

Aulas 1 e 2. Introdução à Metodologia de Superfícies de Resposta

Prof. Silvio Sandoval Zocchi
ESALQ – USP – Piracicaba, SP

1. Introdução

- 1.1 Metodologia de Superfícies de Resposta (MSR)
- 1.2 Objetivos e aplicações típicas

2

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

1.1 Metodologia de Superfícies de Resposta (RSM)

- Planejamento de experimentos
- Técnicas de Regressão
- Métodos elementares de otimização

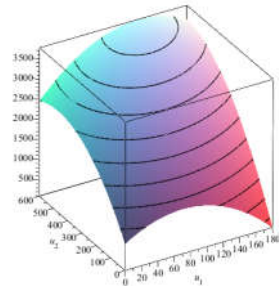


Figura 1. Produtividade de feijão, em kg/ha, em função da quantidade de N aplicada (u_1) e da lâmina de água de irrigação (u_2), em mm.

3

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

- Exemplo:

y = ganho de peso, em kg/dia por animal

u_1 = lotação, em kg/ha

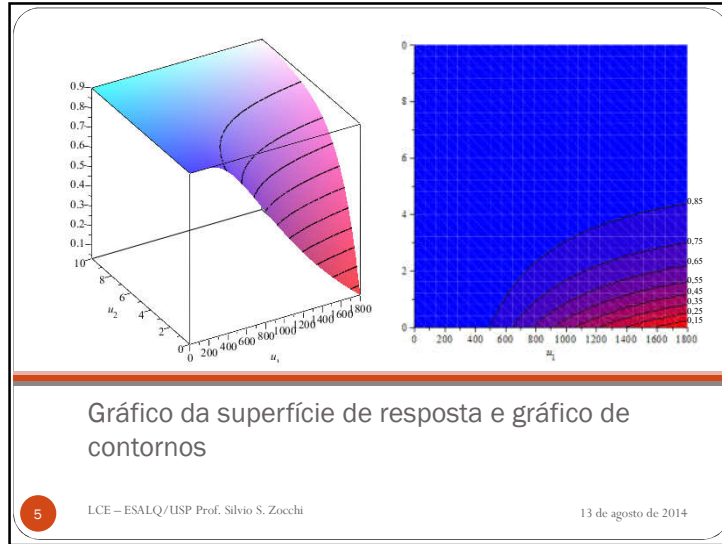
u_2 = consumo de suplemento alimentar, em kg/dia por animal

$$y = 0,9 - 2. \exp\left(-\frac{1500}{u_1} - \frac{u_2}{2}\right)$$

4

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

13 de agosto de 2014



1.2 Objetivos e aplicações típicas

- Planejamento, desenvolvimento e **formulação de novos produtos**
- **Melhoria de produtos** já existentes
- Mapear uma superfície de resposta em uma região de interesse particular
- Predizer mudanças da variável resposta
- Otimizar uma ou mais respostas
- Selecionar condições operacionais para atingir especificações
- Indústria, laboratórios, casas de vegetação etc.

6 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Formulação de Produtos (**problema de misturas**)

Exemplo. Substrato para bromélia.

y_1 = Peso de matéria seca, em g, da muda de bromélia
 y_2 = Custo unitário do substrato, em R\$

p_1 = % de fibra de coco
 p_2 = % de areia
 p_3 = % de vermiculita

} $p_1 + p_2 + p_3 = 100\%$

Misturas de produtos, inseticidas, herbicidas etc.

