

Uma Abordagem Alternativa para Otimizar Múltiplos Objetivos em Contexto Industrial

Nuno Ricardo Costa

E-mail: nuno.costa@estsetubal.ips.pt

Instituto Politécnico de Setúbal - Escola Superior de Tecnologia de Setúbal
UNIDEMI/DEMI, Faculdade de Ciências e Tecnologia - Universidade Nova de Lisboa

João Lourenço

E-mail: joao.lourenco@estsetubal.ips.pt

Instituto Politécnico de Setúbal - Escola Superior de Tecnologia de Setúbal

Resumo:

Os processos e os produtos têm inerentes múltiplas características que devem ser otimizadas simultaneamente de modo a que seja possível encontrar a melhor solução de compromisso. Em contraste com a prática frequentemente usada mas fortemente desencorajada da otimização separada de cada uma das características que se pretendem otimizar, neste artigo sugere-se a utilização de um critério para a otimização simultânea de várias características que é fácil de entender e de implementar, bem como métricas para avaliar a qualidade das soluções geradas. A utilização destas métricas permitirá ao decisor selecionar a solução com base no desvio cumulativo das respostas em relação aos respetivos valores alvo, na qualidade das previsões e/ou na robustez. Para avaliar e comparar o desempenho da abordagem proposta com a de outra frequentemente utilizada na resolução de problemas industriais, simularam-se condições adversas de operação em termos da variância nos processos de fabrico e analisaram-se quatro casos de estudo com diferentes tipos e número de respostas, regiões de operação e número de variáveis.

Palavras-chave: Otimização, Custo, Variância, Robustez.

Abstract:

An easy-to-use criterion for optimizing multiple responses and novel metrics for assessing compromise solutions in terms of the desired response properties, namely, the bias, quality of predictions, and robustness are illustrated. To evaluate and compare the working abilities of the proposed optimization criterion with those of other widely used, yet effective, loss function-based method, adverse variance conditions regarding the production process were simulated and four case studies with different response types, feasible regions, number of responses and variables were analyzed.

Keywords: Optimization, Loss, Variance, Robustness.

1. Introdução

Nas pequenas e médias empresas portuguesas com sistemas da qualidade certificados foram encontradas evidências de não existirem recursos com a competência adequada para seleccionar as ferramentas/técnicas mais adequadas para maximizar a eficiência do processo e as características do produto (Sousa *et al.*, 2005). Neste sentido já apontava a opinião de Saraiva (2003), ao considerar que em Portugal o panorama de utilização de ferramentas e metodologias da qualidade, das mais simples às mais elaboradas, era especialmente confrangedor.

Para que as organizações consigam sobreviver no contexto de elevada competitividade em que hoje se faz negócio, é necessário que assumam a melhoria contínua como uma forma de se posicionar e estar no mercado, tendo por base os seus Valores, Princípios e Comportamentos. Estes têm mais impacto no negócio do que as técnicas e/ou ferramentas de recolha, análise, e tratamento da informação e não podem ser ignorados. De fato, as organizações não deixam de ser competitivas por não usarem as técnicas e/ou ferramentas adequadas, mas estas serão um fator diferenciador nas suas práticas e um elemento importante para a melhoria da competitividade e da produtividade.

Em sintonia com o estudo publicado por Saraiva *et al.* (2010) sobre a Qualidade em Portugal, considera-se que a conceção, desenvolvimento e aplicação de novas técnicas, ferramentas e abordagens da Qualidade devem ser variáveis de intervenção prioritária para a melhoria do desempenho das organizações. Se nada de significativo for feito neste sentido, tal como referiram Saraiva *et al.* (2010), Portugal corre o risco de divergir face às tendências internacionais de evolução da qualidade, nomeadamente quanto à aplicação de novas ferramentas, referenciais e abordagens específicas, em particular de natureza mais avançada ou ambiciosa, bem como na aplicação dos princípios e ferramentas da qualidade nas atividades e projetos de Investigação, Desenvolvimento e Inovação centrados na Qualidade.

2. Objectivo e metodologia utilizada

A necessidade de se recolher informação que possibilite um conhecimento mais sustentado e profundo sobre o produto e o processo, associada à complexidade que lhes está inerente, exige necessariamente o recurso à experimentação. Em contraste com uma prática frequentemente usada, mas fortemente desencorajada, que é a da tentativa-erro, a qual só trás vantagens em condições excepcionais (Frey e Wang, 2006), a Metodologia da Superfície de Respostas (*RSM*) tem vindo a ser cada vez mais utilizada nas diversas áreas do conhecimento. Exemplo disto é o

vasto número de artigos publicados na literatura que fazem uso da *RSM*. Aplicações em engenharia, nomeadamente na engenharia química, eletrotécnica, mecânica e de materiais são predominantes, tal como se pode constatar, por exemplo, em Ilzarbe *et al.* (2008) e Ardakani e Wulff (2013), mas diversos casos de estudo desenvolvidos no âmbito das ciências sociais e nos serviços têm também sido publicados (Antony *et al.*, 2011). Contudo, a *RSM* ainda não faz parte da lista das dez ferramentas ou técnicas mais utilizadas nas pequenas e médias portuguesas com sistemas da qualidade certificados (Sousa *et al.*, 2005), embora Saraiva *et al.* (2010) considerem que a correta aplicação das ferramentas da qualidade nas organizações deva ser assumida com especial prioridade. Evidências de que algo poderá estar a mudar são apresentadas por Lopes *et al.* (2011).

A *RSM* está suportada num conjunto de técnicas e ferramentas estatisticamente fundamentadas que permitem conceber, desenvolver e melhorar, ou melhor compreender, os processos e os produtos (sistemas) com a necessária eficiência e eficácia, tendo inerente uma estratégia de experimentação sequencial onde o conhecimento é gradualmente adquirido e utilizado para se atingir o objetivo definido. Em termos genéricos, a *RSM* está estruturada em três fases:

- Seleção (*Screening*), a qual envolve a definição das experiências a realizar com o propósito de identificar os fatores de controlo com um efeito estatístico significativo no objetivo do estudo.
- Modelação, a qual envolve a definição das experiências a realizar com o propósito de relacionar a resposta com os fatores de controlo considerados, o que é frequentemente feito através de polinómios do segundo grau.
- Otimização, na qual se determinam os valores para os fatores de controlo que permitem obter as propriedades desejadas para a resposta(s) considerada(s).

Em cada uma destas fases existem atividades que têm de ser geridas cuidadosamente, designadamente a definição do objetivo do estudo, a identificação das variáveis de entrada e de saída, a definição da região experimental, as experiências a realizar, a técnica de modelação das variáveis de saída (respostas) e a estratégia de otimização a utilizar. Cada uma destas atividades tem sido alvo de estudo e debate de opiniões entre investigadores, além de serem exploradas nas publicações sobre a *RSM*, incluindo em livros de referência, de que são exemplo os de Anderson e Whitcomb (2005), Box *et al.* (2005) e Myers *et al.* (2009). Entre os autores que propiciam uma discussão detalhada sobre questões estatísticas e não-estatísticas, além de

apresentarem linhas de orientação para o planeamento e condução de estudos experimentais desenvolvidos no âmbito da *RSM*, incluem-se Costa *et al.* (2006), Tanco *et al.* (2009b) e Freeman *et al.* (2013).

A quantidade de livros e artigos científicos onde se apresenta e ilustra a *RSM* é vasta. De qualquer maneira esta não é uma metodologia onde tudo está completamente explorado. Para além das linhas de investigação que estão a ser seguidas por diversos autores, nomeadamente aquelas que são referidas por Khuri e Mukhopadhyay (2010), a necessidade de minimizar a diferença existente entre o desenvolvimento teórico e as aplicações práticas da *RSM* bem como a apresentação de novos pontos de vista sobre problemas menos explorados na literatura, de que é exemplo a otimização de múltiplas respostas, são dois aspetos que merecem particular atenção.

Neste artigo apresenta-se uma abordagem para otimizar múltiplas respostas em problemas desenvolvidos no âmbito da *RSM* e exemplifica-se a sua utilização. A abordagem sugerida usa uma função objetivo que requer do analista/decisor uma quantidade mínima de informação subjetiva e métricas que lhe permitem avaliar e selecionar a solução de compromisso com base no valor cumulativo do desvio das respostas em relação aos respetivos valores alvo e na variabilidade das respostas.

A restante parte do artigo está estruturada da seguinte forma: na Secção 3 é apresentada uma revisão da literatura mais relevante; na Secção 4 é introduzido o critério de otimização e as métricas usadas para avaliar as soluções geradas. Os exemplos de aplicação da abordagem proposta e a discussão de resultados obtidos estão nas Secções 5 e 6, respetivamente. As conclusões são expostas na Secção 7.

3.Revisão da Literatura

Os processos e os produtos têm, por natureza, múltiplas características (respostas) que não devem ser consideradas de forma isolada porque a otimização separada de múltiplas respostas resultará na obtenção de soluções menos favoráveis. Esta é uma das razões para que a otimização de múltiplas respostas seja alvo de estudo em várias áreas do conhecimento. A estratégia que mais tem sido aplicada no âmbito da *RSM* consiste em agregar todas as respostas numa única e proceder à otimização da denominada função agregada. Vários métodos têm sido propostos na literatura, pelo que a seleção de um método eficaz não é uma tarefa necessariamente fácil e rápida. Os métodos são apresentados em diversas publicações que podem não ser de fácil identificação e acesso.

A quantidade e variedade das abordagens e métodos existentes são significativas, embora a utilização de alguns métodos seja predominante. A função “satisfação” (*desirability*) proposta por Derringer e Suich (1980), com a modificação introduzida por Derringer (1994), é uma das mais utilizadas, senão mesmo a mais utilizada, e está disponível na generalidade dos programas informáticos de análise de dados. A abordagem proposta por estes autores tem sido explorada e alvo de modificações por parte de diversos investigadores, sendo exemplos a integração da função satisfação em algoritmos genéticos (Ortiz *et al.*, 2004), a consideração da variância e correlação entre as respostas (Wu, 2005) e a utilização da perceção dos clientes sobre o produto na definição de prioridades para as respostas (Das e Sengupta, 2010). Uma revisão sobre estas e outras modificações na função satisfação é apresentada por Costa *et al.* (2011b), os quais mostram que formulações menos sofisticadas também conseguem competir com outras mais complexas, validando os resultados com métodos desenvolvidos em diferentes abordagens, nomeadamente, a da função perda.

A resolução de problemas com múltiplas respostas com base na denominada função perda tem atraído muita atenção e sido alvo de estudo e aplicação por parte de académicos e não-académicos, sendo os métodos que consideram a variância e correlação entre as respostas os mais frequentemente utilizados. Murphy *et al.* (2005) apresentam uma extensiva revisão dos métodos publicados e confrontam os méritos da função perda com os da função satisfação. Wu e Chyu (2004) dão outro importante contributo para a literatura ao introduzirem o conceito de perdas assimétricas e proporem uma função perda onde os coeficientes de custo ou perda são definidos com base nesse conceito. Ao contrário dos autores anteriores, Ko *et al.* (2005) propuseram uma função perda simétrica que combina as potencialidades de duas funções perda bastante populares, as funções propostas por Pignatiello (1993) e Vining (1998). O primeiro considerou a variância das respostas devida a fatores não controláveis (robustez), o segundo a variância devida à incerteza nas respostas estimadas (qualidade das estimativas).

A função perda proposta por Ko *et al.* (2005) é usada neste artigo e as suas soluções são comparadas com as do critério de otimização proposto por Costa (2010a), que será apresentado como alternativa. A função perda é definida por

$$E[L(y, \theta)] = (\hat{y} - \theta)^T C (\hat{y} - \theta) + \text{trace}[C \Sigma_{\hat{y}}(x)] + \text{trace}[C \Sigma_y(x)] \quad (2)$$

onde o primeiro termo determina a perda resultante do afastamento do valor das respostas aos respetivos valores alvo, o segundo termo determina a perda associada à qualidade das estimativas e o terceiro termo permite obter o valor da perda correspondente à robustez das

respostas. A matriz de variância-covariância calculada com base no valor médio das respostas é representada por $\sum_{\hat{y}}(x)$ e a matriz de variância-covariância calculada com base na variância ou desvio padrão das respostas por $\sum_y(x)$. A matriz de perdas ou custos é representada por C . Quando C é uma matriz diagonal, os seus elementos quantificam a importância relativa atribuída às respostas, ou seja, o custo por unidade do desvio do valor da resposta em relação ao valor alvo. Quando C é uma matriz não-diagonal os elementos fora da diagonal representam o custo devido ao fato de pares de respostas estarem simultaneamente afastadas do valor alvo. Importa ainda salientar que o primeiro e o segundo termo da Equação (2) constituem a função perda proposta por Vining, enquanto o primeiro e o terceiro termo constituem a função perda proposta por Pignatiello.

