

4. Metodologia de superfícies de resposta

- 4.1 Introdução
- 4.2 Modelagem inicial
- 4.3 Caminho de máxima inclinação
- 4.4 Exemplos

53

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

4.1 Introdução

- Segundo Barros Neto, Scarminio e Bruns (2010, cap. 6), a metodologia de superfícies de resposta tem duas etapas distintas:
 1. **Modelagem**
 2. **Deslocamento**
- Devem ser repetidas quantas vezes forem necessárias com o objetivo de chegar a uma região ótima da superfície investigada
- Para a **modelagem**, geralmente são utilizados modelos simples (polinomiais de 1ª ou 2ª ordem)

54

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

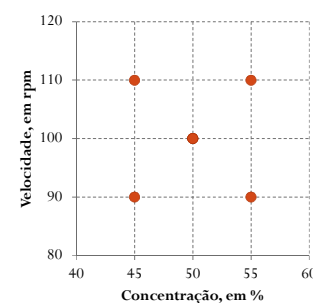
- O **deslocamento** se dá sempre ao longo do caminho de máxima inclinação de um determinado modelo, que é a trajetória na qual a resposta varia de forma mais pronunciada
- **Exemplo:** Rendimento (y) de uma determinada reação, em %, em função do efeito de dois fatores:
 - u_1 = Concentração de um reagente, em % e
 - u_2 = Velocidade de agitação, em rpm
- Nota: informação do pesquisador: processo tem funcionado bem para a concentração **50%** e velocidade **100 rpm**, produzindo rendimento médio em torno de **68%**

55

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

4.2 Modelagem inicial (Exemplo)



u_1	u_2	x_1	x_2	y
45	90	-1	-1	69
55	90	1	-1	59
45	110	-1	1	78
55	110	1	1	67
50	100	0	0	68
50	100	0	0	66
50	100	0	0	69

56

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

Não há evidência de falta de ajuste

Predictive Model					
Source	DF	SS	MS	F	Pr > F
X1	1	110.25	110.25	80.18182	0.0009
X2	1	72.25	72.25	52.54545	0.0019
Model	2	182.5	91.25	66.36364	0.0009
Error	4	5.5	1.375		
(Lack of fit)	2	0.833333	0.416667	0.178571	0.8485
(Pure Error)	2	4.666667	2.333333		
Total	6	188			

2 graus de liberdade, um referente ao efeito de interação dupla X1X2 e outro ao efeito de curvatura

57 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 17/08/2016

Caminho de máxima inclinação?

Gráfico de contornos e de superfície de resposta ($\hat{y} = 67,67 - 5,25x_1 + 4,25x_2$)

58 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 17/08/2016

4.3 Caminho de máxima inclinação

	x_1	x_2	u_1	u_2	y
Estimada	50.25	4.25			
Δ		0.809524			
Centro	0	50	100.0		67.66667
Centro + 1 Δ	-1	0.809524	45	108.1	77
Centro + 2 Δ	-2	1.619048	40	116.2	86
Centro + 3 Δ	-3	2.428571	35	124.3	88
Centro + 4 Δ	-4	3.238095	30	132.4	80
Centro		-0.47619	25	140.5	70

Novos pontos experimentais e respostas

Centro do novo experimento:
 $u_1 = 35$ e $u_2 = 125$

59 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 17/08/2016

- Novo experimento considerando:
 - $30 \leq u_1 \leq 40$
 - $115 \leq u_2 \leq 135$

u_1	u_2	x_1	x_2	y
30	115	-1	-1	86
40	115	1	-1	85
30	135	-1	1	78
40	135	1	1	84
35	125	0	0	90
35	125	0	0	88
35	125	0	0	89

60 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 17/08/2016

Master Model					
Source	DF	SS	MS	F	Pr > F
Model	3	38.75	12.91667	0.660377	0.6293
Error	3	58.67857	19.55952		
(Lack of fit)	1	56.67857	56.67857	56.67857	0.0172
(Pure Error)	2	2	1		
Total	6	97.42857			

• Mesmo o modelo completo não se ajusta bem aos dados
 • Problema de falta de ajuste devido a curvatura
 • Hora de acrescentar os pontos axiais!

