



UNIVERSIDADE DOS AÇORES
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA

ANÁLISE DE RESULTADOS
DE SIMULAÇÕES NÃO ESTACIONÁRIAS
APERIÓDICAS E CÍCLICAS

Rita Margarida Pacheco Dias Marques Brandão

PONTA DELGADA
SETEMBRO DE 2005

ANÁLISE DE RESULTADOS DE SIMULAÇÕES NÃO ESTACIONÁRIAS APERIÓDICAS E CÍCLICAS

Rita Margarida Pacheco Dias Marques Brandão

Dissertação submetida à Universidade dos Açores para obtenção do grau de Doutor em Matemática na especialidade de Investigação Operacional, orientada pelo Professor Doutor Acácio Manuel de Oliveira Porta Nova, Professor Associado do Departamento de Engenharia e Gestão do Instituto Superior Técnico da Universidade Técnica de Lisboa.

PONTA DELGADA
SETEMBRO DE 2005



Este trabalho foi parcialmente financiado pelo programa PRODEP III, na Medida 5/Ação 5.3-Formação Avançada de Docentes do Ensino Superior, do Concurso 2/5.3/PRODEP/2001.

Resumo

Neste trabalho, propomos uma metodologia que permite analisar, de um modo inovador, os resultados produzidos por vários tipos de simulações não estacionárias, através da construção de metamodelos lineares ou não lineares. Esta metodologia inclui procedimentos para a recolha dos dados relevantes, selecção do tipo de metamodelo, estimação e validação do metamodelo seleccionado.

Para complementar a caracterização dos resultados obtidos por um modelo de simulação, desenvolvemos procedimentos, válidos e robustos, para determinar intervalos de confiança para as medidas de *performance*, seleccionadas, do sistema em estudo.

Generalizamos alguns resultados analíticos, existentes, na literatura especializada de probabilidades e estatística, para modelos de filas de espera não estacionárias, para permitir a avaliação experimental da metodologia proposta, em relação a esses resultados. Esta avaliação experimental foi alargada a outros casos de estudo e a outras medidas de *performance*, para os quais, não existem resultados teóricos.

A experimentação realizada mostrou que é, geralmente, possível estimar um metamodelo válido, cuja componente determinística descreva globalmente o comportamento intrínseco das respostas estudadas, ao longo do tempo. Verificámos que uma função linear simples é, frequentemente, adequada para representar o metamodelo pretendido.

Salientamos a importância dos modelos clássicos de séries cronológicas, na descrição do comportamento da componente estocástica dos metamodelos estimados.

Identificamos e procuramos interpretar algumas situações anómalas, nos vários casos analisados, e propomos tópicos para posterior investigação de possíveis desenvolvimentos nesta área.

Abstract

In this thesis, we propose a methodology for analyzing the output of different types of non-stationary discrete event simulations, through the building of linear or nonlinear metamodels. This methodology includes detailed procedures for data collection, selection of the type of metamodel and estimation and validation of the selected metamodel.

In order to complement the output analysis of the simulation model, we developed valid and robust procedures for constructing confidence intervals for selected performance measures in the target system.

We generalize some analytical results for simple queueing systems, under non-stationary conditions, that are available in the literature of probability and statistics. Then, we perform a thorough experimental evaluation of our proposed methodology, for this and other case studies and other performance measures, for which no analytical results are available.

The experimentation showed that it is generally possible to estimate a valid metamodel, so that its deterministic component can capture the evolution in time of the underlying behavior of the selected responses. We verified that, in many cases, a simple linear function is quite suitable for representing the intended metamodel.

We point out the importance of classical time series models for describing the residuals of the estimated metamodels.

We identify and try to explain some anomalous situations, found on several case studies, and we propose topics for further research on this area.

Agradecimentos

Ao Professor Doutor Acácio Manuel de Oliveira Porta Nova, pela sábia orientação e disponibilidade permanente. O estímulo dado, as suas valiosas sugestões e críticas foram fundamentais para a elaboração e bom fim deste trabalho.

À Direcção do Departamento de Matemática e à Universidade dos Açores, agradeço as condições disponibilizadas para a realização deste trabalho.

À minha família, pelo apoio e afecto que sempre me transmitem e pela compreensão das desatenções muitas vezes por mim impostas.

Aos meus pais e irmãos, pelo apoio moral sempre disponibilizado.

Aos meus colegas e amigos, pelo carinho e apoio.

Ao Programa de Desenvolvimento Educativo para Portugal—PRODEP III, pelo apoio financeiro.

Ao Centro de Estudos de Gestão do Instituto Superior Técnico, em particular ao Professor Doutor Acácio Manuel de Oliveira Porta Nova, pelo apoio financeiro à minha participação em Conferências Internacionais.

Ao Aníbal, ao Pedro e à Catarina

Conteúdo

Lista de Figuras	xviii
Lista de Tabelas	xxi
1 Introdução	1
1.1 Contexto e Motivação	1
1.2 Objectivos da Pesquisa	3
1.3 Organização da Tese	3
2 Revisão da Literatura	5
2.1 Método Clássico das Séries Cronológicas	6
2.1.1 Método Autoregressivo	6
2.1.2 Método Autoregressivo e de Médias Móveis	14
2.2 Metamodelos de Simulação	17
2.2.1 Metamodelos de Regressão Lineares	18
2.2.2 Metamodelos de Regressão não Lineares	25
3 Análise de Simulações Não Estacionárias	29
3.1 Metodologia para Metamodelação em Condições Não Estacionárias . .	31
3.1.1 Estimação dos Parâmetros do Metamodelo	36
3.1.2 Validação do Metamodelo	39
3.2 Alguns Resultados Analíticos	45
3.2.1 Análise de Sensibilidade em Relação ao Número de Réplicas . .	51
3.2.2 Avaliação Experimental da Metodologia	58
3.2.3 Construção de Intervalos de Confiança	64
4 Simulações Não Estacionárias Aperiódicas	71
4.1 Sistemas de Filas de Espera $M/M/s$	73

4.1.1	Abordagem <i>Mecanicista</i> (Metamodelos ARIMA)	75
4.1.2	Abordagem <i>Fundamentalista</i> (Metamodelos de Regressão)	83
4.1.3	Ajustamento de Metamodelos para a Variância	97
4.2	Redes de Filas de Espera em <i>Tandem</i>	102
4.2.1	Ajustamento de Metamodelos para a Variância	110
4.3	Rede de Filas de Espera com Retroação	114
4.3.1	Ajustamento de Metamodelos para a Variância	119
4.4	Séries $y_t = bt$ com Resíduos ARMA	123
4.4.1	Ajustamento de Metamodelos para a Variância	128
4.5	Conclusões da Análise Experimental	131
5	Simulações Não Estacionárias Cíclicas	133
5.1	Alguns Conceitos Básicos	134
5.2	Exemplo: Tráfego Interrompido	137
5.2.1	Situação de Tráfego Normal	139
5.2.2	Situação de Tráfego em Hora de Ponta	146
5.2.3	Adaptação do Ciclo dos Semáforos à Hora de Ponta	152
6	Conclusões e Recomendações	157
6.1	Conclusões da Investigação	157
6.2	Recomendações para Trabalho Futuro	159
A	Listagem de Alguns Programas	161
A.1	Modelo na Linguagem Visual SLAM	161
A.2	Programas em FORTRAN 90	162
A.3	Comandos do Mathematica	165
A.4	Programas na Linguagem R	166
B	Catálogo de Curvas	173
B.1	Curvas Polinomiais	173
B.2	Curvas com Potência de x Desconhecida	174
B.3	Curvas de Crescimento Sigmóide	174
B.3.1	Curva Logística	174
B.3.2	Curva de Crescimento Gompertz	175
B.4	Curvas Periódicas	176
B.4.1	Onda Triangular	176

B.4.2 Onda Triangular Inclinada 177
B.4.3 Onda Dente de Serra 177
B.4.4 Onda Sinusoidal 178

Bibliografia **179**

Lista de Figuras

3.1	Contorno C	48
3.2	Contornos C_1 (haltere) e C_2 (pequeno círculo à volta da origem)	48
3.3	Número médio de entidades no sistema (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)	55
3.4	Número médio de entidades no sistema (fila $M/M/1$, com $\rho = 2$)	55
3.5	Séries médias da fila $M/M/1$ (para $\rho = 1$, $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$)	59
3.6	FAC e FACP dos resíduos da estimação preliminar da série média para $\rho = 1$	60
3.7	Metamodelos pouco aceitáveis (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)	63
3.8	Metamodelos ajustados (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)	64
3.9	Comparação dos intervalos de confiança (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$) . . .	66
3.10	Comparação dos intervalos de confiança (fila $M/M/1$, com $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$)	67
4.1	Comprimento médio da fila $M/M/1$, com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$	76
4.2	Séries originais e ajustadas: comprimento da fila $M/M/1$ ($\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)	77
4.3	Séries originais e ajustadas: tempo médio no sistema (fila $M/M/1$, $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)	78
4.4	Comprimento médio da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$	79
4.5	Séries originais e ajustadas: comprimento médio da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$ (transformação <i>trend</i>)	81
4.6	Séries originais e ajustadas: comprimento médio da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$ (transformação de Box-Cox)	81
4.7	Tempo médio de permanência no sistema (fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	82

4.8	Séries originais e ajustadas: tempo médio no sistema (fila $M/M/2$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	83
4.9	Exemplos de séries médias (fila $M/M/1$ com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)	84
4.10	Diagnóstico dos resíduos: comprimento médio da fila $M/M/1$, com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$	85
4.11	Metamodelos ajustados (2 séries, fila $M/M/1$, com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)	87
4.12	Metamodelos ajustados (100 séries, fila $M/M/1$, com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)	88
4.13	Exemplos de séries médias (fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	89
4.14	Diagnóstico dos resíduos: comprimento médio da fila $M/M/2$ com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$	90
4.15	Metamodelos ajustados (2 séries, fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	93
4.16	Metamodelos ajustados (100 séries, fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	93
4.17	Exemplos de séries médias (fila $M/M/3$, com $\rho = 1.5$ e $\delta_t = 0.5$)	94
4.18	Metamodelos ajustados (2 séries, fila $M/M/3$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	96
4.19	Metamodelos ajustados (100 séries, fila $M/M/3$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	97
4.20	Exemplos de séries das variâncias (fila $M/M/2$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	98
4.21	Metamodelos estimados (2 séries das variâncias, fila $M/M/2$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	99
4.22	Intervalos de confiança (2 séries, fila $M/M/2$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	101
4.23	Diagrama esquemático de uma rede de filas de espera em <i>tandem</i>	102
4.24	Exemplos de séries médias (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	103
4.25	Diagnóstico dos resíduos: tempo médio de permanência no sistema (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	104
4.26	Metamodelos ajustados (2 séries, filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	105
4.27	Metamodelos ajustados (100 séries, filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	107
4.28	Metamodelos ajustados (2 séries, filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 2$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	108
4.29	Metamodelos ajustados (100 séries, filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 2$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	110
4.30	Exemplos de séries das variâncias (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	111
4.31	Metamodelos ajustados (2 séries de variâncias, filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	112

4.32	Intervalos de confiança (2 séries, filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	113
4.33	Diagrama esquemático de uma rede de filas de espera com retroacção .	114
4.34	Exemplos de séries médias (rede de filas com retroacção, para $c = 20$ e $c = 100$)	116
4.35	Metamodelos ajustados (2 séries, rede de filas com retroacção, para $c = 20$ e $c = 100$)	117
4.36	Metamodelos ajustados (100 séries, rede de filas com retroacção, para $c = 20$ e $c = 100$)	119
4.37	Exemplos de séries das variâncias (rede de filas com retroacção, para $c = 20$)	120
4.38	Metamodelos ajustados (2 séries das variâncias, rede de filas com retroacção, para $c = 20$)	121
4.39	Intervalos de confiança (2 séries, rede de filas com retroacção, para $c = 20$)	123
4.40	Exemplos de séries médias (séries $y_t = bt$, com resíduos AR(2), MA(4) e ARMA(3,3))	124
4.41	Diagnóstico dos resíduos: séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4)	125
4.42	Metamodelos ajustados (100 séries $y_t = bt$, com resíduos AR(2), MA(4) e ARMA(3,3))	127
4.43	Exemplos de séries das variâncias (séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4)) .	128
4.44	Intervalos de confiança (2 séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4))	130
5.1	Onda triangular inclinada, com $a = 3$, $m = 2$ e $L = 10$	136
5.2	Diagrama esquemático do exemplo de tráfego interrompido	139
5.3	Comprimento médio da fila, nos dois sentidos (tráfego normal)	141
5.4	Tempo médio no sistema, nos dois sentidos (tráfego normal)	141
5.5	Comprimento da fila e tempo no sistema, médios - Séries originais e ajustadas (sentido 1, tráfego normal)	142
5.6	Comprimento da fila e tempo no sistema, médios - Séries originais e ajustadas (de 2500 a 3000 seg.)	143
5.7	FAC e FACP estimadas do comprimento médio fila do sentido 1	144
5.8	Comprimento da fila e tempo no sistema (médios, sentido 2 e tráfego congestionado)	148
5.9	Comprimento médio da fila no sentido 2 (tráfego congestionado)	149

5.10	Tráfego congestionado: ciclo 50-55-125-55	155
5.11	Tráfego congestionado: ciclo 50-55-130-55	155
5.12	Tráfego congestionado: ciclo 50-55-135-55	156
A.1	Modelo na linguagem Visual Slam (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$) . .	161
B.1	Curvas polinomiais	173
B.2	Curvas com potência de x desconhecida	174
B.3	Curvas logísticas	175
B.4	Curvas de crescimento Gompertz	176
B.5	Ondas triangulares	176
B.6	Ondas triangulares inclinadas	177
B.7	Ondas dente de serra	178
B.8	Ondas sinusoidais	178

Lista de Tabelas

3.1	IC a 95% para o número médio no sistema $M/M/1$ - cobertura e dimensão	57
3.2	Metamodelos estimados para a fila $M/M/1$ (para $\rho = 1$, $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$)	61
3.3	Metamodelos alternativos (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)	62
3.4	Comparação de metamodelos alternativos (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$) . .	62
3.5	IC a 95% para o número no sistema no instante t - cobertura e dimensão (fila $M/M/1$, para $\rho = 1$, $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$)	68
4.1	Modelos ARIMA para comprimento médio da fila $M/M/1$, com $\rho = 2$.	76
4.2	Modelos ARIMA para tempo médio no sistema (fila $M/M/1$, $\rho = 2$) . .	78
4.3	Modelos AR e MA para o comprimento médio da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$	80
4.4	Modelos ARIMA para o tempo médio no sistema (fila $M/M/2$, $\rho = 1$) .	83
4.5	Ajustamento das componentes determinísticas para a fila $M/M/1$, com $\rho = 2$	86
4.6	Ajustamento das componentes estocásticas para a fila $M/M/1$, com $\rho = 2$	89
4.7	Ajustamento das componentes determinísticas para a fila $M/M/2$, com $\rho = 1$	91
4.8	Ajustamento das componentes estocásticas para a fila $M/M/2$, com $\rho = 1$	92
4.9	Ajustamento das componentes determinísticas para a fila $M/M/3$, com $\rho = 1.5$	95
4.10	Ajustamento das componentes estocásticas da fila $M/M/3$, com $\rho = 1.5$	96
4.11	Critérios AIC e BIC (variância do comprimento da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$)	98
4.12	Teste da razão de verosimilhança (variância do comprimento da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$)	99

4.13	Ajustamento das componentes determinísticas das séries das variâncias (fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	100
4.14	Ajustamento das componentes estocásticas das séries das variâncias (fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	100
4.15	Ajustamento das componentes determinísticas (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$)	105
4.16	Ajustamento das componentes estocásticas (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$)	106
4.17	Ajustamento das componentes determinísticas (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 2$ e $\mu_i = 1$)	108
4.18	Ajustamento das componentes estocásticas (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 2$ e $\mu_i = 1$)	109
4.19	Ajustamento das componentes determinísticas das séries das variâncias (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	112
4.20	Ajustamento das componentes estocásticas das séries das variâncias (filas em <i>tandem</i> , $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)	112
4.21	Ajustamento das componentes determinísticas da rede de filas de espera com retroacção	117
4.22	Ajustamento das componentes estocásticas para a rede de filas de es- pera com retroacção	118
4.23	Ajustamento das componentes determinísticas das séries das variâncias (rede de filas de espera com retroacção, para $c = 20$)	121
4.24	Ajustamento das componentes estocásticas das séries das variâncias (rede de filas de espera com retroacção, para $c = 20$)	122
4.25	Ajustamento das componentes determinísticas: séries $y_t = bt$, com resíduos AR(2), MA(4) e ARMA(3,3)	126
4.26	Ajustamento das componentes estocásticas: séries $y_t = bt$, com resíduos AR(2), MA(4) e ARMA(3,3)	126
4.27	Ajustamento das componentes determinísticas das séries das variâncias: séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4)	129
4.28	Ajustamento das componentes estocásticas das séries das variâncias: séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4)	129
4.29	IC a 95% para as séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4)	131
5.1	Tráfego normal: tempo médio de espera <i>vs.</i> duração do ciclo	140

5.2	Ajustamento da componente determinística (1 série, tráfego normal) . .	143
5.3	Ajustamento das componentes determinísticas (100 séries, tráfego normal)	146
5.4	Modelos ajustados às componentes estocásticas (100 séries, tráfego normal)	147
5.5	Tráfego Congestionado: tempo médio de espera do ciclo 50-55-60-55 . .	148
5.6	Ajustamento da componente determinística (1 série, tráfego congestionado)	150
5.7	Ajustamento das componentes determinísticas (100 séries, tráfego congestionado)	151
5.8	Modelos para as componentes estocásticas (100 séries, tráfego congestionado).	153
5.9	Tráfego congestionado: tempo médio de espera <i>vs.</i> duração do ciclo . .	154

1

Introdução

1.1 Contexto e Motivação

A análise dos resultados produzidos por modelos de simulação de acontecimentos discretos é, seguramente, a área científica mais activa em simulação estocástica. A natureza fortemente autocorrelacionada das respostas de interesse, nomeadamente, em modelos de filas de espera, tem desafiado a criatividade dos analistas da simulação, que têm proposto os métodos e heurísticas mais variados para ultrapassar aquela dificuldade, em especial, quando se trata de estimar medidas da variabilidade das respostas do modelo, por exemplo, intervalos de confiança.

