MINICURSO
Como planejar e otimizar experimentos ?

ARARANGUÁ - AGOSTO 2019

6. Andando na Superfície de Resposta

- Técnica de otimização baseada em planejamentos fatoriais
- Etapas distintas: Modelagem e deslocamento
- Modelagem: ajuste de modelos simples (lineares ou quadráticos)
- Deslocamento: ocorre ao longo do caminho de máxima inclinação (trajetória na qual a resposta varia de forma mais pronunciada)

Exemplo

Avaliação do efeito de dois fatores no rendimento....

- Processo opera normalmente a 100 rpm e [50%] e Y=68%
- Proposição inicial: investigar a região em torno das condições habituais
- Temos um fatorial em dois níveis com ponto central
- Concentrações [45] e [55]; agitação 90 e 110

Resultados do planejamento

Ensaio	[%]	v(rpm)	x1	x2	Y(%)
1	45	90	-1	-1	69
2	55	90	1	-1	59
3	45	110	-1	1	78
4	55	110	1	1	67
5	50	100	0	0	68
6	50	100	0	0	66
7	50	100	0	0	69

- As repetições no ponto central permitem calcular o desvio padrão
- Suposições : Variância dos erros é constante; erros seguem uma distribuição normal.

	Coeficientes	Erro padrão (s)
Média	68,0	0,50
Conc. % (var 1)	-5,25	0,661
V rpm (var 2)	4,25	0,661
Int var1 x var2	-0,25	0,661

$$Y = 68,00 - 5,25 * x1 + 4,25 * x2$$

n = número total de observações; **p** = número de parâmetros do modelo

% explicado pelo modelo = SQ_R / SQ_T

Fonte de variação	Soma quadrática	Graus de liberdade	Média quadrática
Regressão	SQ_R	p-1	$MQ_R=SQ_R/p-1$
Resíduos	SQ_r	n-p	$MQ_r=s^2=SQr/n-p$
Total	SQ_T	n-1	

- Os resultados das considerações são reunidos na tabela chamada Tabela de Análise de variância ou simplesmente (ANOVA).

$$F_{p-1,n-p} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

Versão completa da ANOVA

Fonte de variação	Soma quadrática	Graus de liberdade	Média quadrática
Regressão	SQ_R	p-1	$MQ_R=SQ_R/(p-1)$
Resíduos	SQ_r	n-p	$MQr=SQ_r/(n-p)$
Falta de ajuste	SQ_{faj}	m-p	$MQ_{faj}=SQ_{faj}/(m-p)$
Erro Puro	SQ_{ep}	n-m	$MQ_{ep}= SQ_{ep}/(n-m)$
Total	SQ_T	n-1	

n = número total de observações; **m** = número de níveis distintos da variável independente; **p** = número de parâmetros do modelo % explicado pelo modelo = SQ_R / SQ_T

$$F_{m-p,n-m} = \frac{MQ_{faj}}{MQ_{ep}}$$

ANOVA do modelo

Fonte de variação	SQ	GL	Média Qua.
Regressão	182,5	2	91,25
Resíduos	5,5	4	1,38
Falta de Ajuste	0,83	2	0,42
Erro puro	4,67	2	2,33
TOTAL	188,00	6	

- $F_{2,4;0,05} = 6,94$ $F_{2,2} = 19,00$

- A partir dos dados obtidos podemos avaliar o seu ajuste a região experimental investigada.
- **Valor de F para falta de ajuste**
- $F = [SQ_{faj}/(m-p)]/[SQ_{ep}/(n-m)] = 0,42/2,33$
- $F=0,18$ (comparar com $F_{(2;2;0,05)} = 19,00$)
- O valor não é estatisticamente significativo e não há evidência de falta de ajuste.
- Outras informações são também obtidas:
- $R^2 * 100$ (variação explicada pelo modelo) = 97,07
- **Obs** : Valores altos significarão muita falta de ajuste

- A equação $Y = 68,00 - 5,25 * x1 + 4,25 * x2$

descreve um plano inclinado obliquamente em relação aos eixos.

- Logo maiores rendimentos experimentais devem estar em regiões com menores valores de x1 e maiores valores de x2.
- O progresso será mais rápido se o deslocamento for realizado ao longo de uma trajetória perpendicular às curvas de nível.

Caminho de máxima inclinação

- Para obtermos a máxima inclinação devemos fazer deslocamentos nos eixos x2 e x1 na proporção b2/b1.
- O caminho pode ser determinado algebricamente pelos coeficientes do modelo.
- b2/b1 = - 0,81
- Para cada unidade recuada no eixo x1 avançamos 0,81 unidades no eixo x2.