61 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 17/08/2016

Exemplo. Compostos fenólicos

y = teor de compostos fenólicos extraídos, em mg/g, em função de:

- u_1 = porcentagem de um certo reagente (PG)
- u_2 = tempo de reação, em minutos (TEMPO)

Delineamento composto central com 4 repetições do ponto central e $\alpha = 1,41$

62 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 17/08/2016

RUN	x_1	x_2	Y
1	-1	-1	37.02
2	-1	1	40.74
3	1	-1	57.42
4	1	1	82.33
5	-1,41	0	20.43
6	1,41	0	62.13
7	0	-1,41	44.02
8	0	1,41	69.37
9	0	0	58.06
10	0	0	55.80
11	0	0	62.94
12	0	0	59.44

Fatorial 2^2
 Pontos axiais (ou estrela)
 Pontos centrais

63 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 17/08/2016

Master Model					
Source	DF	SS	MS	F	Pr > F
PG	1	1829.4	1829.4	114.3	<.0001
TEMPO	1	519.1	519.1	32.4	0.001
PG*PG	1	360.9	360.9	22.6	0.003
PG*TEMPO	1	112.3	112.3	7.0	0.038
TEMPO*TEMPO	1	0.4	0.4	0.0	0.882
Model	5	2840.3	568.1	35.5	0.000
(Linear)	2	2348.5	1174.3	73.4	<.0001
(Quadratic)	2	379.5	189.8	11.9	0.008
(Cross Product)	1	112.3	112.3	7.0	0.038
Error	6	96.0	16.0		
(Lack of fit)	3	69.2	23.1	2.6	0.229
(Pure Error)	3	26.8	8.9		
Total	11	2936.3			

64 LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi 17/08/2016

Predictive Model					
Source	DF	SS	MS	F	Pr > F
PG	1	1829.4	1829.4	132.8	<.0001
TEMPO	1	519.1	519.1	37.7	0.0005
PG*PG	1	379.1	379.1	27.5	0.0012
PG*TEMPO	1	112.3	112.3	8.2	0.0245
Model	4	2839.9	710.0	51.6	<.0001
Error	7	96.4	13.8		
(Lack of fit)	4	69.6	17.4	1.9	0.3057
(Pure Error)	3	26.8	8.9		
Total	11	2936.3			

	Master Model	Predictive Model
RMSE	4.000227	3.71091
R-square	96.73%	96.72%
Adjusted R-square	94.01%	94.84%
Coefficient of Variation	7.388445	6.854075

65

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

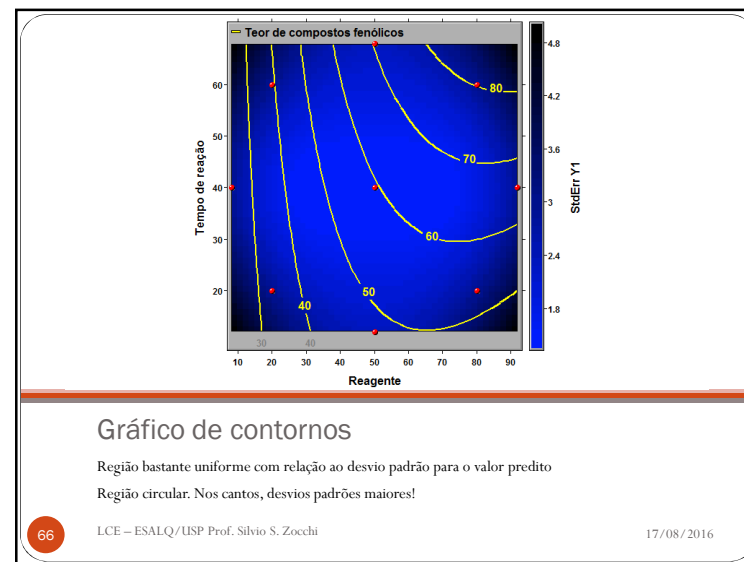


Gráfico de contornos

Região bastante uniforme com relação ao desvio padrão para o valor predito
 Região circular. Nos cantos, desvios padrões maiores!