A um primeiro tipo de abordagem, caracterizado pelas tentativas de obter amostras aleatórias (ou quase), a partir de observações dependentes (métodos das réplicas independentes, regenerativo e das médias de lotes não sobrepostos ou espaçados), sucederam-se outros, em que se procurava explorar as relações de dependência entre os sucessivos valores observados das respostas (métodos espectral, das médias de lotes sobrepostos e das séries cronológicas).

A utilização dos modelos clássicos de séries cronológicas (ver Box, Jenkins e Reinsel (1994)), na análise de resultados em experiências de simulação estocástica estacionária, foi inicialmente proposta por Fishman (1971). Este sugeriu o ajustamento de modelos autoregressivos de ordem p , $AR(p)$, às respostas dos modelos de simulação, como passo intermédio para a estimação de medidas fiáveis da variabilidade das respostas (variância, intervalos de confiança). Schriber e Andrews (1984) generalizaram esta abordagem, utilizando uma aplicação automatizada para o ajuste de modelos autoregressivos e de médias móveis, $ARMA(p, q)$. Mais recentemente, Yuan e Nelson (1994), considerando apenas o ajuste de modelos autoregressivos, apresentaram uma

aproximação alternativa para a estimação da ordem autoregressiva do modelo e para a determinação do número de graus de liberdade. Finalmente, Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005) utilizaram modelos $AR(p)$ para o desenvolvimento de procedimentos, baseados em uma ou múltiplas réplicas do modelo de simulação, para a construção de intervalos de confiança de simulações de curta duração. Os procedimentos desenvolvidos não requerem a eliminação de observações iniciais ou a escolha da dimensão de lotes e permitem inferir da existência da média permanente do processo a partir dos dados.

No entanto, na generalidade dos trabalhos foram relatados resultados insatisfatórios, em particular, na estimação das probabilidades de cobertura de intervalos de confiança em sistemas simples de filas de espera. Em contraste com esta aparente incompatibilidade entre as filas de espera e os modelos de séries cronológicas, Brandão e Porta Nova (1999) mostraram que grande parte dos maus resultados anteriores se devia a uma duração de simulação insuficiente ou a um excessivo viés inicial. Controlando cuidadosamente estes dois factores foram obtidos resultados bastante positivos, para um fila de espera $M/M/3$ estacionária, quer em condições de tráfego moderado, quer congestionado.

Por outro lado, a literatura especializada em simulação estocástica é praticamente omissa em relação à análise de resultados da simulação de sistemas não estacionários. Sendo sabido que, por exemplo, numa fila de espera, a maioria das respostas de interesse tende para infinito, quando o factor de utilização da fila tende para um, assumiu-se provavelmente que essa evolução era descontrolada, ou que não haveria grande interesse na informação daí recolhida. Contudo, em muitos sistemas reais, existem situações (períodos de ponta, avarias, etc.) em que essas condições se verificam efectivamente. E há muitas perguntas que poderíamos formular, cujas respostas teriam um inegável interesse prático... Em média, quantas entidades estarão na fila, no fim do período de ponta? Qual o tempo médio de permanência das entidades, no sistema, a meio desse período? É claro que, ainda teria mais interesse se pudessemos avaliar a evolução destas (ou doutras) respostas ao longo do referido período, sem ter de repetir as morosas e computacionalmente pesadas simulações e respectivas análises de resultados. Este é o principal objectivo, quando se procura ajustar os chamados metamodelos de simulação: procurar modelos analíticos, mais simples que os modelos (programas) de simulação, mas que os representem realisticamente. Desde que foram propostas por Kleijnen (1974), as técnicas estatísticas de regressão têm sido extensivamente utilizadas na construção destes metamodelos.

1.2 Objectivos da Pesquisa

O objectivo principal da nossa pesquisa era o desenvolvimento de uma nova abordagem para a análise de resultados de simulações de acontecimentos discretos, com especial ênfase no estudo de casos em que as respostas a estudar apresentam algum tipo de não estacionaridade. Pretende-se descrever a evolução, no tempo, das respostas de interesse, através da construção de metamodelos de simulação adequados, quer para as componentes determinísticas, ou permanentes, quer para as estocásticas, ou transitórias, recorrendo a técnicas de análise de regressão e/ou de séries cronológicas, respectivamente.

1.3 Organização da Tese

No Capítulo 2, fazemos uma descrição pormenorizada de trabalhos anteriores, com relevância no desenvolvimento desta investigação, incidindo na aplicação de modelos clássicos de regressão e de séries cronológicas a simulações estacionárias. No Capítulo 3, apresentamos uma nova abordagem para a análise de simulações não estacionárias, avaliando-a em relação a alguns resultados analíticos existentes. No Capítulo 4, realizamos uma análise experimental de vários casos de estudo, não estacionários aperiódicos, usando a metodologia aqui proposta. No Capítulo 5, analisamos a aplicação da metodologia proposta para o caso de simulações cíclicas. Finalmente, no Capítulo 6, apresentamos algumas conclusões em relação ao trabalho realizado e identificamos tópicos para futuros desenvolvimentos.

2

Revisão da Literatura

Neste capítulo, apresentamos uma descrição pormenorizada de alguns trabalhos anteriores, que abordaram tópicos com relevância para o trabalho de investigação que conduziu a esta dissertação.

Tradicionalmente, a análise dos resultados produzidos por modelos de simulação de acontecimentos discretos tem abordado, no essencial, situações estacionárias, com insistência, nomeadamente, na estimação pontual e na construção de intervalos de confiança para as medidas de *performance* de interesse. Vários métodos de análise de resultados têm sido desenvolvidos nas últimas décadas e descritos na literatura especializada de simulação; no entanto, tendo em conta a natureza altamente autocorrelacionada das respostas dos modelos de simulação, o nosso interesse centrou-se nas abordagens baseadas na utilização de modelos clássicos de séries cronológicas (Box-Jenkins), como passo intermédio para a construção de intervalos de confiança para a média permanente do processo. Não existindo, nessa literatura, uma designação, comumente aceite, que englobasse a aplicação, neste contexto, dos modelos simplesmente autoregressivos ou autoregressivos e de médias móveis, propomos a denominação de *método clássico das séries cronológicas*, para descrever os dois casos; na Secção 2.1, expomos os trabalhos relevantes sobre este tópico.

Uma vez que uma parte substancial desta investigação incidia na análise de simulações não estacionárias, um outro assunto relevante, para o presente trabalho, era necessariamente a construção e validação de metamodelos de simulação, ou seja, modelos que tentam explicar o funcionamento intrínseco do modelo de simulação (geralmente, um complexo programa de computador), à custa de variáveis de decisão seleccionadas. Existindo, igualmente, várias abordagens para o ajustamento desses metamodelos, optámos pela utilização das técnicas clássicas de regressão para esse

fim; assim, na Secção 2.2, resumimos alguns trabalhos relevantes sobre a construção e validação de metamodelos de regressão lineares e não lineares.

2.1 Método Clássico das Séries Cronológicas

Nesta secção, descrevemos os métodos de análise de resultados que se baseiam na utilização de modelos de séries cronológicas, como um passo intermédio para a construção de intervalos de confiança para a média permanente do processo. Dividimos a apresentação tendo em conta o tipo de modelo ajustado; assim, na Secção 2.1.1, apresentamos os procedimentos que utilizam, apenas, modelos autoregressivos e, na Secção 2.1.2, os procedimentos que utilizam modelos autoregressivos e de médias móveis.

2.1.1 Método Autoregressivo

A utilização de modelos autoregressivos, na construção de intervalos de confiança para a média permanente do processo estocástico, foi inicialmente proposta por Fishman (1971, 1978). Mais recentemente, Yuan e Nelson (1994) retomaram e actualizaram o método desenvolvido por Fishman, incorporando novos processos para a estimação da ordem do modelo autoregressivo e para o cálculo do número de graus de liberdade do intervalo de confiança. Uma nova aproximação, para a estimação e construção de intervalos de confiança para a média de um processo estocástico proveniente de simulações de curta duração e em que pode existir uma fase transiente significativa, foi apresentado por Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005).

Os procedimentos, descritos pelos autores citados, apresentam uma metodologia comum para a construção dos intervalos de confiança, que descreveremos a seguir. No entanto, é necessário efectuar uma distinção em relação ao número de réplicas usadas no modelo de simulação. Em Fishman (1978) e Yuan e Nelson (1994), é considerada, apenas, uma única réplica do modelo de simulação, enquanto que, em Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005), são apresentadas duas alternativas: uma única réplica ou múltiplas réplicas.

Vejamos, em primeiro lugar, o caso de dispormos, apenas, de uma réplica do modelo de simulação. Em Fishman (1978) e Yuan e Nelson (1994), admite-se que foi efectuada uma análise do viés inicial e que, por uma questão de conveniência de notação, Y_1, Y_2, \dots, Y_n representam o processo de resultados correspondente às observações da fase permanente. Por outro lado, Sheth-Voss, Willemain e Haddock

(2005) utilizam todas as observações e a existência de estacionaridade não é assumida antecipadamente.

A principal suposição, comum a todos os procedimentos desenvolvidos, é a possibilidade de transformar uma sequência de observações originalmente (auto)correlacionadas, $\{Y_j : j = 1, 2, \dots, n\}$, numa sequência de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.), através de um modelo autoregressivo. Um modelo autoregressivo de ordem p , denotado por $AR(p)$, é definido pela autoregressão linear

$$\varepsilon_i = \sum_{s=0}^p b_s(Y_{i-s} - \mu_Y), \text{ para } i = p+1, \dots, n, \quad (2.1)$$

onde $b_0 = 1$, $E[Y_i] = \mu_Y$ é a média desconhecida do processo e $\{\varepsilon_i\}$ é uma sequência de variáveis aleatórias i.i.d. com média 0 e variância finita σ_ε^2 . Uma expressão equivalente, para a equação (2.1), é

$$Y_i = \phi_0 + \sum_{s=1}^p \phi_s Y_{i-s} + \varepsilon_i, \quad (2.2)$$

com $\phi_0 = \mu_Y(1 - \sum_{s=1}^p \phi_s)$ e onde $\phi_1 = -b_1, \phi_2 = -b_2, \dots, \phi_p = -b_p$.

A construção de um intervalo de confiança para a média permanente do processo segue as seguintes etapas, que passamos a descrever.

1. Estimação dos parâmetros do modelo

Quando a ordem de um modelo $AR(p)$ é conhecida, existem vários métodos de estimação disponíveis na literatura; ver, por exemplo, Box, Jenkins e Reinsel (1994).

Fishman (1978), definindo o modelo $AR(p)$ através da equação (2.1), determina as estimativas dos parâmetros do modelo b_1, b_2, \dots, b_p , resolvendo o seguinte sistema de equações, denominadas de equações de Yule-Walker:

$$\sum_{s=1}^p \hat{b}_s \hat{\gamma}(r-s) = -\hat{\gamma}(r), \text{ para } r = 1, 2, \dots, p,$$

onde $\hat{\gamma}(s)$ representa o estimador centrado das autocovariâncias amostrais,

$$\hat{\gamma}(s) = \frac{1}{n-s} \sum_{i=1}^{n-s} [Y_i - \bar{Y}(n)][Y_{i+s} - \bar{Y}(n)].$$

Neste caso, demonstra-se que—ver Fishman (1978, p. 248-250)—a variância dos resíduos, σ_ε^2 , obedece à seguinte equação:

$$\sigma_\varepsilon^2 = \sum_{s=0}^p b_s \gamma(s),$$

que pode ser estimada por

$$\hat{\sigma}_\varepsilon^2 = \sum_{s=0}^p \hat{b}_s \hat{\gamma}(s).$$

Por outro lado, em Yuan e Nelson (1994) e Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005), as estimativas $\hat{\phi} = \{\hat{\phi}_0, \dots, \hat{\phi}_p\}$, dos parâmetros do modelo, são calculadas através do método dos mínimos quadrados condicionados, ou método da máxima verosimilhança condicional. Aquelas estimativas são determinadas—ver Fuller (1976)—através da resolução do sistema de equações normais:

$$\hat{\phi} = \mathbf{A}_n^{-1} \boldsymbol{\nu}_n,$$

onde

$$\mathbf{A}_n = \frac{1}{n-p} \sum_{t=p+1}^n \mathbf{Y}_t^T \mathbf{Y}_t,$$

$$\mathbf{Y}_t = (1, Y_{t-1}, \dots, Y_{t-p}),$$

$$\boldsymbol{\nu}_n = \frac{1}{n-p} \sum_{t=p+1}^n \mathbf{Y}_t^T Y_t.$$

Verifica-se que, na solução do sistema anterior,

$$\hat{\phi}_0 = \frac{1}{n-p} \sum_{t=p+1}^n (Y_t - \sum_{i=1}^p \hat{\phi}_i Y_{t-i}).$$

O estimador dos mínimos quadrados condicionados de σ_ε^2 é

$$\tilde{\sigma}_\varepsilon^2 = \frac{\sum_{j=p+1}^n (Y_j - \hat{\phi}_0 - \sum_{i=1}^p \hat{\phi}_i Y_{j-i})^2}{n-p}.$$

2. Estimação da ordem p do modelo

A determinação da ordem do processo, p , em Fishman (1978), é efectuada recorrendo a um teste estatístico. Suponhamos que se calculam os valores de $\hat{\sigma}_\varepsilon^2$ para as sucessivas ordens $j = 0, 1, \dots, q$, onde q é um valor elevado,

consideravelmente maior que a ordem autoregressiva que se prevê. Então, se a ordem for $0 \leq j < q$, a distribuição da estatística

$$T_{q-j} = n \left(1 - \frac{\hat{\sigma}_{\varepsilon,q}^2}{\hat{\sigma}_{\varepsilon,j}^2} \right)$$

converge para a distribuição χ^2 com $q-j$ graus de liberdade, quando $n \rightarrow +\infty$. Para seleccionar a ordem do processo, testamos, repetidamente, a estatística anterior, para valores sucessivos de $j = 0, 1, 2, \dots$, parando quando o valor da estatística, para a ordem j , é aceite.

Por seu turno, Yuan e Nelson (1994) estimam a ordem autoregressiva com base no critério PLS (*predictive least squares*), descrito em Rissanen (1986). Este critério selecciona a ordem do modelo, baseando-se na capacidade de previsão do mesmo. Para uma dada ordem, h , candidata, seja

$$\text{PLS}_h = \frac{\sum_{i=2h+2}^n e_i^2(h)}{n - 2h - 1},$$

onde $e_i^2(h) = Y_i - \hat{Y}_i(h)$ e $\hat{Y}_i(h)$ representa a previsão do valor Y_i , tendo em conta o modelo $\text{AR}(h)$ estimado pelo método dos mínimos quadrados condicionados. O critério PLS selecciona a ordem \hat{p} , do conjunto de ordens \mathcal{O} , tal que, $\text{PLS}_{\hat{p}} = \min_{h \in \mathcal{O}} \text{PLS}_h$. Assume-se que o conjunto das ordens candidatas contém o verdadeiro valor p . Provou-se que este estimador é fortemente consistente (ver, em Yuan e Nelson (1994), as respectivas referências).

Em Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005), a ordem autoregressiva é estimada através da minimização do valor dado pelo critério FIC (*finite-sample information criterion*); ver Broersen e Weinsink (1993).

