

## 5 Critérios de Informação e Seleção de Modelos

Neste capítulo são apresentados métodos de seleção de modelos baseados na teoria da informação. A utilização de tais métodos constitui uma evolução da pesquisa relacionada com seleção de modelos. Foram utilizados os dados do EMP do misto de retardo (ver Capítulo 4) para a obtenção de conclusões a respeito de cada método de seleção de modelo analisado.

A modelagem de dados de EM quando a região de definição dos componentes é muito restrita pode se tornar 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, a seleção *stepwise*, *forward* e *backward* pode 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.

McQuarrie & Tsai (1998), Harrel (2001), Burnham & Anderson (2002), Claeskens & Hjort (2008) e Konishi & Kitagawa (2008) são publicações voltadas para a seleção de modelos com base em critérios de informação.

Para a seleção de modelo, Akaike (1973) desenvolveu o critério de informação de Akaike, *AIC*, que se origina da minimização da informação (ou distância) de Kullback-Leibler (K-L) como base para a seleção de modelos. A informação K-L é uma medida da distância entre o modelo verdadeiro e um modelo candidato. Na realidade este modelo verdadeiro quase sempre é uma abstração. De fato, é desejável a obtenção de em um bom modelo, que represente

satisfatoriamente o mecanismo que gerou os dados em questão. Por conseguinte, necessita-se de uma medida da distância entre um bom modelo e vários modelos candidatos, para ter evidências de um modelo que se destaque. Pode-se às vezes conseguir dois ou mais modelos que se destacam.

Akaike (1973) desenvolveu uma estimativa da informação K-L, baseada na Função de Log-Verossimilhança (FLV) em seu ponto máximo, acrescida de uma penalidade associada ao número de parâmetros do modelo. Este desenvolvimento pode ser visto em Burnham & Anderson (2002), os quais só recomendam usar o *AIC* para selecionar modelos quando o número de observações,  $n$ , é maior do que pelo menos 40 vezes o número de parâmetros,  $p$ . Esta recomendação exclui todos os exemplos com experimentos com mistura e outros experimentos aplicados à qualidade conhecidos pelo autor.

Davison (2001) afirma que o *AIC* não propicia uma seleção consistente de modelos, e que, em aplicações práticas, freqüentemente indica modelos mais complexos do que deveriam ser. Nestes casos a origem da deficiência é que a complexidade é insuficientemente penalizada.

Hurvich & Tsai (1989) desenvolveram um critério de seleção de modelos, o  $AIC_c$ , indicado para pequenas amostras e respostas com distribuição normal. Davison (2001) afirma que o critério  $AIC_c$  pode aumentar apreciavelmente a probabilidade de se escolher um modelo adequado, particularmente na seleção de modelos de regressão e de séries temporais. Entretanto, deve-se considerar arriscado usar para distribuições não normais um critério que foi desenvolvido para a distribuição normal.

McQuarrie & Tsai (1998) e Hurvich & Tsai (1995) apresentam um método baseado na função de QV.

Burnham & Anderson (2002) desenvolvem um método aplicado às distribuições consideradas nos MLG, cujo desenvolvimento é similar ao *AIC*, que não é recomendado para experimentos com pequenas amostras.

Shen *et al.* (2004) propõem um método de seleção de modelos dos MLG baseado numa estimativa da distância de Kullback-Leibler (K-L) e no conceito de graus de liberdade generalizados. Entretanto, o método só foi implementado para as distribuições de Poisson e binomial.

Olive & Hawkins (2005) propõem um método de seleção de modelos tipo 1D, que é uma classe de modelos que inclui os MLG e o método de QV. Eles

mostram que seu método, baseado no índice  $C_p$  de Mallows (1973) e na construção de gráficos auxiliares, pode ser utilizado para seleção de modelos.

Vieira (2004) também propõe um método baseado na maximização de FLV. A utilização da FLV para uma escolha da distribuição e da função de ligação produziu resultados satisfatórios quando: i) não houve interações significativas entre os fatores, ii) a interação entre os fatores, embora significativa, era fraca ou iii) sabia-se quais eram as interações significativas, de modo a incluí-las de antemão no modelo. No entanto, não produziu resultados satisfatórios quando houve interações significativas que não se conheciam de antemão.

Zhu & Chipman (2006) utilizaram algoritmos genéticos como uma ferramenta para a seleção de variáveis possíveis de pertencer ao modelo.

Dal Bello & Vieira (a ser publicado) propõem uma estratégia de modelagem, que se baseia na utilização, inicialmente, de um método de seleção de modelo passo-a-passo (*stepwise, forward* ou *backward*) e, posteriormente, de um método de seleção de modelo baseado na Teoria da Informação. A metodologia proposta provou ser eficiente no caso apresentado e será apresentada no capítulo seguinte.

## 5.1. Critérios de Informação

McQuarrie & Tsai (1998) realizaram estudos de simulação para avaliar diversos critérios de seleção de modelos e concluíram que, para regressão linear, os critérios  $AIC_c$ ,  $AIC_u$  e  $HQ_c$  são os mais indicados.

### 5.1.1. 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).

$$AIC = -2 \sum_{i=1}^n \ln L(\hat{\mu}_i, y_i) + 2 \times (\text{número de parâmetros}) \quad (5.1)$$

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 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 vários modelos candidatos, deve ser escolhido aquele que apresentar o menor valor de *AIC*.

O *AIC* foi desenvolvido a partir a 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:

$$AIC = n \ln(\hat{\sigma}_p^2) + 2(p + 1) \tag{5.2}$$

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

$$\hat{\sigma}_p^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}_i)^2}{n} \tag{5.3}$$

Note que o número de parâmetros na Equação (5.2) é igual a  $(p + 1)$ , já que o mesmo deve incluir os  $p$  parâmetros do modelo e mais a variância ( $\sigma^2$ ).

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

$$AIC = \ln(\hat{\sigma}_p^2) + \frac{2(p + 1)}{n} \tag{5.4}$$

### 5.1.2. Critério *AIC<sub>c</sub>*

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<sub>c</sub>*:

$$AIC_c = AIC + \frac{2(p + 1)(p + 2)}{n - p - 2} \tag{5.5}$$

### 5.1.3. Critério $AIC_u$

O  $AIC_u$ , apresentado por McQuarrie & Tsai (1998), considera o estimador sem tendenciosidade da variância do erro ( $s_p^2$ ), em lugar de  $\hat{\sigma}_p^2$ .

$$AIC_u = \ln(s_p^2) + \frac{n+p}{n-p-2} \quad (5.6)$$

onde  $s_p^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}_i)^2}{n-p}$ .

### 5.1.4. Critério $HQ_c$

Outro critério de seleção de modelo é o  $HQ_c$ , introduzido por Hannan & Quinn (1979).

$$HQ_c = \ln(\hat{\sigma}_p^2) + \frac{2 \ln \ln(n)p}{n-p-2} \quad (5.7)$$

## 5.2. Eficiência e Consistência

O objetivo de um critério de seleção de modelos é selecionar um modelo de um conjunto finito de modelos candidatos que mais se aproxima do modelo verdadeiro, supondo que o modelo verdadeiro possui dimensão infinita ou que o conjunto de modelos candidatos não contém o modelo verdadeiro. A escolha do modelo candidato “mais próximo” do modelo verdadeiro é dita ser apropriada. O termo “mais próximo” requer alguma medida bem definida de distância ou informação. Em grandes amostras, um critério de seleção que escolhe o modelo com o mínimo erro médio quadrático é dito ser um critério assintoticamente eficiente (Shibata, 1980). Os critérios  $AIC$ ,  $AIC_c$ , e  $C_p$  são exemplos de critérios assintoticamente eficientes. Os pesquisadores que acreditam que os sistemas estudados por eles são bastante complexos ou que não há maneira de se medir todas as variáveis importantes escolhem modelos baseados em critérios eficientes.

Muitas pesquisas foram direcionadas à obtenção de correções dos critérios eficientes quando se trabalha com pequenas amostras.

Algumas vezes, a capacidade preditiva de um modelo candidato é o atributo mais importante. Um critério de seleção que utiliza a predição do erro médio quadrático é o *PRESS*. Ademais, o *PRESS* é um critério assintoticamente eficiente.

Supondo que o modelo verdadeiro está incluído no conjunto de modelos candidatos, o objetivo da seleção do modelo é escolher o modelo verdadeiro da lista de modelos candidatos. Um critério de seleção de modelo que identifica assintoticamente o modelo correto com probabilidade 1 é dito ser consistente. O critério *HQ* é um exemplo de um critério consistente. Neste caso, os pesquisadores afirmam que todas as variáveis podem ser medidas e, além disso, se sabe o suficiente sobre o sistema em estudo tendo em vista uma definição da lista de todas as variáveis importantes.

Muitos dos critérios clássicos de seleção são derivados de argumentos assintóticos. Poucos trabalhos têm sido focados em encontrar melhorias aos critérios consistentes, em comparação com os realizados com os critérios eficientes, devido, em parte, ao fato de que os critérios consistentes não estimam alguma função de distância ou discrepância. Um exemplo de critério consistente corrigido para pequenas amostras é o *HQ<sub>c</sub>*.

O que é melhor, eficiência ou consistência? A escolha do critério é altamente subjetiva e depende da complexidade do problema de modelagem. Cabe registrar que eficiência e consistência são propriedades assintóticas. Nos casos de pequenas amostras, os critérios podem se comportar de maneiras diferentes.

### 5.3. Utilização dos Critérios de Informação

A seleção de modelos em EMP começa com a definição dos termos candidatos do modelo. Para isto, deve-se definir o tipo de modelo a ser analisado (Scheffé ou com variável de folga), a ordem do modelo de mistura, a ordem do modelo de processo e a combinação entre os termos do modelo de mistura e de processo (combinação aditiva ou multiplicativa). Uma vez definidos os termos

candidatos do modelo, segue-se com a seleção dos termos do modelo a ser escolhido segundo algum critério.

