

Análise da Convexidade de Superfícies de Resposta no Processo de Usinagem do Aço Endurecido ABNT H13

Leticia Dias Carnevalli Motta (UNIFEI)

Natália Vilas Boas Pappi Maciel (UNIFEI)

Paulo Henrique da Silva Campos (UNIFEI)

Anderson Paulo de Paiva (UNIFEI)

Pedro Paulo Balestrassi (UNIFEI)



O artigo investiga as propriedades de convexidade de um conjunto de 77 funções objetivo utilizando a Metodologia de Superfície de Resposta (RSM) por decomposição espectral. As funções foram criadas com base em dados experimentais do processo de usinagem do Aço H13. Os resultados mostraram que mais de 85% das funções possuem formato de sela, destacando a importância de usar restrições durante a otimização para garantir soluções viáveis com variância de previsão baixa. O estudo também propõe o uso do Excel como uma ferramenta acessível para análise. O trabalho incentiva o desenvolvimento de técnicas de pré processamento com a inclusão de restrições do espaço experimental para melhorar a eficiência e precisão da otimização em aplicações do mundo real.

Palavras-chave: Metodologia de Superfície de Resposta, Decomposição Espectral, Usinagem Aço H13, Método de Jacobi, Convexidade, Funções tipo Sela.

1. Introdução

A metodologia de superfície de resposta (RSM) é uma técnica estatística amplamente utilizada para modelar e otimizar sistemas complexos. Ela envolve a construção de um modelo matemático que aproxima o comportamento de uma variável de resposta em termos de diferentes variáveis preditoras. Contudo, é necessário ter cautela ao analisar e otimizar dados multivariados para evitar interpretações distorcidas. A partir deste modelo, a análise da convexidade das funções de superfície de resposta torna-se um aspecto importante a ser considerado, pois é crucial para que o processo de otimização das variáveis preditoras seja adequado (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009).

A obtenção de funções tipo sela é um desafio comum na metodologia de superfície de resposta (SRM), utilizada na otimização de sistemas analíticos e de design experimental. Bezerra, Sant'anna e Ferreira (2008) ressaltam a complexidade desse problema ao revisar a SRM em processos de otimização de sistemas analíticos. Hamanda e Wu (2011) discutem a importância da análise e planejamento adequado de experimentos para otimização de parâmetros, incluindo a abordagem de resposta de superfície. No entanto, eles também apontam que a obtenção de funções tipo sela pode ser um desafio significativo.

Em um estudo específico sobre o desenvolvimento de métodos analíticos, Ferreira e Bezerra (2008) revisam o uso de designs do tipo Box-Behnken. Eles mencionam que a obtenção de funções tipo sela pode ser um problema ao explorar esses designs para o desenvolvimento de métodos analíticos. Além disso, Myers, Montgomery e Anderson-Cook (2009) discutem a metodologia de superfície de resposta para otimização de processos e produtos em experimentos planejados. Embora não façam menção direta a problemas de obtenção de funções tipo sela, eles enfatizam a necessidade de planejamento adequado para evitar soluções subótimas ou inviáveis na análise de superfície de resposta.

Desta forma, este trabalho tem como objetivo investigar as propriedades de convexidade de um conjunto de funções objetivo, utilizando-se conceitos de decomposição espectral e método jacobiano para análise de autovalores. Para criação das funções, foram utilizados os dados experimentais do processo de usinagem do Aço H13 com sete ferramentas diferentes (CC6050W, CC6050, CC650W, CC670, CC650, PCBN 7025 e PCBN 7025W) e seis variáveis resultantes: vida útil da ferramenta (T), custo total de usinagem (Kp), rugosidade da superfície (Ra), força de usinagem (Fr), nível de pressão sonora (SPL) e energia de corte específica (SCE) (CAMPOS, 2015).

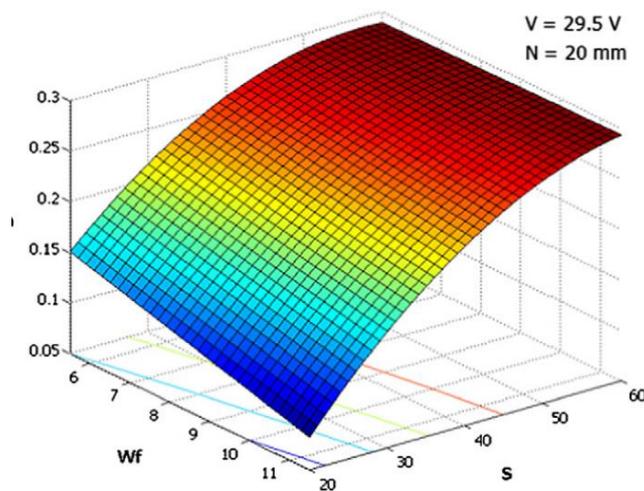
Um Arranjo Composto Central (CCD) foi adotado para três variáveis de processo: velocidade de corte (V_c), taxa de avanço (f) e profundidade de corte (a_p), em um conjunto rotativo de 19 experimentos. A partir dos resultados gerados pelos experimentos, 77 funções objetivo foram obtidas. Através do Excel, procedimentos foram aplicados para o cálculo de autovalores e, posteriormente, foi calculado o percentual de distribuição dos tipos de função, sendo divididas em côncavas, convexas e selas.

