5
Otimização da Resposta

Nesta seção serão apresentadas as otimizações das respostas para os dois Estudos de Caso, levando em consideração os respectivos modelos selecionados no Capítulo 4.

5.1.
Caso 1

No estudo de caso da espuma do xampu, é recomendável que a altura de espuma obtida apresente um valor superior a 170 mm. Várias formulações podem resultar em uma média de futuras previsões da resposta superior a 170 mm. Sendo assim, um objetivo desejável é maximizar o valor esperado para uma futura resposta.

O vetor estimado para os coeficientes é $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{W}'\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}'\mathbf{y}$, cuja matriz variância-covariância é $\mathrm{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2(\mathbf{W}'\mathbf{W})^{-1}$. O valor previsto para a resposta no ponto **w** (**w'** é uma matriz linha de **W**) é representado por $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{w})$ e sua variância é $\mathrm{var}[\hat{y}(\mathbf{w})] = \sigma^2\mathbf{w}'(\mathbf{W}'\mathbf{W})^{-\mathbf{1}}\mathbf{w}$. Suponha um ponto qualquer $\mathbf{w}_0$ no espaço dos componentes de mistura, o modelo no ponto pode ser representado como $y(\mathbf{w}_0) = \mathbf{w}'_0\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$.

A estimativa para uma nova resposta neste ponto é a mesma estimativa da média:

$$E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = \mathbf{w}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}} \tag{5.1}$$

A variância para a nova resposta neste ponto é então:

$$\mathrm{var}[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = \mathrm{var}(\mathbf{w}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}} + \boldsymbol{\varepsilon}) = \mathrm{var}(\mathbf{w}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}) + \mathrm{var}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\sigma}^2\mathbf{w}'_0(\mathbf{W}'\mathbf{W})^{-1}\mathbf{w}_{\mathbf{0}} + \boldsymbol{\sigma}^2 \tag{5.2}$$

O problema de otimização pode ser formulado da seguinte maneira:

$$\max\ E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = \mathbf{w}'_0\boldsymbol{\beta}$$

Sujeito a:

$$v_1 + v_2 + v_3 = 1;$$
$$0 \le v_1 \le 1;$$
$$0 \le v_2 \le 0{,}3;$$
$$0 \le v_3 \le 0{,}7.$$

Utilizando uma rotina de busca exaustiva na região das restrições dos componentes da mistura, codificada na linguagem do Matlab®, maximizou-se o valor esperado para uma futura resposta do Modelo Final (4.15), encontrando a solução:

$$v_1 = 0{,}6103;\ v_2 = 0{,}1397;\ v_3 = 0{,}2500;$$

$$\operatorname{var}[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = 27{,}8203;\ E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = 177{,}3530.$$

Utilizando a Equação (2.6), tem-se a seguinte solução em termos de componentes reais:

$$x_1 = 0{,}5221;\ x_2 = 0{,}1679;\ x_3 = 0{,}3100.$$

Em termos de proporções verdadeiras dos componentes, tem-se:

$$\mathrm{A} = 0{,}2610;\ \mathrm{B} = 0{,}0840;\ \mathrm{C} = 0{,}1550.$$

Comparando a solução obtida com a aplicação desta metodologia à utilizada por Cornell (2000) e Myers & Montgomery (2002), gerou-se a Tabela 21.

Tabela 21 - Comparativo dos Modelos de Mistura

Modelo	*Equação*	*PRESS*	*MSE*	AIC_c	$\operatorname{var}[\hat{y}(\mathbf{w}_0)]$	$E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)]$
Cornell Myers & Montgomery	(2.9) (2.10)	657,1	25,14	83,9	37,74	174,14
Modelo Final (4.15)	(4.15)	348,7	16,61	56,2	27,82	177,35
Redução obtida		46,9%	33,9%	33,0%	26,29%	-

Na Tabela 22 são comparados os modelos de Cornell (2000) e Myers & Montgomery (2002) ao Modelo Final (4.15), apresentando os valores dos componentes da mistura (em L-pseudocomponentes e *actual* componentes) que maximizam o valor esperado de uma futura resposta.

Tabela 22 - Valores dos componentes de mistura em L-pseudocomponentes e *actual* componentes

Modelo	*Equação*	v_1 (A)	v_2 (B)	v_3 (C)
Cornell Myers & Montgomery	(2.9) (2.10)	0,6040 (0,2604)	0,0855 (0,0786)	0,3105 (0,1611)
Modelo Final (4.15)	(4.15)	0,6103 (0,2610)	0,1397 (0,0840)	0,2500 (0,1550)

5.2.
Caso 2

No estudo de caso do adesivo de aplicação aeroespacial, é desejável que a força exigida para separar os componentes após o tempo de cura seja superior a 40 libras. Sendo assim, um objetivo desejável é maximizar o valor esperado para uma futura resposta.

