MINICURSO
Como planejar e otimizar experimentos ?

ARARANGUÁ - AGOSTO 2019

3. Como variar tudo ao mesmo tempo...

- Como determinar a influência de uma ou mais variáveis sobre a resposta de interesse...
- Em um experimento onde a resposta é função de T e C...
- Como a resposta (rendimento, produtividade...) depende destes fatores ?
- Objetivo: escolher as melhores condições de operação do sistema.

Planejamento de experimentos

- Escolha de fatores e de respostas de interesse
- Fatores: variáveis que o operador geralmente controla
- Respostas: variáveis de saída do sistema
- Objetivo: No exemplo ... Troca do catalisador
- Blocagem
- Aleatorização

Planejamento fatoriais em dois níveis

- Utilizados quando queremos saber se determinados fatores afetam a resposta
- Podem ser ampliados para planejamentos mais sofisticados
- Quando consideramos um grande número de fatores é possível que alguns deles não tenham influência na resposta
- Etapa inicial: triagem para decidir quais fatores são mais importantes

Fatorial 2^2

- N^k onde N= número de níveis e K= número de fatores
- Logo para um fatorial 2^2 temos 4 experimentos
- Exemplo: Avaliar o efeito da T 40 e 60 ºC e catalisadores A e B sobre o rendimento.
- Neste caso todas as quatro combinações possíveis são:
- 1) 40 ; A   3) 40 ; B
  2) 60 ; A   4) 60 ; B

Resultados...

Exp.	Temp.	Cat.	Rendimento (%)		Média (%)
1	40 (-)	A (-)	57	61	59
2	60 (+)	A (-)	92	88	90
3	40 (-)	B (+)	55	53	54
4	60 (+)	B (+)	66	70	68

- Obs: Notação (+) e (-)
- Usualmente atribui-se os sinais (+) e (-) para níveis superiores e inferiores das variáveis, respectivamente
- Ao aumentarmos a temperatura usando o catalisador A o rendimento médio passa de 59 a 90 aumentando 31%.
- No aumento da temperatura para o catalisador B o rendimento passa de 54 a 68 um aumento de 14%.

Cálculo dos efeitos

- EFEITOS PRINCIPAIS

$$T = a*[(\bar{y}_2 - \bar{y}_1) + (\bar{y}_4 - \bar{y}_3)]$$

- Efeito da temperatura
- T = (Rend 2 – Rend 1) + (Rend 4 – Rend3) /2
- T = (90 – 59) + (68 – 54) /2
- T = (31+14)/2 = 22,5 %
- O rendimento aumenta em média 22,5% quando a temperatura passa de 40 a 60ºC.
- a=1/2

Cálculo dos efeitos... EFEITO PRINCIPAL + EFEITO DE INTERAÇÃO

- Efeito do catalisador
- C = Rend med (+) - Rend med (-) /2
- C= (54+68)/2 - (59+90)/2 = -13,5%
- Efeito da interação TxC
- TC = rend med (+) - Rend med (-) /2
- TC = (59+68)/2 – (90+54)/2 = -8,5%

Erro experimental

- Como os ensaios foram realizados em duplicata podemos estimar o erro experimental.
- O que irá permitir a avaliação da significância estatística dos efeitos.
- A repetição precisa ser autêntica.
- Obs; Aleatorização: sorteio da ordem de realização dos ensaios
- Blocagem: sabemos previamente que o fator afeta a resposta assim ao definir o planejamento evitamos ou minimizamos confundimentos

Erro experimental

- Cada ensaio foi realizado 2 vezes, assim temos a estimativa da variância com um grau de liberdade

$$V(x) = s^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2$$

Erro experimental

Como as repetições são autênticas podemos tomar a variância desse par de valores como a variância do procedimento experimental.