3. Avaliação do diagnóstico do modelo $\text{AR}(p)$

A análise da qualidade do ajustamento do modelo foi realizada, apenas, por Yuan e Nelson (1994). Para este efeito, utilizaram um teste *Portmanteau*—ver Ljung e Box (1978)—que avalia a qualidade do ajustamento do modelo através do cálculo da estatística \tilde{Q} de Ljung-Box, definida por

$$\tilde{Q} = n(n+2) \sum_{s=1}^k \frac{1}{n-s} \hat{\rho}_s^2(\hat{\varepsilon}),$$

onde $\hat{\rho}_s(\hat{\varepsilon})$ é a autocorrelação amostral dos resíduos do modelo $\text{AR}(p)$ estimado e k é um valor suficientemente grande para que $\hat{\rho}_s(\hat{\varepsilon})$ seja insignificante, para

$s > k$. Neste trabalho, os autores consideraram, para k , o maior inteiro menor que $\log n$. Sob a hipótese de que as k primeiras autocorrelações são nulas, ou seja, $H_0 : \hat{\rho}_1(\hat{\varepsilon}) = \hat{\rho}_2(\hat{\varepsilon}) = \dots = \hat{\rho}_k(\hat{\varepsilon}) = 0$, a estatística \tilde{Q} tem distribuição aproximada χ^2 com $k - p$ graus de liberdade. Passaremos a designar, o teste descrito, por teste de Ljung-Box.

Os modelos ajustados, que não passaram o teste de Ljung-Box, foram também utilizados na construção dos intervalos de confiança, por forma a investigar a relação entre a passagem no teste e o desempenho do método.

4. Escolha do estimador para a média do processo, μ_Y

Fishman (1978) e Yuan e Nelson (1994) consideram, para estimador de μ_Y , a média amostral,

$$\bar{Y}(n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i.$$

Em contrapartida, Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005) consideram o seguinte estimador:

$$\hat{\mu}_Y = \begin{cases} \hat{\phi}_0 \left(1 - \sum_{i=1}^p \hat{\phi}_i\right)^{-1} & , \text{ se } |\hat{r}_i| > 1, \text{ para } i = 1, 2, \dots, p \\ \text{indefinido} & , \text{ caso contrário} \end{cases}, \quad (2.3)$$

onde $\{\hat{\phi}_0, \dots, \hat{\phi}_p\}$ representam as estimativas dos parâmetros do modelo, $\{\phi_0, \dots, \phi_p\}$, e $\{\hat{r}_1, \dots, \hat{r}_p\}$ são as raízes da equação característica

$$1 - \sum_{i=1}^p \hat{\phi}_i z^i = 0.$$

Note-se que a existência de estacionaridade não é previamente assumida e que o estimador de μ_Y somente será definido se for possível ajustar um modelo AR(p) estacionário.

5. Estimação da variância do estimador da média do processo

Consideremos, para estimador da média do processo, a média amostral, $\bar{Y}(n)$. Neste caso, mostra-se que, se o processo de resultados satisfaz a equação (2.1) então

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \text{Var}[\bar{Y}(n)] = \frac{\sigma_\varepsilon^2}{(1 + \sum_{s=1}^p b_s)^2}$$

ou, de uma forma equivalente,

$$\text{Var}[\bar{Y}(n)] \approx \frac{\sigma_\varepsilon^2}{n(1 + \sum_{s=1}^p b_s)^2}.$$

De acordo com o resultado anterior, $\text{Var}[\bar{Y}(n)]$ é estimada, em Fishman (1978), por

$$\widehat{\text{Var}}[\bar{Y}(n)] = \frac{\hat{\sigma}_\varepsilon^2}{n(1 + \sum_{s=1}^{\hat{p}} \hat{b}_s)^2}$$

e, em Yuan e Nelson (1994), por

$$\widetilde{\text{Var}}[\bar{Y}(n)] = \frac{\tilde{\sigma}_\varepsilon^2}{n(1 - \sum_{s=1}^{\hat{p}} \hat{\phi}_s)^2}.$$

Consideremos, agora, para estimador da média do processo, $\hat{\mu}_Y$. Neste caso, se (2.2) for válido e satisfizer as condições de estacionaridade ($|\hat{r}_i| > 1$) e se $\hat{\mu}_Y$ for o estimador de máxima verosimilhança da média do processo, dadas n observações, então, $n^{1/2}(\hat{\mu}_Y - \mu_Y) \rightarrow N(0, \sigma_\varepsilon^2(1 - \sum_{s=1}^{\hat{p}} \hat{\phi}_s)^{-2})$ em distribuição; ver Yuan e Nelson (1994). Neste caso, Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005) consideram, para estimador da variância de $\hat{\mu}_Y$,

$$\widehat{\text{Var}}[\hat{\mu}_Y] = \frac{\tilde{\sigma}_\varepsilon^2}{(n - \hat{p})(1 - \sum_{s=1}^{\hat{p}} \hat{\phi}_s)^2}.$$

6. Cálculo dos graus de liberdade e do intervalo de confiança

Os intervalos de confiança propostos têm, genericamente, a mesma forma, variando, apenas, os estimadores escolhidos. Assim, o intervalo de confiança com, aproximadamente, $100(1 - \alpha)\%$ de probabilidade de cobertura para μ_Y é, segundo

(i) Fishman (1978),

$$\bar{Y}(n) \pm t_{\hat{d}, 1 - \frac{\alpha}{2}} \sqrt{\widehat{\text{Var}}[\bar{Y}(n)]},$$

(ii) Yuan e Nelson (1994),

$$\bar{Y}(n) \pm t_{\hat{d}, 1 - \frac{\alpha}{2}} \sqrt{\widetilde{\text{Var}}[\bar{Y}(n)]},$$

e (iii) Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005),

$$\hat{\mu}_Y \pm t_{\hat{d}, 1 - \frac{\alpha}{2}} \sqrt{\widehat{\text{Var}}[\hat{\mu}_Y]},$$

em que $t_{\hat{d}, 1-\frac{\alpha}{2}}$ é o quantil de probabilidade $1 - \frac{\alpha}{2}$ da distribuição t de Student, com \hat{d} graus de liberdade.

Fishman (1978, p.252) sugere a seguinte aproximação, para estimar o número de graus de liberdade d . Sejam $V = n\text{Var}[\bar{Y}(n)]$ e $\hat{V} = n\widehat{\text{Var}}[\bar{Y}(n)]$. Assumamos que $\hat{d}\hat{V}/V$ é uma variável aleatória com distribuição χ^2 com d graus de liberdade. Ora, se Y é uma variável aleatória com distribuição χ^2 com d graus de liberdade, então $E[Y] = d$ e $\text{Var}[Y] = 2d$. Assim sendo, podemos calcular o número de graus de liberdade através da igualdade

$$d = \frac{2E^2[Y]}{\text{Var}[Y]}.$$

Uma vez que \hat{V} é um estimador consistente de V , então,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E[\hat{V}] = V = \frac{\sigma_\varepsilon^2}{(1 + \sum_{s=1}^p b_s)^2}.$$

Mais ainda, prova-se que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n\text{Var}[\hat{V}] = \frac{4V^2 \sum_{s=0}^p (p-2s)b_s}{(1 + \sum_{s=1}^p b_s)^2}.$$

Com base nos resultados anteriores, uma estimativa, para o número de graus de liberdade, é, então,

$$\hat{d} = \frac{n(\sum_{s=0}^p \hat{b}_s)}{2 \sum_{s=0}^p (p-2s)\hat{b}_s}. \quad (2.4)$$

Em contrapartida, Yuan e Nelson (1994) apresentam várias aproximações para d , efectuando uma distinção entre pequenas e grandes amostras.

Amostras de grande dimensão

Uma vez que os estimadores da ordem e dos parâmetros do modelo convergem para os seus verdadeiros valores quando $n \rightarrow \infty$, o problema é simplificado, se considerarmos as estimativas como constantes conhecidas. Neste caso,

$$(n - \hat{p})\tilde{\sigma}_\varepsilon^2/\sigma_\varepsilon^2 \sim \chi^2(n - \hat{p}) \quad \text{e} \quad (n - \hat{p})\widetilde{\text{Var}}[\bar{Y}(n)]/\text{Var}[\bar{Y}(n)] \sim \chi^2(n - \hat{p}).$$

Uma vez que n é sempre muito maior que a ordem \hat{p} , os autores consideram n para o número de graus de liberdade.

Amostras de pequena dimensão

Para este caso, os autores descrevem duas aproximações: a apresentada por Fishman (1978), que é dada pela equação (2.4), e uma segunda, que aborda o problema de uma maneira diferente e que passamos a descrever. Consideremos o processo estocástico $\{Z_j : j = 1, 2, \dots, n'\}$, onde $Z_j \sim \text{i.i.d.}(\mu_Z, \sigma_\varepsilon^2)$ e $n' = \max\{1, n(1 - \sum_{i=1}^p \phi_i)^2\}$, e seja $\bar{Z}(n') = \sum_{j=1}^{n'} Z_j/n'$; então, $E[\bar{Z}(n')] = \mu_Z$ e $\text{Var}[\bar{Z}(n')] \approx \text{Var}[\bar{Y}(n)]$. Podemos pensar que, a informação, contida em $\{Z_j\}$, é equivalente à contida em $\{Y_j\}$, para efeitos da estimação da variância. Este resultado sugere que se tome, para o número de graus de liberdade de $\widehat{\text{Var}}[\bar{Y}(n)]$, o número de graus de liberdade de $\widehat{\text{Var}}[\bar{Z}(n')]$, isto é, n' . Na prática, para obter o valor de n' , substituímos p e os parâmetros ϕ_i 's pelas suas estimativas.

Finalmente, em Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005), o número de graus de liberdade é estimado, também, por (2.4).

Várias réplicas do modelo de simulação

Consideremos, agora, o caso, descrito em Sheth-Voss, Willemain e Haddock (2005), em que são efectuadas r réplicas, com o mesmo número de observações, do modelo de simulação. Para cada réplica j , identifica-se e estima-se um modelo autoregressivo, obtendo-se uma estimativa para a média, $\hat{\mu}_j$, para $j = 1, 2, \dots, r$, com base no estimador definido pela equação (2.3).

Uma vez que $\hat{\mu}_j$ é assintoticamente normal, um intervalo de confiança, para μ_Y , é dado por

$$\bar{\hat{\mu}} \pm t_{r-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\widehat{\text{Var}}[\hat{\mu}]},$$

onde

$$\bar{\hat{\mu}} = \frac{\sum_{j=1}^r \hat{\mu}_j}{r} \quad \text{e} \quad \widehat{\text{Var}}[\hat{\mu}] = \frac{\sum_{j=1}^r (\hat{\mu}_j - \bar{\hat{\mu}})^2}{r(r-1)}.$$

É de notar que, a expressão deste intervalo de confiança é similar à que se obtém através do método (de análise de resultados) das réplicas independentes.

Fishman obteve resultados insatisfatórios, nomeadamente, na estimação das probabilidades de cobertura dos intervalos de confiança, em sistemas simples de filas de espera (fila $M/M/1$ com factor de utilização 0.9).

Yuan e Nelson, com base em resultados empíricos, que consistiram na aplicação do procedimento a vários modelos de teste, concluíram que o procedimento tinha um bom desempenho, se o processo de resultados não apresentasse uma forte autocorrelação

positiva, sendo, neste caso, necessária uma amostra de grande dimensão, para evitar a degradação do procedimento. Verificaram, também, que o critério PLS sobrestimava a ordem do modelo; apesar disso e atendendo aos bons resultados obtidos, conjecturaram que é um critério apropriado para ajustar a estrutura de autocorrelação dos resultados. Recomendaram, igualmente, o uso da aproximação das amostras equivalentes, para determinar o número de graus de liberdade. Também constataram que o teste de Ljung-Box não providenciava grande protecção na utilização do procedimento. Concluíram, ainda, que o procedimento aparentava ser robusto, em relação a desvios à normalidade dos erros e a estruturas de autocorrelação não autoregressivas.

Sheth-Voss, Willemain e Haddock concluíram que o estimador, por eles proposto, providenciava uma base para a estimação da média do processo, mesmo para séries curtas, dominadas por efeitos transientes. Apesar dos bons resultados obtidos, verificaram que o maior impedimento, para a construção de intervalos de confiança válidos, aparentava ser a não normalidade dos processos subjacentes.

2.1.2 Método Autoregressivo e de Médias Móveis

Nesta secção, iremos descrever a abordagem, apresentada por Schriber e Andrews (1984), para a determinação de intervalos de confiança para a média permanente do processo estocástico de resultados. Os autores generalizam a abordagem anterior, permitindo o ajuste de modelos autoregressivos e de médias móveis, ARMA(p, q).

Um modelo ARMA(p, q), no qual a abordagem se baseia, é definido por

$$Y_t = \phi_1 Y_{t-1} + \dots + \phi_p Y_{t-p} + \phi_0 + \varepsilon_t - \theta_1 \varepsilon_{t-1} - \dots - \theta_q \varepsilon_{t-q}, \quad (2.5)$$

em que

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2),$$

$$E[\varepsilon_i \varepsilon_j] = \begin{cases} \sigma_\varepsilon^2, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

e

$$\text{Cov}(\varepsilon_i, Y_j) = 0, \quad \text{se } i > j.$$

A média do processo é dada por

$$\mu_Y = \phi_0 \left(1 - \sum_{i=1}^p \phi_i \right)^{-1}$$

e a variância por

$$\sigma_Y^2 = \sigma_\varepsilon^2 f(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}),$$

onde ϕ e θ representam os vectores dos coeficientes autoregressivos e de médias móveis, respectivamente, e em que a forma específica de f depende dos parâmetros p e q . A função densidade espectral, para o modelo (2.5), é

$$f(w) = \frac{\sigma_\varepsilon^2}{2\pi} \frac{\left|1 - \sum_{j=1}^q \theta_j e^{-iwj}\right|^2}{\left|1 - \sum_{j=1}^p \phi_j e^{-iwj}\right|^2}, \quad -\pi \leq w \leq \pi.$$

A metodologia, apresentada por Schriber e Andrews (1984), para a determinação de um intervalo de confiança para a média permanente do processo envolve seis passos, que passamos a descrever resumidamente.

1. Cálculo das autocorrelações amostrais

Dadas n observações, calculamos as primeiras 13 autocorrelações amostrais, através do estimador

$$\hat{\rho}(s) = \frac{\sum_{i=1}^{n-s} [Y_i - \bar{Y}(n)][Y_{i+s} - \bar{Y}(n)]}{\sum_{i=1}^n [Y_i - \bar{Y}(n)]^2}.$$

2. Identificação do modelo ARMA

A identificação, dos modelos ARMA candidatos, é feita através de um procedimento automático desenvolvido por Gray, Kelley e McIntire (1978), com base nas autocorrelações amostrais calculadas no passo anterior.

3. Estimação dos parâmetros do(s) modelo(s) ARMA candidato(s)

A estimação dos parâmetros é efectuada utilizando o método de máxima verossimilhança condicional, descrito em Box, Jenkins e Reinsel (1994).

4. Avaliação do diagnóstico dos modelos candidatos

Identificado(s) o(s) modelo(s) e estimados os seus parâmetros, passamos a avaliar se o modelo se ajusta adequadamente ao dados. De entre os vários testes aplicáveis, está o teste t , onde se ensaia a nulidade de cada parâmetro. Cada estatística t é calculada dividindo o correspondente parâmetro estimado pelo respectivo erro padrão estimado. É também aplicado o teste de Ljung-Box. Neste caso, como estamos perante um modelo ARMA(p, q), o número de graus de liberdade é dado por $k - p - q$, sendo p e q as ordens autoregressiva e de médias móveis, respectivamente, do modelo estimado.

5. Estimação da variância da média amostral

Se um modelo foi aceite, é, então, usado para estimar $\text{Var}[\bar{Y}(n)]$. Se a função densidade espectral de uma série cronológica é contínua, então, a variância da média da amostra está relacionada com a função densidade espectral, através de

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \text{Var}[\bar{Y}(n)] = 2\pi f(0),$$

em que $f(0)$ é a densidade espectral da série $\{Y_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ para a frequência nula.

A função densidade espectral é estimada por

$$\hat{f}(w) = \frac{\hat{\sigma}_\varepsilon^2 \left| 1 - \sum_{j=1}^q \hat{\theta}_j e^{-iwj} \right|^2}{2\pi \left| 1 - \sum_{j=1}^p \hat{\phi}_j e^{-iwj} \right|^2},$$

onde $\hat{\theta}_j$, $\hat{\phi}_j$ e $\hat{\sigma}_\varepsilon^2$ são as estimativas dos respectivos parâmetros do modelo.

A variância da média da amostra pode então ser estimada por

$$\widehat{\text{Var}}[\bar{Y}(n)] = \frac{\hat{\sigma}_\varepsilon^2}{2\pi} \left(1 - \sum_{j=1}^q \hat{\theta}_j \right)^2 \left(1 - \sum_{j=1}^p \hat{\phi}_j \right)^{-2}.$$

6. Cálculo dos graus de liberdade e do intervalo de confiança

O intervalo de confiança resultante, com, aproximadamente, $100(1 - \alpha)\%$ de probabilidade de cobertura, para μ_Y , é-nos dado por

$$\bar{Y}(n) \pm t_{\hat{d}, 1 - \frac{\alpha}{2}} \sqrt{\widehat{\text{Var}}[\bar{Y}(n)]},$$

com

$$\hat{d} = \left(\frac{n}{\hat{c}_n} \right) - p - q - 1$$

e

$$\hat{c}_n = 1 + 2 \sum_{j=1}^{n-1} (1 - j/n) \frac{\hat{\gamma}(j)}{\hat{\gamma}(0)}.$$

Se $\hat{d} < 1$, então, o número de graus de liberdade é ajustado para 1. Por outro lado, se $\hat{c}_n < 1$, significando que $n/\hat{c}_n > n$, então o número de graus de liberdade será ajustado para $n - p - q - 1$.