Foi elaborada uma rotina em Matlab<sup>®</sup> para calcular o  $AIC_c$ ,  $AIC_u$  e  $HQ_c$  para todos os modelos candidatos e selecionar os três modelos que apresentarem respectivamente o menor valor de  $AIC_c$ ,  $AIC_u$  e  $HQ_c$ . Este procedimento foi realizado com a utilização, primeiramente, de combinações aditivas e, posteriormente, de combinações multiplicativas de termos de variáveis de mistura e de processo. Ainda nesta etapa da pesquisa, foi analisada a utilização de combinações aditivas e multiplicativas de termos de variáveis de mistura e de processo simultaneamente, obtendo-se resultados melhores do que os obtidos anteriormente.

Os parâmetros considerados são os do modelo completo combinado aditivo-multiplicativo, apresentado na Equação (5.1). Para o caso em questão, o número de componentes da mistura,  $q$ , é igual a 3 e o número de variáveis de processo,  $r$ , é igual a dois. Com isso, tem-se um total de 43 parâmetros possíveis de pertencerem ao modelo a ser selecionado. No entanto, destes 43 parâmetros possíveis, os componentes lineares de 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. Ademais, o número máximo de parâmetros do modelo é limitado a  $(n - 1)$ , sendo  $n$  o número de observações do experimento, que é igual a 39. Com isso, pode-se calcular o número total de possibilidades de modelos em função do número de parâmetros com a seguinte fórmula:

$$(\text{número de modelos}) = C_{43-3}^{p-3}, \quad p = 3, \dots, 38 \quad (5.8)$$

Com a fórmula apresentada na Equação (5.8) pode-se obter a Tabela 13, que apresenta o número de modelos possíveis em função do número de parâmetros do modelo.

Para o caso em questão, deveriam ser consideradas um total de 1.099.511.525.685 possibilidades, o que representaria um esforço computacional considerável para o cálculo e armazenamento dos valores de  $AIC_c$ ,  $AIC_u$  e  $HQ_c$  de todos os possíveis modelos. Visando reduzir o esforço computacional, foram calculados os valores de  $AIC_c$ ,  $AIC_u$  e  $HQ_c$  e armazenados apenas os valores mínimos de  $AIC_c$ ,  $AIC_u$  e  $HQ_c$  em função do número de parâmetros, partindo de um modelo de 3 parâmetros, com incremento de 1 parâmetro a cada passo, até que

$$\{\min[AIC_c(p)] - \min[AIC_c(p-1)]\} > 0, \{\min[AIC_u(p)] - \min[AIC_u(p-1)]\} > 0 \text{ ou } \{\min[HQ_c(p)] - \min[HQ_c(p-1)]\} > 0.$$

Tabela 13 - Número de modelos em função do número de parâmetros

$p$	Nº Modelos	$p$	Nº Modelos	$p$	Nº Modelos
3	1	15	5.586.853.480	27	62.852.101.650
4	40	16	12.033.222.880	28	40.225.345.056
5	780	17	23.206.929.840	29	23.206.929.840
6	9.880	18	40.225.345.056	30	12.033.222.880
7	91.390	19	62.852.101.650	31	5.586.853.480
8	658.008	20	88.732.378.800	32	2.311.801.440
9	3.838.380	21	113.380.261.800	33	847.660.528
10	18.643.560	22	131.282.408.400	34	273.438.880
11	76.904.685	23	137.846.528.820	35	76.904.685
12	273.438.880	24	131.282.408.400	36	18.643.560
13	847.660.528	25	113.380.261.800	37	3.838.380
14	2.311.801.440	26	88.732.378.800	38	658.008

A Tabela 14 apresenta a evolução do valor mínimo de  $AIC_c$  em função do número de parâmetros.

Tabela 14 -  $p$  versus  $\min[AIC_c(p)]$

$p$	$\min[AIC_c(p)]$
3	62,6346
4	52,2668
5	35,3132
6	26,8284
7	18,3256
8	3,8685
9	2,3021
10	2,3443
11	1,8167
12	3,3864

Pode-se também obter um gráfico de evolução do  $AIC_c$  mínimo em função do número de parâmetros, o qual está apresentado na Figura 61.

Como  $\{\min[AIC_c(p=12)] - \min[AIC_c(p=11)]\} > 0$ , não foram analisados os valores mínimos de  $AIC_c$  com  $p > 12$ . 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 há um modelo com menor valor de  $AIC_c$  com  $p > 12$ , mas esta busca demandaria um esforço computacional bastante elevado.



Nesta fase da pesquisa, foram analisados apenas os possíveis modelos com até 12 parâmetros, sendo, portanto, consideradas um total de 373.585.604 possibilidades, o que reduziu consideravelmente o tempo computacional para a seleção do modelo pelo critério  $AIC_c$ . Por este critério, o modelo selecionado foi o seguinte:

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 6,00v_1 + 12,78v_2 + 0,36v_3 - 0,32z_1 + 0,62z_2 - \\ & - 7,01v_1v_2 + 9,21v_1v_3 + 120,80v_1v_2v_3 + \\ & + 39,56v_1v_2z_1(v_1 - v_2) - 46,80v_2v_3z_1(v_2 - v_3) - 19,80v_1v_2v_3z_1z_2 \end{aligned} \quad (5.9)$$

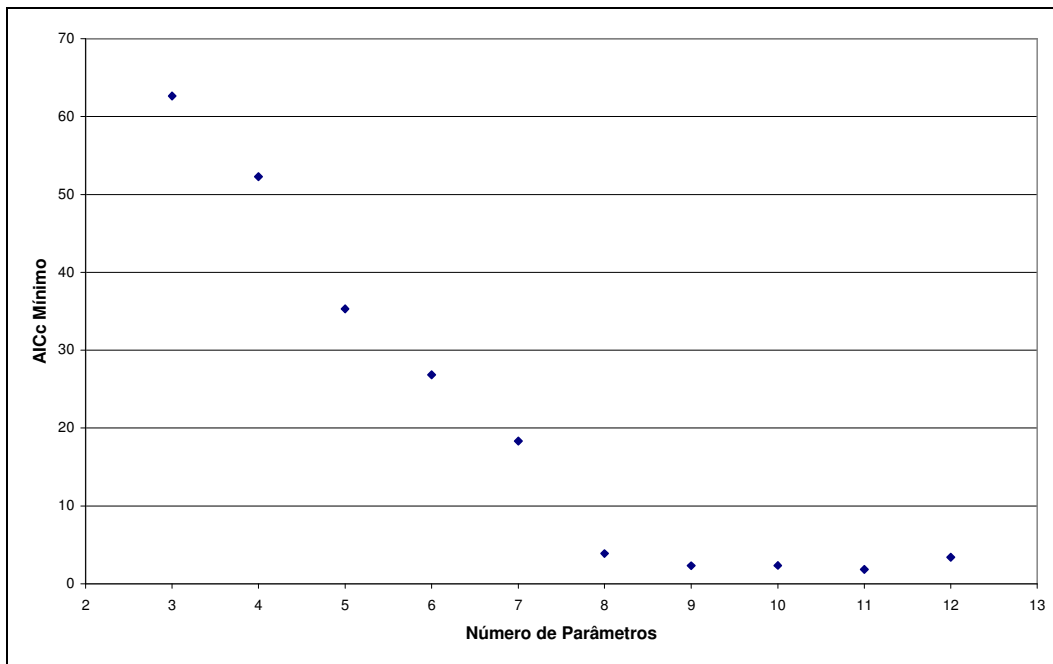


Figura 61 -  $AIC_c$  mínimo em função do número de parâmetros

Na Tabela 15 são apresentados os resultados do teste  $t$  para o Modelo (5.9).

Tabela 15 - Teste do Modelo (5.9)

	estimativa dos coeficientes	desvio-padrão	$t$ -valor	$p$ -valor
$v_1$	6,00256	0,303625	19,770	0,0000
$v_2$	12,7799	0,309857	41,245	0,0000
$v_3$	0,364613	0,738058	0,494	0,6251
$z_1$	-0,317906	0,135956	-2,338	0,0267
$z_2$	0,620774	0,129302	4,801	0,0001
$v_1v_2$	-7,00727	1,61432	-4,341	0,0002
$v_1v_3$	9,20792	1,97560	4,661	0,0001
$v_1v_2v_3$	120,804	12,1539	9,940	0,0000
$v_1v_2z_1(v_1 - v_2)$	39,5612	12,9642	3,052	0,0049
$v_2v_3z_1(v_2 - v_3)$	-46,7998	4,94482	-9,464	0,0000
$v_1v_2v_3z_1z_2$	-19,7973	10,3959	-1,904	0,0672

Analisando a coluna do  $p$ -valor da Tabela 15, pode-se concluir que  $v_3$  é não significativo no modelo na presença dos demais termos. No entanto, a estrutura do modelo de Scheffé impõe a permanência do termo  $v_3$  no modelo ajustado. Ademais, pode-se observar ainda que o  $p$ -valor do termo  $v_1v_2v_3z_1z_2$  é maior que 0,05. No entanto, considerando que há a indicação de que apenas os termos com  $p$ -valor maior que 0,1 não são significativos ao modelo, pode-se manter tal termo no modelo ajustado.

Utilizando os resíduos *studentized*, foram construídos os gráficos de diagnóstico (Figuras 62 a 65), sendo possível verificar as suposições de normalidade, independência, aditividade do modelo inerente ao modelo linear e variância constante. Utilizando a Equação (3.2),  $ET = 1,66$ , que na distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade corresponde a um  $p$ -valor de 0,197. Então, não se rejeita a hipótese de que a variância não aumente quando a média aumenta.