66

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

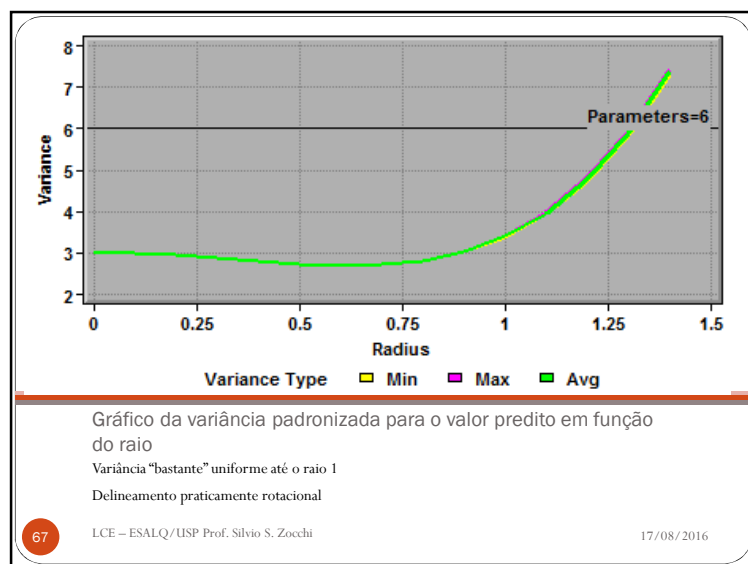
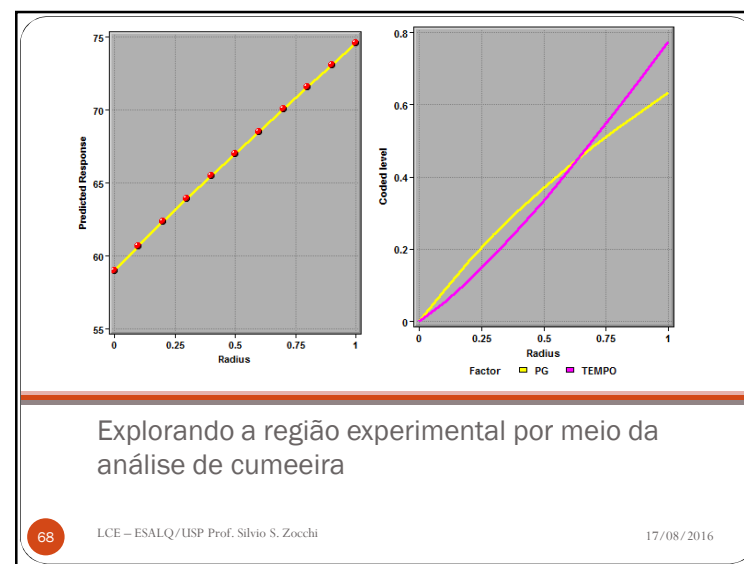


Gráfico da variância padronizada para o valor predito em função do raio
 Variância "bastante" uniforme até o raio 1
 Delineamento praticamente rotacional

