

4 Critérios de Seleção e Metodologia Proposta

Nesta seção são expostos os critérios de seleção de modelos utilizados ao longo do trabalho e, por fim, será apresentada a metodologia proposta para seleção de modelos por meio de dois estudos de caso. O primeiro estudo é um experimento de mistura e o segundo é um experimento mistura-processo.

4.1. Critérios de Informação

A utilização de métodos de seleção de modelos baseado na teoria de informação constitui uma evolução da pesquisa relacionada a seleção de modelos. A modelagem de dados de EM, quando a região de definição dos componentes é muito restrita, pode tornar-se bastante complexa. Quando o campo de variação de uma variável é consideravelmente menor que o campo de variação de outras variáveis, pode ocorrer colinearidade forte entre alguns dos termos do modelo considerado. A colinearidade 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, os métodos de seleção *stepwise*, *forward* e *backward* podem ocasionar seleção arbitrária de variáveis que pertencem ao modelo (Harrell, 2001). Por conseguinte, a seleção do “melhor” modelo, partindo de um conjunto de modelos candidatos, pode ser bastante complexa. Uma alternativa é considerar todas as combinações possíveis de termos do modelo completo e de número de parâmetros e utilizar critérios de seleção de modelos baseados na teoria da informação. Entretanto, alguns casos podem apresentar um elevado número de parâmetros, aumentando o esforço computacional devido ao grande número de possibilidades de modelos.

Dal Bello (2010) apresenta e utiliza o critério de Akaike (*AIC*) (Akaike, 1973), o critério corrigido de Akaike (*AIC_c*) (Hurvich & Tsai, 1989), o critério

AIC_u (McQuarrie & Tsai, 1998), o critério introduzido por Hannan & Quinn (1979), HQ_c , e o conceito de indiferença de AIC_c (Burnham & Anderson, 2002). Dentre os critérios analisados por Dal Bello (2010), os critérios de AIC_c , seguido do conceito de indiferença de AIC_c , foram os que apresentaram melhores resultados, sendo, portanto, os critérios escolhidos para utilização nesta dissertação.

4.1.1. Critério de Akaike (AIC)

Um critério de informação que tem sido muito usado em seleção de modelos é o critério de Akaike (AIC) (Akaike, 1973):

$$AIC = -2 \sum_{i=1}^n \ln L(\hat{\mu}_i, y_i) + 2 \times (\text{número de parâmetros}) \quad (4.1)$$

onde y_i é o i -ésimo valor da resposta e $\hat{\mu}_i$ é a estimativa de y_i , quando se ajusta um modelo de p parâmetros por meio da maximização da Função de Log-Verossimilhança (FLV). O termo que se adiciona à FLV, chamado de função de penalidade, tem a finalidade de corrigir um viés proveniente da comparação de modelos de diferentes números de parâmetros. Entre os diversos modelos candidatos, deve ser escolhido aquele que apresentar o menor valor de AIC .

O AIC foi desenvolvido a partir da distância de Kullback-Leibler (K-L), a qual é uma distância entre o modelo verdadeiro, que geralmente é uma abstração, e o modelo candidato. Burnham & Anderson (2002) recomendam a utilização do AIC apenas quando $n/p \geq 40$. Considerando um caso de respostas com distribuição normal, a expressão do AIC pode ser simplificada, chegando à seguinte forma (Burnham & Anderson, 2002):

$$AIC = n \ln(\hat{\sigma}_p^2) + 2(p+1) \quad (4.2)$$

onde $\hat{\sigma}_p^2$ é o estimador de máxima verossimilhança da variância do erro:

$$\hat{\sigma}_p^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}_i)^2}{n} \quad (4.3)$$

Nota-se que o número de parâmetros na Equação (4.2) é igual a $(p + 1)$, já que o mesmo deve incluir as estimativas dos p parâmetros do modelo e a estimativa da variância (σ^2).

McQuarrie & Tsai (1998) dividem o AIC pelo número de observações (n) para expressá-lo de forma escalonada:

$$AIC = \ln(\hat{\sigma}_p^2) + \frac{2(p+1)}{n} \quad (4.4)$$

4.1.2. Critério AIC_c

Para a seleção de modelos nos casos de respostas com distribuição normal e pequenas amostras ($n/p < 40$), Hurvich & Tsai (1989) desenvolveram o critério AIC_c :

$$AIC_c = AIC + \frac{2(p+1)(p+2)}{n-p-2} \quad (4.5)$$

4.1.3. Conceito de Indiferença de AIC_c

Burnham & Anderson (2002) recomendam o cálculo das diferenças de AIC entre os modelos candidatos e o modelo que apresenta o menor valor de AIC (AIC_{min}):

$$\Delta_i = AIC_i - AIC_{min} \quad (4.6)$$

A metodologia de cálculo das diferenças de AIC também pode ser utilizada para o cálculo das diferenças de AIC_c . Os valores dos Δ_i são fáceis de interpretar e permitem uma rápida comparação entre os modelos candidatos. Quanto maior for o Δ_i menos plausível é que o modelo ajustado seja o melhor modelo de acordo com a distância de Kullback-Leibler (K-L). Burnham & Anderson (2002) afirmam que os modelos com $\Delta_i > 10$ podem ser omitidos em futuras considerações e os modelos com Δ_i entre 0 e 2 podem ser considerados indiferentes em relação ao modelo que apresentou menor valor de AIC_c .

4.2.
PRESS e MSE

O *PRESS* (*Predicted Residual Sum of Squares*) é uma medida de quão bem um modelo particular ajusta cada ponto do experimento (Allen, 1971). Inicialmente, os coeficientes do modelo são calculados omitindo a primeira observação. Este novo modelo é então utilizado para estimar a primeira observação e calcular o respectivo resíduo. Este procedimento é repetido para cada observação e calcula-se a soma dos quadrados dos resíduos. Sem considerar a *i*-ésima observação, calcula-se a diferença entre o valor real, y_i , e previsto, $\hat{y}_{i,-1}$, utilizando $(n - 1)$ observações:

$$e_{i,-1} = y_i - \hat{y}_{i,-1} \tag{4.7}$$

Pode-se mostrar que (Myers & Montgomery, 2002):

$$e_{i,-1} = \frac{e_i}{1 - h_{ii}} \tag{4.8}$$

onde $e_i = y_i - \hat{y}_i$ e h_{ii} são os elementos da diagonal da matriz chapéu $\mathbf{H} = \mathbf{W}(\mathbf{W} \mathbf{W})^{-1} \mathbf{W}$, onde \mathbf{W} é a matriz das variáveis regressoras. O modelo geral, combinando variáveis de mistura e variáveis de processo, é representado na forma matricial na Equação (4.9):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W} \\ w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1p} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2p} \\ w_{31} & w_{32} & \cdots & w_{3p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{n1} & w_{n2} & \cdots & w_{np} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} \\ \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \tag{4.9}$$

onde \mathbf{W} é uma matriz $(n \times p)$, n é o número de observações do experimento e p é o número de parâmetros do modelo, cujos elementos são as proporções dos componentes da mistura, x_i , os níveis das variáveis de processo, z_i , e funções de x_i e z_i , tais como interações.

Para n observações, \mathbf{y} é um vetor $(n \times 1)$ das observações, $\boldsymbol{\beta}$ é um vetor $(p \times 1)$ dos coeficientes e $\boldsymbol{\varepsilon}$ é um vetor $(n \times 1)$ dos erros aleatórios. No modelo linear clássico, $\boldsymbol{\varepsilon}$ é considerado com distribuição normal multivariada, ou seja,

$\varepsilon \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{I}\sigma^2)$, onde $\mathbf{0}$ é um vetor de zeros e \mathbf{I} é um vetor de uns, ambos de dimensões n .

Com isso, tem-se que (Allen, 1971):

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (e_{i,-1})^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{e_i}{1-h_{ii}} \right)^2 \quad (4.10)$$

Nota-se que, quando a alavancagem (*leverage*) de alguns pontos é igual a 1 ($h_{ii} = 1$), o *PRESS* é indefinido. A alavancagem é um valor entre 0 e 1 e indica o potencial de um ponto experimental de influenciar o ajuste do modelo. A alavancagem igual a 1 significa que o valor ajustado será forçado a ser exatamente igual ao valor observado, ou seja, o resíduo é igual a zero. A soma dos valores de alavancagem de todas as observações é igual ao número de parâmetros (p) ajustados pelo modelo. Portanto, a alavancagem média é igual a p/n , sendo n o número de observações. Deve-se ter atenção com valores de alavancagem maiores do que $2p/n$. Um ponto com alavancagem alta deve ser evitado, pois se houver algum erro inesperado no ponto, tal erro poderá influenciar fortemente o ajuste do modelo.

O *MSE* (*Mean Square Error*) é calculado por (Myers & Montgomery, 2002):

$$MSE = \frac{SSE}{n-p} \quad (4.11)$$

onde *SSE* é a soma dos quadrados dos resíduos, definida da seguinte forma:

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4.12)$$

4.3. Metodologia Proposta

A metodologia proposta é constituída por duas etapas. Na primeira, para os casos de EM, utiliza-se um modelo de Scheffé cúbico completo (permite uma maior opção de parâmetros), apresentado na Equação (2.3). Para os casos de EMP, utiliza-se um modelo completo combinado, apresentado na Equação (3.7). Uma vez definidos os parâmetros candidatos do modelo, segue-se com a seleção dos termos do modelo a ser escolhido segundo o critério de *AIC_c*. Foi elaborada

uma rotina em Matlab[®] para calcular o AIC_c para todos os modelos candidatos e selecionar o modelo que apresentasse o menor valor de AIC_c . Em seguida, utiliza-se o Conceito de Indiferença de AIC_c entre os modelos candidatos e o modelo que apresentara o menor valor de AIC_c , sendo selecionados os modelos considerados indiferentes. Analisando os modelos considerados indiferentes, seleciona-se um modelo baseado nos valores de $PRESS$ e MSE , tendo em vista que estas estatísticas têm sido utilizadas para comparação e seleção de modelos. Esse modelo selecionado será considerado o Modelo Base e será utilizado na segunda etapa.

A segunda etapa da metodologia consiste em selecionar um modelo, levando em consideração, além dos termos do Modelo Base determinado na primeira etapa, todos os termos equivalentes ao modelo. Os termos equivalentes são obtidos com a restrição de EM apresentada na Equação (2.1). Por exemplo, o termo v_1v_2 é equivalente ao termo $v_1(1 - v_1 - v_3)$ ou ao termo $(1 - v_2 - v_3)v_2$.

