

3 Experimentos Mistura-Processo

Em alguns experimentos podem existir outros fatores (temperatura, umidade relativa, etc), além das proporções dos componentes, que afetam as características da mistura. Esses fatores são denominados variáveis de processo, as quais são frequentemente incluídas no experimento na forma de projetos fatoriais. Assim sendo, é importante determinar não só as proporções ótimas dos componentes da mistura, mas também os níveis ótimos das variáveis de processo. Tais experimentos são denominados Experimentos Mistura-Processo (EMP).

Casos de EMP são apresentados no Capítulo 7 em Cornell (2002). Para uma introdução a EMP, Myers & Montgomery (2002) apresentam a Seção 13.3. Kowalski *et al.* (2002), Prescott (2004) e Sahni *et al.* (2009) analisaram a modelagem de EMP. Dal Bello (2010) e Dal Bello e Vieira (2011) apresentam uma metodologia para identificação de modelos próxima ao espírito deste trabalho, ressaltando que a originalidade deste trabalho consiste na utilização do critério de informação nas duas etapas da metodologia. Goldfarb *et al.* (2004a) propõem um método gráfico (gráfico de dispersão de variância) para o planejamento de EMP. O gráfico de dispersão de variância apresenta uma maneira visual de avaliar as propriedades da variância de um EMP dentro do espaço combinado de variáveis de mistura e de processo. Essa informação pode ser utilizada para selecionar experimentos com um perfil de variância aceitável. Goldfarb *et al.* (2003), Goldfarb *et al.* (2004b) e Chung *et al.* (2007) consideram o caso em que, além dos componentes da mistura e de variáveis de processo (fatores controlados), há fatores que não são controlados no processo produtivo (variáveis de ruído), embora possam ser controlados em experimentos de laboratório. Os autores tratam de modelos que permitem escolher os valores das variáveis controláveis (de mistura e de processo) que tornam o processo mais robusto em relação às variáveis de ruído.

3.1. Modelo para Variáveis de Processo

Um modelo adequado para r variáveis de processo z_1, z_2, \dots, z_r , envolvendo termos de segunda ordem é (Cornell, 2002):

$$Q(\boldsymbol{\delta}, \mathbf{z}) = \delta_0 + \sum_{l=1}^r \delta_l z_l + \sum_{l=1}^r \delta_{ll} z_l^2 + \sum_{l < m}^r \delta_{lm} z_l z_m \quad (3.1)$$

onde os δ 's são os coeficientes dos parâmetros do modelo para variáveis de processo.

O experimento para as variáveis de processo pode ser um projeto fatorial em dois ou mais níveis. Para incluir no modelo os termos com a variável z_j^2 é necessário um experimento com, pelo menos, três níveis de cada variável de processo e um número total de pontos que seja suficiente para ajustar e testar o modelo. Para ajustar um modelo sem a variável z_j^2 , considerando apenas os efeitos principais das variáveis de processo e interações entre elas, são necessários apenas dois níveis de cada variável (Myers & Montgomery, 2002).

3.2. Modelos de Experimentos com Mistura incluindo Variáveis de Processo

Em EMP, o planejamento experimental é estabelecido por meio de uma combinação do planejamento associado às variáveis de mistura com um planejamento associado às variáveis de processo, estabelecendo-se um planejamento de misturas para cada combinação dos níveis das variáveis de processo. Na Figura 5 é apresentado um planejamento experimental para um caso de mistura de três componentes e duas variáveis de processo. Os pontos dos triângulos representam o planejamento associado às variáveis de mistura e os 4 vértices do quadrado representam o planejamento associado às variáveis de processo.

Para representar problemas do tipo mistura-processo, pode-se combinar aditivamente qualquer dos modelos para mistura vistos no Capítulo 2 com o modelo para as variáveis de processo.

