0074w_1 - 0,0074w_2 - 0,0074w_3 + 2,7705w_1w_2 + 2,7705w_1w_3 + \\
 & 2,7705w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_3 + 5,4207w_1w_2w_3 + \\
 & 1,4619w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 1,4619w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 1,4619w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.49}$$

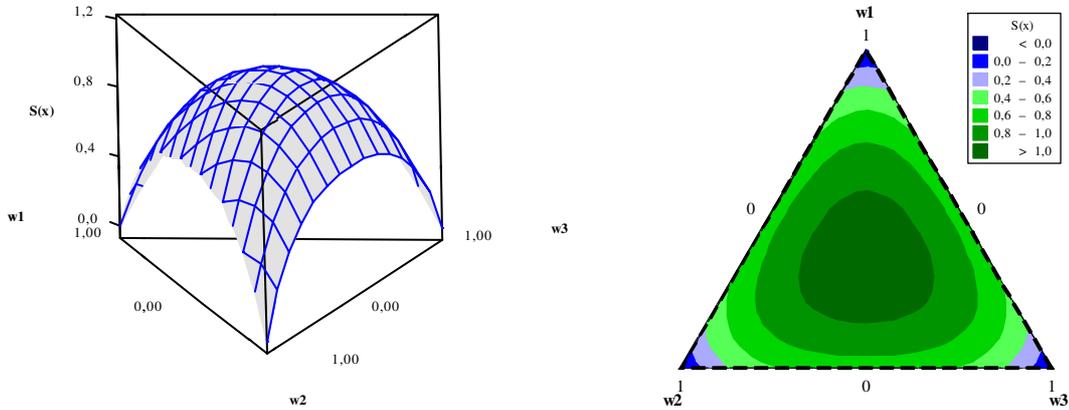


Figura 4.58 – Superfície de resposta e *Contour plot* para $S(x)$ - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$DC = 1,6428w_1w_2 + 0,5176w_1w_3 + 0,7876w_2w_3
 \tag{4.50}$$

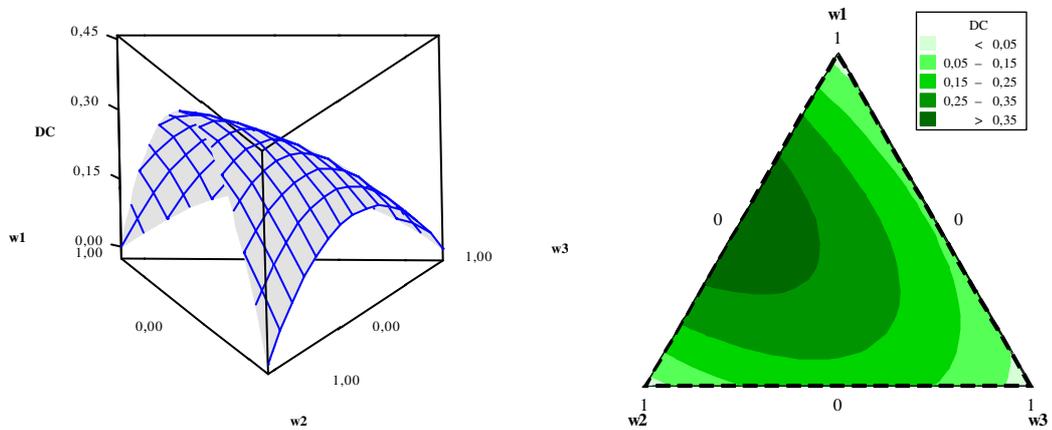


Figura 4.59 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DC - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$DO = 3,4233w_1w_2 + 1,9537w_1w_3 + 1,9253w_2w_3
 \tag{4.51}$$

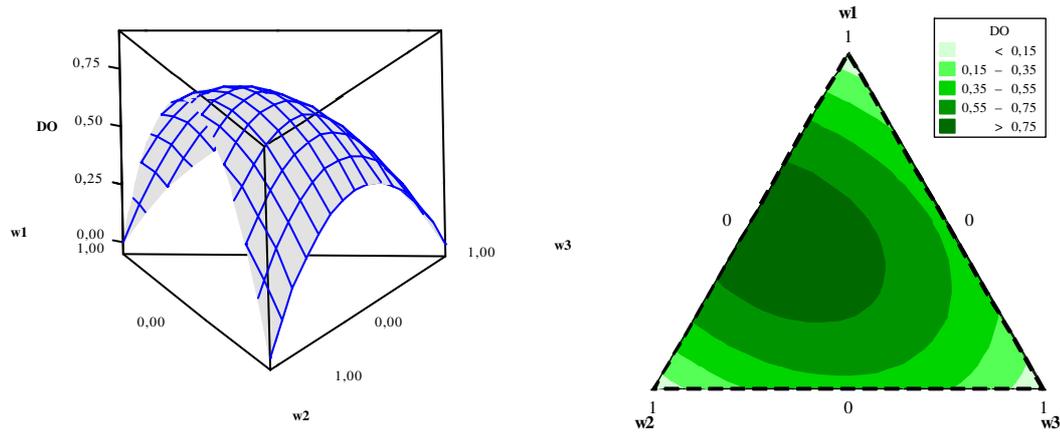


Figura 4.60 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DO - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 \text{MAPE} = & 0,442w_1 + 0,352w_2 + 0,274w_3 - 0,089w_1w_2 - 0,079w_1w_3 + \\
 & 0,017w_2w_3 - 0,228w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,036w_1w_3(w_1 - w_3) + \\
 & 0,277w_1w_2w_3 - 0,267w_1w_2w_3w_3 + 0,185w_1w_2(w_1 - w_2)^2 - \\
 & 0,074w_1w_3(w_1 - w_3)^2 - 0,089w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned} \tag{4.52}$$

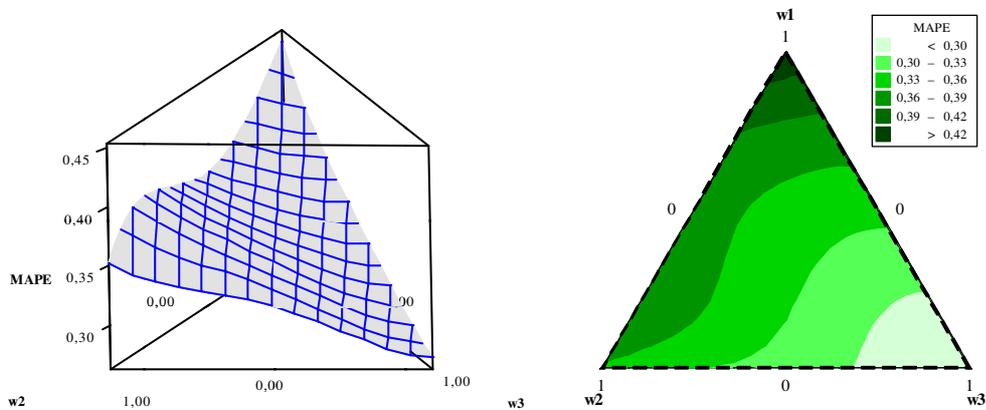


Figura 4.61 – Superfície de resposta e *Contour plot* para MAPE - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 S(x)/\text{MAPE} = & -0,044w_1 - 0,008w_2 + 0,002w_3 + 7,430w_1w_2 + 8,170w_1w_3 + \\
 & 8,663w_2w_3 - 2,030w_1w_3(w_1 - w_3) - 1,245w_2w_3(w_2 - w_3) + \\
 & 16,809w_1w_1w_2w_3 + 10,736w_1w_2w_2w_3 + 21,903w_1w_2w_3w_3 + \\
 & 2,772w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 4,666w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 5,090w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned} \tag{4.53}$$

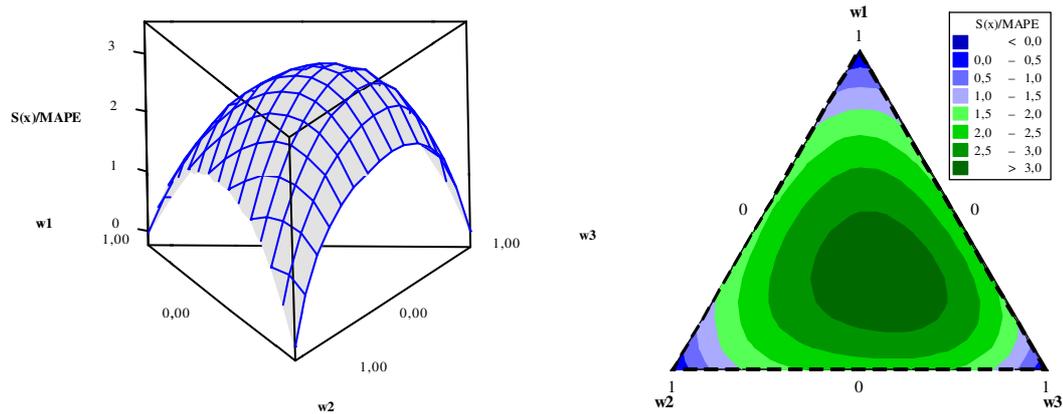


Figura 4.62 – Superfície de resposta e *Contour plot* para $S(x)/MAPE$ - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 DC/MAPE = & -0,0028w_1 + 0,0058w_2 + 0,0013w_3 + 4,3612w_1w_2 + 1,5282w_1w_3 + \\
 & 2,4715w_2w_3 - 0,0533w_1w_2(w_1 - w_2) - 0,3433w_1w_3(w_1 - w_3) - \\
 & 0,3297w_2w_3(w_2 - w_3) + 1,2760w_1w_1w_2w_3 + 1,5377w_1w_2w_3w_3 - \\
 & 0,4891w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 0,0696w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + 0,1254w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned} \tag{4.54}$$

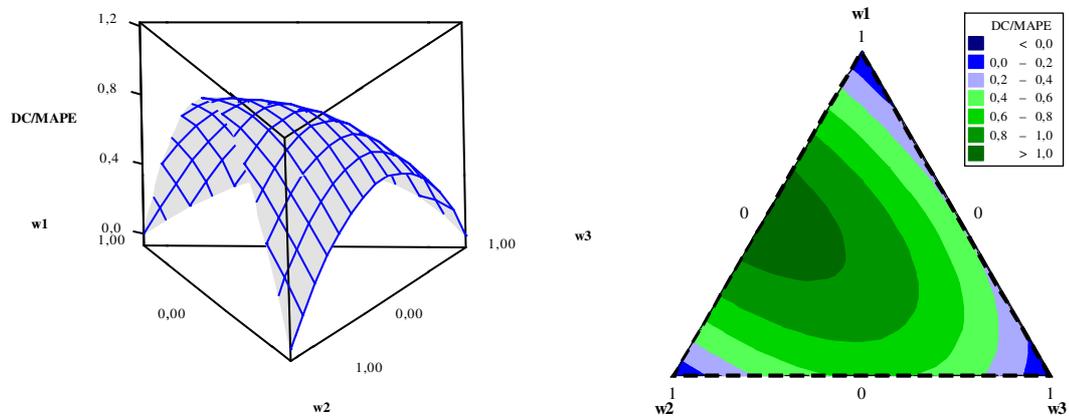


Figura 4.63 – Superfície de resposta e *Contour plot* para $DC/MAPE$ - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 DO/MAPE = & -0,006w_1 + 0,010w_2 + 0,004w_3 + 9,099w_1w_2 + 5,776w_1w_3 + \\
 & 6,050w_2w_3 - 0,123w_1w_2(w_1 - w_2) - 1,311w_1w_3(w_1 - w_3) - \\
 & 0,780w_2w_3(w_2 - w_3) + 3,326w_1w_1w_2w_3 - 1,385w_1w_2w_2w_3 + \\
 & 3,190w_1w_2w_3w_3 - 1,037w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 0,200w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + \\
 & 0,324w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned} \tag{4.55}$$

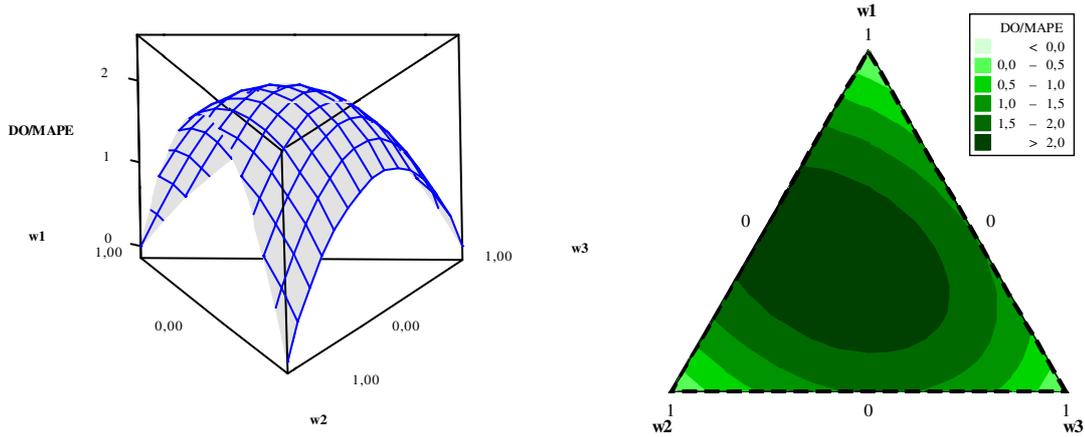


Figura 4.64 – Superfície de resposta e *Contour plot* para DO/MAPE - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

$$\begin{aligned}
 UPV = & 0,583w_1 + 0,443w_2 + 0,349w_3 - 0,307w_1w_3 + 0,343w_2w_3 + \\
 & 1,143w_1w_2(w_1 - w_2) + 0,822w_1w_3(w_1 - w_3) + 0,803w_2w_3(w_2 - w_3) - \\
 & 10,662w_1w_2w_3 - 1,260w_1w_2(w_1 - w_2)^2 + 0,810w_1w_3(w_1 - w_3)^2 + \\
 & 0,644w_2w_3(w_2 - w_3)^2
 \end{aligned}
 \tag{4.56}$$

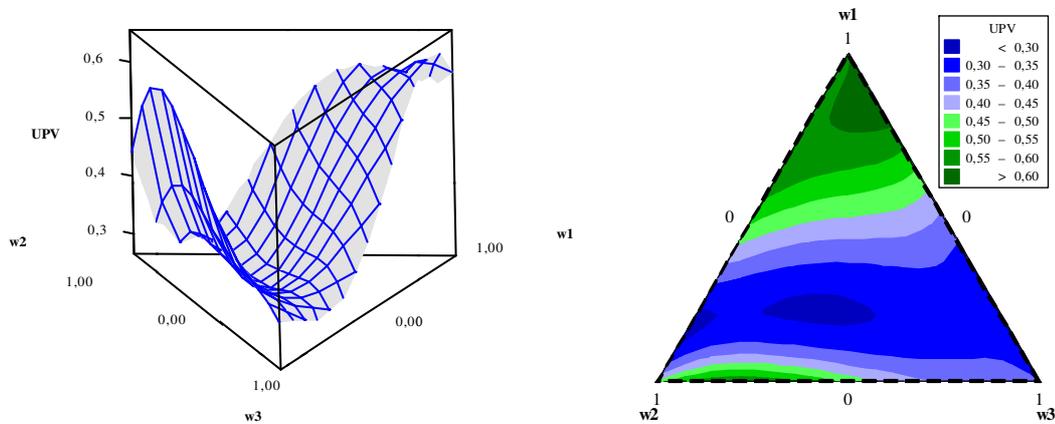


Figura 4.65 – Superfície de resposta e *Contour plot* para UPV - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Assim como ocorreu nos casos anteriores, todos os polinômios canônicos de mistura tiveram ótimo ajuste, uma vez que todos possuem R^2 ajustado próximo de 100%. O modelo que apresentou menor R^2 ajustado foi UPV que apresentou valor de 91,06%, valor considerado aceitável. Além disso, a UPV foi modelada em função dos pesos, provando que a variância de previsão depende dos pesos atribuídos às funções durante o processo de otimização multiobjetivo, mesmo para o presente caso que apresenta o ponto de ótimo de uma

das funções na extremidade do arranjo experimental, algo que não é desejável em modelos de superfície de resposta, além do arranjo possuir somente 2 *cp*.

Por fim, executa-se o Passo 8, que consiste na determinação dos pesos a serem utilizados para a escolha do ponto Pareto ótimo preferido. A maximização das métricas de diversificação, assim como a minimização da métrica de erro, são executadas, utilizando para isso o algoritmo GRG. Esse processo executado para cada métrica gera um vetor de pesos ótimos a serem utilizados no problema de otimização original, implementado pelo NBI, gerando uma resposta ótima diferente, permitindo sua comparação. A Tabela 4.45 apresenta um resumo dos resultados obtidos.

