

6 Síntese e Conclusões

Nesta dissertação foram apresentadas uma síntese das técnicas estatísticas necessárias ao planejamento e análise de experimentos com mistura, e uma metodologia para seleção de modelos em Experimentos com Mistura e Mistura-Processo, que utilizou um critério baseado na Teoria da Informação. Esta metodologia foi ilustrada com dois exemplos encontrados na literatura.

No Capítulo 2 foi apresentada uma breve exposição dos principais tópicos para o planejamento e a análise de Experimentos com Mistura (EM), destacando-se os polinômios canônicos de Scheffé, para o caso de modelos quadráticos, cúbicos e cúbicos especiais. Para ilustração, foram utilizados os dados de um experimento que media a altura da espuma de um determinado xampu.

No Capítulo 3 foi apresentada uma síntese dos tópicos para planejamento e análise de Experimentos Mistura-Processo (EMP), quando foram descritos os principais modelos e algumas de suas combinações para representar os problemas de EMP. Na literatura pesquisada, verificou-se que são utilizadas as combinações aditivas ou multiplicativas dos diferentes tipos de modelos de Scheffé com os modelos para as variáveis de processo. Para ilustrar, foram utilizados os dados de um experimento que media a força de fixação de um adesivo de aplicação aeroespacial.

As restrições nas proporções dos componentes são muito comuns em experimentos com mistura, tornando a região experimental final uma sub-região da região original. A análise de dados em regiões muito restritas de mistura pode tornar-se bastante complexa pela própria natureza das variáveis de mistura, podendo ocorrer multicolinearidade entre alguns dos termos do modelo considerado. Com o intuito de reduzir o efeito de multicolinearidade, optou-se pelo uso de pseudocomponentes em vez de componentes reais, nos exemplos apresentados nos capítulos 2 e 3.

A colinearidade pode tornar instáveis e bastante inflados os estimadores dos coeficientes do modelo, mesmo com a utilização de pseudocomponentes. Isso faz

com que certos termos do modelo possam não ser significativos na presença de alguns termos e ser significativos na presença de outros termos. Uma alternativa foi 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, além das estatísticas *PRESS* e *MSE* como um critério adicional de seleção de modelos.

No Capítulo 4 foi apresentada uma metodologia original indicada para a seleção de modelos, especialmente para aqueles com forte colinearidade entre os níveis dos componentes da mistura. Esta metodologia foi composta de duas etapas, onde na primeira foi ajustado um Modelo Base e na segunda etapa, a partir do Modelo Base, foram levados em consideração também todos os termos equivalentes aos termos do Modelo Base para a seleção do modelo final.

Concluiu-se que a implementação da segunda etapa da metodologia resultou na obtenção de modelos com menores *PRESS* e *MSE*, e, portanto, melhores que o Modelo Base, e também melhores do que os modelos apresentados na literatura.

No Capítulo 5, com os modelos de EM e EMP definidos, foram determinadas as proporções ótimas dos componentes da mistura e dos níveis das variáveis de processo (para o caso de EMP) e realizada uma comparação entre os modelos obtidos na literatura e os modelos selecionados através desta metodologia, levando em consideração as estatísticas *PRESS* e *MSE* e a variância de uma futura resposta, destacando a melhoria percentual.

6.1.

Oportunidade de Melhoria e Recomendações para Futuras Pesquisas

Uma oportunidade de melhoria do método de seleção de modelos em Experimentos com Mistura e Mistura-Processo proposto consiste na diminuição do esforço computacional para o cálculo e armazenamento dos AIC_c de todos os possíveis modelos. Observando as Figuras 7, 16 e 17, pode-se concluir que a evolução do AIC_c mínimo em função do número de parâmetros consiste de um ramo descendente, atingindo um ponto de mínimo, e um outro ramo ascendente. Sabe-se que, para o método de seleção de modelos de EM e EMP proposto, só interessam os modelos indiferentes ao modelo que possui o menor valor de AIC_c .

Com isso, para os casos em estudo, não seria necessário analisar os modelos com mais de 6 parâmetros (Estudo de Caso 1) e os modelos com mais de 11 parâmetros (Estudo de Caso 2), o que reduziria consideravelmente o esforço computacional. No entanto, não há, *a priori*, como saber exatamente como será o real comportamento do valor de AIC_c mínimo em função do número de parâmetros. O desafio deste problema seria encontrar uma solução analítica do número de parâmetros correspondente ao menor valor de AIC_c , o que seria uma solução exata.

Como desdobramento futuro da pesquisa relacionada com seleção de modelos pode-se propor a investigação de uma metodologia com uma estratégia de duas etapas, com a introdução de um critério de seleção baseado em alguma medida de diagnóstico de colinearidade, seja como critério exclusivo ou como critério complementar, visando a obtenção de modelos com baixos níveis de colinearidade.

Sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ os autovalores de $\mathbf{W}^T \mathbf{W}$ e seja λ_{\min} e λ_{\max} o menor e o maior dos autovalores. Pequenos valores de λ_{\min} ($< 0,001$) indicam a presença de colinearidade forte (Khuri, 2005).

Uma importante medida de diagnóstico de colinearidade é o *condition number*, κ , que é definido por (Khuri, 2005):

$$\kappa = \left[\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \right]^{1/2}$$

Grandes valores de κ (> 40) indicam colinearidade severa (Khuri, 2005).

Variance Inflation Factors (VIFs) são os elementos da diagonal da matriz $(\mathbf{W}^T \mathbf{W})^{-1}$. Grandes valores de VIFs (> 10) indicam que a colinearidade presente é suficiente para resultar numa estimativa pobre dos parâmetros do modelo (Khuri, 2005).

Outra possibilidade para futuras pesquisas é utilizar modelos mistos para planejamentos tipo *split-plot*, isto é, em planejamentos nos quais um ou mais fatores são de difícil ajuste, o que implica em problemas com a aleatoriedade.