Outras abordagens que têm tido aplicação no âmbito da RSM são a *goal programming*, que foi usada por Kazemzadeh *et al.* (2008) como base para a unificação de vários métodos desenvolvidos em diferentes abordagens, e o *compromise programming* (Costa e Lourenço, 2014), que inclui como casos particulares as distâncias Euclideana e de Tchebycheff ou o critério “*minimax*” (Chen *et al.*, 1999).

Vários dos métodos utilizados na resolução de problemas desenvolvidos no âmbito da RSM podem ser considerados casos particulares daqueles que têm sido desenvolvidos e aplicados no domínio da investigação operacional, em particular na análise multicritério. Uma revisão detalhada do estado da arte nesta área do conhecimento é apresentada por Figueira *et al.* (2005), Marler e Arora (2004) e Gabrel *et al.* (2014). Estes últimos autores clarificam conceitos e terminologias usadas em diversas áreas do conhecimento. Autores que abordam outros assuntos e fornecem revisões detalhadas sobre os mesmos são: Jeong *et al.* (2005), Marler e Arora (2010), and Almeida *et al.* (2016) – investigam o significado dos pesos ou prioridades atribuídos às respostas e propõem procedimentos para determinar/identificar o seu valor; Shah *et al.* (2004), Robinson *et al.* (2006) e Wan e Birch (2011) – exploram as potencialidades de algumas técnicas de modelação (regressão linear); Shaibu e Cho (2009) e Costa (2010a) – propõem funções objetivo para otimizar a média e o desvio padrão de uma resposta; Alves e Clímaco (2007), Jeong e Kim (2009) e Lee *et al.* (2012) – propõem métodos iterativos para a otimização de múltiplas respostas; Costa *et al.* (2011a) e Lee *et al.* (2010; 2011) – sugerem abordagens alternativas para seleccionar a solução de compromisso entre várias respostas; Chapman *et al.* (2014), Costa e Lourenço (2014), Costa *et al.* (2011c) e Shin e Cho (2009) – avaliam a capacidade de vários métodos gerarem soluções não dominadas (óptimas) em superfícies convexas e concavas, fazendo uma representação tão completa quanto possível da denominada

fronteira de Pareto. Revisões mais generalizadas e recentes da literatura podem ser encontradas em Salmasnia et al. (2013), Ardakani e Wulff (2013) e Ozdemir e Cho (2016).

A quantidade de informação subjetiva que é requerida ao analista/decisor, a indisponibilidade imediata dos algoritmos necessários e a complexidade inerente a alguns métodos são fortes motivos para justificar a limitada aplicação na prática de muitos dos métodos disponíveis, nomeadamente por aqueles que não tenham um conhecimento sólido e aprofundado em matemática/estatística e programação computacional. Outra dificuldade que é necessário ultrapassar é o da seleção da solução de compromisso. O que o analista/decisor sabe é que a solução à qual corresponde o menor ou o maior valor da função agregada, dependendo do método utilizado, corresponderá, teoricamente, à melhor solução para o problema. Porém, a solução ótima para problemas com múltiplas respostas é mais um conceito do que uma definição (Marler e Arora, 2004). É comum as respostas estarem em conflito, pelo que não é expectável conseguir encontrar valores para as variáveis de entrada que permitam obter o valor desejado (alvo ou objetivo) para todas as respostas. Soluções para problemas com várias respostas exigem, inevitavelmente, um compromisso. Por exemplo, o valor médio e a variância de uma característica de um processo ou de um produto estão quase sempre em conflito, sendo vulgar aceitar-se um aumento no valor do desvio da resposta em relação ao valor alvo para que a variância seja menor (ou vice-versa).

A variedade de problemas e o desejo dos investigadores de apresentarem métodos novos ou alternativos para a resolução do tipo de problemas atrás referido, fazendo uso dos mais recentes avanços nas ciências da computação e na matemática, têm impulsionado os investigadores a proporem novos algoritmos e metodologias de otimização. Algoritmos genéticos, imunes e híbridos, entre outros algoritmos menos populares, tais como o *simulating annealing* (Sibaliija e Majstorovic, 2012) ou o *particle swarm* (Fan e Chang, 2009), ou combinações de algoritmos (Cheng e Li, 2015), têm sido ilustrados por aqueles que direcionam as suas linhas de pesquisa para o “como otimizar”. Uma revisão detalhada das principais características e tendências dos mais representativos e recentemente publicados algoritmos de otimização é feita por Younis e Dong (2010) e Cheng e Li (2015). Porém, como Ayvaz *et al.*, (2009) afirmou, a utilização destes algoritmos requer da parte do utilizador conhecimentos sólidos e profundos ao nível da programação computacional e de matemática, o que é um fator limitativo para a sua aplicação, principalmente, em contextos industriais. Críticas à proliferação de algoritmos que carecem de uma aprofundada avaliação são apresentadas por Sörensen (2013).

Outra linha de investigação em que vários investigadores têm trabalhado no âmbito da RSM é a modelação das respostas. Técnicas de modelação paramétricas, semi-paramétricas e não-

paramétricas têm sido propostas e ilustradas. Por exemplo, Hwang-Dae et al. (2007) descrevem e comparam o *Ordinary Least Squares* (OLS), *Local Polynomial Regression* e o *Model Robust Regression*; Zhou et al. (2013) comparam o *Support Vector Regression*, *Radial Basis Function* and *Kriging*; Gupta et al. (2010) descrevem e exemplificam o *Generalized Linear Model* (GLM); Costa et al. (2012) compararam os resultados obtidos com o *Seemingly Unrelated Regression* (SUR) e o OLS; Costa e Lourenço (2016) descrevem o Modelo do Processo Gaussiano (GPM) e comparam os resultados obtidos com os do SUR e OLS.

4. Abordagem Proposta

A abordagem que se propõe é fácil de entender e implementar, requer uma quantidade mínima de informação subjetiva da parte do utilizador/decisor e permite caracterizar as soluções geradas em termos das propriedades desejadas para as respostas, ou seja, do afastamento das respostas ao valor alvo e da variância. Por estas razões torna-se mais apelativa que as outras que têm sido utilizadas num contexto industrial.

4.1 Critério de otimização

A *Compromise Programming* é uma técnica que tem provado ter a capacidade de gerar soluções de Pareto (soluções em que a melhoria de uma das respostas só pode ser feita à custa da degradação do valor de outra resposta(s)) que se encontrem em regiões convexas e não-convexas (concavas) das superfícies de resposta (Messac *et al.*, 2000; Shin e Cho, 2009). Esta técnica é generalizada pela métrica

$$\text{Min } L_p = \text{Min} \left(\sum_{i=1}^n [\lambda_i (\hat{y}_i - u_i)]^p \right)^{1/p} \quad (3)$$

onde \hat{y}_i representa o modelo da i -ésima resposta estimada, u é o valor ideal para a i -ésima resposta, p é um parâmetro que define o tipo de métrica a utilizar e λ_i representa o peso ou a prioridade relativa atribuído à i -ésima resposta. Quando $p=2$, a Equação (3) é uma métrica Euclideana (L_2), ou seja, uma soma ponderada do quadrado dos desvios das respostas ao respetivo valor alvo. Quando $p=\infty$, a métrica L_∞ ou métrica de Tchebycheff é equivalente à utilização de um critério “*minimax*” (minimização do valor máximo do desvio das respostas em relação ao valor ideal ou alvo). Um dos inconvenientes do denominado critério “*minimax*” é o de não ter em consideração o equilíbrio das soluções geradas, ou seja, apenas tem em

consideração a resposta que apresenta o maior desvio em relação ao seu valor alvo. Por exemplo, num problema de otimização de três respostas e perante duas soluções cujos valores das respostas fossem (0,35; 0,4, 0,2) e (0,4; 0,2; 0,2) o critério *minmax* não identificaria uma destas soluções como sendo melhor do que a outra, podendo apresentar as duas como soluções equivalentes. Porém, as soluções têm características diferentes. Para além do desvio máximo aos valores alvo (0,1; 0,1; 0,1) ser o mesmo nas duas soluções (0,4 – 0,1 = 0,3), a soma dos desvios das respostas em relação aos valores alvo é maior na primeira solução. Para contornar este problema e garantir que a métrica L_∞ gerará soluções ótimas (não-dominadas ou de Pareto), Shin e Cho (2009) propuseram uma abordagem lexicográfica da métrica de Tchebycheff ponderada, que consiste num procedimento com duas fases: numa primeira fase as respostas são ordenadas por ordem de importância ou prioridade e cada uma delas minimizada separadamente. Após isto, cada uma das respostas é incorporada no problema como um constrangimento e corre-se a rotina de otimização. Em alternativa, Costa e Pereira (2010) propuseram uma variante da denominada medida de distância generalizada ou critério global definida por

$$\text{Minimizar } \sum_{i=1}^n \left(\frac{|\hat{y}_i - \theta_i|}{U_i - L_i} \right)^{p_i} \quad (4)$$

onde p_i é um fator de preferência (fator de forma $p_i > 0$), θ_i é o valor alvo para a i -ésima resposta estimada \hat{y}_i , a qual pode representar a resposta média ($\hat{\mu}_{(x)}$) e/ou o desvio padrão dessa resposta ($\hat{\sigma}_{(x)}$), U_i e L_i são, respetivamente, o limite superior e inferior da especificação da resposta que estão usualmente disponíveis para o controlo da qualidade do processo e do produto. Um procedimento prático para a aplicação do critério representado pela Equação (4) é descrito no Anexo C.

A normalização das respostas na Equação (4) é feita pelo termo $1/(U_i - L_i)$ em detrimento de um coeficiente de ponderação arbitrário, vulgarmente utilizado nos critérios de otimização, o que tem duas vantagens: Por um lado, permite agregar respostas expressas em diferentes escalas, magnitudes de variação e unidades de medida. Por outro lado, requer-se menos informação subjetiva do analista/decisor. Este procedimento de normalização é uma variante do denominado procedimento da fronteira superior-inferior que foi apresentada e avaliada por Marler e Arora (2005) e que provou ser uma abordagem fiável por conseguir melhorar

consistentemente os resultados obtidos por outros procedimentos, nomeadamente, àquele que é frequentemente utilizado e que consiste na normalização das respostas através da divisão pelo respetivo valor alvo. De acordo com estes autores, o procedimento de normalização proposto não é o único que garante as melhores soluções de compromisso e que elimina problemas de domínio numérico de alguma resposta. No entanto é um procedimento que minimiza potenciais dificuldades na geração de conjuntos de soluções tão completos quanto possível (ou desejáveis) de soluções não-dominadas.

Parâmetros que permitem manipular a curvatura da função objetivo têm também um papel crucial quando se pretende explorar a superfície de resposta e encontrar soluções de compromisso alternativas no conjunto das soluções não-dominadas em problemas com múltiplas respostas. Messac *et al.* (2000) demonstraram teórica e numericamente através de exemplos que usar expoentes para alterar a curvatura da função objetivo agregada é uma prática eficaz para identificar soluções não-dominadas (ótimas ou de Pareto) em regiões convexas e concavas, em contraste com os coeficientes de ponderação ou pesos usados nas funções perda como unidades de custo. Por conseguinte, é expetável que a alteração dos valores do expoente p_i na Equação (4) permita ao analista explorar o espaço de resultados e identificar soluções que pertencem ou formem a denominada fronteira de Pareto (conjunto completo das soluções não-dominadas ou ótimas).

O módulo existente no numerador permite simplificar a formulação matemática da função objetivo para agregar todos os tipos de resposta existente, nomeadamente respostas do tipo nominal-é-melhor (*NTB*), menor-é-melhor (*STB*) e maior-é-melhor (*LTB*). Para respostas do tipo *STB* assume-se que o valor alvo é igual ao valor mínimo da especificação. Para respostas do tipo *LTB* assume-se que o valor alvo é igual ao valor máximo da especificação. Sempre que estes valores alvo não estejam definidos ou não exista conhecimento suficiente para os definir, é possível assumir esses valores como sendo iguais aos valores mínimos e máximos que se podem obter dos modelos (de regressão) estimados para as respostas dentro da região experimental.

Importa salientar que o valor alvo para o desvio padrão ou variância de uma característica da qualidade do processo ou produto ($\hat{\sigma}_{(x)}$) pode não ser, necessariamente, igual a zero, tal como é assumido pela generalidade dos autores. Valores ligeiramente superiores a zero podem permitir explorar mais convenientemente o espaço de resultados e encontrar soluções, pelo menos, igualmente satisfatórias (Shaibu e Cho, 2009).

4.2 Métricas para caracterizar as soluções geradas

Em problemas com múltiplas respostas não existe apenas uma solução que seja melhor do que todas as outras. O número de soluções de compromisso que podem ser geradas é tanto mais elevado quanto maior for o número de respostas. Por conseguinte, selecionar a solução da preferência do decisor pode ser uma tarefa difícil na ausência de critérios bem definidos. Para o efeito é necessário ter em consideração as propriedades desejadas para as respostas, porque se esta informação não for conhecida não é possível tomar uma decisão devidamente fundamentada.