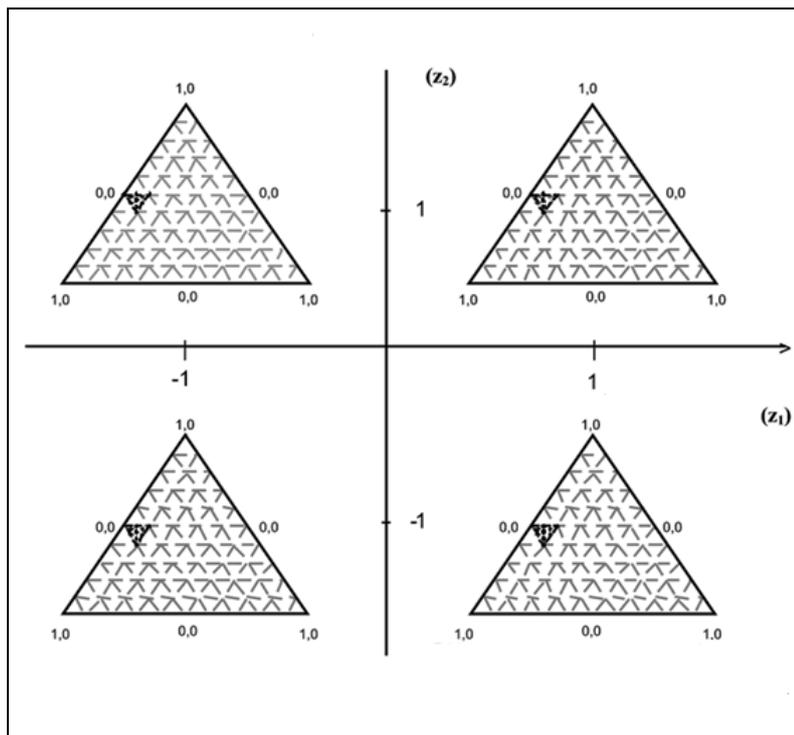


Figura 5 - Mistura de 3 componentes com 2 variáveis de processo

Seja $f(\mathbf{x})$ o modelo para mistura e $g(\mathbf{z})$ o modelo para as variáveis de processo apresentado na Equação (3.1). Então, o modelo aditivo combinado para o caso mistura-processo é (Prescott, 2004):

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{z}) \tag{3.2}$$

Por exemplo, a forma do modelo aditivo combinado, que inclui o modelo cúbico de Scheffé para mistura apresentado na Equação (2.3) e o modelo quadrático reduzido, considerando apenas os efeitos principais das variáveis de processo e interações entre elas, é:

$$C(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}, \mathbf{x}, \mathbf{z}) = \sum_{i=1}^q (\delta_0 + \beta_i) x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i < j < k} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{i < j} \beta_{i-j} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{l=1}^r \delta_l z_l + \sum_{l < m} \delta_{lm} z_l z_m \tag{3.3}$$

Note que o modelo combinado apresentado na Equação (3.3) não possui o termo independente proveniente do modelo para as variáveis de processo. O termo independente é eliminado do modelo combinado, uma vez que possui uma dependência linear com os termos $\beta_i x_i$, devido à restrição apresentada na Equação (2.1).

Modelos alternativos foram sugeridos, com a introdução de termos “cruzados” em $f(\mathbf{x})$ e $g(\mathbf{z})$. O modelo cruzado completo é (Prescott, 2004):

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = f(\mathbf{x}) \times g(\mathbf{z}) \tag{3.4}$$

A forma do modelo multiplicativo combinado, que inclui o modelo cúbico de Scheffé para mistura e apenas os efeitos principais das variáveis de processo, é

$$\begin{aligned} C(\boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}, \mathbf{z}) = & \sum_{i=1}^q \gamma_i^0 x_i + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij}^0 x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \gamma_{ijk}^0 x_i x_j x_k + \\ & + \sum_{i<j}^q \gamma_{i-j}^0 x_i x_j (x_i - x_j) + \\ & + \sum_{l=1}^r \left[\begin{aligned} & \sum_{i=1}^q \gamma_i^l x_i + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij}^l x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \gamma_{ijk}^l x_i x_j x_k + \\ & + \sum_{i<j}^q \gamma_{i-j}^l x_i x_j (x_i - x_j) \end{aligned} \right] z_l \end{aligned} \tag{3.5}$$

onde os γ 's são os parâmetros do modelo combinado de mistura, incluindo variáveis de processo. Os índices inferiores de γ referem-se às variáveis de mistura e os superiores referem-se às variáveis de processo.