O desempenho do procedimento, atrás descrito, na determinação de intervalos de confiança, foi avaliado, recorrendo à simulação de seis processos estocásticos teóricos (modelos ARMA) e a um sistema de filas de espera $M/M/1$. Os autores concluíram que, para os modelos ARMA testados, os resultados podiam ser classificados de bom a excelente, para dimensões de amostras entre 300 e 400 observações. Para o caso das sequências provenientes da fila de espera, as coberturas eram baixas, no caso de amostras de dimensão reduzida, mas melhoravam com o aumento da dimensão da amostra; no entanto, mesmo nesta situação, os valores obtidos eram, ainda, significativamente inferiores à probabilidade de cobertura nominal dos intervalos de confiança.

2.2 Metamodelos de Simulação

A aplicação de modelos clássicos de regressão, no contexto da simulação estocástica, ocorre, essencialmente, no âmbito do planeamento de experiências, em particular, na construção de metamodelos de simulação.

Em geral, podemos dizer que um modelo de simulação tenta aproximar a realidade, enquanto um metamodelo de simulação é uma aproximação do modelo de simulação. Se considerarmos um modelo de simulação como uma transformação de *input-output*, então estamos basicamente perante uma função que, usualmente, pode não se conseguir exprimir através de uma fórmula simples. No entanto, é, frequentemente, possível aproximar os resultados, obtidos pelo modelo de simulação, por uma expressão simples (um metamodelo).

Representemos, de acordo com Kleijnen e Groenendaal (1992), o modelo (ou programa) de simulação através de uma função matemática φ ,

$$\mathbf{Y} = \varphi(\mathbf{Z}, \mathbf{s}), \quad (2.6)$$

onde \mathbf{Y} é a resposta do sistema, $\mathbf{Z} = (Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$ são os parâmetros e variáveis de entrada e \mathbf{s} um vector de números aleatórios, ou um valor inicial (ou semente), escolhido do gerador de números pseudo-aleatórios. É de salientar que se entendem, por parâmetros, as quantidades que não podem ser observadas no sistema real, enquanto as variáveis representam quantidades observáveis directamente. Por exemplo, na simulação de uma agência bancária, o vector \mathbf{Z} pode incluir a taxa de chegadas dos clientes à agência, a taxa de serviço e o número de postos de atendimento. O vector de resposta, \mathbf{Y} , pode incluir o tempo de permanência na fila ou no sistema.

De um modo geral, o desenvolvimento de metamodelos é feito separadamente para cada uma das componentes de \mathbf{Y} . Por conseguinte, para cada resposta individual do sistema, os metamodelos (funções que aproximam o modelo de simulação) considerados são da forma

$$Y = f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon, \quad (2.7)$$

onde as variáveis explicativas (ou de decisão), $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_d)$, pertencem a um subconjunto de \mathbb{R}^d , $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m) \subseteq \mathbb{R}^m$ é um vector de parâmetros desconhecidos, ε representa o erro e f é uma função desconhecida, mais simples que φ , que depende dos parâmetros $\boldsymbol{\beta}$. O erro ε inclui, tanto os efeitos devido à inadequação da representação de φ por f , como efeitos intrínsecos, sempre presentes em qualquer modelo de simulação estocástica e que dependem de \mathbf{s} em (2.6). Uma variável explicativa, X_i , pode ser igual a uma só variável, Z_j , ou a uma transformação de uma ou mais variáveis e/ou parâmetros, Z_j, Z_{j+k}, \dots . Assim, os parâmetros e variáveis de entrada, \mathbf{Z} em (2.6), determinam as variáveis independentes \mathbf{X} do metamodelo de simulação (2.7).

Na literatura de simulação usual, são referenciados diversos tipos de metamodelos (ver, por exemplo, Barton 1992, 1994, 1998). No entanto, a nossa abordagem irá incidir nos denominados metamodelos de regressão, considerando, separadamente, os casos linear e não linear.

2.2.1 Metamodelos de Regressão Lineares

A utilização de metamodelos polinomiais de regressão, para explicar o desempenho de modelos de simulação, tem sido uma escolha preferencial entre a comunidade de simulação. Em particular, Kleijnen tem estado muito activo nesta área—ver, por exemplo, Kleijnen (1992, 1998, 2006) e Kleijnen e Sargent (2000). Neste contexto, a função f assume a forma

$$f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^m \beta_i p_i(\mathbf{X}),$$

onde $p_1(\mathbf{X}), p_2(\mathbf{X}), \dots, p_m(\mathbf{X})$ pertencem a um conjunto de m funções conhecidas, que dependem das variáveis explicativas, por exemplo, os monómios cruzados de X , $X_1, X_2, \dots, X_1 X_2, X_1 X_3, \dots, X_1 X_2 X_3, \dots$. Os parâmetros $\boldsymbol{\beta}$ são estimados a partir dos resultados de uma experiência de simulação, através do método dos mínimos quadrados ou do método da máxima verosimilhança, que, se admitirmos que os erros são gaussianos (ou normais), constituem procedimentos equivalentes.

Consideremos, no contexto das réplicas independentes, uma experiência de simulação com n pontos experimentais e r réplicas em cada um desses pontos. A resposta do modelo, na j -ésima réplica do i -ésimo ponto experimental, Y_{ij} , pode ser expressa por

$$Y_{ij} = f(\mathbf{X}_{i.}, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon_{ij}, \quad (2.8)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$ e $j = 1, 2, \dots, r$ e onde, por hipótese,

$$\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma_i^2), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad \text{e} \quad j = 1, 2, \dots, r,$$

com $\sigma_i^2 > 0$.

Podemos, para efeitos de estimação e tendo em conta que existe o mesmo número de réplicas em cada ponto experimental, considerar o metamodelo no qual as observações individuais são substituídas, em cada ponto experimental, pela respectiva média

$$\bar{Y}_i = f(\mathbf{X}_{i.}, \boldsymbol{\beta}) + \bar{\varepsilon}_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

com $\text{Var}[\bar{Y}_i] = \sigma_i^2/r$ e $\bar{\varepsilon}_i \sim N(0, \sigma_i^2/r)$.

Kleijnen (1992) sugere dois estimadores para os parâmetros $\boldsymbol{\beta}$, nomeadamente, o estimador dos mínimos quadrados usuais, definido por

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \bar{\mathbf{Y}}, \quad (2.9)$$

e o estimador dos mínimos quadrados generalizados estimados, cuja expressão é

$$\tilde{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}}^{-1} \bar{\mathbf{Y}}. \quad (2.10)$$

Em ambos os casos,

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1m} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2m} \\ 1 & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{nm} \end{bmatrix}$$

para polinómios do primeiro grau e inclui produtos, termo a termo, das colunas desta matriz para polinómios de ordem superior, e

$$\bar{\mathbf{Y}} = (\bar{Y}_1, \dots, \bar{Y}_n)^T, \quad \text{com} \quad \bar{Y}_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r Y_{ij}.$$

No caso de assumirmos que as variâncias se mantêm constantes para os vários pontos experimentais, ou seja, $\sigma_i^2 = \sigma^2$, a matriz de variância-covariância do vector $\hat{\beta}$ é dada por

$$\Sigma_{\hat{\beta}} = \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}, \quad (2.11)$$

em que as variâncias das componentes de $\hat{\beta}$ são os elementos da diagonal principal.

Neste caso, considera-se o seguinte estimador para σ^2 (independente do metamodelo):

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N - n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r (Y_{ij} - \bar{Y}_{i.})^2,$$

com $N = nr$. Substituindo $\hat{\sigma}^2$ em (2.11), obtém-se a matriz da variância-covariância estimada,

$$\hat{\Sigma}_{\hat{\beta}} = \hat{\sigma}^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}.$$

Para o caso de não se assumir que as variâncias dos erros são constantes, Kleijnen (2005, p. 292) sugere duas alternativas para estimar os parâmetros β e respectivas matrizes de variância-covariância:

- (i) Utilizar o estimador dos mínimos quadrados usuais (2.9) com a matriz de variância-covariância estimada corrigida, que tem a forma

$$\hat{\Sigma}_{\hat{\beta}} = \frac{1}{r}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \hat{\Sigma}_{\mathbf{Y}} \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}.$$

- (ii) Utilizar o estimador dos mínimos quadrados generalizados estimados (2.10) com a matriz de variância-covariância estimada, dada por

$$\hat{\Sigma}_{\hat{\beta}} = \frac{1}{r} \left(\mathbf{X}^T \hat{\Sigma}_{\mathbf{Y}}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1}.$$

Em ambos os casos, a matriz de variância-covariância $\Sigma_{\mathbf{Y}}$ é estimada utilizando os seguintes estimadores:

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{1}{r-1} \sum_{l=1}^r (Y_{il} - \bar{Y}_{i.})^2, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.12)$$

e

$$\hat{\sigma}_{ij} = \frac{1}{r-1} \sum_{l=1}^r (Y_{il} - \bar{Y}_{i.})(Y_{jl} - \bar{Y}_{j.}), \quad i, j = 1, 2, \dots, n \text{ e } i \neq j. \quad (2.13)$$

É de salientar que, no caso de se assumir que a variância dos erros não é constante para os vários pontos experimentais e que não existe correlação nas respostas do modelo de simulação, a matriz $\Sigma_{\mathbf{Y}}$ se reduz a uma matriz diagonal, isto é,

$$\Sigma_{\mathbf{Y}} = \text{diag}[\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2],$$

com $\sigma_i^2 = \text{Var}[Y_{ij}]$, para $i = 1, 2, \dots, n$ e $j = 1, 2, \dots, r$; neste caso, $\tilde{\beta}$ denomina-se de estimador dos mínimos quadrados ponderados estimados.

Após a formulação dum metamodelo de regressão e a estimação dos respectivos parâmetros, torna-se necessário verificar se o hipotético metamodelo é, de facto, uma aproximação adequada à transformação de *input-output*, correspondente ao modelo de simulação. Diversas técnicas estatísticas têm sido propostas para a validação de metamodelos lineares de regressão em simulação. Apresentamos, de seguida, duas dessas técnicas.

Kleijnen (1983) propôs um teste de falta de ajustamento, que combina a técnica da validação cruzada com a estatística t de Student. A estatística proposta é a seguinte:

$$t = \frac{Y - \hat{Y}}{\hat{\sigma}_{Y-\hat{Y}}}, \quad (2.14)$$

onde \hat{Y} é a previsão da regressão e $\hat{\sigma}_{Y-\hat{Y}}$ denota o desvio padrão estimado de $Y - \hat{Y}$.

Vejamos, agora, como é aplicado o método de validação cruzada, proposto por Kleijnen. Suponhamos que dispomos de n execuções do modelo de simulação, resultando

$$\{X_{ij}, Y_i, \hat{\sigma}_i\}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, m,$$

em que $\hat{\sigma}_i$ representa o estimador do desvio padrão de Y_i , calculado por um dos métodos de análise de resultados (em simulação) que se baseiam numa única réplica do modelo de simulação (método das médias de lotes, método espectral, etc). Se, em cada réplica do modelo de simulação, for usada uma semente s diferente, então sabemos que as respostas Y_i são independentes, com matriz de variância-covariância $\Sigma_{\mathbf{Y}} = \text{diag}[\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2]$, onde $\sigma_i^2 = \text{E}[\hat{\sigma}_i^2]$, para $i = 1, \dots, n$.

A previsão, dada pelo metamodelo de regressão, obtido pelo método dos mínimos quadrados, é

$$\hat{Y}_i = \mathbf{X}_i \hat{\beta}, \quad (2.15)$$

com

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

e a matriz da variância-covariância de $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ é dada por

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{Y}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}.$$

Consequentemente,

$$\text{Var}[\hat{Y}_i] = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\Sigma}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} \mathbf{X}_i^T.$$

Assim sendo, o denominador da equação (2.14), para a resposta Y_i , é dado por

$$\hat{\sigma}_{Y_i - \hat{Y}_i} = \left(\hat{\sigma}_i^2 + \widehat{\text{Var}}[\hat{Y}_i] \right)^{1/2}, \quad (2.16)$$

onde

$$\begin{aligned} \widehat{\text{Var}}[\hat{Y}_i] &= \mathbf{X}_i \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} \mathbf{X}_i^T, \\ \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

e $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}} = \text{diag}[\hat{\sigma}_1^2, \dots, \hat{\sigma}_n^2]$. A equação (2.16) assume que Y_i e \hat{Y}_i são independentes. Esta exigência é automaticamente satisfeita, se o metamodelo de regressão for validado pelo seguinte método de validação cruzada:

- 1) Eliminar uma observação, por exemplo, a última, n , o que resulta no conjunto de $n - 1$ observações multidimensionais, denotado por

$$\{\mathbf{X}_{(-n)}, \mathbf{Y}_{(-n)}, \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{Y_{(-n)}}\},$$

onde

$$\mathbf{X}_{(-n)} = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1m} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2m} \\ 1 & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & X_{n-1,1} & X_{n-1,1} & \dots & X_{n-1,m} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{Y}_{(-n)} = (Y_1, \dots, Y_{n-1})$$

e $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{Y_{(-n)}}$ é a matriz diagonal $(n - 1) \times (n - 1)$ obtida, de $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}}$, por eliminação da n -ésima linha e da n -ésima coluna.

- 2) Estimar $\boldsymbol{\beta}$, a partir das restantes $n - 1$ observações:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(-n)} = [\mathbf{X}_{(-n)}^T \mathbf{X}_{(-n)}]^{-1} \mathbf{X}_{(-n)}^T \mathbf{Y}_{(-n)},$$

sendo

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(-n)}} = [\mathbf{X}_{(-n)}^T \mathbf{X}_{(-n)}]^{-1} \mathbf{X}_{(-n)}^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{Y_{(-n)}} \mathbf{X}_{(-n)} [\mathbf{X}_{(-n)}^T \mathbf{X}_{(-n)}]^{-1}.$$

- 3) Prever a observação eliminada: de (2.15), vemos que, a observação Y_n é prevista por

$$\hat{Y}_{n(-n)} = \mathbf{X}_n \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(-n)},$$

onde $\mathbf{X}_n = (1, X_{n1}, \dots, X_{nm})$. A variância da observação estimada, $\hat{Y}_{n(-n)}$, resulta de (2.17)

$$\widehat{\text{Var}}[\hat{Y}_{n(-n)}] = \mathbf{X}_n \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(-n)}} \mathbf{X}_n^T.$$

Note-se que, Y_n e $\hat{Y}_{n(-n)}$ são estatisticamente independentes, pois $\hat{Y}_{n(-n)}$ depende de $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(-n)}$ que, por sua vez, não depende dos dados relativos ao ponto experimental n .

- 4) Comparar o valor previsto com a observação eliminada, através de

$$t_n = \frac{Y_n - \hat{Y}_{n(-n)}}{\left(\hat{\sigma}_n^2 + \widehat{\text{Var}}[\hat{Y}_{n(-n)}]\right)^{1/2}} \quad (2.18)$$

- 5) Em seguida, os passos 1) a 4) são repetidos, para cada observação i' ($i' = 1, \dots, n-1$). Como resultado, são obtidas n observações dependentes para t , definidas analogamente a (2.18). Uma vez que, o metamodelo de regressão postulado deverá ser válido para todos os n pontos experimentais, este é rejeitado sempre que, o valor da estatística t , para alguma das n observações, seja significativo. Assim, define-se, para hipótese nula,

$$H_0 : E[\hat{Y}_{i(-i)}] = E[Y_i], \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.19)$$

rejeitando-se H_0 se

$$\max_{i=1, \dots, n} |t_i| > t_{d, \alpha_c/2},$$

onde $t_{d, \alpha_c/2}$ é definido por

$$P(t > t_{d, \alpha_c/2}) = 1 - P(t < t_{d, \alpha_c/2}),$$

ou seja, $t_{d, \alpha_c/2}$ é o valor t crítico, ajustado para comparações múltiplas, quando se usa a desigualdade de Bonferroni.

Note-se que, o número de graus de liberdade, da estatística de teste, é desconhecido. Em Kleijnen (1983), $t_{d, \alpha_c/2}$ é substituído pelo valor correspondente da normal padrão, $z_{\alpha_c/2}$. Por outro lado, Kleijnen (1992) utilizou $d = r - 1$, sendo r o número de réplicas em cada ponto experimental.

