

### 3 Experimento com Mistura com Respostas Não-Normais

Neste capítulo é apresentado o planejamento e análise de um EM com respostas não normais, que está detalhado em Dal Bello (2005) e cuja síntese está em Vieira & Dal Bello (2006) e Dal Bello & Vieira (2010).

#### 3.1. Exemplo 2

O objetivo do experimento é encontrar a formulação ideal de um misto químico de forma que o seu tempo de queima (resposta) seja de 8 segundos. O misto é composto por uma mistura de Zarfesil ( $x_1$ ), Vidro Moído ( $x_2$ ) e Nitrocelulose ( $x_3$ ). As restrições nas proporções dos três componentes são as seguintes:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

$$0,79 \leq x_1 \leq 0,87$$

$$0,08 \leq x_2 \leq 0,16$$

$$0,05 \leq x_3 \leq 0,07$$

Com essas restrições, foi utilizado o software Design-Expert<sup>®</sup> para a escolha dos pontos candidatos e seleção dos pontos experimentais segundo o critério D-otimização. Considerando a sugestão de Myers & Montgomery (2002) para a seleção dos pontos candidatos na região experimental resultante e sabendo que o modelo adotado inicialmente é o quadrático, o software sugere um total de 10 pontos, dos quais 6 são necessários para o ajuste do modelo quadrático e 4 pontos adicionais são para testar a falta de ajuste do modelo. Ademais, 4 dos 10 pontos são replicados para estimar o desvio-padrão da resposta, perfazendo um total de 14 observações. Com isso, o Design-Expert<sup>®</sup> gera um projeto de experimento D-ótimo conforme a Tabela 3, onde também se observam as respostas. Na Figura 9 tem-se a representação gráfica do projeto de experimento e pontos experimentais.

Tabela 3 - Experimento do misto de retardo D-ótimo com as respostas

Run	$x_1$	$x_2$	$x_3$	Tempo (s)
1	0,79	0,16	0,05	19,70
2	0,79	0,16	0,05	19,14
3	0,83	0,12	0,05	4,72
4	0,87	0,08	0,05	1,85
5	0,87	0,08	0,05	1,59
6	0,8075	0,1375	0,055	9,53
7	0,8475	0,0975	0,055	1,90
8	0,79	0,15	0,06	12,03
9	0,86	0,08	0,06	1,04
10	0,79	0,14	0,07	0,77
11	0,79	0,14	0,07	0,89
12	0,82	0,11	0,07	0,23
13	0,85	0,08	0,07	0,25
14	0,85	0,08	0,07	0,51

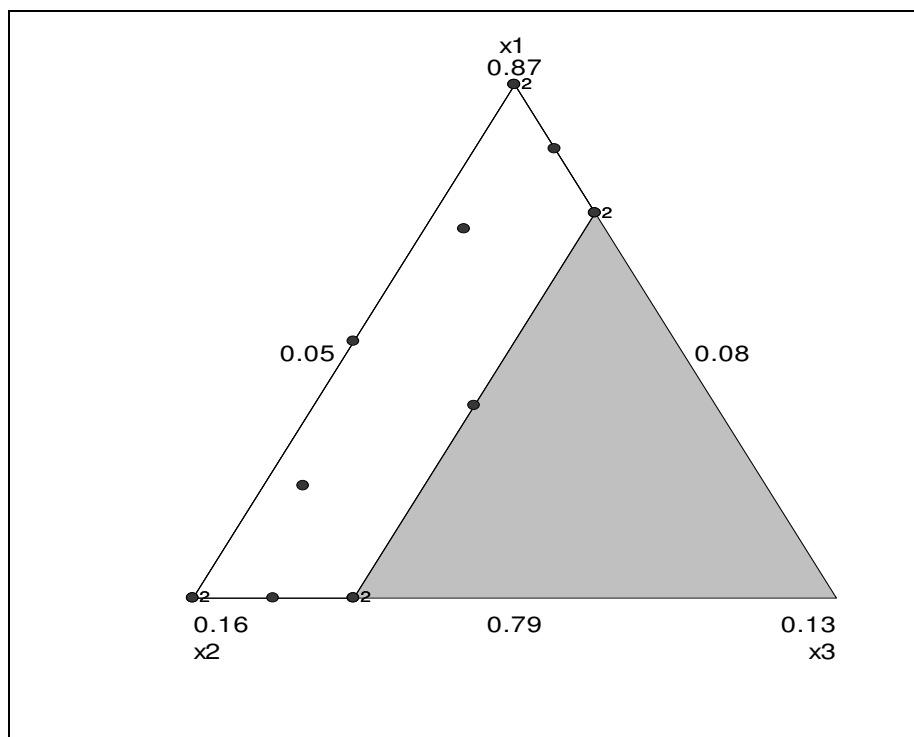


Figura 9 - Experimento do misto de retardo D-ótimo com respostas não-normais

Aplicando o teste *t*-student a um nível de confiança de 95% foi ajustado o seguinte modelo:

$$\hat{y} = 318,85x_1 + 8721,33x_2 - 256135,53x_3 - 12494,31x_1x_2 + 421048,23x_1x_3 + 153766,65x_2x_3 - 174591,55x_1x_3(x_1 - x_3) \quad (3.1)$$

