1 Introdução

Muitos produtos, tais como bolos, concretos, combustíveis e bebidas, são produzidos pela mistura de dois ou mais ingredientes. Experimentos com mistura são experimentos onde os fatores são os componentes de uma mistura e a soma das proporções dos componentes é sempre igual a 1.

Nesses casos, tem-se a necessidade de determinar quais as proporções de cada componente da mistura geram uma resposta desejada em função de uma variável que caracteriza a qualidade do produto. Como, por exemplo, no caso da produção de bolos, alguns dos componentes da mistura são ovos, leite e açúcar, dentre outros. A qualidade do bolo pode ser analisada através de variáveis como a consistência e o sabor, e é influenciada diretamente conforme as proporções dos ingredientes da mistura.

Quando não se sabe previamente quais as proporções ideais dos componentes, deve-se realizar diversos experimentos, variando as proporções dos componentes da mistura, chamados de variáveis independentes, analisando as observações referentes à variável de qualidade desejada. Estas observações são denominadas variáveis de respostas do experimento.

O Projeto de Experimentos ou *Design of Experiments (DOE)* é uma das técnicas disponíveis de análise para melhoria da qualidade e da produtividade, sendo de grande valia nos níveis de desenvolvimento de novos produtos e para o aperfeiçoamento de produtos e processos existentes.

Modelos matemáticos são utilizados para medir a influência das variáveis independentes sobre a variável de resposta, definindo-se uma relação entre elas. Com esses modelos pode-se estabelecer a combinação ótima dos níveis das variáveis independentes, tendo em vista a obtenção de um valor desejado da resposta, podendo corresponder a um valor máximo, um valor mínimo ou um valor alvo.

O Exemplo 1 (Seção 2.3) consiste na formulação de um xampu, cujo objetivo é estudar a relação entre a altura da espuma e os componentes da mistura,

de forma que a altura da espuma seja superior a um valor estabelecido. O experimento está detalhado em Cornell (2000) e Myers & Montgomery (2002). O xampu em estudo é composto pela mistura de três componentes.

O Exemplo 2 (Seção 3.3) consiste na formulação de um adesivo de aplicação aeroespacial, cujo objetivo é estudar a força exigida para separar os componentes unidos com o adesivo aeroespacial, de forma que tal força seja superior a um valor estabelecido. O experimento está detalhado em Myers & Montgomery (2002). O adesivo em estudo é composto pela mistura de três componentes e no processo produtivo são consideradas duas variáveis de processo.

O objetivo deste estudo é apresentar uma metodologia de seleção de modelos onde os modelos resultantes sejam melhores dos que os apresentados nos Exemplos 1 e 2. Esta metodologia de seleção de modelos em Experimentos com mistura e Mistura-Processo provou ser eficiente nos casos estudados.

Esta dissertação versa, portanto, na reunião das técnicas estatísticas necessárias ao planejamento e análise de experimentos com mistura, com ou sem variáveis de processo, e na apresentação e detalhamento da metodologia de seleção de modelos em Experimentos Mistura-Processo que utiliza um critério baseado na Teoria da Informação.

1.1. Justificativa do Trabalho

Os parâmetros de um produto em desenvolvimento, na maioria das vezes, são determinados em função de experiências anteriores ou gerados e aperfeiçoados à medida em que novas unidades estão sendo produzidas. Em outros casos, esses parâmetros podem ser decididos pela intuição de seus desenvolvedores. Contudo, essa tática pode permanecer por muito tempo sem que exista a garantia de um resultado satisfatório, e mesmo se houver, não será possível determinar se este resultado está otimizado, ou seja, se há alguma resposta melhor.

Com isso, as técnicas adotadas em Projeto de Experimentos mostram-se como um eficiente instrumento na otimização de produtos e processos, permitindo a redução do tempo e dos custos de desenvolvimento e um maior detalhamento

das informações, visando a otimização e minimização da variabilidade dos resultados.

A metodologia de seleção de modelos em Experimentos Mistura-Processo justifica o trabalho na medida em que ela visa contornar o problema de multicolinearidade, que é comum em Experimentos com Mistura onde os intervalos das proporções dos componentes são bem restritos. multicolinearidade pode tornar instáveis e bastante inflados os estimadores dos coeficientes do modelo. Com isso, certos termos do modelo podem não ser significativos na presença de alguns termos e ser significativos na presença de outros termos. Neste contexto, a seleção tradicional passo-a-passo pode ocasionar seleção arbitrária de variáveis que pertencem ao modelo.

1.2. Objetivos do Trabalho

1.2.1. Objetivo Principal

O objetivo principal deste trabalho é apresentar, detalhar e aplicar uma metodologia de seleção de modelos em Experimentos com Mistura e Mistura-Processo, que utiliza a combinação de um critério baseado na Teoria da Informação em duas etapas distintas.

