

Introdução à metodologia de superfície de resposta e modelos de mistura no R

Gilberto Rodrigues Liska¹; Marcelo Ângelo Cirillo²

Quando um experimento é feito, é muito comum o interesse em obter a máxima, ou mínima, resposta segundo algumas características. Situações do tipo ocorrem em muitas áreas da ciência. Por exemplo, na Agronomia, na maximização da produção de trigo em função da dose de nitrogênio e lâminas de irrigação; na tecnologia de alimentos, na otimização de características texturais de macarrão sem glúten segundo alguns ingredientes; otimização de processos industriais de soldagem; maximização energética em dietas segundos nutrientes; dentre várias outras aplicações.

Em todas essas aplicações, a função matemática que descreve tal problema para se encontrar qual condição de operação que leva ao ponto ótimo (máximo ou mínimo, quando existir) da variável resposta é, na maioria das situações práticas, desconhecida, sendo então, necessário estimá-la por meio do emprego de dados amostrais. Frente ao exposto, a classe dos modelos de superfície de resposta tem sido aplicada com sucesso em situações do tipo e, como um caso particular e de grande aplicabilidade, tem-se os modelos de mistura.

Os delineamentos de misturas são aplicados em situações nas quais um determinado produto é composto pela mistura de componentes. Cada componente é tratado como um fator e a região experimental é limitada por um simplex, dada a restrição unitária feita a cada ponto experimental. Devido à imposição dessa restrição, percebe-se que os fatores são dependentes, uma vez que, qualquer alteração em uma das proporções de um determinado componente, as demais proporções serão alteradas.

A modelagem estatística para esses delineamentos é feita utilizando técnicas de superfície de resposta aplicadas, com o propósito de determinar a combinação ótima dos componentes a uma variável resposta associada ao experimento. Neste contexto, a interpretação da superfície ajustada por um modelo polinomial, bem como, as curvas de níveis são restritas ao simplex. Portanto, os métodos usuais de estimação são devidamente adaptados, para que todas as misturas estejam compreendidas nessa região.

Tendo como motivação a aplicabilidade da modelagem de superfície de resposta, bem como os modelos de mistura, em várias áreas do conhecimento, atreladas a formulação e/ou composição de produtos, a proposta do minicurso resume-se em apresentar, de maneira aplicada, os passos necessários para realizar uma análise com modelos de superfície de resposta em uma abordagem computacional no software R.

¹ Universidade Federal do Pampa, campus Itaqui, CEP 97650000, Rio Grande do Sul, email: gilbertoliska@unipampa.edu.br

² Universidade Federal de Lavras, CEP 37200000, Minas Gerais, email: macufla@ufla.br