## Adequação do Modelo

Para verificar a suposição de normalidade tem-se o gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized* (Figura 10). Para verificar a suposição de independência, tem-se o gráfico de resíduos *studentized* das observações na ordem em que foram realizados os experimentos (Figura 11). Para verificar se o valor esperado do erro é igual a zero, tem-se o gráfico dos resíduos *studentized* versus valores ajustados (Figura 12). Em nenhum desses três gráficos houve indicação que essas suposições não devam ser aceitas.

Para verificar se a variância é constante, Cook & Weisberg (1999) propuseram um teste. Os quadrados dos resíduos  $e_i^2 = (y_i - \hat{y}_i)^2$  contêm informação sobre a função de variância. Procede-se então à regressão de  $e^2$  sobre  $\hat{y}$ , pelo método dos mínimos quadrados. A estatística de teste (*ET*) é calculada

$$SS_R = \sum_{i=1}^n \left( \hat{e}_i^2 - \sum_{i=1}^n e_i^2 / n \right)^2 \text{ pelo fator de escala } 2 \left( \sum_{i=1}^n e_i^2 / n \right).$$

$$ET = SS_R / 2 \left( \sum_{i=1}^n e_i^2 / n \right)^2 \quad (3.2)$$

Cook & Weisberg (1999) asseguram que *ET* tem distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade (número de termos da regressão de  $e^2$  sobre  $\hat{y}$ ), caso a variância seja constante. Para o caso do misto de retardo, fazendo a regressão de  $e^2$  sobre  $\hat{y}$ , utilizando a planilha Excel, obtém-se  $SS_R$  e o fator de escala. Em seguida, utilizando a Equação (3.2), tem-se que  $ET = 4,83$ . Na distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade,  $ET = 4,83$  corresponde a um *p*-valor de 0,028. Então, se rejeita a hipótese de que a variância não aumente quando a média aumenta. Esta conclusão é confirmada pelo gráfico do valor absoluto dos resíduos *studentized* versus valores ajustados, apresentado na Figura 13. Nele se observa a indicação do crescimento da variância com o aumento da média.