A prática corrente consiste em selecionar a solução com base no valor máximo ou mínimo da função agregada, dependendo do tipo de função utilizada. Muito poucos autores têm apresentado procedimentos ou métricas para identificar a melhor solução de compromisso entre múltiplas respostas. Por exemplo, Ch'ng *et al.* (2005) decidiram não comparar os resultados da função agregada que propuseram com uma função perda, porque entenderam que não era razoável comparar funções formuladas com base em diferentes abordagens. Ko *et al.* (2005) usaram os termos da função perda que propuseram para comparar diferentes funções perda. Em contraste com os autores anteriores, Xu *et al.* (2004) e Pal e Gauri (2010) compararam funções agregadas formuladas com base em diferentes abordagens através das métricas que propuseram. Xu *et al.* (2004) propuseram métricas para quantificar o afastamento do valor das respostas ao respetivo valor alvo, enquanto Pal e Gauri (2010) propuseram uma métrica para quantificar a percentagem de unidades não-conformes, assumindo que a resposta é Normalmente distribuída. Em problemas com múltiplas respostas é exetável que as respostas apresentem como propriedades desejadas um afastamento ao valor alvo tão pequeno quanto possível, de preferência nulo, e uma baixa variabilidade em torno desse valor. Para o efeito, Costa *et al.* (2011a) introduziram três métricas que quantificam as soluções geradas em termos do afastamento do valor das respostas ao respetivo valor alvo (B_{cum}), da variância originada pela incerteza no valor dos coeficientes dos modelos de regressão das respostas (QoP) e da robustez das respostas (Rob).

O valor cumulativo do desvio das respostas ao respetivo valor alvo (B_{cum}) é definido por

$$B_{cum} = \sum_{i=1}^n W_i |\hat{y}_i^* - \theta_i| \quad (5)$$

onde \hat{y}_i^* representa o valor da i -ésima resposta ($i=1, 2, \dots, n$) no valor “ótimo” (de compromisso) das variáveis de entrada (x_i) e W_i é um parâmetro que permite tornar o valor

das respostas adimensional, sendo definido por $w = 1/(U - L)$ para respostas do tipo *STB* e *LTB* e por $w = 2/(U - L)$ para respostas do tipo *NTB*.

Para quantificar a variância originada pela incerteza no valor dos coeficientes dos modelos de regressão das respostas Costa *et al.* (2011a) sugeriram a métrica *QoP*, a qual é definida por

$$QoP = \text{trace} \left[\varphi \left(x^T \left[X^T (\Sigma \otimes I_N)^{-1} X \right]^{-1} x \right) \right] = \text{trace} \left[\varphi \sum_{\hat{y}^*(x)} \right] \quad (6)$$

onde x é uma matriz de blocos diagonal em que cada bloco é o vetor dos $k \times 1$ regressores da i -ésima resposta, X é uma matriz de blocos diagonal em que cada bloco de dimensão $N \times k$, com N igual ao número de observações da resposta, corresponde a uma resposta. O estimador para a matriz de variância-covariância Σ é calculado com base no valor dos resíduos (diferença entre o valor observado da resposta e o correspondente valor estimado) obtidos com o OLS e é determinado por $\hat{\Sigma} = \hat{\varepsilon}_i^T \hat{\varepsilon}_j / N$ com $i, j = 1, 2, \dots, n$; I_N é uma matriz identidade de dimensão $N \times N$ e \otimes representa o produto de Kronecker. Para tornar a matriz de variância-covariância das respostas médias ($\Sigma_{\hat{y}^*(x)}$) adimensional esta matriz é multiplicada pela matriz φ , cujos elementos da diagonal e não-diagonais são $\varphi_{ij} = 1/(U_i - L_i)(U_j - L_j)$, $i \neq j$ ($i, j = 1, \dots, n$), respetivamente.

A medida acima é definida no pressuposto de que o *SUR* é usado para modelar as respostas. Se a técnica *OLS* for usada deve ser utilizada a equação apresentada por Costa e Lourenço (2015). A robustez (*Rob*) é avaliada por

$$Rob = \text{trace} [\varphi \hat{\sigma}_{y^*}] \quad (7)$$

onde $\hat{\sigma}_{y^*}$ representa a matriz variância-covariância do desvio padrão das respostas no valor de compromisso das variáveis de entrada (x_i). Como se pode depreender da definição desta métrica, as experiências realizadas têm de ser replicadas para que seja possível estimar o modelo de regressão para o desvio padrão ou variância das respostas. Embora a realização de réplicas aumente o tempo e o custo dos estudos experimentais, é expectável que a melhoria na robustez das respostas compense os esforços despendidos nessa replicação.

Em contraste com as funções agregadas existentes, as três métricas apresentadas não dependem dos fatores de forma, pesos, prioridades ou custos atribuídos às respostas e são também independentes do tipo de resposta (*NTB*, *LTB* ou *STB*), da sua escala ou unidades. No que

respeita ao valor que as métricas apresentadas podem assumir, o ideal seria o valor zero. Isto significaria que o valor das respostas seria igual ao valor alvo e que a variância em torno desses valores seria nula. Na realidade esta é uma situação com uma baixa probabilidade de acontecer, pode-se mesmo dizer, praticamente impossível de acontecer em situações reais. Valores pequenos, menores do que 1 e tão próximos quanto possível do valor zero, correspondem a melhores soluções de compromisso.

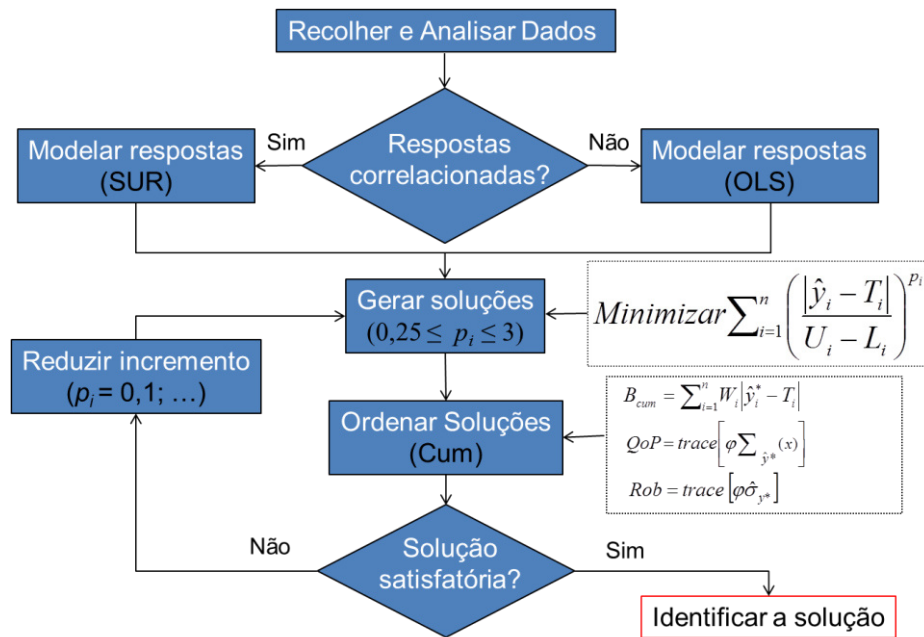
Na prática, as métricas (5-7) podem ser usadas com um triplo propósito:

- 1- Guiar o analista na procura de melhores soluções, mesmo quando a função agregada não foi concebida para ter em consideração a estrutura de variância-covariância das respostas estimadas.
- 2- Avaliar a exequibilidade das soluções, tendo por base as propriedades desejadas para as respostas, que são: B_{cum} , QoP , and Rob .
- 3- Comparar o desempenho de métodos ou soluções por eles geradas que não são diretamente comparáveis por terem sido concebidos sob diferentes abordagens. Por exemplo, os resultados de funções satisfação não são comparáveis com os resultados de funções perda, nem com os de qualquer outra abordagem existente.

A utilidade das métricas foi ilustrada por Costa *et al.* (2010b; 2011a; 2011b). De qualquer maneira, estas métricas não excluem outras de serem usadas. Um exemplo é a métrica Cum , a qual será utilizada nos exemplos apresentados na Secção 4 e é definida pela soma das métricas B_{cum} , QoP e Rob .

4.3 Metodologia - Representação esquemática

A função objetivo e as métricas apresentadas nas subsecções anteriores servem de base à metodologia de análise de prolemas com múltiplas respostas que se usará nos exemplos analisados na Secção 5 e que se representa esquematicamente no seguinte fluxograma:



5.Exemplos

A redução da variabilidade nos processos e produtos tem sido alvo de estudo por parte de muitos investigadores devido às consequências técnicas e económicas que lhe estão associadas. Ko *et al.* (2005) propuseram uma função perda que considera as três propriedades desejadas para as respostas, nomeadamente, o afastamento ao valor alvo, a variância devida à incerteza nos valores previstos e a robustez a fatores incontroláveis. Estes autores mostraram que a sua função agregada conduz a perdas menores do que aquelas que se obtêm pela utilização das funções perda propostas por Pignatiello (1993) e Vining (1998) quando a robustez e a qualidade das previsões são problemas reais. As soluções obtidas com o método proposto por Ko *et al.* (2005), que passará a ser designado de método *K*, irão servir para comparar ou “validar” as soluções geradas pelo critério apresentado na Equação (4), que passará a ser designado de método *GC*. Com este propósito serão construídos 4 casos de estudo com base naquele que foi originalmente apresentado por Myers e Montgomery (1995, p. 253) e posteriormente revisitado por Vining (1998) e Ko *et al.* (2005). O objetivo do estudo é o de determinar o valor das variáveis de entrada, o tempo de reação (x_1), a temperatura da reação (x_2) e a quantidade de catalisador (x_3) que maximizam a percentagem de conversão de um polímero (y_1) e mantêm a atividade térmica (y_2) no valor alvo.

Os quatro casos de estudo que são considerados neste artigo foram construídos de modo a simular condições de operação tanto quanto possível similares às que se encontram em casos de estudo reais, nomeadamente:

- Caso 1: Baixa variabilidade nos valores previstos para as respostas (*HQP*);
- Caso 2: Alta variabilidade nos valores previstos para as respostas (*LQP*);
- Caso 3: Baixa variabilidade nos valores previstos e respostas com diferente variabilidade devido a fatores não controláveis (*HQPUR*);
- Caso 4: Alta variabilidade nos valores previstos e respostas com diferente variabilidade devido a fatores não controláveis (*LQPUR*).

Os quatro casos descritos contemplam todas as situações que são possíveis de encontrar em problemas existentes na prática, pelo que, da sua análise, é possível ficar com um conhecimento mais detalhado das potenciais capacidades dos métodos de otimização para conduzirem os utilizadores à obtenção das melhores soluções de compromisso. Além disto, propiciam uma base para a avaliação do desempenho dos métodos que venham a ser propostos na literatura. Outros casos de estudo em que a metodologia proposta é aplicada são apresentados por Costa e Lourenço (2015) e Costa *et al.* (2011b).

Enquanto os casos 1 e 2 apenas consideram a otimização de duas respostas, os Casos 3 e 4 consideram situações de variabilidade devido a fatores não controláveis, o que significa que foram geradas réplicas de cada uma das experiências realizadas de modo a estimar os modelos de regressão para o desvio padrão da percentagem de polímero convertido ($\hat{\sigma}_1$) e da atividade térmica ($\hat{\sigma}_2$), para além dos modelos para a média de cada uma das respostas consideradas neste estudo ($\hat{\mu}_1$ e $\hat{\mu}_2$).

As experiências realizadas por Myers e Montgomery (1995), definidas por uma matriz (Desenho Compósito Central) com seis pontos centrais e seis pontos axiais, bem como as cinco réplicas geradas para construir os 4 casos de estudo, são apresentadas no Apêndice A – Tabela A.1. As réplicas foram geradas com o modelo utilizado por Ko *et al.* (2005), em que

$$\begin{pmatrix} y_{1i}(x) \\ y_{2i}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \end{pmatrix} + e_i \quad (8)$$

onde $y_1(x)$ and $y_2(x)$ representam os valores das respostas obtidos por Myers e Montgomery (2002), realçados a negrito (**bold**) no Apêndice A – Tabela A.1. O erro (e_i) é definido por

$$e_i \sim N \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_{11}(x) & \sigma_{12}(x) \\ \sigma_{21}(x) & \sigma_{22}(x) \end{pmatrix} \right] \quad (9)$$

com $\sigma_{11}(x) = \exp(3 - x_1^2 - 3x_3^2)$, $\sigma_{12}(x) = \sigma_{21}(x) = 0,03\sigma_{11}(x)\sigma_{22}(x)$ e $\sigma_{22}(x) = \exp(2 - 2x_1^2 - x_3^2)$. Estes modelos de σ_{ij} fazem com que a variância das respostas devida a fatores incontrolláveis seja maior para valores de x_j ($j=1,2,3$) próximos de zero [$x_j=(0,0,0)$], podendo x_j assumir os seguintes valores: $-1,682 \leq x_j \leq 1,682$. Assim, quanto mais próximo da origem estiverem os valores de x_j , menor será a robustez das respostas.