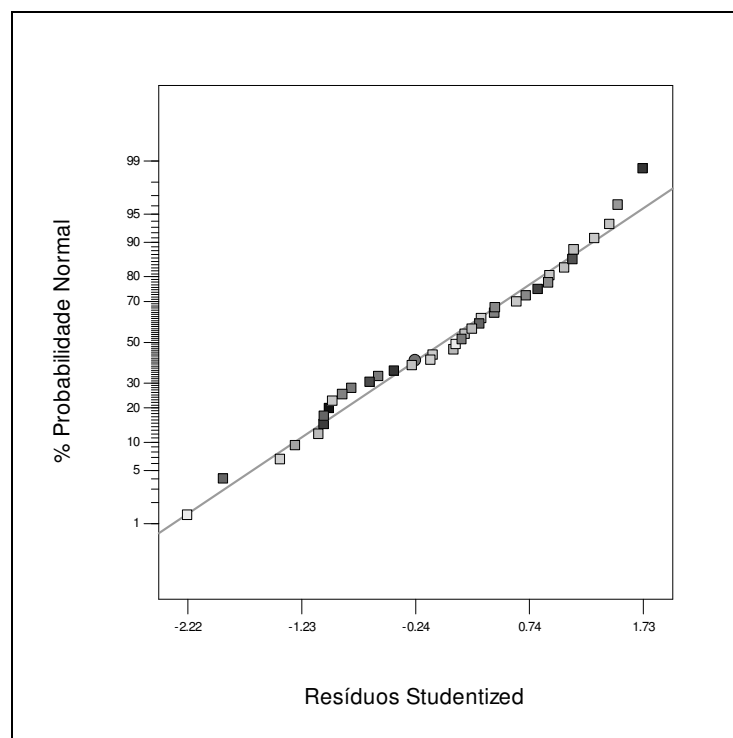


Figura 62 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*

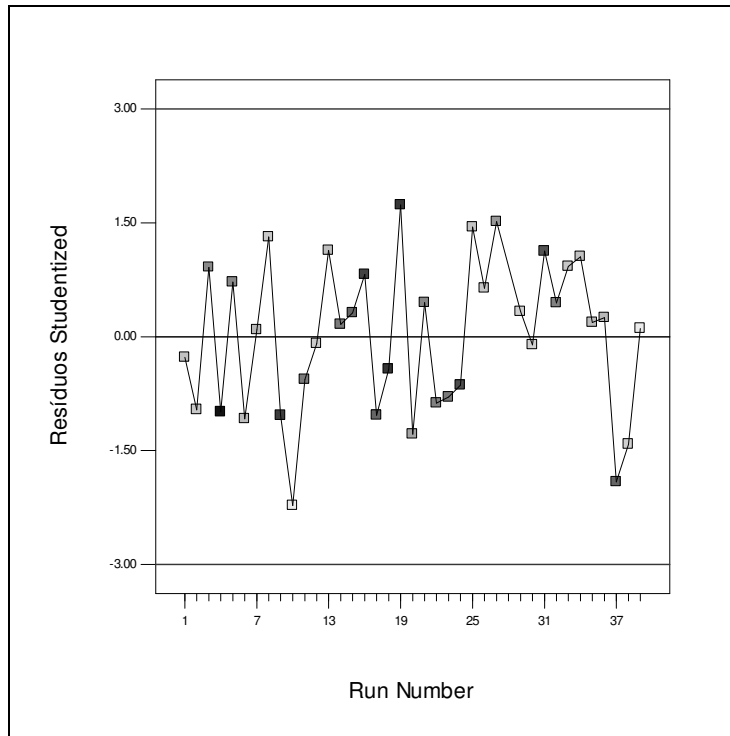


Figura 63 - Gráfico de resíduos *studentized* versus *run number*

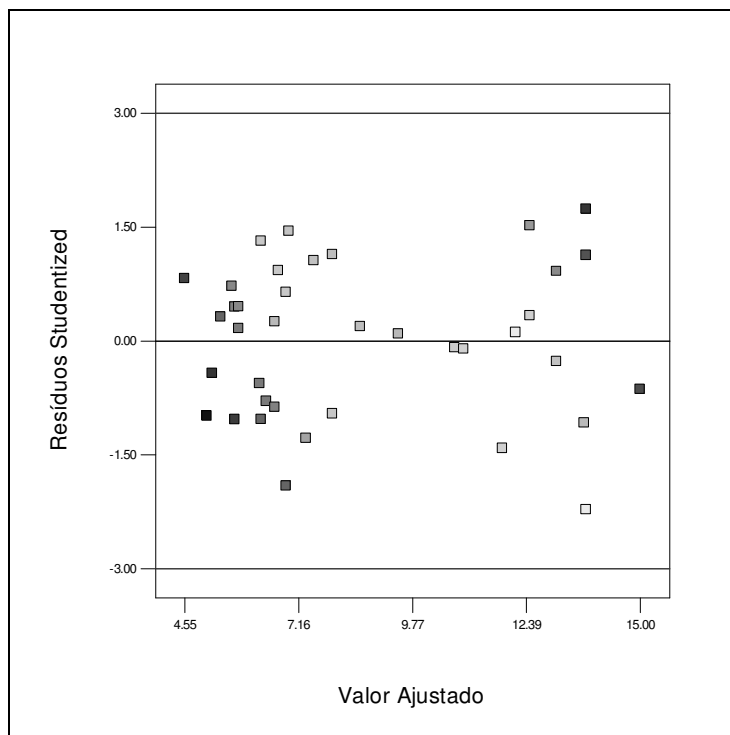


Figura 64 - Gráfico de resíduos *studentized* versus valor ajustado

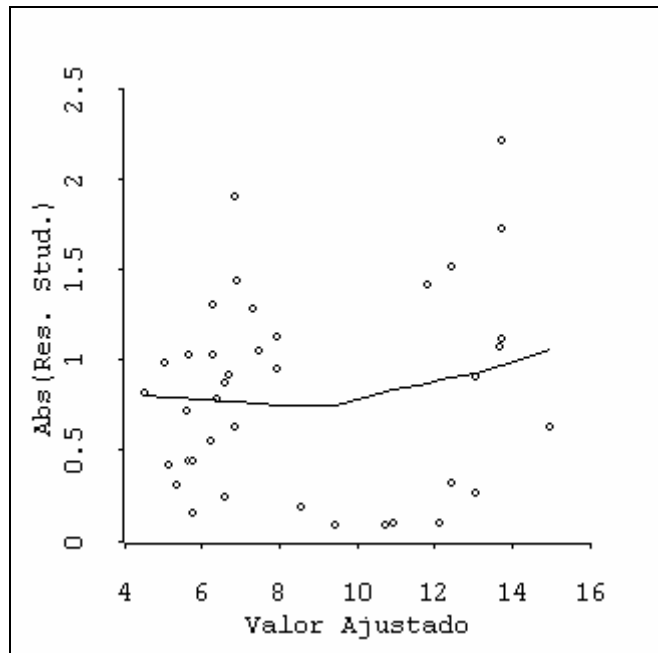


Figura 65 - Gráfico para verificação de não constância da variância

Minimizando a variância de uma futura resposta, chega-se ao seguinte resultado:

$$v_1 = 0,0028; v_2 = 0,5445; v_3 = 0,4527; z_1 = -1; z_2 = -1.$$

$$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)] = 0,6804$$

$$E[y(\mathbf{w}_0)] = 8,0000$$

Utilizando a Equação (2.8), tem-se a seguinte solução final em termos de componentes reais:

$$x_1 = 0,7701; x_2 = 0,1618; x_3 = 0,0681; z_1 = -1; z_2 = -1.$$

Posteriormente, foi utilizado o método de seleção de modelo baseado no critério  $AIC_u$ . A Tabela 16 apresenta a evolução do valor mínimo de  $AIC_u$  em função do número de parâmetros.

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

$p$	$\min[AIC_u(p)]$
3	2,7820
4	2,5493
5	2,1491
6	1,9675
7	1,7868
8	1,4552
9	1,4558

O gráfico do  $AIC_u$  mínimo em função do número de parâmetros está apresentado na Figura 66.

Como  $\{\min[AIC_u(p=9)] - \min[AIC_u(p=8)]\} > 0$ , não foram analisados os valores mínimos de  $AIC_c$  com  $p > 9$ . Foram analisados apenas os modelos possíveis com até 9 parâmetros, sendo, portanto, consideradas um total de 4.598.479 possibilidades, o que reduziu consideravelmente o tempo computacional para a seleção do modelo pelo critério  $AIC_u$ . Por este critério, o modelo selecionado foi o seguinte:

$$\hat{y} = 5,99v_1 + 12,74v_2 - 39,27v_3 + 0,62z_2 - 7,32v_1v_2 + 88,93v_1v_3 + 78,97v_2v_3 - 60,51v_1v_3(v_1 - v_3) \quad (5.10)$$

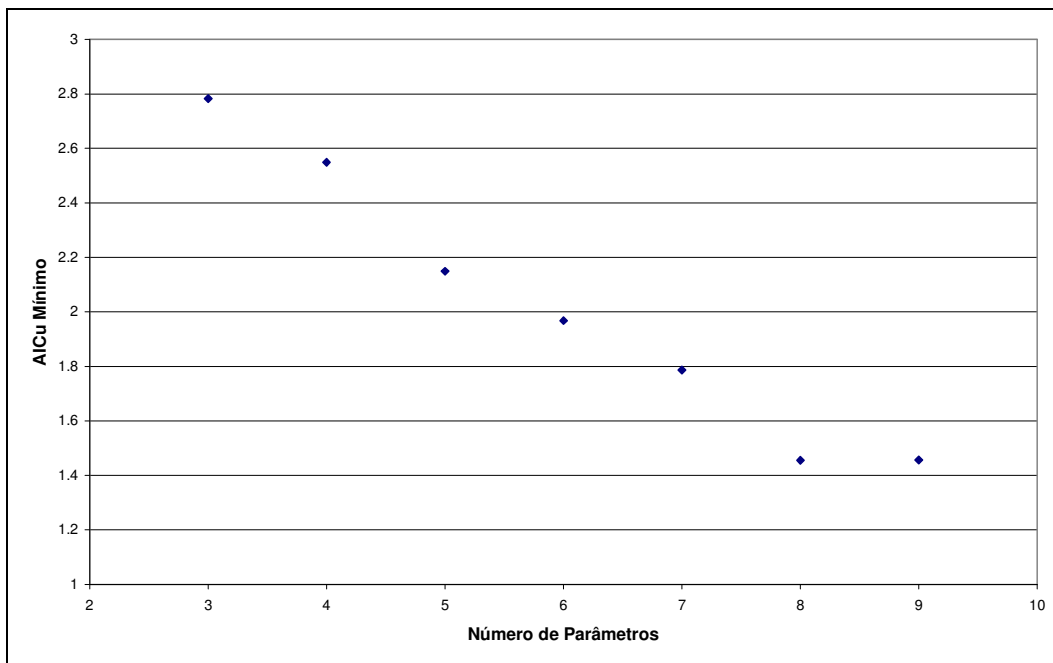


Figura 66 -  $AIC_u$  mínimo em função do número de parâmetros

Na Tabela 17 são apresentados os resultados do teste  $t$  para o Modelo (5.10).