Outra forma do modelo multiplicativo combinado é o que inclui o modelo cúbico de Scheffé para mistura e o modelo quadrático reduzido para as variáveis de processo. Este modelo combinado é representado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} C(\boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}, \mathbf{z}) = & \sum_{i=1}^q \gamma_i^l x_i + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij}^l x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \gamma_{ijk}^l x_i x_j x_k + \\ & + \sum_{i<j}^q \gamma_{i-j}^l x_i x_j (x_i - x_j) + \\ & + \sum_{l=1}^r \left[\begin{aligned} & \sum_{i=1}^q \gamma_i^l x_i + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij}^l x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \gamma_{ijk}^l x_i x_j x_k + \\ & + \sum_{i<j}^q \gamma_{i-j}^l x_i x_j (x_i - x_j) \end{aligned} \right] z_l + \tag{3.6} \\ & + \sum_{l<m}^r \left[\begin{aligned} & \sum_{i=1}^q \gamma_i^l x_i + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij}^l x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \gamma_{ijk}^l x_i x_j x_k + \\ & + \sum_{i<j}^q \gamma_{i-j}^l x_i x_j (x_i - x_j) \end{aligned} \right] z_l z_m \end{aligned}$$

Dal Bello (2010) propõe um modelo com uma combinação aditiva e multiplicativa simultaneamente do modelo cúbico de Scheffé para mistura com o modelo quadrático reduzido para as variáveis de processo. A forma do modelo completo é:

$$\begin{aligned}
 C(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\delta}, \mathbf{x}, \mathbf{z}) = & \sum_{i=1}^q \gamma_i^l x_i + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij}^l x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \gamma_{ijk}^l x_i x_j x_k + \\
 & + \sum_{i<j}^q \gamma_{i-j}^l x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{l=1}^r \delta_l z_l + \sum_{l<m}^r \delta_{lm} z_l z_m + \\
 & + \sum_{l=1}^r \left[\begin{aligned} & \sum_{i=1}^q \gamma_i^l x_i + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij}^l x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \gamma_{ijk}^l x_i x_j x_k + \\ & + \sum_{i<j}^q \gamma_{i-j}^l x_i x_j (x_i - x_j) \end{aligned} \right] z_l + \tag{3.7} \\
 & + \sum_{l<m}^r \left[\begin{aligned} & \sum_{i=1}^q \gamma_i^l x_i + \sum_{i<j}^q \gamma_{ij}^l x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \gamma_{ijk}^l x_i x_j x_k + \\ & + \sum_{i<j}^q \gamma_{i-j}^l x_i x_j (x_i - x_j) \end{aligned} \right] z_l z_m
 \end{aligned}$$

onde os γ 's são os parâmetros do modelo combinado de mistura, incluindo variáveis de processo, e δ 's são os parâmetros das variáveis de processo. Os índices inferiores de γ referem-se às variáveis de mistura e os superiores referem-se às variáveis de processo. Os índices inferiores de δ referem-se às variáveis de processo.

3.3. Exemplo 2

Este experimento é apresentado por Myers & Montgomery (2002) e servirá de base para o Estudo de Caso 2, apresentado na Seção 4.5. Trata-se da formulação de um adesivo de aplicação aeroespacial composto de uma resina (x_1) e dois reticuladores (x_2 e x_3). As restrições dos componentes da mistura são:

$$\begin{aligned}
 x_1 + x_2 + x_3 &= 1 \\
 0,70 \leq x_1 &\leq 0,90 \\
 0,05 \leq x_2 &\leq 0,10 \\
 0,05 \leq x_3 &\leq 0,20
 \end{aligned}$$