Uma desvantagem, do procedimento de validação cruzada proposto por Kleijnen, é a necessidade de se efectuar um número elevado de regressões. Panis, Myers e Houck (1994) generalizaram o trabalho desenvolvido em Kleijnen (1983), demonstrando que é possível fazer o teste de validação cruzada apenas com uma única regressão, recorrendo à matriz “chapéu” (*hat*) $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T$. Os autores demonstraram que, efectuando o estudo com base no método das réplicas independentes, a estatística (2.18) pode ser escrita na forma

$$t_i = \frac{\bar{Y}_i - \hat{Y}_i}{\hat{\sigma}_i(1 - h_{ii})^{1/2}}, \quad (2.20)$$

onde h_{ii} é o i -ésimo elemento da diagonal principal da matriz \mathbf{H} e \hat{Y}_i é a previsão da regressão, baseada nos resultados da regressão usual (ver as equações (2.9), (2.12) e (2.15)). Se as r observações, nas quais o estimador $\hat{\sigma}_i$ se baseia, forem independentes e normalmente distribuídas, então (2.20) segue uma distribuição t de Student, com $r - 1$ graus de liberdade, assumindo que, a hipótese nula (2.19) do teste de Kleijnen é válida. Este teste pode ser, ainda, utilizado no caso de heterogeneidade da variância nos pontos experimentais, quer utilizando o estimador dos mínimos quadrados usuais, quer utilizando o estimador dos mínimos quadrados ponderados. No segundo caso, é necessário modificar a expressão da matriz “chapéu” e a estatística dada pela equação (2.20).

Um procedimento alternativo, para testar a validade do modelo de regressão, é o teste de falta de ajustamento de Rao (1959), que generaliza o teste de falta de ajustamento F clássico, aplicado nos estimadores dos mínimos quadrados usuais, para os estimadores dos mínimos quadrados generalizados. Este teste compara dois estimadores com a mesma variância, σ^2 . Consideremos, em primeiro lugar, o caso em que é usado o estimador dos mínimos quadrados usuais, onde se assume que a variância é constante para os vários pontos experimentais. Neste caso, é aplicado o habitual teste F clássico, que compara os resíduos estimados (reflectindo falta de ajustamento) com o estimador da variância $\hat{\sigma}^2$. A estatística de teste, F , é definida por

$$F = \frac{r}{(n - m)\hat{\sigma}^2} (\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^T (\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}),$$

com

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \hat{\sigma}_i^2$$

e $\hat{\sigma}_i^2$ definido em (2.12). Se o modelo é válido, então a estatística F tem aproxima-

damente uma distribuição $F_{n-m,n(r-1)}$. Assim, o metamodelo é rejeitado se, para um dado nível de significância α , $F > F_{n-m,n(r-1)}^{1-\alpha}$.

No caso de aplicarmos o método dos mínimos quadrados generalizados, a estatística F , de Rao, é dada por

$$F_{Rao} = \frac{r(r-n+m)}{(n-m)(r-1)} (\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}}^{-1} (\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}),$$

onde $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}}^{-1}$ é uma matriz $n \times n$ em que os elementos da diagonal principal são dados por (2.12) e os restantes elementos estimados por (2.13). Neste teste, assume-se que $n > m$ e $r > n$, para que $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}}$ seja não singular. Quando o metamodelo é válido, F_{Rao} segue, aproximadamente, uma distribuição $F_{n-m,r-n+m}$. Kleijnen (1992) mostrou que, o teste F de Rao é melhor que o teste da validação cruzada, se as respostas do modelo de simulação tiverem uma distribuição simétrica, por exemplo, uma normal ou uma uniforme; se, por outro lado, as respostas possuírem uma distribuição assimétrica, por exemplo, lognormal, então, o teste de validação cruzada é mais aconselhável.

Recentemente, num artigo que se encontra para publicação, Kleijnen e Deflandre (2006) analisam duas estatísticas para validação dos metamodelos de regressão lineares: o coeficiente de determinação (R^2) e a estatística F de Rao. A obtenção da distribuição destas duas estatísticas é efectuada através da utilização de técnicas de *bootstrap*, em que não é necessário assumir a normalidade dos dados. A *performance* destas estatísticas de validação é determinada através de experiências de Monte Carlo, realizadas com modelos simples.

2.2.2 Metamodelos de Regressão não Lineares

A assunção de que a realidade se comporta, sempre, de uma forma linear não é realística. Assim sendo, os metamodelos de regressão lineares são aproximações aceitáveis, apenas, numa dada vizinhança (maior ou menor) da região experimental. Além disso, a capacidade de previsão destes metamodelos, fora da região experimental, não é, de um modo geral, satisfatória. Esta dificuldade foi ultrapassada por Santos e Porta Nova (1999, 2001), que apresentaram uma metodologia para construção e validação de metamodelos de simulação não lineares, em que foram adaptadas e aplicadas técnicas estatísticas conhecidas da análise de regressão. Os autores escolheram os metamodelos de regressão não lineares por estes não terem as desvantagens dos metamodelos polinomiais e por permitirem, nomeadamente:

- (i) captar a essência dos modelos, que lhes deram origem, através de expressões simples, envolvendo, geralmente, um número reduzido de parâmetros;
- (ii) caracterizar a sua precisão através da construção de intervalos de confiança; e
- (iii) efectuar previsões, com fiabilidade, fora da região de experimentação.

A definição de metamodelo de regressão não linear é dada pela equação (2.7), onde, neste caso, f representa uma função não linear, em relação aos parâmetros desconhecidos. Por exemplo, em Santos e Porta Nova (1999), o número esperado de clientes à espera, numa fila $M/M/1$, é representado através do seguinte metamodelo de regressão não linear

$$Y = \frac{X\beta_1}{1 - X\beta_2} + \varepsilon,$$

onde a variável de decisão representa o factor de utilização da fila de espera, $X = \rho$.

Consideremos uma experiência de simulação com n pontos experimentais, $\{X_{il} : i = 1, \dots, n; l = 1, \dots, m\}$, onde, para cada ponto experimental, são geradas r réplicas independentes do modelo de simulação, obtendo-se $\{(Y_{ij}, \hat{\sigma}_i) : i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, r\}$, em que Y_{ij} é a resposta relevante do sistema e $\hat{\sigma}_i$ é o respectivo desvio padrão, estimado no ponto experimental i , baseado em r observações, cuja expressão é dada por

$$\hat{\sigma}_i = \left[\frac{1}{r-1} \sum_{j=1}^r (Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2 \right]^{1/2},$$

com $\bar{Y}_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r Y_{ij}$.

O metamodelo (2.7) pode, também, ser expresso na sua forma replicada dada por (2.8) e que reproduzimos, novamente,

$$Y_{ij} = f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon_{ij},$$

para $i = 1, 2, \dots, n$ e $j = 1, 2, \dots, r$, onde $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma_i^2)$, com $\sigma_i^2 > 0$.

Para valores de n elevados e dadas condições de regularidade apropriadas (ver Proposição 1 em Santos e Porta Nova (1999)), o vector de parâmetros desconhecidos é aproximado através do estimador dos mínimos quadrados generalizados não lineares,

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \approx \boldsymbol{\beta}^* + [\mathbf{F}^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{Y}}^{-1} \mathbf{F}]^{-1} \mathbf{F}^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}],$$

onde $\boldsymbol{\beta}^*$ é o valor exacto de $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}^*) = (f(\mathbf{X}_{1.}, \boldsymbol{\beta}^*), \dots, f(\mathbf{X}_{n.}, \boldsymbol{\beta}^*))^T$, $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\boldsymbol{\beta}^*)$ é a matriz jacobiana de \mathbf{f} , avaliada em $\boldsymbol{\beta}^*$,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial \beta_1}(\mathbf{X}_{1.}, \boldsymbol{\beta}^*) & \frac{\partial f}{\partial \beta_2}(\mathbf{X}_{1.}, \boldsymbol{\beta}^*) & \dots & \frac{\partial f}{\partial \beta_m}(\mathbf{X}_{1.}, \boldsymbol{\beta}^*) \\ \frac{\partial f}{\partial \beta_1}(\mathbf{X}_{2.}, \boldsymbol{\beta}^*) & \frac{\partial f}{\partial \beta_2}(\mathbf{X}_{2.}, \boldsymbol{\beta}^*) & \dots & \frac{\partial f}{\partial \beta_m}(\mathbf{X}_{2.}, \boldsymbol{\beta}^*) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial \beta_1}(\mathbf{X}_{n.}, \boldsymbol{\beta}^*) & \frac{\partial f}{\partial \beta_2}(\mathbf{X}_{n.}, \boldsymbol{\beta}^*) & \dots & \frac{\partial f}{\partial \beta_m}(\mathbf{X}_{n.}, \boldsymbol{\beta}^*) \end{bmatrix},$$

$\bar{\mathbf{Y}} = (\bar{Y}_{1.}, \dots, \bar{Y}_{n.})^T$ e $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ é a matriz diagonal $\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \text{diag}[\hat{\sigma}_1^2, \dots, \hat{\sigma}_n^2]$.

Tal como no caso dos metamodelos de regressão lineares, após a estimação dos parâmetros, torna-se necessário testar a capacidade, do metamodelo estimado, em aproximar a resposta do modelo de simulação. Para testar a adequação do metamodelo, definido em (2.8), os autores propõem um teste de falta de ajustamento, que é uma adaptação do teste de Rao aos modelos não lineares e que tem os seguintes requisitos: (i) $n > m$ e $r > n$ (para que $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ seja não singular); e (ii) as respostas deverão ser normalmente distribuídas (quando as respostas do modelo de simulação são médias, o teorema do limite central assegura a normalidade).

Dados os requisitos (i) e (ii) anteriores, a generalização do teste de Rao assume a forma

$$\begin{aligned} F_{\text{Rao}} &= \frac{r(r-n+m)}{(n-m)(r-1)} \left[\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\mathbf{X}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) \right]^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} \left[\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\mathbf{X}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) \right] \\ &= \frac{r(r-n+m)}{(n-m)(r-1)} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\bar{Y}_{i.} - f(\mathbf{X}_{i.}, \hat{\boldsymbol{\beta}})}{\hat{\sigma}_i} \right]^2. \end{aligned}$$

Quando o metamodelo é válido, F_{Rao} tem distribuição aproximada $F_{n-m, r-n+m}$. Valores pequenos de F_{Rao} correspondem a uma melhor aproximação, pelo que, um ajustamento ideal corresponde a $F_{\text{Rao}} = 0$.

A capacidade de previsão do metamodelo é verificada através do método de validação cruzada dupla e de uma adaptação da estatística PRESS. No caso dos modelos não lineares, a expressão da estatística PRESS é

$$\text{PRESS} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r \frac{1}{\hat{\sigma}_i^2} [Y_{ij} - f(\mathbf{X}_{i.}, \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(-j)})]^2,$$

onde $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(-j)}$ é o vector dos parâmetros baseado no conjunto de observações com a j -ésima réplica eliminada em todos os pontos experimentais.

Outras estatísticas úteis, que foram utilizadas, pelos autores, para efeitos de validação de metamodelos, são a soma dos quadrados dos resíduos,

$$\text{SSE}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r \frac{1}{\hat{\sigma}_i^2} [Y_{ij} - f(\mathbf{X}_{i.}, \hat{\boldsymbol{\beta}})]^2,$$

e o erro quadrático médio,

$$\text{MSE} = \frac{\text{SSE}(\hat{\boldsymbol{\beta}})}{N - m},$$

com $N = nr$.

Na validação cruzada dupla, os dados são divididos, de uma forma intuitiva, em dois subconjuntos de dimensão aproximadamente igual ($n/2$). Em seguida, um metamodelo é ajustado a cada subconjunto e usado para prever as observações pertencentes ao outro subconjunto de dados. Em particular, para cada metamodelo, são calculados dois valores do coeficiente de determinação, R^2 : o primeiro, baseado nas observações utilizadas para a construção do metamodelo, R_{constr}^2 , e o segundo, baseado no segundo subconjunto de dados, R_{val}^2 . Se estes valores forem muito diferentes, então o metamodelo não é considerado válido. Neste contexto, a expressão do coeficiente de determinação é dada por

$$R^2 = \frac{\text{SSR}}{\text{SST}},$$

onde

$$\text{SSR} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r \left[\frac{f(\mathbf{X}_{i.}, \hat{\boldsymbol{\beta}})}{\hat{\sigma}_i} - \bar{Y}_{..} \right]^2$$

é a soma dos quadrados da regressão,

$$\text{SST} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r \left[\frac{Y_{ij}}{\hat{\sigma}_i} - \bar{Y}_{..} \right]^2$$

é a soma dos quadrados total e

$$\bar{Y}_{..} = \frac{1}{nr} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r \frac{Y_{ij}}{\hat{\sigma}_i} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{\hat{\sigma}_i} \bar{Y}_{i.}$$

é a média geral de todas as observações.

3

Análise de Simulações Não Estacionárias

A análise de resultados, de simulações não estacionárias, é basicamente uma extensão natural do caso estacionário. De facto, para o caso estacionário, assumimos que as medidas (ou respostas) de *performance* seleccionadas possuem uma distribuição de equilíbrio, com valores esperados perfeitamente definidos. Em geral, neste caso, estamos interessados na estimação pontual e na construção de intervalos de confiança para as respostas do sistema em estudo e, para este efeito, diferentes procedimentos têm sido desenvolvidos. Por outro lado, em simulações não estacionárias podemos apenas esperar que esses valores esperados tenham uma evolução previsível e regular. Nestes casos, o melhor que podemos fazer é tentar explicar esta evolução, através do ajustamento de uma expressão simples ou um metamodelo, aos resultados obtidos pela execução do modelo de simulação.

É nossa profunda convicção que os principais momentos das respostas do sistema em estudo, nomeadamente o valor esperado e a variância, têm um comportamento fundamental determinístico, com pouca variação, que pode ser explicado por um metamodelo subjacente e que, sobreposto a este comportamento, existem perturbações estocásticas fortemente autocorrelacionadas, que escondem o comportamento subjacente e que vamos tentar filtrar na nossa abordagem. Para este efeito, utilizaremos técnicas clássicas da análise de regressão para pôr a descoberto a componente determinística do metamodelo e contamos com os modelos clássicos das séries cronológicas (Box-Jenkins) para descrever o comportamento das perturbações aleatórias ou ruído. Quando as respostas em estudo apresentam algum tipo de comportamento periódico, pode ser necessário recorrer à análise de Fourier, por forma a obter um metamodelo

adequado. Em alguns casos, os modelos de séries cronológicas, por si só, podem explicar o desempenho completo da resposta do sistema.

Como vimos na Secção 2.2, podemos pensar num modelo de simulação como uma transformação de *input-output* muito complicada, que não pode ser expressa usualmente através de uma função simples. Qualquer resposta da simulação escolhida, Y , dependerá de um conjunto de variáveis de entrada e de parâmetros intrínsecos $\mathbf{Z} = (Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$. A verdadeira relação entre as variáveis Y e \mathbf{Z} é representada pelo modelo de simulação. O nosso objectivo é aproximar esta relação através de uma função matemática simples, ou metamodelo. A forma exacta da relação funcional entre Y e (Z_1, Z_2, \dots, Z_k) é geralmente desconhecida. Na maior parte dos casos, temos de seleccionar, por razões físicas, ou pelo comportamento gráfico, uma função f apropriada, caracterizada por alguns parâmetros do metamodelo desconhecidos, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_m)^T$, que devem ser estimados a partir de um conjunto de dados experimentais.

Uma vez que o nosso principal interesse, neste trabalho, é a análise dos resultados produzidos por simulações não estacionárias, os metamodelos, definidos por (2.7), têm de ser capazes de descrever a evolução, no tempo, do valor esperado das respostas do sistema em estudo. Por conseguinte, na maioria dos casos, os metamodelos, que iremos utilizar, têm de incluir explicitamente a variável independente tempo. Nalgumas situações, a variável tempo pode ter de ser substituída por outra variável (geralmente, um índice inteiro), para caracterizar a evolução da resposta em estudo; por exemplo, o número (sequencial) da entidade a ser processada no sistema. Por outro lado, como os resultados, provenientes de modelos de simulações de acontecimentos discretos, são fortemente autocorrelacionados, a componente estocástica do metamodelo (associada aos erros aleatórios), na maioria dos casos, é também, em geral, fortemente autocorrelacionada.

Assim sendo, neste trabalho, os metamodelos, que irão ser considerados, podem ser representados por

$$Y_t = f(\mathbf{X}, t; \boldsymbol{\beta}) + u_t \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_k)$ é o vector de k variáveis independentes ou parâmetros intrínsecos (não incluindo o tempo), t é a variável independente tempo, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_m)^T$ é o vector de parâmetros desconhecidos, f é uma função desconhecida e u_t representa componente estocástica do modelo, que poderá ser descrita através de um modelo clássico de séries cronológicas.

É de salientar que, embora estejamos fundamentalmente interessados na estimação da componente determinística do metamodelo $f(\mathbf{X}, t; \beta)$, uma identificação e caracterização apropriada da componente estocástica u_t , é de extrema importância para credibilizar e validar o metamodelo estimado.

Surgiu, assim, a necessidade do desenvolvimento de uma metodologia que permitisse analisar os resultados provenientes de simulações não estacionárias. Na Secção 3.1, apresentamos a referida metodologia, propondo um procedimento para a recolha dos dados relevantes para a construção de um metamodelo, selecção do tipo de metamodelo, estimação e validação do metamodelo seleccionado. Na Secção 3.2, discutimos alguns resultados analíticos, existentes, na literatura especializada de probabilidades e estatística, para modelos de filas de espera não estacionárias, e avaliamos experimentalmente a metodologia proposta, em relação a esses resultados.

3.1 Metodologia para Metamodelação em Condições Não Estacionárias

A metodologia, proposta neste trabalho, para analisar, de uma forma significativa, os resultados produzidos por simulações não estacionárias, é constituída por vários passos, que são descritos em seguida.