7 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Criação de **produtos robustos**

- Produtos robustos a condições ambientais adversas
- Produtos robustos a variações de seus componentes
- Minimizar a variabilidade ao redor de um valor objetivo

8 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

2. Experimentação

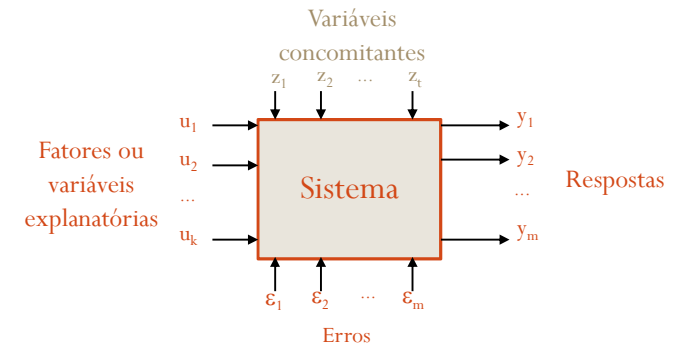
- 2.1 Representação esquemática de um experimento
- 2.2 Codificação de fatores
- 2.3 Regiões experimentais
- 2.4 Planejamento. Natureza sequencial da MSR

9

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

2.1 Representação esquemática de um experimento



10

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

- Experimentos são conduzidos de modo a se estudar se e de que modo certas variáveis, ou **fatores**, afetam outras variáveis (**variáveis resposta**)
- Os valores das variáveis resposta podem depender também de outras t **variáveis concomitantes** conhecidas ou não pelo pesquisador
- A relação entre os fatores e as respostas observadas é obscurecida pela presença dos **erros**

11

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

2.2 Codificação de fatores

- Fatores quantitativos tem seus valores pré-especificados dentro de intervalos

$$u_{i,\min} \leq u_i \leq u_{i,\max} \quad (i = 1, \dots, k)$$

- Exemplo: $20 \leq N \leq 100$ kg/ha
- De modo a auxiliar tanto no planejamento quanto na interpretação dos resultados, as variáveis u_1, \dots, u_k são geralmente **codificadas** de forma a terem seus valores **entre -1 e 1**

12

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

em que

$$x_i = \frac{u_i - u_{i0}}{\Delta_i} \quad (i = 1, \dots, k)$$

$$u_{i0} = (u_{i,\text{mín}} + u_{i,\text{máx}})/2$$

$$\Delta_i = u_{i,\text{máx}} - u_{i0} = u_{i0} - u_{i,\text{mín}}$$

- Exemplo:

$$20 \leq u \leq 100$$

$$u_0 = \frac{20 + 100}{2} = 60$$

$$\Delta = 100 - 60 = 60 - 20 = 40$$

$$x = \frac{u - 60}{40}$$

13 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

- Observação:

$$u_i = u_{i0} + x_i \Delta_i \quad (i = 1, \dots, k)$$
- Exemplo

$$u = 60 + 40x$$
- Nota: Fatores qualitativos ordinais podem, também, ter seus níveis codificados como:
 - 1 (nível inferior)
 - +1 (nível superior)

14 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

2.3 Regiões experimentais

Região quadrada

$$-1 \leq x_1 \leq 1$$

$$-1 \leq x_2 \leq 1$$

Região circular

$$x_1^2 + x_2^2 \leq r^2$$

Região simplex para experimentos de misturas

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

Região quadrada com restrição

15 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

2.4 Planejamento. Natureza sequencial da MSR

- Experimento para a **seleção de fatores importantes**
- Alterando os níveis dos fatores importantes** em busca da resposta ótima
- Novo experimento** planejado de tal forma a encontrar a resposta ótima

16 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

3. Planejamento de experimentos fatoriais 2^k para a seleção de fatores importantes. Análise.

- 3.1 Introdução. Experimento do helicóptero
- 3.2 Planejamento de Fatoriais 2^k usando o módulo ADX do SAS. Experimento do helicóptero
- 3.3 Análise exploratória dos resultados