Uma vez conhecidos todos os termos candidatos do modelo (termos do Modelo Base e termos equivalentes), utiliza-se novamente o critério de AIC_c . Foi elaborada uma rotina em Matlab[®] para calcular o AIC_c para todos os modelos candidatos e selecionar o modelo que apresentasse o menor valor de AIC_c . Em seguida, utiliza-se o Conceito de Indiferença de AIC_c entre os modelos candidatos e o modelo que apresentara o menor valor de AIC_c , sendo selecionados os modelos considerados indiferentes. Analisando os modelos considerados indiferentes, seleciona-se um modelo baseado nos valores de $PRESS$ e MSE .

A seguir, a metodologia proposta será ilustrada por meio de dois estudos de casos.

4.4. Estudo de Caso 1

O primeiro estudo de caso é um problema proposto por Cornell (2000) e Myers & Montgomery (2002) e que foi apresentado na Seção 2.3.

Todos os parâmetros candidatos para o EM são os do Modelo Cúbico de Scheffé completo, apresentado na Equação (2.3). De posse de todos os parâmetros candidatos, calculou-se o valor mínimo de AIC_c em função do número de parâmetros, partindo de um modelo de 3 parâmetros, com incremento de 1

parâmetro a cada passo. Na Tabela 3 e no gráfico da Figura 7 é apresentada a evolução do valor mínimo de AIC_c em função do número de parâmetros do modelo.

O cálculo do valor mínimo de AIC_c só pode ser efetuado até $p = 9$, tendo em vista que, das 13 observações do experimento, 4 observações são replicações, conforme a Tabela 1. Com isso, foram selecionados 9 pontos experimentais distintos e não permitindo ajustar modelos com mais de 9 parâmetros.

Tabela 3 - p versus $\min[AIC_c(p)]$

| p | $\min[AIC_c(p)]$ |
|-----|------------------|
| 3 | 72,9892 |
| 4 | 71,7999 |
| 5 | 69,4111 |
| 6 | 65,2501 |
| 7 | 80,0394 |
| 8 | 105,4234 |
| 9 | 157,4024 |

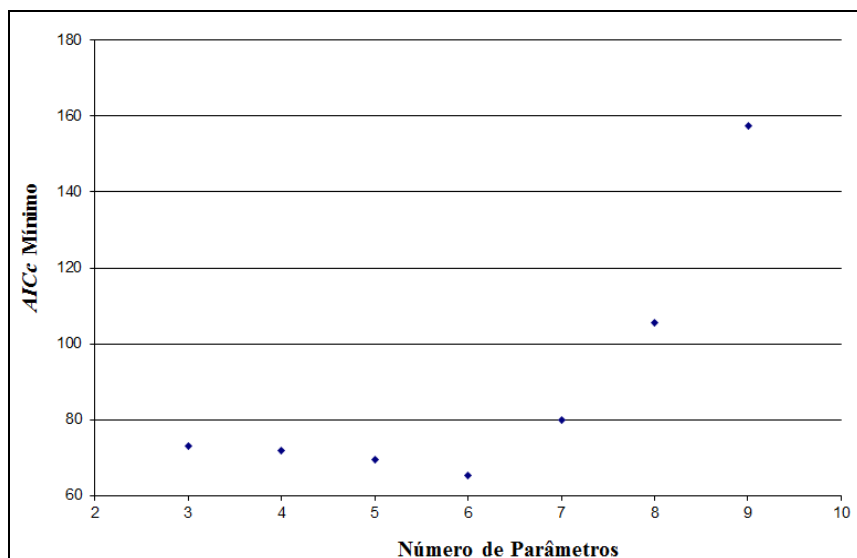


Figura 7 - AIC_c mínimo em função do número de parâmetros

De acordo com o critério AIC_c o modelo selecionado foi o seguinte:

$$\hat{y} = 145,89v_1 + 53,69v_2 + 175,89v_3 + 485,98v_1v_2v_3 + 353,65v_1v_2(v_1 - v_2) + 190,38v_1v_3(v_1 - v_3) \tag{4.13}$$

Após a determinação e armazenamento dos valores de AIC_c de todos os modelos, foi possível calcular os valores das diferenças de AIC_c (Δ_i), conforme Equação (4.6), e selecionar previamente os modelos considerados indiferentes em

relação ao Modelo (4.13), ou seja, aqueles modelos que apresentaram um Δ_i entre 0 e 2.

Na Tabela 4 são apresentados os termos selecionados dos modelos considerados indiferentes, bem como os respectivos valores de AIC_c , $PRESS$ e MSE . Dentre todos os modelos considerados indiferentes apresentados na Tabela 4, o modelo que apresentou menores $PRESS$ (413,22) e MSE (17,09) foi o modelo M4, que é o Modelo (4.13). Isto faz com que seja pertinente a escolha do modelo M4, agora denominado de Modelo Base (4.13).

Tabela 4 - Modelos indiferentes (M1 a M4)

| Terms | M1 | M2 | M3 | M4 |
|---------------------|--------|--------|--------|--------|
| v_1 | √ | √ | √ | √ |
| v_2 | √ | √ | √ | √ |
| v_3 | √ | √ | √ | √ |
| v_1v_2 | √ | √ | | |
| v_1v_3 | √ | | √ | |
| v_2v_3 | | √ | √ | |
| $v_1v_2v_3$ | | | | √ |
| $v_1v_2(v_1 - v_2)$ | √ | | √ | √ |
| $v_1v_3(v_1 - v_3)$ | | √ | | √ |
| AIC_c | 66,05 | 65,19 | 65,71 | 65,25 |
| $PRESS$ | 457,92 | 453,39 | 454,97 | 413,22 |
| MSE | 18,17 | 18,37 | 17,70 | 17,09 |

Na Tabela 5 são apresentados os resultados do teste t para o Modelo (4.13). Analisando a coluna “ p -valor” da Tabela 5, pode-se concluir que todos os termos são significativos a um nível de confiança de 99,0%.

Tabela 5 - Teste do Modelo (4.13)

| | <i>estimativa dos coeficientes</i> | <i>desvio-padrão</i> | <i>t-valor</i> | <i>p-valor</i> |
|---------------------|------------------------------------|----------------------|----------------|----------------|
| v_1 | 145,890 | 2,86419 | 50,936 | 0,0000 |
| v_2 | 53,6878 | 12,0572 | 4,453 | 0,0030 |
| v_3 | 175,892 | 4,38294 | 40,131 | 0,0000 |
| $v_1v_2v_3$ | 485,978 | 121,642 | 3,995 | 0,0052 |
| $v_1v_2(v_1 - v_2)$ | 353,651 | 54,6939 | 6,466 | 0,0003 |
| $v_1v_3(v_1 - v_3)$ | 190,382 | 31,0108 | 6,139 | 0,0005 |

Nesta segunda etapa, parte-se deste Modelo Base (4.13) podendo obter um modelo melhor, levando em consideração, além dos termos do Modelo Base, todos os termos equivalentes aos termos do Modelo Base, conforme descrito na

Seção 4.3. Na Tabela 6 são apresentados os termos equivalentes aos termos do Modelo Base (4.13).

Tabela 6 - Termos Equivalentes

| Termos do Modelo Base | Termos Equivalentes |
|-----------------------|--|
| $v_1v_2v_3$ | $(v_2v_3 - v_2^2v_3 - v_2v_3^2);$ $(v_1v_3 - v_1^2v_3 - v_1v_3^2);$ $(v_1v_2 - v_1^2v_2 - v_1v_2^2)$ |
| $v_1v_2(v_1 - v_2)$ | $(v_1^2v_2 - v_1v_2^2);$ $(v_1^2 - v_1^3 - v_1^2v_3 - v_2^2 + v_2^3 + v_2^2v_3)$ |
| $v_1v_3(v_1 - v_3)$ | $(v_1^2v_3 - v_1v_3^2);$ $(v_1^2 - v_1^3 - v_1^2v_2 - v_3^2 + v_3^3 + v_2v_3^2)$ |

Uma vez conhecidos todos os termos candidatos do modelo de EM (termos do Modelo Base e termos equivalentes), calculou-se o valor mínimo de AIC_c em função do número de parâmetros, partindo de um modelo de 3 parâmetros, com incremento de 1 parâmetro a cada passo, conforme realizado anteriormente.

De acordo com o critério AIC_c , o modelo selecionado foi o seguinte:

$$\hat{y} = 146,67v_1 + 301,14v_2 + 134,47v_3 + 180,23v_1^2v_3 - 1698,94v_2^3 \quad (4.14)$$

Após a determinação e armazenamento dos valores de AIC_c , foi possível calcular os valores das diferenças de AIC_c (Δ_i), conforme Equação (4.6), e selecionar previamente os modelos considerados indiferentes, ou seja, aqueles modelos que apresentaram um Δ_i entre 0 e 2. Na Tabela 7 são apresentados os termos selecionados dos modelos considerados indiferentes, bem como os respectivos valores de AIC_c , $PRESS$ e MSE .

Tabela 7 - Modelos indiferentes (M5 e M6)

| Terms | M5 | M6 |
|------------|--------|--------|
| v_1 | √ | √ |
| v_2 | √ | √ |
| v_3 | √ | √ |
| $v_1^2v_3$ | √ | √ |
| v_2^2 | √ | |
| v_2^3 | | √ |
| AIC_c | 57,06 | 56,22 |
| $PRESS$ | 391,72 | 348,73 |
| MSE | 17,72 | 16,61 |

Dentre os dois modelos considerados indiferentes apresentados na Tabela 7, o modelo que apresentou menores *PRESS* (348,73) e *MSE* (16,61) foi o modelo M6, que é igual ao Modelo (4.14), sendo o Modelo Final (4.15) selecionado por meio desta metodologia:

$$\hat{y} = 146,67v_1 + 301,14v_2 + 134,47v_3 + 180,23v_1^2v_3 - 1698,94v_2^3 \quad (4.15)$$

Comparando os modelos selecionados por Cornell (2000) e por Myers & Montgomery (2002), apresentados nas Equações (2.9) e (2.10), respectivamente, ao Modelo Final (4.15), observa-se que a aplicação da metodologia permitiu um decréscimo de 46,93% para o *PRESS* (que foi reduzido de 657,08 para 348,73) e um decréscimo de 33,91% para o *MSE* (que foi reduzido de 25,14 para 16,61). Cabe ressaltar que o Modelo Final (4.15) possui 5 parâmetros e os modelos de Cornell (2000) e Myers & Montgomery (2002) possuem 7 parâmetros, sendo o Modelo Final (4.15) um modelo com menos parâmetros.

Na Tabela 8 são apresentados os resultados do teste *t* para o Modelo Final (4.15).

