

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO



Luiz Henrique Abreu Dal Bello

**Modelagem em Experimentos Mistura-Processo para
Otimização de Processos Industriais**

Tese de Doutorado

Tese apresentada como requisito parcial para
obtenção do título de Doutor pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Industrial da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Antonio Fernando de Castro Vieira

Rio de Janeiro,
Setembro de 2010



Luiz Henrique Abreu Dal Bello

Modelagem em Experimentos Mistura-Processo para Otimização de Processos Industriais

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Industrial da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Antonio Fernando de Castro Vieira

Orientador

Departamento de Engenharia Industrial - PUC-Rio

Prof. Paulo Afonso Lopes da Silva

IME

Prof. Eugenio Kahn Epprecht

Departamento de Engenharia Industrial - PUC-Rio

Prof. Antonio Fernando Branco Costa

UNESP - Universidade Est. Paulista Júlio de Mesquita Filho

Prof. Maysa Sacramento de Magalhães

ENCE/IBGE

Prof. José Eugenio Leal

Coordenador(a) Setorial do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 22 de setembro de 2010

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Luiz Henrique Abreu Dal Bello

Graduou-se em Engenharia Mecânica pelo IME no ano 2000 e concluiu o Mestrado em Engenharia de Produção na PUC-Rio em 2005. É engenheiro do Centro Tecnológico do Exército (CTEx) desde 2001 e professor do Departamento de Engenharia Industrial da PUC-Rio desde 2007.

Ficha Catalográfica

Dal Bello, Luiz Henrique Abreu

Modelagem em experimentos mistura-processo para otimização de processos industriais / Luiz Henrique Abreu Dal Bello ; orientador: Antonio Fernando de Castro Vieira. – 2010.

155 f. : il. ; 30 cm

Tese (doutorado)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Industrial, 2010.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Industrial – Teses. 2. Experimentos com mistura. 3. Variável de processo. 4. Regressão linear. 5. Critério de informação. 6. Otimização. I. Vieira, Antonio Fernando de Castro. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Industrial. III. Título.

CDD: 658.5

Agradecimentos

Ao meu orientador Professor Antonio Fernando de Castro Vieira, pela orientação preciosa e parceria na realização deste trabalho.

Ao meu chefe Marcello Menezes Eifler, por todo incentivo e apoio.

Aos professores que participaram da Comissão Examinadora.

A todos os professores e funcionários do Departamento de Engenharia Industrial, pelos ensinamentos e pela ajuda.

A Bruna, pelo companheirismo, compreensão e apoio incondicional.

Aos meus pais, pela educação recebida e pelo incentivo.

Por fim, a Deus, por me dar saúde e força de vontade para superar os desafios.

Resumo

Dal Bello, Luiz Henrique Abreu; de Castro Vieira, Antonio Fernando; **Modelagem em Experimentos Mistura-Processo para Otimização de Processos Industriais**. Rio de Janeiro, 2010. 155p. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Industrial, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Nesta tese é apresentada uma metodologia de seleção de modelos em experimentos mistura-processo e reunidas as técnicas estatísticas necessárias ao planejamento e análise de experimentos com mistura com ou sem variáveis de processo. Na pesquisa de seleção de modelos foi utilizado um experimento para determinar as proporções ótimas de um misto químico do mecanismo de retardo para ignição de um motor foguete. O misto químico 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 investigar as proporções dos componentes da mistura e os níveis das variáveis de processo que colocam o valor esperado do tempo de retardo (resposta) o mais próximo possível do valor alvo e, ao mesmo tempo, minimizam o tamanho do intervalo de previsão de uma futura resposta. Foi ajustado um modelo de regressão linear com respostas normais. Com o modelo desenvolvido foram determinadas as proporções ótimas dos componentes da mistura e os níveis ótimos das variáveis de processo. Para a seleção do modelo foi utilizada uma metodologia de duas etapas, que provou ser eficiente no caso estudado.

Palavras-chave

experimentos com mistura; variável de processo; regressão linear; critério de informação; otimização

Abstract

Dal Bello, Luiz Henrique Abreu; de Castro Vieira, Antonio Fernando; **Modeling in Mixture-Process Experiments for Optimization of Industrial Processes.** Rio de Janeiro, 2010. 155p. D.Sc. Thesis – Departamento de Engenharia Industrial, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

This thesis presents a methodology for model selection in mixture-process experiments and puts together the statistical techniques for the design and analysis of mixture experiments with or without process variables. An experiment of a three-component mixture of a delay mechanism to start a rocket engine was used in the research. Besides the mix components proportions, two process variables are considered. The aim of the study is to investigate the proportions of the mix components and the levels of the process variables that set the expected delay time (response) as close as possible to the target value and, at the same time, minimize the width of the prediction interval for the response. A linear regression model with normal responses was fitted. Through the developed model, the optimal proportions of the mix components and the levels of the process variables were determined. A two-stage methodology was used to select the model. This methodology for model selection proved to be efficient in the studied case.