Temperatura (z_1) e a umidade relativa (z_2) são variáveis de processo que podem ser controladas. O experimentador considera apropriados dois níveis possíveis para as variáveis de processo, que são Temperatura (40°F e 100°F) e

Umidade Relativa (15% e 85%). Em L-pseudocomponentes e variáveis de processo codificadas, têm-se as seguintes restrições para o problema:

$$0,00 \leq v_1 \leq 1,00$$

$$0,00 \leq v_2 \leq 0,25$$

$$0,00 \leq v_3 \leq 0,75$$

$$z_1 = \pm 1,00$$

$$z_2 = \pm 1,00$$

Na Tabela 2 é apresentado o planejamento experimental do adesivo aeroespacial em L-pseudocomponentes, bem como as respostas dos experimentos.

Tabela 2 - Experimento da força do adesivo aeroespacial em L-pseudocomponentes

<i>Std</i>	<i>Run</i>	v_1	v_2	v_3	z_1	z_2	Força (lb)
1	26	1,000	0,000	0,000	-1,000	-1,000	44
2	6	1,000	0,000	0,000	1,000	-1,000	70
3	21	1,000	0,000	0,000	-1,000	1,000	19
4	8	1,000	0,000	0,000	1,000	1,000	33
5	5	0,000	0,250	0,750	-1,000	-1,000	48
6	2	0,000	0,250	0,750	1,000	-1,000	72
7	30	0,000	0,250	0,750	-1,000	1,000	32
8	24	0,000	0,250	0,750	1,000	1,000	59
9	17	0,250	0,000	0,750	-1,000	-1,000	32
10	23	0,250	0,000	0,750	1,000	-1,000	58
11	33	0,250	0,000	0,750	-1,000	1,000	21
12	9	0,250	0,000	0,750	1,000	1,000	38
13	11	0,750	0,250	0,000	-1,000	-1,000	51
14	20	0,750	0,250	0,000	1,000	-1,000	76
15	19	0,750	0,250	0,000	-1,000	1,000	22
16	22	0,750	0,250	0,000	1,000	1,000	49
17	10	0,500	0,125	0,375	-1,000	1,000	17
18	16	0,125	0,125	0,750	1,000	-1,000	69
19	32	0,125	0,125	0,750	-1,000	-1,000	40
20	3	0,375	0,250	0,375	-1,000	-1,000	37
21	7	0,500	0,125	0,375	1,000	1,000	46
22	29	0,375	0,250	0,375	-1,000	1,000	21
23	27	0,375	0,250	0,375	1,000	-1,000	82
24	34	0,375	0,250	0,375	1,000	1,000	43
25	15	0,625	0,000	0,375	-1,000	-1,000	32
26	1	0,625	0,000	0,375	1,000	-1,000	60
27	28	0,750	0,063	0,187	-1,000	1,000	14
28	4	0,750	0,063	0,187	1,000	1,000	38
29	14	0,626	0,187	0,187	-1,000	-1,000	45
30	13	0,375	0,250	0,375	-1,000	1,000	18
31	18	0,125	0,125	0,750	1,000	-1,000	70
32	25	0,750	0,250	0,000	-1,000	1,000	10
33	12	0,375	0,250	0,375	1,000	1,000	52
34	31	0,750	0,250	0,000	1,000	1,000	42

A variável de interesse é a força exigida para separar os componentes após o tempo de cura. Deseja-se que esta força seja superior a 40 libras.

Conforme apresentado na Seção 2.2, quando há a presença de restrições superiores e inferiores, recomenda-se a utilização de pseudocomponentes. No exemplo em questão foram utilizados os L-pseudocomponentes e as transformações conforme a Equação (2.5).

Na Figura 6 tem-se a representação gráfica do experimento.