67

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016



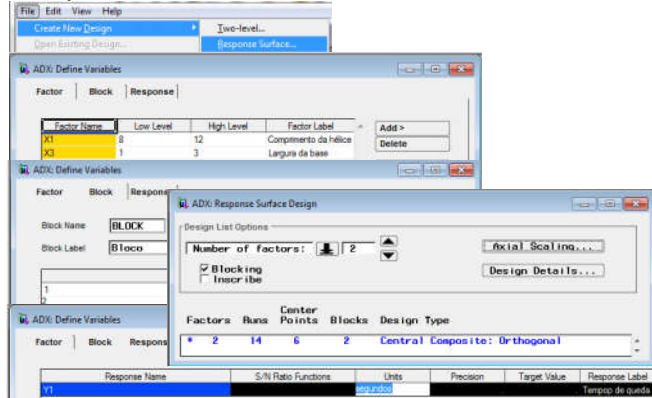
Explorando a região experimental por meio da análise de cumeira

68

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

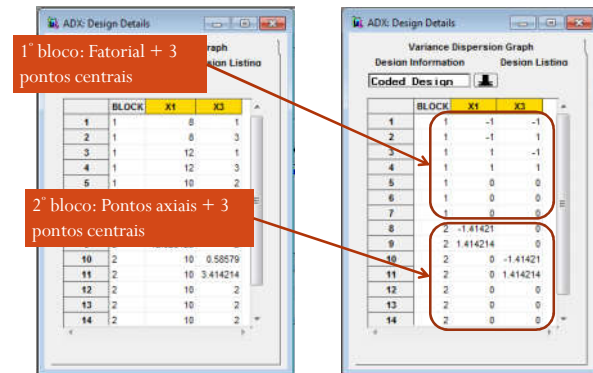
17/08/2016

Exemplo. Helicóptero II. Delineamento composto central em dois blocos.



69

17/08/2016



1º bloco: Fatorial + 3 pontos centrais

2º bloco: Pontos axiais + 3 pontos centrais

70

17/08/2016

Exercícios

- 1) Leia o capítulo 6 de Barros Neto, Scarminio e Bruns (2010)
- 2) Lance os helicópteros relativos ao 1º bloco (pontos fatoriais + 3 centrais), avalie o tempo de queda e analise os resultados.
- 3) Caso o modelo polinomial de 1ª ordem esteja adequado, construa novos helicópteros de tal forma que o deslocamento se dê ao longo do caminho de máxima inclinação. Determine, então, as coordenadas do novo ponto central e vá para (2). Caso haja evidência de falta de ajuste, vá para (3)
- 4) Lance os helicópteros relativos ao 2º bloco (pontos estrela + 3 centrais), avalie o tempo de queda e analise os resultados considerando os dois blocos simultaneamente. Explore a região experimental.

71

17/08/2016

Exercício extra

u_1	u_2	x_1	x_2	y
30	115	-1	-1	86
40	115	1	-1	85
30	135	-1	1	78
40	135	1	1	84
35	125	0	0	90
35	125	0	0	88
35	125	0	0	89
28	125	$-\sqrt{2}$	0	81
42	125	$\sqrt{2}$	0	86
35	111	0	$-\sqrt{2}$	87
35	139	0	$\sqrt{2}$	80

- Analise o conjunto de dados ao lado, em que:
 - y = Rendimento de uma determinada reação, em %;
 - u_1 = Concentração de um reagente, em % e
 - u_2 = Velocidade de agitação, em rpm.

72

17/08/2016

5. Como tratar problemas com m variáveis resposta

73

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

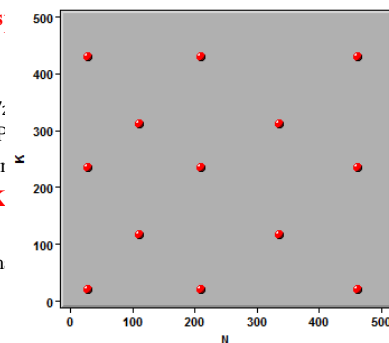
Exemplo. Capim

- $m = 4$ variáveis res

- Massa seca, em g:
 - Da parte aérea (y_1)
 - Do sistema radicular (y_2)
- Teor de clorofila ou SP
- Índice de área foliar, e_i