Tabela 4.45 – Resumo dos resultados - Caso 7

		$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{MAPE}$	$\frac{DC}{MAPE}$	$\frac{DO}{MAPE}$
Pesos	w_1	0,333	0,500	0,448	0,000	0,294	0,496	0,381
	w_2	0,333	0,500	0,447	0,000	0,315	0,504	0,384
	w_3	0,333	0,000	0,105	1,000	0,390	0,000	0,235
Variáveis	x_1	0,733	0,937	0,877	0,010	0,705	0,942	0,804
	x_2	0,742	0,806	0,786	0,693	0,709	0,798	0,759
	x_3	1,134	1,440	1,350	0,025	1,062	1,435	1,237
	x_4	-0,212	-0,337	-0,304	1,162	-0,175	-0,335	-0,231
Respostas	y_1	9,813	10,699	10,426	7,791	9,501	10,642	10,056
	y_2	49,172	43,376	45,170	59,619	50,941	43,642	47,545
	y_3	3,204	2,827	2,946	3,933	3,270	2,827	3,093
UPV		0,331	0,517	0,436	0,311	0,317	0,513	0,367

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base nos resultados apresentados na Tabela 4.45, a métrica de erro, MAPE, obteve o melhor desempenho em definir o ponto Pareto ótimo preferido com menor variância de previsão. Porém, ao alocar todo o peso somente em uma função, a utilização desta métrica descaracterizaria o problema como multiobjetivo. Ao se associar a métrica de entropia com a métrica de erro, $S(x)/MAPE$, os pesos foram diversificados sem alterar demasiadamente a variância de previsão. Uma vez que a amplitude da UPV para o presente problema foi de 0,311 a 0,583, considera-se que as métrica $S(x)$, MAPE, $S(x)/MAPE$ e $DO/MAPE$ conseguiram conduzir as respostas para uma região de mínima variância. A Figura 4.66 apresenta os resultados obtidos com a utilização de MAPE e de $S(x)/MAPE$ diretamente na fronteira Pareto ótima.

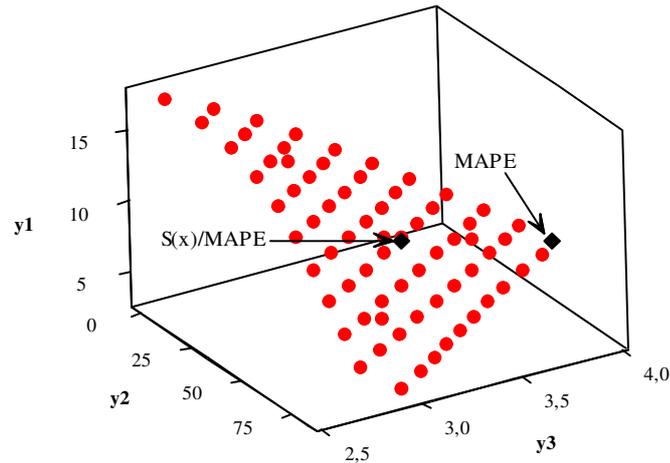


Figura 4.66 – Fronteira de Pareto e os resultados da otimização - Caso 7.

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Como discutido anteriormente, o fato de o ponto ótimo de uma das respostas otimizadas no presente caso estar na extremidade do arranjo experimental associado ao fato de que somente 2 *cp* foram utilizados no arranjo experimental, faz com que algumas respostas Pareto ótimas apresentem um aumento considerável na variância de previsão. Mesmo assim, o uso das métricas MAPE e $S(x)/MAPE$ gerou um vetor de pesos que levou as respostas a uma região de mínima variância para o problema em análise, sendo que a razão $S(x)/MAPE$ foi a que obteve o melhor resultado, por permitir maior diversificação entre as respostas a serem otimizadas. Apesar de a fronteira de Pareto estar localizada em uma região de maiores valores de variância de previsão, foi possível, assim como nos casos anteriores, modelar a UPV em função dos pesos, comprovando que os pesos utilizados no processo de otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida, mesmo para o caso em que se utiliza somente 2 *cp* no arranjo experimental.

Por fim, com o objetivo de visualizar o impacto da variância de previsão nas respostas obtidas, gera-se o intervalo de confiança para cada resposta, considerando as métricas com melhor performance em reduzir a variância, $S(x)$, MAPE, $S(x)/MAPE$ e $DO/MAPE$. Uma vez que o presente caso apresenta um problema real, em que as respostas apresentam interpretação física, essa análise se torna relevante.

O intervalo de confiança é o intervalo de valores que contém a média da população, com certa probabilidade, sendo válido para uma confiança de $100(1 - \alpha)\%$. Para o cálculo do intervalo de confiança, a Equação 2.72 será utilizada. A Tabela 4.46 apresenta os intervalos de confiança associados aos pontos ótimos alcançados com cada métrica, considerando-se $\alpha = 5\%$, além do coeficiente de variação (CV) para cada resposta obtida.

Tabela 4.46 – Intervalos de confiança - Caso 7

y_1	Limite Inferior	Média	Limite Superior	Desvio-padrão	CV
$S(x)$	8,554	9,813	11,072	0,572	0,058
MAPE	6,572	7,791	9,010	0,554	0,071
$S(x)/MAPE$	8,269	9,501	10,733	0,560	0,059
DO/MAPE	8,732	10,056	11,380	0,602	0,060
y_2	Limite Inferior	Média	Limite Superior	Desvio-padrão	CV
$S(x)$	29,959	49,1721	68,3854	8,729	0,178
MAPE	41,011	59,6190	78,2267	8,454	0,142
$S(x)/MAPE$	32,137	50,9413	69,7453	8,543	0,168
DO/MAPE	27,331	47,5448	67,7591	9,184	0,193
y_3	Limite Inferior	Média	Limite Superior	Desvio-padrão	CV
$S(x)$	2,762	3,204	3,646	0,201	0,063
MAPE	3,505	3,933	4,361	0,194	0,049
$S(x)/MAPE$	2,838	3,270	3,702	0,196	0,060
DO/MAPE	2,628	3,093	3,557	0,211	0,068

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base nos intervalos de confiança para cada resposta, percebe-se que os valores obtidos com as métricas MAPE e $S(x)/MAPE$ são os menores, logo apresentam menor variabilidade e maior confiabilidade para o caso analisado. Entretanto, para o caso analisado, os resultados gerados pela métrica $S(x)/MAPE$ são preferíveis, uma vez que a utilização do MAPE gerou a otimização de uma única resposta, a produtividade de hidrocarboneto (y_3). Com relação ao CV, percebe-se que a resposta seletividade de hidrocarboneto (y_2) apresentou os maiores valores, sendo, por isso, considerada a resposta mais difícil de se controlar para o problema em análise.

4.8 – ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE OS CASOS

Após a apresentação dos casos, se faz necessária a comparação entre seus resultados, relativos à variância de previsão, com o intuito de gerar conclusões válidas para o presente estudo.

Inicialmente, as médias da UPV geradas por cada métrica foi analisada. A ANOVA foi utilizada visando determinar a existência de diferença estatisticamente significativa para os valores médios em questão. Como o *p-value* gerado foi 0,002, rejeita-se a hipótese nula de que as médias são iguais, ou seja, pelo menos uma das médias é diferente entre si. Complementarmente, a análise de comparações múltiplas é realizada com o intuito de visualizar onde se dá a diferença entre os valores médios da UPV. A Tabela 4.47 apresenta os

resultados de UPV para cada métrica em cada caso analisado, sua média e o resultado da análise de comparação múltipla.

Tabela 4.47 – Análise comparativa

UPV	$S(x)$	DC	DO	MAPE	$\frac{S(x)}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DC}}{\text{MAPE}}$	$\frac{\text{DO}}{\text{MAPE}}$	Mínimo	Máximo
Caso 1	0,242	0,242	0,242	0,211	0,219	0,221	0,221	0,207	0,403
Caso 2	0,190	0,190	0,190	0,195	0,193	0,192	0,192	0,190	0,403
Caso 3	0,195	0,195	0,195	0,198	0,191	0,191	0,191	0,191	0,207
Caso 4	0,191	0,190	0,192	0,195	0,191	0,190	0,191	0,190	0,403
Caso 5	0,463	0,491	0,471	0,362	0,392	0,413	0,402	0,339	0,499
Caso 6	0,528	0,607	0,461	0,588	0,326	0,382	0,305	0,279	0,607
Caso 7	0,331	0,517	0,436	0,311	0,317	0,513	0,367	0,311	0,583
Média	0,306	0,348	0,313	0,294	0,261	0,300	0,267	0,244	0,444
Grupos	A, B	A, B	A, B	B	B	A, B	B	B	A

Fonte: Elaborado pelo autor (2017).

Com base na Tabela 4.47, pode-se afirmar que as médias de UPV geradas pelas métricas $S(x)$, DC, DO e DC/MAPE não apresentam diferença estatisticamente significativa às médias dos valores mínimos e máximos de UPV para os problemas analisados. Por isso, as médias de UPV relativas a essas métricas são classificadas como "A, B". Por outro lado, as médias de UPV geradas pelas métricas MAPE, $S(x)/\text{MAPE}$ e DO/MAPE apresentam valores estatisticamente diferentes da média dos valores máximos de UPV, enquanto não apresentam diferenças estatisticamente significativas quando comparadas à média dos valores mínimos de UPV para os problemas analisados. Esses valores estão em negrito na Tabela 4.47.

De maneira geral, as métricas foram capazes de reduzir a variância de previsão, ao definir o vetor de pesos para a definição do ponto Pareto ótimo preferido. Porém, alguns pontos devem ser destacados: 1. a utilização de 2 cp no arranjo experimental, além de aumentar de modo geral a variância de previsão, prejudica a redução da UPV pelas métricas utilizadas, principalmente as métricas de diversificação, $S(x)$, DC e DO; 2. modelos matemáticos cujos pontos de ótimo se situam fora da região experimental, prejudicam a redução da UPV pelas métricas de diversificação e pela métrica de erro, sendo a mais afetada a métrica de erro; 3. algumas métricas geraram pesos iguais a zero para alguns problemas, como é o caso da métrica de diversificação, DC, da métrica de erro, MAPE e da razão de ambas; 4. em todos os casos analisados, as métricas $S(x)/\text{MAPE}$ e DO/MAPE , obtidas pela razão entre medidas de diversificação e erro, foram eficientes em gerar vetor de pesos que levaram à redução da UPV, para o ponto Pareto ótimo escolhido, mantendo a diversificação

entre as respostas; e 5. em todos os casos analisados, foi possível verificar que a ponderação afeta a variância de previsão.

5 – CONCLUSÕES

Conforme anteriormente mencionado, o tema a respeito de um método de ponderação para seleção de um ponto de ótimo na fronteira de Pareto, como um auxílio à tomada de decisão, continua em destaque mesmo depois de tantos anos de pesquisa.

O presente trabalho objetivou trazer à tona a discussão sobre a variabilidade das respostas Pareto ótimas, algo pouco encontrado na literatura, apesar da ampla discussão a respeito do comportamento da variância em designs experimentais. Os resultados obtidos esclarecem alguns pontos, deixando claro que os pesos utilizados no processo de otimização multiobjetivo têm influência na variância de previsão da resposta obtida.

O presente trabalho buscou analisar o comportamento da variância de previsão nas mais diversas situações envolvendo a otimização de modelos de superfície de resposta: arranjos com dois e cinco pontos centrais, respostas cujos modelos matemáticos não apresentavam ponto estacionário dentro da região de experimentação, respostas cujos modelos apresentavam ponto estacionário dentro da região de experimentação, modelos apresentando duas, três e quatro variáveis de decisão e otimização multiobjetivo com duas e três funções. Diante dos resultados apresentados, conclui-se que as métricas $S(x)/MAPE$ e $DO/MAPE$, obtidas pela razão entre medidas de diversificação e erro, são as mais robustas, pois, apresentaram resultados mais confiáveis, gerando vetores de pesos que levaram a pontos Pareto ótimos com menor variância de previsão em todos os problemas analisados. Além disso, em todos os problemas analisados, essas métricas geraram pesos que mantiveram a diversificação entre as respostas, ou seja, não geraram pesos iguais a zero em nenhuma ocasião.

Assim, a questão de pesquisa "como auxiliar o tomador de decisão na escolha da melhor ponderação ao se trabalhar com otimização multiobjetivo, visando manter a variância de previsão das respostas para o ponto escolhido tão baixa quanto possível?", pode ser respondida da seguinte maneira: a melhor ponderação em otimização multiobjetivo, visando manter a variância de previsão tão baixa quanto possível, pode ser obtida pela razão entre uma métrica de diversificação e uma métrica de erro, como no caso de $S(x)/MAPE$ e de $DO/MAPE$, uma vez que a utilização dessas métricas permite a redução do erro em relação ao ótimo de cada resposta, ao mesmo tempo em que mantém a diversificação entre as respostas.

Por fim, como sugestão para trabalhos futuros, recomenda-se a utilização do método proposto a outros tipos de arranjos experimentais, como os arranjos de misturas, com distintos números de experimentos. Além disso, uma vez que se objetiva a redução da variância de previsão, a utilização do D-Optimal design é outro aspecto que pode ser contemplado.

REFERÊNCIAS

- ADEYEMO, J. A.; OLOFINTOYE, O. O. Evaluation of combined Pareto multiobjective differential evolution on tuneable problems. **International Journal of Simulation Modelling**, v. 13, n. 3, p. 276-287, 2014.
- AFGAN, N. H.; CARVALHO, M. G. Sustainability assessment of hydrogen energy systems. **International Journal of Hydrogen Energy**, v.29, n.13, p.1327-1342, 2004.
- ANDERSON-COOK, C. M.; BORROR, C. M.; MONTGOMERY, D. C. Response surface design evaluation and comparison. **Journal of Statistical Planning and Inference**, v.139, n.2, p.629-641, 2009.
- ANGSERYD, J.; ELFWING, M.; OLSSON, E.; ANDRÉN, H.-O. Detailed microstructure of a cBN based cutting tool material. **International Journal of Refractory Metals and Hard Materials**, v.27, n.2, p.249-255, 2009.
- ARDAKANI, M. K.; NOOROSSANA, R. A new optimization criterion for robust parameter design – the case of target is best. **International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v. 38, n.9-10, 851-859, 2008.
- BAIERLEIN, R. How Entropy Got Its Name. **American Journal of Physics**,v.60, p.1151, 1992.
- BARIL, C.; YACOUT, S. e CLÉMENT, B. Design for Six Sigma through collaborative multiobjective optimization. **Computers & Industrial Engineering**, v. 60, n. 1, p. 43-55, 2011.
- BECCALI, M.; CELLURA, M.; MISTRETTA, M. Decision-making in energy planning. Application of the Electre method at regional level for the diffusion of renewable energy technology. **Renewable Energy**, n.28, n.13, p.2063-2087, 2003.
- BEGIĆ, F.; AFGAN, N. H. Sustainability assessment tool for the decision making in selection of energy system-Bosnian case. **Energy**, v.32, n.10, p.1979-1985, 2007.
- BERTRAND, J; FRANSOO, J. Modelling and simulation: operations management research methodologies using quantitative modeling.**International Journal of Operations & Production Management**, v. 22, n. 2, p. 241-264, 2002.
- BICKMAN, L.; ROG, D. Applied research design: A practical approach. In: BICKMAN, L.; ROG, D (Eds.).**Handbook of applied social research methods**. 2.ed. p. 3–43. Thousand Oaks, CA: Sage, 2009.
- BOLLINGER, D.; PICTET, J. Multiple criteria decision analysis of treatment and land-filling technologies for waste incineration residues. **Omega**, v.36, n.3, p.418-428, 2008.

- BONANO, E. J.; APOSTOLAKIS, G. E.; SALTER, P. F.; GHASSEMI, A.; JENNINGS, S. Application of risk assessment and decision analysis to the evaluation, ranking and selection of environmental remediation alternatives. **Journal of Hazardous Materials**, v.71, n.1-3, p.35-57, 2000.
- BORKOWSKI, J. J. Spherical prediction-variance properties of central composite and Box-Behnken designs. **Technometrics**, v.37, n.4, 1995.
- BOTTERO, M.; COMINO, E.; RIGGIO, V. Application of the analytic hierarchy process and the analytic network process for the assessment of different wastewater treatment systems. **Environmental Modelling & Software**, v.26, n.10, p.1211-1224, 2011.
- BOUACHA, K.; YALLESE, M. A.; KHAMEL, S.; BELHADI, S. Analysis and optimization of hard turning operation using cubic boron nitride tool. **International Journal of Refractory Metals & Hard Materials**, v.45, p.160–178, 2014.
- BOUACHA, K.; YALLESE, M. A.; MABROUKI, T.; RIGAL, J.-F. Statistical analysis of surface roughness and cutting forces using response surface methodology in hard turning of AISI 52100 bearing steel with CBN tool. **International Journal of Refractory Metals and Hard Materials**, v.28, n.3, 349-361, 2010.
- BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. **Empirical Model-Building and Response Surfaces**. New York: John Wiley & Sons, 1987, 650 p.
- BOX, G. E. P.; HUNTER, J. S. Multi-Factor Experimental Designs for Exploring Response Surfaces. **The Annals of Mathematical Statistics**, v.28, n.1, p.195-241, 1957.
- BRÉCHET, T.; TULKENS, H. Beyond BAT: selecting optimal combinations of available techniques, with an example from the limestone industry. **Journal of Environmental Management**, v.90, n.5, p.1790-1801, 2009.
- BRITO, T.G.; PAIVA, A. P.; FERREIRA, J. R.; GOMES, J. H. F.; BALESTRASSI, P. P. A normal boundary intersection approach to multiresponse robust optimization of the surface roughness in end milling process with combined arrays. **Precision Engineering**, v.38, n.3, p.628-638, 2014.
- BROOKES, C. A. The mechanical properties of cubic boron nitride – a perspective view. **Institute of Physics Conference Series**, v.75, p.207-220, 1986.
- CAMPOS, P. H. S. **Metodologia de Otimização de Seleção de Ferramentas para o Torneamento do Aço Endurecido ABNT H13 por Análise Envoltória de Dados**. 2015. 182 p. Tese (Doutorado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2015.

