

Estudo dos Pontos Críticos de uma Superfície de Resposta

Jussara Ribeiro de Rezende ¹Andréa Cristiane dos Santos Delfino ²

Resumo: A metodologia de superfície de resposta consiste em uma coleção de técnicas estatísticas e matemáticas que desempenham um papel importante no desenvolvimento, melhoria e otimização de processos. A mais extensiva aplicação da metodologia de superfície de resposta é na área industrial, particularmente em situações em que são necessárias muitas variáveis que potencialmente influenciam em alguma medida de desempenho ou na qualidade característica de um produto ou processo. Um experimento que costumeiramente é utilizado, conjuntamente com a metodologia de superfície de resposta, é o delineamento composto central. Este delineamento é muito utilizado devido a sua eficiência com relação do número de tratamentos utilizados. Neste trabalho, pretende-se apresentar a metodologia de superfície de resposta conjuntamente com o delineamento composto central, com intuito de apresentar o estudo da obtenção dos pontos críticos da função ajustada. Para ilustrar a metodologia, será utilizado um exemplo descrito por Montgomery (2013), em que um engenheiro estuda a produção de um processo químico (Y), observando-se os fatores tempo de reação em minutos (X_1) e temperatura de reação em $^{\circ}\text{F}$ (X_2), com dois níveis cada. Para organizar os níveis dos fatores que compõem os tratamentos, combinação de todos os níveis dos fatores investigados que provocam efeito sobre a variável resposta, utilizou-se o esquema fatorial 2^2 , ou seja, a combinação de dois fatores com dois níveis cada, num delineamento composto central. O delineamento composto central é constituído pelas partes cúbica, axial e central; através desse plano de ajuste, determina-se a região experimental, na qual foi realizado o estudo dos pontos críticos, limitada por um lugar geométrico de raio $\sqrt{2}$ e centro na origem do sistema de coordenadas cartesianas. Para os estudo dos pontos críticos da função ajustada, denotada por \hat{Y} , primeiramente, recorreu-se ao critério da derivada primeira para encontrar os extremos relativos da função; em seguida, utilizou-se o teste da segunda derivada para analisar se o ponto é de máximo, mínimo ou de sela. Verificou-se através da fórmula de Taylor a relação da matriz das segundas derivadas de \hat{Y} , matriz Hessiana, com a determinação dos pontos críticos. Tanto para o ajuste do modelo, como para o estudo dos pontos críticos, utilizou-se o *software* R (R Core Team, 2016). O modelo ajustado aos dados foi $\hat{Y} = 79,93995 + 0,99505X_1 - 1,37645X_1^2 - 0,5152X_2 - 1,00134X_2^2$. O estudo da função apontou que a superfície do modelo é côncava com pontos críticos para o tempo de reação em 87 minutos e para temperatura em $176,5^{\circ}\text{F}$. A análise dos autovalores, indicaram pontos críticos de máximo, o qual resulta numa produção máxima em 80,21%.

Palavras-chave: Autovalores e Autovetores, Pontos Críticos, Regressão Múltipla, Superfície de Resposta.

¹Aluna de Mestrado do PROFMAT, Turma 2014, Universidade Federal de São João Del-Rei - UFSJ, jussararibeirorezende@hotmail.com

²Professora orientadora, Departamento de Matemática e Estatística - DEMAT, UFSJ, andrea@ufsj.edu.br

1 Introdução

A metodologia da superfície de resposta é utilizada na modelagem e análise de problemas nos quais a variável de resposta de interesse é influenciada por diversas variáveis independentes ou fatores e cujo objetivo é otimizar a variável resposta (Montgomery, 2013).

De modo geral tem-se interesse em avaliar as relações existentes entre os principais fatores que compõem um processo e uma variável resposta de interesse. Nestas situações, tem-se como objetivo, a partir de uma fórmula matemática da função, determinar qual é a condição de operação do processo que levará à obtenção de um valor ótimo para a variável resposta. A análise da superfície de resposta é feita de forma sequencial. Primeiramente tenta-se ajustar uma função de baixa ordem para modelar os dados, se esta for uma boa aproximação dos fatores para a variável resposta, então tem-se uma função linear. Por outro lado, quando uma modelagem linear não é eficiente, utiliza-se um modelo de segunda ordem. Uma superfície de resposta é a figura obtida quando uma variável resposta é representada graficamente em função de dois ou mais fatores do processo. Os resultados destes processos geralmente são obtidos por meio de experimentos.

Um experimento que auxilia em tal determinação é o denominado delineamento composto central. Este experimento é constituído por três partes: fatorial, axial e central. Os pontos axiais contribuem na estimativa dos termos quadráticos do modelo de 2ª ordem; os pontos centrais, quando repetidos, contribuem tanto na estimativa dos efeitos quadráticos quanto na estimativa do erro puro; e os pontos fatoriais estão associados aos termos lineares e de interação.

Em funções de duas ou mais variáveis, ou seja, dois ou mais fatores que provocam efeito sobre uma resposta, é necessário utilizar o critério da derivada primeira e o teste da segunda derivada para a obtenção e o estudo dos pontos críticos da função ajustada; determinando se estes são pontos de máximo, mínimo ou sela. A relação entre a matriz das segundas derivadas parciais da função com a determinação dos pontos críticos pode ser verificada através da fórmula de Taylor.

Devido à enorme quantidade de dados gerados em um determinado processo, tornou-se cada vez mais comum o desenvolvimento de métodos computacionais, pois permitem de forma automática o levantamento de detalhes suficientes que auxiliam na definição das prioridades e no planejamento direcionado das ações que visam oportunidades de melhoria. Os pacotes estatísticos fornecem as funções, os gráficos e apontam a região ótima, mas não mostram como encontrar os pontos críticos da função ajustada.