Para ter em conta a correlação entre as respostas, os modelos de regressão foram estimados com a técnica *SUR*, a qual é revista no Apêndice B. No que respeita aos coeficientes de custo e aos fatores de forma associados às respostas nos métodos em avaliação, a definição dos seus valores foi a seguinte:

- A gama de valores para os coeficientes de custo usados na função perda proposta por Ko *et al.* (2005) foi definida de modo a que os valores máximos e mínimos dos coeficientes fossem realistas, ou seja, que fizesse sentido a sua utilização de um ponto de vista prático e incluíssem os valores utilizados por Ko *et al.* (2005). Os valores testados nos quatro casos de estudo foram os seguintes: $c_1 = \{0,01; 0,02; \dots; 0,2\}$, $c_2 = \{0,3; 0,4; \dots; 0,8\}$ e $c_{12} = \{0,01; 0,02; 0,03; 0,04\}$.
- Os fatores de forma (p_i) assumem valores entre 0,25 e 4,0 com incrementos de 0,25 unidades nos Casos 1 e 2, enquanto nos Casos 3 e 4 a gama de valores foi restringida ao conjunto $\{1; 1,25; \dots; 2\}$ de modo a limitar o número de soluções geradas, mantendo esse número próximo do número de soluções geradas com o método K, e também porque análises preliminares com valores de p_i a variar entre $\{0,25; 0,5; \dots; 1\}$ e $\{2; 2,25; \dots; 4\}$ não revelaram alterações nos resultados (melhorias nas propriedades das soluções geradas).

A avaliação e comparação de resultados foram feitas com base nas métricas definidas pelas Equações (5-7) e no valor cumulativo dessas métricas, que se denomina por *Cum*.

5.1 Casos de estudo

Caso 1: *Baixa variabilidade nos valores previstos para as respostas (HQP)*

Os modelos da média da percentagem de conversão do polímero e da atividade térmica no caso de baixa variabilidade nos valores previstos para as respostas são os seguintes:

$$\hat{\mu}_1 = 81,9305 + 1,0290 x_1 + 4,1058 x_2 + 6,2060 x_3 - 1,6301 x_1^2 + 2,9639 x_2^2 - 5,1896 x_3^2 + 2,0288 x_1 x_2 + 11,3657 x_1 x_3 - 3,7974 x_2 x_3$$

$$\hat{\mu}_2 = 60,5100 + 3,5855 x_1 + 2,2312 x_3$$

Neste caso a robustez das duas respostas é considerada constante e igual, o que faz com que o método K dê resultados iguais ao do método de Vining (1998), uma vez que este método é um caso especial do método K . Para que $\hat{\mu}_2$ fique tanto quanto possível perto do respetivo valor alvo e $\hat{\mu}_1$ se mantenha dentro dos limites de especificação, Vining atribuiu a $\hat{\mu}_2$ um coeficiente de custo superior a $\hat{\mu}_1$. Nesta condição, o método K gerou a solução K11 que se apresenta na Tabela 1. Esta solução é ligeiramente melhor do que todas as outras soluções geradas por este método em termos dos valores do B_{cum} , QoP and Cum . Uma alternativa à solução K11 é a solução K31. Esta solução foi obtida sem haver a necessidade de atribuir valores elevados a $\hat{\mu}_2$, o que justifica a significativa diferença no valor da função perda (E_{Loss}) destas duas soluções. Este resultado põe em evidência um dos pontos fracos das funções perda existentes na literatura, que é o de a mesma solução poder originar valores de perda significativamente diferentes, tal como se mostra na Tabela 1. Isto não é surpreendente, porque o valor da função perda depende dos coeficientes de custo atribuídos às respostas. Por conseguinte, nos Casos 2-4 o seu valor não é apresentado. De qualquer maneira, é interessante notar que a solução K21, que foi obtida pelo método K com os coeficientes de custo utilizados por Ko *et al.* (2005), nomeadamente, $c_1 = 0,1$, $c_{12} = 0,025$ e $c_2 = 0,5$, originaria perdas maiores e piores valores do B_{cum} e Cum do que as soluções K11 e K31, confirmando que coeficientes de custo inadequadamente definidos levam à geração de soluções menos favoráveis.

No que respeita às soluções geradas pelo método GC com a gama de valores do fator de forma atrás definidos, é possível constatar na Tabela 1 que as soluções GC11 e GC31 produzem valores de B_{cum} e Cum menores do que qualquer uma das soluções geradas pelo método K . Ao atribuir-se valores maiores ao fator de forma p_2 foi possível gerar soluções com valores de QoP ligeiramente menores, de que é exemplo a solução GC21. Porém, esta solução tem piores valores de B_{cum} e Cum do que GC11 e GC31, ainda assim melhores do que os da solução K51, a qual tem um valor de QoP similar. Além disto, na Tabela 1 é possível constatar que as soluções com os melhores valores nas funções agregadas, E_{Loss} e CP , não são as soluções com melhores valores de B_{cum} , QoP

Tabela 1: Resultados – HQP

Método K							
Solução	c_i	x_i	$\hat{\mu}_1; \hat{\mu}_2$	Resultado	B_{cum}	QoP	Cum
K11	(1,0; 0,00; 100,0)	(-0,5112; 1,682; -0,5125)	95,23; 57,53	$E_{Loss} = 51,20$	0,490	0,029	0,519
K21	(0,1; 0,025; 0,50)	(-0,4150; 1,682; -0,4732)	95,25; 57,97	$E_{Loss} = 3,17$	0,661	0,027	0,688
K31	(0,01; 0,01; 0,80)	(-0,4971; 1,682; -0,5078)	95,23; 57,59	$E_{Loss} = 0,47$	0,514	0,029	0,543
K41	(0,01; 0,04; 0,30)	(-0,3878; 1,682; -0,4210)	95,27; 58,18	$E_{Loss} = 0,23$	0,746	0,026	0,771
K51	(0,20; 0,04; 0,30)	(-0,1017; 1,682; -0,2359)	95,78; 59,62	$E_{Loss} = 5,62$	1,270	0,022	1,291
Método GC							
Solução	β_i	x_i	$\hat{\mu}_1; \hat{\mu}_2$	Resultado	B_{cum}	QoP	Cum
GC11	(1,00; 1,00)	(-0,4971; 1,682; -0,5503)	95,25; 57,50	CP = 0,24	0,475	0,030	0,505
GC21	(0,75; 4,00)	(-0,2215; 1,682; -0,3388)	95,48; 58,96	CP = 0,34	1,036	0,023	1,059
GC31	(2,50; 1,25)	(-0,4970; 1,682; -0,5503)	95,25; 57,50	CP = 0,03	0,475	0,030	0,505

e *Cum*, o que acontece, por exemplo, com as soluções K11, K31, GC11 e GC31.

Este caso de estudo é um exemplo paradigmático de que a seleção/identificação de uma solução de compromisso, mesmo em situações de baixa variabilidade nos valores estimados para as respostas, não deve ser feita pela simples análise do valor da função agregada e que decisões mais fundamentadas são possíveis quando se avaliam as soluções geradas com base nas métricas sugeridas.

Caso 2: Alta variabilidade nos valores previstos para as respostas (LQP)

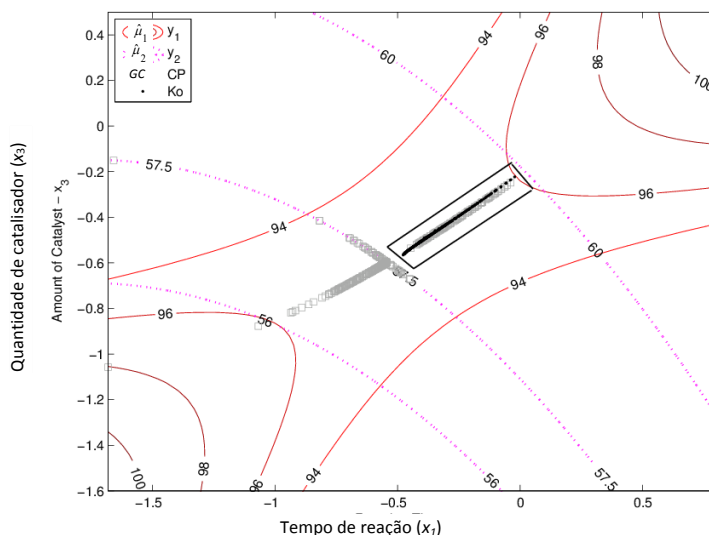
De modo a introduzir variabilidade nos valores das respostas geradas, foram adicionados regressores estatisticamente insignificativos ($x_2, x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3$) no modelo definido para a atividade térmica ($\hat{\mu}_2$) de modo a que as soluções geradas tivessem uma maior variabilidade (maiores valores na métrica *QoP*) quando os valores de x_i estão mais afastados da origem. Os coeficientes de custo e os fatores de forma foram mantidos iguais aos do caso anterior.

No que respeita aos resultados, também não existem diferenças significativas a assinalar comparativamente ao Caso 1, sendo as soluções de compromisso geradas pelos métodos *K* e *GC* mostradas na Figura 1. Importa salientar que as soluções apresentadas na Figura 1 são aquelas em que $x_2 = 1,682$, e que representam a quase totalidade das soluções geradas por ambos os métodos.

A observação da Figura 1 permite constatar uma diferença notória entre o conjunto de soluções gerado por cada um dos métodos. Enquanto o método *GC* gerou soluções com $56 < \hat{\mu}_2 < 60$, o

método K gerou soluções com $\hat{\mu}_2 > 57,5$. A região da Figura 1 delimitada por um retângulo evidencia soluções que são geradas pelos dois métodos e permite mais facilmente constatar que nenhum dos métodos gera soluções com valores de $\hat{\mu}_1$ e $\hat{\mu}_2$ iguais ao respectivo valor alvo. De fato, as respostas estão em conflito, ou seja, melhorias no valor de $\hat{\mu}_1$ conduzem a degradações no valor de $\hat{\mu}_2$ e vice-versa.

Figura 1 – Alta variabilidade nos valores previstos (LQP)



Os resultados apresentados na Tabela 2 permitem constatar que as soluções com menores valores na métrica B_{cum} têm associados piores (maiores) valores na métrica QoP , ou seja, diminuir o afastamento das respostas ao respectivo valor alvo conduz a uma degradação na qualidade dos valores estimados para as respostas. De qualquer maneira, é interessante notar que os melhores valores nas métricas B_{cum} e Cum correspondem aos de uma solução gerada pelo método GC, a solução GC12, embora o valor da métrica QoP seja, marginalmente, menos favorável.

Tabela 2: Resultados – LQP

Método K						
Solução	c_i	x_i	\hat{y}_1, \hat{y}_2	B_{cum}	QoP	Cum
K12	(0,02; 0,01; 0,80)	(-0,4776; 1,682; -0,5654)	95,19; 57,73	0,572	0,065	0,637
K22	(0,01; 0,04; 0,80)	(-0,4299; 1,526; -0,4871)	92,95; 57,97	0,892	0,046	0,938
Método GC						
Solução	p_i	x_i	\hat{y}_1, \hat{y}_2	B_{cum}	QoP	Cum
GC12	(1,25; 1,00)	(-0,5436; 1,682; -0,5982)	95,21; 57,50	0,479	0,069	0,548
GC22	(0,25; 0,25)	(-0,7670; 0,721; -0,2139)	83,40; 57,50	1,660	0,017	1,677
GC32	(0,75; 4,00)	(-0,1558; 1,682; -0,3342)	95,58; 59,14	1,096	0,052	1,148

Assumindo-se que uma solução é melhor do que outra se a variabilidade (QoP) e o valor do afastamento das respostas ao respectivo valor alvo (B_{cum}) forem menores, então os resultados dos Casos 1 e 2 fornecem evidências que nenhum dos dois métodos consegue gerar soluções com melhores propriedades do que o outro. De fato, com os coeficientes de custo e fatores de forma utilizados, nenhuma das soluções geradas apresenta valores mais baixos em todas as métricas.

Caso 3: Baixa variabilidade nos valores previstos e respostas com diferente variabilidade devido a fatores não-controláveis (HQPUR)

Neste caso foram geradas réplicas para cada uma das experiências realizadas, sendo os modelos da média ($\hat{\mu}_i, i=1,2$) e do desvio padrão ($\hat{\sigma}_i$) das respostas os seguintes:

$$\hat{\mu}_1 = 81,7863 + 0,8234 x_1 + 4,1361 x_2 + 6,2127 x_3 + 1,9954 x_1^2 + 2,8346 x_2^2 - 5,5585 x_3^2 + 1,6981 x_1 x_2 + 11,4114 x_1 x_3 - 3,8694 x_2 x_3$$

$$\hat{\sigma}_1 = 4,4903 - 1,2366 x_1^2 - 0,8904 x_2^2 - 1,6466 x_3^2$$

$$\hat{\mu}_2 = 60,7977 + 3,5894 x_1 + 2,1794 x_3$$

$$\hat{\sigma}_2 = 2,0583 - 0,6512 x_1^2 - 0,7015 x_3^2$$

Os limites da especificação para $\hat{\sigma}_1$ e $\hat{\sigma}_2$ são $0 \leq \hat{\sigma}_1 < 10$ e $0 \leq \hat{\sigma}_2 < 5$, respectivamente, sendo o valor alvo igual a zero. Os coeficientes de custo são os mesmos dos Casos 1 e 2, enquanto o conjunto de valores para os fatores de forma p_i ficou limitado aos valores $\{1; 1,25; \dots; 2\}$ pelas razões já enunciadas.