2. Referencial teórico

2.1. Metodologia de superfície de resposta

A Metodologia de Superfície de Resposta (ou RSM – *Response Surface Methodology*) é uma estratégia de melhoria que emprega uma sequência de arranjos experimentais com o objetivo de identificar regiões de curvatura e, nelas, criar funções quadráticas de aproximação. Após as etapas de experimentação e modelagem, as funções criadas são utilizadas em algoritmos de otimização não-linear (com ou sem restrições) (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009).

Figura 1 - Gráfico Superfície de Resposta



Fonte: (GOMES et al., 2013).

As funções quadráticas de aproximação são resultado da expansão em Série de Taylor Multidimensional para k variáveis, truncada em seu termo quadrático. De forma geral, o modelo quadrático completo relacionado a este tipo de aproximação é dado por:

$$f(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad \text{Eq. (1)}$$

Onde: β_i e β_{ii} são os coeficientes polinomiais, k é o número de fatores e ε é o termo que representa o erro. De forma matricial, temos:

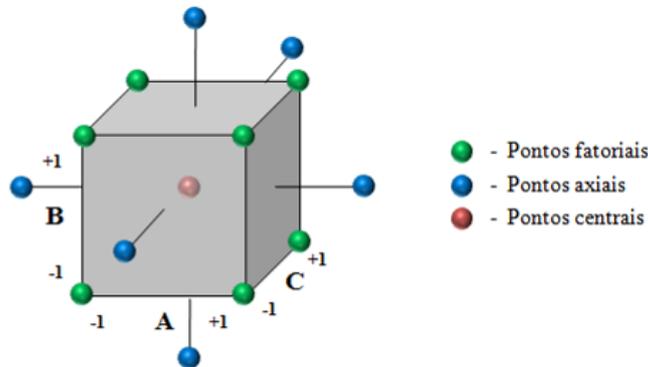
$$\hat{y} = \beta_0 + \mathbf{x}^T \hat{\beta} + \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x} + \varepsilon \quad \text{Eq. (2)}$$

Sendo que a matriz \mathbf{B} é a matriz Hessiana, matriz esta que armazena as derivadas de segunda ordem da função objetivo.

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \frac{1}{2}\beta_{12} & \dots & \frac{1}{2}\beta_{1k} \\ \frac{1}{2}\beta_{12} & \beta_{22} & \dots & \frac{1}{2}\beta_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2}\beta_{1k} & \frac{1}{2}\beta_{2k} & \dots & \beta_{kk} \end{bmatrix} \quad \text{Eq. (3)}$$

Um arranjo amplamente utilizado para coleta de dados na RSM é conhecido como Arranjo Composto Central (Central Composite Design - CCD). Esse arranjo é composto por três grupos distintos de elementos experimentais: um fatorial completo (2^k) ou fracionado (2^{k-p} , onde p representa a fração desejada do experimento), um conjunto de pontos centrais (m) e, adicionalmente, um grupo de níveis extras denominados pontos axiais - $2k$ (conforme ilustrado na Figura 5 (MONTGOMERY, 2012; MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009)).

Figura 2 - Arranjo composto central para três fatores.



Fonte: (CAMPOS, 2015).

No CCD, o número de pontos axiais é igual ao dobro do número de fatores, representando os valores extremos desses fatores (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009).

2.3. Decomposição Espectral

De acordo com Johnson e Wichern (2014), uma matriz \mathbf{A} de dimensão $m \times k$ pode ser decomposta em uma combinação linear de autovalores (Λ) e autovetores (\mathbf{P}), tal que:

$$\mathbf{A} = \mathbf{P} \Lambda \mathbf{P}^T = \sum_{i=1}^p \lambda_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T$$

Nesta expressão, \mathbf{P} representa a matriz ortogonal dos autovetores; cada coluna de \mathbf{P} está associada a um único autovalor (λ). A matriz $\mathbf{\Lambda}$ é do tipo diagonal e cada elemento dessa diagonal é um dos autovalores, apresentados em ordem decrescente $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$.

$$\mathbf{A}_{(mxk)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mk} \end{bmatrix}; \mathbf{P}_{(mxk)} = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1k} \\ e_{21} & e_{22} & \dots & e_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{m1} & e_{m2} & \dots & e_{mk} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{\Lambda}_{(mxk)} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_k \end{bmatrix}$$

Pré-multiplicando a matriz \mathbf{A}_{mxk} por \mathbf{P}^T e pós-multiplicando pela matriz de autovetores \mathbf{P} , pode-se escrever que:

$$\mathbf{P}^T[\mathbf{A}]\mathbf{P} = \mathbf{P}^T[\mathbf{P} \mathbf{\Lambda} \mathbf{P}^T] \mathbf{P}$$