Tabela 8 - Teste do Modelo Final (4.15)

| | <i>estimativa dos coeficientes</i> | <i>desvio-padrão</i> | <i>t-valor</i> | <i>p-valor</i> |
|------------|------------------------------------|----------------------|----------------|----------------|
| v_1 | 146,674 | 2,61705 | 56,046 | 0,0000 |
| v_2 | 301,142 | 32,6991 | 9,209 | 0,0000 |
| v_3 | 134,473 | 4,15726 | 32,346 | 0,0000 |
| $v_1^2v_3$ | 180,230 | 30,1357 | 5,981 | 0,0003 |
| v_2^3 | -1698,94 | 359,383 | -4,727 | 0,0015 |

Analisando a coluna “*p-valor*” da Tabela 8, pode-se concluir que todos os termos são significativos a um nível de confiança de 99,0%.

Myers & Montgomery (2002) recomendam a utilização dos resíduos *studentized* para a verificação das suposições de normalidade, independência e constância da variância. Os resíduos *studentized* (r_i) são definidos da seguinte forma:

$$r_i = \frac{e_i}{\sqrt{\hat{\sigma}^2(1 - h_{ii})}} \quad (4.16)$$

onde $e_i = y_i - \hat{y}_i$ e h_{ii} são os elementos da diagonal da matriz chapéu $\mathbf{H} = \mathbf{W}(\mathbf{W}' \mathbf{W})^{-1} \mathbf{W}'$.

As Figuras 8 a 11 apresentam os gráficos de diagnóstico utilizados na verificação da adequação do Modelo Final (4.15).

No gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*, mostrado na Figura 8, observa-se que não há indicação de que a suposição de normalidade não deva ser aceita, já que não há pontos muito fora do alinhamento.

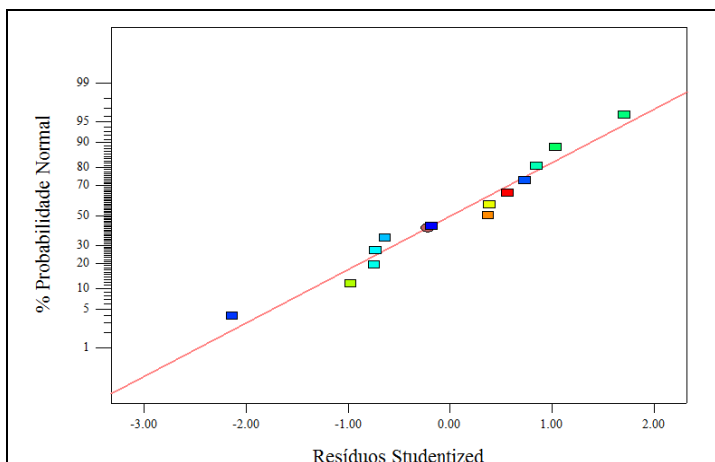


Figura 8 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*

Para verificar a suposição de independência, há o gráfico de resíduos *studentized* das observações na ordem em que foram realizados os experimentos, mostrado na Figura 9.

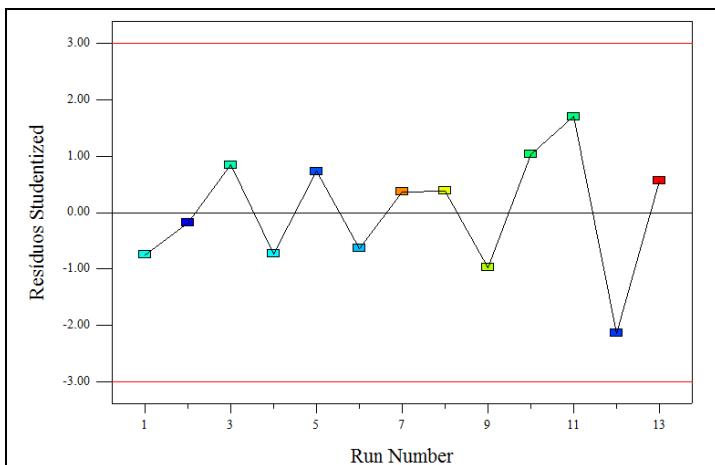


Figura 9 - Gráfico de resíduos *studentized* versus *run number*

Como os resíduos mostrados na Figura 9 estão aleatoriamente distribuídos e sem qualquer tendência evidente que os correlacione, não há razão para se suspeitar que a suposição de independência não seja válida.

Para verificar a aditividade do modelo inerente ao modelo linear há o gráfico dos resíduos *studentized* versus valores ajustados, mostrado na Figura 10.

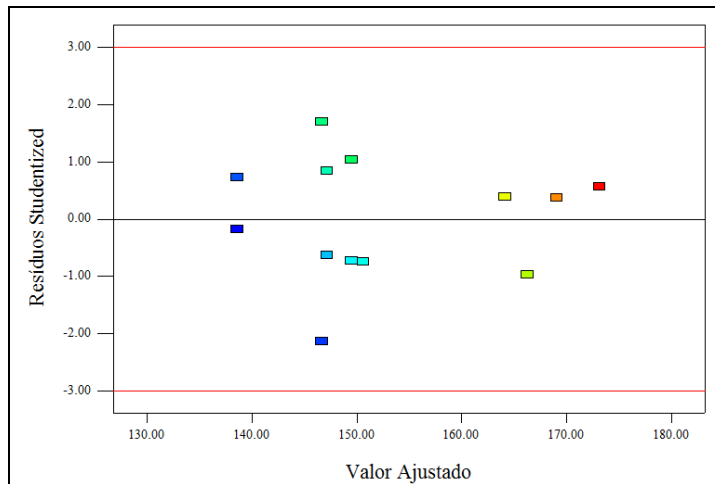


Figura 10 - Gráfico de resíduos *studentized versus* valor ajustado

Como os resíduos mostrados no gráfico da Figura 10 seguem distribuídos aleatoriamente em torno de zero, não há razão para se suspeitar que a suposição de aditividade não deva ser aceita.

Para verificar a suposição de variância constante, utiliza-se o gráfico de valores absolutos dos resíduos *studentized versus* valores ajustados, o qual é mostrado na Figura 11.

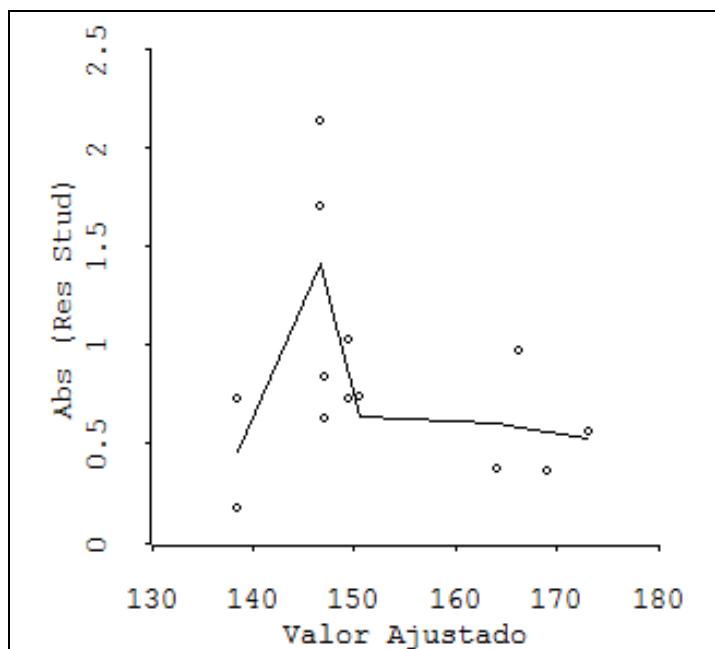


Figura 11 - Gráfico para verificação de não constância da variância

Analisando o gráfico nota-se que não há indicação de crescimento da variância com o aumento do valor ajustado.

Portanto, foi verificada a adequação do Modelo Final (4.15).

Nas Figuras 12 e 13 são apresentados os gráficos de contorno da previsão da resposta e do desvio-padrão da média de futuras respostas em função dos L-pseudocomponentes, considerando os modelos obtidos por Cornell (2000) e Myers & Montgomery (2002), conforme Equações (2.9) e (2.10).

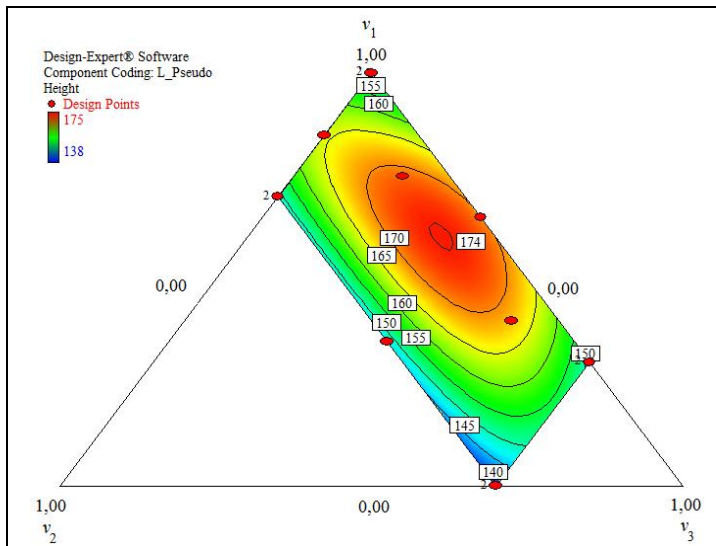


Figura 12 - Gráfico de contorno da previsão da resposta para os modelos (2.9) e (2.10)

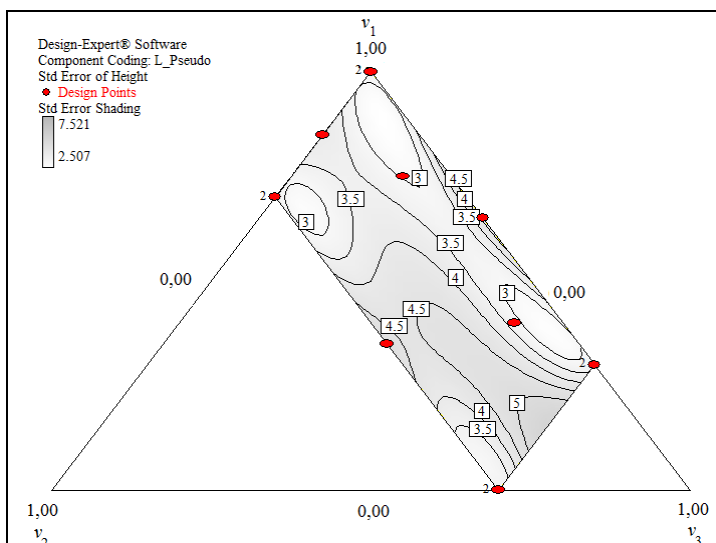


Figura 13 - Gráfico de contorno do desvio-padrão da média para os modelos (2.9) e (2.10)

Nas Figuras 14 e 15 são apresentados os gráficos de contorno da previsão da resposta e do desvio-padrão da média de futuras respostas em função dos L-pseudocomponentes, considerando o Modelo Final (4.15).