17

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

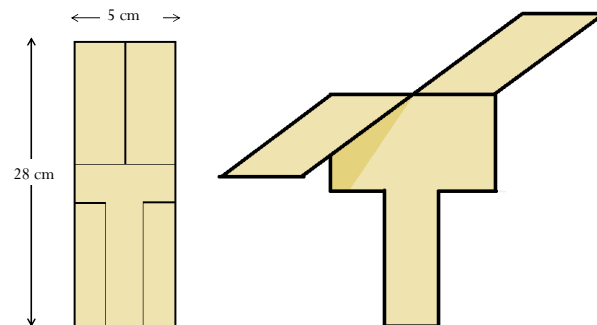
3.1 Introdução

- k fatores ou variáveis explanatórias
- Com 2 níveis cada
- Ex.: $k = 6 \Rightarrow 2 \times 2 \times \dots \times 2 = 2^6 = 64$ combinações (tratamentos)
- Experimentos fatoriais 2^k :
 - Com repetições ($k = 2$ ou 3), inteiramente ao acaso ou casualizados em blocos completos
 - Sem repetições ($4 \leq k \leq 6$)
 - Em blocos incompletos
 - Não fracionados ou fracionados ($k \geq 4$)

18

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014



Exemplo. Helicóptero de papel ou cartolina

19

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

- Quais fatores podem afetar o desempenho do helicóptero?
- Como avaliar ou quantificar o desempenho do mesmo?
- Como planejar um experimento com, no máximo 16 helicópteros?
- Material necessário: papel, régua, cartolina, tesoura e cronômetro

20

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

$u_1 = \text{Comprimento da hélice}$

$y = \text{Tempo mediano de queda, em segundos}$

$u_2 = \text{espaçamento entre a hélice e a base, em cm}$

$u_3 = \text{largura da base, em cm}$

$u_4 = \text{material: cartolina ou papel}$

Experimento do helicóptero. Fatores e variável resposta

21 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Definição da região experimental

- $u_1 = \text{comprimento da hélice, em cm}$
 $7 \leq u_1 \leq 12 \Rightarrow x_1 = \frac{u_1 - 9,5}{2,5}$
- $u_2 = \text{espaçamento entre a hélice e a base, em cm}$
 $2 \leq u_2 \leq 6 \Rightarrow x_2 = \frac{u_2 - 4}{2}$
- $u_3 = \text{largura da base, em cm}$
 $1 \leq u_3 \leq 3 \Rightarrow x_3 = u_3 - 2$
- $u_4 = \text{material: cartolina ou papel}$
 $x_4 = -1(\text{cartolina}) \text{ ou } x_4 = +1(\text{papel})$

22 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Fatorial 2^4 completo

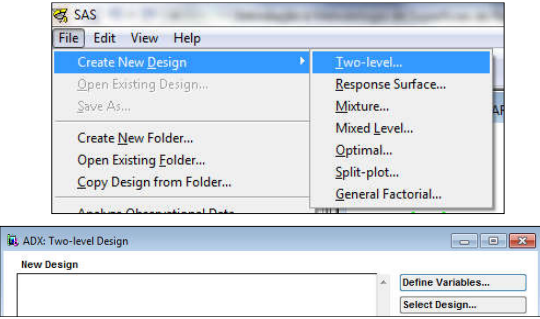
Helic.	x_1	x_2	x_3	x_4	Helic.	x_1	x_2	x_3	x_4
1	-1	-1	-1	-1	9	-1	-1	-1	1
2	1	-1	-1	-1	10	1	-1	-1	1
3	-1	1	-1	-1	11	-1	1	-1	1
4	1	1	-1	-1	12	1	1	-1	1
5	-1	-1	1	-1	13	-1	-1	1	1
6	1	-1	1	-1	14	1	-1	1	1
7	-1	1	1	-1	15	-1	1	1	1
8	1	1	1	-1	16	1	1	1	1

Nota: Deve-se **sortear (aleatorizar)** a sequência de lançamento dos helicópteros!!

23 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

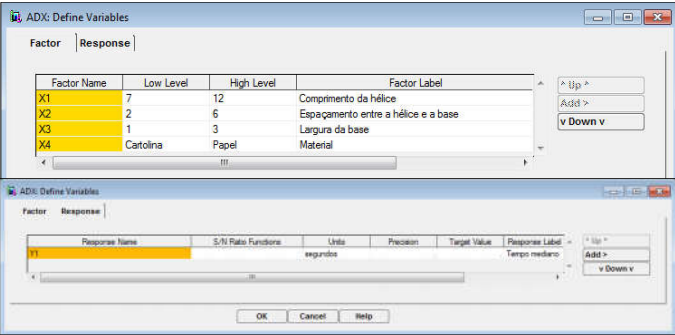
3.2 Planejamento de **fatoriais 2^k** usando o módulo ADX do SAS