1. Recolha dos dados relevantes

O nosso principal objectivo é a análise da evolução, no tempo, do valor esperado de respostas seleccionadas do sistema em estudo. A análise efectuada concentrou-se em dois tipos de medidas de *performance* extensamente utilizadas: (i) estatísticas persistentes no tempo, como é o caso do comprimento duma fila ou do número de entidades no sistema, num dado instante t ; e (ii) estatísticas baseadas em observações, nomeadamente, o tempo de espera numa fila ou o tempo de permanência, no sistema, de uma entidade, que chegou, ao sistema, no instante t .

Para a execução de um modelo (programa) de simulação, é necessário que sejam completamente especificadas as condições iniciais. Ao contrário do caso estacionário, em que os resultados obtidos, com base em determinadas condições iniciais (estados do sistema extremamente raros), podem estar contaminados com um viés inicial, a escolha das condições iniciais, em simulações não estacionárias, não é um problema, mas um dado do mesmo, devendo ser especificadas de acordo com o sistema em estudo.

O procedimento, para obtenção dos dados relevantes para a construção do meta-modelo de simulação, pode ser descrito nos seguintes passos:

1º passo

Escolher a duração da simulação (intervalo de tempo em que haverá recolha de dados) e o número de réplicas independentes (*runs*) do modelo de simulação. A duração do intervalo de tempo, para recolha de dados, irá depender do sistema em estudo; por exemplo, se pretendermos analisar o sistema durante uma hora de ponta, então, a recolha de dados será efectuada entre 0 e 60 unidades de tempo.

Verificámos, ao longo da realização deste trabalho, que a metodologia proposta não era muito sensível ao número de réplicas escolhido (ver a Secção 3.2.1), pelo que consideramos que 30 réplicas constituem uma escolha adequada, tanto do ponto de vista das condições experimentais, como da garantia da estabilidade estatística das respostas a analisar.

2º passo

Uma vez que não é viável armazenar os valores relevantes de uma forma contínua, estes têm de ser recolhidos a intervalos de tempo regulares, discretos, δ_t , em relação aos quais é necessário decidir. A escolha da dimensão destes intervalos depende de cada caso em estudo, devendo-se tentar, para as medidas baseadas em observações, que ocorra o menor número possível de observações (de preferência, só uma) em cada intervalo.

Para as respostas persistentes no tempo, as observações apenas têm de ser simplesmente recolhidas no fim de cada um destes intervalos de tempo regulares; contudo, as medidas baseadas em observações necessitam de processamento adicional. Em primeiro lugar, é necessário registar o instante de chegada de cada entidade ao sistema, para, depois, se poder ordenar as observações, de acordo com o respectivo instante de chegada. De seguida, para cada intervalo de tempo, δ_t , devemos verificar se existe mais de uma observação nesse intervalo. Se for este o caso, apenas a primeira observação é guardada, sendo as restantes observações rejeitadas, por forma a preservar a independência das mesmas.

3º passo

Finalmente, calculamos a média das observações correspondentes nas várias réplicas. No caso das medidas baseadas em observações, o número de obser-

vações, que contribuem para a construção da série média em cada intervalo, pode ser inferior ao número total de réplicas escolhido, porque, em algumas destas, pode não ter ocorrido nenhuma chegada no referido intervalo de tempo.

Todas as restantes etapas, da metodologia proposta, são efectuadas com base nesta série média.

A utilização, de uma série cronológica média, não é comum nas áreas típicas de aplicação da metodologia das séries cronológicas, como, por exemplo, em econometria, onde, geralmente, apenas se encontra disponível uma única realização da variável a estudar. No entanto, em experiências que envolvam a simulação de acontecimentos discretos, podemos escolher qualquer número de réplicas, que seja conveniente para o estudo a realizar. Assim sendo, podemos analisar simulações não estacionárias através de séries médias, em vez de confiarmos, apenas, numa única réplica. Consequentemente, a variabilidade das séries cronológicas é substancialmente reduzida, o comportamento intrínseco da resposta, ao longo do tempo, é identificado mais facilmente e o processo de ajustamento do metamodelo torna-se mais fiável.

É de salientar que, a duração de cada réplica (*run*) do modelo de simulação é variável pois, para as medidas baseadas em observações, a recolha de dados só termina quando tiver abandonado, o sistema, a última entidade que a ele chegou, imediatamente antes do fim do intervalo de tempo estipulado para a recolha dos dados.

2. Identificação do tipo de metamodelo

Idealmente, a selecção do tipo de função, para o metamodelo a ajustar, deveria ser baseada em justificações físicas. No entanto, em termos práticos, esta selecção é, muitas vezes, efectuada visualmente, analisando o gráfico da evolução, no tempo, da série cronológica média, correspondente à resposta em estudo. De facto, esta é uma perspectiva semelhante à utilizada na estatística, quando se comparam histogramas empíricos com funções de densidade de probabilidade (teóricas) conhecidas, para seleccionar uma dada distribuição a testar.

Desde modo, é conveniente construir, em primeiro lugar, um cronograma (gráfico onde, no eixo das abcissas, é marcado o tempo e, no eixo das ordenadas, os valores da série, sendo os pontos resultantes ligados por segmentos de recta), ou um

diagrama de dispersão da resposta média *versus* o tempo. Para facilitar a identificação das possíveis relações funcionais a utilizar, é aconselhável a construção de um catálogo com diferentes relações e as suas respectivas representações gráficas. Comparando o cronograma da série média, de cada resposta em estudo, com as diversas curvas analíticas, escolhe-se a(s) função(ões) que se parecer(em) aproximar melhor.

Verificou-se, no decorrer deste trabalho, que uma função linear simples foi, muitas vezes, adequada para representar o metamodelo pretendido.

3. Estimação dos parâmetros do metamodelo

Os procedimentos para estimação dos parâmetros do metamodelo dependem usualmente do tipo de relação. Por exemplo, no caso de um metamodelo linear, o método dos mínimos quadrados usuais é utilizado numa estimação preliminar. Em seguida, é analisada a presença de autocorrelação nos resíduos, usando a função de autocorrelação e a função de autocorrelação parcial estimadas. A etapa seguinte consiste em encontrar um modelo adequado para os resíduos da regressão preliminar. A estimação da ordem do modelo é efectuada com base no teste de Ljung-Box (ver a Secção 2.1.1). No caso de existirem vários modelos candidatos, é escolhido o que tiver menor valor no critério de Akaike (ver a Secção 3.1.2). Finalmente, conhecida a estrutura de autocorrelação dos resíduos da regressão preliminar, aplicamos o método de máxima verosimilhança para obter um novo metamodelo, onde se assume que os resíduos são i.i.d., com distribuição normal de média nula e variância finita. Neste trabalho, utilizamos o método de máxima verosimilhança para a estimação dos parâmetros, por ser um método robusto e por permitir a estimação conjunta dos parâmetros das componentes determinística e estocástica. É também de salientar a importância das propriedades assintóticas destes estimadores.

Na Secção 3.1.1, descrevemos os métodos utilizados na estimação dos parâmetros dos metamodelos.

4. Validação do metamodelo

Para garantir que o metamodelo estimado se aproxima, suficientemente bem, do modelo de simulação, têm de ser seguidos determinados procedimentos de validação. O primeiro passo, para a validação de um metamodelo, consiste na avaliação do diagnóstico do metamodelo, através da avaliação da qualidade estatística

e da avaliação da qualidade de ajustamento; ver Murteira, Müller e Turkman (1993). Um outro aspecto, a ter em consideração na validação do metamodelo, prende-se com a análise da sua capacidade de previsão. Na Secção 3.1.2, apresentamos uma descrição destes procedimentos de validação.

Será necessário retornar ao passo **2**, se o modelo não for considerado adequado e válido. Caso contrário, o metamodelo pode ser utilizado para o fim pretendido.

No caso de não ser possível encontrar um metamodelo válido para determinado problema, isto é, se não existir mais nenhuma curva disponível, que ainda não tenha sido seleccionada, o processo de modelação é terminado e concluímos que, neste caso, a metodologia, que propomos, não é aplicável.

5. Utilização do metamodelo estimado

Estando, finalmente, perante um metamodelo estimado, que se verificou ser adequado para representar o modelo de simulação, que produziu o conjunto de dados usados na estimação desse metamodelo, podemos avaliar o sistema em estudo e responder a muitas questões do tipo “O que acontece se ...?”, sem ter de efectuar novas simulações. A título de exemplo, na simulação dum sistema de tráfego, em hora de ponta, poderíamos facilmente responder a questões do tipo:

- (a) Qual o comprimento esperado duma dada fila, meia hora após o início do período de ponta?
- (b) Qual o tempo esperado para passar um dado cruzamento problemático, para um condutor que chegue 15 minutos após o início do período de ponta?
- (c) A que taxa irá aumentar o comprimento esperado duma dada fila, ao longo do período de ponta?

6. Construção de intervalos de confiança

No contexto da análise de resultados em simulação (discreta) estacionária, a construção de intervalos de confiança sempre assumiu uma importância fundamental, para caracterizar a variabilidade das medidas de *performance*, objecto de qualquer estudo de simulação. Ao generalizarmos a análise de resultados, para o caso de simulações não estacionárias, este é um tópico que surge naturalmente, uma vez que, o metamodelo de simulação, estimado para uma dada resposta, é simplesmente a extensão do estimador pontual dessa resposta, no caso estacionário. Como nos pareceu que este trabalho não ficaria completo, sem uma abordagem

desta forma complementar de caracterizar os resultados obtidos por um modelo de simulação, procurámos desenvolver, no âmbito da metodologia aqui proposta, procedimentos, robustos e válidos, para determinar intervalos de confiança para as medidas de *performance* seleccionadas, do sistema em estudo.

Assim, neste trabalho, apresentamos duas maneiras alternativas de construir intervalos de confiança, para os valores das respostas, ao longo do tempo, do sistema em estudo. A primeira, mais óbvia, devido à disponibilidade de vários *runs* independentes, baseia-se na aplicação, do método das réplicas independentes, aos valores observados em cada instante t . No entanto, também procurámos encontrar uma alternativa, mais expedita e elegante, para a construção de intervalos de confiança, com base num novo metamodelo, a ajustar à série das variâncias, calculadas, em cada um dos instantes de tempo, para a amostra constituída pelas observações, nos 30 *runs* independentes, das respostas em análise.

3.1.1 Estimação dos Parâmetros do Metamodelo

Suponha-se que, após a recolha dos dados relevantes, estamos perante uma série cronológica média, $\bar{Y}_1, \bar{Y}_2, \dots, \bar{Y}_n$, e considere-se o seguinte metamodelo

$$\bar{Y}_i = f(\mathbf{X}_i, t_i; \boldsymbol{\beta}) + u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.2)$$

ou, em notação matricial,

$$\bar{\mathbf{Y}} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) + \mathbf{u} \quad (3.3)$$

onde i é um índice inteiro correspondente à discretização da variável tempo, $\bar{\mathbf{Y}} = (\bar{Y}_1, \bar{Y}_2, \dots, \bar{Y}_n)^T$ é o vector das observações no instante $i = 1, 2, \dots, n$, $\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) = \left(f(\mathbf{X}, t_1; \boldsymbol{\beta}), f(\mathbf{X}, t_2; \boldsymbol{\beta}), \dots, f(\mathbf{X}, t_n; \boldsymbol{\beta}) \right)^T$, t_i é o valor da variável independente tempo no instante i , $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_m)^T$ é o vector dos parâmetros desconhecidos (a estimar) e as componentes de $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T$ são os valores do processo ARMA(p, q) que satisfazem

$$\phi(B)u_i = \theta(B)\varepsilon_i, \quad (3.4)$$

onde se assume que, $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$, para $i = 1, 2, \dots, n$, os polinómios $\phi(B) = 1 - \phi_1 B - \phi_2 B^2 - \dots - \phi_p B^p$ e $\theta(B) = 1 - \theta_1 B - \theta_2 B^2 - \dots - \theta_q B^q$ não têm raízes no círculo unitário e não têm raízes comuns e onde B representa o operador de atraso, definido pelas relações $Bu_i = u_{i-1}$ e $B^k u_i = u_{i-k}$.

Nestas condições, podemos concluir que $\mathbf{u} \sim N_n(\mathbf{0}, \Sigma)$, onde $\Sigma = \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{V}$, e que $\mathbf{Y} \sim N_n(\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}), \Sigma)$. Assim sendo, a função de verosimilhança de $\bar{Y}_1, \bar{Y}_2, \dots, \bar{Y}_n$ é dada por

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}, \sigma_\varepsilon^2) = (2\pi)^{-n/2} |\Sigma|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})]^T \Sigma^{-1} [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})] \right\}$$

e o respectivo logaritmo por

$$\begin{aligned} \log \mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}, \sigma_\varepsilon^2) &= -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})]^T \Sigma^{-1} [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})] \\ &= -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log \sigma_\varepsilon^2 - \frac{1}{2} \log |\mathbf{V}| \\ &\quad - \frac{1}{2\sigma_\varepsilon^2} [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})]^T \mathbf{V}^{-1} [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})] \\ &= -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log \sigma_\varepsilon^2 - \frac{1}{2} \log |\mathbf{V}| - \frac{1}{2\sigma_\varepsilon^2} S(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}) \end{aligned}$$

onde

$$S(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}) = [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})]^T \mathbf{V}^{-1} [\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})].$$

Para obter os estimadores de máxima verosimilhança de $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\phi}$, $\boldsymbol{\theta}$ e σ_ε^2 , há que maximizar a função de verosimilhança (ou o seu logaritmo), havendo, para isso, que resolver um sistema de equações não lineares.

Se representarmos, por $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ e $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, os estimadores de máxima verosimilhança de $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\phi}$ e $\boldsymbol{\theta}$, então, o estimador de máxima verosimilhança de σ_ε^2 é dado por

$$\hat{\sigma}_\varepsilon^2 = \frac{1}{n} S(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\boldsymbol{\phi}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}).$$

Se $\{u_i\}$ for um processo ARMA estacionário e invertível, então, admitindo condições de regularidade apropriadas das variáveis independentes, as estimativas de máxima verosimilhança têm, assintoticamente, uma distribuição normal. Verifica-se, ainda, que os estimadores $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ são assintoticamente independentes dos estimadores $\hat{\boldsymbol{\phi}}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ e $\hat{\sigma}_\varepsilon^2$; ver Brockwell e Davis (2002, p. 214) e Davidson e Mackinnon (1993, p. 302). Assim, considerando o vector, dos $k = m + p + q + 1$ parâmetros, $\Delta = (\beta_1, \dots, \beta_m, \phi_1, \dots, \phi_p, \theta_1, \dots, \theta_q, \sigma_\varepsilon^2)^T$, temos que

$$\sqrt{n}(\hat{\Delta} - \Delta) \rightarrow N_k(\mathbf{0}, \Omega), \quad (3.5)$$

com

$$\Omega = \begin{bmatrix} M^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \begin{bmatrix} C & D \\ D^T & F \end{bmatrix}^{-1} \\ & \mathbf{0} & 2\sigma_\varepsilon^4 \end{bmatrix}.$$

A matriz de variância-covariância assintótica dos coeficientes de regressão do metamodelo é dada por

$$M^{-1} = \text{plim}_{n \rightarrow \infty} [n^{-1} \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}^*)^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}^*)]^{-1},$$

onde $\boldsymbol{\beta}^*$ é o valor exacto de $\boldsymbol{\beta}$ e a matriz de variância-covariância assintótica dos resíduos ARMA(p, q) é

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} C & D \\ D^T & F \end{bmatrix}^{-1} = \sigma_\varepsilon^2 \begin{bmatrix} E(\mathbf{U}_i \mathbf{U}_i^T) & E(\mathbf{U}_i \mathbf{W}_i^T) \\ E(\mathbf{W}_i \mathbf{U}_i^T) & E(\mathbf{W}_i \mathbf{W}_i^T) \end{bmatrix}^{-1},$$

em que $\mathbf{U}_i = (U_i, \dots, U_{i+1-p})^T$, $\mathbf{W}_i = (W_i, \dots, W_{i+1-p})^T$ e $\{U_i\}$ e $\{W_i\}$ são os processos autoregressivos

$$\phi(B)U_i = \varepsilon_i \quad \text{e} \quad \theta(B)W_i = \varepsilon_i.$$

Na prática, a estimação dos parâmetros, do metamodelo (3.3), é efectuada através dos seguintes passos:

- (i) Realizar uma estimação preliminar, através do método dos mínimos quadrados lineares ou dos mínimos quadrados não lineares, conforme o metamodelo seja linear ou não linear;
- (ii) Analisar os resíduos, da estimação realizada em (i), identificando a estrutura de autocorrelação adequada. Esta deve ser efectuada através de uma análise da função de autocorrelação (FAC) e da função de autocorrelação parcial (FACP) estimadas, que nos sugerem um modelo ARMA(p, q) candidato. De seguida, os parâmetros deste modelo são estimados, através do método de máxima verosimilhança, sendo, depois, aplicado, aos resíduos resultantes, o teste de Ljung-Box. Se o modelo passar o teste, então, avançamos para o passo seguinte. Caso contrário, é estimado um novo modelo e o processo repete-se, até se encontrar um modelo adequado, ou se esgotar a lista dos modelos candidatos.
- (iii) Tendo em consideração o modelo encontrado em (ii), é efectuada uma estimação final, para determinar os estimadores de máxima verosimilhança dos parâmetros $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\phi}$, $\boldsymbol{\theta}$ e σ_ε^2 .