Considerando que a média e a variância foram determinadas conforme as Equações (5.1) e (5.2), respectivamente, o problema de otimização pode ser formulado da seguinte maneira:

$$\max\ E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = \mathbf{w}_0'\boldsymbol{\beta}$$

Sujeito a:

$$v_1 + v_2 + v_3 = 1;$$
$$0 \leq v_1 \leq 1;$$
$$0 \leq v_2 \leq 0{,}25;$$
$$0 \leq v_3 \leq 0{,}75;$$
$$-1 \leq z_1 \leq 1;$$
$$-1 \leq z_2 \leq 1.$$

Utilizando uma rotina de busca exaustiva na região das restrições dos componentes da mistura, codificada na linguagem do Matlab®, maximizou-se o valor esperado de uma futura resposta do Modelo Final (4.21), encontrando a solução:

$$v_1 = 04638;\ v_2 = 0{,}2600;\ v_3 = 0{,}2762;\ z_1 = 1{,}0000;\ z_2 = -1{,}0000;$$

$$\mathrm{var}[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = 16{,}0093;\ E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = 82{,}3177.$$

Utilizando a Equação (2.6), tem-se a seguinte solução em termos de componentes reais:

$$x_1 = 0{,}7928;\ x_2 = 0{,}1020;\ x_3 = 0{,}1052;\ z_1 = 100°\mathrm{F};\ z_2 = 15{,}0\%\mathrm{UR}.$$

Analisando e comparando a solução obtida com a aplicação desta metodologia à utilizada por Myers & Montgomery (2002), gerou-se a Tabela 23.

Tabela 23 - Comparativo dos Modelos de Mistura-Processo

Modelo	*Equação*	*PRESS*	*MSE*	*AIC$_c$*	$\mathrm{var}[\hat{y}(\mathbf{w}_0)]$	$E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)]$
Myers & Montgomery	(3.8)	903,2	15,5	122,6	21,5172	80,1773
Modelo Final (4.21)	(4.21)	515,4	10,1	108,1	16,0093	82,3177
Redução obtida		42,9%	34,4%	11,7%	25,60%	-

Na Tabela 24 são comparados os modelos de Myers & Montgomery (2002) ao Modelo Final (4.21), apresentando os valores dos componentes da mistura (em L-pseudocomponentes e componentes reais) e os níveis das variáveis de processo que maximizam o valor esperado de uma futura resposta.

Tabela 24 - Valores dos componentes de mistura em L-pseudocomponentes e componentes reais e níveis das variáveis de processo

Modelo	*Equação*	v_1 (x_1)	v_2 (x_2)	v_3 (x_3)	z_1 (T(°F))	z_2 (UR(%))
Myers & Montgomery	(3.8)	0,7400 (0,848)	0,2600 (0,102)	0,000 (0,050)	1,0 (100,0)	-1,0 (15,0)
Modelo Final (4.15)	(4.21)	0,4638 (0,793)	0,2600 (0,102)	0,2762 (0,105)	1,0 (100,0)	-1,0 (15,0)

Com o intuito de facilitar o controle das variáveis de processo durante a cura do adesivo, o experimentador recomenda uma temperatura de 70°F e umidade relativa de 30% (Myers & Montgomery, 2002).

Com isso, o problema de otimização pode ser formulado da seguinte maneira:

$$\max\ E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = \mathbf{w}_0'\boldsymbol{\beta}$$

Sujeito a:

$$v_1 + v_2 + v_3 = 1;$$
$$0 \le v_1 \le 1;$$
$$0 \le v_2 \le 0{,}25;$$
$$0 \le v_3 \le 0{,}75;$$
$$z_1 = 0;$$
$$z_2 = -0{,}57143.$$

Utilizando uma rotina de busca exaustiva na região das restrições dos componentes da mistura, codificada na linguagem do Matlab®, maximizou-se o valor esperado de uma futura resposta do Modelo (4.21), encontrando a solução:

$$v_1 = 0{,}000;\ v_2 = 0{,}2600;\ v_3 = 0{,}7400;\ z_1 = 0{,}000;\ z_2 = -0{,}57143;$$

$$\mathrm{var}[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = 13{,}4288;\ E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)] = 58{,}2788.$$

Utilizando a Equação (2.6), tem-se a seguinte solução em termos de componentes reais:

$$x_1 = 0{,}7000;\ x_2 = 0{,}1020;\ x_3 = 0{,}1980;\ z_1 = 70°\mathrm{F};\ z_2 = 30{,}0\%\mathrm{UR}.$$

Analisando e comparando a solução obtida com a aplicação desta metodologia à utilizada por Myers & Montgomery (2002), gerou-se a Tabela 25.

Tabela 25 - Comparativo dos Modelos de Mistura-Processo (Condição sugerida pelo experimentador)

Modelo	*Equação*	*PRESS*	*MSE*	$\text{var}[\hat{y}(\mathbf{w}_0)]$	$E[\hat{y}(\mathbf{w}_0)]$
Myers & Montgomery	(3.8)	903,20	15,45	18,1619	58,3423
Modelo Final (4.21)	(4.21)	515,43	10,13	12,4288	58,2788
Redução obtida		42,93%	34,42%	31,57%	-

Na Tabela 26 são comparados os modelos Myers & Montgomery (2002) ao Modelo Final (4.21), apresentando os valores dos componentes da mistura (em componentes reais).

Tabela 26 - Valores dos componentes de mistura em componentes reais e níveis das variáveis de processo (Condição sugerida pelo experimentador)

Modelo	*Equação*	x_1	x_2	x_3	z_1 (°F)	z_2 (%UR)
Myers & Montgomery	(3.8)	0,8480	0,1020	0,050	70	30
Modelo Final (4.21)	(4.21)	0,700	0,1020	0,1980	70	30