Sendo assim, o objetivo desse trabalho é apresentar o estudo e a forma de encontrar os pontos críticos da função ajustada em um planejamento de experimento usando superfície de resposta.

2 Material e Método

2.1 Material

Para o ajuste da superfície de resposta, utilizou-se os dados de um experimento apresentado por Montgomery (2013). O experimento em questão foi utilizado por um engenheiro químico para investigar as condições de funcionamento que maximizam a produção de um determinado processo. Os fatores utilizados para tal fim foram: tempo de reação em minutos (X_1) e temperatura de reação em °F (X_2). A variável resposta (Y) analisada foi a produção. O ensaio foi instalado em delineamento composto central, com 2 fatores e dois níveis cada,

cinco pontos centrais e quatro pontos axiais. Os níveis dos pontos fatoriais são expressos da seguinte forma: (1,1), (-1,1), (-1,-1), (1,-1), sendo que (1) representa o nível alto de um fator e o (-1) representa o nível baixo do fator. Os pontos centrais são representados pelo par (0,0) e os pontos axiais foram:(0; 1,414), (0; -1,414), (1,414; 0), (-1,414; 0). Na Tabela 1 encontram-se os dados no esquema do delineamento, constando as variáveis originais, as variáveis codificadas e a variável resposta. Por simplicidade será utilizada as variáveis codificadas.

Tabela 1: Configurações do delineamento do composto central para a variável produção

Variáveis originais		Variáveis codificadas		Resposta
(X_1)	(X_2)	(X_1)	(X_2)	Y(rendimento)
80,00	170,00	-1	-1	76,5
80,00	180,00	-1	1	77,0
90,00	170,00	1	-1	78,0
90,00	180,00	1	1	79,5
85,00	175,00	0	0	79,9
85,00	175,00	0	0	80,3
85,00	175,00	0	0	80,0
85,00	175,00	0	0	79,7
85,00	175,00	0	0	79,8
92,07	175,00	1,414	0	78,4
77,93	175,00	-1,414	0	75,6
85,00	182,07	0	1,414	78,5
85,00	167,93	0	-1,414	77,0

2.2 Método

2.2.1 Metodologia de Superfície de Resposta

Segundo Myers & Montgomery (1995) a superfície resposta é uma coleção de técnicas estatísticas e matemáticas úteis para desenvolvimento, melhoramento e otimização de processos. Esta metodologia é muito adequada na indústria, principalmente em situações em que várias variáveis podem influenciar a performance e a qualidade do produto ou processo.

Além de grande aplicabilidade na indústria, a metodologia de superfície de resposta tem sido utilizada em outras áreas do conhecimento.

Uma suposição feita a um produto, processo ou sistema envolve uma variável resposta Y , que também é chamada de variável dependente, e variáveis de entrada X , chamadas de variáveis independentes (Myers & Montgomery, 1995).

Esta relação pode ser expressa por:

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_k) + \epsilon, \quad (1)$$

em que ϵ representa o erro aleatório. Assume-se que o erro aleatório tenha distribuição normal com média zero e variância σ^2 .

Aplicando o operador esperança em Y tem-se que:

$$E(Y) = E[f(X_1, X_2, \dots, X_k) + \epsilon] = f(X_1, X_2, \dots, X_k) = \eta. \quad (2)$$

A superfície resposta é representada por:

$$\eta = f(X_1, X_2, \dots, X_k) \quad (3)$$

De acordo com Montgomery & Runger (2009), geralmente a relação funcional entre Y e X é desconhecida. Desta forma a primeira etapa na metodologia de superfície resposta é estabelecer uma aproximação adequada entre Y e X . De modo geral, utiliza-se um polinômio de baixo grau em alguma região das variáveis independentes. Desta forma, se a resposta for bem modelada por uma função linear das variáveis independentes então tem-se o modelo de primeira ordem cuja função é dada por:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_k X_k + \epsilon \quad (4)$$

em que:

Y : variável dependente ou resposta;

β_i , com $i = 1 \dots k$, são parâmetros, também chamados de coeficientes de regressão;

X_i , com $i = 1 \dots k$ são as variáveis independentes.

Nos casos em que há curvatura no sistema, um modelo polinomial de maior grau deverá ser utilizado. Um modelo de segunda ordem é dado por:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\substack{j=2, \\ i < j}}^N \beta_{ij} X_i X_j + \epsilon_i \quad (5)$$

em que:

Y : variável dependente ou resposta;

β_i com $i = 1 \dots k$ são parâmetros, também chamados de coeficientes de regressão;

β_{ii} , com $i = 1 \dots k$ são parâmetros, também chamados de coeficientes de regressão;

β_{ij} , com $i = 1 \dots k - 1$ e $j = 2 \dots N$ são parâmetros, também chamados de coeficientes de regressão;

X_i , com $i = 1 \dots k$, são as variáveis independentes.

X_{ij} , com $i = 1 \dots k - 1$ e $j = 2 \dots N$, são as variáveis independentes.

A qualidade nas estimativas depende do método de estimação utilizado e do plano experimental adequado. O delineamento experimental mais utilizado para se analisar uma superfície é o Delineamento Composto Central (DCC).

2.2.2 Esquema fatorial

Segundo Montgomery & Runger (2009) os esquemas fatoriais são utilizados quando há interesse em se estudar vários fatores. Estes mesmos autores classificam este tipo de planejamento como uma técnica poderosa.

Tal planejamento é eficiente, pois permite a análise de vários fatores simultaneamente.