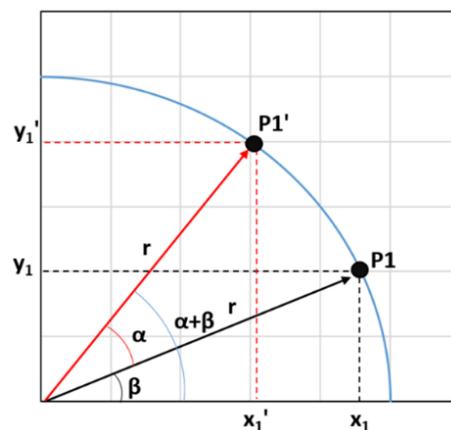
Como $\mathbf{P}^T\mathbf{P}=\mathbf{I}$, então, pode-se escrever a matriz de autovalores $\mathbf{\Lambda}$ como:

$$\mathbf{\Lambda} = \mathbf{P}^T[\mathbf{A}] \mathbf{P} \tag{Eq. (4)}$$

2.3. Matriz de Rotação

Qualquer ponto P pode ser rotacionado em torno de um dado eixo, observando-se as mudanças de coordenadas dadas pelos deslocamentos angulares. Supondo que o ponto $P_1(x_1, y_1)$ forme um ângulo β com o eixo x . A partir deste ponto, aplica-se uma rotação de intensidade α em relação a sua posição inicial, de modo que, em relação ao eixo x , forme-se um ângulo resultante $(\alpha + \beta)$, como mostrado na Figura 3.

Figura 3 - Rotação de P



Fonte: Autor.

Observando-se a figura, pode-se estabelecer que as coordenadas de $P'_1(x_1, y_1)$ podem ser escritas, respectivamente, como:

$$x_1 = r \cos \beta \quad y_1 = r \sin \beta$$

Então, as coordenadas do ponto rotacionado P'_1 serão, respectivamente:

$$x'_1 = r \cos(\alpha + \beta) = x_1 \cos \alpha - y_1 \sin \alpha$$

Analogamente:

$$y'_1 = r \cos(\alpha + \beta) = x_1 \sin \alpha - y_1 \cos \alpha$$

Em notação matricial, pode-se escrever:

$$\begin{bmatrix} x'_1 \\ y'_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}$$

A partir da decomposição espectral temos:

$$\Lambda = P^T [A] P$$

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

Como o primeiro elemento da segunda coluna da matriz de autovalores é zero, a multiplicação de matriz é feita apenas para este elemento e igualada a zero:

$$\begin{aligned} -\sin \theta (\cos \theta a_{11} + \sin \theta a_{12}) + \cos \theta (\cos \theta a_{12} + \sin \theta a_{22}) &= 0 \\ -\sin \theta \cos \theta a_{11} - \sin^2 \theta a_{12} + \cos^2 \theta a_{12} + \sin \theta \cos \theta a_{22} &= 0 \\ \sin \theta \cos \theta (a_{11} - a_{22}) + a_{12} (\cos^2 \theta \sin^2 \theta) &= 0 \end{aligned}$$

Através das funções trigonométricas:

$$\begin{aligned} \cos 2\theta &= \cos(\theta + \theta) = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta \\ \sin(2\theta) &= \sin(\theta + \theta) = 2 \sin \theta \cos \theta \end{aligned}$$

Substituídas no equacionamento anterior calculamos o ângulo θ de rotação:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \sin 2\theta (a_{11} - a_{22}) &= -\cos(2\theta) a_{12} \\ \frac{\sin \theta}{\cos \theta} &= \frac{2a_{12}}{a_{11} - a_{22}} \\ \theta &= \frac{1}{2} \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left[\frac{2a_{12}}{a_{11} - a_{22}} \right] \end{aligned} \quad \text{Eq. (5)}$$

2.4. Método de Jacobi

Assim como verificado para uma matriz $\Sigma_{2 \times 2}$, matrizes de rotação de ordem p podem ser utilizadas para o cálculo de autovalores e autovetores. Este método iterativo é conhecido como Método de Jacobi. Na matriz de Rotação de ordem p , todos os elementos da diagonal principal são iguais a "1", exceto para os dois elementos a_{ii} e a_{jj} que serão iguais a $\cos \theta$. Todos os elementos fora da diagonal principal serão iguais a zero, exceto os elementos $a_{ij} = -\sin \theta$ e $a_{ji} = \sin \theta$. Uma matriz de rotação genérica \mathbf{J}_0 pode ser definida como:

$$J_0 (p \times p) = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & \cos \theta & \dots & -\text{sen } \theta & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \dots & \text{sen } \theta & \dots & \cos \theta & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

Em suma, o Método de Jacobi busca transformar uma matriz simétrica $\Sigma_{p \times p}$ em uma matriz diagonal. Para tanto, os elementos fora da diagonal principal precisam ser zerados. Esta operação pode ser realizada com o auxílio de uma matriz de rotação J_0 , escrita de acordo com o elemento que deve eliminado.