Tabela 17 - Teste do Modelo (5.10)

	estimativa dos coeficientes	desvio-padrão	$t$ -valor	$p$ -valor
$v_1$	5,98550	0,352244	16,993	0,0000
$v_2$	12,7444	0,342325	37,229	0,0000
$v_3$	-39,2669	3,60628	-10,888	0,0000
$z_2$	0,616351	0,141265	4,363	0,0001
$v_1v_2$	-7,32454	1,72590	-4,244	0,0002
$v_1v_3$	88,9287	7,01972	12,668	0,0000
$v_2v_3$	78,9747	6,56109	12,037	0,0000
$v_1v_3(v_1 - v_3)$	-60,5146	7,20218	-8,402	0,0000

Analisando a coluna  $p$ -valor da Tabela 17, pode-se concluir que todos os 8 parâmetros são significativos.

Utilizando os resíduos *studentized*, foram também construídos os gráficos de diagnóstico (Figuras 67 a 70), sendo possível verificar as suposições de normalidade, independência, aditividade do modelo inerente ao modelo linear e variância constante. Ademais, utilizando a Equação (3.2),  $ET = 1,43$ , que na distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade corresponde a um  $p$ -valor de 0,233. Então, não se rejeita a hipótese de que a variância não aumente quando a média aumenta.

A minimização da variância de uma futura resposta conduziu ao seguinte resultado:

$$v_1 = 0,5116; v_2 = 0,0690; v_3 = 0,4194; z_2 = 1.$$

$$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)] = 0,8394$$

$$E[y(\mathbf{w}_0)] = 8,0001$$

Utilizando a Equação (2.8), tem-se a seguinte solução final em termos de componentes reais:

$$x_1 = 0,7905; x_2 = 0,1428; x_3 = 0,0668; z_2 = 1.$$

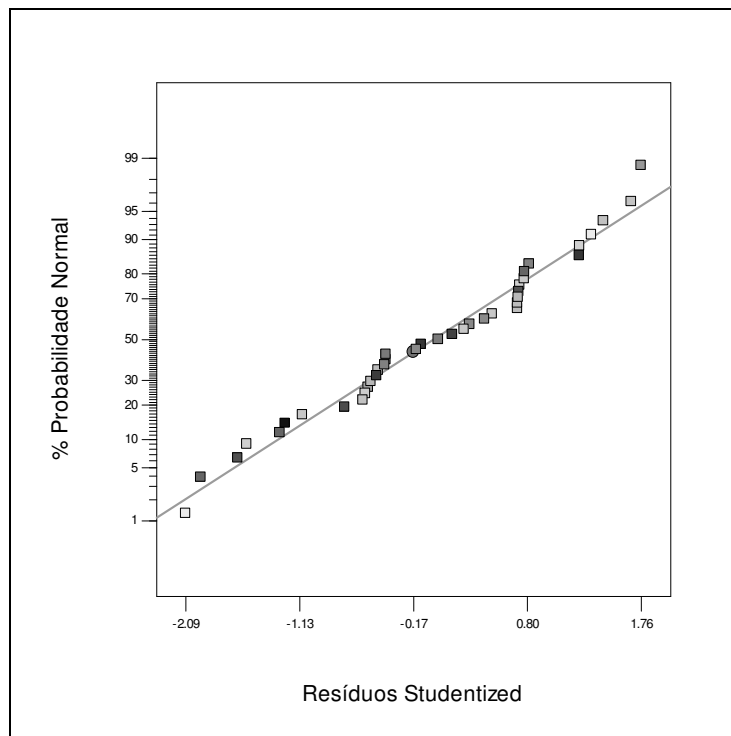


Figura 67 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*

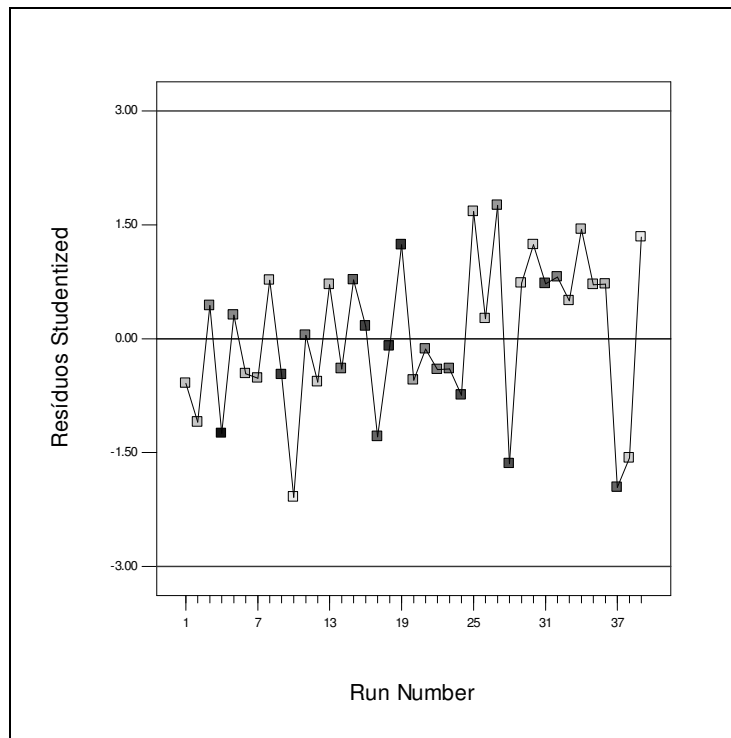


Figura 68 - Gráfico de resíduos *studentized* versus run number

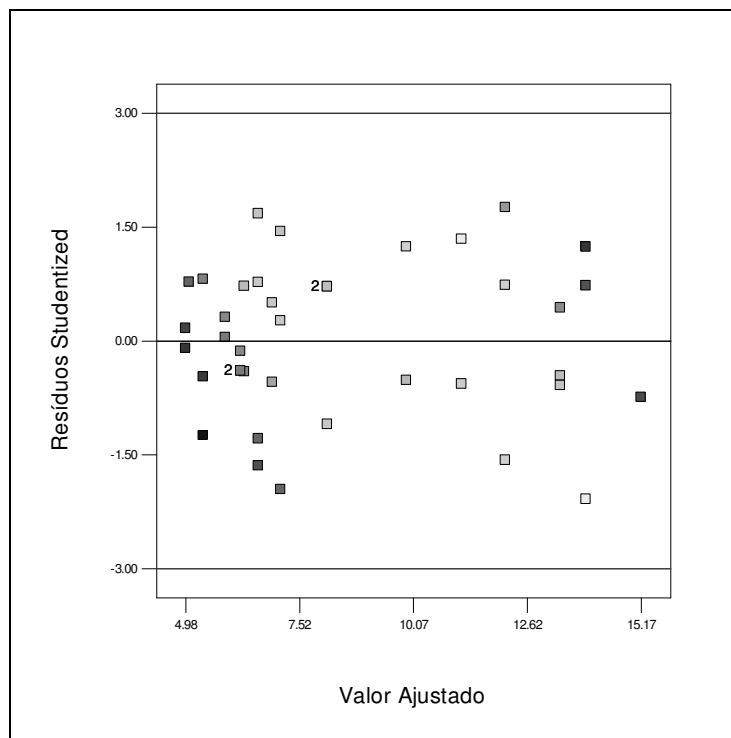


Figura 69 - Gráfico de resíduos *studentized* versus valor ajustado

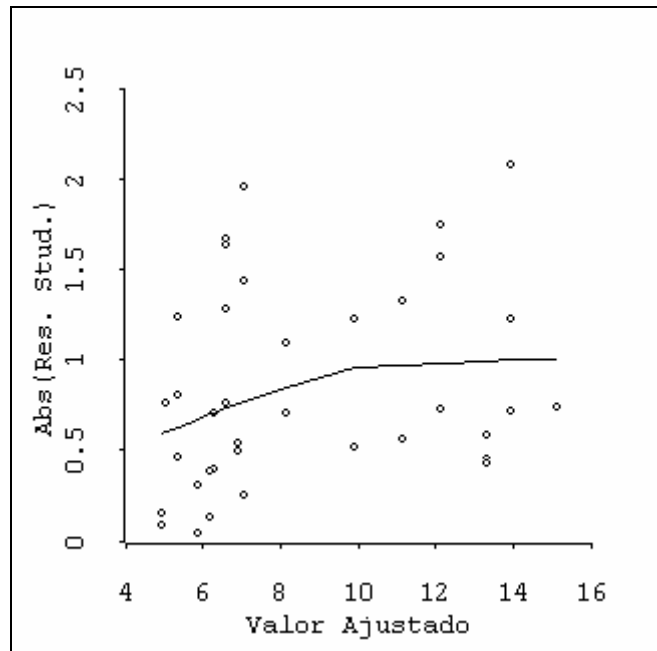


Figura 70 - Gráfico para verificação de não constância da variância

Finalmente, foi utilizado o método de seleção de modelo baseado no critério  $HQ_c$ . A Tabela 18 apresenta a evolução do valor mínimo de  $HQ_c$  em função do número de parâmetros.