- $k = 2$ fatores, N e K

- N , de 28 a 462 kg/ha
- K , de 19,5 a 429 kg/h
- 13 tratamentos
- 4 blocos ao acaso



74

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

- Desejo: encontrar uma ou mais regiões experimentais que levem a altos valores para as 4 variáveis resposta, simultaneamente, por exemplo:

$$y_1 \geq 25$$

$$y_2 \geq 18$$

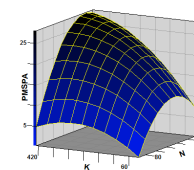
$$y_3 \geq 45$$

$$y_4 \geq 3500$$

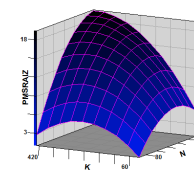
75

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

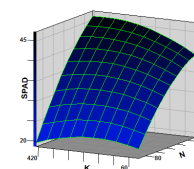
17/08/2016



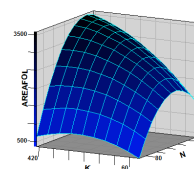
Fixed levels: BLOCO = 1



Fixed levels: BLOCO = 1



Fixed levels: BLOCO = 1

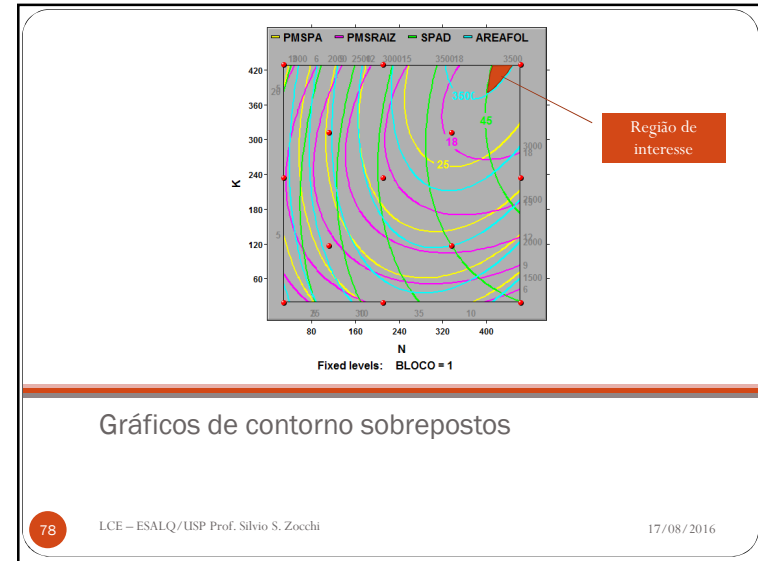
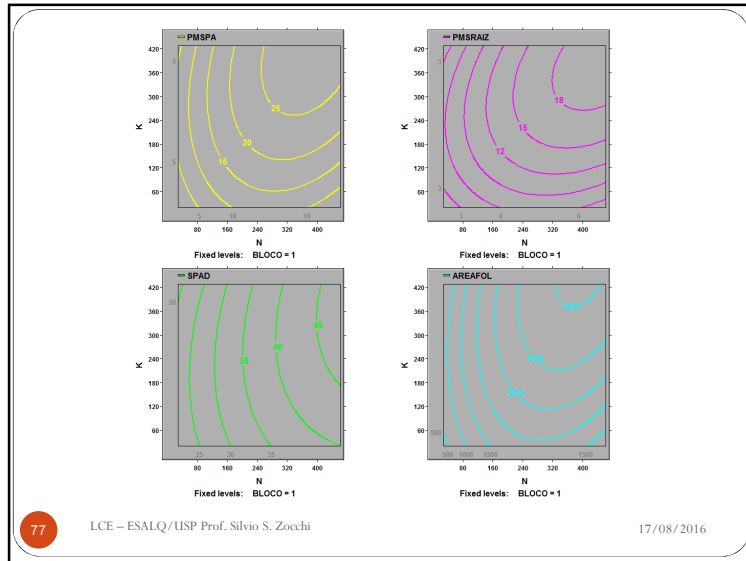


Fixed levels: BLOCO = 1

76

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016



O que fazer quando há mais do que dois fatores?