Assim a matriz de rotação J_0 , relativa a esses elementos assumiria a seguinte configuração:

$$J_0 = \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & -\text{sen } \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \text{sen } \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix}$$

Para que os elementos a_{13} e a_{31} de uma matriz A_0 sejam “zerados”, aplica-se a seguinte transformação:

$$A_1 = J_0^T A_0 J_0$$

Analogamente, para eliminar os elementos a_{12} e a_{21} , constrói-se uma matriz de rotação J_1 e uma matriz transformada A_2 dadas, respectivamente, por:

$$J_1 = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\text{sen } \theta & 0 \\ \text{sen } \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad A_2 = J_1^T A_1 J_1$$

Finalmente, para eliminar os elementos a_{23} e a_{32} , constrói-se uma matriz de rotação J_2 e uma matriz transformada A_3 , tal que:

$$J_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\text{sen } \theta \\ 0 & \text{sen } \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad A_3 = J_2^T A_2 J_2$$

Após algumas iterações, a matriz A_0 original se transforma em uma matriz diagonal de autovalores (Λ) e a matriz ortogonal de autovetores (P) obtidas como:

$$\Lambda = J_k^T A_k J_k \quad \text{Eq. (6)}$$

$$P = \prod_{i=0}^k J_k = J_0 * J_1 * \dots * J_k \quad \text{Eq. (7)}$$

A partir do resultado da aplicação do Método de Jacobi, encontram-se os autovalores e a partir de seus sinais, o comportamento das funções pode ser caracterizado conforme segue. Se todos os autovalores forem negativos, a função será côncava e terá um ponto máximo. Por outro lado, se todos os autovalores forem positivos, a função será convexa e terá um ponto mínimo. No entanto, quando os autovalores possuem sinais mistos, ou seja, positivos e negativos, a função

assume a forma de uma superfície em forma de sela, indicando a presença de múltiplos pontos críticos e a ausência de um ponto máximo ou mínimo único (SAMBUCINI, 2012).

3. Metodologia

Nesta seção, as etapas desenvolvidas no processo de análise de convexidade de funções de superfície de resposta do processo de usinagem do aço H13 é apresentado.

a) Usinagem do Aço H13

Os experimentos foram realizados em um Centro de Torneamento MHP Kingsbury disponível no Laboratório de Usinagem do Departamento de Mecânica Engenharia pela Universidade de Aveiro, Portugal. O aço temperado de dureza 54 HRC foi torneado até um desgaste de 0,3 mm, utilizando ferramentas e porta-ferramentas fornecidos pela empresa Sandvik Coromant de acordo com a Tabela 1 (CAMPOS, 2015).

Tabela 1 – Ferramentas utilizadas nos experimentos (Insertos Sandvik Coromant).

Insertos Sandvik Coromant		
Cerâmicos	Geometria ISSO	Composição
CC6050	CNGA120408 S01525	Al ₂ O ₃ + TiN
CC 6050 (Wiper)	CNGA120408 S01525WH	Al ₂ O ₃ + TiN
CC 650	CNGA120408 T01020	70% Al ₂ O ₃ + Ti [22,5% C, 7,5% N]
CC 650 (Wiper)	CNGA120408 T01020WG	70% Al ₂ O ₃ + Ti [22,5% C, 7,5% N]
CC 670	CNGN 120408 T01020	80% Al ₂ O ₃ + 20% SiC _w
PCBN	Norma ISSO	Composição
CB 7025	CNGA 120408 S01030A	CBN + TiC
CB 7025 (Wiper)	CNGA 120408 S01030 AWG	CBN + TiC

Fonte: (CAMPOS, 2015)

As variáveis de controle (Tabela 2) adotadas para esse procedimento foram velocidade de corte (V_c), avanço (f) e profundidade de usinagem (a_p). O sequenciamento dos experimentos foi planejado seguindo de um arranjo composto central (CCD), criado para três parâmetros em dois níveis ($2^k = 2^3 = 8$), seis pontos axiais ($2k = 6$) e cinco pontos centrais (cp = 5), o que resultou em 19 experimentos.

Tabela 2 – Variáveis de Controle

Variáveis de Controle	Símbolo	Níveis de trabalho				
		-1.682	-1	0	1	1.682
Velocidade de Corte (m/min)	V _c	57,39	100	150	225	267,61
Avanço de Corte (mm/rev)	F	0.06	0.10	0.15	0.225	0.27
Profundidade de usinagem (mm)	A _p	0.09	0.15	0.225	0.33	0.39

Fonte: (CAMPOS, 2015)

As respostas analisadas incluíram o custo total de usinagem (K_p), tempo total de usinagem (T_t), tempo de corte (T_c), vida da ferramenta (T), temperatura de corte (T_p^o), taxa de volume de

cavaco removido (MRR), força de usinagem (Fr), rugosidades (Ra, Rt) e energia específica de corte (EEC) e o nível de pressão sonora (SPL).

b) Determinação da Superfície de Resposta (RSM)

Esta etapa inicial de análise dos dados experimentais foi feita utilizando o software Minitab, através do recurso "Create Response Surface Design". Os parâmetros utilizados foram: 3 fatores contínuos que, pelo experimento foram as variáveis alteradas para obtenção de resultados (Vc, f e ap). Um CCD de 3 variáveis tem por convenção 6 pontos centrais. Porém, pela forma na qual o experimento foi executado, usa-se o valor personalizado de 5.

