

Resolução dos exercícios do tema (06)

- 1) Uma indústria farmacêutica deseja estudar um processo de purificação de substância ativa e identifica 6 possíveis fatores de influência no desempenho do processo. Os fatores são: pH do eluente, composição do eluente, velocidade do eluente, temperatura do eluente, tipo de coluna empregada e tempo de coleta das frações.

Qual a ferramenta adequada para atingir os objetivos descritos a seguir:

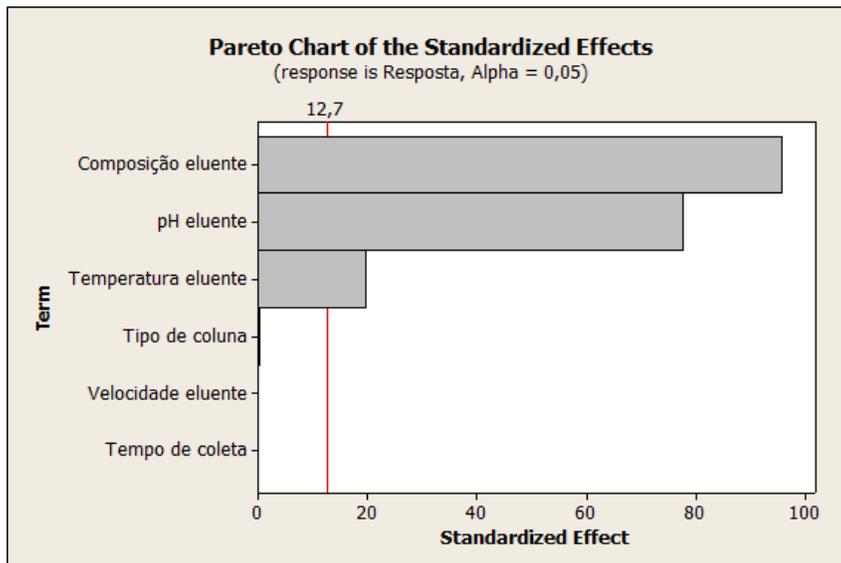
Resposta:

Identificar os fatores de maior relevância e descartar os fatores que não influenciam no desempenho do processo. **Planejamento fatorial fracionado**

Identificar interações entre os fatores e ajusta modelo de regressão com os termos lineares. **Planejamento fatorial completo**

Ajuste modelo de regressão completo (com termos quadráticos e interações) e criar gráficos de superfície resposta. **Delineamento de compósito central**

- 2) Considerando a questão anterior, foi realizado um planejamento fatorial fracionado ($2^{6-2} = 8$ experimentos). O gráfico de Pareto obtido encontra-se abaixo:



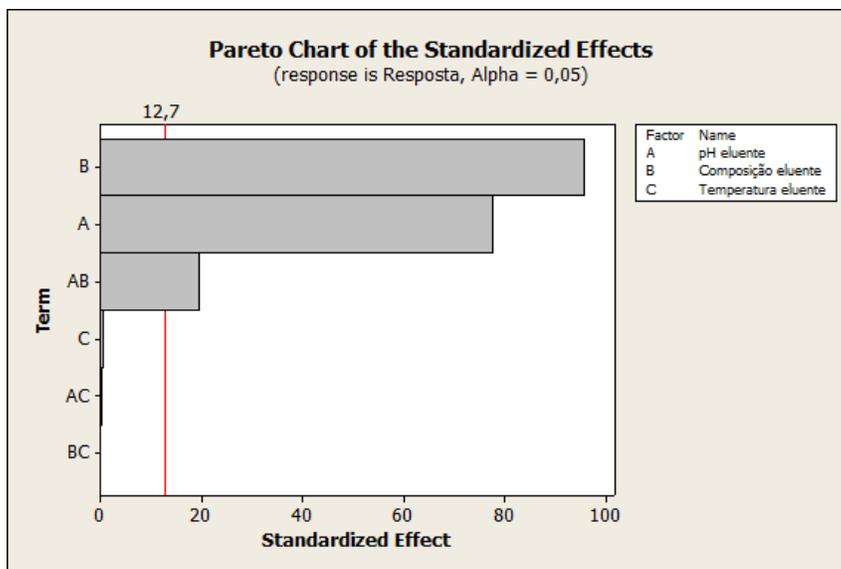
Analisando o gráfico, podemos concluir que os fatores relevantes para a performance do processo são:

Resposta:

Os fatores relevantes são aqueles que apresentam efeito padronizado maior que o valor crítico (linha vermelha). Portanto, os fatores relevantes para a performance do processo são:

Composição do eluente, pH do eluente e temperatura do eluente.