1.2.2. Objetivos Secundários

Os objetivos secundários consistem na realização de uma síntese das técnicas estatísticas necessárias ao planejamento e análise de experimentos envolvendo misturas com ou sem a inclusão de variáveis de processo. Tais conceitos serão úteis no planejamento e na análise do experimento da espuma do xampu e do adesivo de aplicação aeroespacial, que foram utilizados na pesquisa

de seleção de modelos em Experimentos com Mistura e Mistura-Processo, respectivamente.

1.3. Estrutura do Trabalho

Esta dissertação está estruturada em 6 capítulos com os conteúdos apresentados na sequência.

No Capítulo 2 são apresentados tópicos para planejamento e análise de Experimentos com Mistura com uma aplicação real. Na Seção 2.1 são apresentados os modelos de Scheffé para Experimentos com Mistura. Na Seção 2.2 é apresentada uma síntese da teoria relacionada com a utilização de Pseudocomponentes. Na Seção 2.3 é descrito o experimento de um xampu, o qual é um Experimento com Mistura com restrições superiores e inferiores nas proporções de todos os três componentes. O objetivo do estudo é ajustar um modelo de regressão linear com respostas normais melhor do que o apresentado no Exemplo 1 e investigar as proporções dos componentes da mistura que maximizam o valor esperado da altura da espuma do xampu.

No Capítulo 3 são apresentados tópicos para planejamento e análise de Experimentos Mistura-Processo com uma aplicação real. Na Seção 3.1 é introduzido um modelo adequado para variáveis de processo. Na Seção 3.2 são descritos diferentes tipos de modelos para Experimentos Mistura-Processo. Nesta seção são apresentados os modelos provenientes de combinações aditivas e multiplicativas. Na Seção 3.3 é descrito um experimento de um adesivo de aplicação aeroespacial. O adesivo consiste de uma mistura de três componentes. Além das proporções dos componentes da mistura, são consideradas duas variáveis de processo. O objetivo do estudo é ajustar um modelo de regressão linear com respostas normais melhor do que o apresentado no Exemplo 2, e investigar as proporções dos componentes da mistura e os níveis das variáveis de processo que maximizam o valor esperado da força exigida para separar os componentes colados com o adesivo.

No Capítulo 4 é introduzida uma metodologia para seleção de modelos baseados na teoria da informação. Na Seção 4.1 é apresentada a justificativa para a utilização dos critérios de informação e são apresentados o critério de Akaike

(AIC) e o critério corrigido de Akaike (AIC_c). Na Seção 4.2 são apresentados os conceitos de PRESS (Predicted Residual Sum of Squares) e MSE (Mean Square Error), utilizados como um critério adicional de seleção de modelos. Na Seção 4.3 é apresentada uma metodologia de seleção de modelos em Experimentos com Mistura e Mistura-Processo. Na Seção 4.4 é apresentado o Estudo de Caso 1, que consiste em um Experimento com Mistura, onde é aplicada a metodologia descrita e selecionado um modelo. Na Seção 4.5 é apresentado o Estudo de Caso 2, que consiste em um Experimento Mistura-Processo, no qual é aplicada a metodologia descrita e selecionado um modelo.

No Capítulo 5 é apresentada a otimização da resposta levando em consideração os modelos obtidos no Capítulo 4. Na Seção 5.1 é apresentada a otimização da resposta para o Estudo de Caso 1, em que são comparados os valores que maximizam a resposta para o modelo apresentado no Capítulo 2 e para o modelo determinado por meio da metodologia proposta no Capítulo 4. Na Seção 5.2 é apresentada a otimização da resposta para o Estudo de Caso 2, no qual são comparados os valores que maximizam a resposta para o modelo apresentado no Capítulo 3 e para o modelo determinado por meio da metodologia proposta no Capítulo 4.

No Capítulo 6 constam a síntese, as conclusões e as sugestões de possíveis desdobramentos futuros deste trabalho.

1.4. Softwares Utilizados

• Design-Expert®

Software comercial desenvolvido e distribuído pela empresa Stat-Ease, o qual ajusta um modelo de regressão e oferece gráficos tridimensionais para a visualização da superfície de resposta e também gráficos de contorno interativos, além de um módulo de otimização da resposta capaz de buscar o ótimo diante de inúmeras respostas.

• Arc®

Software gratuito que acompanha o livro de Cook & Weisberg (1999), podendo também ser obtido no *site* do Departamento de Estatística da Universidade de

Minnesota, EUA. É excelente para a construção de gráficos para diagnóstico dos modelos.

• Matlab[®]

É um ambiente de computação numérica e uma linguagem de programação de quarta geração. Desenvolvido pela empresa MathWorks, o Matlab[®] permite manipulações de matrizes, construção de gráficos de funções e de dados, implementação de algoritmos, criação de interfaces de usuário e interface com programas escritos em outras linguagens.