Ao se comparar os gráficos de contorno da previsão da resposta, apresentados nas Figuras 12 e 14, percebe-se que o Modelo Final (4.15) permite a obtenção de valores de respostas superiores em relação aos modelos (2.9) e (2.10)

e permite, ainda, a obtenção de desvio-padrão da média de futuras respostas inferior, conforme Figuras 13 e 15.

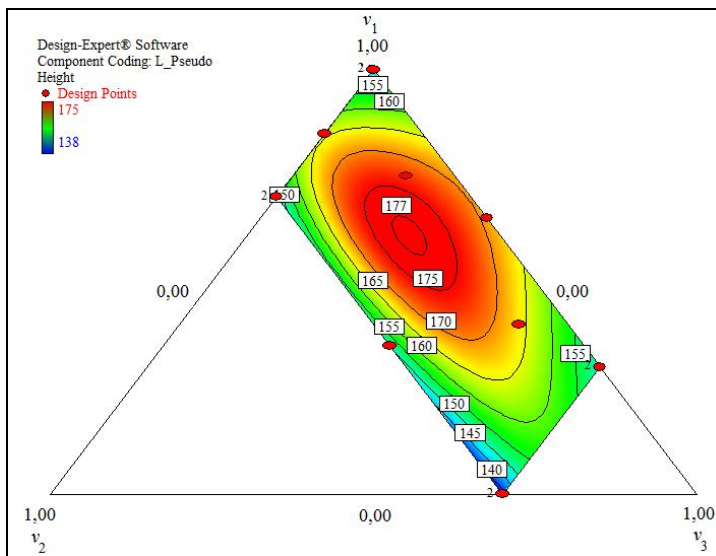


Figura 14 - Gráfico de contorno da previsão da resposta para o Modelo Final (4.15)

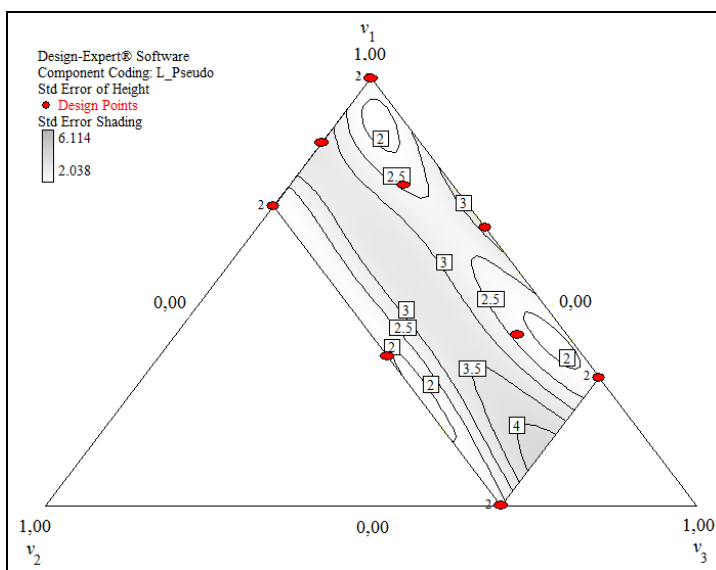


Figura 15 - Gráfico de contorno do desvio-padrão da média para o Modelo Final (4.15)

Várias formulações podem resultar em futuras previsões da resposta superiores a 170 mm. Por conseguinte, um objetivo desejável é maximizar o valor esperado para uma futura resposta. Um procedimento de otimização será apresentado na Seção 5.

4.5. Estudo de Caso 2

O segundo estudo de caso é um problema proposto por Myers & Montgomery (2002) e que foi apresentado na Seção 3.3.

Todos os parâmetros candidatos para o EMP são os do modelo completo combinado, apresentado na Equação (3.7). Para o caso em questão, o número de componentes da mistura (q) é igual a 3 (uma resina e dois reticuladores), e o número de variáveis de processo (r) é igual a dois (temperatura e umidade relativa). Expandindo o modelo combinado da Equação (3.7) tem-se um total de 43 parâmetros possíveis de pertencerem ao modelo selecionado. Entretanto, destes 43 parâmetros possíveis, os componentes lineares da mistura (v_1, v_2 e v_3) devem, necessariamente, pertencer a todos os possíveis modelos a serem gerados, devido à estrutura do modelo de Scheffé. Com isso, o número máximo de parâmetros do modelo é limitado a $p = 29$, tendo em vista, que das 34 observações do experimento, 5 observações são replicações para fornecer uma estimativa do erro. Sendo assim, pode-se calcular o número total de possibilidades de modelos em função do número de parâmetros com a seguinte fórmula:

$$\text{número de modelos} = C_{43-3}^{p-3}, p = 3, \dots, 29 \tag{4.17}$$

Com a fórmula da Equação (4.17) obtém-se a Tabela 9, que apresenta o número de modelos possíveis em função do número de parâmetros do modelo.

Tabela 9 - Número de modelos em função do número de parâmetros

| p | N° Modelos | p | N° Modelos | p | N° Modelos |
|-----|-------------------|-----|-------------------|-----|-------------------|
| 3 | 1 | 12 | 273.438.880 | 21 | 113.380.261.800 |
| 4 | 40 | 13 | 847.660.528 | 22 | 131.282.408.400 |
| 5 | 780 | 14 | 2.311.801.440 | 23 | 137.846.528.820 |
| 6 | 9.880 | 15 | 5.586.853.480 | 24 | 131.282.408.400 |
| 7 | 91.390 | 16 | 12.033.222.880 | 25 | 113.380.261.800 |
| 8 | 658.008 | 17 | 23.206.929.840 | 26 | 88.732.378.800 |
| 9 | 3.838.380 | 18 | 40.225.345.056 | 27 | 62.852.101.650 |
| 10 | 18.643.560 | 19 | 62.852.101.650 | 28 | 40.225.345.056 |
| 11 | 76.904.685 | 20 | 88.732.378.800 | 29 | 23.206.929.840 |

Para o caso em questão, deveriam ser consideradas um total de 1.078.358.503.844 possibilidades, o que representaria um esforço computacional considerável para os cálculos e armazenamento dos valores de AIC_c de todos os possíveis modelos.

De posse de todos os parâmetros candidatos, calculou-se o valor mínimo de AIC_c em função do número de parâmetros, partindo de um modelo de 3 parâmetros, com incremento de 1 parâmetro a cada passo. Não foram calculados os valores mínimos de AIC_c para $p > 13$ devido à evolução do esforço computacional. No caso de $p = 12$, o tempo de execução computacional foi de 18 horas. Já no caso de $p = 13$, o tempo de execução computacional foi de 32 horas, tornando inviável o cálculo para $p > 13$.

Na Tabela 10 é apresentada a evolução do valor mínimo de AIC_c em função do número de parâmetros.

Tabela 10 - p versus $\min[AIC_c(p)]$

| p | $\min[AIC_c(p)]$ |
|-----|------------------|
| 3 | 208,0013 |
| 4 | 186,7306 |
| 5 | 130,2464 |
| 6 | 120,9665 |
| 7 | 114,9032 |
| 8 | 111,9035 |
| 9 | 108,4102 |
| 10 | 109,0676 |
| 11 | 108,3013 |
| 12 | 109,1366 |
| 13 | 111,1085 |

Pode-se obter um gráfico de evolução do AIC_c mínimo em função do número de parâmetros, o qual está apresentado na Figura 16.

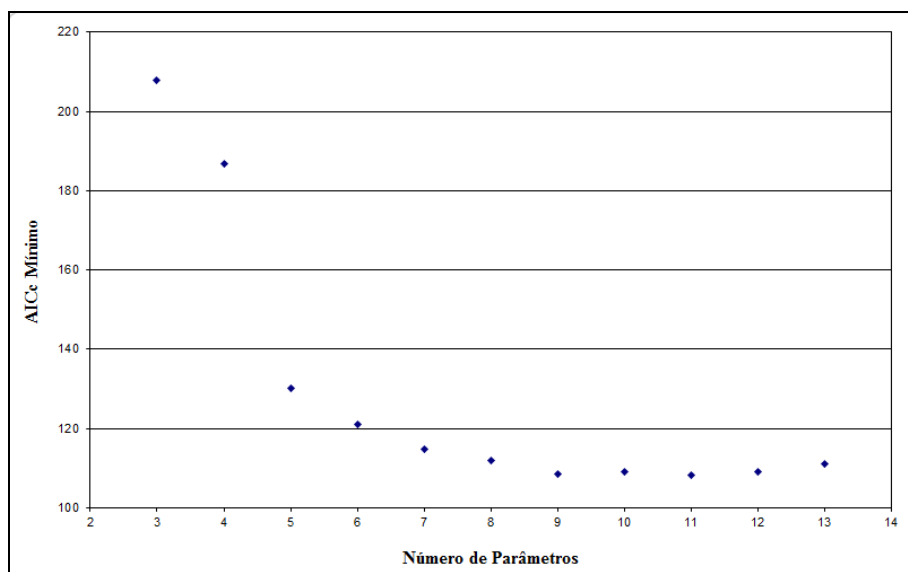


Figura 16 - AIC_c mínimo em função do número de parâmetros

Analisando a Tabela 10 e o gráfico da Figura 16 percebe-se que $\min[AIC_c(p=13)] > \min[AIC_c(p=12)] > \min[AIC_c(p=11)]$.

A função de penalidade tende a ter um peso maior no valor de AIC_c , conforme aumenta o número de parâmetros do modelo. Entretanto, não há garantia de que não exista um modelo com menor valor de AIC_c com $p > 13$, mas esta busca demandaria um esforço computacional bastante elevado, como citado anteriormente.

Nesta fase da pesquisa foram analisados apenas os possíveis modelos com até 13 parâmetros, sendo, portanto, consideradas um total de 1.221.246.132 possibilidades. Pelo critério de AIC_c , o modelo selecionado foi o seguinte:

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 40,36v_1 + 67,32v_2 + 35,09v_3 + 11,79z_1 - 16,19z_2 + \\ & + 11,25v_3z_2 - 3,53v_1z_1z_2 - 106,74v_2v_3(v_2 - v_3) + \\ & + 172,09v_1v_2v_3z_1 - 45,36v_1v_2z_1z_2 + 138,49v_1v_2z_1z_2(v_1 - v_2) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Após a determinação e armazenamento dos valores de AIC_c de todos os modelos analisados (até $p = 13$), foi possível calcular os valores das diferenças de AIC_c (Δ_i), conforme Equação (4.6), e selecionar previamente os modelos considerados indiferentes em relação ao Modelo (4.18), ou seja, aqueles que apresentaram um Δ_i entre 0 e 2.

Nas Tabelas 11, 12 e 13 são apresentados os termos selecionados dos 23 modelos considerados indiferentes, bem como os respectivos valores de AIC_c , $PRESS$ e MSE .