- 3) Considerando os fatores relevantes, foi realizado um planejamento fatorial completo. O gráfico de Pareto obtido encontra-se abaixo:



Analisando o gráfico, podemos concluir que:

Resposta:

Os fatores relevantes para a performance do processo são: pH do eluente (A), composição do eluente (B) e a interação entre estes fatores (AB). A temperatura (C), assim como sua interação com os fatores pH do eluente (AC) e composição do eluente (BC) não são relevantes. Portanto, podemos afirmar que:

Existe interação entre os fatores pH do eluente e composição do eluente.

- 4) Um delineamento de compósito central foi realizado para ajusta o modelo que explique o desempenho do processo (resposta) em função dos fatores pH do eluente e composição do eluente. Os resultados são apresentados a seguir:

Response Surface Regression: Resposta versus pH; Composição

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for Resposta

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	379,678	0,6864	553,124	0,000
pH	60,497	0,5427	111,480	0,000
Composição	75,014	0,5427	138,232	0,000
pH*pH	1,420	0,5819	2,441	0,045
Composição*Composição	-0,219	0,5819	-0,376	0,718
pH*Composição	14,577	0,7674	18,994	0,000

S = 1,53489 PRESS = 35,4586
 R-Sq = 99,98% R-Sq(pred) = 99,95% R-Sq(adj) = 99,96%

Analysis of Variance for Resposta

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	5	75160,7	75160,7	15032,1	6380,65	0,000
Linear	2	74295,6	74295,6	37147,8	15768,02	0,000
pH	1	29278,8	29278,8	29278,8	12427,89	0,000
Composição	1	45016,8	45016,8	45016,8	19108,15	0,000
Square	2	15,2	15,2	7,6	3,22	0,102
pH*pH	1	14,9	14,0	14,0	5,96	0,045
Composição*Composição	1	0,3	0,3	0,3	0,14	0,718
Interaction	1	849,9	849,9	849,9	360,76	0,000
pH*Composição	1	849,9	849,9	849,9	360,76	0,000
Residual Error	7	16,5	16,5	2,4		
Lack-of-Fit	3	1,7	1,7	0,6	0,16	0,919
Pure Error	4	14,7	14,7	3,7		
Total	12	75177,2				

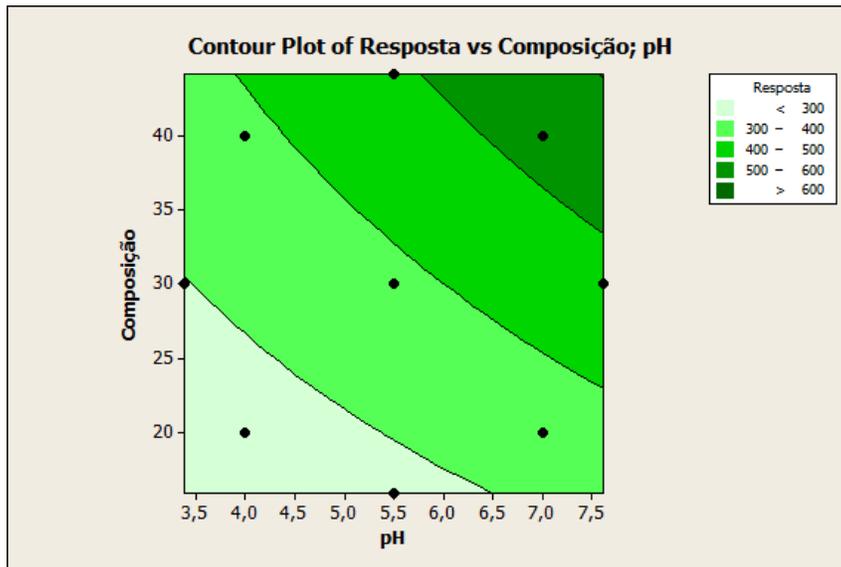
Analisando os resultados, podemos concluir que:

Resposta:

De acordo com a Análise de Variância (ANOVA), os coeficientes lineares (pH e composição do eluente), quadrático (pH do eluente) e de interação (pH e composição do eluente) foram significativos (p -valor $< 0,05$). Portanto:

O modelo exige termos lineares, quadráticos e de interações.

- 5) Considerando o modelo ajustado, foi criado um gráfico de superfície resposta (Contour plot).



Com base no gráfico, qual a melhor combinação de pH e composição do eluente para aumentar a resposta do processo.

Resposta:

No gráfico de superfície resposta Contour plot, a coloração indica a resposta do processo em relação aos fatores pH e composição do eluente. A região com coloração verde escura é a que apresenta maior resposta (> 600). Portanto, para aumentar a resposta do processo devemos:

Aumentar pH e composição do eluente.