- As coordenadas ao longo de vários pontos ao longo dessa trajetória são determinadas seguindo um procedimento:
- 1- Escolhemos um dos coeficientes (o maior); tipicamente o seu deslocamento é de uma unidade .
- 2 – determinamos o deslocamento do(s) outro(s) fator(es)

Caminho de máxima inclinação

etapa	x1	x2	C(%)	V (rpm)	Y(%)
Centro	0	0,00	50	100	68,66,69
Centro +Δ	-1	0,81	45	108,1	77
Centro +2Δ	-2	1,62	40	116,2	86
Centro +3Δ	**-3**	**2,43**	**35**	**124,3**	**88**
Centro +4Δ	-4	3,24	30	132,4	80
Centro +5Δ	-5	4,05	25	140,5	70

- Podemos interpretar os resultados imaginando que a superfície é um morro.
- Escolhido o melhor ensaio podemos então fazer um planejamento idêntico ao primeiro.

Novo planejamento 2^2 com ponto central

Ensaio	C (%)	V (RPM)	X1	X2	Y (%)
1	30	115	-1	-1	86
2	40	115	1	-1	85
3	30	135	-1	1	78
4	40	135	1	1	84
5	35	125	0	0	90
6	35	125	0	0	88
7	35	125	0	0	89

ANOVA do modelo

Fonte de variação	SQ	GL	Média
Regressão	26,5	2	13,25
Resíduos	70,93	4	17,73
Falta de Ajuste	68,93	2	**34,46**
Erro puro	2,00	2	1,00
TOTAL	97,42	6	

- %variação explicada: 27,2

- A ANOVA mostra uma situação diferente.
- O valor de F subiu para 34,46.
- Como $F_{2;2;0,05} = 19,0$; podemos concluir que na região onde chegamos, o modelo linear já não descreve satisfatoriamente a superfície de resposta.

Localização do ponto ótimo

- Como o modelo linear já não descreve a região experimental, devemos partir para um modelo quadrático.
- Para duas variáveis temos:

$$\hat{y}_i = b_o + b_1 * x_1 + b_2 * x_2 + b_{11} * x_1^2 + b_{22} * x_x^2 + b_{12} * x_1 * x_2$$

- Este modelo tem seis parâmetros e nosso planejamento tem apenas cinco “níveis”.
- Logo é necessário ampliar o planejamento
- A ampliação pode ser feita de várias maneiras, sendo a mais comum a construção do chamado Planejamento em estrela.

Planejamento estrela

- Acrescentamos simplesmente ao planejamento inicial um planejamento idêntico, porém girado de 45 graus em relação a orientação de partida.

- Os novos pontos estão a uma distância $\sqrt{2}$

Unidades codificadas do ponto central

Resultados do planejamento estrela

Ensaio	C (%)	V (RPM)	X1	X2	Y (%)
1	30	115	-1	-1	86
2	40	115	1	-1	85
3	30	135	-1	1	78
4	40	135	1	1	84
5	35	125	0	0	90
6	35	125	0	0	88
7	35	125	0	0	89
8	28	125	-1,41	0	81
9	35	139	0	1,41	80
10	42	125	1,41	0	86
11	35	111	0	-1,41	87

ANOVA do modelo

Fonte de variação	SQ	GL	Média
Regressão	144,15	5	28,83
Resíduos	2,76	5	0,55
Falta de Ajuste	0,76	3	0,25
Erro puro	2,00	2	1,00
TOTAL	146,91	10	

- %variação explicada: 98,64
- $F_R = 28,83 / 0,55$ e $F_{fa} = 0,25/1,00$

- Modelo ajustado
- $Y = 89{,}00 + 1{,}51 \cdot x1 - 2{,}36 \cdot x2 - 2{,}81 \cdot x1^2 - 2{,}81 \cdot x2^2 + 1{,}75 \cdot x1 \cdot x2$

- O valor de F= 0,25 deve ser comparado com F(3,2,0,05) = 19,16
- Conclui-se que não há evidência de falta de ajuste para o modelo quadrático.
- Conclui-se também que a região investigada contém um ponto de máximo.

Planejamentos compostos centrais

- O planejamento estrela é um exemplo de planejamento composto central de dois fatores.
- Planejamento estrela = planejamento composto central

- Para um planejamento com K fatores temos:
- 1 – Uma parte fatorial (pontos de coordenadas -1 e +1
- 2 – Uma parte axial (pontos com coordenadas nulas exceto um valor de α ou – α)
- 3 – Um número de ensaios no ponto central

Considerações

- Valor de α:
- Pode ficar entre 1 e $(k)^{1/2}$
- Se k=3 α=1,68; se k=4 α=2,0
- Ponto central:
- 3 a 5 ensaios
- Fornece uma medida do erro puro
- Estabiliza a variância

Vantagens

- Os PE podem ser construídos de forma sequêncial:
- Inicialmente faz-se a parte fatorial com os pontos centrais.....
- AVALIA-SE OS RESULTADOS!!!
- Opção 1 : deslocamento
- Opção 2 : realizam-se os experimentos axiais.

- Obrigado pela atenção !

- jose.muller@ufsc.br