Tabela 18 -  $p$  versus  $\min[HQ_c(p)]$

$p$	$\min[HQ_c(p)]$
3	1,6855
4	1,4429
5	1,0331
6	0,8422
7	0,6529
8	0,3132
9	0,3065
10	0,3440

Pode-se também obter um gráfico de evolução do  $HQ_c$  mínimo em função do número de parâmetros, o qual está apresentado na Figura 71.

Como  $\{\min[HQ_c(p=10)] - \min[HQ_c(p=9)]\} > 0$ , foram analisados apenas os modelos possíveis com até 10 parâmetros, sendo, portanto, consideradas um total de 23.242.039 possibilidades, o que reduziu consideravelmente o tempo computacional para a seleção do modelo pelo critério  $HQ_c$ . Por este critério, o modelo selecionado foi o seguinte:



$$\begin{aligned} \hat{y} = & 5,99v_1 + 12,74v_2 - 39,33v_3 + 0,61z_2 - \\ & - 7,20v_1v_2 + 89,03v_1v_3 + 79,11v_2v_3 - \\ & - 59,96v_1v_3(v_1 - v_3) - 22,79v_1v_2v_3z_1z_2 \end{aligned} \tag{5.11}$$

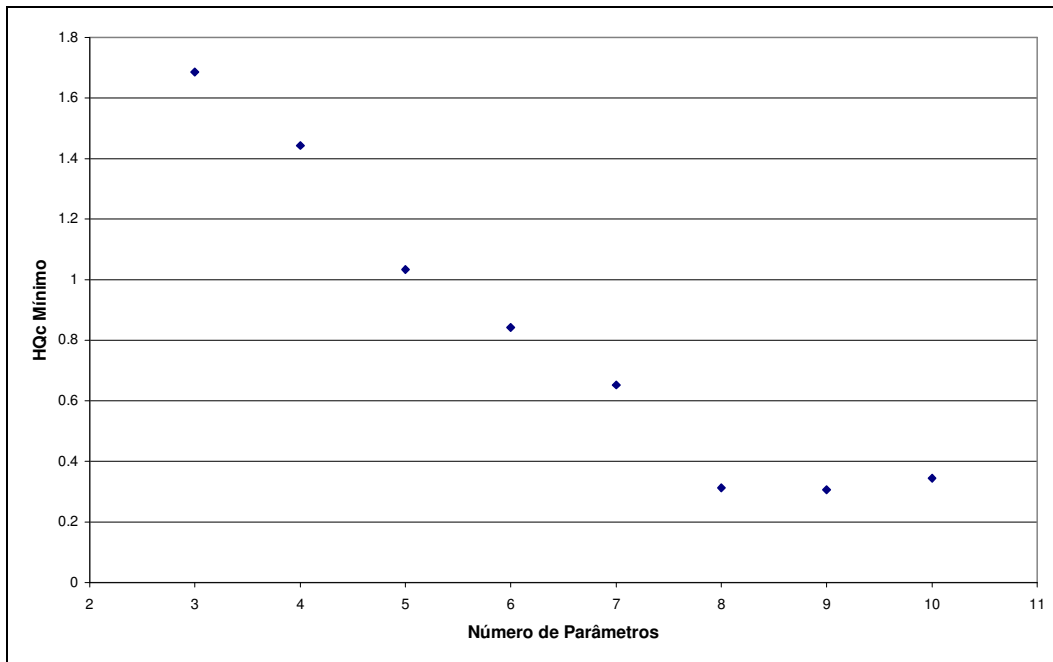


Figura 71 -  $HQ_c$  mínimo em função do número de parâmetros

Na Tabela 19 são apresentados os resultados do teste  $t$  para o Modelo (5.11).

Tabela 19 - Teste do Modelo (5.11)

	estimativa dos coeficientes	desvio-padrão	$t$ -valor	$p$ -valor
$v_1$	5,98946	0,334907	17,884	0,0000
$v_2$	12,7370	0,325491	39,132	0,0000
$v_3$	-39,3312	3,42888	-11,471	0,0000
$z_2$	0,606307	0,134397	4,511	0,0001
$v_1v_2$	-7,19597	1,64210	-4,382	0,0001
$v_1v_3$	89,0284	6,67430	13,339	0,0000
$v_2v_3$	79,1114	6,23843	12,681	0,0000
$v_1v_3(v_1 - v_3)$	-59,9602	6,85282	-8,750	0,0000
$v_1v_2v_3z_1z_2$	-22,7862	10,9967	-2,072	0,0469

Analisando a coluna  $p$ -valor da Tabela 19, pode-se concluir que todos os 9 parâmetros são significativos.

Com os gráficos de diagnóstico (Figuras 72 a 75) foi possível verificar a adequação do Modelo (5.11). Ademais, utilizando a Equação (3.2),  $ET = 1,34$ , que na distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade corresponde a um  $p$ -valor de 0,247. Então, não se rejeita a hipótese de que a variância não aumente quando a média aumenta.