Uma forma de expressar este planejamento é o chamado planejamento 2^k , ou seja k fatores com 2 níveis. Os fatores referem-se as variáveis independentes de um experimento que podem ser controladas pelo pesquisador e os seus níveis são os valores específicos atribuídos a eles. O mais simples deles é o 2^2 , sendo 2 fatores com 2 níveis cada. De acordo com Montgomery & Runger (2009), os níveis baixos e altos de um fator podem ser representados, respectivamente, pelos sinais (-) e (+). Esta notação é chamada de geométrica. As combinações dos níveis dos fatores, são chamadas de tratamentos, e para o caso em questão, tem-se 4 tratamentos. O coeficiente utilizado para os sinais é o valor 1. Sendo assim, tem-se as combinações: (-1,-1); (1,-1); (-1,1) e (1,1).

Neste trabalho será abordado o fatorial 2^k , mas outras formas de esquema também são possíveis.

2.2.3 Delineamento Composto Central (DCC)

O Delineamento Composto Central (DCC) é um dos mais populares delineamentos para ajuste de modelos de até segunda ordem (Myers & Montgomery,1995).

O Delineamento Composto Central (DCC) é constituído por três partes: cúbica (fatorial), axial(α) e central. Em geral, um DCC para k fatores, cujos níveis codificados serão combinados, é dado pelo conjunto constituído pelos seguintes tratamentos com níveis codificados: (1,1,...,1); (-1,1,...,1);...;(-1,-1,...,-1) referentes à parte fatorial, totalizando 2^k combinações; $(-\alpha, 0, \dots, 0)$; $(\alpha, 0, \dots, 0)$; $(0, -\alpha, \dots, 0)$; ...; $(0, 0, \dots, -\alpha)$; $(0, 0, \dots, \alpha)$ referentes a parte axial, totalizando $2k$ combinações e $(0,0,\dots,0)$ referente ao ponto central.

No total, são $2^k + 2k + 1$ combinações entre os níveis dos k fatores investigados.

Portanto, o Delineamento Composto Central (DCC) para os dois fatores que influenciam no processo de rendimento do experimento utilizado pelo engenheiro químico, com níveis codificados sem repetição no ponto central, gera nove tratamentos ($2^2 + 2.2 + 1$) conforme apresentado na Tabela 2. Os pontos axiais são situados nos eixos do sistema de coordenadas com distância $\pm\alpha$ da origem ($\pm\sqrt{2}$).

Tabela 2: Combinações entre os níveis codificados dos fatores X_1 e X_2 .

	X_1 (codificado)	X_2 (codificado)	Tratamento
Pontos fatoriais	-1	-1	1
	1	-1	2
	-1	1	3
	1	1	4
Pontos axiais	$-\alpha$	0	5
	α	0	6
	0	$-\alpha$	7
	0	α	8
Pontos central	0	0	9

Segundo Myers & Montgomery (1995), são os pontos axiais que contribuem na estimativa de termos quadráticos dos modelos de segunda ordem. Os responsáveis, de grande modo, na estimativa dos efeitos de interações são os pontos fatoriais, que são as combinações geralmente utilizadas em ajustes de modelos de primeira ordem com ou sem interações duplas entre os fatores. O ponto central, além de ser responsável também pela estimativa dos efeitos quadráticos, possibilita a estimativa do erro puro, quando ele é repetido.

2.2.4 Máximos e Mínimos

Segundo Flemming & Gonçalves (1992) dada uma função com uma variável, tem-se:

Definição 2.1 *Uma função f tem um máximo relativo em c , se existir um intervalo aberto I , contendo c , tal que $f(c) \geq f(x)$ para todo $x \in I \cap D(f)$.*

Definição 2.2 *Uma função tem um mínimo relativo em c , se existir um intervalo aberto I , contendo c , tal que $f(c) \leq f(x)$ para todo $x \in I \cap D(f)$.*

Proposição 2.1 *Suponhamos que $f(x)$ existe para todos os valores de $x \in (a, b)$ e que f tem um extremo relativo em c , onde $a < c < b$. Se $f'(c)$ existe, então $f'(c) = 0$*

Proposição 2.2 *Seja $f : [a, b] \rightarrow R$ uma função contínua, definida em um intervalo fechado $[a, b]$. Então f assume máximo e mínimo absoluto em $[a, b]$.*

Definição 2.3 *Dizemos que $f(c)$ é o máximo absoluto da função f se $c \in D(f)$, e $f(c) \geq f(x)$ para todos os valores de x no domínio de f .*

Definição 2.4 *Dizemos que $f(c)$ é o mínimo absoluto da função f se $c \in D(f)$, e $f(c) \leq f(x)$ para todos os valores de x no domínio de f .*

De acordo com Leithold (1994), estendendo-se o conceito de funções de uma variável para funções com duas variáveis, tem-se:

Definição 2.5 *Diz-se que uma função de duas variáveis tem um máximo relativo em um ponto (x_0, y_0) se há um círculo centrado em (x_0, y_0) , de modo que $f(x_0, y_0) \geq f(x, y)$ para todos os pontos (x, y) do domínio de f que estão dentro do círculo, e diz-se que f tem um máximo absoluto em (x_0, y_0) se $f(x_0, y_0) \geq f(x, y)$ para todos os pontos (x, y) do domínio de f .*

Definição 2.6 *Diz-se que uma função de duas variáveis tem um mínimo relativo em um ponto (x_0, y_0) se há um círculo centrado em (x_0, y_0) , de modo que $f(x_0, y_0) \leq f(x, y)$ para todos os pontos (x, y) do domínio de f que estão dentro do círculo, e diz-se que f tem um mínimo absoluto em (x_0, y_0) se $f(x_0, y_0) \leq f(x, y)$ para todos os pontos (x, y) do domínio de f .*

2.2.5 Critérios para determinar os extremos de uma função

Para funções de uma variável, segundo Flemming & Gonçalves (1992), tem-se:

Teorema 2.1 ***Critério da derivada primeira para determinação dos extremos de uma função***

Seja f uma função contínua num intervalo fechado $[a, b]$ que possui derivada em todo o ponto

do intervalo (a, b) , exceto possivelmente num ponto c .