Dentre os 23 modelos considerados indiferentes apresentados nas Tabelas 11, 12 e 13, o modelo que apresentou menores $PRESS$ (536,67) e MSE (10,44) foi o modelo M28.

Com isso, é pertinente a escolha do modelo M28, agora denominado de Modelo Base, apresentado na Equação (4.19):

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 40,36v_1 + 67,37v_2 + 35,10v_3 + 10,68z_1 - 16,20z_2 + \\ & + 9,86v_2z_1 + 11,25v_3z_2 - 3,55v_1z_1z_2 - 106,69v_2v_3(v_2 - v_3) + \\ & + 141,28v_1v_2v_3z_1 - 46,60v_1v_2z_1z_2 + 138,17v_1v_2z_1z_2(v_1 - v_2) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Tabela 11 - Modelos indiferentes (M7 a M14)

| Terms | M7 | M8 | M9 | M10 | M11 | M12 | M13 | M14 |
|---------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| v_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_3 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_1v_3 | √ | √ | | | √ | √ | √ | √ |
| v_2z_1 | | | | | √ | | | |
| v_3z_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1z_2 | | | | | | √ | | |
| $v_1v_2v_3$ | | | | | | | | |
| $v_1v_2z_1$ | | | | | | | √ | |
| $v_1z_1z_2$ | | | | | | | | √ |
| $v_1v_3(v_1 - v_3)$ | | | | | | | | |
| $v_2v_3(v_2 - v_3)$ | | | √ | √ | | | | |
| $v_1v_2v_3z_1$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1v_2z_1z_2$ | | | | | | | | |
| $v_1v_3z_1z_2$ | √ | | √ | | √ | | √ | |
| $v_1v_2z_1(v_1 - v_2)$ | | | | | | | | |
| $v_1v_2v_3z_1z_2$ | | √ | | √ | | | | |
| $v_1v_2z_1z_2(v_1 - v_2)$ | | | | | | √ | | √ |
| <i>AIC_c</i> | 108,53 | 108,83 | 108,41 | 108,64 | 109,23 | 109,99 | 110,26 | 110,04 |
| <i>PRESS</i> | 626,62 | 645,81 | 617,47 | 626,06 | 602,68 | 695,62 | 658,95 | 689,98 |
| <i>MSE</i> | 14,45 | 14,58 | 14,40 | 14,50 | 12,95 | 13,24 | 13,35 | 13,26 |

Tabela 12 - Modelos indiferentes (M15 a M22)

| Terms | M15 | M16 | M17 | M18 | M19 | M20 | M21 | M22 |
|---------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| v_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_3 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_1v_3 | √ | | | | | | | √ |
| v_2z_1 | | √ | √ | | | | | |
| v_3z_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1z_2 | | | | √ | | | | |
| $v_1v_2v_3$ | | | | | | | | |
| $v_1v_2z_1$ | | | | | √ | | | |
| $v_1z_1z_2$ | | | | | | √ | | √ |
| $v_1v_3(v_1 - v_3)$ | | | | | | | | |
| $v_2v_3(v_2 - v_3)$ | | √ | √ | √ | √ | √ | √ | |
| $v_1v_2v_3z_1$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1v_2z_1z_2$ | | | | | | | | √ |
| $v_1v_3z_1z_2$ | √ | √ | | | √ | | √ | |
| $v_1v_2z_1(v_1 - v_2)$ | √ | | | | | | √ | |
| $v_1v_2v_3z_1z_2$ | | | √ | | | | | |
| $v_1v_2z_1z_2(v_1 - v_2)$ | | | | √ | | √ | | √ |
| AIC_c | 110,22 | 109,07 | 110,29 | 110,08 | 110,03 | 110,04 | 109,95 | 108,34 |
| $PRESS$ | 657,60 | 589,56 | 619,99 | 693,88 | 639,84 | 683,16 | 637,63 | 614,30 |
| MSE | 13,33 | 12,89 | 13,36 | 13,28 | 13,25 | 13,26 | 13,22 | 11,41 |

Tabela 13 - Modelos indiferentes (M23 a M29)

| Terms | M23 | M24 | M25 | M26 | M27 | M28 | M29 |
|---------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| v_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_3 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_1v_3 | √ | | | √ | √ | | |
| v_2z_1 | | | | √ | | √ | |
| v_3z_2 | | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1z_2 | | | | | | | |
| $v_1v_2v_3$ | | | | | √ | | |
| $v_1v_2z_1$ | | | | | | | |
| $v_1z_1z_2$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1v_3(v_1 - v_3)$ | | | | | | | √ |
| $v_2v_3(v_2 - v_3)$ | | √ | √ | | | √ | √ |
| $v_1v_2v_3z_1$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1v_2z_1z_2$ | | √ | | √ | √ | √ | √ |
| $v_1v_3z_1z_2$ | | | | | | | |
| $v_1v_2z_1(v_1 - v_2)$ | | | | | | | |
| $v_1v_2v_3z_1z_2$ | √ | | √ | | | | |
| $v_1v_2z_1z_2(v_1 - v_2)$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| <i>AIC_c</i> | 109,50 | 108,30 | 109,36 | 109,23 | 110,25 | 109,14 | 110,18 |
| <i>PRESS</i> | 642,41 | 607,03 | 628,34 | 549,43 | 624,81 | 536,67 | 603,71 |
| <i>MSE</i> | 11,81 | 11,40 | 11,76 | 10,47 | 10,78 | 10,44 | 10,76 |

Na Tabela 14 são apresentados os resultados do teste *t* para o Modelo (4.19). Analisando a coluna “*p*-valor” da Tabela 14, pode-se concluir que o termo v_2z_1 não é significativo, já que o *p*-valor é maior que 0,05. No entanto, pelo critério

AIC_c , tal termo deve compor o modelo. Todos os demais termos do modelo (4.19) são significativos a um nível de confiança de 95,0%.

Tabela 14 - Teste do Modelo (4.19)

| | <i>estimativa dos coeficientes</i> | <i>desvio-padrão</i> | <i>t-valor</i> | <i>p-valor</i> |
|-------------------------------|------------------------------------|----------------------|----------------|----------------|
| v_1 | 40,361762 | 1,36326001 | 29,607 | 0,0000 |
| v_2 | 67,366422 | 5,20421595 | 12,945 | 0,0000 |
| v_3 | 35,100269 | 1,93383617 | 18,151 | 0,0000 |
| z_1 | 10,683201 | 0,94098256 | 11,353 | 0,0000 |
| z_2 | -16,2029 | 0,90842382 | -17,836 | 0,0000 |
| $v_2 z_1$ | 9,8576792 | 5,58181546 | 1,766 | 0,0913 |
| $v_3 z_2$ | 11,246064 | 1,90018336 | 5,918 | 0,0000 |
| $v_1 z_1 z_2$ | -3,551227 | 1,35293887 | -2,625 | 0,0155 |
| $v_2 v_3 (v_2 - v_3)$ | -106,6906 | 27,4447121 | -3,887 | 0,0008 |
| $v_1 v_2 v_3 z_1$ | 141,28193 | 46,1350483 | 3,062 | 0,0057 |
| $v_1 v_2 z_1 z_2$ | -46,59519 | 19,5725775 | -2,381 | 0,0264 |
| $v_1 v_2 z_1 z_2 (v_1 - v_2)$ | 138,17136 | 42,3067874 | 3,266 | 0,0035 |

Nesta segunda etapa, parte-se deste Modelo Base (4.19) podendo obter um modelo melhor levando em consideração, além dos termos do Modelo Base, todos os termos equivalentes aos termos do Modelo Base, conforme descrito na Seção 4.3.

Na Tabela 15 são apresentados os termos equivalentes aos termos do Modelo Base. Cabe ressaltar que, para o cálculo do valor mínimo de AIC_c , dentre todos os termos equivalentes determinados na Tabela 15, foram desconsiderados os termos que já pertenciam ao modelo completo combinado da Equação (3.7) e que não foram selecionados na primeira etapa desta metodologia, reduzindo o número de parâmetros possíveis.

Uma vez conhecidos todos os termos candidatos do modelo de EMP (termos do Modelo Base e termos equivalentes), calculou-se o valor mínimo de AIC_c em função do número de parâmetros, partindo de um modelo de 3 parâmetros, com incremento de 1 parâmetro a cada passo, conforme realizado anteriormente. Com isso, foram considerados 34 parâmetros possíveis.

Tabela 15 - Termos Equivalentes

| Termos do Modelo Base | Termos Equivalentes |
|-------------------------------|---|
| $v_2 z_1$ | $(z_1 - v_1 z_1 - v_3 z_1)$ |
| $v_3 z_2$ | $(z_2 - v_1 z_2 - v_2 z_2)$ |
| $v_1 z_1 z_2$ | $(z_1 z_2 - v_2 z_1 z_2 - v_3 z_1 z_2)$ |
| $v_2 v_3 (v_2 - v_3)$ | $(v_2^2 v_3 - v_2 v_3^2);$ $(v_2^2 - v_2^3 - v_1 v_2^2 - v_3^2 + v_3^3 + v_1 v_3^2)$ |
| $v_1 v_2 v_3 z_1$ | $(v_2 v_3 z_1 - v_2^2 v_3 z_1 - v_2 v_3^2 z_1);$ $(v_1 v_3 z_1 - v_1^2 v_3 z_1 - v_1 v_3^2 z_1);$ $(v_1 v_2 z_1 - v_1^2 v_2 z_1 - v_1 v_2^2 z_1)$ |
| $v_1 v_2 z_1 z_2$ | $(v_2 z_1 z_2 - v_2^2 z_1 z_2 - v_2 v_3 z_1 z_2);$ $(v_1 z_1 z_2 - v_1^2 z_1 z_2 - v_1 v_3 z_1 z_2)$ |
| $v_1 v_2 z_1 z_2 (v_1 - v_2)$ | $(v_1^2 v_2 z_1 z_2 - v_1 v_2^2 z_1 z_2);$ $(v_1^2 z_1 z_2 - v_1^3 z_1 z_2 - v_1^2 v_3 z_1 z_2 - v_2^2 z_1 z_2 + v_2^3 z_1 z_2 + v_2^2 v_3 z_1 z_2)$ |

Calculou-se o valor mínimo de AIC_c em função do número de parâmetros, partindo de um modelo de 3 parâmetros, com incremento de 1 parâmetro a cada passo. Não foram calculados os valores mínimos de AIC_c para $p > 14$ devido à evolução do esforço computacional. No caso de $p = 13$, o tempo de execução foi de 22 horas. Já no caso de $p = 14$, o tempo de execução computacional foi de 31 horas, tornando inviável o cálculo para $p > 14$. Na Tabela 16 é apresentada a evolução do valor mínimo de AIC_c em função do número de parâmetros.