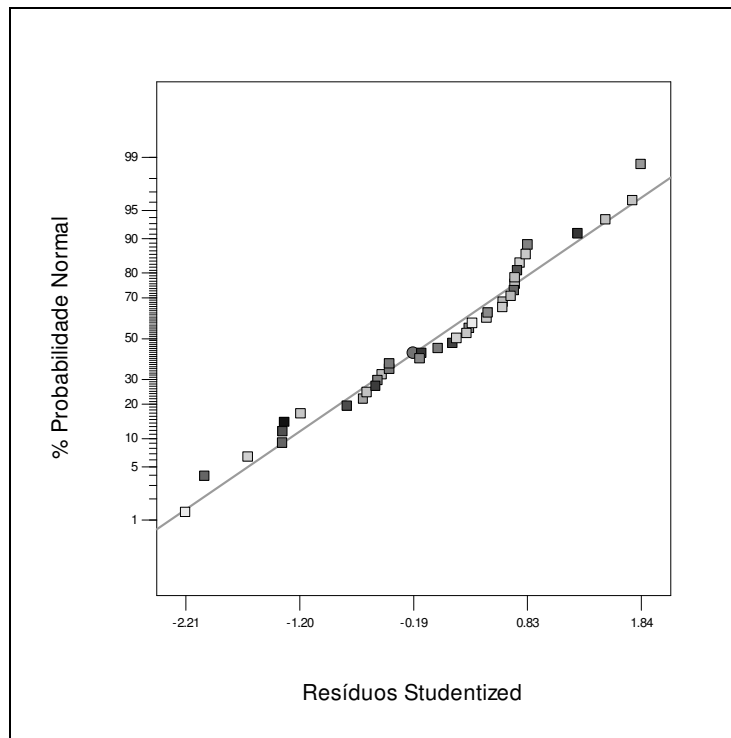


Figura 72 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*

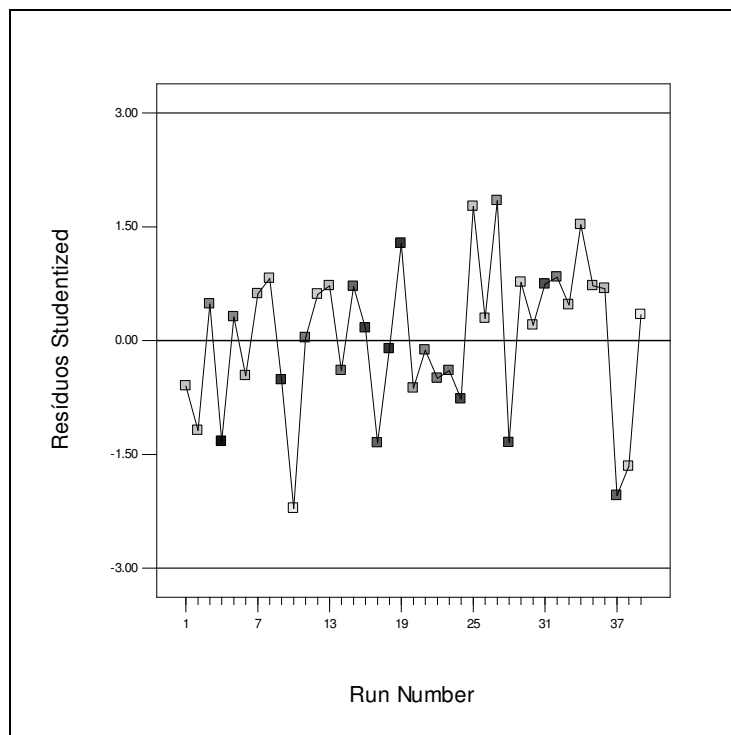


Figura 73 - Gráfico de resíduos *studentized* versus *run number*

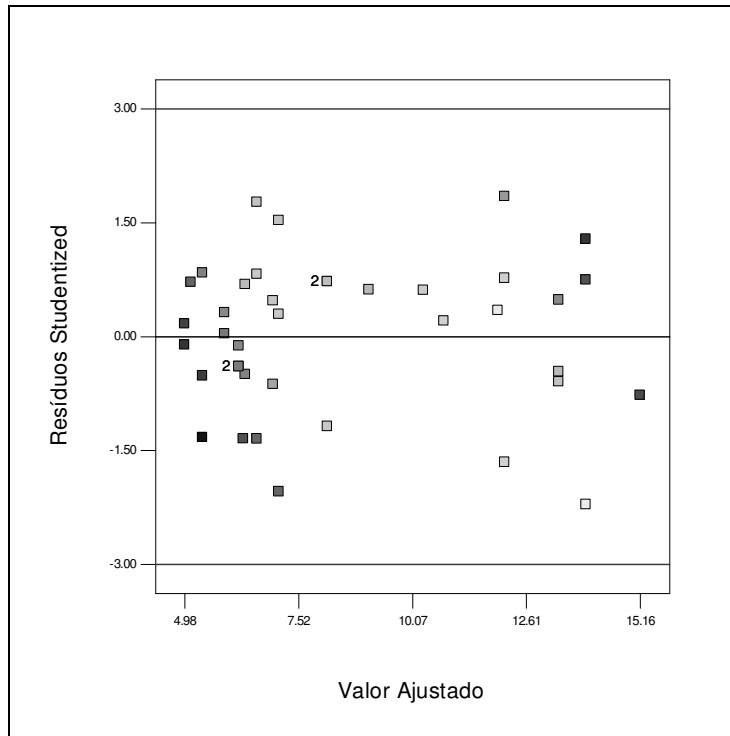


Figura 74 - Gráfico de resíduos *studentized* versus valor ajustado

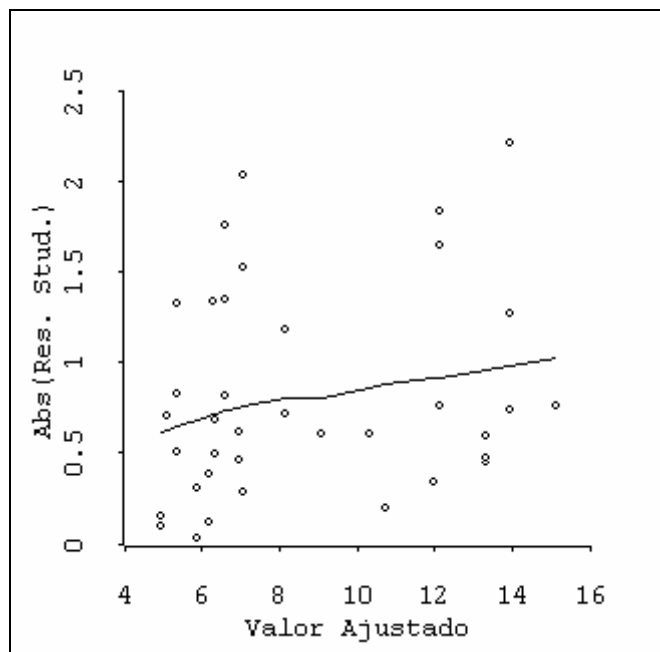


Figura 75 - Gráfico para verificação de não constância da variância

Com a minimização da variância, tem-se o seguinte resultado:

$$v_1 = 0,5337 ; v_2 = 0,0504 ; v_3 = 0,4159 ; z_1 = -1 ; z_2 = 1 .$$

$$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)] = 0,7772$$

$$E[y(\mathbf{w}_0)] = 8,0000$$

Utilizando a Equação (2.8), tem-se a seguinte solução final em termos de componentes reais:

$$x_1 = 0,7913 ; x_2 = 0,1420 ; x_3 = 0,0666 ; z_1 = -1 ; z_2 = 1 .$$

Na Tabela 20 é apresentado um comparativo dos 3 modelos obtidos com a utilização dos critérios  $AIC_c$ ,  $AIC_u$  e  $HQ_c$ , contendo as estatísticas  $PRESS$  e  $MSE$  e a variância de uma futura resposta no ponto.

Tabela 20 - Comparativo dos Modelos Mistura-Processo

Critério	Equação	$PRESS$	$MSE$	$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)]$
$AIC_c$	(5.11)	indefinido	0,5798	0,6804
$AIC_u$	(5.12)	35,62	0,7468	0,8394
$HQ_c$	(5.13)	32,04	0,6751	0,7772

Observando a Tabela 20, pode-se concluir que os modelos obtidos pelos 3 critérios de informação não proporcionaram uma melhoria nas estatísticas  $PRESS$ , nem na variância de uma futura resposta no ponto, quando comparados com os resultados obtidos pelo modelo aditivo-multiplicativo de Scheffé (ver Tabela 12). Apenas o  $MSE$  do modelo obtido pelo critério  $AIC_c$  é um pouco menor do que o obtido pelo modelo aditivo-multiplicativo de Scheffé. No entanto, o  $PRESS$  do modelo obtido pelo critério  $AIC_c$  é indefinido, o que deve ser evitado.

#### 5.4. Diferenças de $AIC$

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

$$\Delta_i = AIC_i - AIC_{min} \tag{5.12}$$

A metodologia de cálculo das diferenças de  $AIC$  também pode ser utilizada para o cálculo das diferenças de  $AIC_c$ . Os valores dos  $\Delta_i$  são fáceis de interpretar e permitem uma rápida comparação entre os modelos candidatos. Quanto maior for

o  $\Delta_i$  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  $\Delta_i$  entre 0 e 2 podem ser considerados indiferentes.

O cálculo das diferenças de  $AIC$  é utilizado na metodologia proposta de seleção de modelo, a qual será apresentada no Capítulo 6.

Numa etapa seguinte da pesquisa, foi elaborada uma rotina Matlab<sup>®</sup> para o cálculo e armazenamento dos valores de  $AIC_c$ . Conhecendo-se os valores de  $AIC_c$  de todos os modelos, foi possível calcular os valores dos  $\Delta_i$  e selecionar previamente os modelos indiferentes, ou seja, aqueles que apresentaram um  $\Delta_i$  entre 0 e 2.

Nas Tabelas 21 e 22 são apresentados os termos selecionados dos modelos indiferentes com 9 parâmetros, bem como os respectivos valores de  $AIC_c$ ,  $PRESS$ ,  $MSE$  e da variância de uma futura resposta no ponto.

Nas Tabelas 23 a 29 são apresentados os termos selecionados dos modelos indiferentes com 10 parâmetros, bem como os respectivos valores de  $AIC_c$ ,  $PRESS$ ,  $MSE$  e da variância de uma futura resposta no ponto.

Nas Tabelas 30 a 36 são apresentados os termos selecionados dos modelos indiferentes com 11 parâmetros, bem como os respectivos valores de  $AIC_c$ ,  $PRESS$ ,  $MSE$  e da variância de uma futura resposta no ponto.

Nas Tabelas 37 e 38 são apresentados os termos selecionados dos modelos indiferentes com 12 parâmetros, bem como os respectivos valores de  $AIC_c$ ,  $PRESS$ ,  $MSE$  e da variância de uma futura resposta no ponto.

Dentre todos os modelos indiferentes, o modelo que apresentou o menor  $PRESS$  (28,67) e menor variância de uma futura resposta no ponto (0,6312) foi o M98 (ver Tabela 44). Os modelos M105, M106, M107 e M109 apresentaram os menores valores de  $MSE$  (0,5569), que são ligeiramente menores do que o do modelo M98 (0,5593). Com isso, é pertinente a escolha do modelo M98, apresentado na Tabela 37, com 12 parâmetros, que possui a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 6,01v_1 + 12,51v_2 - 39,14v_3 + 0,58z_2 - 6,19v_1v_2 + \\ & + 88,32v_1v_3 + 79,62v_2v_3 + 0,72v_2z_1z_2 - 70,18v_1v_3(v_1 - v_3) - \\ & - 3,16v_1v_2z_1z_2 - 3,44v_2v_3z_1z_2 + 13,08v_1v_3(v_1 - v_3)z_1 \end{aligned} \quad (5.12)$$

Tabela 21 - Modelos indiferentes com 9 parâmetros (M1 a M6)

Termos	M1	M2	M3	M4	M5	M6
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3$	√	√	√	√		
$v_1v_2v_3$					√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$					√	
$v_1v_3(v_1 - v_3)$	√	√	√	√		
$v_2v_3(v_2 - v_3)$					√	√
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$						√
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$	√					
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$						
$v_3z_1z_2$		√				
$v_1v_2z_1z_2$			√			
$v_1v_2v_3z_1z_2$				√		
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$						
<i>AIC<sub>c</sub></i>	3,6311	3,7630	3,7340	2,3021	3,5259	3,5259
<i>PRESS</i>	33,37	33,88	33,73	32,04	Indef.	Indef.
<i>MSE</i>	0,6985	0,7009	0,7003	0,6751	0,6966	0,6966
$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7851	0,8011	0,7886	0,7772	0,8047	0,8004

Tabela 22 - Modelos indiferentes com 9 parâmetros (M7 a M12)

Termos	M7	M8	M9	M10	M11	M12
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√				
$v_2v_3$			√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$			√			
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√	√	√	√	√	√
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$				√		
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$	√				√	
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$		√				√
$AIC_c$	3,5259	3,5259	3,1410	3,1410	3,1410	3,1410
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6966	0,6966	0,6898	0,6898	0,6898	0,6898
$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)]$	0,8047	0,8004	0,8031	0,7940	0,8031	0,7940

Tabela 23 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M13 a M18)

Termos	M13	M14	M15	M16	M17	M18
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)$	√					
$v_1v_3(v_1 - v_3)$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3(v_2 - v_3)$						
$z_1$						
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$		√				
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$			√			
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$				√		
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$					√	
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$						√
$AIC_c$	3,7883	3,7782	3,7883	3,4736	3,7883	3,7883
$PRESS$	Indef.	32,70	Indef.	31,32	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6561	0,6559	0,6561	0,6508	0,6561	0,6561
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7636	0,7551	0,7600	0,7529	0,7636	0,7600



Tabela 24 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M19 a M24)

Termos	M19	M20	M21	M22	M23	M24
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3$						
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$	√	√	√			
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√	√		√	√	√
$z_1$	√		√	√	√	√
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$				√		
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$			√			
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$					√	
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$		√				
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$						√
$AIC_c$	2,9159	3,3112	2,3443	2,9159	2,9159	2,9159
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6416	0,6481	0,6323	0,6416	0,6416	0,6416
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7530	0,7486	0,7422	0,7530	0,7530	0,7530

Tabela 25 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M25 a M30)