- CAVALLARO, F. Multi-criteria decision aid to assess concentrated solar thermal technologies. **Renewable Energy**, v.34, n.7, p.1678-1685, 2009.
- CHANKONG, V.; HAIMES, Y. Multiobjective decision making: theory and methodology. New York: North Holland, 1983.
- CHARNES, A.; COOPER, W. W. **Management Models and Industrial Applications of Linear Programming**. v.1. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1961.
- CHARNES, A.; COOPER, W. W.; FERGUSON, R. O. Optimal Estimation of Executive Compensation by Linear Programming. **Management Science**, v.1, n.2, p.138-151, 1955.
- CHEN, M.; GUO, Y.; LIU, H.; WANG, C. The evolutionary algorithm to find robust Pareto-optimal solutions over time. **Mathematical Problems in Engineering**, vol. 2015, Article ID 814210, 18 pages, 2015.
- CHOWDHURY, S.; HUSAIN, T. Evaluation of drinking water treatment technology: an entropy-based fuzzy application. **Journal of Environmental Engineering**, v.132, n.10, p.1264-1271, 2006.
- CLARKE, F. H. Optimization and Nonsmooth Analysis. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1983.
- CORNELL, J. **Experiments with mixtures: designs, models, and the analysis of mixture data**. 3 ed. New York: John Wiley & Sons, 2002, 649 p.
- CORREIA, A. E.; DAVIM, J. P. Surface roughness measurement in turning carbon steel AISI 1045 using wiper inserts. **Measurement**, v.44, n.5, p.1000-1005, 2011.
- CRISTÓBAL, J.; GUILLÉN-GOSÁLBEZ, G.; JIMÉNEZ, L.; IRABIEN, A. Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal burning. **Applied Energy**, v.92, p.369-378, 2012.
- CRITTO, A.; CANTARELLA, L.; CARLON, C.; GIOVE, S.; PETRUZZELLI, G.; MARCOMINI, A. Decision support-oriented selection of remediation technologies to rehabilitate contaminated sites. **Integrated Environmental Assessment and Management**, v.2, n.3, p.273-285, 2006.
- CZINER, K.; TUOMAALA, M.; HURME, M. Multicriteria decision making in process integration. **Journal of Cleaner Production**, v.13, n.5, p.475-483, 2005.
- DAIM, T.; INTARODE, N. A framework for technology assessment: case of a Thai building material manufacturer. **Energy for Sustainable Development**, v.13, n.4, p.280-286, 2009.
- DAS, I.; DENNIS, J. E. Normal boundary intersection: A new method for generating the Pareto surface in nonlinear multicriteria optimization problems. **SIAM Journal on Optimization**, v.8, n.3, 631-657, 1998.

- DAS, I.; DENNIS, J. E. A closer look at drawbacks of minimizing weighted sums of objectives for Pareto set generation in multicriteria optimization problems. **Structural Optimization**, v. 14, n. 1, p. 63-69, 1997.
- DAUER, J. P.; KRUEGER, R. J. An iterative approach to goal programming. **Operational Research Quarterly**, v.28, n.3, parte 2, p.671–681, 1977.
- DE LANGE, W. J.; STAFFORD, W. H. L., FORSYTH, G. G.; LE MAITRE, D. C. Incorporating stakeholder preferences in the selection of technologies for using invasive alien plants as a bio-energy feedstock: applying the analytical hierarchy process. **Journal of Environmental Management**, v.99, n.30, p.76-83, 2012.
- DEB, K. **Multi-objective optimization using evolutionary algorithms**. New York: Wiley, 2001.
- DERDEN, A.; VERCAEMST, P.; DIJKMANS, R. Best available techniques (BAT) for the fruit and vegetable processing industry. **Resources, Conservation and Recycling**, v.34, n.4, p.261-271, 2002.
- DIJKMANS, R. Methodology for selection of best available techniques (BAT) at the sector level. **Journal of Cleaner Production**, v.8, n.1, p.11-21, 2000.
- DOUKAS, H.; PATLITZIANAS, K. D.; PSARRAS, J. Supporting sustainable electricity technologies in Greece using MCDM. **Resources Policy**, v.31, n.2, p.129-136, 2006.
- ESCHE, E.; MÜLLER, D.; SONG, S.; WOZNY, G. Optimization during the process synthesis: enabling the oxidative coupling of methane by minimizing the energy required for the carbon dioxide removal. **Journal of Cleaner Production**, n. 91, p. 100-108, 2015.
- ESKELINEN, P.; MIETTINEN, K. Trade-off analysis approach for interactive nonlinear multiobjective optimization. **OR Spectrum**, v. 34, n. 4, p. 803-816, 2011.
- FANG, S.-C.; RAJASEKERA, J. R.; TSAO, H.-S. J. **Entropy optimization and mathematical programming**. Boston: Kluwer Academic Publishers, 1997.
- FARZANEH-GORD, M.; NIAZMAND, A.; DEYMI-DASHTEBAYAZ, M.; RAHBARI, H.R. Effects of natural gas compositions on CNG (compressed natural gas) reciprocating compressors performance. **Energy**, v. 90, n. 1, p.1152-1162, 2015.
- FIGUEIRA, J.R.; GRECO, S.; SŁOWIŃSKI, R. Building a set of additive value functions representing a reference preorder and intensities of preference: GRIP method. **European Journal of Operational Research**, v. 195, n. 2, p. 460-486, 2009.
- FIJAL, T. An environmental assessment method for cleaner production technologies. **Journal of Cleaner Production**, v.15, n.10, p.914-919, 2007.

- GABRIELE, G. A.; RAGSDALL, K. M. The generalized reduced gradient method: a reliable tool for optimal design. **ASME Journal of Engineering for Industry**, v. 99, p. 384–400, 1977.
- GAITONDE, V. N.; KARNIK, S. R.; FIGUEIRA, L.; DAVIM, J.P. Machinability investigations in hard turning of AISI D2 cold work tool steel with conventional and wiper ceramic inserts. **International Journal of Refractory Metals and Hard Materials**, v.27, n.4, 754-763, 2009.
- GARCÍA, N.; CABALLERO, J. A. Economic and environmental assessment of alternatives to the extraction of acetic acid from water. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v.50, n.18, p.10717-10729, 2011.
- GAUDREAU, C.; SAMSON, R.; STUART, P. Implications of choices and interpretation in LCA for multi-criteria process design: de-inked pulp capacity and cogeneration at a paper mill case study. **Journal of Cleaner Production**, v.17, n.17, p.1535-1546, 2009.
- GELDERMANN, J.; RENTZ, O. The reference installation approach for the technoeconomic assessment of emission abatement options and the determination of BAT according to the IPPC Directive. **Journal of Cleaner Production**, v.12, p.389-402, 2004.
- GEORGOPOULOU, E.; HONTOU, V.; GAKIS, N.; SARAFIDIS, Y.; MIRASGEDIS, S.; LALAS, D.P.; LOUKATOS, A.; GARGOULAS, N.; MENTZIS, A.; ECONOMIDIS, D.; TRIANTAFILOPOULOS, T.; KORIZI, K. BEAsT: a decision-support tool for assessing the environmental benefits and the economic attractiveness of best available techniques in industry. **Journal of Cleaner Production**, v.16, n.3, p.359-373, 2008.
- GINER-SANTONJA, G.; ARAGONÉS-BELTRÁN, P.; NICLÓS-FERRAGUT, J. The application of the analytic network process to the assessment of best available techniques. **Journal of Cleaner Production**, v.25, n., p.86-95, 2012.
- GIOVANNITTI-JENSEN, A.; MYERS, R. H. Graphical assessment of the prediction capability of response surface designs. **Technometrics**, v.31, n.2, p.159-171, 1989.
- GOLDFARB, H. B.; ANDERSON-COOK, C. M.; BORROR, C. M.; MONTGOMERY, D. C. Fraction of design space plots for assessing mixture and mixture-process designs. **Journal of Quality Technology**, v. 36, n.2, p.169-179, 2004.
- GOMES, J. H. F.; PAIVA, A. P. ; COSTA, S. C. ; BALESTRASSI, P. P.; PAIVA, E. J. Weighted Multivariate Mean Square Error for processes optimization: a case study on flux-cored arc welding for stainless steel claddings. **European Journal of Operational Research**, v.226, n.3, p. 522-535, 2013.

- GÓMEZ-LÓPEZ, M. D.; BAYO, J.; GARCÍA-CASCALES, M. S.; ANGOSTO, J. M. Decision support in disinfection technologies for treated wastewater reuse. **Journal of Cleaner Production**, v.17, n.16, p.1504-1511, 2009.
- GRANDINETTI, L.; GUERRIERO, F.; LEPERA, G.; MANCINI, M. A niched genetic algorithm to solve a pollutant emission reduction problem in the manufacturing industry: a case study. **Computers and Operations Research**, v.34, n.7, p.2191-2214, 2007.
- GRZESIK, W. Wear development on wiper Al_2O_3 -TiC mixed ceramic tools in hard machining of high strength steel. **Wear**, v.266, n.9-10, p.1021-1028, 2009.
- GRZYBOWSKI, A. Z. Note on a new optimization based approach for estimating priority weights and related consistency index. **Expert Systems with Applications**, v.39, n.14, p.11699-11708, 2012.
- HALOG, A., SHULTMANN, F., RENTZ, O. Using quality function deployment for technique selection for optimum environmental performance improvement. **Journal of Cleaner Production**, v.9, p.387-394, 2001.
- HAMADA, M.; MARTZ, H. F.; REESE, C. F.; WILSON, A. G. Finding Near-Optimal Bayesian Experimental Designs via Genetic Algorithms. **The American Statistician**, v.55, n.3, p.175-181, 2001.
- HARRIS, T. K.; BROOKES, E. J.; TAYLOR, C. J. The effect of temperature on the hardness of polycrystalline cubic boron nitride cutting tool materials. **International Journal of Refractory Metals and Hard Materials**, v.22, n.2-3, p.105-110, 2004.
- HEATH, P. J. Properties and uses of amborite. **Industrial Diamond Review**, v.46, n.514, p.120-127, 1986.
- HEIN, N.; KROENKE, A.; RODRIGUES JUNIOR, M. M. Professor Assessment Using Multi-Criteria Decision Analysis. **Procedia Computer Science**, v.55, p.539-548, 2015.
- HERZOG, D. E. Cutting tools with COMPAX diamond and BZN compact inserts slash production time and lower part cost. **Cutting Tool Engineering**, v.5, p.64-67, 1977.
- HOWARD, E.; KAMPER, M. J. Weighted Factor Multiobjective Design Optimization of a Reluctance Synchronous Machine. **IEEE Transactions on Industry Applications**, v.52, n.3, May/June, 2016.
- HUANG, H. Z.; GU, Y. K.; DU, X. An interactive fuzzy multi-objective optimization method for engineering design. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, v.19, n.5, p.451-460, 2006.

- HUANG, Y.; CHOU, Y. K.; LIANG, S. Y. CBN tool wear in hard turning: survey on research progresses. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v.35, n.5, p.443-453, 2007.
- HWANG, C. -L.; MASUD, A. S. M. **Multiple objective decision making - methods and applications: a state-of-the-art survey**. Lecture notes in economics and mathematical systems 164. Berlin/New York: Springer-Verlag/Heidelberg, 1979.
- IBÁÑES-FORÉS, V.; BOVEA, M. D.; PÉREZ-BELIS, V. A holistic review of applied methodologies for assessing and selecting the optimal technological alternative from a sustainability perspective. **Journal of Cleaner Production**, v.70, n.1, p.259-281, 2014.
- IGNIZIO, J. P. Generalized Goal Programming: An Overview. **Computers & Operations Research**, v.10, n.4, p.277-289, 1983.
- INOUE, Y.; KATAYAMA, A. Two-scale evaluation of remediation technologies for a contaminated site by applying economic input-output life cycle assessment: risk-cost, risk-energy consumption and risk-CO₂ emission. **Journal of Hazardous Materials**, v.192, n.3, p.1234-1242, 2011.
- ISTADI; AMIN, N.A.S. A hybrid numerical approach for multi-responses optimization of process parameters and catalyst compositions in CO₂ OCM process over CaO-MnO/CeO₂ catalyst. **Chemical Engineering Journal**, v. 106, n. 3, p. 213-227, 2005.
- ISTADI; AMIN, N.A.S. Optimization of process parameters and catalyst compositions in carbon dioxide oxidative coupling of methane over CaO-MnO/CeO₂ catalyst using response surface methodology. *Fuel Processing Technology*, v. 87, n. 5, p. 449-459, 2006.
- JAHN, J.; KLOSE, J.; MERKEL, A. On the application of a method of reference point approximation to bicriterial optimization problems in chemical engineering. In: OETTLI, W.; PALLASCHKE, D. (orgs.). **Advances in optimization**, pp. 478-491. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1991.
- JIA, Z.; IERAPETRITOU, G. Generate Pareto optimal solutions of scheduling problems using normal boundary intersection technique. **Computers and Chemical Engineering**, v.31, n.4, 268-280, 2007.
- KANO, M.; NAKAGAWA, Y. Data-based process monitoring, process control, and quality improvement: Recent developments and applications in steel industry. **Computers & Chemical Engineering**, v.32, n.1-2, p.12-24, 2008.
- KARAGIANNIDIS, A.; PERKOULIDIS, G. A multi-criteria ranking of different technologies for the anaerobic digestion for energy recovery of the organic fraction of municipal solid wastes. **Bioresource Technology**, v.100, n.8, p.2355-2360, 2009.

- KARAVANAS, A.; CHALOULAKOU, A.; SPYRELLIS, N. Evaluation of the implementation of best available techniques in IPPC context: an environmental performance indicators approach. **Journal of Cleaner Production**, v.17, n.4, p.480-486, 2009.
- KAZAGIĆ, A., SMAJEVIĆ, I.; DUIĆ, N. Selection of sustainable technologies for combustion of Bosnian coals. **Thermal Science**, v.14, n.3, p.715-727, 2010.
- KHELIFI, O.; DALLA GIOVANNA, F.; VRANES, S.; LODOLO, A.; MIERTUS, S. Decision support tool for used oil regeneration technologies assessment and selection. **Journal of Hazardous Materials**, v.137, n.1, p.437-442, 2006.
- KHURI, A.; KIM, H. J.; UM, Y. Quantile plots of the prediction variance for response surface designs. **Computational Statistics & Data Analysis**, v.22, n.4, p.395-407, 1996.
- KIEFER, J. Optimum experimental designs (with discussion). **Journal of the Royal Statistical Society. B**, v.21, p.229-249, 1959.
- KIEFER, J.; WOLFOWITZ, J. The equivalence of two extremum problems. **Canadian Journal of Mathematics**, v.12, p.262-266, 1960.
- KÖNIG, W.; TÖNSHOFF, H. K.; ACKERSHOTT, G. Machining of hard materials. **Annals of the CIRP**, 1984, v.33, n.2, p.417-427, 1984.
- KÖNIG, W.; BERKTOLD, A.; KOCH, K. F. Turning versus grinding—a comparison of surface integrity aspects and attainable accuracies. **Annals of the CIRP**, v.42, n.1, p.39-43, 1993.
- KÖKSOY, O. A nonlinear programming solution to robust multi-response quality problem. **Applied Mathematics and Computation**, v. 196, n. 2, p. 603-612, 2008.
- KÖKSOY, O.; DOGANAKSOY, N. Joint optimization of mean and standard deviation using response surface methods. **Journal of Quality Technology**, v. 35, n. 3, p. 237-334, 2003.
- KOSKI, J. Multicriteria truss optimization. In: STADLER, W. (org.). **Multicriteria optimization in engineering and in the sciences**, pp. 263-307. New York: Plenum Press, 1988.
- KRAJNC, D., MELE, M., GLAVIČ, P. Fuzzy logic model for the performance benchmarking of sugar plants by considering best available techniques. **Resources, Conservation and Recycling**, v.52, n.2, p.314-330, 2007.
- LAHIFF, C.; GORDON, S.; PHELAN, P. PCBN tool wear modes and mechanisms in finish hard turning. **Robotics and Computer-Integrated Manufacturing**, v.23, n.6, p.638-644, 2007.
- LIN, G. T. R.; SHEN, Y. C. A collaborative model for technology evaluation and decision-making. **Journal of Scientific & Industrial Research**, v.69, n.2, p.94-100, 2010.