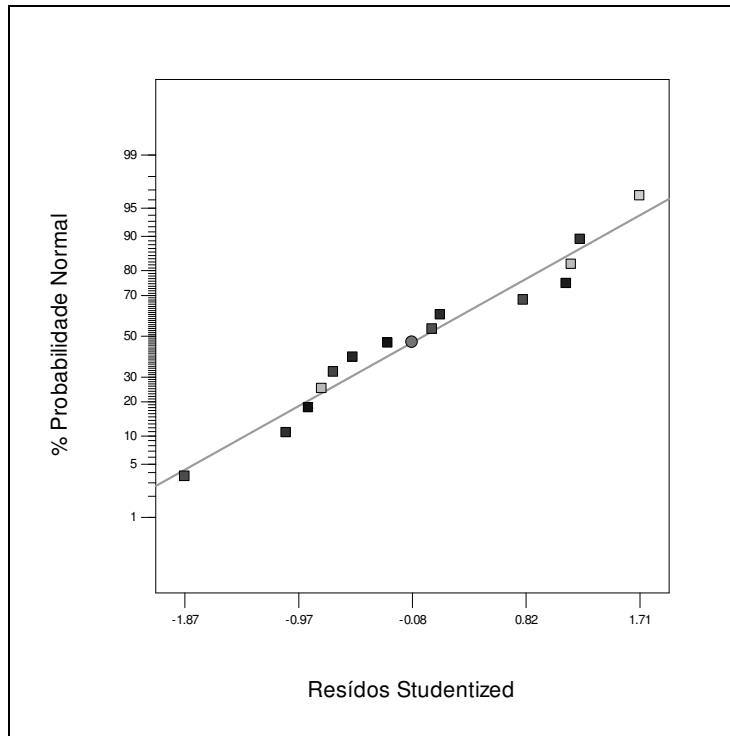


Figura 10 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*

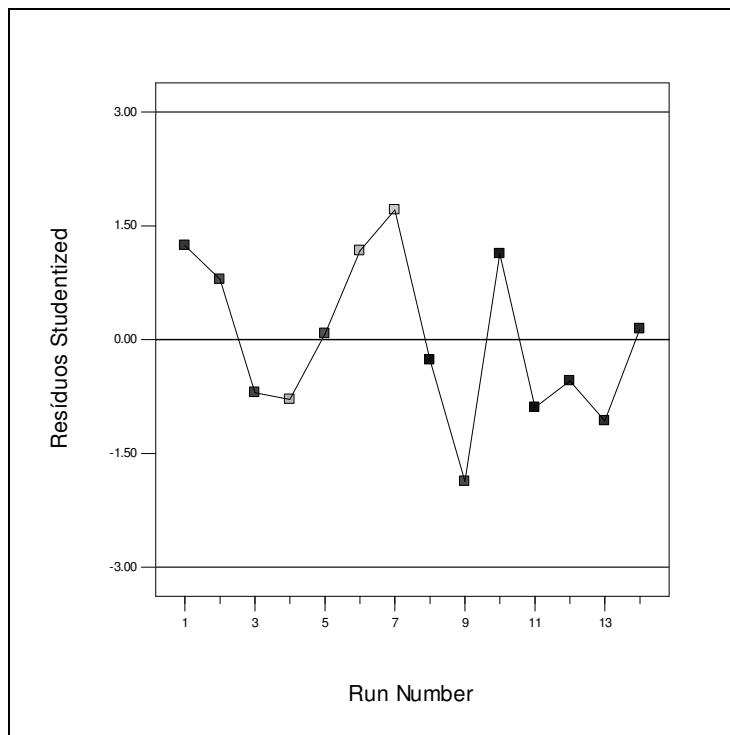


Figura 11 - Gráfico de resíduos *studentized* versus *run number*

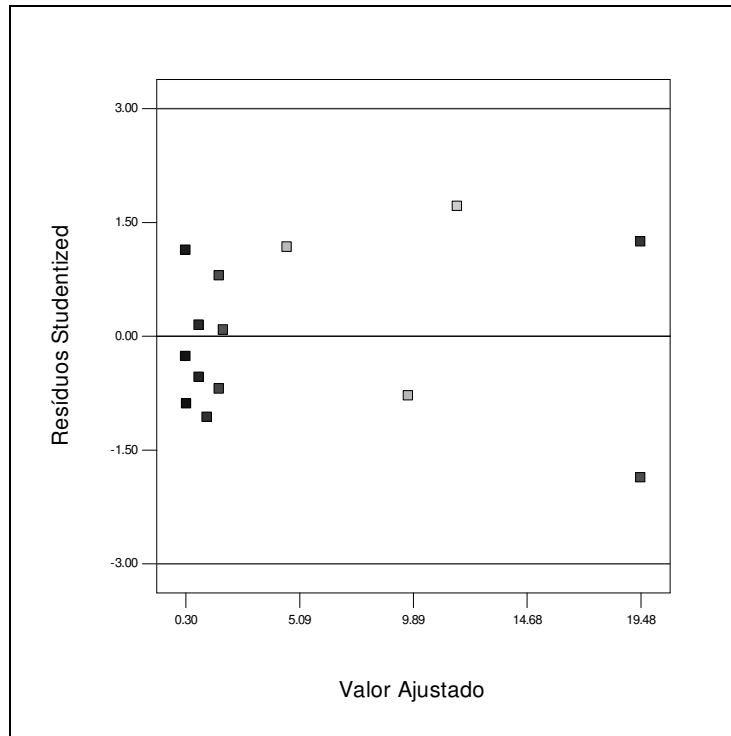


Figura 12 - Gráfico de resíduos *studentized* versus valor ajustado

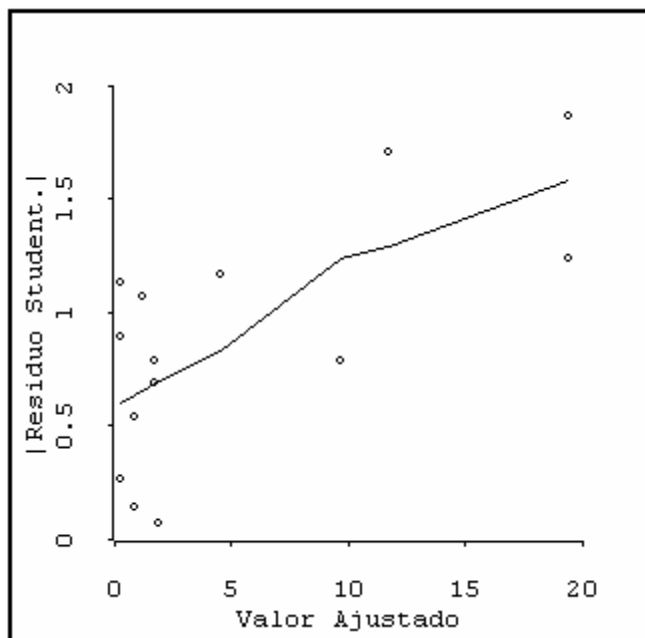


Figura 13 - Gráfico para verificação de não constância da variância

### 3.1.1. Modelos Lineares Generalizados

No modelo linear clássico, três condições são pressupostas: a resposta tem distribuição normal, a variância da resposta é constante e os efeitos dos fatores sobre a variável resposta se combinam aditivamente. Essas condições são encontradas em muitas aplicações industriais, porém nem sempre isso ocorre, como no presente caso.

