Introdução à Otimização de Experimentos

Profa. Heloisa Maria de Oliveira

Universidade Federal de Santa Catarina
Campus Curitibanos

Introdução de Experimentos

- Experimentos são desenvolvidos diariamente.
- É extremamente importante planejá-lo

Fonte: www.evonline.com.br

Planejamento de Experimentos

- Compreender as possíveis mudanças na variável resposta a partir da alteração de uma ou mais variáves independentes.

- Técnicas e conceitos estatísticos

Fonte: www.acaoreacao.com

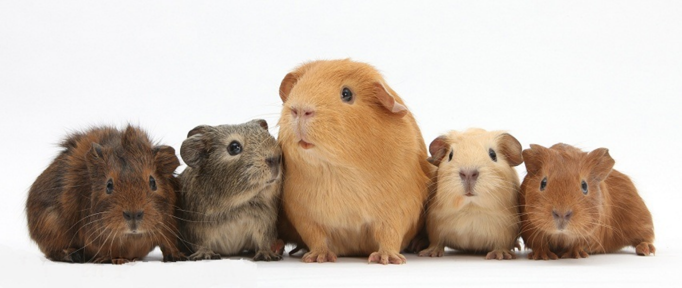
Passos para realizar um Experimento

1. Defina o problema
2. Escolha os fatores e seus níveis
3. Selecione a(s) variável(eis) resposta
4. Escolha o plano experimental

5. Planeje e execute o trabalho experimental
6. Analise os dados e interprete os resultados
7. Prepare um relatório

Três Princípios Básicos de Experimento

- Repetição
- Casualização
- Controle local



Experimentos Fatoriais

- surgiram com os trabalhos de Fisher (1935) e Yates (1937)
- k fatores a serem analisados com seus níveis
- cada unidade experimental recebe uma combinação dos níveis dos k fatores (tratamentos)
- experimento fatorial é a estrutura de tratamento empregado e não refere-se ao delineamento

Aplicação dos Experimentos Fatoriais em DIC

Fonte: https://br.depositphotos.com

Elaborar uma receita de pão com farinha de mandioca controlando os seguintes ingredientes.

Tabela: Descrição do Experimento.

Fatores	Descrição	Níveis (em gramas)			Codificação		
X_1	Clara de ovo	10	20	30	-1	0	1
X_2	Farinha de mandioca	45	55	65	-1	0	1
X_3	Fermento	05	10	15	-1	0	1

Fonte: Escouto(2000)

- a combinação dos níveis de cada fator é um tratamento
- serão $3 \times 3 \times 3 = 3^3 = 27$ tratamentos distintos
- notação a^b onde a é o nível e b é o número de fatores
- se aumentar mais dois com três níveis serão $3^5 = 243$ tratamentos a serem alocados.

Experimentos Fracionários

- Surgiu com Finny (1945) que notou que, na prática, as interações entre os vários fatores são irrelevantes.
- consiste na seleção de frações para o experimento fatorial completo em escolher os contrastes ou efeitos que são confundíveis e inseparáveis de outros.

Os Experimentos Fracionários mais conhecidos são:

- **Delineamento Central Composto (DCC)** de Box e Wilson (1951)
- **Delineamento Box-Behnken (DBB)** de Box e Behnken (1960)

Delineamento Ótimos

- Os delineamentos ótimos surgiram com Kiefer (1959)
- Fedorov (1972), Silvey (1980) e Atkinson e Donev (1982) desenvolveram outros trabalhos.

Fonte:www.veja.abril.com.br

Vantagens

- redução no número de unidades experimentais com qualidade das análises;
- experimentos em blocos com qualquer tamanho;
- podem ser adaptados para atender os desejos do pesquisador.

Comandos no R

Ilustração de modelagem

- Sabe-se que o rendimento de um produto é 45% aproximadamente usando a temperatura de 60^{o}C por 20 min.
- Qual será o rendimento do produto considerando
  - temperatura 65, 60 e 70^{o}C
  - tempo de reação (20 e 40 min)

Modelagem do Experimento Fatorial

Tabela: Representação e informações do experimento.

Variáveis Originais		Variáveis Codificadas		Resposta
Tempo	Temperatura	X_1	X_2	Y
20	65	-1	-1	37,5
20	65	-1	-1	37,8
40	65	1	-1	40,6
40	65	1	-1	40,1
20	60	-1	0	46,1
20	60	-1	0	45,7
40	60	1	0	79,3
40	60	1	0	79,6
20	70	-1	1	80,8
20	70	-1	1	80,5
40	70	1	1	78,9
40	70	1	1	79,8

Modelo de primeira ordem

$$y_u = \beta_0 + \beta_1 x_{u1} + \beta_2 x_{u2} + \epsilon_u$$

onde

- y_u é a u-ésima resposta da reação, $u = 1, \ldots,$ n
- x_{u1} e x_{u2} são as reações x_j na u-ésima observação
- β_1 e β_2 são os parâmetros
- ϵ_u é a componente aleatória (erro experimental) na u-ésima unidade experimental