- k fatores codificados:

$$x_1, x_2, \dots, x_k$$
- **Uma idéia:** maximizar uma resposta sujeita a restrições impostas às demais
 - Métodos de programação linear/não linear
- **Outra idéia** (Derringer e Suich, 1980): maximizar uma função denominada **desejabilidade** que expressa o quão desejável é um conjunto de respostas $(\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_m)$ ao conjunto de fatores codificados (x_1, x_2, \dots, x_k)

Função desejabilidade

- Seja d_l ($l = 1, \dots, m$) uma função contínua que assume o valor:
 - **0**, quando a resposta \hat{y}_l assume um valor **não desejado**
 - **1**, quando a resposta \hat{y}_l assume o valor (ou faixa de valores) **mais desejado(a) ou ideal**
- A função desejabilidade conjunta é dada pela média geométrica das desejabilidades das m respostas, ou seja,

$$D = \sqrt[m]{d_1 \times d_2 \times \dots \times d_m} = \left(\prod_{l=1}^m d_l \right)^{\frac{1}{m}}$$

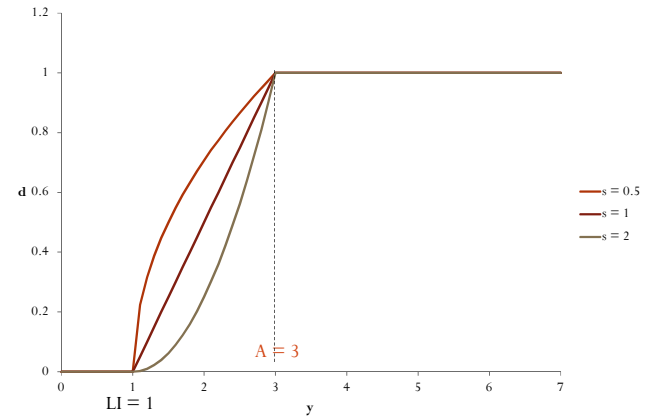
- Exemplo. Quanto maior, melhor.
 - Valores não desejados: abaixo de LI
 - Ideal: valores maiores ou iguais a A

$$d = \begin{cases} 0 & \text{se } \hat{y} < LI \\ \left(\frac{\hat{y} - LI}{A - LI}\right)^s & \text{se } LI \leq \hat{y} < A \\ 1 & \text{se } \hat{y} \geq A \end{cases}$$

81

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016



82

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

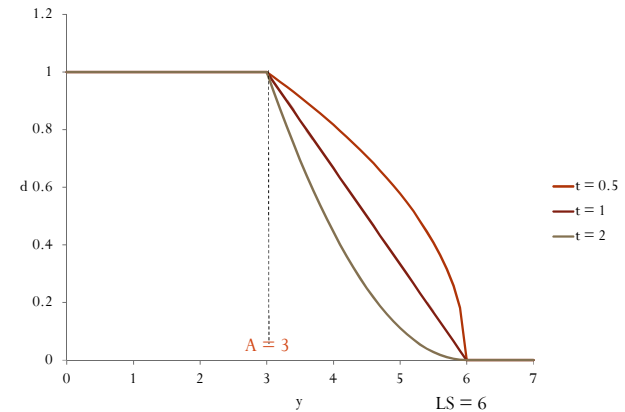
- Exemplo. Quanto menor, melhor.
 - Valores não desejados: acima de LS
 - Ideal: valores menores ou iguais a A

$$d = \begin{cases} 1 & \text{se } \hat{y} \leq A \\ \left(\frac{LS - \hat{y}}{LS - A}\right)^t & \text{se } A \leq \hat{y} < LS \\ 0 & \text{se } \hat{y} > LS \end{cases}$$