Caso um ou mais dos três pressupostos não possam ser aceitos, uma alternativa é alterar a escala da variável resposta, transformando-a e usando o modelo linear e o método dos mínimos quadrados com os dados transformados. A transformação da resposta muitas vezes pode ser satisfatória, levando ao atendimento dos três pressupostos. Entretanto, quando não se consegue isso, deve-se recorrer aos Modelos Lineares Generalizados (MLG). Ademais, Lewis *et al.* (2001a) e (2001b) concluíram que os MLG devem ser preferidos à transformação da resposta, uma vez que, em todos os casos estudados pelos autores, os MLG apresentaram melhor desempenho na estimativa da resposta, pois propiciaram intervalos de confiança menores.

Com os MLG, é possível considerar outras distribuições além da normal, não é necessário considerar a variância constante (ela pode ser função da média) e pode-se conseguir linearidade por meio de uma função que faz a ligação entre a média da variável resposta e o polinômio linear das variáveis independentes. Nos MLG, usam-se as distribuições da família exponencial e a estimativa dos coeficientes do modelo é obtida com a maximização da função de log-verossimilhança. No caso de distribuição normal, efeitos aditivos e variância constante, a maximização da função de log-verossimilhança leva aos estimadores de mínimos quadrados, de modo que os modelos lineares ordinários podem ser considerados um caso particular dos MLG. Para uma descrição dos MLG, ver McCullagh & Nelder (1989) e Myers *et al.* (2002).

### Estrutura dos MLG

Considere um experimento com os dados da Tabela 4, com  $n$  respostas independentes  $y_i$ .

Tabela 4 - Dados para o modelo

$x_1$	$x_2$	...	$x_k$	$y$
$x_{11}$	$x_{12}$	...	$x_{1k}$	$y_1$
$x_{21}$	$x_{22}$	...	$x_{2k}$	$y_2$
.	.	...	.	.
.	.	...	.	.
.	.	...	.	.
$x_{n1}$	$x_{n2}$	...	$x_{nk}$	$y_n$

Tem-se:

1. Sejam  $y_1, y_2, \dots, y_n$  as variáveis de resposta com médias  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ .

2. A distribuição de probabilidade de  $y_i$  é um dos membros da família exponencial.

3. A porção sistemática do modelo é composta pelas variáveis de regressão  $x_1, x_2, \dots, x_k$ .

4. O modelo é construído com um preditor linear  $\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k$ . Cabe registrar que uma variável  $x_i$  pode representar um termo de um grau mais elevado. Por exemplo  $x_l^2 x_m$ .

5. A função de ligação  $g(\mu_i)$  faz a ligação entre a média  $\mu_i$  e o preditor linear. A função de ligação define a forma com que os efeitos sistemáticos de  $x_1, x_2, \dots, x_k$  são transmitidos para a média.

$$\eta_i = g(\mu_i) = (\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik}).$$

6. Para os membros da família exponencial, a variância da resposta tem a seguinte expressão:  $\text{var}(y_i) = \phi V(\mu_i)$ . Onde  $V(\mu_i)$  é a parte da variância da resposta  $y$  que depende da média e  $\phi$  é o parâmetro de dispersão que não depende da média e é constante.

A relação da função de variância  $V(\mu_i)$  com a média pode ser representada por uma função de potência, ou seja,  $V(\mu_i) = \mu_i^t$ .

Para testar a significância dos coeficientes, Atkinson & Riani (2000), Lindsey (1997) e McCullagh & Nelder (1989) recomendam usar a função desvio (*deviance*).

A função desvio está para os MLG como a soma dos quadrados dos resíduos está para o caso particular de modelos lineares clássicos. A função desvio de um modelo qualquer é definida como sendo o desvio deste modelo em relação ao

modelo saturado, conforme a definição (Lindsey, 1997):  $D = -2 \ln[L_{Mod} / L_{Sat}]$ , onde  $L_{Mod}$  é a função de verossimilhança do modelo em questão e  $L_{Sat}$  é a função de verossimilhança do modelo saturado, que é o modelo para o qual os valores ajustados  $\hat{\mu}_i$  são iguais às respostas observadas  $y_i$ . Com isso,

$$\begin{aligned} D(y_i, \hat{\mu}_i) &= -2 \ln[L(y_i, \hat{\mu}_i) / L(y_i, y_i)] = \\ &= -2 [\ln L(y_i, \hat{\mu}_i) - \ln L(y_i, y_i)] \end{aligned} \quad (3.3)$$

Lindsey (1997) propõe o procedimento de análise da função desvio para testar a significância dos coeficientes. Este procedimento está para os MLG assim como a análise de variância está para os modelos lineares clássicos.