(i) Se $f'(x) > 0$ para todo $x < c$ e $f'(x) < 0$ para todo $x > c$, então f tem um máximo relativo em c .

(ii) Se $f'(x) < 0$ para todo $x < c$ e $f'(x) > 0$ para todo $x > c$, então f tem um mínimo relativo em c .

Teorema 2.2 Critério da derivada segunda para determinação dos extremos de uma função

Sejam f uma função derivável num intervalo (a, b) e c um ponto crítico de f neste intervalo, isto é, $f'(c) = 0$, com $a < c < b$. Se f admite a derivada f'' em (a, b) , temos:

(i) Se $f''(c) < 0$, f tem um valor máximo relativo em c .

(ii) Se $f''(c) > 0$, f tem um valor mínimo relativo em c .

Segundo Leithold (1994), para funções com duas variáveis tem-se que:

Definição 2.7 Extremo relativo

Se a função contínua f com duas variáveis admitir um valor mínimo ou máximo relativo num ponto (x_0, y_0) , diz-se que tal ponto é um extremo relativo de f .

Para que isso ocorra, se existirem $\frac{\partial}{\partial x}f(x_0, y_0)$ e $\frac{\partial}{\partial y}f(x_0, y_0)$ deve-se ter $\frac{\partial}{\partial x}f(x_0, y_0) = 0$ e $\frac{\partial}{\partial y}f(x_0, y_0) = 0$. O ponto (x_0, y_0) também é chamado de ponto crítico de f .

Teorema 2.3 Teorema do valor extremo para funções de duas variáveis

Seja R uma região fechada no plano xy , e seja f uma função de duas variáveis contínua em R . Então, existe pelo menos um ponto em R onde f tem valor máximo absoluto, e pelo menos um ponto em R onde f tem um valor mínimo absoluto.

Teorema 2.4 Teste da segunda derivada

Seja f uma função de duas variáveis, tal que f e suas derivadas primeira e segunda sejam contínuas em algum disco aberto $B((x_0, y_0); r)$. Suponha além disso, que $f_x(x_0, y_0) = 0$ e $f_y(x_0, y_0) = 0$. Seja

$$D = f_{xx}(x_0, y_0)f_{yy}(x_0, y_0) - f_{xy}^2(x_0, y_0)$$

(i) f tem um valor mínimo relativo em (x_0, y_0) se $f_{xx}(x_0, y_0) \cdot f_{yy}(x_0, y_0) - f_{xy}^2(x_0, y_0) > 0$ e $f_{xx}(x_0, y_0) > 0$ (ou $f_{yy}(x_0, y_0) > 0$)

(ii) f tem um valor máximo relativo em (x_0, y_0) se $f_{xx}(x_0, y_0) \cdot f_{yy}(x_0, y_0) - f_{xy}^2(x_0, y_0) > 0$ e $f_{xx}(x_0, y_0) < 0$ (ou $f_{yy}(x_0, y_0) < 0$)

(iii) f tem um ponto de sela em (x_0, y_0) se $f_{xx}(x_0, y_0) \cdot f_{yy}(x_0, y_0) - f_{xy}^2(x_0, y_0) < 0$

(iiii) Nenhuma conclusão pode ser tirada se $f_{xx}(x_0, y_0) \cdot f_{yy}(x_0, y_0) - f_{xy}^2(x_0, y_0) = 0$

Observa-se que D é o determinante da matriz das derivadas de f , no ponto (x_0, y_0) .

$$D = \begin{vmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{vmatrix}$$

Se f for uma função que satisfaz o Teorema 2.4 e se ambas $f_x(x, y)$ e $f_y(x, y)$ existirem em todos os pontos de R , então os extremos de f ocorrerão num ponto (x_0, y_0) , onde $f_x(x_0, y_0) = 0$ e $f_y(x_0, y_0) = 0$ ou num ponto de fronteira de R .

2.2.6 Concavidade e Pontos de Inflexão

Flemming & Gonçalves (1992), descrevem que para a análise da concavidade e o estudo do ponto de inflexão tem-se que

Definição 2.8 *Uma função f é dita côncava para cima no intervalo (a, b) , se $f'(x)$ é crescente neste intervalo.*

Definição 2.9 *Uma função f é dita côncava para baixo no intervalo (a, b) , se $f'(x)$ for decrescente neste intervalo.*

Para reconhecer os intervalos onde uma curva tem concavidade voltada para cima ou para baixo basta analisar o sinal da derivada $f''(x)$.

Proposição 2.3 *Seja f uma função contínua no intervalo $[a, b]$ e derivável até a segunda ordem no intervalo (a, b) :*

(i) *Se $f''(x) > 0$ para todo $x \in (a, b)$, então f é côncava para cima em (a, b) .*

(ii) *Se $f''(x) < 0$ para todo $x \in (a, b)$, então f é côncava para baixo em (a, b) .*

Podem existir pontos no gráfico de uma função nos quais a concavidade muda de sentido. Esses pontos são chamados pontos de inflexão.

Definição 2.10 *Um ponto $P(c, f(c))$ do gráfico de uma função contínua f é chamado de ponto de inflexão, se existe um intervalo (a, b) contendo c , tal que uma das seguintes situações ocorram:*

(i) *f é côncava para cima em (a, c) e côncava para baixo em (c, b) .*

(ii) *f é côncava para baixo em (a, c) e côncava para cima em (c, b) .*

Leithold (1994), descreve que em funções de uma única variável, a derivada é nula para qualquer candidato a máximo ou mínimo, seja porque a função pára de crescer ou porque inicia sua ascensão. Para funções de várias variáveis, garante-se a ocorrência de pontos críticos somente por meio dos pontos em que todas as derivadas parciais sejam nulas.