3.1.2 Validação do Metamodelo

No contexto da construção de metamodelos de simulação, a validação é uma fase extremamente importante, sendo necessário garantir que o metamodelo estimado é credível, como representação do modelo de simulação.

A validação de metamodelos estimados, no contexto em que investigámos a sua utilização (explicação de respostas esperadas, em simulação discreta), não é, propriamente, uma tarefa fácil, até porque, para além de avaliar o metamodelo, na sua globalidade, era igualmente necessário contemplar duas situações distintas: a análise da componente determinística dum dado metamodelo, estimada por técnicas de regressão, e a da componente estocástica, para o que recorriámos a técnicas no âmbito da metodologia de Box-Jenkins, para séries cronológicas. Assim, nem sempre foi possível encontrar testes de validação objectivos, tendo de se recorrer, nalguns casos, a métodos qualitativos, com a natural subjectividade a eles associada.

Passamos a apresentar, de seguida, as técnicas, por nós foram seleccionadas, para efeitos de validação do metamodelo ajustado, de entre as disponíveis, na literatura especializada.

1. Avaliação da qualidade estatística do metamodelo

1.1. Significância estatística dos parâmetros estimados

Tendo em conta o princípio de parcimónia, devemos analisar as estimativas, obtidas para os parâmetros, com o objectivo de eliminar aqueles que não podem considerar-se significativamente diferentes de zero. Neste caso, para os parâmetros de regressão, testa-se:

$$H_0 : \beta_i = 0 \quad \text{vs.} \quad \beta_i \neq 0,$$

usando, como estatística de teste,

$$t_i = \sqrt{n} \frac{\hat{\beta}_i}{\sqrt{v_{ii}(\hat{\beta})}}, \quad (3.6)$$

onde $v_{ii}(\hat{\beta})$ é o i -ésimo elemento da diagonal principal da matriz M^{-1} estimada. Com base no resultado assintótico (3.5), a estatística t_i segue uma distribuição t , de *Student*, com $n - m$ graus de liberdade. Por outro lado, atendendo à coincidência, no limite, da distribuição t , de *Student*, com

a normal, a hipótese da nulidade pode ser rejeitada, ao nível, aproximado, de significância de 5%, quando $|t_i| \geq 1.96$.

Para os parâmetros do modelo ARMA(p, q), define-se um teste equivalente, em que se substitui $v_{ii}(\hat{\beta})$ pelo correspondente valor na matriz $\hat{\Sigma}$ estimada; neste caso, o número de graus de liberdade é dado por $n - p - q$.

1.2. Estabilidade do metamodelo estimado

Deve ser, sempre, efectuada a análise da matriz de correlação entre os estimadores dos parâmetros. Embora seja de esperar alguma correlação espúria entre os estimadores obtidos, se encontrarmos alguma correlação significativa, entre dois ou mais estimadores dos parâmetros do metamodelo, isso indica, em geral, uma sobreparametrização do metamodelo.

Como regra prática, consideram-se significativas as correlações com valor absoluto superior a 0.7, tal como é sugerido por Murteira, Müller e Turkman (1993).

2. Avaliação da qualidade de ajustamento do metamodelo

A qualidade do ajustamento de um metamodelo pode medir-se através da análise das correspondentes estimativas dos resíduos. Considerando o metamodelo definido em (3.2) e a equação (3.4), as estimativas dos resíduos (resíduos finais) são definidas por

$$\hat{\varepsilon}_i = \hat{\theta}^{-1}(B)\hat{\phi}(B)[\bar{Y}_i - f(\mathbf{X}_i, t_i; \hat{\beta})].$$

2.1. Hipóteses distribucionais

Para a aplicação do método da máxima verosimilhança, considerou-se, por hipótese, que a série $\{\varepsilon_i\}$ era normalmente distribuída. Assim, torna-se necessário verificar se os resíduos estimados têm, efectivamente, uma distribuição normal. Devem analisar-se as séries dos resíduos através do seu cronograma, histograma e papel de probabilidade normal (ou Q-Q *plot*). Se a análise destes três gráficos não revelar desvios acentuados, relativamente ao modelo normal, então concluímos que, não é de rejeitar a normalidade dos resíduos estimados.

Esta análise pode ser complementada por um teste estatístico. Para esse efeito, utilizamos o teste de Shapiro-Wilk, que passamos a descrever. Seja $\mathbf{o} = (o_1, \dots, o_n)^T$ o vector dos valores esperados de uma estatística de

ordem normal e seja V a correspondente matriz de variância-covariância, isto é, $E[Z_{(i)}] = o_i$ ($i = 1, \dots, n$) e $\text{Cov}(Z_{(i)}, Z_{(j)}) = v_{ij}$ ($i, j = 1, \dots, n$), onde $Z_{(1)} < Z_{(2)} < \dots < Z_{(n)}$ é uma amostra aleatória ordenada, com distribuição normal padrão. Suponha-se que, $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T$ representa a amostra aleatória, a que vamos aplicar o teste de Shapiro-Wilk, e $Y_{(1)} < Y_{(2)} < \dots < Y_{(n)}$ a respectiva amostra ordenada. Nestas condições, a estatística de teste é

$$W = \frac{[\sum_{i=1}^n A_i Y_{(i)}]^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2},$$

onde

$$\mathbf{A} = (A_1, \dots, A_n)^T = \frac{\mathbf{o}^T \mathbf{V}^{-1}}{\sqrt{\mathbf{o}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}^{-1} \mathbf{o}}}.$$

Apesar de existirem tabelas, para os coeficientes $\{A_i\}$, para $n \leq 20$, e um algoritmo, para a determinação da matriz \mathbf{V} (ver, em Royston (1982b), as respectivas referências), Shapiro e Wilk (1965) apresentaram uma aproximação, para \mathbf{A} , cujos resultados melhoram, à medida que a dimensão da amostra aumenta, adoptada, também, por Royston (1982b, p. 117), e que evita o cálculo explícito da matriz \mathbf{V} .

Royston (1982b) desenvolveu uma transformação, da distribuição da estatística W , aproximando-a da distribuição normal, para amostras de dimensão $7 \leq n \leq 2000$. É igualmente desenvolvido, no artigo citado, um método para o cálculo do nível de significância de W , para $n < 7$. Em Royston (1982a, 1986), pode ser consultado o algoritmo, que permite a implementação deste teste em computador.

2.2. Falta de ajustamento (*Lack of fit*)

Consideremos, em primeiro lugar, a definição de série de ruído branco.

Definição 3.1. Uma série $\{\varepsilon_i : i \in \mathbb{Z}\}$ diz-se ser uma *série de ruído branco*, com média nula e variância σ_ε^2 , e representa-se por $\{\varepsilon_i\} \sim \text{RB}(0, \sigma_\varepsilon^2)$, se

$$E[\varepsilon_i] = 0 \quad \text{e} \quad \text{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_{i+s}) \begin{cases} \sigma_\varepsilon^2, & s = 0 \\ 0, & s \neq 0 \end{cases}, \quad \forall i \in \mathbb{Z}.$$

Atendendo à definição anterior, Box, Jenkins e Reinsel (1994) referem que, se os parâmetros do modelo (3.4) forem estimados pelo método da máxima

verosimilhança, então, os resíduos aproximam-se do ruído branco, se o modelo for adequado. Assim, para verificar se um determinado metamodelo se ajusta adequadamente aos dados, podemos verificar se os respectivos resíduos podem ser considerados como ruído branco. Para este fim, decidimos utilizar o teste de Ljung-Box, que verifica a nulidade de uma sequência de valores iniciais da FAC estimada dos resíduos, ou seja,

$$H_0 : \hat{\rho}_1(\hat{\varepsilon}) = \hat{\rho}_2(\hat{\varepsilon}) = \dots \hat{\rho}_k(\hat{\varepsilon}) = 0.$$

A estatística de teste, como já vimos na Secção 2.1.1, é dada por

$$\tilde{Q} = n(n+2) \sum_{s=1}^k \frac{1}{n-s} \hat{\rho}_s^2(\hat{\varepsilon})$$

onde $\hat{\rho}_s(\hat{\varepsilon})$ é a autocorrelação amostral dos resíduos do metamodelo estimado. Admitindo que o modelo, estimado para $\{u_i\}$, é um ARMA(p, q), a estatística \tilde{Q} tem distribuição assintótica χ^2 , com $k - p - q$ graus de liberdade.

Um teste alternativo, para aferir da falta de ajustamento, é o teste da razão de verosimilhança (*Likelihood ratio test*). Este teste compara dois metamodelos, um mais simples e outro mais complexo, desde que o metamodelo mais simples seja um caso particular do mais complexo. Assim, para além do metamodelo, em relação ao qual pretendemos testar a qualidade de ajustamento, denotado por \mathcal{M}_s (modelo simples), é necessária a estimação de um segundo metamodelo, \mathcal{M}_g , tal que, \mathcal{M}_s é obtido como um caso particular de \mathcal{M}_g , através da fixação de um ou mais parâmetros de \mathcal{M}_g . Desta forma, a falta de ajustamento do metamodelo \mathcal{M}_s é verificada através da estatística de teste

$$\begin{aligned} LR &= -2 \log \left(\frac{\hat{\mathcal{L}}(\mathcal{M}_s)}{\hat{\mathcal{L}}(\mathcal{M}_g)} \right) \\ &= -2 [\log \hat{\mathcal{L}}(\mathcal{M}_s) - \log \hat{\mathcal{L}}(\mathcal{M}_g)], \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde $\hat{\mathcal{L}}$ denota o valor máximo estimado da função de verosimilhança. Sob a hipótese nula de que o metamodelo mais simples é correcto, a estatística LR tem distribuição assintótica χ^2 , com um número de graus de liberdade igual à diferença do número de parâmetros dos metamodelos \mathcal{M}_g e \mathcal{M}_s .

3. Avaliação da capacidade previsiva do metamodelo

No âmbito da análise de resultados, em simulação de acontecimentos discretos, uma forma de validar o metamodelo de simulação, em relação à sua capacidade de previsão, é através da recolha de novas observações e da comparação, das mesmas, com os valores previstos pelo metamodelo ajustado. O nosso principal interesse é, naturalmente, testar a capacidade de previsão da componente determinística do metamodelo.

No contexto do nosso trabalho, dois tipos de recolha de dados podem ser efectuados: novas réplicas do modelo de simulação, no mesmo intervalo de tempo utilizado anteriormente (*confirmation runs*), ou novas observações, para além da duração da simulação já usada. Neste último caso, as observações adicionais também podem ser obtidas aquando da recolha inicial dos dados, através do aumento da duração da simulação do modelo, desde que não sejam utilizados na estimação do metamodelo.

Em qualquer dos casos referidos, sugerimos as seguintes estatísticas, para testar a capacidade previsiva do metamodelo:

- (i) Soma dos quadrados dos resíduos,

$$\text{SSE} = \sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i - f(\mathbf{X}_i, t_i; \hat{\boldsymbol{\beta}})]^2;$$

- (ii) Erro quadrático médio,

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [\bar{Y}_i - f(\mathbf{X}_i, t_i; \hat{\boldsymbol{\beta}})]^2; \quad e$$

- (iii) Erro absoluto médio,

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\bar{Y}_i - f(\mathbf{X}_i, t_i; \hat{\boldsymbol{\beta}})|.$$

A análise, da capacidade previsiva dos metamodelos, é efectuada de uma forma qualitativa. Assim, tendo em conta as estatísticas anteriores, pretendemos verificar se os valores destas estatísticas, obtidas com os dados que serviram para a estimação dos metamodelo, são comparáveis com as obtidas com os novos dados. É natural que os valores, destas últimas, sejam superiores; no entanto, se os valores não forem substancialmente diferentes, isso significa que o metamodelo apresenta uma boa capacidade de previsão.

Critérios de selecção de metamodelos

Em algumas situações, podem existir vários metamodelos capazes de descrever, de uma forma satisfatória, a resposta do sistema em estudo, ou seja, é possível, por vezes, encontrar mais do que um metamodelo, que passe o crivo dos diferentes critérios de validação, anteriormente descritos. Nesse caso, para escolher o melhor destes metamodelos, de entre os vários disponíveis, podemos usar os dois seguintes critérios de selecção, que passamos a descrever:

a) Critério de Akaike

Considere-se um metamodelo, com k parâmetros, que foi estimado, pelo método da máxima verosimilhança, a partir duma série com n observações. Akaike (1974), utilizando conceitos da teoria da informação, definiu um critério, para medir a qualidade do ajustamento, através da grandeza AIC (*Akaike's Information Criterion*)

$$\text{AIC} = -2\log(\text{máxima verosimilhança}) + 2k$$

De acordo com este critério, deve seleccionar-se, como melhor, o metamodelo para o qual o correspondente AIC tenha o menor valor. Pela definição de AIC, verifica-se que os metamodelos, com maior número de parâmetros e com maior variância residual, são penalizados. Isto significa que, um metamodelo, com maior número de parâmetros, só é seleccionado se os seus resíduos tiverem uma variância mais pequena do que os metamodelos concorrentes mais parcimoniosos.

Alguns estudos, efectuados sobre o critério AIC—ver, por exemplo, Peña, Tiao e Tsay (2001)—verificaram que este tende a sobrestimar o número de parâmetros. Para resolver este problema, Akaike (1979) propôs uma modificação bayesiana do seu critério, que é assimptoticamente equivalente ao critério de Schwarz, que apresentamos a seguir.

b) Critério de Schwarz

Schwarz (1978) também propôs um critério de informação bayesiano (*Bayesian Information Criterion*), cuja expressão é dada por

$$\text{BIC} = -2\log(\text{máxima verosimilhança}) + k \log n$$

Neste critério, a penalização, pela introdução de novos parâmetros, é maior que no critério AIC, pelo que, o critério BIC tende a seleccionar modelos mais simples, do que os seleccionados pelo critério AIC.

Um outro teste, que pode ser aplicado no contexto da selecção de metamodelos, é o teste da razão de verosimilhança, dado pela expressão (3.7), desde que os metamodelos, a comparar, obedeçam aos requisitos do referido teste (*nested metamodels*).

3.2 Alguns Resultados Analíticos

A nossa convicção, de que o valor esperado, de cada um dos momentos das respostas de sistemas não estacionários, tem um comportamento, fundamental, que pode ser descrito por um metamodelo, relativamente simples, é confirmada por Bailey (1957, 1964), que deduziu expressões para a evolução, ao longo do tempo, do valor médio e da variância do número de entidades no sistema, para uma fila de espera $M/M/1$. Nos trabalhos citados, são apresentados resultados analíticos, para o caso particular da taxa de serviço ser unitária, e resultados assintóticos, para o caso geral.

Tendo por base esses resultados, verificamos que é possível definir um metamodelo, que expresse o valor esperado do número de entidades no sistema, no instante t , para uma fila $M/M/1$, com taxa de chegada λ e taxa de serviço μ , quaisquer. Este resultado é apresentado na proposição que se segue.

Proposição 3.1. *Para uma fila de espera $M/M/1$, com taxa de chegada λ e taxa de serviço μ , começando, no instante $t = 0$, com zero clientes no sistema, o metamodelo, que exprime o valor esperado do número de entidades no sistema, no instante t , é dado por*

$$f(\lambda, \mu, t) = \begin{cases} \lambda(\mu - \lambda)^{-1} - G(\lambda, \mu, t), & \lambda < \mu \\ \lambda \int_0^t e^{-2\lambda\tau} [I_0(2\lambda\tau) + I_1(2\lambda\tau)] d\tau, & \lambda = \mu, \\ \mu(\lambda - \mu)^{-1} + (\lambda - \mu)t - G(\lambda, \mu, t), & \lambda > \mu \end{cases}$$

onde

$$G(\lambda, \mu, t) = \frac{e^{-(\sqrt{\lambda}-\sqrt{\mu})^2 t}}{2\pi} \int_0^1 \frac{w^{\frac{1}{2}}(1-w)^{\frac{1}{2}} e^{-4\sqrt{\lambda\mu} tw}}{\left[w + \frac{(\sqrt{\lambda}-\sqrt{\mu})^2}{4\sqrt{\lambda\mu}}\right]^2} dw$$

e $I_n(x)$ representa a função de Bessel de primeira espécie modificada.