### Quase-Verossimilhança

Muitas vezes, os membros da família exponencial não são distribuições adequadas para representar a variável resposta. Para os casos em que um dos membros da família exponencial não são distribuições adequadas para representar a variável resposta há um método que estima os coeficientes maximizando a função de Quase-Verossimilhança (QV). No método da QV, define-se apenas a relação da variância da resposta com a média da resposta, não sendo necessário definir a distribuição de probabilidade. McCullagh & Nelder (1989) definem a função de QV como a seguir:

Para uma observação, tem-se:

$$Q_i(y_i, \mu_i) = \int_{y_i}^{\mu_i} \frac{y_i - u}{\phi V(u)} du \quad (3.4)$$

Para  $n$  observações, tem-se:

$$Q(\mathbf{y}, \boldsymbol{\mu}) = \sum_{i=1}^n Q_i(y_i, \mu_i) = \sum_{i=1}^n \int_{y_i}^{\mu_i} \frac{y_i - u}{\phi V(u)} du \quad (3.5)$$

Com  $V(\mu_i) = \mu_i$ , tem-se:

$$Q(\mathbf{y}, \boldsymbol{\mu}) = \sum_{i=1}^n [y_i \ln(\mu_i) - \mu_i] \quad (3.6)$$

omite-se o parâmetro  $\phi$  porque não influi na estimativa dos coeficientes, sendo ele estimado após o ajuste do modelo.



Como foi visto, a relação da função de variância com a média pode ser representada por uma função de potência  $V(\mu_i) = \mu_i^t$ . Vieira (2004) mostra que, para  $t = 0, 1, 2$  e  $3$ , as funções de QV são iguais, respectivamente, às funções de Log-Verossimilhança (LV) das distribuições normal, de Poisson, gama e normal inversa, e que, para  $V(\mu) = \mu(1 - \mu)$ , que é a função de variância da binomial, a função de QV corresponde à função de LV da binomial. Portanto, a maximização da função de QV, para estas funções de variância, produz as mesmas estimativas dos coeficientes que a função de LV nos MLG, podendo-se então usar o mesmo algoritmo de estimativa dos coeficientes que nos MLG, e conseqüentemente, qualquer software comercial que tenha a opção dos MLG. Usando esta opção nos MLG, pode-se obter as estimativas dos coeficientes.

Para o caso em análise, a variância possui uma tendência de crescimento com o aumento da média. Portanto, considerando, em princípio,  $t = 1$ , ou seja,  $V(\mu_i) = \mu_i$ , tem-se que a distribuição correspondente da família exponencial é a distribuição de Poisson. Entretanto, esta é uma distribuição de variável discreta, o que não é o caso do misto de retardo, cuja resposta é uma variável contínua. Ademais, o parâmetro de dispersão  $\phi$  é igual a 1 para o caso da distribuição de Poisson. Será visto mais adiante que  $\hat{\phi} = 0,0233$  para o caso em questão, diferente, portanto, de 1.

Para testar a significância dos coeficientes, Davison (2003) recomenda a estatística *quasi-deviance*. A *quasi-deviance* está para a modelagem pela função de quase-verossimilhança como a função desvio para os MLG. Por analogia, a *quasi-deviance* de um modelo qualquer é definida como sendo o desvio deste modelo em relação ao modelo saturado:

$$\begin{aligned} D_i(y_i, \hat{\mu}_i) &= -2\phi[Q_i(y_i, \hat{\mu}_i) - Q_i(y_i, y_i)] = \\ &= -2\phi[Q_i(y_i, \hat{\mu}_i)] = 2 \int_{\mu_i}^{y_i} \frac{y_i - u}{V(u)} du \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde  $Q_i(y_i, \hat{\mu}_i)$  é a função quase-verossimilhança do modelo em questão e  $Q_i(y_i, y_i)$  é a função de quase-verossimilhança do modelo saturado.

Para  $V(u) = u$  tem-se:

$$D_i(y_i, \hat{\mu}_i) = 2 \int_{\mu_i}^{y_i} \frac{y_i - u}{V(u)} du = 2[y_i \ln(y_i/\mu_i) - (y_i - \mu_i)] \quad (3.8)$$

Para  $n$  observações, tem-se:

$$D(\mathbf{y}, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = \sum_{i=1}^n D_i(y_i, \hat{\mu}_i) \quad (3.9)$$

Vieira (2004) mostra que, para  $t = 0, 1, 2$  e  $3$ , e para  $V(\mu) = \mu(1 - \mu)$ , as estatísticas *quasi-deviance* são iguais, respectivamente, às funções desvio das distribuições normal, de Poisson, gama, normal inversa e binomial, também fornecidas por qualquer software comercial que tenha a opção de MLG.

Considerando inicialmente o modelo quadrático, obtivemos as estimativas dos coeficientes. Observamos que a predição do tempo em um dos pontos experimentais é negativa, o que indica que o modelo quadrático não é adequado para este caso. Com isso, vamos adicionar ao modelo quadrático, seqüencialmente, os termos do modelo cúbico.

A Tabela 5 mostra os valores da *quasi-deviance* com a adição seqüencial de cada um dos termos  $x_1x_2x_3$ ,  $x_1x_2(x_1 - x_2)$ ,  $x_1x_3(x_1 - x_3)$  e  $x_2x_3(x_2 - x_3)$  ao modelo quadrático.