Se a função é de n variáveis precisa-se considerar valores próximos da função em n dimensões.

(i) Ponto de máximo: em um pequeno intervalo n -dimensional ao redor do ponto, todos os valores da função são menores ou iguais a ele;

(ii) Ponto de mínimo: em um pequeno intervalo n -dimensional ao redor do ponto, todos os valores da função são maiores ou iguais a ele;

(iii) Ponto de sela: Ocorre em gráficos tridimensionais de funções de duas variáveis. Tal ponto representa um máximo em uma dimensão e um mínimo em alguma outra, ou representa um ponto de inflexão em uma ou várias dimensões.

O estudo do ponto crítico da função, neste artigo, será feito baseando-se nas segundas derivadas da função e utilizando o conceito de autovalores e autovetores.

2.2.7 Fórmula de Taylor

De acordo com Fleming & Gonçalves(1992) a fórmula de Taylor consiste num método de aproximação de uma função por um polinômio, com um erro possível de ser estimado.

Definição 2.11 *Fórmula de Taylor*

Seja $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ uma função que admite derivadas até ordem n num ponto c do intervalo I . O polinômio de Taylor de ordem n de f no ponto c , que denotamos por $P_n(x)$, é dado por

$$P_n(x) = f(c) + f'(c)(x - c) + \frac{f''(c)}{2!}(x - c)^2 + \dots + \frac{f^n(c)}{n!}(x - c)^n$$

Dado um polinômio de Taylor de grau n de uma função $f(x)$, denota-se por $R_n(x)$ a diferença entre $f(x)$ e $P_n(x)$, isto é, $R_n(x) = f(x) - P_n(x)$.

Logo, $f(x) = P_n(x) + R_n(x)$.

$$f(x) = f(c) + f'(c)(x - c) + \frac{f''(c)}{2!}(x - c)^2 + \dots + \frac{f^n(c)}{n!}(x - c)^n + R_n(x) \quad (6)$$

Proposição 2.4 *Fórmula de Taylor*

Seja $f : [a, b] \rightarrow R$ uma função definida num intervalo $[a, b]$. Suponha que as derivadas f', f'', \dots, f^n existam e sejam contínuas em $[a, b]$ e que f^{n+1} exista em (a, b) . Seja c um ponto qualquer fixado em $[a, b]$. Então, para cada $x \in [a, b]$, $x \neq c$, existe um ponto z entre c e x tal que $f_n(x) = f(c) + f'(c)(x - c) + \frac{f''(c)}{2!}(x - c)^2 + \dots + \frac{f^n(c)}{n!}(x - c)^n + \frac{f^{n+1}(z)}{(n + 1)!}(x - c)^{n+1}$

Seja $f(x, y)$, para o caso de uma função de duas variáveis. A fórmula de Taylor nos fornece:

$$\begin{aligned} f(x, y) = & f(x_0, y_0) + \Delta x \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y} + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x^2} (\Delta x)^2 + \right. \\ & \left. + 2 \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x \partial y} \cdot \Delta x \cdot \Delta y + \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial y^2} (\Delta y)^2 + R \right] \end{aligned} \quad (7)$$

em que R é o resto (erro) da aproximação. Tal fórmula permite relacionar a matriz Hessiana (matriz das segundas derivadas da função) com determinação dos pontos críticos. Dado

$$a = \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x^2} (\Delta x)^2, b = \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x \partial y} \Delta x \Delta y, c = \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial y^2} (\Delta y)^2$$

Obtém-se uma expressão para os termos quadráticos:

$$Q(\Delta x, \Delta y) = a(\Delta x)^2 + 2b \Delta x \Delta y + c(\Delta y)^2 = f(x, y) - f(x_0, y_0). \quad (8)$$

Para os pontos críticos, onde a primeira derivada é nula, pode-se escrever a expressão na forma matricial:

$$Q(\Delta x, \Delta y) = \begin{bmatrix} \Delta x & \Delta y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix}$$

Logo, tem-se a matriz Hessiana

$$\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{bmatrix}$$

De acordo com Leithold (1994), pode-se relacionar a matriz Hessiana com uma cônica em um plano; sendo possível diagonalizá-la usando o processo idêntico ao da rotação de uma

cônica. Ao desenhar as curvas de nível da função, pode-se perceber outra semelhança entre a forma da matriz e a característica do ponto crítico: quando o ponto é de sela, geralmente obtêm-se hipérbolas; quando é de máximo ou mínimo, costuma-se ter elipses ou círculos. Uma das propriedades das hipérbolas é apresentar autovalores de sinais contrários em sua matriz de termos quadráticos, enquanto que as elipses possuem autovalores de sinais iguais.

Logo, a análise do ponto crítico está relacionada com os sinais dos autovalores da matriz Hessiana. Se os sinais dos autovalores são todos positivos, o ponto em questão é ponto de mínimo; se entre os sinais dos autovalores ao menos um for positivo e um for negativo, o ponto é de sela; sendo todos os sinais dos autovalores negativos, o ponto é de máximo.

Segundo Leithold (1994), para funções de duas variáveis pode-se determinar as mesmas características observando o sinal do primeiro elemento da matriz Hessiana e seu determinante. Caso o determinante seja negativo, o ponto em questão é um ponto de sela; se o determinante é positivo, deve-se analisar o sinal do primeiro elemento da matriz Hessiana: sendo positivo, o ponto é de mínimo; caso contrário o ponto é de máximo. Não obtém-se nenhuma informação caso o determinante seja zero.