- LIU, X.; WEN, Z. Best available techniques and pollution control: a case study on China's thermal power industry. **Journal of Cleaner Production**, v.23, n.1, p.113-121, 2012.
- LIU, F.; ZHANG, W.-G.; WANG, Z. X. A goal programming model for incomplete interval multiplicative preference relations and its application in group decision-making. **European Journal of Operational Research**, v.218, n.3, p.747-754, 2012.
- LUENBERGER, D. G.; YE, Y. **Linear and nonlinear programming**. 3 ed. New York: Springer, 2008, 516 p.
- LUO, D. Decision-making methods with three-parameter interval grey number. **System Engineering Theory and Practice**, v.29, n.1, p.124-130, 2009.
- LUO, D.; WANG, X. The multi-attribute grey target decision method for attribute value within three-parameter interval grey number. **Applied Mathematical Modelling**, v.36, n.5, p.1957-1963, 2012.
- MANDAL, N.; DOLOI, B.; MONDAL, B. Development of flank wear prediction model of Zirconia Toughened Alumina (ZTA) cutting tool using response surface methodology. **International Journal of Refractory Metals and Hard Materials**, v.29, n.2, 273-280, 2011.
- MACARTHUR, R. Patterns of species diversity. **Biological Reviews**, v.40, p.510-533, 1965.
- MAVROTAS, G., GEORGOPOULOU, E., MIRASGEDIS, S., SARAFIDIS, Y., LALAS, D., HONTOU, V., GAKIS, N. An integrated approach for the selection of best available techniques (BAT) for the industries in the greater Athens area using multiobjective combinatorial optimization. **Energy Economics**, v.29, n.4, p.953-973, 2007.
- MAVROTAS, G. Effective implementation of the ϵ -constraint method in Multi-Objective Mathematical Programming problems. **Applied Mathematics and Computation**, v.213, n.2, p.455-465, 2009.
- MELA, K.; TIAINEN, T.; HEINISUO, M.; BAPTISTE, P. Comparative study of multiple criteria decision making methods for building design. **Advanced Engineering Informatics**, 26, 716-726, 2012.
- MELACHRINOUDIS, E. Determining an optimum location for an undesirable facility in a workroom environment. **Applied Mathematical Modelling**, v.9, n.5, p.365-369, 1985.
- MESSAC, A.; MATTSON, C. A. Generating well distributed sets of Pareto points for engineering design using physical programming. **Optimization and Engineering**, v.3, n.4, p.431-450, 2002.
- MIETTINEN, K. **Nonlinear multiobjective optimization**. Boston: Kluwer Academic Publishers, 1999.

MITROFF, I. I.; BETZ, F.; PONDY, L. R.; SAGASTI, F. On managing science in the systems age: two schemas for the study of science as a whole systems phenomenon.

Interfaces, v.4. n.3, 1974.

MONGHASEMI, S.; NIKOO, M. R.; KHAKSAR FASAEI, M. A.; ADAMOWSKI, J. A novel multi criteria decision making model for optimizing time-cost-quality trade-off problems in construction projects. **Expert Systems with Applications**, v.42, n.6, p.3089-3104, 2015.

MONTGOMERY, D. C. **Design and Analysis of Experiments**. 7 ed. New York: John Wiley & Sons, 2009, 665 p.

MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. **Applied Statistics and Probability for Engineers**. 5 ed. New York: John Wiley & Sons, 2011, 768 p.

MONTGOMERY, D. C.; JENNINGS, C. L.; KULAHCI, M. **Introduction to Time Series Analysis and Forecasting**. New York: John Wiley & Sons, 2008, 445 p.

MOUATASIM, A. E. Two-Phase Generalized Reduced Gradient Method for Constrained Global Optimization. **Journal of Applied Mathematics**, vol. 2010, Article ID 976529, 19 pages, 2010.

MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. **Response Surface Methodology: process and product optimization using designed experiments**. 3 ed. New York: John Wiley & Sons, 2009, 680 p.

MYERS, R. H.; VINING, G. G.; GIOVANNITTI-JENSEN, A.; MYERS, S. L. Variance dispersion properties of second-order response surface designs. **Journal of Quality Technology**, v.24, n.1, p.1-11, 1992.

NAJJARBASHI, A.; LIM, G. Using Augmented ϵ -constraint Method for Solving a Multi-objective Operating Theater Scheduling. **Procedia Manufacturing**, v.3, p.4448-4455, 2015.

NARANG, N.; DHILLON, J. S.; KOTHARI, D. P. Weight pattern evaluation formultiobjective hydrothermal generation scheduling using hybrid search technique. **International Journal of Electrical Power and Energy Systems**, v.62, p.665-678, 2014.

ÖZEL, T.; HSU, T. K.; ZEREN, E. Effects of cutting edge geometry, workpiece hardness, feed rate and cutting speed on surface roughness and forces in finish turning of hardened AISI H13 steel. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v.25, n.3, p.262-269, 2005.

ÖZEL, T.; KARPAT, Y.; FIGUEIRA, L.; DAVIM, J. P. Modelling of surface finish and tool flank wear in turning of AISI D2 steel with ceramic wiper inserts. **Journal of Materials Processing Technology**, v.189, n.1-3,p.192-198, 2007.

- PAIVA, A. P.; FERREIRA, J. R.; BALESTRASSI, P. P. A multivariate hybrid approach applied to AISI 52100 hardened steel turning optimization. **Journal of Materials Processing Technology**, v.189, n.1-3, p.26-35, 2007.
- PAIVA, A.P.; PAIVA, E.J.; FERREIRA, J.F.; BALESTRASSI, P.P.; COSTA, S.C. A multivariate mean square error optimization of AISI 52100 hardened steel turning. **International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v.43, n.7, p.631–643, 2009.
- PAIVA, A. P.; CAMPOS, P. H.; FERREIRA, J. R.; LOPES, L. G. D.; PAIVA, E. J.; BALESTRASSI, P. P. A multivariate robust parameter design approach for optimization of AISI 52100 hardened steel turning with wiper mixed ceramic tool. **International Journal of Refractory Metals and Hard Materials**, v.30, n., p.152-163, 2012.
- PIELOU, E. **An introduction to mathematical ecology**. Wiley: New York, 1969.
- PINEDA, J. O. C. **A entropia segundo Claude Shannon: o desenvolvimento do conceito fundamental da teoria da informação**. 2006. 124 p. Dissertação (Mestrado em História da Ciência) – Programa de Estudos Pós Graduated em História da Ciência, Pontifícia Universidade Católica de São Paulo, São Paulo, 2006.
- PILAVACHI, P. A.; STEPHANIDIS, S. D.; PAPPAS, V. A.; AFGAN, N. H. Multi-criteria evaluation of hydrogen and natural gas fuelled power plant technologies. **Applied Thermal Engineering**, v.29, n.11-12, p.2228-2234, 2009.
- PILAVACHI, P. A.; ROUMPEAS, C. P.; MINETT, S.; AFGAN, N. H. Multi-criteria evaluation for CHP system options. **Energy Conversion and Management**, v.47, n.20, p.3519-3529, 2006.
- POULACHON, G.; MOISAN, A.; JAWAHIR, I. S. Tool-wear mechanisms in hard turning with polycrystalline cubic boron nitride tools. **Wear**, v.250, n.1-12, p.576-586, 2001.
- PRABHU, T. R.; VIZAYAKUMAR, K. Technology choice using FHDM: a case of iron-making technology. **IEEE Transactions on Engineering Management**, v.48, n.2, p.209-222, 2001.
- PRAKASH, C.; BARUA, M. K. A Robust Multi-Criteria Decision-Making Framework for Evaluation of the Airport Service Quality Enablers for Ranking the Airports. **Journal of Quality Assurance in Hospitality & Tourism**, v.17, n.3, 2016.
- PROMENTILLA, M. A. B.; FURUICHI, T.; ISHII, K.; TANIKAWA, N. A fuzzy analytic network process for multi-criteria evaluation of contaminated site remedial countermeasures. **Journal of Environmental Management**, v.88, n.3, p.479–495, 2008.

- RAO, S. S. **Engineering optimization: theory and practice**. 4 ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2009, 813 p.
- ROCHA, L. C. S.; PAIVA, A. P.; BALESTRASSI, P. P.; SEVERINO, G.; ROTELA JUNIOR, P. Entropy-Based Weighting for Multiobjective Optimization: An Application on Vertical Turning. **Mathematical Problems in Engineering**, vol. 2015, Article ID 608325, 11 pages, 2015a.
- ROCHA, L. C. S.; PAIVA, A. P.; BALESTRASSI, P. P.; SEVERINO, G.; ROTELA JUNIOR, P. Entropy-Based weighting applied to normal boundary intersection approach: the vertical turning of martensitic gray cast iron piston rings case. **Acta Scientiarum. Technology**, v. 37, n. 4, p. 361-371, 2015b.
- ROCHA, L. C. S.; PAIVA, A. P.; ROTELA JUNIOR, P.; BALESTRASSI, P. P.; CAMPOS, P. H. S. Robust multiple criteria decision making applied to optimization of AISI H13 hardened steel turning with PCBN wiper tool. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, IN PRESS, 2016. DOI 10.1007/s00170-016-9250-8
- RUBIO, L. ; DE LA SEN, M.; LONGSTAFF, A. P.; FLETCHER, S. Model-based expert system to automatically adapt milling forces in Pareto optimal multi-objective working points. **Expert Systems with Applications**, v.40, n.6, p.2312–2322, 2013.
- SAATY, T. L. How to make a decision: the analytic hierarchy process. **European Journal of Operational Research**, v.48, n.1, p. 9-26, 1990.
- SADIQ, R.; KHAN, F.I.; VEITCH, B. Evaluating offshore technologies for produced water management using GreenPro-I: a risk-based life cycle analysis for green and clean process selection and design. **Computers and Chemical Engineering**, v.29, n.5, p.1023-1039, 2005.
- SAMPAIO, P. R. **Teoria, métodos e aplicações de otimização multiobjetivo**. 2011. 79 p. Dissertação (Mestrado em Ciência da Computação) – Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo. 2011.
- SAN CRISTÓBAL, J. R. A multi criteria data envelopment analysis model to evaluate the efficiency of the renewable energy technologies. **Renewable Energy**, v.36, n.10, p.2742-2746, 2011.
- SAVIER, J. S.; DAS, D. Loss allocation to consumers before and after reconfiguration of radial distribution networks. **International Journal of Electrical Power and Energy Systems**, v.33, n.3, p.540-549, 2011.
- SCHOLLENBERGER, H.; Treitz, M.; Geldermann, J. Adapting the European approach of best available techniques: case studies from Chile and China. **Journal of Cleaner Production**, v.16, n.17, p.1856-1864, 2008.

- SEVERINO, G.; PAIVA, E. J.; FERREIRA, J. R.; BALESTRASSI, P. P.; PAIVA, A. P. Development of a special geometry carbide tool for the optimization of vertical turning of martensitic gray cast iron piston rings. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v.63, n.5-8, p.523-534, 2012.
- SHAHHOSSEIN, H.R.; FARSI, M.; EINI, S. Multi-objective optimization of industrial membrane SMR to produce syngas for Fischer-Tropsch production using NSGA-II and decision makings. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, v.32, p. 222-238, 2016.
- SHAHRAKI, A. F.; NOOROSSANA, R. Reliability-based robust design optimization: A general methodology using genetic algorithm. **Computers & Industrial Engineering**, v. 74, p. 199-207, 2014.
- SHANNON, C.E. A mathematical theory of communication. **Bell System Technical Journal**. v.27, p.379-423 e p.623-656, (julho e outubro), 1948.
- SHEHABUDDEEN, N.; PROBERT, D.; PHAAL, R. From theory to practice: challenges in operationalising a technology selection framework. **Technovation**, v.26, n.3, p.324-335, 2006.
- SHIN, S.; SAMANLIOGLU, F.; CHO, B. R.; WIECEK, M. M. Computing trade-offs in robust design: perspectives of the mean squared error. **Computers and Industrial Engineering**, v.60, n.2, p.248-255, 2011.
- SHUKLA, P. K.; DEB, K. On finding multiple Pareto-optimal solutions using classical and evolutionary generating methods. **European Journal of Operational Research**, v.181, n.3, 1630-1652, 2007.
- SOLOW, A.; POLASKY, S. Measuring biological diversity. **Environmental and Ecological Statistics**, v.1, n.2, p.95–107, 1994.
- STIRLING, A. A general framework for analysing diversity in science, technology and society. **Journal of the Royal Society Interface**, v.4, n.15, p.707–719, 2007.
- STIRLING, A. Diversity and ignorance in electricity supply investment: addressing the solution rather than the problem. **Energy Policy**, v.22, n.3, p.195-216, 1994.
- SZELAĞ, M.; GRECO, S.; SŁOWIŃSKI, R. Variable consistency dominance-based rough set approach to preference learning in multicriteria ranking. **Information Sciences**, v. 277, p.525-552, 2014.
- TABOADA, H. A.; BAHERANWALA, F.; COIT, D. W.; WATTANAPONGSAKORN, N. Practical solutions for multi-objective optimization: an application to system reliability design problems. **Reliability Engineering and System Safety**, v.92, n.3, p.314–322, 2007.

- TÖNSHOFF, H. K.; ARENDT, C; BEN AMOR, R. Cutting of hardened steel. **Annals of the CIRP**, v.49, n.2, p.547–566, 2000.
- TRAN, N. H.; TRAN, K. Combination of fuzzy ranking and simulated annealing to improve discrete fracture inversion. **Mathematical and Computer Modelling**, v.45, n.7-8, p.1010-1020, 2007.
- UTYUZHNIKOV, S. V.; FANTINI, P.; GUENOV, M.D. A method for generating a well-distributed Pareto set in nonlinear multiobjective optimization. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v.223, n.2, 820-841, 2009.
- VAHIDINASAB, V.; JADID, S. Normal boundary intersection method for suppliers' strategic bidding in electricity markets: An environmental/economic approach. **Energy Conversion and Management**, v.51, n.6, p.1111-1119, 2010.
- VIGNES, R.P. Use limited life-cycle analysis for environmental decision-making. **Chemical Engineering Progress**, v.97, n.2, p.40-54, 2001.
- VIJAYARAM, T. R.; SULAIMAN, S.; HAMOUDA, A. M. S.; AHMAD, M. H. M. Foundry quality control aspects and prospects to reduce scrap rework and rejection in metal casting manufacturing industries. **Journal of Materials Processing Technology**, v. 178, n.1-3, p.39-43, 2006.
- WAN, S.-P.; DONG, J.-Y. Power geometric operators of trapezoidal intuitionistic fuzzy numbers and application to multiattribute group decision making. **Applied Soft Computing**, v.29, p.153-168, 2015.
- WANG, Y.; TAKAHASHI, Y.; OHTSUKA, Y. Carbon dioxide as oxidant for the conversion of methane to ethane and ethylene using modified CeO₂ catalyst. **Journal of Catalysis**, v. 186, n. 1, p. 160-168, 1999.
- WANG, Z.-J. Consistency analysis and priority derivation of triangular fuzzy preference relations based on modal value and geometric mean. **Information Sciences**, v.314, p.169-183, 2015.
- WANG, J. J.; JING, Y. Y.; ZHANG, C. F.; ZHAO, J. H. Review on multi-criteria decision analysis aid in sustainable energy decision-making. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v.13, n.9, p.2263-2278, 2009.
- WUWONGSE, V.; KOBAYASHI, S.; IWAI, S.-I.; ICHIKAWA, A. Optimal design of linear control systems by an interactive optimization method. **Computers in Industry**, v.4, n.4, p.381-394, 1983.
- YANG, Q. Z.; CHUA, B. H.; SONG, B. A matrix evaluation model for sustainability assessment of manufacturing technologies. **World Academy of Science, Engineering and**

Technology - International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering, v.3, n.8, p.953-958, 2009.

YU, O. Y.; GUIKEMA, S. D.; BRIAUD, J. L.; BURNETT, D. Sensitivity analysis for multiattribute system selection problems in onshore environmentally friendly drilling (EFD). **Systems Engineering**, v.15, n.2, p.153-171, 2012.

ZHANG, W.; YANG, H. A study of the weighting method for a certain type of multicriteria optimization problem. **Computers & Structures**, v. 79, n. 31, p. 2741-2749, 2001.

ZELENY, M. A Concept of compromise solutions and the method of the displaced ideal. **Computers & Operations Research**, v.1, n.3-4, p.479-496, 1974.

ZELENY, M. The theory of the displaced ideal. In: ZELENY, M. (Ed.). **Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, n°123: Multiple Criteria Decision Making - Kyoto 1975**. Springer-Verlag: Berlin, New York, 1975.

ZENG, G.; JIANG, R.; HUANG, G.; XU, M.; LI, J. Optimization of wastewater treatment alternative selection by hierarchy grey relational analysis. **Journal of Environmental Management**, v.82, n.2, p.250-259, 2007.

ZHOU, R.; CAI, R.; TONG, G. Applications of Entropy in Finance: A Review. **Entropy**, v.15, n.11, p.4909-493, 2013.

ZHU, J.; HIPEL, K. W. Multiple stages grey target decision making method with incomplete weight based on multigranularity linguistic label. **Information Sciences**, v.212, p.15-32, 2012.

ANEXO – ALGUNS CONCEITOS EM ESTATÍSTICA

O campo de estatística lida com a coleta, apresentação, análise e uso dos dados para tomar decisões, resolver problemas e planejar produtos e processos. Devido a muitos aspectos da prática de engenharia envolverem o trabalho com dados, o conhecimento em estatística se torna importante. Técnicas estatísticas podem ser uma ajuda poderosa no planejamento de novos produtos e sistemas, melhorando os projetos existentes e planejando, desenvolvendo e melhorando os processos de produção.

Métodos estatísticos são usados com o intuito de ajudar a entender variabilidade. Por variabilidade entende-se que sucessivas observações de um sistema ou fenômeno não produzem exatamente o mesmo resultado. A estatística fornece uma estrutura para descrever essa variabilidade e para aprender sobre quais fontes potenciais de variabilidade são mais importantes. Dessa forma, um experimento, o qual é um teste ou uma série de testes, que pode fornecer diferentes resultados, muito embora seja repetido toda vez da mesma maneira, é chamado de um experimento aleatório. O conjunto de todos os resultados possíveis de um experimento aleatório é chamado de espaço amostral do experimento.