Tabela 5 - *Quasi-Deviance*

Termo Adicionado	<i>Quasi-Deviance</i>
$x_1x_2x_3$	0,824
$x_1x_2(x_1 - x_2)$	2,035
$x_1x_3(x_1 - x_3)$	0,163
$x_2x_3(x_2 - x_3)$	2,316

Será escolhido, portanto, o termo  $x_1x_3(x_1 - x_3)$  para ser adicionado ao modelo quadrático, já que este é o que proporciona a menor *quasi-deviance*, conforme apresentado na Tabela 4.

Procede-se então com uma análise de *quasi-deviance* para a adição de novos termos ao modelo base, o qual possui sete termos ( $x_1, x_2, x_3, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3$  e  $x_1x_3(x_1 - x_3)$ ).

Considere o Modelo 1 como sendo o saturado, o Modelo 2 com  $(p + 1)$  parâmetros e o Modelo 3, aninhado no Modelo 2, com  $p$  parâmetros. Então, a diferença entre as *quasi-deviance* dos Modelos 3 e 2 é  $D_3(y_i, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i^{(3)}) - D_2(y_i, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i^{(2)})$ .

Para testar o termo adicional do modelo maior, Davison (2003) recomenda o teste da distribuição  $F$ . A estatística de teste é:  $F_0 = (D_3(y_i, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i^{(3)}) - D_2(y_i, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i^{(2)})) / \hat{\phi}_2$ , sendo que  $\hat{\phi}_2$  é a estimativa parâmetro de dispersão do Modelo 2:

$$\hat{\phi}_2 = \frac{1}{(n-p)} \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \hat{\mu}_i^{(2)})^2}{V(\hat{\mu}_i^{(2)})} = \frac{X^2}{(n-p)} \quad (3.10)$$

onde  $X^2$  é a estatística generalizada de Pearson e, para o presente caso,  $V(\hat{\mu}_i^{(2)}) = \hat{\mu}_i^{(2)}$ .

Portanto, para aceitar o Modelo 2 como sendo correto, comparamos  $F_0$  com a distribuição  $F_{1, n-p}$ .

Os resultados da análise de *quasi-deviance* são apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 - Análise de Quasi-Deviance

Termo Adicionado	Quasi-Deviance	Diferença na Quasi-Deviance	$\hat{\phi}_2$	$F_0$	$p$ -valor
$x_1x_3(x_1 - x_3)$	0,163				
$x_1x_2x_3$	0,136	0,027	0,023	1,17	0,32
$x_1x_2(x_1 - x_2)$	0,156	0,007	0,026	0,27	0,62
$x_2x_3(x_2 - x_3)$	0,136	0,027	0,023	1,17	0,32

Analisando a coluna “ $p$ -valor” da Tabela 6, conclui-se que os demais termos cúbicos não são significativos quando adicionados ao modelo base, já que todos os  $p$ -valores são maiores que 0,05.

Com isso, tem-se o modelo:

$$\hat{y} = 305,89x_1 + 8444,77x_2 - 242540,70x_3 - 12023,23x_1x_2 + 399292,58x_1x_3 + 144387,77x_2x_3 - 166047,61x_1x_3(x_1 - x_3) \quad (3.11)$$

Para verificar a adequação do modelo obtido pelo método de QV, são utilizados os resíduos. Para cada resposta  $y_i$  pode-se definir a *quasi-deviance*  $d_i = D_i(y_i, \hat{\mu}_i)$ , que é usada como medida de discrepância. Cada resposta  $i$

contribui com uma quantidade  $d_i$ , de tal modo que  $\sum_1^n d_i = D(y_i, \hat{\mu}_i)$ . Define-se

então o resíduo *quasi-deviance* correspondente a cada resposta:

$$\begin{cases} (y_i - \hat{\mu}_i) \geq 0 \rightarrow r_{Di} = \sqrt{d_i} \\ (y_i - \hat{\mu}_i) < 0 \rightarrow r_{Di} = -\sqrt{d_i} \end{cases} \quad (3.12)$$

McCullagh & Nelder (1998) recomendam os resíduos *quasi-deviance studentized* para verificar a adequação do modelo, os quais são definidos como sendo

$$r_i = \frac{r_{Di}}{\sqrt{\hat{\phi}(1-h_{ii})}} \quad (3.13)$$

onde  $\hat{\phi}$  é a estimativa do parâmetro de dispersão e  $h_{ii}$  é o  $i$ -ésimo elemento da diagonal da matriz chapéu  $\mathbf{H}$ , que é dada por:  $\mathbf{H} = \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}$ , onde a matriz  $\mathbf{W}$  é uma matriz diagonal, com os elementos da diagonal principal dados por:  $w_i = [1/V(\mu_i)] [d\mu_i/d\eta_i]^2$ .

No presente caso, tem-se que  $\hat{\phi} = 0,023$  e  $V(\mu_i) = \mu_i$ ,  $d\mu_i/d\eta_i = 1$ , pois a função de ligação é a identidade. Logo,  $w_i = 1/\mu_i$ .