Tabela 16 - p versus $\min[AIC_c(p)]$

| p | $\min[AIC_c(p)]$ |
|-----|------------------|
| 3 | 208,0013 |
| 4 | 186,7306 |
| 5 | 130,2464 |
| 6 | 120,9665 |
| 7 | 115,0002 |
| 8 | 111,6931 |
| 9 | 110,4774 |
| 10 | 109,6070 |
| 11 | 107,4531 |
| 12 | 108,1345 |
| 13 | 110,0698 |
| 14 | 112,3263 |

Pode-se também obter um gráfico de evolução do AIC_c mínimo em função do número de parâmetros, o qual está apresentado na Figura 17.

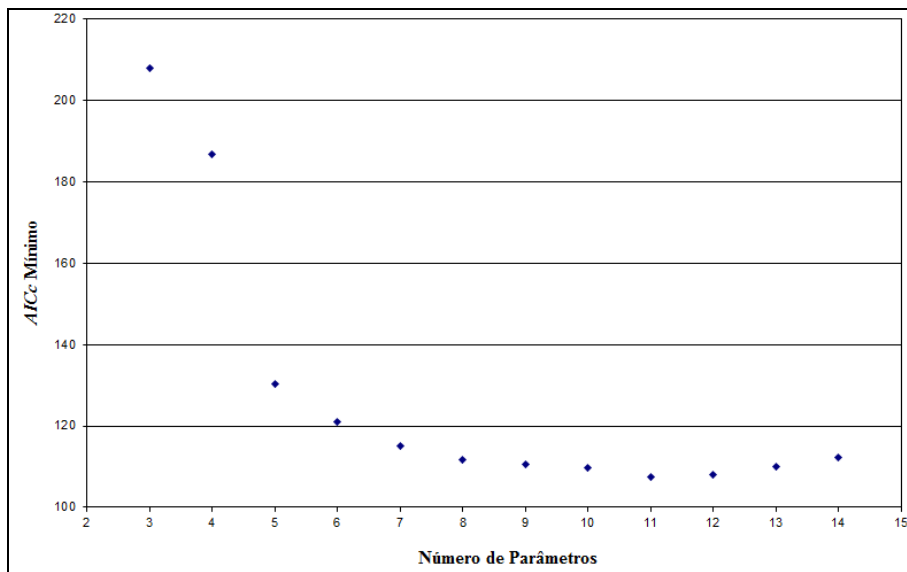


Figura 17 - AIC_c mínimo em função do número de parâmetros

Analisando a Tabela 16 e o gráfico da Figura 17 percebe-se que $\min[AIC_c(p=14)] > \min[AIC_c(p=13)] > \min[AIC_c(p=12)] > \min[AIC_c(p=11)]$. A função de penalidade tende a ter um peso maior no valor de AIC_c , conforme aumenta o número de parâmetros do modelo. Entretanto, não há garantia de que não exista um modelo com menor valor de AIC_c com $p > 14$, mas esta busca demandaria um esforço computacional bastante elevado, como citado anteriormente.

De acordo com o critério AIC_c o modelo selecionado foi o seguinte:

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 40,53v_1 + 66,44v_2 + 49,15v_3 + 11,82z_1 - 16,16z_2 + \\ & + 10,95v_3z_2 - 71,94v_1v_3^2 - 3,57v_1z_1z_2 + 174,81v_1v_2v_3z_1 - \\ & - 46,32v_1v_2z_1z_2 + 139,72v_1v_2z_1z_2(v_1 - v_2) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Após a determinação e armazenamento dos valores de AIC_c , foi possível calcular os valores das diferenças de AIC_c (Δ_i), conforme Equação (4.6), e selecionar previamente os modelos considerados indiferentes, ou seja, aqueles que apresentaram um Δ_i entre 0 e 2.

Nas Tabelas 17, 18 e 19 são apresentados os termos selecionados dos 23 novos modelos considerados indiferentes, bem como os respectivos valores de AIC_c , $PRESS$ e MSE .

Tabela 17 - Modelos indiferentes (M30 a M37)

| Termos | M30 | M31 | M32 | M33 | M34 | M35 | M36 | M37 |
|-------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| v_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_3 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_2 z_1$ | | | | | | | | |
| $v_3 z_2$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1 z_1 z_2$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_2 v_3 (v_2 - v_3)$ | √ | √ | √ | √ | √ | | | |
| $v_1 v_2 v_3 z_1$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1 v_2 z_1 z_2$ | √ | √ | | | | √ | √ | |
| $v_1 v_2 z_1 z_2 (v_1 - v_2)$ | √ | | √ | √ | | √ | | √ |
| $v_1 v_2^2$ | | | | | | | | |
| v_3^2 | | | | | | | | |
| $v_1 v_3^2$ | | | | | | √ | √ | √ |
| v_3^3 | | | | | | | | |
| $v_1^2 z_1 z_2$ | | | | | | | | √ |
| $v_1^2 v_2 z_1 z_2$ | | √ | √ | | √ | | √ | |
| $v_1 v_2^2 z_1 z_2$ | | | | √ | √ | | | |
| AIC_c | 108,30 | 108,96 | 109,19 | 109,19 | 109,19 | 107,45 | 107,84 | 109,28 |
| $PRESS$ | 607,03 | 617,91 | 621,75 | 621,75 | 621,75 | 586,66 | 592,84 | 614,81 |
| MSE | 11,40 | 11,62 | 11,70 | 11,70 | 11,70 | 11,12 | 11,24 | 11,73 |

Tabela 18 - Modelos indiferentes (M38 a M45)

| Termos | M38 | M39 | M40 | M41 | M42 | M43 | M44 | M45 |
|-------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| v_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_3 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_2 z_1$ | | | | | | √ | √ | √ |
| $v_3 z_2$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1 z_1 z_2$ | √ | √ | √ | | | √ | √ | √ |
| $v_2 v_3 (v_2 - v_3)$ | | | | | | √ | √ | √ |
| $v_1 v_2 v_3 z_1$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1 v_2 z_1 z_2$ | | | | √ | √ | √ | | |
| $v_1 v_2 z_1 z_2 (v_1 - v_2)$ | √ | √ | | √ | | √ | √ | √ |
| $v_1 v_2^2$ | | | | | | | | |
| v_3^2 | | | | | | | | |
| $v_1 v_3^2$ | √ | √ | √ | √ | √ | | | |
| v_3^3 | | | | | | | | |
| $v_1^2 z_1 z_2$ | | | | √ | √ | | | |
| $v_1^2 v_2 z_1 z_2$ | √ | | √ | | √ | | √ | |
| $v_1 v_2^2 z_1 z_2$ | | √ | √ | | | | | √ |
| <i>AIC_c</i> | 108,74 | 108,74 | 108,74 | 109,22 | 108,94 | 109,14 | 108,90 | 108,90 |
| <i>PRESS</i> | 609,40 | 609,40 | 609,40 | 622,25 | 618,62 | 536,67 | 533,84 | 533,84 |
| <i>MSE</i> | 11,54 | 11,54 | 11,54 | 11,71 | 11,61 | 10,44 | 10,36 | 10,36 |

Tabela 19 - Modelos indiferentes (M46 e M52)

| Termos | M46 | M47 | M48 | M49 | M50 | M51 | M52 |
|-------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| v_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| v_3 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_1 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| z_2 | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_2 z_1$ | √ | √ | √ | √ | √ | | |
| $v_3 z_2$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1 z_1 z_2$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_2 v_3 (v_2 - v_3)$ | √ | | | | | | |
| $v_1 v_2 v_3 z_1$ | √ | √ | √ | √ | √ | √ | √ |
| $v_1 v_2 z_1 z_2$ | | √ | | | | √ | √ |
| $v_1 v_2 z_1 z_2 (v_1 - v_2)$ | | √ | √ | √ | | √ | √ |
| $v_1 v_2^2$ | | | | | | √ | √ |
| v_3^2 | | | | | | √ | |
| $v_1 v_3^2$ | | √ | √ | √ | √ | | |
| v_3^3 | | | | | | | √ |
| $v_1^2 z_1 z_2$ | | | | | | | |
| $v_1^2 v_2 z_1 z_2$ | √ | | √ | | √ | | |
| $v_1 v_2^2 z_1 z_2$ | √ | | | √ | √ | | |
| AIC_c | 108,90 | 108,13 | 108,34 | 108,34 | 108,34 | 109,41 | 109,35 |
| $PRESS$ | 533,84 | 515,43 | 520,87 | 520,87 | 520,87 | 611,98 | 610,75 |
| MSE | 10,36 | 10,13 | 10,19 | 10,19 | 10,19 | 10,52 | 10,50 |

Dentre os 23 modelos considerados indiferentes apresentados nas Tabelas 17, 18 e 19, o modelo que apresentou menores *PRESS* (515,43) e *MSE* (10,13) foi o modelo M47, sendo o Modelo Final (4.21) selecionado por meio desta metodologia:

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 40,54v_1 + 66,48v_2 + 49,17v_3 + 10,71z_1 - 16,17z_2 + \\ & + 9,89v_2z_1 + 10,95v_3z_2 - 71,95v_1v_3^2 - 3,59v_1z_1z_2 + \\ & + 143,90v_1v_2v_3z_1 - 47,56v_1v_2z_1z_2 + 139,40v_1v_2z_1z_2(v_1 - v_2) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Comparando o modelo selecionado por Myers & Montgomery (2002) ao Modelo Final (4.21), observa-se que a aplicação da metodologia permitiu um decréscimo de 42,93% para o *PRESS* (que foi reduzido de 903,20 para 515,43) e um decréscimo de 34,42% para o *MSE* (que foi reduzido de 15,45 para 10,13), mantendo a quantidade de parâmetros igual a 12.

Na Tabela 20 são apresentados os resultados do teste *t* para o Modelo Final (4.21).

Tabela 20 - Teste do Modelo Final (4.21)

| | <i>estimativa dos coeficientes</i> | <i>desvio-padrão</i> | <i>t-valor</i> | <i>p-valor</i> |
|---------------------------|------------------------------------|----------------------|----------------|----------------|
| v_1 | 40,540375 | 1,35874275 | 29,837 | 0,0000 |
| v_2 | 66,475194 | 5,21594393 | 12,745 | 0,0000 |
| v_3 | 49,166770 | 2,72828301 | 18,021 | 0,0000 |
| z_1 | 10,712770 | 0,92714668 | 11,555 | 0,0000 |
| z_2 | -16,171790 | 0,89527495 | -18,063 | 0,0000 |
| v_2z_1 | 9,889209 | 5,50016127 | 1,798 | 0,0859 |
| v_3z_2 | 10,947476 | 1,86779370 | 5,861 | 0,0000 |
| $v_1v_3^2$ | -71,952320 | 17,86427991 | -4,028 | 0,0006 |
| $v_1z_1z_2$ | -3,585570 | 1,33309350 | -2,690 | 0,0134 |
| $v_1v_2v_3z_1$ | 143,901810 | 45,45097852 | 3,166 | 0,0045 |
| $v_1v_2z_1z_2$ | -47,562130 | 19,28306408 | -2,467 | 0,0219 |
| $v_1v_2z_1z_2(v_1 - v_2)$ | 139,400310 | 41,68523330 | 3,344 | 0,0029 |

Analisando a coluna “*p-valor*” da Tabela 20, pode-se concluir que o termo v_2z_1 não é significativo, já que o *p-valor* é maior que 0,05. No entanto, pelo critério *AIC_c*, tal termo deve compor o modelo. Todos os demais termos do modelo (4.21) são significativos a um nível de confiança de 95,0%.