2.2.8 Autovalores e Autovetores

Segundo Boldrini (1986) considerando uma transformação especial $T : V \rightarrow W$.

$$T(v) = \lambda v \quad (9)$$

em que λ é o autovalor (escalar) e v é autovetor (se $v \geq 0$). Como toda transformação linear pode ser escrita pela multiplicação de uma matriz por um vetor então:

$$T(v) = Av \quad (10)$$

Igualando-se as Equações (9) e (10) tem-se:

$Av = \lambda v$ ou $Av - \lambda v = 0$ que resulta no sistema homogêneo:

$$(A - \lambda I)v = 0 \quad (11)$$

em que A é uma matriz ($n \times n$), $v = 0$ é sempre solução (trivial).

Os vetores $v \geq 0$ para os quais existe um λ que resolve a Equação (11) são chamados de autovetores da matriz A e os valores de λ , que conjuntamente com v resolvem a equação são chamados de autovalores da matriz A associados aos respectivos autovetores. Para que a Equação (11) tenha solução além da trivial é necessário que o determinante da matriz dos coeficientes seja zero, ou seja,

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad (12)$$

o que resulta em um polinômio de grau n em λ , conhecido como polinômio característico. As raízes do polinômio característico são os autovalores da matriz A . Para se encontrar os autovetores basta substituir o valor do autovalor na equação original e encontrar o autovetor. O autovalor será, então, associado ao autovetor encontrado. Na verdade, o autovetor encontrado forma uma base para o espaço de solução da Equação (11), dado o respectivo autovalor. Logo, qualquer múltiplo do autovetor também é um autovetor. Portanto, sendo A a matriz canônica que representa um operador linear T , temos:

(i) autovalores λ de T ou de A : são as raízes da equação

$$\det(A - \lambda I) = 0,$$

(ii) autovetores v de T ou de A : para cada λ , são as soluções da equação

$$Av = \lambda v \text{ ou } (A - \lambda I)v = 0.$$

2.2.9 Localização do ponto estacionário

Suponha que o interesse seja encontrar os níveis x_1, x_2, \dots, x_k , que maximizam a resposta estimada. Segundo Montgomery (2013), este ponto, se existir, será dado pelo conjunto x_1, x_2, \dots, x_k para o qual as derivadas parciais são iguais a zero.

$$\frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_1} = \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_2} = \dots = \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_k} = 0 \quad (13)$$

Este ponto é chamado de ponto estacionário e pode representar um ponto de máximo, de mínimo ou um ponto de sela. Generalizando o modelo de segunda ordem, para encontrar o ponto estacionário, em notação matricial, temos:

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + x^t b + x^t B x \quad (14)$$

em que

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} \text{ e } B = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \dots & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ & \hat{\beta}_{22} & \dots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix},$$

em que b é um vetor $(k \times 1)$ dos coeficientes de regressão da primeira ordem e B é uma matriz simétrica $(k \times k)$ em que na diagonal tem-se os coeficientes de regressão de segunda ordem e fora da diagonal os coeficientes de interação.

As derivadas parciais dos valores estimados da resposta \hat{Y} em relação aos elementos do vetor x igualadas a zero são dadas por:

$$\frac{\partial \hat{Y}}{\partial x} = b + 2Bx = 0. \quad (15)$$

O ponto estacionário é solução da equação (15), ou seja,

$$x_s = -\frac{1}{2}B^{-1}b. \quad (16)$$

O valor estimado da variável resposta no ponto estacionário é:

$$\hat{Y}_s = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}x_s^t b. \quad (17)$$

2.2.10 Caracterizando a superfície de resposta

Segundo Montgomery (2013), uma vez encontrado o ponto estacionário, é necessário caracterizar a superfície de resposta, ou seja, determinar se o ponto estacionário é um ponto de máximo, de mínimo ou de sela.

Para um modelo ajustado com poucas variáveis, pode-se examinar o gráfico de contorno, caso contrário, faz-se uma análise canônica. De acordo com Montgomery (2013), considera-se uma translação da superfície de resposta da origem para o ponto estacionário x_s e, então, rotacionam-se os eixos desse sistema até que eles fiquem paralelos aos eixos principais da superfície de resposta ajustada, como mostra a Figura 1.

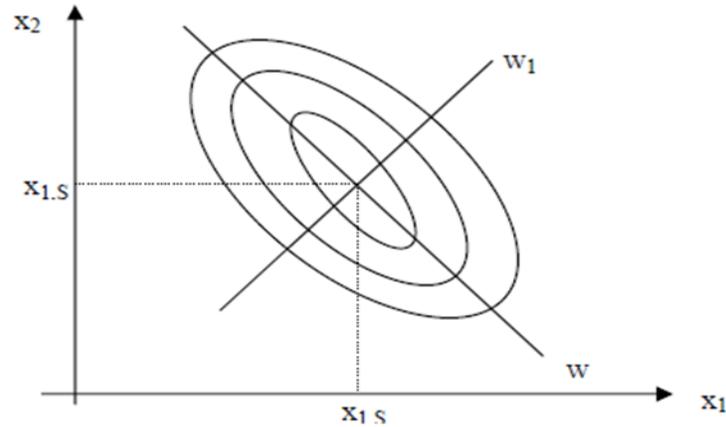


Figura 1: Forma canônica para o modelo de segunda ordem.
Fonte: Montgomery (2013)

A forma canônica do modelo está representada pela equação:

$$\hat{Y} = \hat{Y}_s + \lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 + \dots + \lambda_k w_k^2, \quad (18)$$

onde λ_i são constantes (autovalores ou raízes características da matriz B) e w_i são as variáveis independentes transformadas. Assim, pode-se concluir que:

- i.* Se todos os valores de (λ_i) são positivos, então x_s é um ponto de resposta mínima;
- ii.* Se todos os valores de (λ_i) são negativos, então x_s é um ponto de resposta máxima;
- iii.* Se os valores de (λ_i) tem sinais positivos e negativos, então x_s é um ponto de sela.