Através de um modelo de regressão, foi aplicada a condição de otimalidade de primeira ordem, obtendo assim o vetor de coeficientes conhecido como estimadores OLS (Ordinal Least Squares) ou estimadores β de Mínimos Quadrados Ordinários, dado por:

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \hat{y} \tag{Eq.8}$$

Já a matriz \hat{y} foi montada a partir dos resultados obtidos nos experimentos. Assim, teremos 7 matrizes, \hat{y} uma para cada ferramenta usada.

Tabela 3 – Exemplo da matriz \hat{y} para a ferramenta CC6050W

CC6050W	T	Tc	Tt	Kp	Ra	Rt	Fr	MRR	EEC	T (°C)	SPL
1	62.000	1.570	2.320	2.550	0.130	1.180	340.220	1.500	0.004	502.820	64.390
2	33.000	0.690	1.410	1.580	0.110	1.090	236.490	3.375	0.014	653.540	83.260
3	52.000	0.690	1.470	2.040	0.410	2.820	432.590	3.300	0.008	473.860	74.920
4	30.500	0.310	1.030	1.320	0.720	3.520	240.320	7.425	0.031	633.720	83.540
5	63.000	1.570	2.390	3.170	0.340	2.440	451.470	3.300	0.007	475.230	68.880
6	30.000	0.690	1.450	1.850	0.090	0.660	244.180	7.425	0.030	569.330	85.650
7	52.000	0.690	1.530	2.490	0.080	0.720	459.390	7.260	0.016	539.500	69.490
8	28.500	0.310	1.020	1.170	0.420	2.230	246.310	16.335	0.066	609.300	88.720
9	59.000	1.680	2.520	3.350	0.220	1.740	485.870	2.204	0.005	429.430	73.750
10	24.500	0.360	1.070	1.230	0.290	1.420	224.480	10.276	0.046	528.320	95.440
11	39.000	1.680	2.460	2.870	0.130	1.180	319.280	1.950	0.006	498.240	83.150
12	40.250	0.360	1.100	1.510	0.490	2.600	358.850	10.140	0.028	540.930	85.530
13	51.000	0.590	1.310	1.510	0.220	1.480	330.980	2.340	0.007	558.770	80.270
14	47.500	0.590	1.370	1.980	0.120	0.920	359.240	10.140	0.028	565.830	85.850
15	43.500	0.590	1.370	1.990	0.470	0.980	336.520	6.240	0.019	497.340	83.260
16	43.000	0.590	1.370	1.960	0.490	0.970	335.280	6.240	0.019	485.320	85.320
17	44.500	0.590	1.370	2.010	0.490	0.960	334.920	6.240	0.019	495.730	82.580
18	44.000	0.590	1.370	1.960	0.480	0.980	337.830	6.240	0.018	497.440	87.720
19	45.000	0.590	1.370	1.950	0.470	0.970	334.780	6.240	0.019	506.150	84.450

Fonte: Autor.

Concluindo esta etapa, utilizando a Equação 8 e realizando as multiplicações matriciais através do Excel, os coeficientes para todas as ferramentas e variáveis foram determinados, totalizando assim 77 funções objetivo.

Tabela 4 – Exemplo da matriz $\hat{\beta}$ para a ferramenta CC6050W

CC6050W	T	Tc	Tt	Kp	Ra	Rt	Fr	MRR	EEC	T (°C)	SPL
β_0	43.986	0.593	1.373	1.976	0.478	0.963	336.475	6.237	0.018	495.022	84.922