24 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014



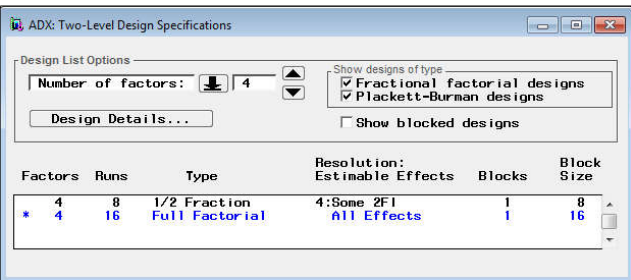
Planejando um fatorial 2^k

25 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014



Definindo o(s) fator(es) e variável(is) resposta

26 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014



Factors	Runs	Type	Resolution: Estimable Effects	Blocks	Block Size
4	8	1/2 Fraction	4:Some 2FI	1	8
* 4	16	Full Factorial	All Effects	1	16

Fatorial 2^4 completo

27 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Especificações

- Número de unidades experimentais (“Runs”)
- Tipo de delineamento:
 - Metade do fatorial
 - Fatorial completo
- Efeitos estimáveis (Nota: 2FI = efeitos de interação envolvendo 2 fatores)
- Um só bloco de **unidades experimentais homogêneas**

28 LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Metade do fatorial 2^4 completo

Não há como separar os efeitos dos pares de interações duplas:
 X_1X_2 e X_3X_4 , X_1X_3 e X_2X_4 , X_1X_4 e X_2X_3 !!!!!

29 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Fatoriais 2^4 com ou sem repetições, em blocos

30 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

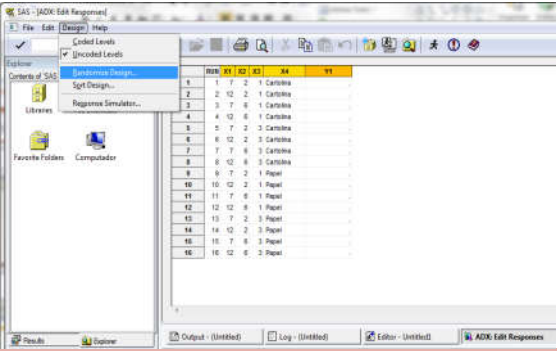
Opções

- Número de unidades experimentais (“Runs”)
- Tipo de delineamento:
 - Metade do fatorial
 - Fatorial completo
 - Fatorial com repetições
- Efeitos estimáveis (Nota: 2FI = efeitos de interação envolvendo 2 fatores)
- Número de blocos
- Tamanho dos blocos