3 Resultados

Inicialmente foi feita uma análise para verificar a relevância dos fatores, variáveis, utilizados no experimento. O estudo da importância desses fatores foi feito por meio da análise de variância, que consiste em decompor os graus de liberdade e a variabilidade total de um experimento em partes conhecidas e independentes e uma porção residual de origem desconhecida e de natureza aleatória (Kronca & Banzatto, 2006).

Os resultados da análise de variância para o experimento composto central são apresentados na Tabela 3. A variável tempo de reação é representada por X_1 , a variável temperatura é representada por X_2 . Verifica-se a significância de uma fonte de variação, analisando-se o valor-p. Se o valor-p for $< 0,05$, considera-se a fonte de variação relevante. Foram consideradas nesta análise as variáveis simples, seus termos quadráticos e a interação entre os fatores, representados por $X_1 : X_2$.

Considerando-se os resultados da Tabela 3, conclui-se que todos os fatores foram significantes, ou seja, valor-p $< 0,05$, exceto para a interação entre os fatores.

Tabela 3: Análise de variância de dados referentes à produção no delineamento composto central

Fonte de variação	Graus de liberdade	Soma de quadrados	Quadrado médio	F	valor-p
X_1	1	7,9198	7,9198	111,6873	0,0000
X_2	1	2,1232	2,1232	29,9413	0,0000
X_1^2	1	10,9816	10,9816	154,8663	0,0000
X_2^2	1	6,9721	6,9721	98,3225	0,0000
$X_1 : X_2$	1	0,2500	0,2500	3,5256	0,1025
Resíduo	7	0,4964	0,0709		

Na Tabela 4 são apresentados os coeficientes do modelo de regressão múltipla. Verifica-se por meio do valor-p que exceto para a interação entre os fatores, todos os demais fatores são significativos. Sendo assim, verifica-se que um modelo de segunda ordem é adequado, pois o termo quadrático é significativo.

Tabela 4: Estimativa dos parâmetros do modelo de segunda ordem

FV	Estimativas	Erro padrão	T	valor-p
Intercepto	79,93995	0,11909	671,264	0,00000
X_1	0,99505	0,09415	10,568	0,00001
X_2	0,51520	0,09415	5,472	0,00093
X_1^2	-1,37645	0,10098	-13,630	0,00000
X_2^2	-1,00134	0,10098	-9,916	0,00002
$X_1 : X_2$	0,25000	0,13315	1,878	0,102519

Considerando-se os resultados da Tabela 4, tem-se o modelo de segunda ordem, representado por meio da Equação (19).

$$\hat{Y} = 79,93995 + 0,99505X_1 - 1,37645X_1^2 - 0,5152X_2 - 1,00134X_2^2 \quad (19)$$

As Figuras 2 e 3 representam a superfície de resposta e o gráfico de contorno, respectivamente, para a resposta (produção) em função da temperatura e do tempo. Percebe-se por estas figuras que a resposta (produção) tem valor de máximo.

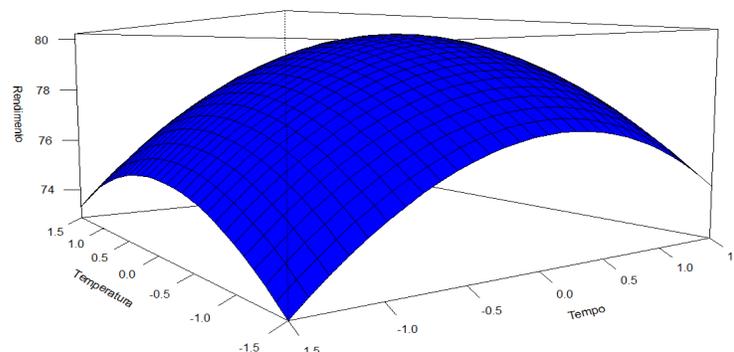


Figura 2: Superfície de resposta do modelo de segunda ordem

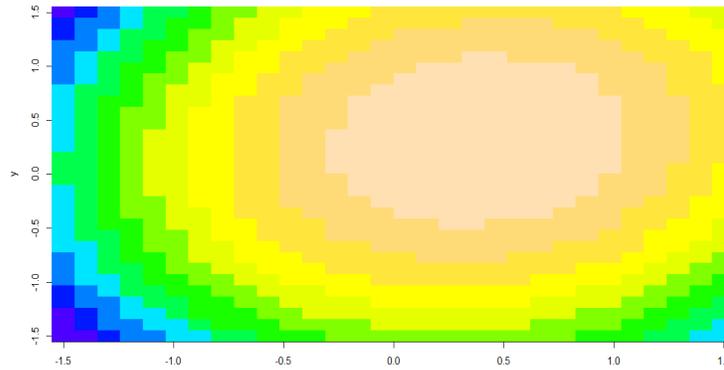


Figura 3: Gráfico de contorno do modelo de segunda ordem

Observa-se que o ponto ótimo está próximo de 0,4 para o tempo e 0,3 para a temperatura considerando as variáveis codificadas e que a resposta neste ponto é um ponto de máximo. Quando transformadas, as variáveis codificadas para variáveis originais, esses valores estarão próximos de $175^{\circ}F$ e 85 minutos. Utilizando a solução geral apresentada, tem-se:

$$x_s = -\frac{1}{2}B^{-1}b.$$

Primeiramente, define-se o vetor b , formado pelos coeficientes de x_1 e x_2

$$b = \begin{bmatrix} 0,99505 \\ 0,5152 \end{bmatrix}.$$

A matriz B é a matriz dos coeficientes quadráticos na diagonal principal e na diagonal secundária o coeficiente da interação dividido por 2.