As Figuras 18 a 21 apresentam os gráficos de diagnóstico utilizados na verificação da adequação do Modelo Final (4.21).

No gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*, mostrado na Figura 18, pode-se observar que não há indicação de que a suposição de normalidade não deva ser aceita, já que não há pontos muito fora do alinhamento.

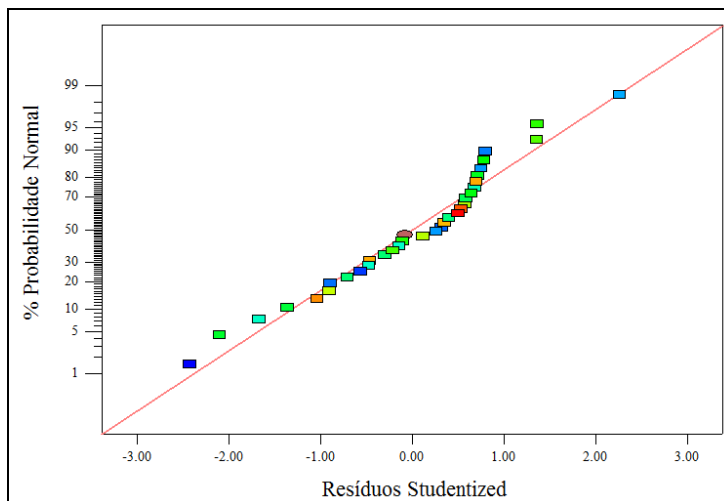


Figura 18 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*

Para verificar a suposição de independência há o gráfico de resíduos *studentized* das observações na ordem em que foram realizados os experimentos, apresentado na Figura 19.

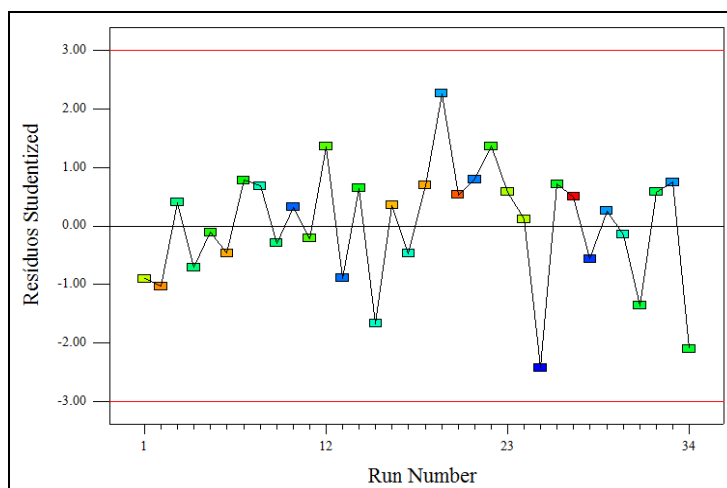


Figura 19 - Gráfico de resíduos *studentized* versus *run number*

Como os resíduos do gráfico mostrado na Figura 19 estão aleatoriamente distribuídos e sem qualquer tendência evidente que os correlacione, não há razão para se suspeitar que a suposição de independência não seja válida.

Para verificar a aditividade do modelo inerente ao modelo linear há o gráfico dos resíduos *studentized* versus valores ajustados, mostrado na Figura 20. Como os resíduos mostrados no gráfico da Figura 20 seguem distribuídos aleatoriamente em torno de zero, não há razão para se suspeitar que a suposição de aditividade não deva ser aceita.

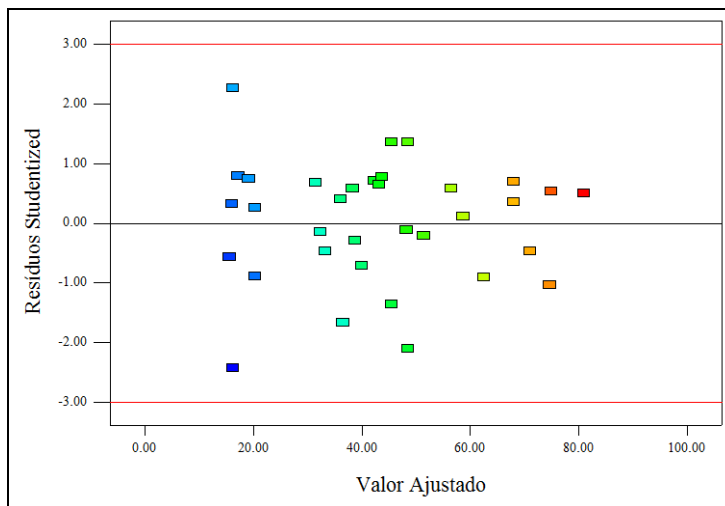


Figura 20 - Gráfico de resíduos *studentized* versus valor ajustado

Para verificar a suposição de variância constante, utiliza-se o gráfico de valores absolutos dos resíduos *studentized* versus valores ajustados, o qual é mostrado na Figura 21. Analisando o gráfico nota-se que não há indicação de crescimento da variância com o aumento do valor ajustado.

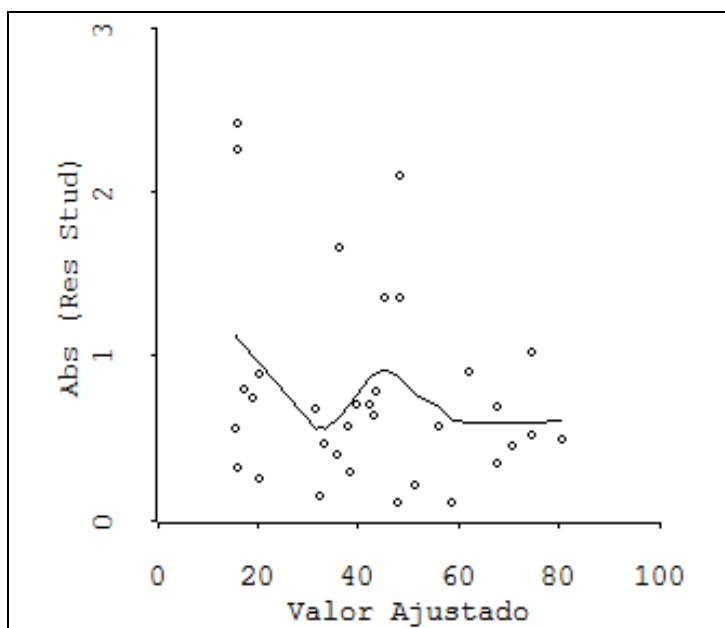


Figura 21 - Gráfico para verificação de não constância da variância

Portanto, foi verificada a adequação do Modelo Final (4.21).

Nas Figuras 22 e 23 são apresentados os gráficos de contorno da previsão da resposta e do desvio-padrão da média de futuras respostas em função dos L-pseudocomponentes e das variáveis de processo codificadas (em suas quatro combinações), considerando o modelo obtido por Myers & Montgomery (2002), conforme Equação (3.8).

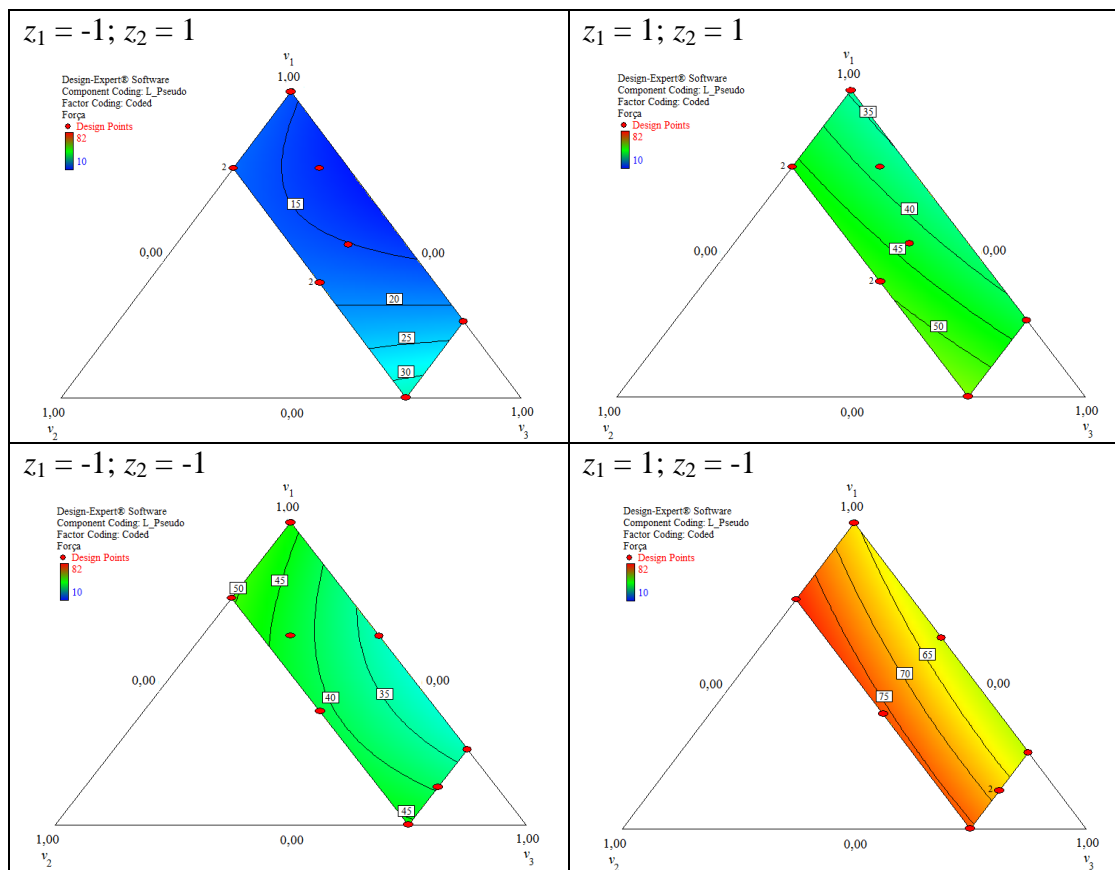


Figura 22 - Gráficos de contorno da previsão da resposta para o modelo (3.8)