Muitos sistemas físicos podem ser modelados por experimentos aleatórios e variáveis aleatórias. Uma função cujo valor é um número real determinado por cada elemento no espaço amostral de um experimento aleatório é chamada uma variável aleatória. A distribuição das variáveis aleatórias envolvidas em cada um desses sistemas pode ser analisada e os resultados dessa análise podem ser usados em diferentes aplicações.

Se um espaço amostral contém um número finito de pontos ou uma sequência infinita contável de pontos amostrais, ele é chamado de espaço amostral discreto. A variável aleatória definida sobre esse espaço é chamada variável aleatória discreta. Entretanto, se um espaço amostral contém pontos amostrais que formam uma continuidade, então ele é chamado espaço amostral contínuo. A variável definida sobre esse espaço é chamada variável aleatória contínua e o número de valores possíveis desta variável é infinito incontável.

As probabilidades de interesse poderão ser determinadas com o conhecimento da distribuição de probabilidade da variável aleatória. Para a abordagem desse assunto os conceitos apresentados por Montgomery e Runger (2011) serão utilizados. Assim como apresentado por esses autores, letras maiúsculas, tais como X , Y ou Z , serão utilizadas para representar as variáveis aleatórias e a correspondente letra minúscula, x , y ou z , para um de seus valores.

A.1 – Variáveis Aleatórias Discretas e Distribuições de Probabilidades

Variáveis aleatórias são tão importantes em experimentos aleatórios que algumas vezes se ignora essencialmente o espaço amostral original do experimento, focando-se na distribuição de probabilidades da variável aleatória. Assim, uma variável aleatória pode simplificar a descrição e a análise de um experimento aleatório.

A distribuição de probabilidades de uma variável aleatória X é uma descrição das probabilidades associadas com os valores possíveis de X . Para uma variável aleatória discreta, a distribuição é frequentemente especificada por apenas uma lista de valores possíveis, juntamente com a probabilidade de cada um. Em alguns casos, é conveniente expressar a probabilidade em termos de uma fórmula. Para uma variável aleatória discreta X , com valores possíveis x_1, x_2, \dots, x_n , a função de probabilidade é uma função tal que:

$$\begin{aligned} f(x_i) &\geq 0 \\ \sum_{i=1}^n f(x_i) &= 1 \\ f(x_i) &= P(X = x_i) \end{aligned} \tag{A.1}$$

Algumas vezes é útil ser capaz de expressar probabilidades cumulativas, tais como $P(X \leq x)$, podendo essas probabilidades cumulativas serem usadas para encontrar a função de probabilidade de uma variável aleatória. Por conseguinte, o uso de probabilidades cumulativas é um método alternativo de descrever a distribuição de probabilidades de uma variável aleatória.

Em geral, para qualquer variável aleatória com valores possíveis x_1, x_2, \dots, x_n , os eventos $\{X = x_1\}, \{X = x_2\}, \dots, \{X = x_n\}$ são mutuamente excludentes. Logo, a função de distribuição cumulativa de uma variável aleatória discreta X , denotada por $F(x)$, é:

$$\begin{aligned} F(x) &= P(X \leq x) = \sum_{x_i \leq x} f(x_i) \\ 0 &\leq F(x) \leq 1 \\ \text{Se } x &\leq y, \text{ então } F(x) \leq F(y) \end{aligned} \tag{A.2}$$

Outras informações de importância são a média e a variância, números frequentemente usados para resumir uma distribuição de probabilidades para uma variável aleatória X . A média é uma medida do centro ou meio da distribuição de probabilidades e a variância é uma medida da dispersão ou variabilidade na distribuição. Essas duas medidas não identificam unicamente uma distribuição de probabilidades, ou seja, duas distribuições diferentes podem

ter a mesma média e variância. Além disso, essas medidas são simples e úteis sumários da distribuição de probabilidades de X .

A média ou valor esperado de uma variável aleatória discreta X , denotada(o) como μ ou $E(X)$, é:

$$\mu = E(X) = \sum xf(x) \quad (\text{A.3})$$

A variância de X , denotada por σ^2 ou $V(X)$, é:

$$\begin{aligned} \sigma^2 = V(X) &= E(X - \mu)^2 = \sum (x - \mu)^2 f(x) \\ &= \sum x^2 f(x) - 2\mu \sum xf(x) + \mu^2 \sum f(x) \\ &= \sum x^2 f(x) - 2\mu^2 + \mu^2 = \sum x^2 f(x) - \mu^2 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Logo, o desvio-padrão de X é $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$.

A média de uma variável aleatória X é uma média ponderada dos valores possíveis de X , com pesos iguais às probabilidades. A variância de uma variável aleatória X é uma medida de dispersão ou espalhamento nos valores possíveis para X . A variância de X usa o peso $f(x)$ como o multiplicador de cada desvio quadrático possível $(x_i - \mu)^2$.

Já o valor esperado de qualquer função $h(X)$ de uma variável aleatória discreta com função de probabilidade $f(x)$ é:

$$E[h(X)] = \sum h(x)f(x) \quad (\text{A.5})$$

A.2 – Variáveis Aleatórias Contínuas e Distribuições de Probabilidades

No caso de uma variável aleatória contínua somente terão interesse as probabilidades de que a variável aleatória assuma valores em dados intervalos. Tais probabilidades poderão ser determinadas com o conhecimento da função densidade de probabilidade da variável aleatória.

Uma função densidade de probabilidade $f(x)$ pode ser usada para descrever a distribuição de probabilidades de uma variável aleatória contínua X . Se um intervalo for provável de conter um valor para X , então sua probabilidade é grande e ela corresponde a valores grandes para $f(x)$. A probabilidade de X estar entre a e b é determinada pela integral

de $f(x)$ de a a b . Essa integral é a área sob a função densidade ao longo desse intervalo. Para uma variável aleatória contínua X , uma função densidade de probabilidade é uma função tal que:

$$\begin{aligned} f(x) &\geq 0 \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx &= 1 \\ P(a \leq X \leq b) &= \int_a^b f(x)dx \end{aligned} \tag{A.6}$$

Uma função densidade de probabilidade fornece uma descrição simples das probabilidades associadas a uma variável aleatória. Desde que $f(x)$ seja não-negativa e $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1$, então $0 \leq P(a \leq X \leq b) \leq 1$, de modo que as probabilidades sejam apropriadamente restritas. Uma função densidade de probabilidade é zero para valores de x que não possam ocorrer e é considerada igual a zero onde ela não for especificamente definida.

O importante é que $f(x)$ é usada para calcular uma área que representa a probabilidade de X ser um valor em $[a, b]$. Assim, para uma variável aleatória contínua X e qualquer valor x , $P(X = x) = 0$. Similarmente, uma vez que cada ponto tem probabilidade zero, não se necessita distinguir entre desigualdades, tais como $<$ ou \leq , para variáveis aleatórias contínuas, de modo que para qualquer x_1 e x_2 , $P(x_1 \leq X \leq x_2) = P(x_1 < X < x_2)$.

Assim como acontece com variáveis aleatórias discretas, a função de distribuição cumulativa também pode ser usada como método alternativo para descrever a distribuição de uma variável aleatória contínua, sendo definida por:

$$F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(u)du \tag{A.7}$$

para $-\infty < x < \infty$.

A média e a variância de uma variável aleatória contínua também são definidas similarmente a uma variável aleatória discreta, porém, a integração substitui a soma nas definições de variáveis discretas. Assim, sendo X uma variável aleatória contínua, com uma função densidade de probabilidade $f(x)$, a média ou valor esperado de X é:

$$\mu = E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx \quad (\text{A.8})$$

Já a variância de X é:

$$\sigma^2 = V(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 f(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x)dx - \mu^2 \quad (\text{A.9})$$

E o desvio-padrão de X é $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$. Além do desvio-padrão, uma outra medida de dispersão utilizada é o coeficiente de variação (CV). Este coeficiente é uma medida de dispersão relativa e representa o desvio-padrão expresso como porcentagem da média ($CV = \sigma/\mu$). Sua principal qualidade é a capacidade de comparação entre diferentes distribuições.

A.2.1 – Distribuição Normal

Segundo Montgomery e Runger (2011), o modelo mais largamente utilizado para a distribuição de uma variável aleatória é a distribuição normal. Toda vez que um experimento aleatório for replicado, a variável aleatória que for igual ao resultado médio (ou total) das réplicas tenderá a ter uma distribuição normal, à medida que o número de réplicas se torne grande. Este teorema é o chamado teorema do limite central e seu enunciado será trabalhado posteriormente.

Variáveis aleatórias com diferentes médias e variâncias podem ser modeladas pelas funções densidades de probabilidade normal, com escolhas apropriadas do centro e da largura da curva. O valor de $E(X) = \mu$ determina o centro da função densidade de probabilidade e o valor de $V(X) = \sigma^2$ determina a largura. Assim, a seguinte definição se aplica: uma variável aleatória X com função densidade de probabilidade

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad -\infty < x < \infty \quad (\text{A.10})$$

é uma variável aleatória normal, com parâmetros μ , em que $-\infty < \mu < \infty$, e $\sigma > 0$. Também $E(X) = \mu$ e $V(X) = \sigma^2$ e a notação $N(\mu, \sigma^2)$ é usada para denotar a distribuição, sendo a média e variância de X mostradas como iguais a μ e σ^2 , respectivamente.

Um resultado bastante útil da distribuição normal é que para qualquer variável aleatória normal:

$$\begin{aligned} P(\mu - \sigma < X < \mu + \sigma) &= 0,6827 \\ P(\mu - 2\sigma < X < \mu + 2\sigma) &= 0,9545 \\ P(\mu - 3\sigma < X < \mu + 3\sigma) &= 0,9973 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Além disso, da simetria de $f(x)$, $P(X > \mu) = P(X < \mu) = 0,5$. Como $f(x)$ é positiva para todo x , esse modelo atribui alguma probabilidade para cada intervalo da linha dos números reais. Entretanto, a função densidade de probabilidade diminui quando x se move para mais longe de μ . Consequentemente, a probabilidade de uma medida cair longe de μ é pequena.

Além de 3σ da média, a área sob a função densidade de probabilidade normal é bem pequena. Pelo fato de mais de 0,9973 da probabilidade de uma distribuição normal estar dentro do intervalo $(\mu - 3\sigma), (\mu + 3\sigma)$, 6σ é frequentemente referida como a largura de uma distribuição normal. Quando uma variável aleatória normal possui $\mu = 0$ e $\sigma^2 = 1$, esta é chamada de variável aleatória normal padrão e é denotada por Z . A função distribuição cumulativa de uma variável aleatória normal padrão é denotada por:

$$\Phi(z) = P(Z \leq z) \tag{A.12}$$

Funções de distribuição cumulativa para variáveis aleatórias normais são amplamente disponíveis em pacotes computacionais, assim como em tabelas estatísticas, conforme apresentado por Montgomery e Runger (2011). Para o caso arbitrário de uma variável aleatória normal padrão qualquer, utiliza-se o processo de padronização para o cálculo da sua probabilidade cumulativa. Assim, se X é uma variável aleatória normal com $E(X) = \mu$ e $V(X) = \sigma^2$, a variável aleatória

$$Z = \frac{X - \mu}{\sigma} \tag{A.13}$$

é uma variável aleatória normal, com $E(Z) = 0$ e $V(Z) = 1$. Ou seja, Z é uma variável aleatória normal padrão e representa a distância de X a partir de sua média em termos dos desvios-padrão. Assim, supondo que X seja uma variável aleatória com média μ e variância σ^2 :

$$P(X \leq x) = P\left(\frac{X - \mu}{\sigma} \leq \frac{x - \mu}{\sigma}\right) = P(Z \leq z) \quad (\text{A.14})$$

em que Z é uma variável aleatória normal padrão e $z = (x - \mu)/\sigma$ é o valor z obtido pela padronização de x .

Se uma amostra for coletada de uma população que tenha uma distribuição desconhecida de probabilidades, a distribuição amostral da média da amostra será aproximadamente normal, com média μ e variância σ^2/n , se o tamanho n da amostra for grande. Segundo Montgomery e Runger (2011), esse é um dos mais úteis teoremas em estatística, o chamado teorema do limite central, cujo enunciado é: se X_1, X_2, \dots, X_n for uma amostra aleatória de tamanho n , retirada de uma população (finita ou infinita), com média μ e variância finita σ^2 , e se \bar{X} for a média da amostra, então, a forma limite da distribuição de

$$Z = \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \quad (\text{A.15})$$

quando $n \rightarrow \infty$, é a distribuição normal padrão.

Em muitos casos de interesse prático, se $n \geq 30$, a aproximação normal será satisfatória, independentemente da forma da população. Se $n < 30$, o teorema do limite central funcionará, se a distribuição da população não for muito diferente da normal.

Uma vez encontrado o valor de Z , pode-se estimar o intervalo para a média μ da população, chamado intervalo de confiança. Não há como ter certeza de que o intervalo contém o parâmetro verdadeiro desconhecido da população, pois, somente uma amostra proveniente da população completa foi utilizada para calcular a estimativa pontual e o intervalo. No entanto, o intervalo de confiança é construído de modo que se tenha alta confiança de que ele contém o parâmetro desconhecido da população.

Uma estimativa de intervalo de confiança para μ é um intervalo da forma $l \leq \mu \leq u$, em que os extremos l e u são calculados a partir de dados da amostra. Uma vez que diferentes amostras produzirão diferentes valores de l e u , esses extremos são valores de variáveis aleatórias L e U , respectivamente. Suponha que se possa determinar valores de L e U , tal que a seguinte afirmação de probabilidade seja verdadeira:

$$P\{L \leq \mu \leq U\} = 1 - \alpha \quad (\text{A.16})$$

sendo $0 \leq \alpha \leq 1$.

Há uma probabilidade de $1 - \alpha$ de selecionar uma amostra para a qual o intervalo de confiança conterá o valor verdadeiro de μ . Uma vez que a amostra tenha sido selecionada, de modo que $X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_n = x_n$, e l e u calculados, o intervalo resultante de confiança para μ é: $l \leq \mu \leq u$.

Os extremos ou limites l e u são chamados de limites inferior e superior de confiança, respectivamente, e $1 - \alpha$ é chamado de coeficiente de confiança. Visto que $Z = (\bar{X} - \mu)/(\sigma/\sqrt{n})$ tem uma distribuição normal padrão, pode-se escrever:

$$P \left\{ \bar{X} - z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \bar{X} + z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right\} = 1 - \alpha \quad (\text{A.17})$$

Da consideração da Equação A.16, os limites inferior e superior das desigualdades na Equação A.17 são os limites inferior e superior de confiança, L e U , respectivamente. Isso leva à seguinte definição: se \bar{x} for a média amostral de uma amostra aleatória, de tamanho n , proveniente de uma população com variância conhecida σ^2 , um intervalo com $100(1 - \alpha)\%$ de confiança para μ é dado por:

$$\bar{x} - z_{\alpha/2} \sigma/\sqrt{n} \leq \mu \leq \bar{x} + z_{\alpha/2} \sigma/\sqrt{n} \quad (\text{A.18})$$

sendo $z_{\alpha/2}$ o ponto superior com $100\alpha/2\%$ da distribuição normal padrão.

A.2.2 – Distribuição t

Ao construir um intervalo de confiança bilateral para μ , se a variância populacional σ^2 for conhecida, sabe-se que $Z = (\bar{X} - \mu)/(\sigma/\sqrt{n})$ terá uma distribuição normal padrão. Isso é de alguma forma um cenário não-realista porque tipicamente a variância σ^2 é desconhecida, assim como a média μ . Suponha, então, que a população de interesse tenha uma distribuição normal, com média μ e variância σ^2 desconhecidas. Considere que uma amostra aleatória de tamanho n , como X_1, X_2, \dots, X_n , seja disponível e sejam \bar{X} e S^2 a média e a variância amostrais, respectivamente. Assim, quando σ^2 for desconhecida, um procedimento lógico será trocar σ pelo desvio-padrão da amostra S , de modo que a variável Z torna-se $T = (\bar{X} - \mu)/(S/\sqrt{n})$.

Se n for grande, a troca de σ por S terá pouco efeito na distribuição da variável aleatória T , de modo que se pode proceder com o uso do intervalo de confiança baseado na

distribuição normal. No entanto, n é geralmente pequeno na maioria dos problemas de engenharia e, nessa situação, a distribuição t tem de ser empregada para construir o intervalo de confiança. Desta forma, sendo X_1, X_2, \dots, X_n uma amostra aleatória proveniente de uma distribuição normal, com média μ a variância σ^2 desconhecidas, a variável aleatória:

$$T = \frac{\bar{X} - \mu}{S/\sqrt{n}} \quad (\text{A.19})$$

tem uma distribuição t , com $n-1$ graus de liberdade.

A função densidade de probabilidade de t é:

$$f(x) = \frac{\Gamma[(k+1)/2]}{\sqrt{\pi k} \Gamma(k/2)} \cdot \frac{1}{[(x^2/k) + 1]^{(k+1)/2}}, \quad -\infty < x < \infty \quad (\text{A.20})$$

sendo k o número de graus de liberdade. A média e a variância da distribuição t são zero e $k/(k-2)$ (para $k > 2$), respectivamente. A função gama (Γ) pode ser dada pela Equação A.21:

$$\Gamma(r) = \int_0^{+\infty} e^{-u} u^{r-1} du \quad (\text{A.21})$$

onde r é uma variável exponencial aleatória maior que zero e u é o intervalo de tempo no qual um dado evento ocorre.