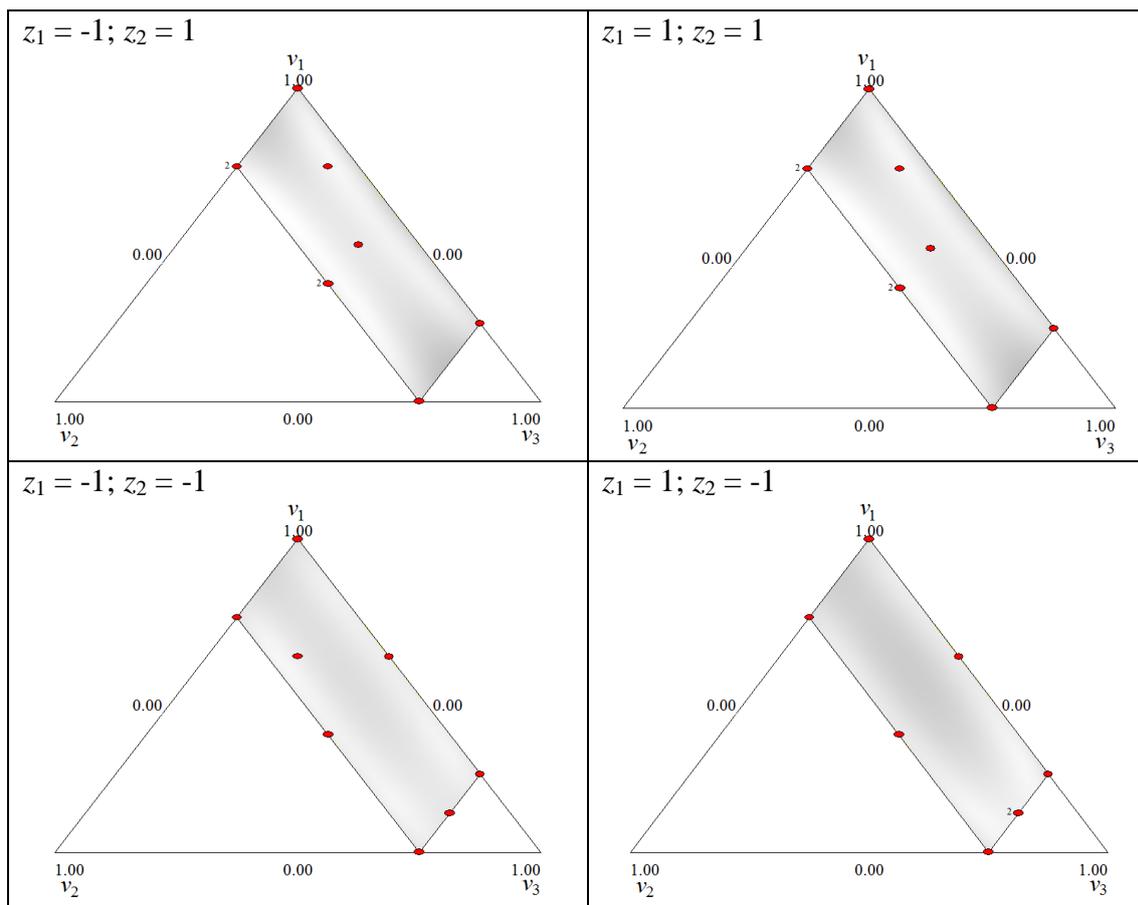


Figura 6 - Experimento do adesivo aeroespacial

O modelo selecionado por Myers & Montgomery (2002), em L-pseudocomponentes para as variáveis de mistura e com as variáveis de processo em fatores codificados, é apresentado na Equação (3.8):

$$\hat{y} = 40,66v_1 + 71,95v_2 + 46,16v_3 - 30,58v_1v_3 + 9,32v_1z_1 - 15,49v_1z_2 + 29,92v_2z_1 - 20,18v_2z_2 + 7,43v_3z_1 - 4,41v_3z_2 + 19,39v_1v_3z_1 - 2,60v_3z_1z_2 \quad (3.8)$$

Na Seção 4 será apresentada uma metodologia original de seleção de modelos que permite a obtenção de um modelo melhor do que o obtido por Myers & Montgomery (2002), apresentado na Equação (3.8).