No que respeita aos resultados, a Tabela 3 mostra que as soluções K13 and GC13 são similares, apresentando os menores valores nas métricas B_{cum} e Cum . Estas e outras soluções similares são delimitadas por uma elipse nas Figuras 2-5. Em termos da métrica QoP não existem diferenças significativas entre as soluções geradas por qualquer dos métodos, porque neste caso de estudo as soluções foram geradas no pressuposto de que a variabilidade nos valores previstos seria baixa.

A principal diferença está ao nível da robustez das soluções. De fato, todas as soluções geradas pelo método GC apresentam valores de $\hat{\sigma}_1 \leq 1$ e a maior parte das soluções tem $\hat{\sigma}_2 \leq 1,5$, enquanto as soluções geradas pelo método K apresentam valores de $\hat{\sigma}_2 \geq 1,5$ e aproximadamente metade delas têm $\hat{\sigma}_1 \geq 1$ (ver Figuras 3 e 5). Em particular, a solução GC33 é a mais robusta de todas as soluções geradas pelos dois métodos, o que se justifica por ter

valores de x_1 e x_3 mais afastados da origem. Esta solução e outras com maior robustez (menores valores na métrica *Rob*) estão delimitadas nas Figuras 4-5 por um quadrado, distinguindo-se claramente das que têm melhores (menores) valores nas métricas B_{cum} , que estão delimitadas por uma elipse. Exemplos de soluções com melhores (menores) valores nas métricas B_{cum} e Cum do que GC33 são as soluções GC13, GC23, K13 e K33.

Tabela 3: Resultados – HQPUR

Método K								
Solução	c_i	x_i	$\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2$	$\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$	B_{cum}	QoP	Rob	Cum
K13	(0,01; 0,02; 0,80)	(-0,4562; 1,682; -0,7608)	95,64; 57,50	0,76; 1,52	1,196	0,027	0,070	1,293
K23	(0,2; 0,04; 0,30)	(-0,4795; 1,682; -0,5082)	96,03; 57,97	1,26; 1,73	1,527	0,024	0,084	1,635
K33	(0,01; 0,01; 0,80)	(-0,4694; 1,682; -0,7650)	95,67; 57,45	0,74; 1,50	1,204	0,027	0,069	1,300
Método GC								
Solução	p_i	x_i	$\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2$	$\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$	B_{cum}	QoP	Rob	Cum
GC13	(2,0; 1,0; 1,75; 1,0)	(-0,3654; 1,682; -0,9114)	94,60; 57,50	0,44; 1,39	1,183	0,030	0,061	1,273
GC23	(1,0; 1,0; 2,0; 2,0)	(-0,5294; 1,682; -0,6414)	96,03; 57,50	0,95; 1,59	1,221	0,026	0,075	1,322
GC33	(1,0; 2,0; 1,0; 1,0)	(-0,7546; 1,682; -0,8772)	96,39; 56,18	0,00; 1,15	1,350	0,034	0,046	1,430

Figura 2 – Método K: HQPUR – Médias

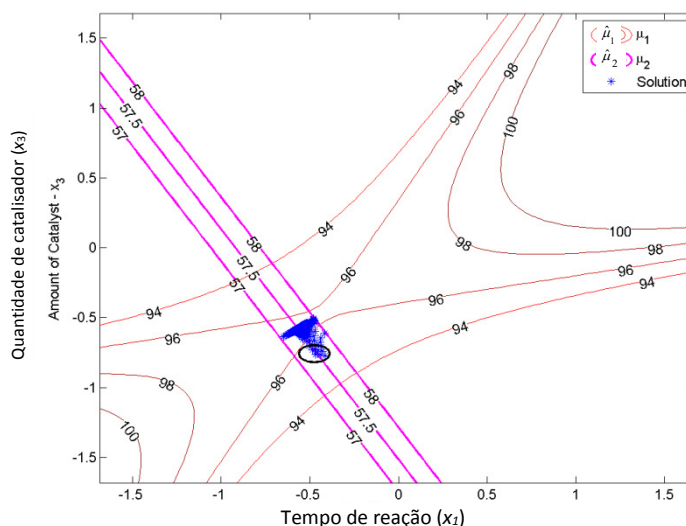


Figura 3 – Método K: HQPUR – desvios padrão

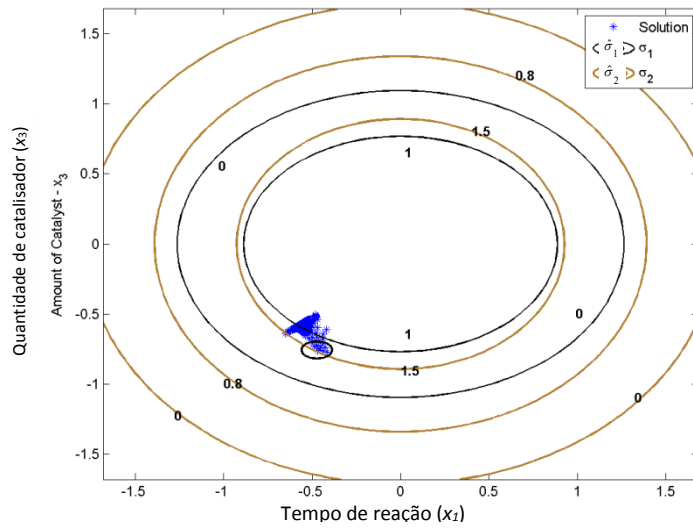


Figura 4 – Método GC: HQPUR – Médias

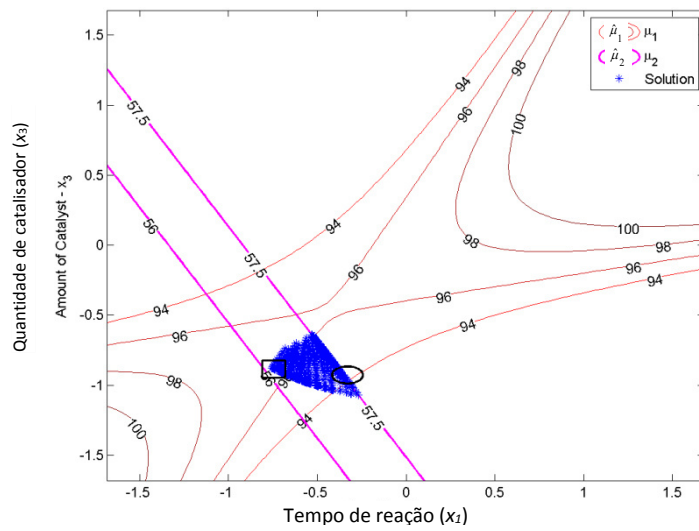
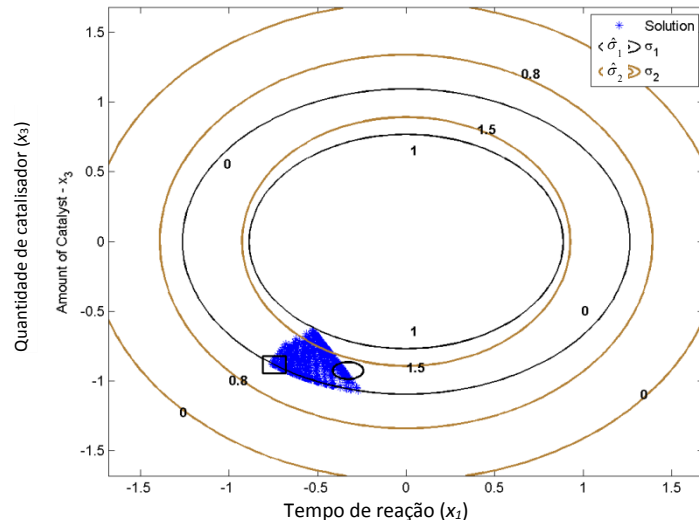


Figura 5 – Método GC: HQPUR – desvios padrão



Neste caso de estudo, tal como na generalidade dos problemas com múltiplas respostas, é evidente a necessidade de definir compromissos. A robustez e o afastamento ao valor alvo são duas propriedades em conflito, ou seja, melhorar uma implica degradar o valor da outra. Por conseguinte, compete ao decisor escolher o “melhor” compromisso. Uma alternativa é escolher a solução com o menor valor da métrica *Cum*.

Caso 4: Alta variabilidade nos valores previstos e respostas com diferente variabilidade devido a fatores não-controláveis (LQPUR)

À semelhança do Caso 2, regressores sem significância estatística foram incluídos no modelo de regressão da atividade térmica ($\hat{\mu}_2$). Isto faz com que os valores da métrica *QoP* sejam maiores (piores) quando os valores das variáveis x_i estão mais afastados da origem. Em contrapartida, a robustez das respostas será maior.

Os modelos estimados para as respostas são os seguintes:

$$\begin{aligned} \hat{\mu}_1 &= 81,8380 + 0,8234 x_1 + 4,0717 x_2 + 6,2127 x_3 - 2,1774 x_1^2 + 2,8731 x_2^2 - 5,4906 x_3^2 \\ &\quad + 1,7698 x_1 x_2 + 11,4084 x_1 x_3 - 3,9496 x_2 x_3 \\ \hat{\sigma}_1 &= 4,5033 - 1,2540 x_1^2 - 0,8972 x_2^2 - 1,6415 x_3^2 \\ \hat{\mu}_2 &= 60,6935 + 3,5894 x_1 + 0,3042 x_2 + 2,1799 x_3 + 0,5301 x_1^2 - 0,1719 x_2^2 - 0,2055 x_3^2 \\ &\quad - 0,3381 x_1 x_2 + 0,0124 x_1 x_3 + 0,3714 x_2 x_3 \\ \hat{\sigma}_2 &= 2,0935 - 0,7300 x_1^2 - 0,6744 x_3^2 \end{aligned}$$

Os limites e os valores alvo para $\hat{\sigma}_1$ e $\hat{\sigma}_2$, os coeficientes de custo e os fatores de forma são os mesmos que foram utilizados no Caso 3.

Este caso de estudo simula as condições de operação mais severas que são possíveis encontrar em casos reais, ou seja, a variabilidade nos processos e/ou produtos tem origem em fatores não-controláveis e na incerteza associada aos valores previstos. Nestas condições de variabilidade, as Figuras 6-7 mostram diferenças na forma, posicionamento e direção da mancha de soluções geradas por cada um dos métodos.

A Figura 7 mostra que o método *K* gera um conjunto de soluções dispostas numa linha reta caracterizada por valores de $\hat{\sigma}_1 \geq 1$ e $\hat{\sigma}_2 > 1,5$, enquanto as soluções geradas pelo método *GC* apresentam valores de $\hat{\sigma}_1 \leq 1$ e $\hat{\sigma}_2 \leq 1,5$. As soluções do método *GC* estão dispostas numa forma de funil direcionado para a zona onde estão as soluções mais robustas. Esta área é delimitada na Figura 7 por uma linha fechada tracejada. À semelhança do Caso 3, o método *K* não

conseguiu gerar soluções com um valor na métrica *Rob* tão pequeno quanto aquele que o método *GC* gerou. De fato, o menor valor na métrica *Rob* ($Rob = 0,039$) é o da solução *GC24*, conforme se pode confirmar na Tabela 4. Esta e outras soluções similares estão delimitadas por uma elipse nas Figuras 6-7.

A incapacidade do método *K* de gerar soluções tão robustas quanto as que são geradas pelo método *GC* é uma limitação relevante. De qualquer maneira, importa ter presente que o desempenho de um método ou a qualidade das soluções geradas não pode ser avaliada apenas com base numa das propriedades desejadas para as respostas. Os valores das métricas *QoP*, *B_{cum}* e *C_{um}* devem também ser considerados nessa avaliação.