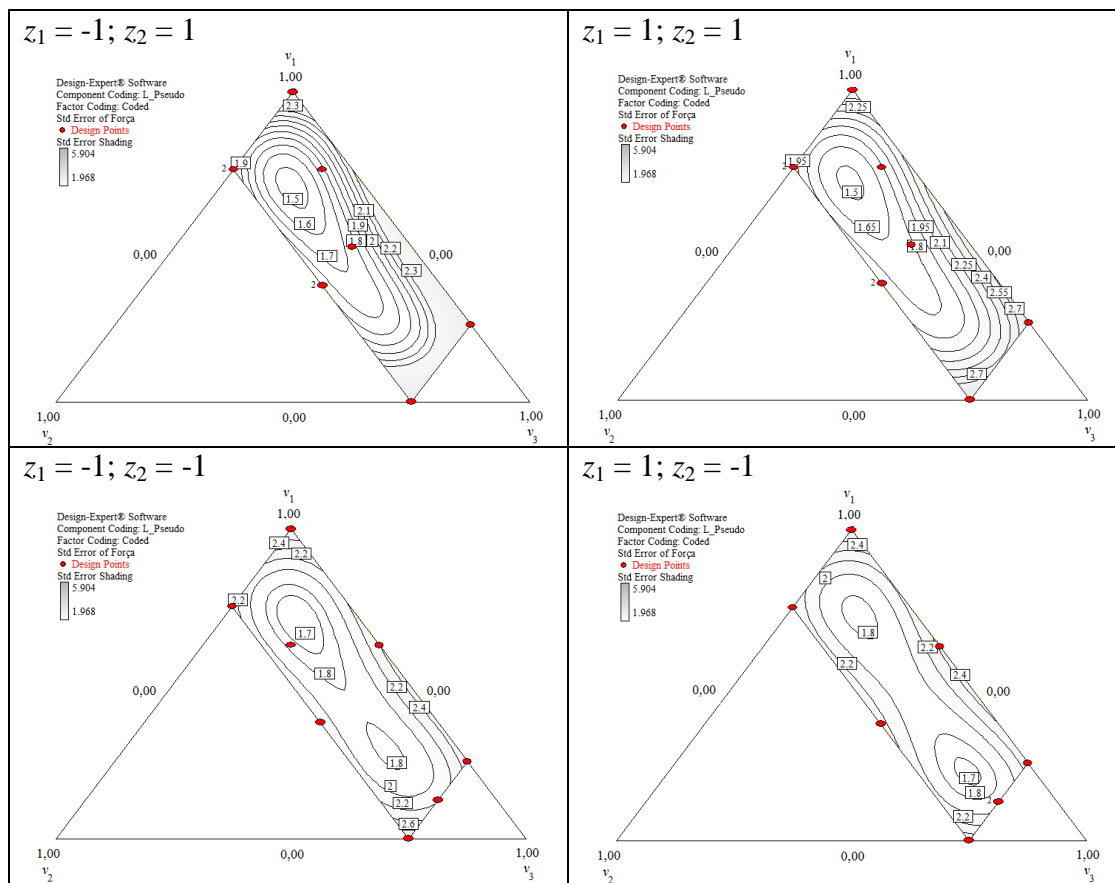


Figura 23 - Gráficos de contorno do desvio-padrão da média para o modelo (3.8)

Nas Figuras 24 e 25 são apresentados os gráficos de contorno da previsão da resposta e do desvio-padrão da média de futuras respostas em função dos L-pseudocomponentes e das variáveis de processo codificadas (em suas quatro combinações), considerando o Modelo Final (4.21).

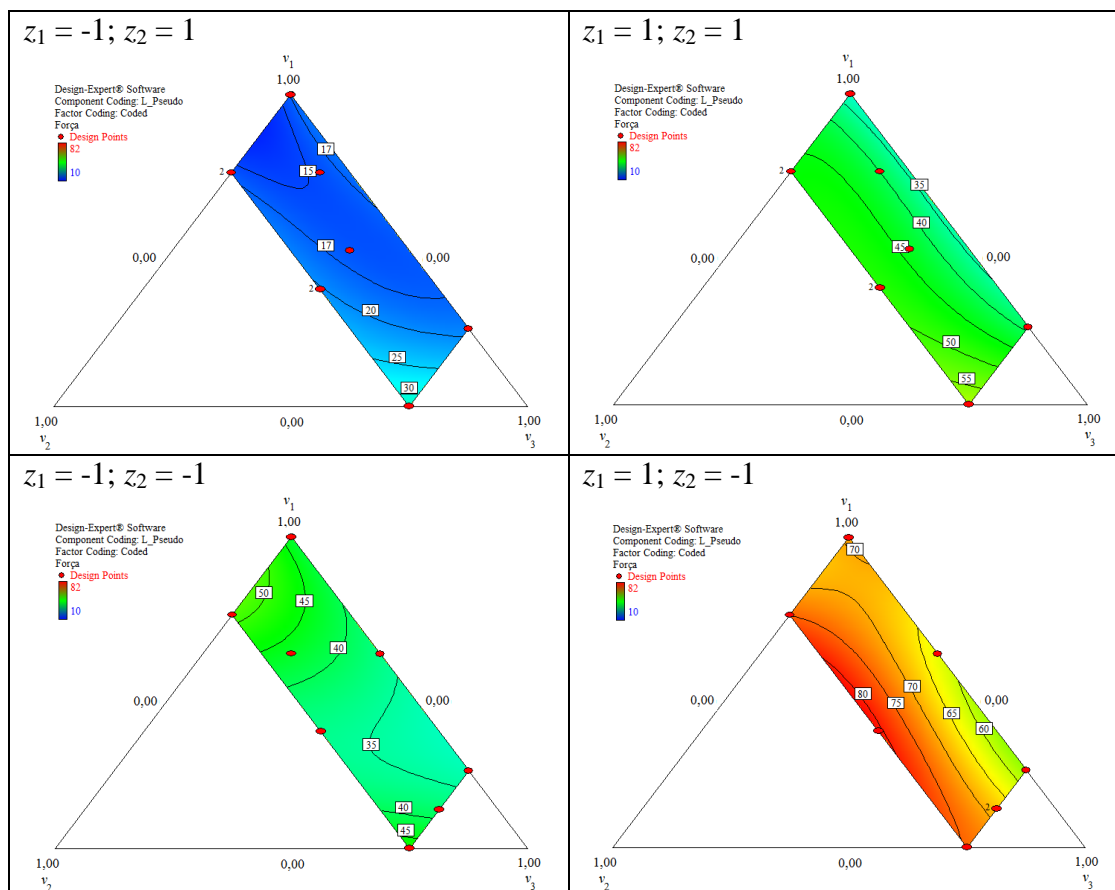


Figura 24 - Gráficos de contorno da previsão da resposta para o Modelo Final (4.21)

Ao se comparar os gráficos de contorno da previsão da resposta, apresentados nas Figuras 22 e 24, percebe-se que o Modelo Final (4.21) permite a obtenção de valores de respostas superiores em relação ao modelo (3.8) e possibilita ainda, a obtenção de desvios-padrão da média de futuras respostas inferiores, conforme Figura 23 e 25.

Varias formulações podem resultar em futuras previsões da resposta superior a 40 libras. Por conseguinte, um objetivo desejável é maximizar o valor esperado para uma futura resposta. Um procedimento de otimização será apresentado na Seção 5.

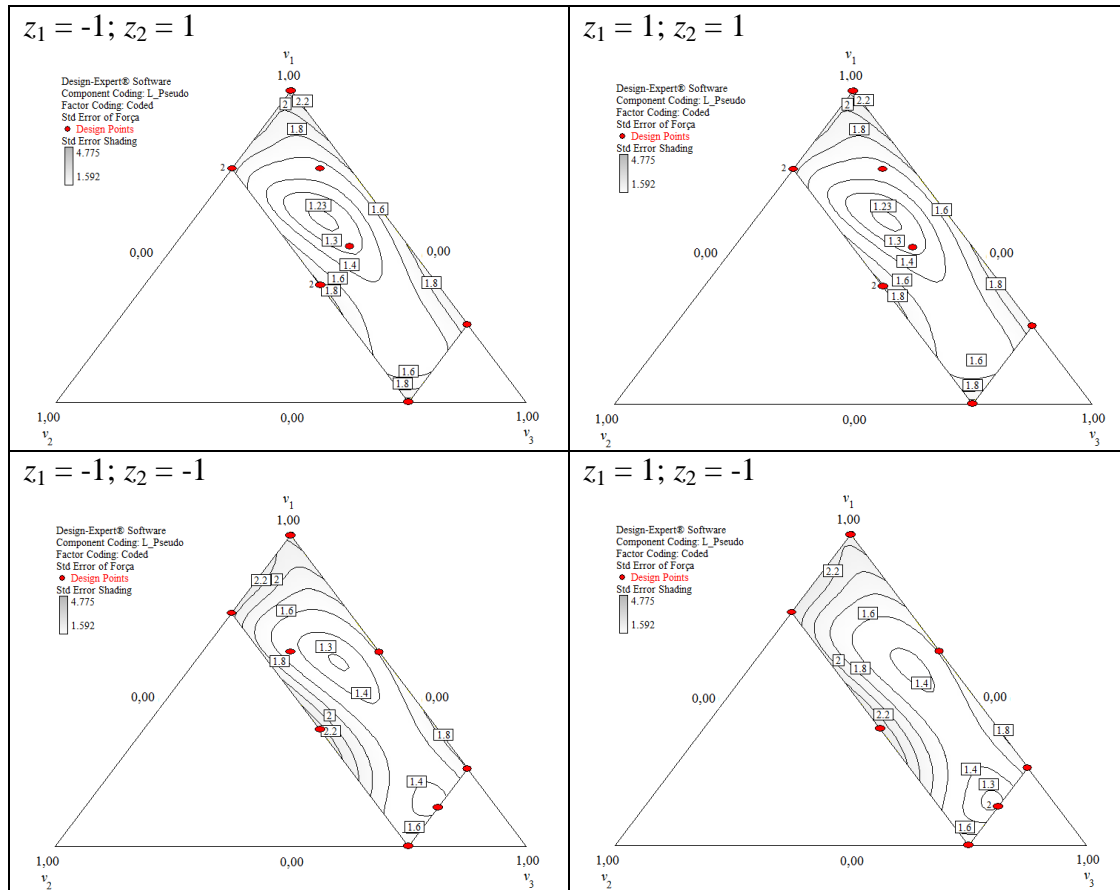


Figura 25 - Gráficos de contorno do desvio-padrão da média para o Modelo Final (4.21)