$$B = \begin{bmatrix} -1,37645 & 0,12500 \\ 0,12500 & -1,00134 \end{bmatrix}$$

O ponto estacionário é dado por:

$$x_s = -\frac{1}{2}B^{-1}b$$

$$x_s = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -0,73972 & -0,09234 \\ -0,09234 & -1,01018 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0,99505 \\ 0,51520 \end{bmatrix}$$

$$x_s = \begin{bmatrix} 0,3892304 \\ 0,3058466 \end{bmatrix} \begin{matrix} \rightarrow X_{1,s} \\ \rightarrow X_{2,s} \end{matrix}$$

As análises foram feitas considerando-se as variáveis codificadas. Sendo assim, faz-se necessário transformar a variável. As fórmulas utilizadas para transformar as variáveis são representadas por $x_{1,s}$ e $x_{2,s}$. O ponto estacionário em termos das variáveis naturais, é dado por:

$$X_{1,s} = \frac{\xi_1 - 85}{5} \qquad X_{2,s} = \frac{\xi_2 - 175}{5}$$

Logo:

$$0,3892304 = \frac{\xi_1 - 85}{5}$$

$$\xi_1 \cong 87$$

$$0,3058466 = \frac{\xi_2 - 175}{5}$$

$$\xi_2 \cong 176,5$$

O valor estimado da produção no ponto estacionário obtido por meio da seguinte solução:

$$\hat{Y} = \beta_0 + \frac{1}{2}x_s^t b$$

$$\hat{Y} = 79,93995 + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0,3892304 & 0,3058466 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0,99505 \\ 0,51520 \end{bmatrix}$$

$$\hat{Y} \cong 80,21$$

Com o objetivo de caracterizar a superfície resposta, ou seja, determinar se o ponto estacionário é um ponto de resposta máxima, mínima ou de sela vamos expressar o modelo ajustado na forma canônica, considerando a equação (19). Para tal transformação é necessário, em primeiro lugar, determinar os autovalores λ_1 e λ_2 .

Os autovalores λ_1 e λ_2 são as raízes do determinante da equação:

$$\begin{aligned} |B - \lambda I| &= 0 \\ \left| \begin{bmatrix} -1,37645 & 0,12500 \\ 0,12500 & -1,00134 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right| &= 0 \\ \lambda^2 + 2,37779\lambda + 1,3626639 &= 0 \end{aligned}$$

Sendo assim, tem-se que

$$\lambda_1 = -0,9635$$

$$\lambda_2 = -1,4143$$

A forma canônica do modelo ajustado fica:

$$\hat{Y} = 80,21 - 0,9635w_1^2 - 1,4143w_2^2$$

Dado que as raízes λ_1 e λ_2 são negativas, conclui-se então que x_s é um ponto de máximo.

4 Conclusões

Como existem apenas duas variáveis que influenciam no processo, os gráficos de superfície de resposta, ao serem visualizados e comparados, possibilitam facilmente uma análise quanto à produção máxima e a região que contém o ótimo. No gráfico de contorno, cada curva corresponde a uma particular altura da superfície de resposta, levando a concluir que em cada contorno a resposta estimada é constante e sendo assim podemos localizar o ótimo com precisão razoável.

Através de uma solução matemática geral pôde-se localizar os pontos críticos para o tempo de reação em 87 minutos, para temperatura em 176,5°F e encontrar o valor estimado da produção no ponto estacionário de 80,21%. Uma vez determinado o ponto estacionário, caracterizou-se a superfície de resposta nas imediações desse ponto, transformando o modelo

em um novo sistema de coordenadas cartesianas $\hat{Y} = 80,21 - 0,9635w_1^2 - 1,4143w_2^2$ com origem no ponto estacionário $\xi_1 \cong 87$ e $\xi_2 \cong 176,5$; sendo $-0,9635$ e $-1,4143$ respectivamente os autovalores de λ_1 e λ_2 . A análise dos autovalores indicaram pontos críticos de máximo o que resulta numa produção máxima em 80,21%.

Referências

- [1] BANZATTO, David A.; KRONKA, Sérgio N., Experimentação Agrícola, 4ª ed, Editora Funep, São Paulo, 2006.
- [2] BOLDRINI, C., Álgebra Linear, 3ª ed., Editora Harbra, São Paulo, 1986.
- [3] FLEMING, Diva M.; GONÇALVES, Mírian B., Cálculo A: funções, limite, derivação, integração. 5ª ed., Editora UFSC, São Paulo, 1992.
- [4] LEITHOLD, Louis. The Calculus with Analitic Geometry, 6ª ed O cálculo com geometria analítica, vol. 2, Tradução de Cyro de Carvalho Palarra, 3ª ed., Editora Harbra LTDA, São Paulo, 1994.
- [5] MONTGOMERY, Douglas C., Design and Analysis of Experiments, Editora John Wiley & Sons, New York, 2013.
- [6] MONTGOMERY, Douglas C.; RUNGER, G. C, Estatística aplicada e probabilidade para engenheiros; tradução Verônica Calado. 2ª ed., Editora LTC, Rio de Janeiro, 2009.
- [7] MYERS, Raymond H.; MONTGOMERY, Douglas C., Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Design of Experiments, 2ª ed., Editora John Wiley & Sons, New York, 1995.
- [8] R DEVELOPMENT CORE TEAM **The R Manuals**: current version: 3.3.1. 2016. Disponível em: <http://www.R-project.org/>. Acesso em: 21/05/2016