Figura 6 - LQPUR – Médias

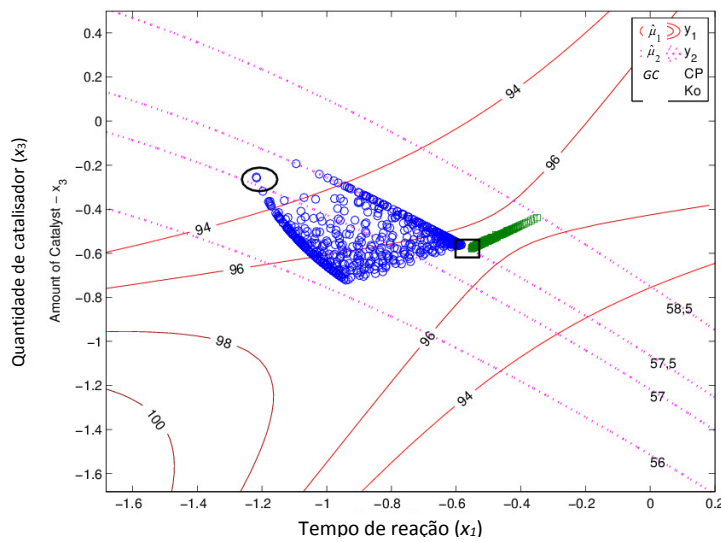


Figura 7 - LQPUR – Desvios padrão

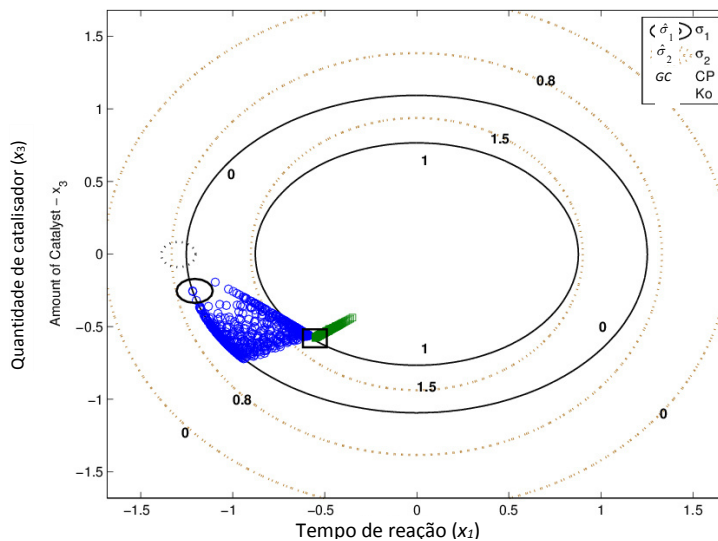


Tabela 4: Resultados – LQPUR

Método <i>K</i>								
Solução	c_i	x_i	$\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2$	$\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$	B_{cum}	<i>QoP</i>	<i>Rob</i>	<i>Cum</i>
K14	(0,20; 0,01; 0,80)	(-0,5516; 1,682; -0,5772)	96,11; 57,53	1,04; 1,65	1,267	0,063	0,078	1,408
K24	(0,01; 0,04; 0,80)	(-0,5493; 1,497; -0,4990)	93,18; 57,82	1,75; 1,71	1,843	0,042	0,089	1,975
K34	(0,01; 0,01; 0,80)	(-0,5934; 1,516; -0,5450)	93,70; 57,57	1,51; 1,64	1,614	0,047	0,084	1,745
Método <i>GC</i>								
Solução	p_i	x_i	$\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2$	$\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$	B_{cum}	<i>QoP</i>	<i>Rob</i>	<i>Cum</i>
GC14	(1,25; 1,0; 1,5; 1,25)	(-0,6254; 1,682; -0,5290)	96,05; 57,50	1,02; 1,62	1,246	0,064	0,077	1,387
GC24	(2,0; 1,0; 1,0; 1,0)	(-1,2176; 1,682; -0,2540)	92,24; 57,11	0,00; 0,97	1,321	0,095	0,039	1,455
GC34	(1,0; 2,0; 1,0; 2,0)	(-0,9405; 1,682; -0,7221)	96,51; 56,22	0,00; 1,10	1,298	0,089	0,044	1,431

No que respeita ao afastamento das respostas ao respetivo valor alvo, quantificado pela métrica B_{cum} , a Figura 6 mostra que ambos os métodos geraram soluções com valores elevados de $\hat{\mu}_1$, mantendo $\hat{\mu}_2$ no valor alvo. Em particular, a Tabela 4 mostra que a solução GC14 é a que tem o melhor (menor) valor de B_{cum} entre todas as soluções geradas pelos dois métodos. Além disto, esta solução tem também o melhor (menor) valor na métrica *QoP* entre as soluções geradas pelo método *GC*. Esta e outras soluções com propriedades similares estão delimitadas por um retângulo nas Figuras 6-7. O inconveniente nestas soluções é a maior variabilidade introduzida por fatores não-controláveis, que se traduz num maior valor na métrica *Rob*, pondo em evidência o conflito entre estas duas propriedades; o afastamento do valor das respostas ao valor alvo, expresso pela métrica B_{cum} , e a robustez das soluções, expresso pela métrica *Rob*.

Em termos dos valores da métrica *QoP*, o método *K* gerou melhores soluções, sendo a solução K24 a melhor delas. Porém, os valores nas métricas B_{cum} , *Rob*, *Cum* e variância total ($QoP + Rob$) são piores do que os das soluções apresentadas na Tabela 4. Observando os valores da métrica *Cum* na Tabela 4, pode-se afirmar que não existem diferenças significativas entre as melhores soluções geradas pelos dois métodos. De qualquer maneira, a solução GC14 é ligeiramente melhor do que todas as outras, além de apresentar o melhor valor nas métricas B_{cum} e *Rob*.

6. Discussão de resultados

A otimização de múltiplas respostas e, em particular, da média e do desvio padrão dessas respostas, tem sido um tipo de problema estudado ao longo das últimas três décadas no contexto da *RSM* porque é recorrente em contextos industriais e está diretamente relacionado com o

desempenho dos processos e dos produtos. Conforme se mostrou nos exemplos, as funções agregadas geram novas soluções quando se alteram os denominados parâmetros de preferência (pesos, coeficientes de custo, fatores de forma, etc.) mas pouco se sabe sobre como devem ser escolhidos e alterados esses valores. Saber que alterações devem ser feitas aos valores dos parâmetros de preferência e quais os valores das respostas que irão ser modificados, a direção e magnitude dessa mudança é extremamente difícil, senão mesmo impossível.

Os parâmetros de preferência assumem, em geral, valores adimensionais. Porém, nas funções perda os coeficientes de custo são especificados em unidades monetárias. Nos quatro casos de estudo apresentados foi utilizado um conjunto de valores para os coeficientes de custo onde se incluíam os valores originalmente usados por Vining (1998) e Ko *et al.* (2005), tendo-se obtido soluções de compromisso com valores de perda menores para coeficientes de custo significativamente diferentes daqueles usados pelos autores citados.

Os coeficientes de custo estão, por natureza, diretamente relacionados com o processo e/ou produtos em estudo mas podem não estar prontamente disponíveis ou serem fáceis de definir/obter (Vining, 1998; Ko *et al.*, 2005). Se, por um lado, especificar gamas de variação grandes para os coeficientes de custo pode não fazer sentido de um ponto de vista teórico-prático, por outro, gamas de variação muito pequenas poderão conduzir à obtenção de soluções menos favoráveis do que seria possível de obter. Isto significa que definir valores para os coeficientes de custo não é uma tarefa fácil.

Definir gamas de valores para os coeficientes de custo não tem sido uma prática corrente na literatura, embora este procedimento possa ser vantajoso para ter em consideração a definição/identificação menos exata desses valores. Nos casos de estudo apresentados, foi estabelecida uma gama de variação para os coeficientes de custo suficientemente ampla, mas não exageradamente grande que deixasse de fazer sentido de um ponto de vista teórico-prático. Assim, foi possível adquirir um conhecimento mais detalhado das potencialidades do método *K* para gerar soluções competitivas comparativamente às que foram geradas pela abordagem alternativa apresentada. As Figuras 1-7 mostram que a mancha de soluções geradas por este método não é igual à que foi gerada pelo método *GC*, embora não tenham sido identificadas diferenças significativamente diferentes entre as melhores soluções de compromisso geradas por ambos os métodos com os valores dos coeficientes de custo e fatores de forma utilizados. Uma gama de valores maior para os coeficientes de custo poderia conduzir a diferentes resultados mas não seria fácil justificar o seu valor, tendo em consideração que estes coeficientes têm um significado muito próprio e específico para cada problema. Por exemplo, se o custo por unidade de afastamento ao valor alvo de uma resposta é de 0,01 não é fácil

justificar a atribuição de um valor 10 a esse coeficiente. Além disto, existe uma dificuldade adicional na utilização de funções perda e na necessária definição da gama de valores para os coeficientes de custo que está relacionada com o fato do valor dos coeficientes se alterar de um problema para o outro, ao contrário do que acontece com os fatores de forma requeridos para a utilização do método *GC*. Os resultados dos Casos 1-4 e de outros casos de estudo analisados pelos autores (Costa e Lourenço, 2014; 2015; Costa *et al.* 2011b; 2011c; 2012) dão indicações que, para problemas similares àqueles apresentados neste artigo, não será muito vulgar ter necessidade de variar os valores de p_i em incrementos menores do que 0,01 unidades e utilizar valores maiores do que 3. Por exemplo, no Caso 4, onde são simuladas condições de operação adversas em termos de variabilidade (HQPUR), apenas foi necessário variar os valores de p_i entre 1 e 2 em incrementos de 0,25 unidades para obter uma solução de compromisso satisfatória em termos do valor da métrica *Cum*. Em termos de tempo computacional, os valores são negligenciáveis (inferiores a 30 segundos) para correr a rotina de otimização no software Matlab[®]. Alterações na gama de valores e incrementos utilizados apenas dependem do nível de satisfação do decisor com as soluções de compromisso geradas.

Está descrito na literatura que métodos estruturados na forma de somas de quadrados ponderadas, tal como é a função perda proposta por Ko *et al.* (2005), ou outra forma de funções agregadas que fixem ou limitem a alteração aos valores dos expoentes das funções que se pretendem otimizar, ou da própria função agregada, não conseguem captar todas as soluções de compromisso não-dominadas quando a convexidade da superfície de todas as respostas não é assegurada (Messac e Ismail-Yahaya, 2001). O método *GC* não tem esta limitação e consegue gerar soluções não-dominadas (Chen *et al.*, 1999; Messac *et al.*, 2000), particularmente em problemas como os que foram aqui analisados. Os quatro casos de estudo fornecem evidências de que o método *GC* é suficientemente flexível para gerar soluções em que o afastamento do valor das respostas ao respetivo valor alvo e a variância dessas múltiplas respostas são satisfatórios. Em particular, as Figuras 3, 5 e 7 mostram que o método *GC* gerou as soluções com o menor valor na métrica *Rob*, o que é relevante porque a falta de robustez é um problema frequente e crítico para aqueles que estão envolvidos na melhoria contínua dos processos e dos produtos. Porém, nenhuma das soluções apresentadas nas Tabelas 1-4 tem um melhor valor em todas as métricas (B_{cum} , QoP , Rob) do que as outras. O afastamento do valor alvo e a variabilidade estão em conflito, tal como era esperado, sendo usual em situações reais, o que poderá complicar o processo de seleção da solução de compromisso. Em algum momento o

decisor terá de optar. Em caso de indefinição a escolha da solução poderá ser feita com base no menor valor da métrica *Cum*.

7. Conclusões

Uma das formas que as empresas têm para se diferenciar da concorrência é adotar práticas e metodologias que, estando devidamente testadas, validadas e sendo de fácil entendimento e implementação, ainda estão pouco disseminadas. Dúvidas sobre as vantagens e eficiência dessas práticas e metodologias têm sido levantadas por quem não está devidamente documentado/informado, pelo que os responsáveis das empresas devem desencadear esforços para eliminar as resistências que possam ocorrer à sua introdução e formar ou admitir recursos competentes para as selecionar e utilizar (Owen *et al.*, 2003; Bergquist e Albing, 2006; Tanco *et al.*, 2010). Assim, será possível às empresas progredirem mais rapidamente e no sentido em que a Gestão da Qualidade nas organizações irá evoluir, conforme delineado por Saraiva *et al.* (2010).

Neste artigo é abordado um dos assuntos menos explorado na metodologia da superfície de respostas, a otimização simultânea de múltiplas respostas, e ilustram-se as potencialidades do método *GC* para gerar soluções de compromisso em situações onde existem condições adversas de operação em termos de variabilidade. As soluções geradas por este método foram comparadas com as de uma função perda que integra na função agregada todas as propriedades desejadas para as respostas. Para o efeito foram utilizados quatro casos de estudo construídos para simular, tanto quanto possível, situações reais e expor as vantagens que decorrem da utilização das métricas de avaliação sugeridas em alternativa à seleção da solução de compromisso com base no valor da função agregada.

Nos quatro casos de estudo apresentados, a representação gráfica das soluções geradas facilitou a análise do desempenho dos métodos, tendo sido possível concluir que os métodos geram conjuntos de soluções diferentes, embora ambos tenham gerado algumas soluções equivalentes em termos das propriedades desejadas para as respostas. Porém, a escolha mais simples e expedita dos fatores de forma no método *GC* é um elemento de diferenciação relevante quando se comparam os dois métodos. Além disto, a gama de valores para os fatores de forma sugerida neste artigo, valores de p_i menores ou igual a três, provou ser eficaz e permitiu obter um conjunto diversificado de soluções com diferentes propriedades que permitirão ao decisor identificar a melhor solução de compromisso, tendo em consideração questões técnicas e/ou económicas. Em contraste com outros métodos, a gama de valores não é dependente do

problema em estudo, do seu contexto ou da sensibilidade do analista/decisor, tal como acontece quando se utiliza uma função perda, o que nos permite sugerir a aplicação do método *GC* em casos de estudo reais desenvolvidos no âmbito da metodologia da superfície de respostas. Em futuros trabalhos pretende-se mostrar que o método *GC*, em contraste com outros métodos frequentemente utilizados, tem também a potencialidade de gerar soluções não-dominadas uniformemente distribuídas ao longo da denominada fronteira de Pareto, além de se confirmar que a gama de valores para os fatores de forma usada neste artigo se manterá válida.