Na **forma matricial** $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \epsilon$, temos

$$\begin{bmatrix} 37,5 \\ 37,8 \\ 40,6 \\ 40,1 \\ 46,1 \\ 45,7 \\ 79,3 \\ 79,6 \\ 80,8 \\ 80,5 \\ 78,9 \\ 79,8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \\ \epsilon_7 \\ \epsilon_8 \\ \epsilon_9 \\ \epsilon_{10} \\ \epsilon_{11} \\ \epsilon_{12} \end{bmatrix}$$

Modelo Estatístico

Para um experimento completamente aleatorizado, considere o modelo

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} + \epsilon$$

onde

- $\mathbf{Y}$ é o vetor de resposta das n unidades experimentais
- β é o vetor p-dimensional de parâmetros desconhecidos
- ϵ é o vetor de erros aleatoriamente independentes com média 0 e variância σ^2

Por exemplo, a matriz $\mathbf{X}$ que ajusta um polinômio de segunda ordem tem-se

$$f'(\mathbf{x}_i) = \left(1, x_1, \ldots, x_k, x_1^2, \ldots, x_k^2, x_1 x_2, \ldots, x_{k-1} x_k\right)$$

para cada ponto $\mathbf{x}_i = \left(x_{i1}, \ldots, x_{ik}\right)'$ de uma região experimental $\mathcal{X}$, onde $1 \leq i \leq n \leq p = \frac{1}{2}\left(k+1\right)\left(k+2\right)$.

Estimação dos Coeficientes

- mininizar os erros

$$
\begin{aligned}
F(\beta) &= \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2 = \epsilon'\epsilon = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta)'(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta) \\
&= \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - 2\mathbf{X}'\mathbf{Y} + \beta\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta
\end{aligned}
$$

- Método de Mínimos Quadrados $\frac{\partial F}{\partial \beta} = -2\mathbf{X}'\mathbf{Y} + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta = 0$
- Simplificando temos
$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$$

Cálculo da Matriz de Informação

$$\mathbf{X}'\mathbf{X} = \begin{bmatrix} n & \sum_{u=1}^{n} X_{u1} & \sum_{u=1}^{n} X_{u2} \\ \sum_{u=1}^{n} X_{u1} & \sum_{u=1}^{n} X_{u1}^2 & \sum_{u=1}^{n} X_{u1}X_{u2} \\ \sum_{u=1}^{n} X_{u1} & \sum_{u=1}^{n} X_{u1}X_{u2} & \sum_{u=1}^{n} X_{u2}^2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}'\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \sum_{u=1}^{n} Y_u \\ \sum_{u=1}^{n} Y_u x_{u1} \\ \sum_{u=1}^{n} Y_u x_{u2}^2 \end{bmatrix}$$

Rendimento do produto

$$\mathbf{X'X} = \begin{bmatrix} 12 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix} \quad \mathbf{X'Y} = \begin{bmatrix} 726,7 \\ 69,9 \\ 164,0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X'X})^{-1}\mathbf{X'Y}$$

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \frac{1}{12} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{12} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 726,7 \\ 69,9 \\ 164,0 \end{bmatrix}$$

- matriz de covariâncias é $\mathbf{V}(\beta) = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\sigma^2$

- delineamento ótimo é aquele que otimiza alguma função da matriz $(\mathbf{X}'\mathbf{X})$ encontrando a melhor combinação dos pontos experimentais

Critérios de otimização

- D-otimalidade
- A-otimalidade
- A-otimalidade ponderada
- I-otimalidade

- ***D*-otimalidade**

$$\max_{X \in \mathcal{X}} det(\mathbf{X}'\mathbf{X})$$

minimizando o determinante da inversa da matriz de informação, consequentemente está sendo minimizado a variância dos estimadores dos parâmetros

- ***A*-otimalidade**

$$\min_{X \in \mathcal{X}} \left\{ \text{traço} \left[(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \right] \right\}$$

minimiza a variância média das estimativas dos parâmetros do modelo que será ajustado

- *A*-**otimalidade ponderada**

$$\min_{X \in \mathcal{X}} \left\{ \text{traço} \left[\mathbf{W}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \right] \right\}$$

onde $\mathbf{W}$ é a matriz diagonal de pesos pesos que são atribuídos aos parâmetros de acordo com as prioridades do estudo

- I-otimalidade

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \left\{ \frac{\text{traço}\left[\mathcal{M}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right)^{-1}\right]}{\int_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} d\mathbf{x}} \right\},$$

onde $\mathcal{M}$ é a matriz de momentos $\int_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} f(\mathbf{x})f'(\mathbf{x})d\mathbf{x}$ da região experimental que pode ser cúbica, esférica ou irregular.

Minimiza a variância média da predição em uma região experimental $\mathcal{X}$