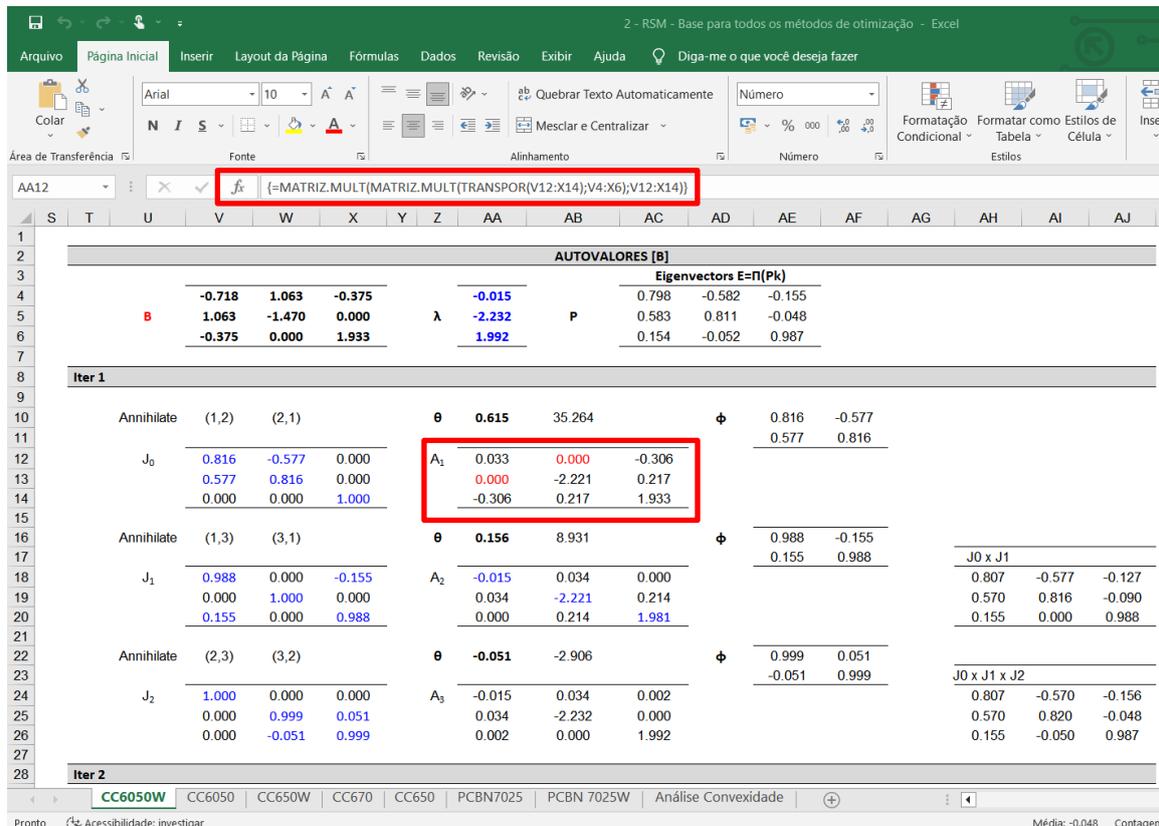
β_1	-12.083	-0.347	-0.384	-0.578	0.036	-0.015	-84.644	2.400	0.013	46.921	7.320
β_2	-1.677	-0.347	-0.352	-0.323	0.115	0.462	12.653	2.379	0.007	9.318	1.354
β_3	-0.724	0.000	0.019	0.145	-0.045	-0.256	14.590	2.331	0.007	-4.299	1.173
β_{11}	-0.718	0.135	0.134	0.099	-0.067	0.266	3.475	0.015	0.003	1.367	-1.433
β_{22}	-1.470	0.135	0.129	0.064	-0.048	0.376	-2.221	-0.054	0.000	15.760	-1.523
β_{33}	1.933	-0.017	-0.027	-0.094	-0.098	0.132	-0.084	0.015	0.000	30.862	-1.975
β_{12}	2.125	0.125	0.113	0.031	0.115	0.510	-11.791	0.900	0.005	-1.895	-0.974
β_{13}	-0.750	0.000	-0.013	-0.119	-0.025	-0.110	-15.546	0.900	0.005	-18.335	1.064
β_{23}	0.000	0.000	-0.008	-0.074	-0.103	-0.528	-10.769	0.878	0.003	19.128	-0.891

Fonte: Autor.

c) Análise da Curvatura da Superfície de Resposta

Para determinar os autovalores, e assim, analisar a convexidade das funções, foi utilizado o Método de Jacobi descrito no referencial teórico. Utilizando-se os coeficientes encontrados na etapa anterior, a matriz B foi calculada e, a partir dela, as iterações, os autovetores e autovalores resultantes. Os cálculos foram feitos para cada função-objetivo através do Excel conforme o exemplo descrito abaixo. Na Figura 4, podemos ver a primeira etapa do Método de Jacobi para a função objetivo da Variável T da ferramenta CC60510.

Figura 4 – Primeira Iteração do Método de Jacobi para variável T da ferramenta CC6050W



The screenshot shows an Excel spreadsheet with the following content:

- Formula Bar:** $\{=MATRIZ.MULT(MATRIZ.MULT(TRANSPO(V12:X14);V4:X6);V12:X14)\}$
- Table: AUTOVALORES [B]**

Eigenvalues E=Π(Pk)		
B	λ	P
-0.718	1.063	-0.375
1.063	-1.470	0.000
-0.375	0.000	1.933
- Table: Iter 1**