83

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016



84

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

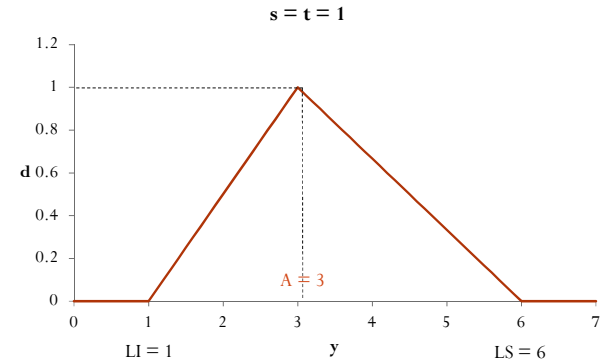
- Exemplo. Quanto mais próximo do valor alvo A , melhor.
 - Valores não desejados: abaixo de LI , ou acima de LS
 - Ideal: valor igual a A

$$d = \begin{cases} 0 & \text{se } \hat{y} < LI \\ \left(\frac{\hat{y} - LI}{A - LI}\right)^s & \text{se } LI \leq \hat{y} < A \\ \left(\frac{LS - \hat{y}}{LS - A}\right)^t & \text{se } A \leq \hat{y} \leq LS \\ 0 & \text{se } \hat{y} > LS \end{cases}$$

85

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016



86

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

Exemplo. Capim II

PMSPA

- D(PMSPA) = 0 when PMSPA < 5
- D(PMSPA) = 0.5 when PMSPA = 15
- D(PMSPA) = 1 when PMSPA > 25
- Function power:
 - Lower half: 1
 - Upper half: 1

PMSRAIZ

- D(PMSRAIZ) = 0 when PMSRAIZ < 5
- D(PMSRAIZ) = 0.5 when PMSRAIZ = 11.25
- D(PMSRAIZ) = 1 when PMSRAIZ > 17.5
- Function power:
 - Lower half: 1
 - Upper half: 1

SPAD

- D(SPAD) = 0 when SPAD < 20
- D(SPAD) = 0.5 when SPAD = 35
- D(SPAD) = 1 when SPAD > 50
- Function power:
 - Lower half: 1
 - Upper half: 1

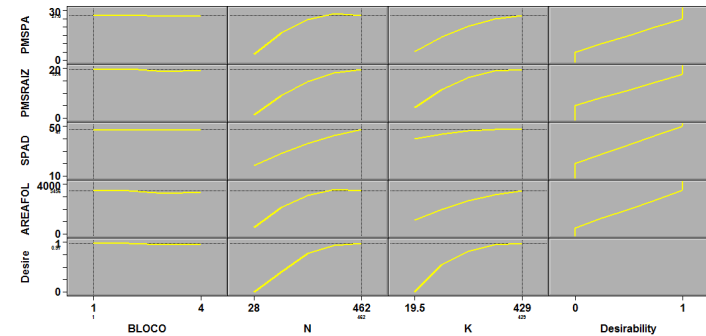
AREAFOL

- D(AREAFOL) = 0 when AREAFOL < 500
- D(AREAFOL) = 0.5 when AREAFOL = 2000
- D(AREAFOL) = 1 when AREAFOL > 3500
- Function power:
 - Lower half: 1
 - Upper half: 1

87

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016



Saída do SAS, com desejabilidade

88

LCE – ESALQ/USP Prof. Silvio S. Zocchi

17/08/2016

Prediction Profile Settings		
Factor	Optimal Setting	
BLOCO	1	
N	462	
K	429	
Response	Estimated Value	
PMSPA	26.97412 [23.87233,30.07591]	
PMSRAIZ	19.41687 [16.88901,21.94472]	
SPAD	47.06733 [44.61942,49.51525]	
AREAFOL	3456.204 [3051.027,3861.38]	
Desirability	97.10%	