Termos	M25	M26	M27	M28	M29	M30
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3$						
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$						
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√	√	√			
$z_1$				√	√	√
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$	√			√		
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$				√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$		√			√	
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$	√	√	√			
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$			√			√
$AIC_c$	3,3112	3,3112	3,3112	2,3443	2,3443	2,3443
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6481	0,6481	0,6481	0,6323	0,6323	0,6323
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7467	0,7486	0,7467	0,7404	0,7404	0,7422

Tabela 26 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M31 a M36)

Termos	M31	M32	M33	M34	M35	M36
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$						
$v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√	√	√	√		
$z_1$	√				√	
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$		√				√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$					√	√
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$						
$v_3z_1z_2$			√			
$v_1v_2v_3z_1z_2$				√		
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$						
<i>AIC<sub>c</sub></i>	3,6645	3,4050	3,7029	2,8830	3,4049	3,7938
<i>PRESS</i>	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
<i>MSE</i>	0,6540	0,6497	0,6547	0,6411	0,6497	0,6562
$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7750	0,7689	0,7720	0,7464	0,7697	0,7766

Tabela 27 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M37 a M42)

Termos	M37	M38	M39	M40	M41	M42
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$						
$v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$						
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√	√	√	√	√	√
$z_1$	√	√	√			
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$				√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$	√			√		
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$		√			√	
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$			√			√
<i>AIC<sub>c</sub></i>	3,6645	3,6645	3,6645	3,4050	3,4050	3,4050
<i>PRESS</i>	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
<i>MSE</i>	0,6540	0,6540	0,6540	0,6497	0,6497	0,6497
$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7739	0,7739	0,7750	0,7613	0,7605	0,7605

Tabela 28 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M43 a M48)

Termos	M43	M44	M45	M46	M47	M48
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$						
$v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$						
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√	√	√	√	√	√
$z_1$						
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$	√	√				
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$			√	√		
$v_3z_1z_2$	√		√		√	
$v_1v_2v_3z_1z_2$		√		√		√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$					√	√
$AIC_c$	3,7029	2,8830	3,7029	2,8830	3,7029	2,8830
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6547	0,6411	0,6547	0,6411	0,6547	0,6411
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7720	0,7431	0,7720	0,7464	0,7720	0,7431

Tabela 29 - Modelos indiferentes com 10 parâmetros (M49 a M54)

Termos	M49	M50	M51	M52	M53	M54
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$						
$v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$						
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$						
$z_1$	√	√	√	√	√	√
$z_2$	√	√	√			
$v_2z_1$				√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$	√			√		
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$		√			√	
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$			√			√
$AIC_c$	3,4049	3,4049	3,4049	3,7938	3,7938	3,7938
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6497	0,6497	0,6497	0,6562	0,6562	0,6562
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7587	0,7587	0,7697	0,7601	0,7601	0,7755

Tabela 30 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M55 a M60)

Termos	M55	M56	M57	M58	M59	M60
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3$	√					
$v_1v_2v_3$		√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$		√	√	√	√	√
$v_1v_3(v_1 - v_3)$	√					
$v_2v_3(v_2 - v_3)$		√	√			
$z_1$		√		√	√	√
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$			√			
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$				√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$						
$v_2z_1z_2$	√					
$v_3z_1z_2$				√		
$v_1v_2z_1z_2$	√					
$v_2v_3z_1z_2$	√				√	
$v_1v_2v_3z_1z_2$		√	√			√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$						
<i>AIC<sub>c</sub></i>	2,0460	2,4618	3,4944	3,3645	3,6145	1,8167
<i>PRESS</i>	30,34	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
<i>MSE</i>	0,5886	0,5894	0,6052	0,6032	0,6071	0,5798
$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)]$	0,6642	0,6916	0,7106	0,7228	0,7274	0,6804

Tabela 31 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M61 a M66)

Termos	M61	M62	M63	M64	M65	M66
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3$						
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$	√					
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$		√	√	√	√	√
$z_1$		√	√	√		
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$	√				√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$		√			√	
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$	√					
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$			√			√
$v_2z_1z_2$						
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2z_1z_2$						
$v_2v_3z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$				√		
$AIC_c$	3,7418	2,4618	2,4618	2,4618	3,4944	3,4944
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6091	0,5894	0,5894	0,5894	0,6052	0,6052
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7152	0,6916	0,6916	0,6916	0,7106	0,7092



Tabela 32 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M67 a M72)

Termos	M67	M68	M69	M70	M71	M72
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3$						
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$						
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√					
$z_1$		√	√	√	√	√
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$	√					
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$		√	√	√		
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$		√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$					√	√
$v_2z_1z_2$						
$v_3z_1z_2$		√			√	
$v_1v_2z_1z_2$						
$v_2v_3z_1z_2$			√			√
$v_1v_2v_3z_1z_2$	√			√		
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$	√					
<i>AIC<sub>c</sub></i>	3,4944	3,3645	3,6145	1,8167	3,3645	3,6145
<i>PRESS</i>	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
<i>MSE</i>	0,6052	0,6032	0,6071	0,5798	0,6032	0,6071
$\text{var}[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7092	0,7228	0,7121	0,6804	0,7228	0,7121

Tabela 33 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M73 a M78)

Termos	M73	M74	M75	M76	M77	M78
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3$						
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$						
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$						
$z_1$	√	√	√	√		
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$					√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$					√	
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$	√		√	√		√
$v_2z_1z_2$						
$v_3z_1z_2$		√				
$v_1v_2z_1z_2$						
$v_2v_3z_1z_2$			√			
$v_1v_2v_3z_1z_2$	√			√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$		√	√	√		
$AIC_c$	1,8167	3,3645	3,6145	1,8167	3,7418	3,7418
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,5798	0,6032	0,6071	0,5798	0,6091	0,6091
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,6804	0,7228	0,7274	0,6804	0,7152	0,7152

Tabela 34 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M79 a M84)

Termos	M79	M80	M81	M82	M83	M84
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√					
$v_2v_3$		√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$		√	√	√	√	
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$		√	√			√
$z_1$		√		√		√
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$	√		√		√	
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$						√
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$	√			√	√	
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$						
$v_2z_1z_2$						
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2z_1z_2$						
$v_2v_3z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$	√					
$AIC_c$	3,7418	3,3046	3,0126	3,0126	3,4501	3,3046
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6091	0,6023	0,5978	0,5978	0,6046	0,6023
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7152	0,7135	0,7072	0,7081	0,7151	0,7135

Tabela 35 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M85 a M90)

Termos	M85	M86	M87	M88	M89	M90
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$						
$v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$						
$v_1v_3(v_1 - v_3)$						
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√	√	√	√	√	
$z_1$	√	√				√
$z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2z_1$			√	√	√	
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$			√			√
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$						√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$	√			√		
$v_2z_1z_2$						
$v_3z_1z_2$						
$v_1v_2z_1z_2$						
$v_2v_3z_1z_2$						
$v_1v_2v_3z_1z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$		√			√	
$AIC_c$	3,3046	3,3046	3,0126	3,0126	3,0126	3,0126
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,6023	0,6023	0,5978	0,5978	0,5978	0,5978
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7135	0,7135	0,7072	0,6978	0,6978	0,7081

Tabela 36 - Modelos indiferentes com 11 parâmetros (M91 a M95)

Termos	M91	M92	M93	M94	M95
$v_1$	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√
$v_1v_3$					
$v_2v_3$	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$					
$v_1v_3(v_1 - v_3)$					
$v_2v_3(v_2 - v_3)$					
$z_1$	√	√			
$z_2$	√	√	√	√	√
$v_2z_1$			√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$			√		
$v_2v_3(v_2 - v_3)z_1$	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$	√			√	
$v_2z_1z_2$					
$v_3z_1z_2$					
$v_1v_2z_1z_2$					
$v_2v_3z_1z_2$					
$v_1v_2v_3z_1z_2$	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$		√			√
$AIC_c$	3,0126	3,0126	3,4501	3,4501	3,4501
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,5978	0,5978	0,6046	0,6046	0,6046
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,7081	0,7081	0,7151	0,7119	0,7119

Tabela 37 - Modelos indiferentes com 12 parâmetros (M96 a M101)

Termos	M96	M97	M98	M99	M100	M101
$v_1$	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√	√	√	
$v_2v_3$	√	√	√	√	√	
$v_1v_2v_3$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)$	√					
$v_1v_3(v_1 - v_3)$	√	√	√	√	√	
$v_2v_3(v_2 - v_3)$						
$z_2$	√	√	√	√	√	
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$		√				
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$			√			
$v_1v_2v_3z_2$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$				√		
$v_2z_1z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2z_1z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3z_1z_2$	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3z_1z_2$						
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$					√	
$AIC_c$	3,8020	3,8020	3,5573	3,8020	3,8020	3,7285
$PRESS$	Indef.	Indef.	28,67	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,5628	0,5628	0,5593	0,5628	0,5628	0,5628
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,6617	0,6617	0,6312	0,6605	0,6605	0,6817

Tabela 38 - Modelos indiferentes com 12 parâmetros (M102 a M108)

Termos	M102	M103	M104	M105	M106	M107	M108
$v_1$	√	√	√	√	√	√	√
$v_2$	√	√	√	√	√	√	√
$v_3$	√	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2$	√	√	√	√	√	√	√
$v_1v_3$	√	√	√				
$v_2v_3$				√	√	√	√
$v_1v_2v_3$	√	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)$				√			
$v_1v_3(v_1 - v_3)$							
$v_2v_3(v_2 - v_3)$	√	√	√	√	√	√	√
$z_2$	√	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1$	√				√		
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$							
$v_1v_2v_3z_2$							
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_2$		√				√	
$v_2z_1z_2$	√	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2z_1z_2$	√	√	√	√	√	√	√
$v_2v_3z_1z_2$	√	√	√	√	√	√	√
$v_1v_2v_3z_1z_2$							
$v_1v_2(v_1 - v_2)z_1z_2$			√				√
$AIC_c$	3,7825	3,7825	3,7825	3,3864	3,3864	3,3864	3,3864
$PRESS$	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.	Indef.
$MSE$	0,5618	0,5618	0,5618	0,5569	0,5569	0,5569	0,5569
$var[y(\mathbf{w}_0)]$	0,6765	0,6627	0,6627	0,6798	0,6705	0,6520	0,6520

Na Tabela 39 são apresentados os resultados do teste  $t$  para o Modelo (5.12).