Annihilate		θ	ϕ	
(1,2)	(2,1)	0.615	35.264	0.816 -0.577
J_0	$\begin{bmatrix} 0.816 & -0.577 & 0.000 \\ 0.577 & 0.816 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 \end{bmatrix}$	A_1	$\begin{bmatrix} 0.033 & 0.000 & -0.306 \\ 0.000 & -2.221 & 0.217 \\ -0.306 & 0.217 & 1.933 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.577 & 0.816 \\ 0.155 & 0.988 \end{bmatrix}$
(1,3)	(3,1)	0.156	8.931	0.988 -0.155
J_1	$\begin{bmatrix} 0.988 & 0.000 & -0.155 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 \\ 0.155 & 0.000 & 0.988 \end{bmatrix}$	A_2	$\begin{bmatrix} -0.015 & 0.034 & 0.000 \\ 0.034 & -2.221 & 0.214 \\ 0.000 & 0.214 & 1.981 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.988 & -0.155 \\ 0.155 & 0.988 \end{bmatrix}$
(2,3)	(3,2)	-0.051	-2.906	0.999 0.051
J_2	$\begin{bmatrix} 1.000 & 0.000 & 0.000 \\ 0.000 & 0.999 & 0.051 \\ 0.000 & -0.051 & 0.999 \end{bmatrix}$	A_3	$\begin{bmatrix} -0.015 & 0.034 & 0.002 \\ 0.034 & -2.232 & 0.000 \\ 0.002 & 0.000 & 1.992 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.051 & 0.999 \\ 0.999 & 0.999 \end{bmatrix}$

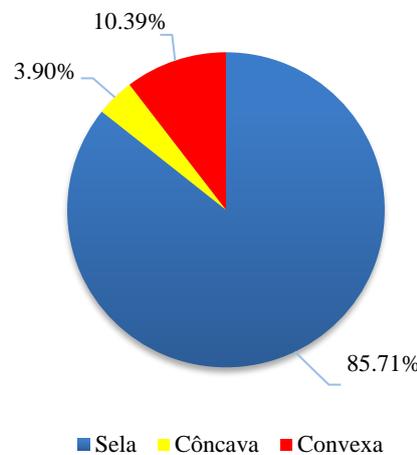
Fonte: Autor.

A fim de otimizar a repetição do procedimento para as 77 funções objetivo, um programa em VBA foi desenvolvido para que os autovalores λ fossem armazenados em uma tabela auxiliar, onde a convexidade das funções foi analisada conforme seus sinais (positivos ou negativos).

4. Resultados e análise

A análise de 77 funções objetivo revelou que 85,71% dessas funções são sela. Portanto, as funções possuem mínimos e máximos locais, o que significa que elas não são estritamente crescentes ou decrescentes em todo o seu domínio.

Figura 5 – Gráfico da distribuição em percentual da convexidade das funções



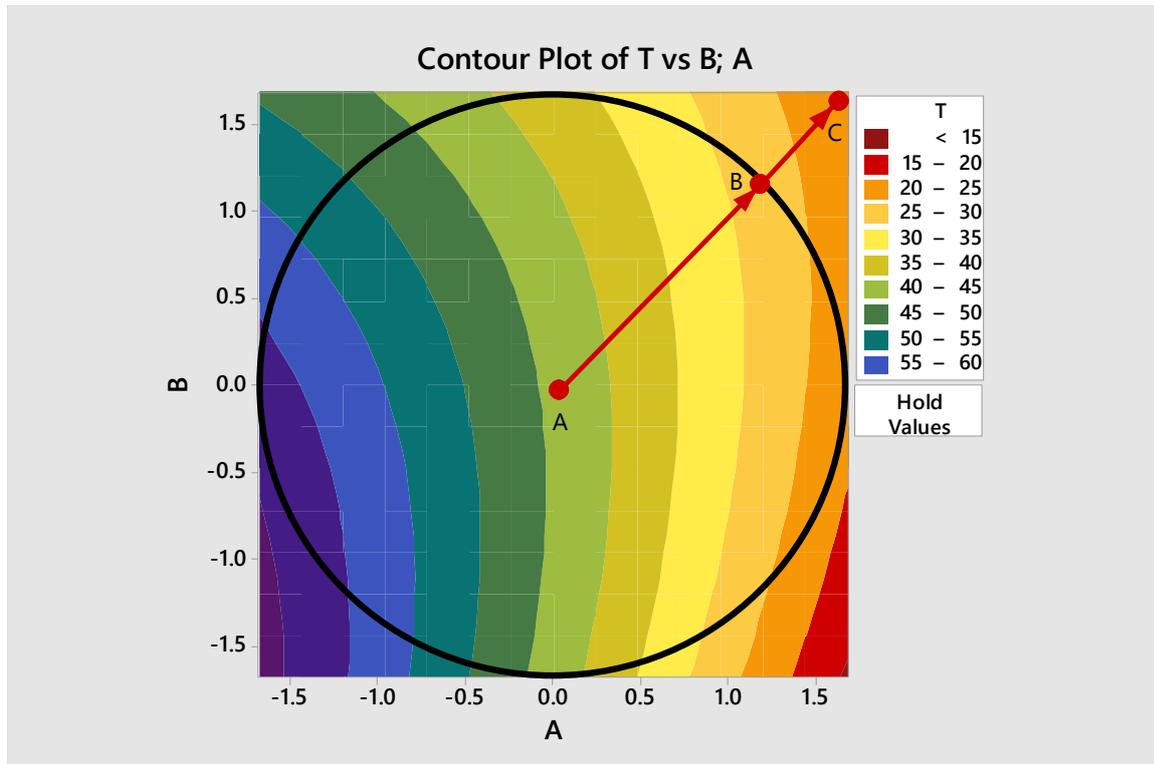
Fonte: Autor.