À medida que o número de graus de liberdade $k \rightarrow \infty$, a forma limite da distribuição t é a distribuição normal padrão.

Também é possível calcular um intervalo de confiança de $100(1-\alpha)\%$ para a média de uma distribuição normal com variância desconhecida. Com $t_{\alpha/2, n-1}$ sendo o ponto superior $100\alpha/2\%$ da distribuição t , com $n-1$ graus de liberdade, pode-se escrever:

$$P \left\{ \bar{X} - t_{\alpha/2, n-1} \frac{S}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \bar{X} + t_{\alpha/2, n-1} \frac{S}{\sqrt{n}} \right\} = 1 - \alpha \quad (\text{A.22})$$

Isso conduz à seguinte definição de intervalo de confiança: se \bar{x} e s forem a média e o desvio-padrão de uma amostra aleatória proveniente de uma população normal com variância desconhecida σ^2 , um intervalo de confiança de $100(1-\alpha)\%$ para a média μ é dado por:

$$\bar{x} - t_{\alpha/2, n-1} s / \sqrt{n} \leq \mu \leq \bar{x} + t_{\alpha/2, n-1} s / \sqrt{n} \quad (\text{A.23})$$

sendo $t_{\alpha/2, n-1}$ o ponto superior $100\alpha/2\%$ da distribuição t , com $n-1$ graus de liberdade.

A.2.3 – Distribuição χ^2

Algumas vezes, são necessários intervalos de confiança para a variância ou desvio-padrão da população, sendo esses intervalos aplicáveis quando a população for modelada por uma distribuição normal. Se X_1, X_2, \dots, X_n for uma amostra aleatória proveniente de uma distribuição normal, com média μ a variância σ^2 e S^2 for a variância da amostra, a variável aleatória:

$$X^2 = \frac{(n-1)S^2}{\sigma^2} \quad (\text{A.24})$$

tem uma distribuição qui-quadrado (χ^2), com $n-1$ graus de liberdade.

A função densidade de probabilidade de uma variável aleatória χ^2 é:

$$f(x) = \frac{1}{2^{k/2} \Gamma(k/2)} x^{(k/2)-1} e^{-x/2}, \quad x > 0 \quad (\text{A.25})$$

em que k é o número de graus de liberdade. A média e a variância da distribuição χ^2 são k e $2k$, respectivamente.

À medida que o número de graus de liberdade $k \rightarrow \infty$, a forma limite da distribuição χ^2 é a distribuição normal.

Uma vez que a variável aleatória descrita na Equação A.24 é qui-quadrado (χ^2), com $n-1$ graus de liberdade, pode-se escrever:

$$P \left\{ \frac{(n-1)S^2}{\chi_{\alpha/2, n-1}^2} \leq \sigma^2 \leq \frac{(n-1)S^2}{\chi_{1-\alpha/2, n-1}^2} \right\} = 1 - \alpha \quad (\text{A.26})$$

Isso conduz à seguinte definição de intervalo de confiança para σ^2 : se s^2 for a variância amostral de uma amostra aleatória de n observações provenientes de uma população normal, com variância desconhecida σ^2 , então um intervalo de confiança de $100(1-\alpha)\%$ para σ^2 será:

$$\frac{(n-1)S^2}{\chi_{\alpha/2, n-1}^2} \leq \sigma^2 \leq \frac{(n-1)S^2}{\chi_{1-\alpha/2, n-1}^2} \quad (\text{A.27})$$

sendo $\chi_{\alpha/2, n-1}^2$ e $\chi_{1-\alpha/2, n-1}^2$ os pontos percentuais superior e inferior $100\alpha/2\%$ da distribuição qui-quadrado, com $n-1$ graus de liberdade, respectivamente.

Um intervalo de confiança para σ tem limites inferior e superior que são as raízes quadradas dos limites correspondentes na Equação A.27.

A.2.4 – Distribuição F

A variável aleatória F é definida como a razão de duas variáveis aleatórias independentes qui-quadrado, cada uma dividida pelo seu número de graus de liberdade, ou seja:

$$F = \frac{W/u}{Y/v} \quad (\text{A.28})$$

onde W e Y são variáveis aleatórias independentes qui-quadrado, com u e v graus de liberdade, respectivamente.

A função densidade de probabilidade de uma variável aleatória F é:

$$f(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{u+v}{2}\right)\left(\frac{u}{v}\right)^{u/2} x^{(u/2)-1}}{\Gamma\left(\frac{u}{2}\right)\Gamma\left(\frac{v}{2}\right)\left[\left(\frac{u}{v}\right)x+1\right]^{(u+v)/2}}, \quad 0 < x < \infty \quad (\text{A.29})$$

e segue a distribuição F com u graus de liberdade no numerador e v graus de liberdade no denominador.

A média e a variância da distribuição F são:

$$\mu = v/(v-2), \quad v > 2$$

e

(A.30)

$$\sigma^2 = \frac{2v^2(u+v-2)}{u(v-2)^2(v-4)}, \quad v > 4$$

A variável aleatória F é positiva e a distribuição é desviada para a direita e, apesar de parecer muito similar à distribuição qui-quadrado, os parâmetros u e v fornecem flexibilidade extra em relação à forma.

Se $f_{\alpha,u,v}$ for considerado como o ponto percentual da distribuição F , com u graus de liberdade no numerador e v graus de liberdade no denominador, a probabilidade de a variável aleatória F exceder esse valor é dada por:

$$P(F > f_{\alpha,u,v}) = \int_{f_{\alpha,u,v}}^{\infty} f(x)dx = \alpha \quad (\text{A.31})$$

Já os pontos percentuais na extremidade inferior podem ser encontrados como:

$$f_{1-\alpha,u,v} = \frac{1}{f_{\alpha,u,v}} \quad (\text{A.32})$$

A.3 – Testes de Hipóteses

Muitos problemas em engenharia requerem que se decida entre aceitar ou rejeitar uma afirmação acerca de algum parâmetro. A afirmação sobre os parâmetros de uma ou mais populações é chamada de hipótese estatística ou hipótese nula, normalmente representada por H_0 , e o procedimento de tomada de decisão sobre a hipótese é chamado de teste de hipóteses.

Uma vez que distribuições de probabilidades são utilizadas para representar populações, uma hipótese nula pode também ser pensada como uma afirmação acerca da distribuição de probabilidades de uma variável aleatória. A hipótese geralmente envolverá um ou mais parâmetros dessa distribuição.

Procedimentos de teste de hipóteses se apóiam no uso de informações de uma amostra aleatória proveniente da população de interesse. Se essa informação for consistente com a hipótese nula, esta não será rejeitada. Entretanto, se essa informação for inconsistente com a

hipótese nula, esta será considerada falsa e uma hipótese alternativa, normalmente representada por H_1 , será considerada.

Como na maioria dos problemas práticos é impossível examinar a população inteira, um procedimento de teste de hipóteses deve ser desenvolvido tendo-se em mente a probabilidade de alcançar uma conclusão errada. O primeiro erro é rejeitar a hipótese nula H_0 quando ela é verdadeira, chamado de erro tipo I. O segundo erro é aceitar a hipótese nula H_0 quando ela é falsa, chamado erro tipo II.

Pelo fato de a nossa decisão estar baseada em variáveis aleatórias, probabilidades podem ser associadas com os erros tipo I e tipo II. A probabilidade de ocorrência do erro tipo I é chamada de nível de significância ou erro α . Já a probabilidade de ocorrência do erro tipo II é chamada de erro β .

Geralmente, ao escolher os valores críticos, o analista controla diretamente a probabilidade α do erro tipo I, ou seja, a probabilidade de rejeitar erroneamente H_0 . Dessa forma, é possível considerar a rejeição da hipótese nula como uma conclusão forte.

Na construção de hipóteses, a hipótese nula será sempre estabelecida como uma igualdade de modo que a probabilidade α do erro tipo I possa ser controlada em um valor específico. Se a hipótese alternativa envolver alegações como maior que ou menor que, a hipótese alternativa unilateral é apropriada. Se a alegação for diferente de, uma alternativa bilateral deve ser usada.

Com relação aos resultados do teste de hipótese, o objetivo é estabelecer se a hipótese nula foi ou não rejeitada com um valor especificado ou nível de significância de α . Essa forma de conclusão é frequentemente inadequada, pois ela não dá ideia, ao tomador de decisão, se o valor calculado da estatística de teste estava apenas nas proximidades da região de rejeição ou se estava longe dessa região. Assim, com o intuito de evitar essa dificuldade, o valor p (*p-value*) é utilizado, sendo esta métrica considerada o menor nível de significância que conduz à rejeição da hipótese nula H_0 , com os dados fornecidos, ou seja, é o menor nível α em que os dados são significantes.

De modo geral, pode-se dizer que testar a hipótese envolve considerar uma amostra aleatória, computar uma estatística de teste a partir de dados amostrais e então usar a estatística de teste para tomar uma decisão a respeito da hipótese nula.

A.3.1 – Testes de Hipóteses para a Média com Variância Desconhecida

Suponha que se deseja testar as hipóteses:

$$\begin{aligned} H_0 : \mu &= \mu_0 \\ H_1 : \mu &\neq \mu_0 \end{aligned} \tag{A.33}$$

sendo μ_0 uma constante especificada.

Considerando que X_1, X_2, \dots, X_n é uma amostra aleatória proveniente de uma distribuição normal, a seguinte estatística de teste pode ser usada:

$$T_0 = \frac{\bar{X} - \mu_0}{S/\sqrt{n}} \tag{A.34}$$

Se a hipótese nula for verdadeira, T_0 terá uma distribuição t com $n-1$ graus de liberdade. Quando se conhece a distribuição da estatística de teste quando H_0 é verdadeira, pode-se localizar a região crítica para controlar a probabilidade do erro tipo I em um nível desejado. Nesse caso, os pontos percentuais $t - t_{\alpha/2, n-1}$ e $t_{\alpha/2, n-1}$ podem ser usados como os limites da região crítica, de modo que $H_0 : \mu = \mu_0$ seria rejeitada se $t_0 > t_{\alpha/2, n-1}$ ou se $t_0 < -t_{\alpha/2, n-1}$ sendo t_0 o valor observado da estatística de teste T_0 .

Para o caso das hipóteses alternativas unilaterais, $H_1 : \mu > \mu_0$ e $H_1 : \mu < \mu_0$, os critérios de rejeição são $t_0 > t_{\alpha, n-1}$ e $t_0 < -t_{\alpha, n-1}$, respectivamente.

A.3.2 – Testes de Hipóteses para a Razão de Duas Variâncias

Considerando que $X_{11}, X_{12}, \dots, X_{1n_1}$ é uma amostra aleatória proveniente de uma distribuição normal, com média μ_1 a variância σ_1^2 e que $X_{21}, X_{22}, \dots, X_{2n_2}$ é uma amostra aleatória proveniente de uma distribuição normal, com média μ_2 a variância σ_2^2 . Ainda, considerando que ambas as populações sejam independentes e que a variância das amostras seja, respectivamente, S_1^2 e S_2^2 , a razão:

$$F = \frac{S_1^2/\sigma_1^2}{S_2^2/\sigma_2^2} \tag{A.35}$$

tem uma distribuição F , com $n_1 - 1$ graus de liberdade no numerador e $n_2 - 1$ graus de liberdade no denominador, uma vez que $(n_1 - 1)S_1^2/\sigma_1^2$ é uma variável aleatória qui-quadrado

com $n_1 - 1$ graus de liberdade e $(n_2 - 1)S_2^2/\sigma_2^2$ é uma variável aleatória qui-quadrado com $n_2 - 1$ graus de liberdade.

Estando sujeita à hipótese nula $H_0 : \sigma_1^2 = \sigma_2^2$, a seguinte estatística de teste pode ser usada:

$$F_0 = \frac{S_1^2}{S_2^2} \tag{A.36}$$

Se a hipótese nula for verdadeira, F_0 terá uma distribuição F_{n_1-1, n_2-1} .

APÊNDICE – PRODUÇÃO BIBLIOGRÁFICA

J Braz. Soc. Mech. Sci. Eng.
DOI 10.1007/s40430-015-0355-z



TECHNICAL PAPER

Comparing DEA and principal component analysis in the multiobjective optimization of P-GMAW process

Luiz C. S. Rocha¹ · Anderson P. Paiva¹ · Emerson J. Paiva¹ · Pedro P. Balestrassi¹

Received: 27 October 2014 / Accepted: 2 April 2015
© The Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering 2015

Abstract The optimization of a multiresponse manufacturing process is not a trivial task. Many authors have tried to overcome the particular difficulties observed in this knowledge area exploring the powerful mechanisms present in a great deal of techniques like design of experiments, response surface methodology (RSM), principal component analysis (PCA) and mathematical programming. In this sense, this paper presents an alternative hybrid approach, combining RSM and data envelopment analysis (DEA), a popular linear programming technique useful to compare efficiency of decision making units. The basic idea is to optimize a set of multiple correlated responses of a well-defined manufacturing process using DEA as an algorithm for generated the singular objective function. This alternative proposal is compared to multivariate response surface methodology, a stochastic approach based on the PCA, a multivariate statistical technique usually employed with Taguchi multiresponse designs. Since a great number of manufacturing processes present sets of multiple correlated responses, a case study based in a five quality characteristics of a pulsed GMAW welding process

is here presented to illustrate the comparative performance of two proposals. The results indicate close responses for both methods. In spite of this, DEA was considered better because its results are larger in parameters that we wanted maximize and are smaller in parameters we wanted minimize. All established constraints were not violated in both cases of DEA.

Keywords Data envelopment analysis (DEA) · Multivariate response surface methodology (MRS) · Principal component analysis (PCA) · Generalized reduced gradient (GRG) · Pulsed gas metal arc welding (P-GMAW)

1 Introduction

Many manufacturing processes are naturally multivariate and although they are common in a manufacturing environment there is a lack of efficiency in the quality characteristics model building when traditional OLS (ordinary least squares) is employed. These kinds of processes are also specific, which imply that a unique model cannot be employed in every application, raw material or operational setup. Looking for the best process operation conditions the behavior of some desired features must be evaluated as a function of the factor increments that are, at first, considered significant. This is typically the experimental strategy.

Sometimes, the existence of a multiple quality characteristics sets involves the growing of a highly correlated structure among the dependent variables. There are a number of studies that evaluate processes with this particular feature, [1–4]. However, even though the responses present a highly correlated structure, there are no majors concerns by the authors regarding to the influence of such structures on the

Technical Editor: Fernando Alves Rochinha.

✉ Pedro P. Balestrassi
ppbalestrassi@gmail.com; pedro@unifei.edu.br
Luiz C. S. Rocha
luizrocham@hotmail.com
Anderson P. Paiva
andersonppaiva@unifei.edu.br
Emerson J. Paiva
emersonjpaiva@unifei.edu.br

¹ Institute of Production Engineering and Management, Federal University of Itajubá, Bps Avenue 1303, Itajubá, Minas Gerais 37500-188, Brazil



Entropy-Based weighting applied to normal boundary intersection approach: the vertical turning of martensitic gray cast iron piston rings case

Luiz Célio Souza Rocha^{*}, Anderson Paulo de Paiva, Pedro Paulo Balestrassi, Geremias Severino and Paulo Rotela Junior

Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Avenida Bps, 1303, 37500-188, Itajubá, Minas Gerais, Brazil.
^{*}Author for correspondence. E-mail: luizrochamg@hotmail.com

ABSTRACT. In practical situations, solving a given problem usually calls for the systematic and simultaneous analysis of more than one objective function. Hence, a worthwhile research question may be posed thus: In multiobjective optimization, what can facilitate the decision maker in choosing the best weighting? Thus, this study attempts to propose a method that can identify the optimal weights involved in a multiobjective formulation. Our method uses functions of Entropy and Global Percentage Error as selection criteria of optimal weights. To demonstrate its applicability, we employed this method to optimize the machining process for vertical turning martensitic gray cast iron piston rings, maximizing the productivity and the life of cutting tool and minimizing the cost, using feed rate and rotation of the cutting tool as the decision variables. The proposed optimization goals were achieved with feed rate = 0.35 mm rev⁻¹ and rotation = 248 rpm. Thus, the main contributions of this study are the proposal of a structured method, differentiated in relation to the techniques found in the literature, of identifying optimal weights for multiobjective problems and the possibility of viewing the optimal result on the Pareto frontier of the problem. This viewing possibility is very relevant information for managing processes more efficiently.

Keywords: pareto frontier, optimal weights, mixture design of experiments.

Ponderação baseada em Entropia aplicada à abordagem de interseção normal à fronteira: o caso do torneamento vertical de anéis de pistão de ferro fundido martensítico

RESUMO. Em situações práticas, normalmente se tem mais de uma função objetivo a ser analisada de maneira sistemática e simultânea para a resolução de determinado problema. Desta forma, surge a seguinte questão de pesquisa: como auxiliar o tomador de decisão na escolha da melhor ponderação ao se trabalhar com otimização multiobjetivo? O presente trabalho propõe um método que possa identificar os pesos ótimos envolvidos em uma formulação multiobjetivo utilizando as funções de Entropia e de Erro Percentual Global (EPG) como critérios de seleção. Empregou-se o método para otimizar o processo de torneamento vertical de anéis de pistão de ferro fundido cinzento martensítico, maximizando a produtividade e a vida da ferramenta de corte e minimizando o custo, usando como variáveis de decisão o avanço e a rotação da peça. Os objetivos de otimização propostos foram alcançados com avanço = 0,35 mm rot.⁻¹ e rotação = 248 rpm. Assim, as principais contribuições do presente trabalho foram a proposição de um método estruturado, diferenciado em relação às técnicas encontradas na literatura, para a identificação de pesos ótimos em problemas multiobjetivos e a possibilidade de visualização do resultado ótimo na fronteira de Pareto do problema, sendo esta última uma informação de grande relevância para uma gestão mais eficiente dos processos.