Keywords

mixture experiments; process variable; linear regression; information criterion; optimization

Sumário

1	Introdução	15
1.1.	Justificativa do Trabalho	16
1.2.	Objetivos do Trabalho	17
1.2.1.	Objetivo Principal	17
1.2.2.	Objetivos Intermediários	17
1.3.	Contribuição Original da Pesquisa	18
1.4.	Estrutura do Trabalho	18
2	Experimentos com Mistura	21
2.1.	Modelos de Scheffé para Experimentos com Mistura	23
2.2.	Modelos para Experimentos com Mistura com Variável de Folga	23
2.3.	Pseudocomponentes	25
2.4.	Experimento Gerado Computacionalmente	27
2.4.1.	Escolha dos Pontos Candidatos	27
2.4.2.	Critérios de Seleção	28
2.5.	Exemplo 1	30
3	Experimento com Mistura com Respostas Não-Normais	35
3.1.	Exemplo 2	35
3.1.1.	Modelos Lineares Generalizados	40
3.1.2.	Otimização da Resposta	48
4	Experimentos Mistura-Processo	50
4.1.	Modelo para Variáveis de Processo	51
4.2.	Modelos para Mistura incluindo Variáveis de Processo	51
4.3.	Experimento Mistura-Processo D-ótimo	55
4.4.	Exemplo 3	56
4.4.1.	Combinação Aditiva: Modelos de Scheffé e com Variável de Folga	59

4.4.2. Combinação Multiplicativa: Modelos de Scheffé e com Variável de Folga	72
4.4.3. Comparação dos Modelos Combinados Aditivos e Multiplicativos	84
4.4.4. Combinação Simultânea Aditiva e Multiplicativa: Modelo de Scheffé	86
5 Critérios de Informação e Seleção de Modelos	93
5.1. Critérios de Informação	95
5.1.1. Critério de Akaike (AIC)	95
5.1.2. Critério AIC_c	96
5.1.3. Critério AIC_u	97
5.1.4. Critério HQ_c	97
5.2. Eficiência e Consistência	97
5.3. Utilização dos Critérios de Informação	98
5.4. Diferenças de AIC	112
6 Metodologia Proposta para Seleção de Modelos	135
6.1. Primeira Etapa	135
6.2. Segunda Etapa	136
6.3. Otimização da Resposta	142
6.4. Oportunidade de Melhoria	144
7 Síntese e Conclusões	148
Referências Bibliográficas	152

Lista de figuras

Figura 1 - Espaço fatorial restrito para misturas com a) 2 e b) 3 componentes	21
Figura 2 - Sistema de coordenadas trilinear	22
Figura 3 - Restrições a) inferiores e b) superiores nas proporções dos componentes	25
Figura 4 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	32
Figura 5 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	32
Figura 6 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	33
Figura 7 - Gráfico de contorno da previsão da resposta para o Modelo (2.15)	34
Figura 8 - Gráfico de contorno do desvio-padrão para o Modelo (2.15)	34
Figura 9 - Experimento do misto de retardo D-ótimo com respostas não-normais	36
Figura 10 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	38
Figura 11 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	38
Figura 12 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	39
Figura 13 - Gráfico para verificação de não constância da variância	39
Figura 14 - Gráfico de probabilidade normal	46
Figura 15 - Resíduos <i>quase-deviance studentized</i> × valor ajustado	47
Figura 16 - Resíduos <i>quase-deviance studentized</i> × valor ajustado	47
Figura 17 - Mistura de 3 componentes com 2 variáveis de processo	52
Figura 18 - Experimento do misto de retardo D-Ótimo com L-pseudocomponentes	59
Figura 19 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	60
Figura 20 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	61
Figura 21 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	61
Figura 22 - Gráfico para verificação de não constância da variância	62
Figura 23 - Gráfico de contorno da previsão da resposta para o Modelo (4.12)	63
Figura 24 - Gráfico de contorno do desvio-padrão para o Modelo (4.12)	63

Figura 25 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	65
Figura 26 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	66
Figura 27 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	66
Figura 28 - Gráfico para verificação de não constância da variância	67
Figura 29 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	68
Figura 30 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	68
Figura 31 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	69
Figura 32 - Gráfico para verificação de não constância da variância	69
Figura 33 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	70
Figura 34 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	71
Figura 35 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	71
Figura 36 - Gráfico para verificação de não constância da variância	72
Figura 37 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	73
Figura 38 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	74
Figura 39 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	74
Figura 40 - Gráfico para verificação de não constância da variância	75
Figura 41 - Gráfico de contorno da previsão da resposta para o Modelo (4.19)	75
Figura 42 - Gráfico de contorno do desvio-padrão para o Modelo (4.19)	76
Figura 43 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	77
Figura 44 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	77
Figura 45 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	78
Figura 46 - Gráfico para verificação de não constância da variância	78
Figura 47 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	79
Figura 48 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	80
Figura 49 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	80
Figura 50 - Gráfico para verificação de não constância da variância	81
Figura 51 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	82
Figura 52 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	82
Figura 53 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	83
Figura 54 - Gráfico para verificação de não constância da variância	83
Figura 55 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	88
Figura 56 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	88