A adequação do modelo e o comportamento dos resíduos com valores extremos podem ser observados com o gráfico de probabilidade normal dos resíduos *quasi-deviance studentized* (Lee & Nelder, 1998). O gráfico para o caso em questão, é mostrado na Figura 14.

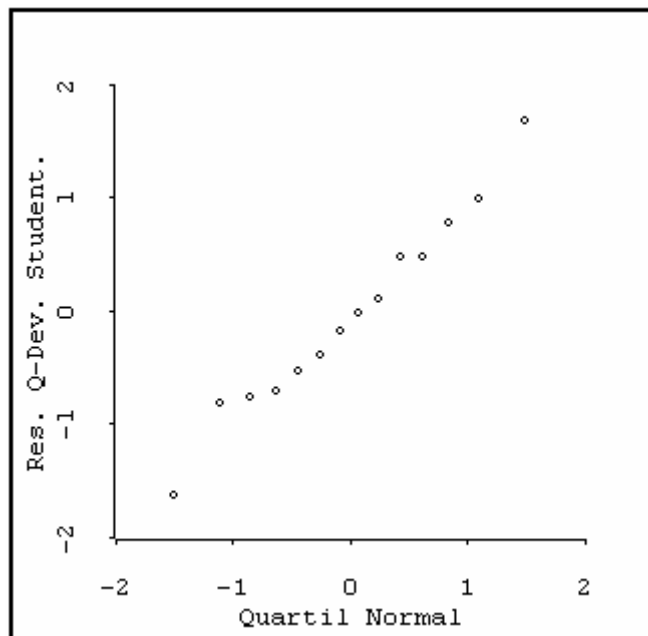


Figura 14 - Gráfico de probabilidade normal

Nesse gráfico, pode-se observar que não há pontos muito fora do alinhamento, não havendo, portanto, a indicação de que o modelo seja inadequado.

A função de ligação pode ser verificada com o gráfico dos resíduos *quasi-deviance studentized versus* valor ajustado (Lee & Nelder, 1998). Esse gráfico é mostrado na Figura 15.

Pode-se observar que os resíduos, aleatoriamente distribuídos, não apresentam uma tendência de crescimento ou decrescimento em relação à média. A linha resultante do amortecimento (*lowess*) fica situada nas proximidades da

reta horizontal de ordenada zero, não havendo indicação de que a função de ligação não seja correta.

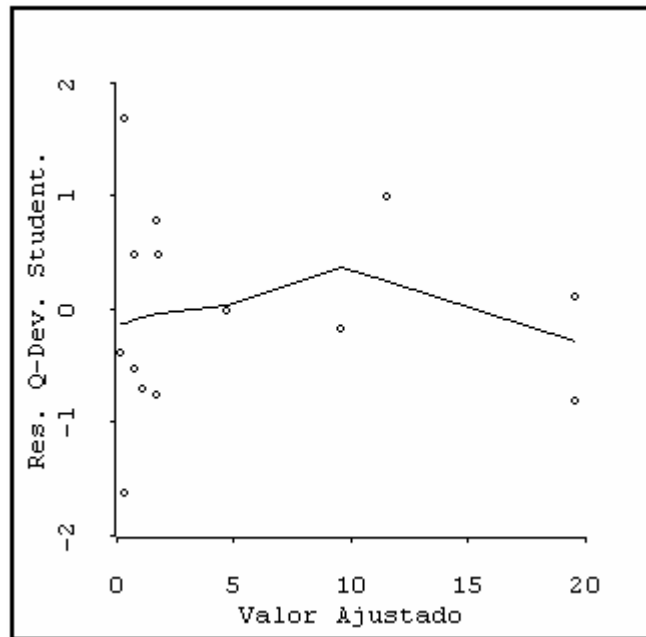


Figura 15 - Resíduos *quase-deviance studentized* × valor ajustado

A função de variância pode ser verificada com o gráfico do valor absoluto dos resíduos *quasi-deviance studentized versus* valor ajustado (Lee & Nelder, 1998). Esse gráfico é mostrado na Figura 16.