Palavras-chave: fronteira de pareto, pesos ótimos, arranjo de misturas.

Introduction

Optimization techniques, in recent years, have evolved greatly, finding wide application in various types of industries, mainly because making decision about complex problems involves process optimization and engineering design (HEJAZI

et al., 2014). They are now capable of solving ever larger and more complex problems, thanks to a new generation of powerful computers.

According to Rao (2009), optimization is the act, in any given circumstance, of obtaining the best result. In this context, the main purpose of decision making in industrial processes is to minimize the

Research Article

Entropy-Based Weighting for Multiobjective Optimization: An Application on Vertical Turning

Luiz Célio Souza Rocha,¹ Anderson Paulo de Paiva,¹ Pedro Paulo Balestrassi,¹ Geremias Severino,² and Paulo Rotela Junior¹

¹Institute of Production Engineering and Management, Federal University of Itajuba, BPS Avenue 1303, 37500-903 Itajuba, MG, Brazil

²Mahle Metal Leve S/A, Itajuba, MG, Brazil

Correspondence should be addressed to Paulo Rotela Junior; paulo.rotela@gmail.com

Received 15 May 2015; Revised 13 July 2015; Accepted 22 July 2015

Academic Editor: Giovanni Falsone

Copyright © 2015 Luiz Célio Souza Rocha et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

In practical situations, solving a given problem usually calls for the systematic and simultaneous analysis of more than one objective function. Hence, a worthwhile research question may be posed thus: In multiobjective optimization, what can facilitate for the decision maker choosing the best weighting? Thus, this study attempts to propose a method that can identify the optimal weights involved in a multiobjective formulation. The proposed method uses functions of Entropy and Global Percentage Error as selection criteria of optimal weights. To demonstrate its applicability, this method was employed to optimize the machining process for vertical turning, maximizing the productivity and the life of cutting tool, and minimizing the cost, using as the decision variables feed rate and rotation of the cutting tool. The proposed optimization goals were achieved with feed rate = 0.37 mm/rev and rotation = 250 rpm. Thus, the main contributions of this study are the proposal of a structured method, differentiated in relation to the techniques found in the literature, of identifying optimal weights for multiobjective problems and the possibility of viewing the optimal result on the Pareto frontier of the problem. This viewing possibility is very relevant information for the more efficient management of processes.

1. Introduction

As companies today face fierce and constant competition, managers are under increasing pressure to reduce their costs and improve the quality standards of products and processes. As part of their response to this demand, managers have pursued rigorous methods of decision making, including optimization methods [1].

In many practical fields, such as engineering design, scientific computing, social economy, and network communication, there exist a large number of complex optimization problems [2] and, because of this, optimization techniques, in recent years, have evolved greatly, finding wide application in various types of industries. They are now capable, thanks to a new generation of powerful computers, of solving ever larger and more complex problems.

According to [1], optimization is the act, in any given circumstance, of obtaining the best result. In this context,

the main purpose of decision making in industrial processes is to minimize the effort required to develop a specific task or to maximize the desired benefit. The effort required or the benefit desired in any practical situation can be expressed as a function of certain decision variables. This being the case, optimization can be defined as the process of finding the conditions that give the maximum or minimum value of a function [1]. This function is known as the objective function.

In practical situations, however, solving a given problem usually calls for the systematic and simultaneous analysis of more than one objective function giving rise to multiobjective optimization [3].

In multiobjective problems, it is very unlikely that all functions are minimized simultaneously by one optimal solution x^* . Indeed, the multiple objectives (m) have conflicts of interest [1]. What becomes of great relevance to these types of problems, according to [1], is the concept of a Pareto-optimal solution, also called a compromise solution.

Previsão da cotação do Café Arábica Tipo 6 utilizando o modelo de previsão ARIMA

Predicting price of Arabica Coffee Type 6 using the ARIMA forecasting model

Luiz Célio Souza Rocha (luizrochamg@hotmail.com, UNIFEI, Minas Gerais, Brasil)

- Rodovia Machado-Paraguaçu, km03, Santo Antônio, II, Minas Gerais

Leonardo Alves de Carvalho (lac_carvalho@hotmail.com, UNIFEI, Minas Gerais, Brasil)

Paulo Rotela Junior (paulo.rotela@gmail.com, UNIFEI, Minas Gerais, Brasil)

Anderson Paulo de Paiva (andersonppaiva@unifei.edu.br, UNIFEI, Minas Gerais, Brasil)

Victor Eduardo de Mello Valério (victor.dmv@gmail.com, UNIFEI, Minas Gerais, Brasil)

Resumo: *A atividade cafeeira no Brasil caracteriza-se por sua importância social, sendo o setor do agronegócio que mais emprega mão de obra, e econômica, apresentando participação expressiva na produção agrícola e refletindo positivamente na balança comercial. Algumas características da atividade cafeeira, como dependência de fatores climáticos, longos períodos que permanecem sem dar retorno, perecibilidade dos produtos e grande variabilidade dos preços no mercado físico e futuro, conferem a esta atividade um elevado risco em face do investimento efetuado. Assim, o estudo da previsão do preço do café pode auxiliar seus produtores na tomada de decisão em relação às propostas do mercado futuro, visando a minimização do risco. Nessa perspectiva, este artigo tem como objetivo encontrar um modelo econométrico de séries temporais, adequado à previsão do preço do Café Arábica Tipo 6 (saco de 60 kg) no Brasil, utilizando dados do mercado físico brasileiro, por meio do modelo ARIMA. O período da análise estende-se de setembro de 1996 a outubro de 2013, com periodicidade mensal, sendo utilizadas as cotações do último dia útil de cada mês, em dólares norte-americanos (US\$). Os dados foram coletados no CEPEA/ESALQ. De acordo com os resultados do estudo, o modelo apresentado é eficaz nas previsões, visto que obteve um baixo Erro Médio Absoluto Percentual. Faz-se importante ressaltar que o modelo é ainda mais eficiente quando utilizado para a previsão do primeiro período após o último dado histórico. Assim, o modelo pode ser utilizado como mecanismo de apoio à tomada de decisão na previsão de preços do café.*

Palavras-chave: Preços de commodities; Erro de previsão; Modelo Autorregressivo Integrado de Média Móvel.

Abstract: *The coffee industry in Brazil is characterized by its social importance, once the agribusiness sector is the one that employs more labor, and by its economic importance, with significant participation in agricultural production, reflecting positively on the trade balance. Some characteristics of the coffee activity, such as dependence on climatic factors, long periods without profits, perishable products and high variability of prices in the physical and future market, give this activity a high risk in the face of the investment made. Thus, the study of coffee price forecast can help producers in making decisions related to the future market, aiming to minimize the risk. From this perspective, this article aims to find an econometric time series model, suitable to forecast the price of Arabica Coffee Type 6 (bag of 60 kg) in Brazil, using the Brazilian physical market data through the ARIMA model. The period of*

The current issue and full text archive of this journal is available on Emerald Insight at:
www.emeraldinsight.com/0025-1747.htm

MD
53,8

Stochastic portfolio optimization using efficiency evaluation

Paulo Rotela Junior, Edson de Oliveira Pamplona,
 Luiz Célio Souza Rocha, Victor Eduardo de Mello Valerio and
 Anderson Paulo Paiva

*Institute of Production Engineering and Management,
 Federal University of Itajuba, Itajuba, Brazil*

1698

Received 17 November 2014
 Revised 7 May 2015
 Accepted 1 July 2015

Abstract

Purpose – The purpose of this paper is to analyze portfolios chosen using an efficiency evaluation that considers risk and uncertainty and optimizes the allocation of invested capital using the Sharpe approach.

Design/methodology/approach – The portfolios comprised shares on the Sao Paulo Stock Exchange. A chance-constrained data envelopment analysis stochastic optimization model was used, and return and variance were employed as input and output variables.

Findings – The model was shown to be viable. It reduced the search space and considered data randomness.

Originality/value – Three portfolios were proposed. The variation of the model's risk criterion fulfilled the requirements of investors with different attitudes to risk. The model proposed can be used as a support tool for stock investment decisions.

Keywords Financial management, Financial modelling, Stock markets, Assets management

Paper type Research paper

1. Introduction

Choosing portfolios involves allocating capital among a number of titles so that the investment generates the greatest return and minimizes risks, thus producing a return-to-risk ratio that is satisfactory for investors (Li *et al.*, 2012).

Fixed income funds and savings accounts have been losing their appeal. Investment options that are more profitable in the long term should attract investors over the coming years. Stock investments are becoming an alternative for diversification, as they can make a portfolio more profitable in the long term; this makes them a much better alternative than other financial instruments (Rotela *et al.*, 2014).

The Markowitz model, developed over 60 years ago (Markowitz, 1952), is a classic mean-variance approach that is still the main model used to allocate assets and manage portfolios. This model has led to new proposals (Tu and Zhou, 2011; Brodie *et al.*, 2009; Ditraglia and Gerlach, 2013; Zopounidis *et al.*, 2014).

Charnes *et al.* (1978) developed data envelopment analysis (DEA), which is used to evaluate and compare organizational units that use many different inputs to produce outputs over a specified period of time (Kuo *et al.*, 2010; Amirteimoori, 2011; Kao and Liu, 2014). This analysis has been amply discussed, and variations on it continue to be developed. Chen *et al.* (2013) and Silva *et al.* (2014) claim that fuzzy logic is already considered in some of them. Lertworasirikul *et al.* (2003) proposed a DEA model with



Management Decision
 Vol. 53 No. 8, 2015
 pp. 1698-1713
 © Emerald Group Publishing Limited
 0025-1747
 DOI 10.1108/MD-11-2014-0644

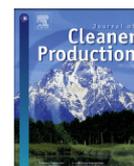
The authors would like to thank FAPEMIG, CNPq, and CAPES for financial and research support.



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Cleaner Production

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jclepro

Wind power generation: An impact analysis of incentive strategies for cleaner energy provision in Brazil



Giancarlo Aquila^a, Luiz Célio Souza Rocha^a, Paulo Rotela Junior^{b,*},
Edson de Oliveira Pamplona^a, Anderson Rodrigo de Queiroz^c, Anderson Paulo de Paiva^a

^a Institute of Production Engineering & Management, Federal University of Itajubá, Itajubá, MG, Brazil

^b Production Engineering Department, Federal University of Paraíba, João Pessoa, PB, Brazil

^c Department of Civil, Constr. and Environ. Engineering, North Carolina State University, Raleigh, NC, USA

ARTICLE INFO

Article history:

Received 12 April 2016

Received in revised form

28 July 2016

Accepted 29 July 2016

Available online 2 August 2016

Keywords:

Wind power

Stochastic analysis

Financial risk

Incentive strategies

Net present value

ABSTRACT

Brazil has adopted various strategies to encourage alternative renewable energy sources in pursuit of cleaner and sustainable energy production. To this end, strategies should support the reduction of the financial risk for potential investors in the renewable energy market. Therefore, this study aims to analyze the impact of incentive strategies on the financial risk of wind power generation projects in Brazil in different marketing environments. From a quantitative approach, using Monte Carlo Simulation in three scenarios, we evaluate the impact of funding from the National Development Bank and participation in the Clean Development Mechanism in the financial returns of the investor in a regulated contracting environment and free contracting environment, measured by the Net Present Value. We conduct a statistical analysis to find out if there were statistically significant differences in investor risk in each scenario. The main results of the study are as follows: the wind speed, the selling price of energy, and disbursement for the investment have the most significant impact on the financial return; the project viability probability is greater than 85% in all scenarios, regardless of the marketing environment; the regulated market is less risky for the producer than the free market, since there is a statistically significant difference in Net Present Value variances for all scenarios; in the regulated contracting environment, funding is critical to reducing risk; and carbon credit trading is not a suitable policy for providing financial security to renewable energy producers. Thus, we conclude that in Brazil the contracting of projects from auctions in the regulated contracting environment, with the support of the National Development Bank, has been important for neutralizing the producer's financial risks.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Renewable energy sources (RES) can reduce a society's dependence on fossil fuels, which in turn would also reduce greenhouse gas emissions (Shezan et al., 2016; Wesseh and Lin, 2016). Moreover, RES provides energy independence for industrialized countries by reducing exposure to risk associated with the high price volatility of fossil fuels and the risks and geopolitical uncertainties related to the dependence on imports of these resources (Faggioli et al., 2013).

Furthermore, according to Wong et al. (2010), in recent decades, governments of many countries have paid more attention to the issue of climate change. Consequently, several countries have committed to the reduction of greenhouse gas emissions, increasing the need to supply the industries with cleaner energy production from more sustainable sources (Ayodele et al., 2016; Wesseh and Lin, 2016; Ayoub and Yuji, 2012).

Abbreviations: RES, renewable energy sources; FIT, Feed-in Tariff; BNDES, National Development Bank; CDM, Clean Development Mechanism; ACR, regulated contracting environment; ACL, free contracting environment; CCEE, Electric Power Trading Chamber; ANEEL, Electric Power Regulatory Agency; PROINFA, Alternative Energy Sources Incentive Program; PLD, Differences Settlement Price; ONS, National Electric System Operator; SIN, National Transmission Network; MCS, Monte Carlo simulation; O&M, Operations & Maintenance; TUST, Tariff for Use of Transmission System; WACC, Weight Average Capital Cost; CAPM, Capital Asset Pricing Model; IRPJ, Income Tax for Corporations; CSLL, Social Contribution on Net Income.

* Corresponding author. Cidade Universitária, João Pessoa, PB, 58051-900, Brazil.

E-mail addresses: giancarlo.aquila@yahoo.com (G. Aquila), luizrochamg@hotmail.com (L.C.S. Rocha), paulo.rotela@gmail.com (P. Rotela Junior), pamplona@unifei.edu.br (E.O. Pamplona), arqueiroz@ncsu.edu (A.R. Queiroz), andersonppaiva@unifei.edu.br (A.P. Paiva).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.07.207>

0959-6526/© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.



Robust multiple criteria decision making applied to optimization of AISI H13 hardened steel turning with PCBN wiper tool

Luiz Célio Souza Rocha¹ · Anderson Paulo de Paiva¹ · Paulo Rotela Junior² · Pedro Paulo Balestrassi¹ · Paulo Henrique da Silva Campos¹

Received: 25 June 2016 / Accepted: 25 July 2016
© Springer-Verlag London 2016

Abstract Mathematically, each Pareto optimal point is an equally acceptable solution to a multiobjective optimization problem (MOP). However, the process of choosing a single preferred solution among all computed alternatives can be a difficult task because of a high cognitive effort required. Thus, the main objective of this work is to optimize the process of AISI H13 hardened steel turning with PCBN wiper tool using a robust multiple criteria decision making based on an entropic measure to choose the most preferred Pareto optimal point as the problem final solution. The responses of tool life (T), surface roughness parameter (Ra), and the ratio between material removal rate and cutting force (MRR/F_c) are modeled by using the response surface methodology (RSM), using as decision variables cutting speed (V_c), feed rate (f), and depth of cut (d). The normal boundary intersection (NBI) method along with the mixture design of experiments (MDE) are used to

optimize these responses simultaneously. The optimal turning process conditions obtained were judged satisfactory since that parameter values for cost, quality, and productivity are acceptable. Moreover, the study was able to demonstrate that the weights used in the multiobjective optimization process influence the prediction variance. From the variability point of view, the final solution obtained is the robust one, since it leads to a region of minimum variance, less variability, and greater reliability.

Keywords Hard turning · Wiper PCBN tool · Robust multiple criteria decision making · Normal boundary intersection · Entropic measure

1 Introduction

Precision hardened steel turning, i.e., turning process for materials which are hardened above 45 HRC [1–5], has been studied for more than 35 years [2] and, until the present moment, considerable attention has been given to its understanding [3–30]. This great number of studies was carried out on many materials and as the current state of knowledge in this field does not allow to generalize obtained results and to predict the behavior of other materials [5], the research on the machining of these materials is continued [11, 22].

When comparing with traditional grinding, the hard turning process shows some advantages such as the following: it reduces the manufacturing costs, reduces the setup time, it is flexible machining process, decreases production time, eliminates the cooling media, improves the surface integrity, and improves overall product quality [2–6, 8, 10, 21]. This process is widely used in the automotive, aerospace, gear, bearing, cam, forging, tools, and die industry [3, 5, 10, 21].