Figura 57 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	89
Figura 58 - Gráfico para verificação de não constância da variância	89
Figura 59 - Gráfico de contorno da previsão da resposta para o Modelo (4.29)	90
Figura 60 - Gráfico de contorno do desvio-padrão para o Modelo (4.29)	91
Figura 61 - AIC_c mínimo em função do número de parâmetros	101
Figura 62 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	102
Figura 63 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	103
Figura 64 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	103
Figura 65 - Gráfico para verificação de não constância da variância	104
Figura 66 - AIC_u mínimo em função do número de parâmetros	105
Figura 67 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	106
Figura 68 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	107
Figura 69 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	107
Figura 70 - Gráfico para verificação de não constância da variância	108
Figura 71 - HQ_c mínimo em função do número de parâmetros	109
Figura 72 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	110
Figura 73 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	110
Figura 74 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	111
Figura 75 - Gráfico para verificação de não constância da variância	111
Figura 76 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	133
Figura 77 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	133
Figura 78 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	134
Figura 79 - Gráfico para verificação de não constância da variância	134
Figura 80 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	138
Figura 81 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	138
Figura 82 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	139
Figura 83 - Gráfico para verificação de não constância da variância	139
Figura 84 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos <i>studentized</i>	140
Figura 85 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus run number</i>	141
Figura 86 - Gráfico de resíduos <i>studentized versus</i> valor ajustado	141
Figura 87 - Gráfico para verificação de não constância da variância	142

Figura 88 - Gráfico de contorno da previsão da resposta para o Modelo (6.2)	143
Figura 89 - Gráfico de contorno do desvio-padrão para o Modelo (6.2)	143
Figura 90 - AIC_c mínimo em função do número de parâmetros	146
Figura 91 - $n \ln \hat{\sigma}_p^2$ versus número de parâmetros	147
Figura 92 - Função de penalidade em função do número de parâmetros	147

Lista de tabelas

Tabela 1 - Experimento do misto de retardo D-ótimo	30
Tabela 2 - Teste do Modelo (2.15)	31
Tabela 3 - Experimento do misto de retardo D-ótimo com as respostas	36
Tabela 4 - Dados para o modelo	41
Tabela 5 - <i>Quasi-Deviance</i>	44
Tabela 6 - Análise de Quasi-Deviance	45
Tabela 7 - Experimento do misto de retardo D-ótimo com L-pseudocomponentes	58
Tabela 8 - Teste do Modelo (4.12)	60
Tabela 9 - Teste do Modelo (4.19)	73
Tabela 10 - Comparativo dos Modelos Mistura-Processo	85
Tabela 11 - Teste do Modelo (4.29)	87
Tabela 12 - Comparativo dos Modelos Mistura-Processo de Scheffé	91
Tabela 13 - Número de modelos em função do número de parâmetros	100
Tabela 14 - p versus $\min_{\phi} \mathbf{MC}_c$	100
Tabela 15 - Teste do Modelo (5.9)	101
Tabela 16 - p versus $\min_{\phi} \mathbf{MC}_u$	104
Tabela 17 - Teste do Modelo (5.10)	105
Tabela 18 - p versus $\min_{\phi} \mathbf{HQ}_c$	108
Tabela 19 - Teste do Modelo (5.11)	109
Tabela 20 - Comparativo dos Modelos Mistura-Processo	112
Tabela 21 - Modelos indiferentes com 9 parâmetros (M1 a M6)	114
Tabela 22 - Modelos indiferentes com 9 parâmetros (M7 a M12)	115
Tabela 23 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M13 a M18)	116
Tabela 24 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M19 a M24)	117
Tabela 25 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M25 a M30)	118
Tabela 26 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M31 a M36)	119
Tabela 27 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M37 a M42)	120
Tabela 28 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M43 a M48)	121
Tabela 29 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M49 a M54)	122

Tabela 30 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M55 a M60)	123
Tabela 31 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M61 a M66)	124
Tabela 32 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M67 a M72)	125
Tabela 33 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M73 a M78)	126
Tabela 34 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M79 a M84)	127
Tabela 35 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M85 a M90)	128
Tabela 36 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M91 a M95)	129
Tabela 37 - Modelos indiferentes com 12 parâmetros (M96 a M101)	130
Tabela 38 - Modelos indiferentes com 12 parâmetros (M102 a M108)	131
Tabela 39 - Teste do Modelo (5.12)	132
Tabela 40 - Termos Equivalentes	136
Tabela 41 - Teste do Modelo (6.2)	137
Tabela 42 - Comparativo dos Modelos	142
Tabela 43 - Número de modelos em função do número de parâmetros	145