31 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

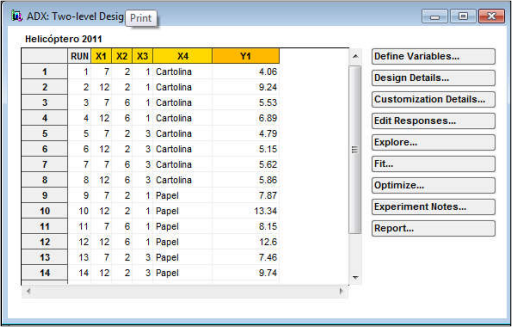
Alterando o planejamento inicial

32 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014



Aleatorizando a sequência de lançamentos

33 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014



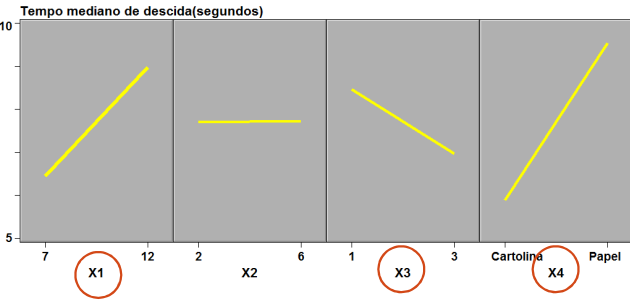
Editando as respostas

34 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

3.3 Análise exploratória

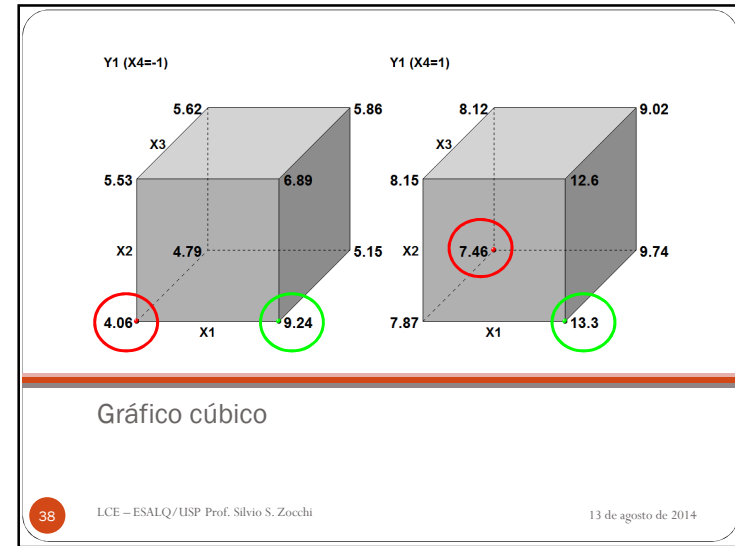
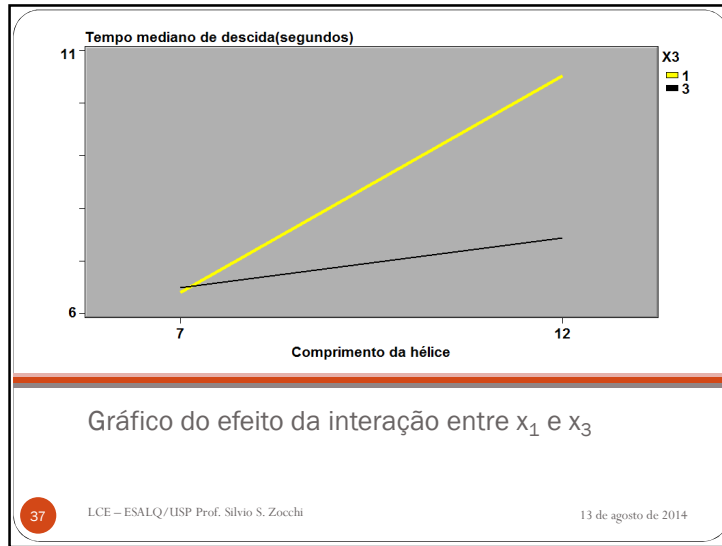
- Gráficos dos efeitos principais
- Gráficos dos efeitos de interações duplas
- Gráficos dos efeitos de interações envolvendo 3 fatores
- Gráfico cúbico

35 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014



Gráficos de efeitos principais

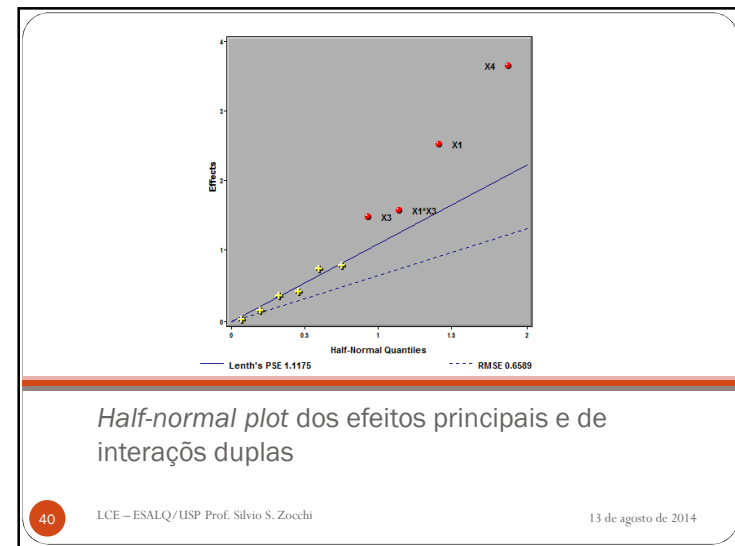
36 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014