Referências Bibliográficas

- Almeida, A., Almeida, J., Costa, A. Almeida-Filho, A. (2016). A new method for elicitation of criteria weights in additive models: Flexible and interactive trade off. *European Journal of Operational Research*, 250: 179-191.
- Alves, M., Clímaco, J. (2007). A review of interactive methods for multiobjective integer and mixed-integer programming. *European Journal of Operational Research*, 180: 99-115.
- Anderson, M., Whitcomb, P. (2005). *RSM Simplified: Optimizing processes using response surface methods for design of experiments*. Productivity Press, USA, Minneapolis, MN.
- Antony J, Coleman S, Montgomery D, Anderson M, Silvestrini R. (2011). Design of Experiments for Non-Manufacturing Processes: Benefits, Challenges and Some Examples. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture*, 225: 2078-2087.
- Ardakani, M., Wulff, S. (2013). An Overview of Optimization Formulations for Multiresponse Surface Problems. *Quality and Reliability Engineering International*, 29: 3-16.
- Ayvaz, M., Kayhan, A., Ceylan, H., Gurarlan, G. (2009). Hybridizing the harmony search algorithm with a spreadsheet ‘Solver’ for solving continuous engineering optimization problems. *Engineering Optimization*, 41, 1119-1144.
- Beasley, M. (2008). Seemingly unrelated regression models as a solution to path analytic models with correlated errors. *Multiple Linear Regression Viewpoints*, 34: 1-7.
- Bergquist, B., Albing, M. (2006). Statistical methods – does anyone really use them? *Total Quality Management & Business Excellence*, 17: 961-972.
- Box, G., Hunter, J., Hunter, W. (2005). *Statistics for experimenters: design, innovation, and discovery* (2nd Ed.), New Jersey: John Wiley & Sons.
- Chapman, J., Lu, L., Anderson-Cook, C. (2014). Process Optimization for Multiple Responses Utilizing the Pareto Front Approach. *Quality Engineering*, 26: 253-268.
- Chen, W., Wiecek, M., Zhang, J. (1999). Quality utility: a compromise programming approach to robust design. *Journal of Mechanical Design*, 121: 179-187
- Cheng, S., Li, M. (2015). Robust optimization using hybrid differential evolution and sequential quadratic programming. *Engineering Optimization*, 47: 87-106.
- Ch’ng, C., Quah, S., Low, H. (2005). A new approach for multiple-response optimization. *Quality Engineering*, 17: 621-626.
- Costa, N. (2010a). Simultaneous optimization of mean and standard deviation. *Quality Engineering*, 22: 140-149.
- Costa, N. (2010b). Multiple response optimization: methods and results. *International Journal of Industrial and Systems Engineering*, 5: 442-459.
- Costa, N., Lourenço, J. (2014). A Comparative Study of Multiresponse Optimization Criteria Working Ability. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 138: 171-177.
- Costa, N., Lourenço, J. (2015). On the generation and selection of solutions to multiple response problems. *International Journal of Industrial and Systems Engineering*, 20: 437-456.
- Costa, N., Lourenço, J. (2016). Gaussian Process Model - An Exploratory Study in the Response Surface Methodology. *Quality and Reliability Engineering International*, in press, doi: 10.1002/qre.1940.
- Costa, N., Lourenço, J., Pereira, Z. (2011b). Desirability function approach: A review and performance evaluation in adverse conditions. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 107: 234-244.
- Costa, N., Lourenço, J., Pereira, Z. (2011c). Multiresponse optimization and Pareto frontiers. *Quality and Reliability Engineering International*, 28: 701-712.
- Costa, N., Lourenço, J., Pereira, Z. (2012). Responses Modeling and Optimization Criteria Impact on the Optimization of Multiple Quality Characteristics. *Computers & Industrial Engineering*, 62, 972-935.
- Costa, N., Pereira, Z. (2010). Multiple response optimization: a global criterion-based method. *Journal of Chemometrics*, 24: 333-342.

- Costa, N., Pereira, Z., Tanco, M. (2010b). Optimization Measures for Assessing Compromise Solutions in Multiresponse Problems. World Congress on Engineering – ICMEEM 2010, pp. 2252-2257, London:UK.
- Costa, N., Pereira, Z., Tanco, M. (2011a). *Optimization measures for assessing compromise solutions in multiresponse problems*. In: Lecture Notes in Electrical Engineering, Vol. 90: 445-457, ed. by A. Sio-Jong and G. Len, International Association of Engineers.
- Costa, N., Pires, R., Ribeiro, C. (2006). Guidelines to help practitioners of design of experiments. *Total Quality Management Magazine*, 18: 386-399.
- Das, P., Sengupta, S. (2010). Composite desirability index in cases of negative and zero desirability. *Journal of Management Research*, 10: 25-38.
- Derringer, G., Suich, R. (1980). Simultaneous optimization of several response variables. *Journal of Quality Technology*, 12: 214-218.
- Derringer, G. (1994). A balancing act: optimizing product's properties. *Quality Progress*, June: 51-58.
- Fan, S-K, Chang, J-M (2009). A parallel particle swarm optimization algorithm for multi-objective optimization problems. *Engineering Optimization*, 41: 673-697.
- Figueira, J., Greco, S., Ehrgott, M. (eds.) (2005). *Multiple criteria decision analysis: State of the art surveys*. New York: Springer.
- Freeman, L., Ryan, A., Kensler, J., Dickinson, R., Vining, G. (2013). A Tutorial on the Planning of Experiments. *Quality Engineering*, 25: 315-332.
- Frey, D., Wang, H. (2006). Adaptive one-factor-at-a-time experimentation and expected value of improvement. *Technometrics*, 48: 418-431.
- Gabrel, V., Murat, C., Thiele, A. (2014). Recent advances in robust optimization: An overview. *European Journal of Operational Research*, 235: 471-483.
- Greene, W. (2008). *Econometric analysis*, (6th ed.). New Jersey: Pearson Prentice Hall.
- Gupta, S., Kulahci, M., Montgomery, D., Borrer, C. (2010). Analysis of Signal – Response Systems Using Generalized Linear Mixed Models. *Quality and Reliability Engineering International*, 26, 375-385.
- Hwang-Dae, K., Robinson, T., Wulff, S., Parker, P. (2007). Comparison of Parametric, Nonparametric and Semiparametric Modeling of Wind Tunnel Data. *Quality Engineering*, 19, 179-190.
- Ilzarbe, L., Alvarez, M., Viles, E., Tanco, M. (2008). Practical applications of design of experiments in the field of engineering: A bibliographical review. *Quality and Reliability Engineering International*, 24: 417-428.
- Jeong, I., Kim, K. (2009). An interactive desirability function method to multiresponse optimization. *European Journal of Operational Research*, 195: 412-426.
- Jeong, I., Kim, K., Chang, S. (2005). Optimal weighting of bias and variance in dual response surface optimization. *Journal of Quality Technology*, 37: 236-247.
- Kazemzadeh, B., Bashiri, M., Atkinson, A., Noorossana, R. (2008). A general framework for multiresponse optimization problems based on goal programming. *European Journal of Operational Research*, 189: 421-429.
- Khuri, A., Mukhopadhyay, S. (2010). Response surface methodology. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, 2: 128-149.
- Kim, K., Lin, D. (1998). Dual response surface optimization: a fuzzy modelling approach. *Journal of Quality Technology*, 30: 1-10.
- Kim, K., Lin, D. (2000). Simultaneous optimization of multiple responses by maximizing exponential desirability functions. *Applied Statistics C*, 49: 311-325.
- Kim, K., Lin, D. (2006). Optimization of multiple responses considering both location and dispersion effects. *European Journal of Operational Research*, 169: 133-145.
- Ko, Y., Kim, K., Jun, C. (2005). A new loss function-based method for multiresponse optimization. *Journal of Quality Technology*, 37: 50-59.
- Lee, M., Kim, Y. (2007). Separate response surface modelling for multiple response optimization: multivariate loss function approach. *International Journal of Industrial Engineering - Theory, Applications and Practice*, 14: 227-235.
- Lee, D., Jeong, I., Kim, K. (2010). A posterior preference articulation approach to dual response surface optimization. *IIE Transactions*, 42: 161-171.

- Lee, D., Kim, K., Köksalan, M. (2011). A posterior preference articulation approach to multiresponse surface optimization. *European Journal of Operational Research*, 210: 301-309.
- Lee, D., Kim, K., Köksalan, M. (2012). An interactive method to multiresponse surface optimization based on pairwise comparisons. *IIE Transactions*, 44: 13-26.
- Lopes, I., Nunes, E., Sousa, S., Esteves, D. (2011). Quality Improvement Practices Adopted by Industrial Companies in Portugal. *Proceedings of the World Congress on Engineering 2011*, Vol. I, pp. 696-701, WCE 2011, July, London, U.K.
- Marler, R., Arora, J. (2004). Survey of multi-objective optimization methods for engineering. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 26: 369-395.
- Marler, R., Arora, J. (2005). Function-transformation methods for multi-objective optimization. *Engineering Optimization*, 37: 551-570.
- Marler, R., Arora, J. (2010). The weighted sum method for multi-objective optimization: some insights. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 41: 853-862.
- Messac, A., Ismail-Yahaya, A. (2001). Required relationship between objective function and pareto frontier orders: practical implications. *AIAA Journal*, 39: 2168-2174.
- Messac, A., Sundararaj, G., Tappeta, R., Renaud, J. (2000). Ability of objective functions to generate points on non-convex Pareto frontiers. *AIAA Journal*, 38: 1084-1091.
- Myers, R., Montgomery, D. (1995). *Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments*, New Jersey: Wiley.
- Myers, R., Montgomery, D., Anderson-Cook, C. (2009). *Response Surface Methodology: process and product optimization using designed experiments* (3rd Ed.). New Jersey: John Wiley & Sons.
- Murphy, T., Tsui, K., Allen, J. (2005). A review of robust design methods for multiple responses. *Research in Engineering Design*, 15: 201-215.
- Ortiz, F., Simpson, J., Pignatiello, J., Heredia-Langner, A. (2004). A genetic algorithm approach to multiple-response optimization. *Journal of Quality Technology*, 36: 432-450.
- Owen, M., Armitage, M., Chatfield, M. (2003). A scientist's viewpoint on promoting effectiveness of experimental design: ten things a scientist wants to know about experimental design. *Pharmaceutical Statistics*, 2: 15-29.
- Ozdemir, A., Cho, B. (2016). A Nonlinear Integer Programming Approach to Solving the Robust Parameter Design Optimization Problem. *Quality and Reliability Engineering International*, in press, DOI: 10.1002/qre.1970.
- Pal, S., Gauri, S. (2010). Assessing effectiveness of the various performance metrics for multi-response optimization using multiple regression. *Computers & Industrial Engineering*, 59: 976-985.
- Pignatiello, J. (1993). Strategies for robust multi-response quality engineering. *IIE Transactions*, 25: 5-15.
- Robinson, T., Wulff, S., Khuri, A., Montgomery, D. (2006). Robust parameter design using generalized linear mixed models. *Journal of Quality Technology*, 38: 65-75.
- Salmasnia, A., Kazemzadeh, R., Seyyed-Esfahani, M., Hejazi, T. (2013). Multiple response surface optimization with correlated data. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 64, 841-855.
- Saraiva, P. (2003). *Manual Prático para a Certificação e Gestão da Qualidade com base nas Normas ISO9000: 2000*. Unidade 3, capítulo 5, subcapítulo 2.1. Editora VERLAG.
- Sörensen, K. (2013). Metaheuristics - the metaphor exposed. *International Transactions in Operational Research*, in press, DOI: 10.1111/itor.12001.
- Saraiva, P., d' Orey, J., Sampaio, P., Reis, M., Cardoso, C., Pinheiro, J., Tomé, L. (2010). O Futuro da Qualidade em Portugal. APQ.
- Shah, H., Montgomery, D., Carlyle, W. (2004). Response surface modelling and optimization in multiresponse experiments using seemingly unrelated regressions. *Quality Engineering*, 16: 387-397.
- Shaibu, A., Cho, B. (2009). Another view of dual response surface modelling and optimization in robust parameter design. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 4: 631-641.
- Shin, S., Cho, B. (2009). Studies on a bi-objective robust design optimization problem. *IIE Transactions*, 41: 957-968.