Em geral, a presença de funções de regressão em forma de sela no planejamento de experimentos não é necessariamente um problema, mas requer interpretação e análise cuidadosas. Ao lidar com estas funções, existem algumas recomendações, como, por exemplo: análise cuidadosa dos mínimos e máximos locais, validação do modelo, técnicas de visualização através de gráficos de superfície de resposta, exploração do espaço de design e técnicas de otimização.

Esta observação tem implicações significativas para otimizar soluções dentro da região esférica definida pelo CCD. Dada a natureza das funções em forma de sela, onde múltiplos ótimos locais estão presentes, a obtenção de resultados viáveis que satisfaçam as restrições torna-se um ponto crítico de atenção. Para garantir a qualidade dos pontos ótimo, a incorporação de uma função de restrição (Eq. 18) surge como uma estratégia para garantir a geração de soluções viáveis dentro da região esférica designada.

$$\begin{cases} \min_{x \in \Omega} \beta_0 + \mathbf{x}^T \mathbf{b} + \mathbf{x}^T [\mathbf{B}] \mathbf{x} \\ S. t.: \mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq \rho^2 \end{cases} \quad \text{Eq. (9)}$$

Figura 6 - Região cuboidal versus restrição



Ao introduzir uma função de restrição que reforça a adesão às restrições predefinidas, o processo de otimização pode ser direcionado para as soluções viáveis desejadas, como visto na Figura 6. Podemos também observar que utilizando a restrição cuboidal na otimização deste tipo de funções o resultado é direcionado aos vértices da superfície de resposta, ponto este que não está dentro da área descrita pela Eq. (9). Portanto, função de restrição atua como um mecanismo orientador, restringindo o espaço de busca à região esférica definida pelo CCD, melhorando assim a probabilidade de obtenção de soluções ótimas que se alinham com as restrições pretendidas (DE OLIVEIRA et al., 2019).

5. Conclusão

Com base na análise realizada utilizando Metodologia de Superfície de Resposta (RSM) e análise de autovalores através do Método de Jacobi, este trabalho teve como objetivo investigar as propriedades de convexidade de um conjunto de 77 funções objetivo. Os resultados revelaram que uma proporção significativa, onde mais de 85% das funções analisadas tem o formato de sela.

Estes resultados destacam a importância do uso de restrições ao otimizar tais funções, a fim de garantir que as soluções sejam restritas a região esférica formada pelo CCD. Ainda, o artigo

traz uma forma alternativa e acessível para as análises realizadas através do uso do Excel, simplificando os conceitos abordados. Este trabalho incentiva a exploração e o desenvolvimento de técnicas de manipulação de restrições para aumentar a eficiência e a precisão dos algoritmos de otimização em aplicativos do mundo real.

6. Agradecimentos

Os autores expressam sua gratidão ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelo apoio a esta pesquisa.

REFERÊNCIAS

BEZERRA, M. A.; SANT'ANNA, G. L.; FERREIRA, F. A. Surface response methodology (SRM) in process optimization of analytical systems: A review. **Talanta**, v. 76, n. 5, p. 965–977, 2008.

CAMPOS, P. H. DA S. **Metodologia: Uma contribuição para a Seleção Ótima de Ferramentas no Torneamento do Aço Endurecido ABNT H13**. Itajubá, MG: UNIFEI, abr. 2015.

DE OLIVEIRA, L. G. et al. Response surface methodology for advanced manufacturing technology optimization: theoretical fundamentals, practical guidelines, and survey literature review. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v. 104, n. 5–8, p. 1785–1837, 18 out. 2019.

FERREIRA, F. A.; BEZERRA, M. A. Box–Behnken designs for analytical methods development: A review. **Talanta**, v. 80, n. 3, p. 1051–1062, 2008.

GOMES, J. H. F. et al. Weighted Multivariate Mean Square Error for processes optimization: A case study on flux-cored arc welding for stainless steel claddings. **European Journal of Operational Research**, v. 226, n. 3, p. 522–535, 1 maio 2013.

HAMADA, M. S.; WU, C. F. J. **Experiments: Planning, Analysis and Parameter Design Optimization**. 2011.

JOHNSON, R. ARNOLD.; WICHERN, D. W. **Applied multivariate statistical analysis**. 2014.

MONTGOMERY, D. C. **Design and analysis of experiments**. 8th. ed., 2012.

MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. **Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments**. 3th. ed., 2009.

SAMBUCINI, V. Confidence regions for the stationary point of a quadratic response surface based on the asymptotic distribution of its MLE. **Statistics and Computing**, v. 22, n. 3, p. 739–751, 1 maio 2012.