Tabela 39 - Teste do Modelo (5.12)

	estimativa dos coeficientes	desvio-padrão	$t$ -valor	$p$ -valor
$v_1$	6,00949	0,305007	19,703	0,0000
$v_2$	12,5084	0,314218	39,808	0,0000
$v_3$	-39,1389	3,12729	-12,515	0,0000
$z_2$	0,581277	0,125468	4,633	0,0001
$v_1v_2$	-6,19229	1,54374	-4,011	0,0004
$v_1v_3$	88,3249	6,09043	14,502	0,0000
$v_2v_3$	79,6151	5,70780	13,948	0,0000
$v_2z_1z_2$	0,715917	0,312683	2,290	0,0301
$v_1v_3(v_1 - v_3)$	-70,1848	9,18466	-7,642	0,0000
$v_1v_2z_1z_2$	-3,15572	1,41835	-2,225	0,0346
$v_2v_3z_1z_2$	-3,43840	1,32441	-2,596	0,0151
$v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$	13,0759	8,32659	1,570	0,1280

Analisando a coluna  $p$ -valor da Tabela 39, pode-se concluir que apenas o termo  $v_1v_3(v_1 - v_3)z_1$ , não é significativo. No entanto, pelo critério  $AIC_c$ , tal termo deve compor o modelo.

Com os gráficos de diagnóstico (Figuras 76 a 79) foi possível verificar as suposições de normalidade, independência, aditividade do modelo inerente ao modelo linear e variância constante. Utilizando a Equação (3.2),  $ET = 1,98$ , que na distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade corresponde a um  $p$ -valor de 0,159. Então, não se rejeita a hipótese de que a variância não aumente quando a média aumenta.

A minimização da variância de uma futura resposta conduziu aos seguintes resultados:

$$v_1 = 0,5130; v_2 = 0,0764; v_3 = 0,4106; z_1 = 1; z_2 = 1.$$

Utilizando a Equação (2.8), tem-se a seguinte solução final em termos de componentes reais:

$$x_1 = 0,7905; x_2 = 0,1431; x_3 = 0,0664; z_1 = 1; z_2 = 1.$$

Diante destes resultados, cabe registrar que a utilização do critério de indiferença de  $AIC_c$  pode levar à escolha de um modelo com menor  $PRESS$ ,  $MSE$  ou variância de uma futura resposta no ponto do que o obtido pelo critério  $AIC_c$  mínimo.



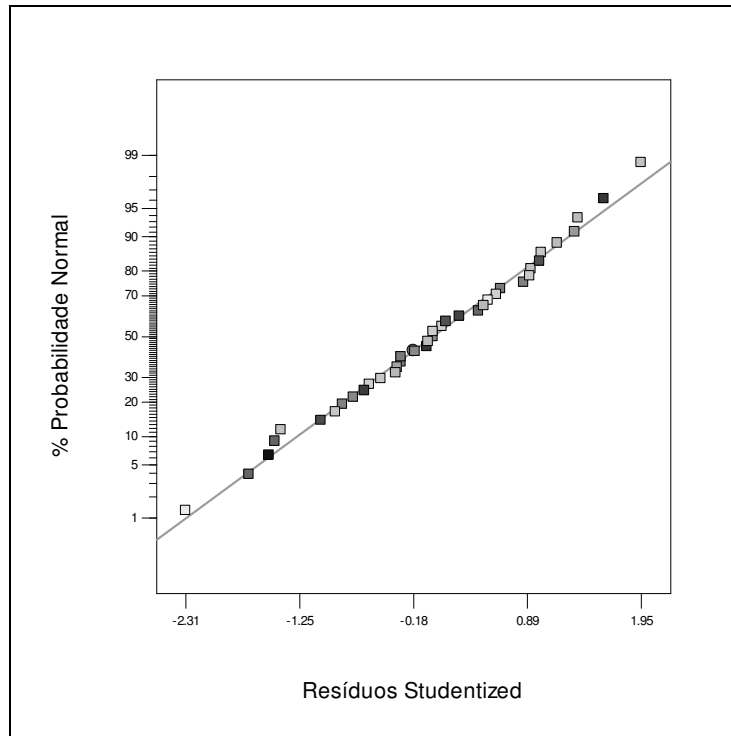


Figura 76 - Gráfico de probabilidade normal dos resíduos *studentized*

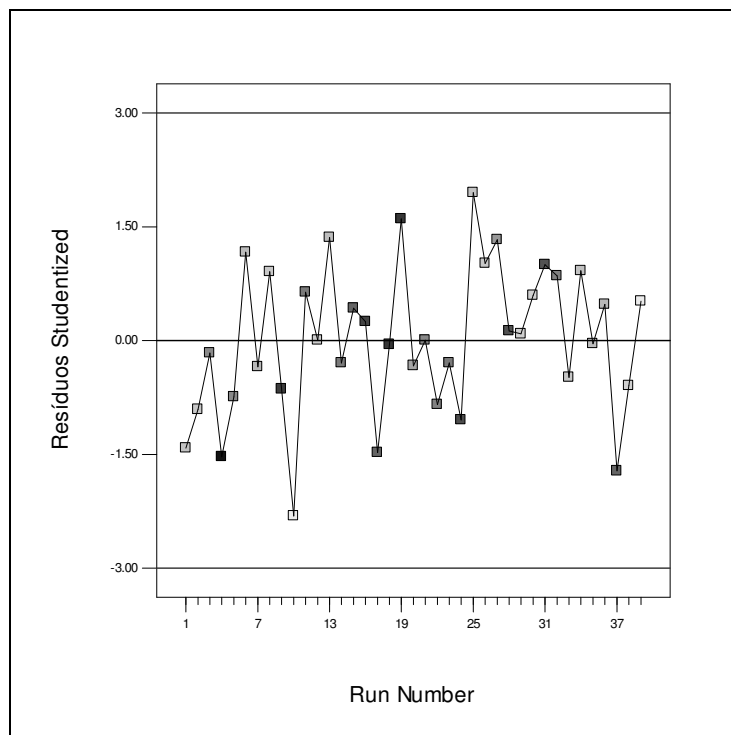


Figura 77 - Gráfico de resíduos *studentized* versus *run number*

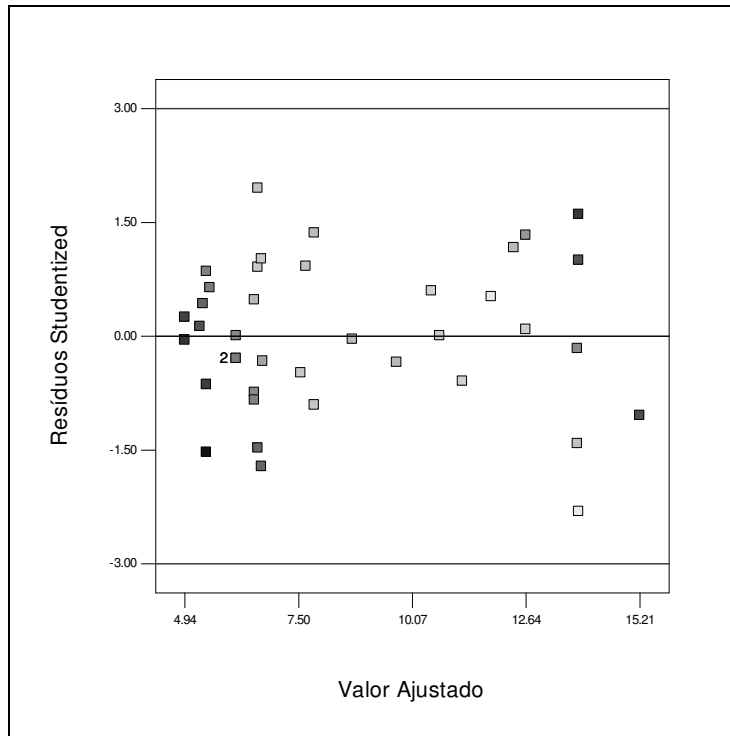


Figura 78 - Gráfico de resíduos *studentized* versus valor ajustado

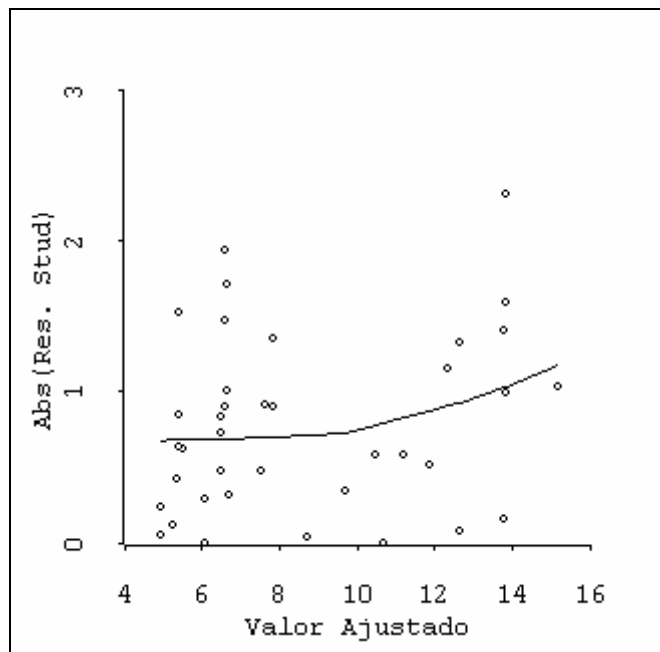


Figura 79 - Gráfico para verificação de não constância da variância