✉ Paulo Rotela Junior
paulo.rotela@gmail.com

Luiz Célio Souza Rocha
luizrochamg@hotmail.com

Anderson Paulo de Paiva
andersonppaiva@unifei.edu.br

Pedro Paulo Balestrassi
ppbalestrassi@gmail.com

Paulo Henrique da Silva Campos
paulohcampos@hotmail.com

¹ Institute of Production Engineering and Management - Federal University of Itajubá, Itajubá, MG, Brazil

² Department of Production Engineering, Federal University of Paraíba Cidade Universitária - Campus I, João Pessoa 58051-900, PB, Brazil



Contents lists available at ScienceDirect

Precision Engineering

journal homepage: www.elsevier.com/locate/precision

Robust weighting applied to optimization of AISI H13 hardened-steel turning process with ceramic wiper tool: A diversity-based approach

Luiz Célio Souza Rocha^{a,b}, Anderson Paulo de Paiva^b, Paulo Rotela Junior^{c,*},
Pedro Paulo Balestrassi^b, Paulo Henrique da Silva Campos^b, João Paulo Davim^d

^a Federal Institute of Education, Science and Technology – South of Minas Gerais, Machado, MG, Brazil

^b Institute of Production Engineering and Management, Federal University of Itajubá, Itajubá, MG, Brazil

^c Production Engineering Department, Federal University of Paraíba, João Pessoa, PB, Brazil

^d Department of Mechanical Engineering, University of Aveiro, Aveiro, Portugal

ARTICLE INFO

Article history:

Received 12 January 2017

Received in revised form 29 April 2017

Accepted 16 May 2017

Available online xxx

Keywords:

Wiper ceramic tool

Hard turning

Robust weighting

Diversity

Normal boundary intersection

Mixture design of experiments

Multiobjective optimization

ABSTRACT

A mixed ceramic is a type of cutting-tool material widely employed for machining hardened steels. The usage of a mixed ceramic along with a wiper geometry can help double the feed rate, thereby increasing productivity while keeping the surface roughness (R_a) as low as possible. Analyses of manufacturing processes, such as a machining process, show that the various possible controlled parameters can be modeled by multiobjective mathematical models to ensure their optimization. Hence, the aim of this study was to optimize a hard turning process using a robust weighting based on diversity to choose the final Pareto optimal solution of the multiobjective problem. The responses of the material removal rate (MRR), R_a parameter, and cutting force (F_c) were modeled by using the response surface methodology; in this methodology, decision variables, such as the cutting speed (V_c), feed rate (f), and depth of cut (d), are employed. The diversity index, as a decision-making criterion, proved to be useful in mapping the regions of minimum variance within the Pareto optimal responses obtained in the optimization process. Hence, the study demonstrates that the weights used in the multiobjective optimization process influence the prediction variance of the obtained response.

© 2017 Elsevier Inc. All rights reserved.

1. Introduction

Precision turning of hardened steel is a highly flexible, productive, and cost effective machining process for machining ferrous metal components, which are usually hardened over 45 HRC [1–3]. Hardened steels are widely employed in various fields of engineering owing to their high hardness, high strength, and good wear resistance [4]. The turning operation is performed using materials required for advanced tools, yielding significant benefits, such as a low surface roughness (R_a), high material removal rate (MRR), and short cutting time cycle [3,5]. As a result, hard turning is replacing grinding in many industrial applications [1,3,6,7].

Many types of cutting tools are used for turning hardened steels. A mixed ceramic (aluminum oxide along with TiC or TiN) is a type of cutting-tool material widely employed for machining hardened steels [8,9], particularly under dry cutting conditions and moderate cutting speeds ranging between 90 and 120 m/min [9]. The ceramic cutting tools are used to machine superhard materials, which are difficult to machine using conventional tool materials [10].

Furthermore, the optimum cutting speed employed while using the ceramic cutting tools is three to ten times higher than that employed when using normal cemented carbide tools with the same geometrical parameters; hence, the processing efficiency is higher [10]. Several scholars have conducted extensive studies on the development of ceramic cutting tools [10–16].

Some researchers who studied the influence of tool geometry proposed the use of tools having wiper geometry in order to improve the hard turning process [1,7,8,12,17]. Owing to their three radii geometries [1], such tools can double the feed rate, thereby increasing productivity while keeping the R_a as low as possible [1,7,17]. Fig. 1 shows the conventional and wiper (multi-radii) geometries.

* Corresponding author at: Production Engineering Department, Federal University of Paraíba, Cidade Universitária, s/n, João Pessoa, PB 58051-900, Brazil.

E-mail addresses: luizrochamg@hotmail.com (L.C.S. Rocha),

andersonppaiva@unifei.edu.br (A.P. de Paiva), paulo.rotela@gmail.com

(P. Rotela Junior), ppbalestrassi@gmail.com (P.P. Balestrassi),

paulohcampos@hotmail.com (P.H. da Silva Campos), pdavim@ua.pt (J.P. Davim).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.precisioneng.2017.05.011>

0141-6359/© 2017 Elsevier Inc. All rights reserved.

ARTIGOS EM CONGRESSOS - SBPO 2015**AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA SOB CONDIÇÕES DE RISCO E INCERTEZA NA OTIMIZAÇÃO DE PORTFÓLIOS****Paulo Rotela Junior**

Universidade Federal de Itajubá
Caixa Postal 50, CEP: 37500-903, Itajubá-MG
paulo.rotela@gmail.com

Edson de O Pamplona

Universidade Federal de Itajubá
Caixa Postal 50, CEP: 37500-903, Itajubá-MG
pamplona@unifei.edu.br

Luiz Célio S Rocha

Universidade Federal de Itajubá
Caixa Postal 50, CEP: 37500-903, Itajubá-MG
luizrochamg@hotmail.com

Victor E M Valério

Universidade Federal de Itajubá
Caixa Postal 50, CEP: 37500-903, Itajubá-MG
victor.dmv@gmail.com

Anderson P Paiva

Universidade Federal de Itajubá
Caixa Postal 50, CEP: 37500-903, Itajubá-MG
andersonppaiva@unifei.edu.br

Giancarlo Aquila

Universidade Federal de Itajubá
Caixa Postal 50, CEP: 37500-903, Itajubá-MG
giancarloaquila@ig.com.br

Marcelo Nunes Fonseca

Universidade Federal de Itajubá
Caixa Postal 50, CEP: 37500-903, Itajubá-MG
marcelonunes21@yahoo.com.br

RESUMO

Este artigo tem como objetivo analisar o comportamento de portfólios selecionados por meio da avaliação da eficiência, sob condições de risco e incerteza, de ações negociadas na Bolsa de Valores de São Paulo, e otimizar a alocação do capital investido utilizando a abordagem de Sharpe. Para isso, utilizou-se o modelo da Análise Envoltória de Dados associado à Programação Restringida por Chances, dando origem ao modelo de otimização estocástica Chance Constrained Data Envelopment Analysis (CCDEA), empregando retorno, variância e outros indicadores, como variáveis de entrada e saída. A utilização do modelo mostrou-se viável, permitindo a redução do espaço de busca, e ainda considerando a aleatoriedade dos dados. Foram propostos três portfólios, no qual a variação do critério de risco do modelo permitiu atender às

**MODIFICAÇÕES EM EFICIÊNCIA DE MÁQUINAS E SEU IMPACTO NA
PRODUTIVIDADE: AVALIAÇÃO ATRAVÉS DA SIMULAÇÃO A EVENTOS DISCRETOS**

Marcelo Nunes Fonseca

Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)
Av. BPS, 1303. Pinheirinho, Itajubá-MG
marcelonunes21@yahoo.com.br

Luiz Célio Souza Rocha

Instituto Federal do Sul de Minas (IFSULDEMINAS)
Rodovia Machado - Paraguaçu, km 3, s/n. Santo Antonio, Machado-MG
luizrochamg@hotmail.com

Giancarlo Aquila

Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)
Av. BPS, 1303. Pinheirinho, Itajubá-MG
giancarloaquila@ig.com.br

Edson de Oliveira Pamplona

Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)
Av. BPS, 1303. Pinheirinho, Itajubá-MG
pamplona@unifei.edu.br

Anderson Paulo de Paiva

Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)
Av. BPS, 1303. Pinheirinho, Itajubá-MG
andersonppaiva@unifei.edu.br

Victor Eduardo de Mello Valerio

Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)
Av. BPS, 1303. Pinheirinho, Itajubá-MG
victor.dmv@gmail.com

Paulo Rotela Junior

Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)
Av. BPS, 1303. Pinheirinho, Itajubá-MG
paulo.rotela@gmail.com

Bruno Monti Nardini

Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)
Av. BPS, 1303. Pinheirinho, Itajubá-MG
bmnardini@gmail.com

ARTIGOS EM CONGRESSOS - ENEGEP 2015

XXXV ENCONTRO NACIONAL DE ENGENHARIA DE PRODUÇÃO

Perspectivas Globais para a Engenharia de Produção

Fortaleza, CE, Brasil, 13 a 16 de outubro de 2015.

MÉTODO DE PONDERAÇÃO BASEADO EM ENTROPIA PARA OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO

LUIZ CELIO SOUZA ROCHA (UNIFEI)

luizrochamg@hotmail.com

Anderson Paulo de Paiva (UNIFEI)

andersonppaiva@yahoo.com.br

Pedro Paulo Balestrassi (UNIFEI)

ppbalestrassi@gmail.com

Paulo Rotela Junior (UNIFEI)

paulo.rotela@gmail.com

Edson de Oliveira Pamplona (UNIFEI)

pamplona@unifei.edu.br



Em situações práticas, normalmente se tem mais de uma função objetivo a ser analisada de maneira sistemática e simultânea para a resolução de determinado problema, levando à otimização multiobjetivo. Neste contexto, o tomador de decisão e suas informações de preferência apresentam papel fundamental, pois, a fim de definir a importância relativa de cada função objetivo, o tomador de decisão deve atribuir-lhes pesos diferentes. Desta forma, surge a seguinte questão de pesquisa: como auxiliar o tomador de decisão na escolha da melhor ponderação ao se trabalhar com otimização multiobjetivo? O presente trabalho busca propor um método que possa identificar os pesos ótimos envolvidos em uma formulação multiobjetivo, utilizando para tanto uma abordagem Normal Boundary Intersection (NBI) juntamente com projeto de experimento de misturas, tendo as funções de

ARTIGOS EM CONGRESSOS - ENANPAD 2015



XXXIX Encontro da ANPAD

Belo Horizonte / MG – 13 a 16 de setembro de 2015

Avaliação da Viabilidade Econômica de Projetos de Geração Domiciliar de Energia Eólica no Brasil

Autoria: Luiz Célio Souza Rocha, Giancarlo Aquila, Anderson Paulo de Paiva, Edson de Oliveira Pamplona, Paulo Rotela Júnior

Agradecimentos à FAPEMIG, ao CNPq, à CAPES e ao IFSULDEMINAS pelo apoio financeiro e incentivo à pesquisa.

Resumo

O presente estudo investiga a viabilidade econômica da instalação de microgeradores residenciais para energia eólica no Brasil, caracterizando-se por ser de natureza aplicada, com objetivo normativo, e abordagem quantitativa, tendo a modelagem e simulação como método de pesquisa. Para tanto, foi elaborada a análise de viabilidade econômica para a instalação de um aerogerador residencial diante do contexto brasileiro, considerando-se três cenários com diferentes velocidades médias de vento, sendo o primeiro cenário de alta velocidade, o segundo de baixa velocidade e o terceiro de velocidade intermediária. Foram realizadas 10.000 simulações em cada cenário, utilizando-se a Simulação de Monte Carlo para obter os possíveis resultados de Valor Presente Líquido para o projeto. Os resultados indicaram que existe alta probabilidade de o projeto se mostrar inviável nos três cenários, porém com diferentes percentuais. A análise de sensibilidade revelou que a velocidade do vento é essencial para esse tipo de investimento ser viável. Além disso, foi possível observar que o investimento e a parcela de capital de terceiros presente no investimento, também possuem relevância para a geração dos resultados de Valor Presente Líquido. Como conclusão, tem-se que a iniciativa da ANEEL para incentivar a instalação de microgeradores residenciais constitui-se em um primeiro passo visando a disseminação e consolidação de tecnologias de geração de energia limpa e que ações complementares são necessárias visando reduzir o risco enfrentado por aqueles que decidem investir na geração domiciliar de energia eólica no Brasil.

Palavras-chave: Simulação de Monte Carlo; Fontes de Energia Renovável; Microgeração de Energia; Valor Presente Líquido; Análise Estocástica.

1 – Introdução

Devido à necessidade de diminuir o impacto do consumo de energia proveniente de combustíveis fósseis, que predominam na matriz energética mundial, e seus possíveis danos ao meio ambiente, diversos países têm caminhado na direção da sustentabilidade e da eficiência energética. Segundo dados do *International Energy Agency – IEA* (2014) a produção de energia mundial era derivada, até 2014, de 67% de combustíveis fósseis, 11% oriundos de fonte nucleares e 22% de energia renovável, sendo que a produção de energia hidrelétrica é responsável por 16% do total da matriz energética mundial, o que equivale a 74% do total de energia oriunda de fontes renováveis. Diante desse desafio, as fontes de energia renovável (FER) têm recebido maior atenção dos governos nacionais.

Por energia renovável se entendem as formas de energia que ocorrem na natureza e que são produzidas continuamente em decorrência da energia absorvida do sol, a qual, para efeitos da humanidade, é suposta de duração infinita. Enquadram-se na definição as energias vindas diretamente do sol (como a fotovoltaica), do vento, da biomassa, do movimento das

EVENTOS INTERNACIONAIS - EURO 2015

DTU MANAGEMENT ENGINEERING
TECHNICAL UNIVERSITY OF DENMARK

Prof. Paulo Rotela Junior
Institute of Production Engineering and Management
Federal University of Itajuba
Av. BPS, 1303
37500-903 Itajubá
Minas Gerais
Brazil



Dear Prof. Paulo Rotela Junior, Professor Edson Pamplona, Prof. Luiz Celio Souza Rocha, Victor E M Valerio, Dr. Anderson P Paiva, Mr. Giancarlo Aquila, Mr. Marcelo Nunes Fonseca,

April 16, 2015

DIVISION OF MANAGEMENT SCIENCE

On behalf of the Scientific Program Committee, I am pleased to inform you that your abstract:

Stochastic Portfolio Optimization Using Efficiency Evaluation

DTU MANAGEMENT ENGINEERING
PRODUKTIONSTORVET 424
DK-2800 KONGENS LYNGBY
DENMARK

has been accepted for oral presentation at the 27th European Conference on Operational Research to be held in Glasgow, England, 12-15 July 2015. For further information about the Conference, please visit the conference webpage: <http://www.euro2015.org>.

TEL +45 45 25 48 00
FAX +45 45 93 34 35

We thank you for your contribution and look forward to your participation.

pisinger@man.dtu.dk
<http://www.man.dtu.dk>

Sincerely,

David Pisinger
Program Committee Chair
EURO-2015 Conference



27th European Conference on
Operational Research

12-15 July 2015
University of Strathclyde

EURO
The Association of European
Operational Research Societies



DTU MANAGEMENT ENGINEERING
TECHNICAL UNIVERSITY OF DENMARK

Prof. Luiz Celio Souza Rocha
Industrial Engineering and Management
Federal University of Itajuba
37500000 Itajuba
Minas Gerais
Brazil



Dear Prof. Luiz Celio Souza Rocha, Anderson Paulo Paiva, Pedro Paulo Balestrassi, Prof. Paulo Rotela Junior, Professor Edson Pamplona, Mr. Marcelo Nunes Fonseca, Mr. Giancarlo Aquila, Victor E M Valerio,

April 16, 2015

DIVISION OF MANAGEMENT SCIEN

On behalf of the Scientific Program Committee, I am pleased to inform you that your abstract:

Entropy-based weighting for multiobjective Optimization

DTU MANAGEMENT ENGINEERING
PRODUKTIONSTORVET 424
DK-2800 KONGENS LYNGBY
DENMARK

has been accepted for oral presentation at the 27th European Conference on Operational Research to be held in Glasgow, England, 12-15 July 2015. For further information about the Conference, please visit the conference webpage: <http://www.euro2015.org>.

TEL +45 45 25 48 00
FAX +45 45 93 34 35

We thank you for your contribution and look forward to your participation.

pisinger@man.dtu.dk
<http://www.man.dtu.dk>

Sincerely,

David Pisinger
Program Committee Chair
EURO-2015 Conference



**27th European Conference on
Operational Research**

12-15 July 2015
University of Strathclyde

EURO
The Association of European
Operational Research Societies



DTU MANAGEMENT ENGINEERING
TECHNICAL UNIVERSITY OF DENMARK

Mr. Giancarlo Aquila
Institute of Production Engineering and Management
Federal University of Itajubá
BPS Avenue, 1303
37500 903 Itajubá
Minas Gerais
Brazil



Dear Mr. Giancarlo Aquila, Prof. Luiz Celio Souza Rocha, Mr. Marcelo Nunes Fonseca, Professor Edson Pamplona, Anderson Paulo Paiva, Prof. Paulo Rotela Junior, Victor E M Valerio,

April 16, 2015

DIVISION OF MANAGEMENT SCIENCE

On behalf of the Scientific Program Committee, I am pleased to inform you that your abstract:

Changes in the machinery and their impact on the efficiency of productivity: evaluation through discrete event simulation

DTU MANAGEMENT ENGINEERING
PRODUKTIONSTORVET 424
DK-2800 KONGENS LYNGBY
DENMARK

has been accepted for oral presentation at the 27th European Conference on Operational Research to be held in Glasgow, England, 12-15 July 2015. For further information about the Conference, please visit the conference webpage: <http://www.euro2015.org>.

TEL +45 45 25 48 00
FAX +45 45 93 34 35

pisinger@man.dtu.dk
<http://www.man.dtu.dk>

We thank you for your contribution and look forward to your participation.

Sincerely,

David Pisinger
Program Committee Chair
EURO-2015 Conference



**27th European Conference on
Operational Research**

12-15 July 2015
University of Strathclyde

EURO
The Association of European
Operational Research Societies