89

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

17/08/2016

- Nota: Função desejabilidade proposta não é diferenciável.
- Como alternativa Del Castillo, Montgomery e McCarville (1996) sugeriram a utilização de funções polinomiais de 4ª ordem
- Outra alternativa:

$$d = e^{-\left(\frac{\hat{y}-A}{\sigma_E}\right)^2} I_{(\hat{y} \leq A)}(\hat{y}) + I_{(\hat{y} > A)}(\hat{y})$$

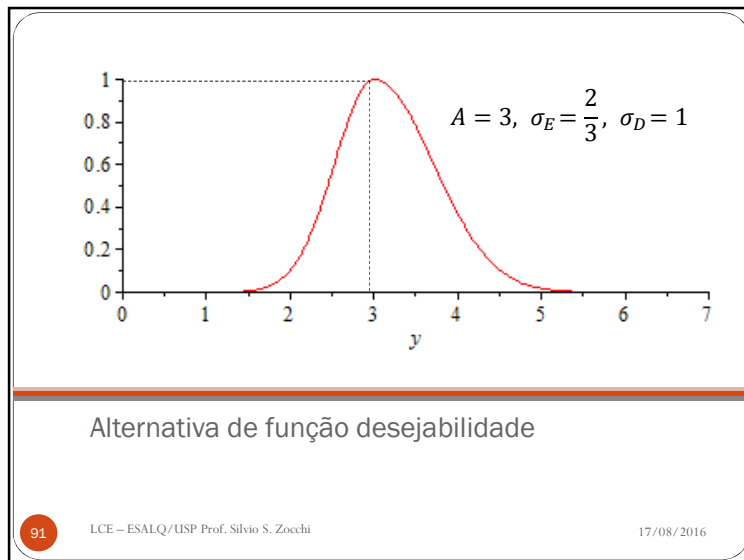
$$d = I_{(\hat{y} \leq A)}(\hat{y}) + e^{-\left(\frac{\hat{y}-A}{\sigma_D}\right)^2} I_{(\hat{y} > A)}(\hat{y})$$

$$d = e^{-\left(\frac{\hat{y}-A}{\sigma_E}\right)^2} I_{(\hat{y} \leq A)}(\hat{y}) + e^{-\left(\frac{\hat{y}-A}{\sigma_D}\right)^2} I_{(\hat{y} > A)}(\hat{y})$$

90

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

17/08/2016



Alternativa de função desejabilidade

91

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

17/08/2016

- **Nota:** técnicas apresentadas consideram ou pressupõem que as variáveis respostas são **independentes** ou **não correlacionadas**.
- Esta pressuposição frequentemente é violada
- Métodos multivariados. Khuri e Conlon (1981) e Khuri e Cornell (1996) propuseram:
 - Obter os pontos ótimos para cada variável resposta na região experimental considerada.

$$\mathbf{x}_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0k})$$
 - Utilizar, para um determinado ponto da região experimental $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)$, a distância ponderada entre \mathbf{x}_0 e \mathbf{x} , com pesos tomados com base na matriz de variâncias e covariâncias das variáveis resposta.

92

LCE – ESALQ/USP Prof. Sívio S. Zocchi

17/08/2016

Bibliografia sugerida

- ATKINSON, A.C.; A.N. DONEV e R.D. TOBIAS. **Optimum Experimental Designs, with SAS**. Oxford University Press. Oxford, 2007.
- 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.
- BOX, G.E.P. e N.R. DRAPER. **Empirical Model-Building and Response**. John Wiley & Sons, New York, 1987.
- 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.
- WU, C.F.J. e HAMADA, M. **Experiments. Planning, analysis, and parameter design optimization**. Ed. Wiley-Interscience, New York, 2000, 630p.