3.4 Análise dos resultados

- Normal-plot ou half normal-plot dos efeitos principais e de interações duplas
- Teste t
- Análise de variância
- Modelo preditivo
- Verificação das pré-suposições
 - Análise gráfica dos resíduos
 - Normal-plot dos resíduos
- Gráfico de contornos e superfície de resposta

39 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014



Effect	Estimate	Std Error	t Ratio	P Value
X1	2.53	0.32946	7.6795	0.0006
X2	0.0176	0.32946	0.053119	0.9697
X3	-1.49	0.32946	-4.5227	0.0003
X4	3.645	0.32946	11.064	0.0001
X1*X2	-0.7925	0.32946	-2.4055	0.0612
X1*X3	-1.585	0.32946	-4.8111	0.0048
X1*X4	0.745	0.32946	2.2614	0.0732
X2*X3	0.3526	0.32946	1.07	0.3335
X2*X4	-0.1475	0.32946	-0.44772	0.6731
X3*X4	-0.415	0.32946	-1.2597	0.2634

Teste t para os efeitos principais e de interação dupla, considerando-se os de interação triplas e o de quádrupla como resíduo (padrão do SAS)

41 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Análise de variância

Source	Master Model					Predictive Model				
	DF	SS	MS	F	Pr > F	DF	SS	MS	F	Pr > F
X1	1	25.604	25.604	58.975	0.001	1	25.604	25.604	34.442	0.000
X2	1	0.001	0.001	0.003	0.960					
X3	1	8.880	8.880	20.455	0.006	1	8.880	8.880	11.946	0.005
X4	1	53.144	53.144	122.412	0.000	1	53.144	53.144	71.490	<.0001
X1.X2	1	2.512	2.512	5.787	0.061					
X1.X3	1	10.049	10.049	23.147	0.005	1	10.049	10.049	13.518	0.004
X1.X4	1	2.220	2.220	5.114	0.073					
X2.X3	1	0.497	0.497	1.145	0.334					
X2.X4	1	0.087	0.087	0.200	0.673					
X3.X4	1	0.689	0.689	1.587	0.263					
Model	10	103.684	10.368	23.883	0.001	4	97.677	24.419	32.849	<.0001
Error	5	171	0.434			11	8.177	0.743		
(Lack of fit)						3	49	0.983	1.504	0.286
(Pure Error)						8	28	0.654		
Total	15	105.854				15	105.854			

42 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

Estimativas dos efeitos dos fatores

Term	Master Model					Predictive Model			
	Estimate	Std Err	t	Pr > t	Estimate	Std Err	t	Pr > t	
X1	2.530	0.329	7.680	0.001	2.530	0.431	5.869	0.000	
X2	0.018	0.329	0.053	0.960					
X3	-1.490	0.329	-4.523	0.006	-1.490	0.431	-3.456	0.005	
X4	3.645	0.329	11.064	0.000	3.645	0.431	8.455	<.0001	
X1.X2	-0.793	0.329	-2.406	0.061					
X1.X3	-1.585	0.329	-4.811	0.005	-1.585	0.431	-3.677	0.004	
X1.X4	0.745	0.329	2.261	0.073					
X2.X3	0.353	0.329	1.070	0.334					
X2.X4	-0.148	0.329	-0.448	0.673					
X3.X4	-0.415	0.329	-1.260	0.263					