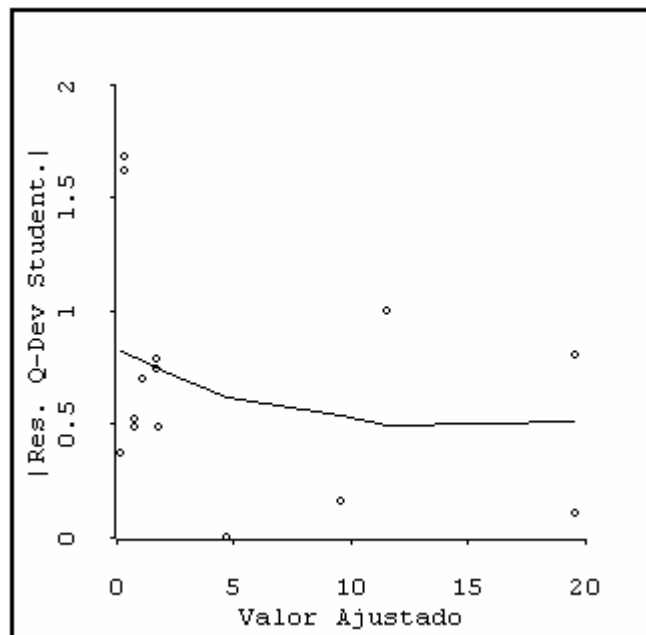


Figura 16 - Resíduos *quase-deviance studentized* × valor ajustado

No gráfico da Figura 16 pode-se observar que o valor absoluto dos resíduos *quasi-deviance studentized* não apresenta tendência de crescimento em relação à média, não havendo, portanto, a indicação de função de variância incorreta.

Com isso, pode-se concluir que o modelo ajustado pelo método da quase-verossimilhança é adequado para representar a resposta.

### 3.1.2. Otimização da Resposta

No experimento do misto de retardo, é desejável a obtenção de um valor de 8 segundos para a resposta. Várias formulações podem resultar em uma média de futuras previsões da resposta igual a 8 segundos. Por conseguinte, um objetivo desejável é minimizar a variância de uma futura resposta entre as formulações que resultam em 8 segundos de previsão.

Supondo, um ponto qualquer no espaço dos componentes da mistura,  $\mathbf{x}'_0 = [x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_1x_2 \ x_1x_3 \ x_2x_3 \ x_1x_3(x_1 - x_3)]$ . Pode-se mostrar que a variância de uma futura previsão é (Davison, 2003):

$$\text{var}[y(\mathbf{x}_0)] = \text{var}\{E[y(\mathbf{x}_0)]\} + E\{\text{var}[y(\mathbf{x}_0)]\} \quad (3.14)$$

Então,

$$\text{var}\{E[y(\mathbf{x}_0)]\} = \text{var}[\hat{y}(\mathbf{x}_0)] = \text{var}(\mathbf{x}'_0 \hat{\boldsymbol{\beta}}) = \mathbf{x}'_0 \text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) \mathbf{x}_0 \quad (3.15)$$

Davison (2003) demonstra que, se a função de variância é corretamente especificada, tem-se que:

$$\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \phi(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1} \quad (3.16)$$

Substituindo (3.16) em (3.15) obtém-se:

$$\text{var}\{E[y(\mathbf{x}_0)]\} = \mathbf{x}'_0 \phi(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0 \quad (3.17)$$

No modelo escolhido, tem-se que:

$$\text{var}[y(\mathbf{x}_0)] = \phi\mu(\mathbf{x}_0) \quad (3.18)$$

Então,

$$E\{\text{var}[y(\mathbf{x}_0)]\} = E[\phi\mu(\mathbf{x}_0)] = \phi \mathbf{x}'_0 \boldsymbol{\beta} \quad (3.19)$$

Substituindo (3.17) e (3.19) em (3.14) obtém-se:

$$\text{var}[y(\mathbf{x}_0)] = \phi \mathbf{x}'_0 (\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0 + \phi \mathbf{x}'_0 \boldsymbol{\beta} \quad (3.20)$$

Pode-se então formular o problema da seguinte forma:

$$\min \text{var}[y(\mathbf{x}_0)] = \phi \mathbf{x}'_0 (\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0 + \phi \mathbf{x}'_0 \boldsymbol{\beta}$$

sujeito a :

$$E[y(\mathbf{x}_0)] = \mathbf{x}'_0 \boldsymbol{\beta} = 8$$

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

$$0,79 \leq x_1 \leq 0,87$$

$$0,08 \leq x_2 \leq 0,16$$

$$0,05 \leq x_3 \leq 0,07$$

Utilizando uma rotina de busca exaustiva, na região das restrições dos componentes da mistura, codificada na linguagem do Matlab<sup>®</sup>, foi encontrada a seguinte solução:

$$x_1 = 0,8124; \quad x_2 = 0,1322; \quad x_3 = 0,0554.$$

$$\text{var}[y(x_1, x_2, x_3)] = 0,2191$$

$$E[y(x_1, x_2, x_3)] = 8,0002$$

A estimativa do desvio-padrão de uma futura resposta é então igual a  $\hat{\sigma}_0 = \sqrt{0,2191} = 0,4681$ . Respostas fora do intervalo  $8 \pm 1$  ou  $8 \pm 2,14 \hat{\sigma}_0$  da média resultam em produtos fora da especificação.

Como não se conhece a distribuição de probabilidade da resposta, não se pode estimar a probabilidade de um ponto fora da especificação. Entretanto, por experiência própria e dos usuários de estatística aplicada, pode-se afirmar que a probabilidade de respostas além de  $8 \pm 2,14 \hat{\sigma}_0$  é não desprezível, qualquer que seja a distribuição de probabilidade da resposta na prática.

Portanto, há evidências de que a solução atual resultaria em um processo produtivo de qualidade inadequada.