- S^2= (8+8+2+8)/4 = 6,5

$$s^2 = \frac{(N_1 - 1)s_1^2 + \ldots + (N_4 - 1)s_4^2}{(N_1 - 1) + \ldots + (N_4 - 1)}$$

Erro padrão de um efeito

- Cálculo da variância do efeito

$$\sigma_y^2 = \sum_i a_i^2 \sigma_i^2$$

- Cada um dos efeitos calculados é uma combinação de quatro valores, com coeficientes a=1/2
- Temos: V (efeito) = (1/4+1/4+1/4+1/4)* σ^2

Erro padrão de um efeito

- Como a resposta Y é a média de duas observações independentes temos:

$$\sigma_{\bar{y}}^{2} = \frac{\sigma^{2}}{2}$$

- Usando a estimativa $s^2 = 6,5$ no lugar de σ^2 ; obtemos finalmente a estimativa do erro padrão de um efeito.
- $S(\text{efeito}) = (6,5\ /2)^{(1/2)} = 1,80\%$

Interpretação dos resultados...

- O erro padrão da média global é a metade do erro dos efeitos.
- Média global : 67,75%±0,9%
- Efeitos
- T = 22,5%±1,8%   C = -13,5%±1,8%
- TC = -8,5%±1,8%
- Para 95% de confiança; consideramos estatisticamente significativo, um efeito cujo valor for superior a t_4*s(efeito) = 2,776*1,8 = 5,0%

Interpretação dos resultados

- Os efeitos podem ser também avaliados utilizando-se uma ferramenta de qualidade:
- Diagrama de Pareto
- Gráfico de barras que permite avaliar em ordem de importância os efeitos.

Conclusões

- Todos os efeitos são significativos.
- Elevando a temperatura aumentamos o rendimento das reações.
- Trocando o catalisador diminuímos o rendimento da reação.
- Os maiores rendimentos são obtidos com o catalisador A e na temperatura de 60ºC.

O modelo estatístico...

- Codificação das variáveis originais: substituição dos valores por +1 e -1.
- Subtrai-se cada valor do valor médio e divide-se pela metade da amplitude.
- Assim, para a temperatura temos...

$$\frac{40-50}{(60-40)/2}=-1$$

O modelo estatístico...

- O modelo pode ser escrito como:
- Y (x1,x2) = *n* (x1,x2) + ε (x1,x2)
- Considerações sobre o modelo
- Erros seguem uma distribuição normal...com média igual zero, mesma variância,....
- *Nosso modelo postula que n (x1,x2) seria bem representado por :*
- *Bo + B 1x1 + B 2x2 + B 12x1x2*

O modelo estatístico...

- $Y(x1,x2) = \beta_o + \beta_1 x1 + \beta_2 x2 + \beta_{12} x1x2 + \varepsilon(x1,x2)$

- Do ponto de vista matemático devemos interpretá-la como uma equação que pode ser extrapolada.
- Para determinar os valores de βo, $\beta 1$, $\beta 2$ e $\beta 12$; teríamos que fazer um grande número de experimentos, já que são valores populacionais.

O modelo estatístico

- O que calculamos a partir dos resultados são estimativas dos valores populacionais, logo temos:

- $Y\ (x1,x2) = b_o + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2$

- *Onde os parâmetros b_o, b_1 , b_2 e b_{12}* são estimadores dos parâmetros populacionais.

Estimadores dos parâmetros populacionais

- Como a codificação cada efeito corresponde a duas unidades do fator considerado, no nosso exemplo...

- O efeito da temperatura é 22,5% , logo quando á passamos de 40 a 60ºC, temos que o efeito é de 11,25% por unidade de $x1$.

- Temos -6,75% para o efeito do catalisador ($x2$)

- Para o efeito da interação TC temos -4,25%

Estimadores dos parâmetros populacionais

- O parâmetro b_o é a média de todas as observações, logo, b_o= 67,75.

- Assim os estimadores dos parâmetros populacionais são:

- b_o= 67,75; b_1=11,25 ; b_2=-6,75 ; b_{12}=-4,25
- E o modelo será...

- **Y (x1,x2) = 67,75 + 11,25*x_1 - 6,75*x_2 - 4,25 * x_1* x_2**

- Assim, por exemplo, usando o modelo,para o ponto (+1,+1) temos que Y=68%

Análise de resíduos

- Como exemplo, os dois resíduos do ensaio 4 são iguais ao valor calculado menos o valor observado:

no primeiro ensaio temos : 66-68 = -2%

no segundo ensaio temos : 70-68 = 2%

- Os resíduos aparecem porque o modelo é ajustado a 8 observações.
- Caso tivessem sido 4 experimentos os resíduos seriam iguais a zero !!
- Resíduos altos podem indicar a presença de uma observação anômala ! !