43 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 13 de agosto de 2014

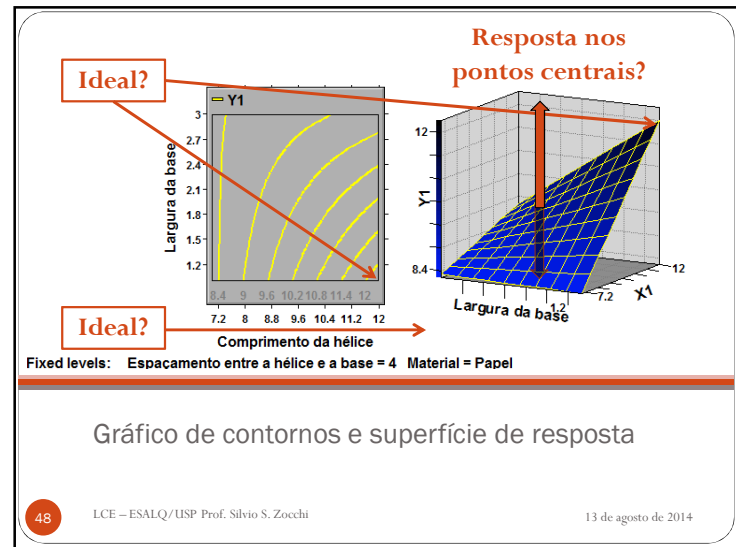
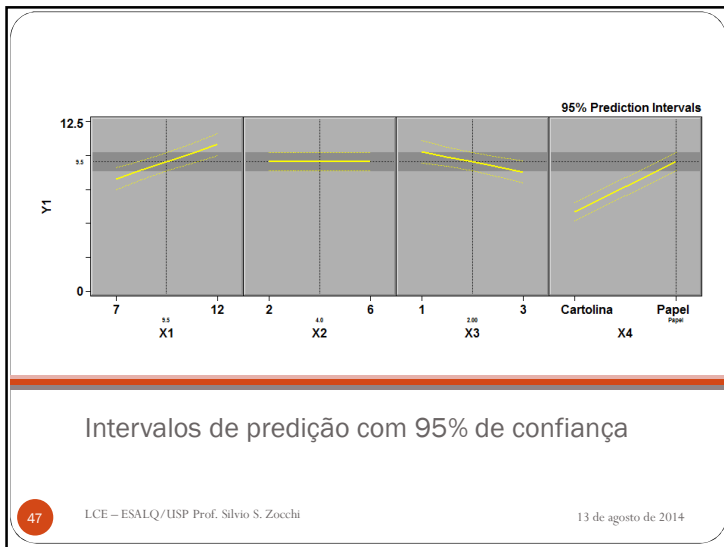
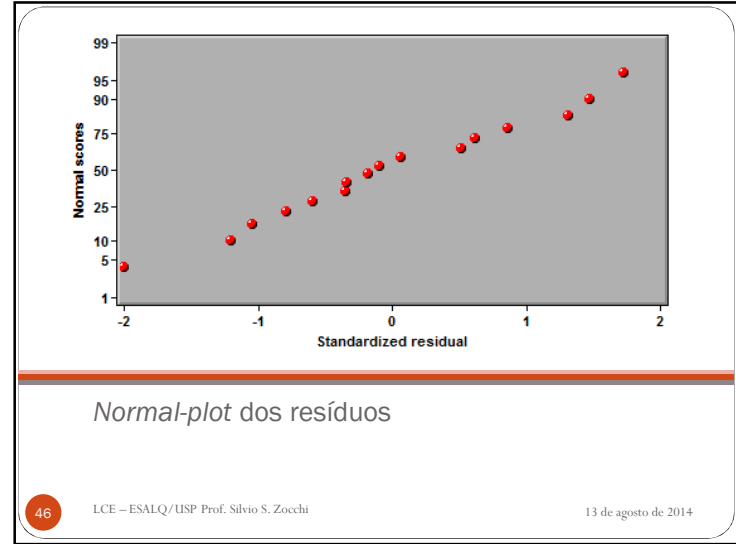
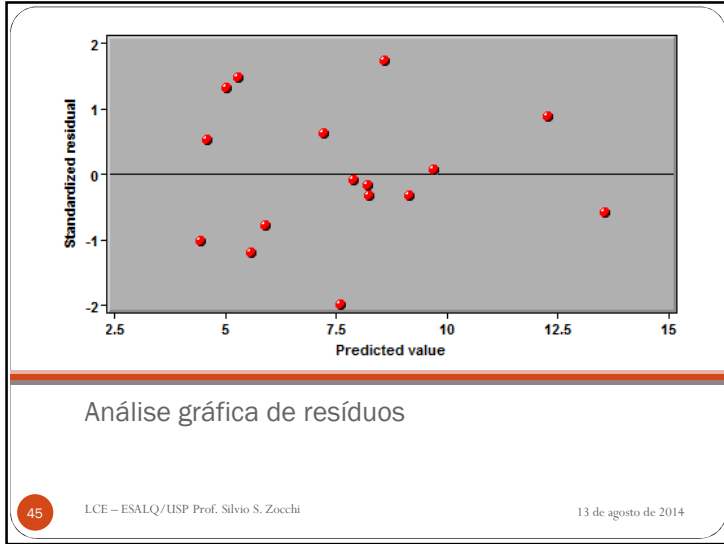
Modelo preditivo

