

Engenharia Física

**Adaptações no algoritmo simulated annealing para geração de experimentos de mistura ambos na presença (e ausência) de viés na especificação das proporções.**

Lucas Pinotti - Lucas Pinotti (6º período de Engenharia Física) IC VOLUNTÁRIO (PIVIC)

Professor Fortunato S. Menezes (ICN:DFI:UFLA) - Professor Fortunato S. Menezes (ICN:DFI:UFLA) - Orientador(a)

Professor Marcelo A. Cirilo (ICET:DES:UFLA) - Professor Marcelo A. Cirilo (ICET:DES:UFLA)

**Resumo**

Delineamento de misturas são representados em termos de variáveis ( $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, q$ ) chamado componentes. O conjunto das componentes definem e descrevem uma região experimental descrita no espaço simplex, onde cada variável apresenta o valor entre 0 e 1, caracterizando a especificação das proporções. Com estas características, a prática de delineamentos ambos em diversos setores industriais e em setores farmacêuticos torna-se justificável. O ponto chave é que, definir uma estrutura com N pontos experimentais torna-se complexa, já que podemos gerar um número muito grande (ilimitado) de configurações. Portanto, nós usamos delineamentos de misturas (com métricas apropriadas) que, em resumo, garantem regiões de confiança mais acuradas para estimativas das componentes ( $x_i$ ) quando desenvolvemos delineamentos condicionados a um critério estatístico. Para realizar esta tarefa, foi proposto uma modificação no algoritmo simulated annealing combinado com o método Monte Carlo na geração de delineamento D-ótimo de misturas classificados ambos na presença (e ausência) de viés na especificação das proporções. Concluímos que: (i) a modificação proposta no algoritmo simulated annealing permite a busca no espaço das componentes ( $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, q$ ) (espaço simplex) com a geração de delineamentos D-ótimo, dando suporte no controle da região distribuição de pontos experimentais próximos (ou longe) das bordas da região de observação limitada pelo espaço simplex. (ii) As estratégias ótimas geradas na abordagem enviesada são menos sensíveis ao número de componentes ( $q$ ) das variáveis ( $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, q$ ), e ao número de pontos experimentais (N), o que é extremamente relevante na determinação do número de pontos experimentais (N) (em experimental REAL). Como trabalho futuros: iremos observar outras métricas no delineamento de misturas e identificar qual é a mais apropriada para definir a região mais acurada, dada um delineamento prático (em setores onde delineamentos experimentais são requeridos).

Palavras-Chave: Mistura, Energia, Simplex.

Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://youtu.be/SF2DIzmzUkI?si=BF3N2H0qSkVOA5SC>