- Sibalija, T., Majstorovic, V. (2012). An integrated simulated annealing-based method for robust multiresponse process optimization. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 59:1227-1244.
- Sousa D., Aspinwall E., Sampaio A., Rodrigues A. (2005). Performance Measures and Quality Tools in Portuguese Small and Medium Enterprises: Survey Results. *Total Quality Management*, 16: 277-307.
- Tanco, M., Costa, N., Viles, E. (2009a). Experimental design selection: guidelines for practitioners. *International Journal of Productivity and Quality Management*, 4: 283-302.
- Tanco, M., Viles, E., Ilzarbe, L., Alvarez, M. (2009b). Implementation of Design of Experiments projects in industry. *Applied Stochastic Models in Business and Industry*, 25: 478-505.
- Tanco, M., Viles, E., Alvarez, M., Ilzarbe, L. (2010). Why is not design of experiments widely used by engineers in Europe? *Journal of Applied Statistics*, 37: 1961-1977.
- Vining, G. (1998). A compromise approach to multiresponse optimization. *Journal of Quality Technology*, 30: 309-313.
- Vining, G., Myers, R. (1990). Combining taguchi and response surface philosophies: A dual response approach. *Journal of Quality Technology*, 22: 38-45.
- Wan, W., Birch, J. (2011). A semiparametric technique for the multi-response optimization problem. *Quality and Reliability Engineering International*, 27: 47-59.
- Wu, F-C. (2005). Optimization of correlated multiple quality characteristics using desirability function. *Quality Engineering*, 17: 119-126.
- Wu, F-C, Chyu, C. (2004). Optimization of robust design for multiple quality characteristics. *International Journal of Production Research*, 4: 337-354.
- Xu, K., Lin, D., Tang, L., Xie, M. (2004). Multiresponse Systems optimization using a goal attainment approach. *IIE Transactions*, 36: 433-445.
- Younis, A., Dong, Z. (2010). Trends, features, and tests of common and recently introduced global optimization methods. *Engineering Optimization*, 42: 691-718.
- Zellner, A. (1962). An efficient method of estimating seemingly unrelated regression equations and tests for aggregation bias. *Journal of American Statistical Association*, 57: 348-368.
- Zhou, X., Ma, Y., Tu, Y., Feng, Y. (2013). Ensemble of Surrogates for Dual Response Surface Modeling in Robust Parameter Design. *Quality and Reliability Engineering International*, 29, 173-197.

Apêndice A - Matriz de experiências e Resultados

Tabela A.1: Matriz de experiências e Resultados

x_1	x_2	x_3	Porcentagem de conversão (y_1)					Atividade térmica (y_2)						
-1	-1	-1	74	74,125	74,009	74,500	73,016	74,432	53,2	53,303	53,485	54,188	52,508	51,404
1	-1	-1	51	51,203	51,690	51,490	50,321	50,159	62,9	62,654	63,173	63,678	62,397	63,203
-1	1	-1	88	88,613	87,718	88,961	88,761	87,587	53,4	54,174	53,311	53,608	52,847	53,961
1	1	-1	70	69,542	69,520	69,448	70,643	70,083	62,6	61,789	63,312	62,873	62,694	62,779
-1	-1	1	71	70,456	71,564	71,063	69,522	70,094	57,3	56,746	58,295	57,090	56,899	56,401
1	-1	1	90	89,714	90,387	89,818	90,689	90,366	67,9	68,327	68,373	67,927	67,559	68,258
-1	1	1	66	66,475	65,967	66,505	65,991	66,539	59,8	59,721	59,248	60,622	59,885	60,092
1	1	1	97	96,119	97,510	96,819	96,950	96,318	67,8	67,419	67,591	67,333	68,886	67,844
-1,682	0	0	76	77,632	78,137	76,570	74,430	76,951	59,1	59,055	59,087	58,867	58,809	59,064
1,682	0	0	79	78,549	76,373	78,309	78,017	78,619	65,9	66,128	65,928	66,064	65,688	66,040
0	-1,682	0	85	85,650	84,369	86,418	84,901	85,768	60,0	62,055	59,375	62,376	60,563	58,592
0	1,682	0	97	100,255	97,683	94,842	102,277	93,825	60,7	58,975	63,333	60,095	62,938	56,776
0	0	-1,682	55	55,136	54,895	55,020	55,102	54,936	57,4	57,114	57,532	57,368	58,017	57,457
0	0	1,682	81	81,008	80,989	80,983	80,916	81,090	63,2	63,455	62,834	63,315	63,590	63,284
0	0	0	81	86,978	78,373	70,546	85,439	90,903	59,2	62,974	58,608	56,190	58,899	61,607
0	0	0	75	82,010	84,358	78,765	72,300	79,464	60,4	61,435	56,218	57,124	61,181	63,279
0	0	0	76	74,151	73,247	77,608	81,747	77,671	59,1	63,677	64,414	60,810	63,578	61,142
0	0	0	83	91,657	80,442	83,103	80,349	86,053	60,6	61,235	61,968	61,927	60,453	62,486
0	0	0	80	72,136	81,935	80,230	78,625	82,035	60,8	63,178	60,127	60,793	59,658	62,038
0	0	0	91	88,702	90,861	86,640	85,786	90,213	58,9	61,782	56,693	55,698	58,563	62,406

Apêndice B – Seemingly Unrelated Regression (SUR)

A técnica de regressão *SUR* é formulada na forma de um sistema de equações onde cada equação é definida por $y_i = X_i\beta_i + e_i$ com $i= 1, 2, \dots, n$, sendo y_i um vetor com dimensão $N \times 1$ que contém as observações da i -ésima resposta, X_i é uma matriz de dimensão $N \times K_i$, β_i é um vetor de coeficientes de regressão com dimensão $K_i \times 1$ e e_i é o vetor de erros aleatórios com dimensão $N \times 1$. Na forma matricial tem-se

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & X_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix} \quad (B.1)$$

A técnica *SUR* foi formulada por Zellner (1962) para ter em conta a correlação existente entre as respostas, sendo a estimativa dos erros obtida pelo *OLS*. Note-se que o *OLS* ignora a correlação entre os erros das respostas, pelo que a sua utilização não é recomendada quando existir uma correlação significativa entre duas ou mais respostas

O melhor estimador não-enviesado dos coeficientes de regressão (β) para a técnica *SUR* é definido por

$$\hat{\beta} = \left(X^T (\Sigma \otimes I_N)^{-1} X \right)^{-1} X^T (\Sigma \otimes I_N)^{-1} y \quad (B.2)$$

onde Σ representa a matriz de variância-covariância das respostas, I_N uma matriz identidade com dimensão $N \times N$ e \otimes representa o produto de matrizes de Kronecker. Zellner (1962) propôs um estimador para Σ que é determinado com base nos resíduos das respostas individuais estimados pela técnica *OLS* e é definido por

$$\hat{\Sigma} = \hat{e}_i^T \hat{e}_j / N, \quad (i, j = 1, 2, \dots, n). \quad (B.3)$$

Correções ao denominador deste estimador têm sido propostas na literatura, sendo alguns exemplos apresentados por Green (2008).

A técnica *SUR* é uma variante da técnica dos mínimos quadrados generalizados (*Generalized Least Squares technique*), podendo a matriz de covariância das respostas (variáveis independentes) ser estimada com base nos resultados das experiências, pelo que a técnica *SUR*

tem também sido denominada de *Feasible Generalized Least Squares technique* (Beasley, 2008) Na prática, quando as respostas estiverem fortemente correlacionados a estimação conjunta dos modelos de regressão das respostas permite obter coeficientes de regressão e estimativas para o valor das respostas mais precisos do que quando o modelo de cada uma das respostas é estimado separadamente. De qualquer maneira, os resultados obtidos com as técnicas *SUR* e *OLS* são similares (iguais) nas seguintes condições (Shah *et al.*, 2004):

1. A matriz Σ é diagonal, o que significa que os erros das várias respostas não estão correlacionados. Neste caso as equações não estão aparentemente não relacionadas (*seemingly unrelated*), mas sim verdadeiramente não relacionadas (*truly unrelated*).
2. Os modelos das respostas têm os mesmos termos, ou seja, $X_1 = X_2 = \dots = X_n$.

Para uma revisão detalhada da técnica *SUR* e de outras técnicas de regressão sugere-se, por exemplo, a leitura do livro publicado por Green (2008).

Apêndice C – Método GC: Procedimento de Implementação

Para facilitar a implementação do método GC, a folha de cálculo para o Exemplo 2 é apresentada na Tabela 4. Depois de realizadas as experiências e modeladas as respostas (médias $\hat{\mu}_1$ e $\hat{\mu}_2$), o procedimento de implementação consistirá no seguinte:

- 1- Introduzir os coeficientes dos modelos para as respostas que se pretende otimizar - células B3:L4.
- 2- Introduzir os limites de especificação para cada uma das respostas (L_i, U_i) e o valor alvo (T_i) - células H7:J8.
- 3- Introduzir os pesos ou fatores de forma a associar a cada uma das respostas (ω_i) – células E7:E8.
- 4- Associar os coeficientes dos modelos com as respetivas variáveis – células D10:D11. Note que o valor “ótimo” para as variáveis (valores de saída do Excel®-Solver) serão mostrados nas células B7:B9.
- 5- Introduzir a função objetivo, fazendo os necessários “links” (associações) com os valores estimados para as respostas (células D10:D11), valores alvo para as respostas, limites de especificação e pesos/fatores de forma das respostas – células F11.
- 6- Abrir a ferramenta Solver do Excel® - 2010 e preencher o menú: *definir objetivo: F11; Para: Min* (Minimize); *Alterando as células: B7:B9, Sujeito às restrições: $-1 \leq B7:B9 \leq 1$, e $H7:H8 \leq D10:D11 \leq J7:J8$; Método de resolução: GRG não-linear; Clicar em Opções e seleccionar Derivada: Central. Para detalhes sobre estas opções recomenda-se a consulta do Help do Excel®.*
- 7- Clicar em *Resolver*: Se $F11=0$, a solução é ótima. Se $F11>0$ teste outros pontos de partida e pesos até encontrar uma solução de interesse.

Tabela 4: GC método – Exemplo 2

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	L
1	Modelos de Regressão - Coeficientes										
2	Resposta	Cte.	x ₁	x ₂	x ₃	x ₁ ²	x ₂ ²	x ₃ ²	x ₁ x ₂	x ₁ x ₃	x ₂ x ₃
3	$\hat{\mu}_1$	81,0943	1,0290	4,0426	6,2060	-1,8377	2,9455	-5,2036	2,1250	11,3750	-3,8750
4	$\hat{\mu}_2$	59,8505	3,5855	0,2547	2,2312	0,8360	0,0742	0,0565	-0,3875	-0,0375	0,3125
5											
6	Variável	Valor	Peso					L	T	U	
7	x ₁	-0,5436		ω_1	2,25		$\hat{\mu}_1$	80	100	100	
8	x ₂	1,682		ω_2	1,00		$\hat{\mu}_2$	55	57,5	60	
9	x ₃	-0,5982									
10			$\hat{\mu}_1$	95,21		Resultado					
11			$\hat{\mu}_2$	57,50		0,04					

Curriculum Vitae:

Nuno Costa é docente no Instituto Politécnico de Setúbal – Escola Superior de Tecnologia de Setúbal, no Departamento de Engenharia Mecânica, e é investigador no UNIDEMI-DEMI da FCT-UNL. Os seus trabalhos têm sido apresentados em eventos internacionais e publicados em revistas indexadas na SCI-Thomson Reuters®. Além de 4 dos seus trabalhos terem recebido prémios internacionais tem também 4 capítulos de livro publicados. Desenvolve atividade de investigação nas áreas da Gestão de Operações e da Qualidade, nomeadamente em Desenho de Experiências e Métodos de Taguchi, Controlo Estatístico do Processo e metodologia 6-Sigma.

João Lourenço é doutorado em Engenharia Electrotécnica e Computadores pelo Instituto Superior Técnico (IST) da Universidade Técnica de Lisboa. Atualmente é docente no IPS-ESTSetubal, no Departamento de Sistemas e Informática, e é investigador no INESC-ID. Tem vários trabalhos publicados em atas de congressos, em revistas indexadas na SCI-Thomson Reuters® e quatro capítulos de livro publicados. Dois dos seus trabalhos foram premiados internacionalmente. As suas áreas de pesquisa são a identificação de sistemas e previsões, o controlo preditivo, o controlo adaptativo baseado em modelos múltiplos, mecanismos de aprendizagem e a otimização de múltiplas respostas.

Authors Profiles:

Nuno Ricardo Costa is a lecturer at the Instituto Politécnico de Setúbal – Escola Superior de Tecnologia de Setúbal (IPS-ESTSetubal) and is a researcher at UNIDEMI-DEMI of Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa. He has presented works in international events and has publications in journals indexed to SCI-Thomson Reuters®. His research interests include quality and operations management.

João Lourenço holds a Ph.D. degree in Electrothechnical and Computers Engineering from the Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Portugal. Currently he is a Professor at the IPS-ESTSetubal, in the Department of Systems and Informatics and is invited Researcher at R&D Unit INESC-ID. His research interests are system identification and forecast, predictive and adaptive control, switched multiple model adaptive control, learning mechanisms, and multiresponse optimization.