- Com variáveis codificadas

$$y = 7,715 + 1,265x_1 - 0,745x_3 + 1,8225x_4 - 0,7925x_1x_3$$
- Nota: $\widehat{\beta}_1 = \frac{2,53}{2}$, $\widehat{\beta}_3 = \frac{-1,49}{2}$, $\widehat{\beta}_4 = \frac{3,645}{2}$ e $\widehat{\beta}_{13} = \frac{-1,585}{2}$
- $R^2 = 0,923$ $R_{aj}^2 = 0,895$ $C.V. = 11,2\%$
- Com variáveis não codificadas

$$y = 0,1975 + 1,14u_1 + 2,2665u_3 - 3,645u_4 - 0,317u_1u_3$$

44 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 11 de agosto de 2016



Otimização numérica

Comprimento da hélice	Espaçamento entre a hélice e a base	Largura da base	Material	Y
12	2	1	Papel	12.34
12	4	1	Papel	12.34
12	6	1	Papel	12.34
11	2	1	Papel	11.517
11	4	1	Papel	11.517
11	6	1	Papel	11.517
12	2	2	Papel	10.8025
12	4	2	Papel	10.8025
12	6	2	Papel	10.8025

49

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014



ADX Report for Helicóptero 2011

Today's date: 05SEP2011
Experiment creation date: 05SEP2011

Design Details

Design Type	Two-level
Design Description	Full Factorial
Number of factors	4
Number of runs	16
Resolution	Full

50

Observação. O módulo ADX do SAS fornece relatório detalhado em html ou texto

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

Considerações

- O helicóptero ótimo, isto é, com maior tempo permanência no ar, deve ser feito **de papel**
- Deve-se aumentar o tamanho da hélice para mais de 12 cm?
- Deve-se diminuir a largura da base para valor menor do que 1 cm?
- Será que helicópteros com 9,5 cm de hélice e 2 cm de largura da base (**pontos centrais**) seriam melhores? Piores?
- Qual seria uma estratégia **em busca do ótimo**?

51

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014

Exercícios.

1. Analise e interprete os dados coletados durante a aula utilizando o módulo ADX do SAS.
2. Planeje um experimento hipotético para a escolha de fatores importantes **na sua área de interesse**.
3. Leia o primeiro capítulo de cada um dos livros a seguir

BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I.S. e BRUNS, R.E. **Como fazer experimentos: pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria**. 4ªed. Bookman, Porto Alegre, 2010, 413 p.

KHURI, A.I. e J.A. CORNELL. **Response Surfaces. Designs and Analyses**. 2ªed. Marcell Dekker Inc., New York, 1996, 510p.

MYERS, R.H., D.C. MONTGOMERY e C.M. ANDERSON-COOK **Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments**. 3ªed. John Wiley & Sons, New York, 2009, 680p.

52

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

13 de agosto de 2014