Verificação: De acordo com Bailey (1964, Secção 11.5) e considerando zero clientes, no sistema, no instante $t = 0$, a transformada de Laplace, da função geradora dos momentos da distribuição do número de entidades no sistema, é dada por

$$M^*(\nu, s) = \frac{e^\nu - (1 - e^\nu)\xi(1 - \xi)^{-1}}{-\lambda(e^\nu - \xi)(e^\nu - \eta)},$$

onde

$$\xi = \frac{(\lambda + \mu + s) - [(\lambda + \mu + s)^2 - 4\lambda\mu]^{\frac{1}{2}}}{2\lambda}$$

e

$$\eta = \frac{(\lambda + \mu + s) + [(\lambda + \mu + s)^2 - 4\lambda\mu]^{\frac{1}{2}}}{2\lambda}.$$

Calculando a primeira derivada de $M^*(\nu, s)$ em ordem a ν , na origem, obtém-se a transformada do valor esperado (momento de ordem 1) do número de entidades no sistema,

$$f^*(\lambda, \mu, s) = \frac{\lambda - \mu}{s^2} + \frac{\mu - \lambda\xi}{s^2}.$$

Aplicando a transformada de Laplace inversa à expressão anterior, obtemos

$$f(\lambda, \mu, t) = (\lambda - \mu)t + \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds, \quad (3.8)$$

em que c é uma constante positiva, maior que a parte real de qualquer das singularidades de $f^*(\lambda, \mu, s)$. Como o cálculo do integral, na expressão anterior, não é trivial, consideraremos dois casos distintos: (a) $\lambda = \mu$ e (b) $\lambda \neq \mu$.

(a) Quando $\lambda = \mu$, é mais simples trabalhar com a transformada da primeira derivada de f . Verifica-se—ver Bailey (1964, p.154)—que

$$\left\{ \frac{df}{dt} \right\}^* = \frac{\lambda(1 - \xi)}{s} = \frac{1 + \eta^{-1}}{\eta - \xi} \quad (3.9)$$

e a transformada de Laplace inversa de $(\eta - \xi)^{-1}$ e de $\eta^{-1}(\eta - \xi)^{-1}$ é, respectivamente,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{e^{st}}{(\eta - \xi)} ds &= \frac{\lambda e^{-2\lambda t}}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{e^{zt}}{(z^2 - 4\lambda^2)^{\frac{1}{2}}} dz \\ &= \lambda e^{-2\lambda t} I_0(2\lambda t), \end{aligned} \quad (3.10)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{e^{st}}{(\eta - \xi)\eta} ds &= \frac{\lambda e^{-2\lambda t}}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{2\lambda e^{zt}}{(z^2 - 4\lambda^2)^{\frac{1}{2}} [z + (z^2 - 4\lambda^2)^{\frac{1}{2}}]} dz \\ &= \lambda e^{-2\lambda t} I_1(2\lambda t), \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde $z = 2\lambda + s$.

De (3.9), (3.10) e (3.11), obtemos, integrando

$$f(\lambda, \mu, t) = \lambda \int_0^t e^{-2\lambda\tau} [I_0(2\lambda\tau) + I_1(2\lambda\tau)] d\tau, \quad \text{para } \lambda = \mu. \quad (3.12)$$

(b) Consideremos, agora, os casos $\lambda < \mu$ e $\lambda > \mu$. A integranda de

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds \quad (3.13)$$

tem dois pontos de ramificação em

$$s_1 = -(\sqrt{\lambda} - \sqrt{\mu})^2 \quad \text{e} \quad s_2 = -(\sqrt{\lambda} + \sqrt{\mu})^2,$$

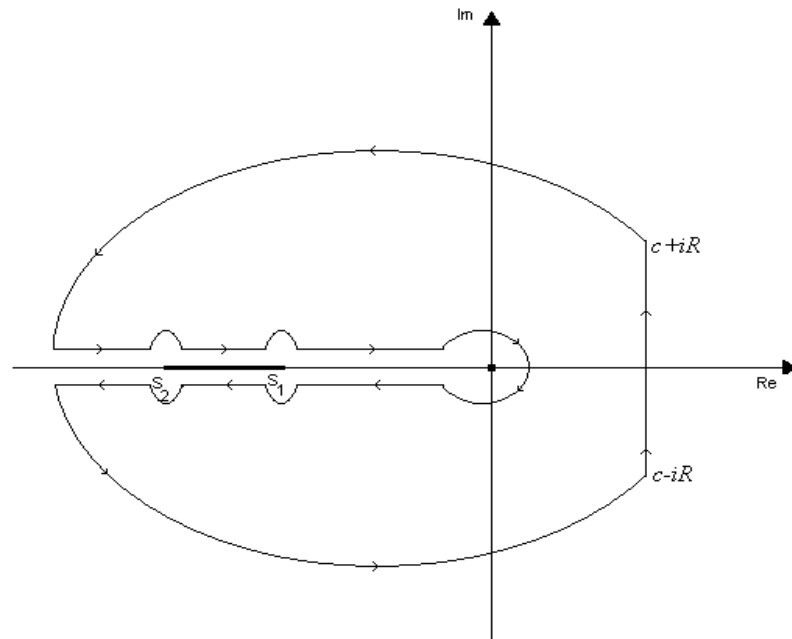
e um pólo simples, na origem, se $\lambda > \mu$ (se $\lambda < \mu$, o pólo é duplo).

Tomemos a linha de ramificação, parte do eixo real negativo entre os pontos s_2 e s_1 .

Em vez do cálculo do integral (3.13), ao longo da linha vertical, que corta o semi-eixo real em c , apliquemos o Teorema de Cauchy a um contorno fechado, isto é,

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds = 0,$$

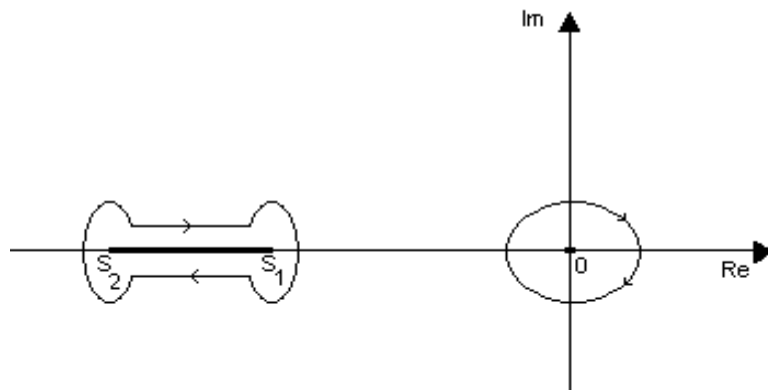
onde C é o contorno constituído por esta mesma linha vertical (mas, agora, de $c - iR$ a $c + iR$), por um arco de circunferência de raio infinito (desde $c + iR$, até um ponto infinitamente próximo e acima do semi-eixo real negativo, a uma distância infinita da origem), acompanhando, de seguida, o semi-eixo real negativo, por cima, contornando os pontos de ramificação s_2 e s_1 , até à origem, que é contornada no sentido horário, regressando, ao infinito, no semi-eixo real negativo, por baixo (continuando a evitar os pontos de ramificação s_1 e s_2) e regressando, de seguida, a $c - iR$ por outro arco de circunferência de raio infinito (ver a Figura 3.1).

Figura 3.1: Contorno C

Após alguns cálculos, verifica-se que o integral, definido em (3.13), é dado por

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds = -\frac{1}{2\pi i} \left[\oint_{C_1} \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds + \oint_{C_2} \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds \right] \quad (3.14)$$

em que C_1 é o contorno, em haltere, definido em torno da linha de ramificação entre os pontos s_2 e s_1 , sendo s_1 contornado no sentido horário, e C_2 é um pequeno círculo à volta da origem, contornado no sentido horário (ver a Figura 3.2).

Figura 3.2: Contornos C_1 (haltere) e C_2 (pequeno círculo à volta da origem)

Pelo Teorema dos Resíduos e atendendo a que o pequeno círculo à volta da origem é contornado no sentido horário, temos que

$$\oint_{C_2} \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds = -2\pi i \operatorname{Res}\left(\frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2}; 0\right).$$

O valor do resíduo, na origem, é dado por

$$\begin{cases} \lambda(\mu - \lambda)^{-1} + t(\mu - \lambda), & \lambda < \mu \\ \mu(\lambda - \mu)^{-1}, & \lambda > \mu \end{cases}.$$

Assim,

$$-\frac{1}{2\pi i} \oint_{C_2} \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds = \begin{cases} \lambda(\mu - \lambda)^{-1} + t(\mu - \lambda), & \lambda < \mu \\ \mu(\lambda - \mu)^{-1}, & \lambda > \mu \end{cases}. \quad (3.15)$$

Calculemos, agora, o integral $\oint_{C_1} \frac{e^{st}(\mu - \lambda\xi)}{s^2} ds$. Fazendo a seguinte mudança de variável, $z = s - s_1$, obtemos

$$e^{s_1 t} \oint_{C_1^*} \frac{e^{zt} \left(\mu - \frac{\lambda + \mu + z + s_1 - [(\lambda + \mu + z + s_1)^2 - 4\lambda\mu]^{\frac{1}{2}}}{2} \right)}{(z + s_1)^2} dz,$$

onde C_1^* é uma translação do contorno C_1 , em que o haltere, anteriormente definido entre s_2 e s_1 , passou a estar definido entre $-4\sqrt{\lambda\mu}$ e 0. Finalmente, efectuando uma nova mudança de variável, $z = 4\sqrt{\lambda\mu}w$, e calculando o integral ao longo do contorno C_1^* , obtemos

$$i e^{-(\sqrt{\lambda} - \sqrt{\mu})^2 t} \int_0^1 \frac{w^{\frac{1}{2}}(1-w)^{\frac{1}{2}} e^{-4\sqrt{\lambda\mu} tw}}{\left[w + \frac{(\sqrt{\lambda} - \sqrt{\mu})^2}{4\sqrt{\lambda\mu}} \right]^2} dw. \quad (3.16)$$

Substituindo, em (3.14), os valores obtidos em (3.15) e (3.16), a expressão resultante para (3.8) é dada por

$$f(\lambda, \mu, t) = \begin{cases} \lambda(\mu - \lambda)^{-1} - G(\lambda, \mu, t), & \lambda < \mu \\ \mu(\lambda - \mu)^{-1} + (\lambda - \mu)t - G(\lambda, \mu, t), & \lambda > \mu \end{cases},$$

onde

$$G(\lambda, \mu, t) = \frac{e^{-(\sqrt{\lambda} - \sqrt{\mu})^2 t}}{2\pi} \int_0^1 \frac{w^{\frac{1}{2}}(1-w)^{\frac{1}{2}} e^{-4\sqrt{\lambda\mu} tw}}{\left[w + \frac{(\sqrt{\lambda} - \sqrt{\mu})^2}{4\sqrt{\lambda\mu}} \right]^2} dw.$$

□

Como o resultado anterior envolve o cálculo de um integral complicado, é vantajoso analisar o comportamento assintótico (para valores de t elevados) do valor esperado do número de entidades no sistema.

Proposição 3.2. *Sob as mesmas condições da Proposição 3.1, o metamodelo, que representa o valor assintótico do número esperado de entidades no sistema, no instante t , é dado por*

$$f(\lambda, \mu, t) \approx \begin{cases} \rho(1 - \rho)^{-1}, & \lambda < \mu \\ 2 \left(\frac{\lambda t}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}, & \lambda = \mu \\ \mu(\lambda - \mu)^{-1} + (\lambda - \mu)t, & \lambda > \mu \end{cases},$$

onde $\rho = \frac{\lambda}{\mu}$.

Verificação: Para $\lambda < \mu$, existe a solução de equilíbrio, muito conhecida—ver, por exemplo, Gross e Harris (1998)—que é dada por

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(\lambda, \mu, t) = \frac{\rho}{1 - \rho} = \frac{\lambda}{\mu - \lambda}.$$

No caso de $\lambda = \mu$, substituindo, na equação (3.12), o resultado assintótico da função de Bessel de primeira espécie modificada,

$$I_n(x) \approx \frac{e^x}{(2\pi x)^{\frac{1}{2}}}, \quad x \rightarrow \infty,$$

o cálculo do integral é elementar, resultando

$$f(\lambda, \mu, t) \approx 2 \left(\frac{\lambda t}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Finalmente, para $\lambda > \mu$, verifica-se que

$$G(\lambda, \mu, t) \rightarrow 0, \quad \text{se } t \rightarrow \infty, \quad (3.17)$$

e, assim,

$$f(\lambda, \mu, t) \approx \mu(\lambda - \mu)^{-1} + (\lambda - \mu)t, \quad \text{para } \lambda > \mu.$$

A conclusão, em (3.17), resulta do seguinte: em primeiro lugar, comparando os resultados dados pelas proposições anteriores, para o caso de $\lambda < \mu$, podemos concluir que $G(\lambda, \mu, t) \rightarrow 0$; por outro lado, temos que

$$G(\lambda, \mu, t) = G(\mu, \lambda, t), \quad \text{para } \lambda > \mu,$$

pois $\sqrt{\lambda\mu} = \sqrt{\mu\lambda}$ e $(\sqrt{\lambda} - \sqrt{\mu})^2 = (\sqrt{\mu} - \sqrt{\lambda})^2$. Assim sendo, $G(\mu, \lambda, t) \rightarrow 0$, pois $\mu < \lambda$, o que é equivalente a $G(\lambda, \mu, t) \rightarrow 0$, para $\lambda > \mu$. \square

As duas proposições anteriores definiam metamodelos para o valor esperado (primeiro momento) dum dada resposta (número de entidades no sistema) dum sistema específico (fila de espera $M/M/1$). Contudo, Bailey também obteve resultados assintóticos para a variância desta mesma resposta, o que nos permite definir, igualmente, um metamodelo para expressar o comportamento assintótico, ao longo do tempo, da variância do número de entidades no sistema, no instante t , resultado esse que é essencial para a construção de intervalos de confiança. Na proposição, que se segue, apresentamos este resultado.

Proposição 3.3. *Nas mesmas condições da Proposição 3.1, o metamodelo, que representa o valor assintótico da variância, do número de entidades no sistema, no instante t , é dado por*

$$g(\lambda, \mu, t) \approx \begin{cases} \frac{\rho}{(1-\rho)^2}, & \lambda < \mu \\ 2 \left(1 - \frac{2}{\pi}\right) \lambda t, & \lambda = \mu \\ (\lambda + \mu)t, & \lambda > \mu \end{cases}$$

onde $\rho = \frac{\lambda}{\mu}$.

Verificação: Atendendo a que os resultados, enunciados nesta proposição, coincidem com os que são apresentados em Bailey (1964), sugestões, para a sua demonstração, podem ser encontradas, nas páginas 154 a 156, do citado trabalho. \square

3.2.1 Análise de Sensibilidade em Relação ao Número de Réplicas

Desde o início, deste trabalho de investigação, já estávamos à espera de encontrar uma enorme variabilidade, em cada uma das realizações (individuais) das séries cronológicas, correspondentes a respostas, de sistemas, em condições de não estacionaridade; essa expectativa foi largamente confirmada, quando observámos realizações individuais das várias respostas de sistemas simples de filas de espera. Aliás, esse comportamento instável já se verifica, de algum modo, em sistemas de filas de espera estacionárias, quando os respectivos factores de utilização tendem para um. Num trabalho anterior, nós próprios tínhamos sentido algumas dificuldades em ajustar mo-

delos ARMA a uma única realização duma série produzida por uma fila $M/M/3$, para um factor de $\rho = 0.95$; ver Brandão e Porta Nova (1999).

Sendo, do conhecimento geral, que a determinação, de médias amostrais, estabiliza o comportamento das componentes estocásticas, surgiu-nos, naturalmente, a ideia de utilizar, uma série média, como representante do processo de resultados, embora essa não seja uma prática usual, na aplicação dos modelos clássicos (Box-Jenkins) de séries cronológicas. Como esta abordagem é viável, no contexto da simulação de acontecimentos discretos, consegue-se uma variabilidade, para a série média, substancialmente menor que a das séries individuais, o que, por outro lado, torna bastante mais fácil de identificar o tipo de evolução, no tempo, da resposta a analisar. Contudo, esta abordagem também leva à colocação duma questão pertinente:

– Que número (“ideal”? “ótimo”?) de réplicas é que se deve considerar, para calcular a série média?

O objectivo de “optimização” está entre aspas, uma vez que, como é óbvio, a simulação é, essencialmente, uma ferramenta de diagnóstico; de qualquer modo, queríamos determinar, até que ponto, os resultados eram muito, ou pouco, sensíveis, em relação ao número de réplicas, usado na determinação da série cronológica média. Para respondermos à questão proposta, escolhemos um modelo, para o qual é possível determinar o valor esperado de uma medida do sistema, em condições de não estacionaridade. Assim, o modelo seleccionado, considerando os resultados da Proposição 3.1, foi a fila de espera $M/M/1$ e, a medida, o número de entidades no sistema (número de entidades na fila de espera mais a entidade a ser atendida), em cada instante t .

Para implementar este modelo de simulação (relativamente simples), os requisitos não eram muito exigentes, mas conviria utilizar uma linguagem de simulação de âmbito genérico, relativamente eficiente (uma vez que teríamos de realizar uma experimentação bastante pesada e num computador pessoal, sem grande poder computacional) e que permitisse registar as múltiplas grandezas, a estudar, em ficheiros intermutáveis com o *software* de análise de dados que viesse a ser seleccionado. Uma vez que já conhecíamos versões anteriores deste *software* de simulação, quer por ter sido usado em disciplinas de licenciatura, quer em virtude do trabalho desenvolvido no âmbito das Provas de Aptidão Pedagógica e Capacidade Científica, a nossa escolha recaiu sobre a linguagem **Visual SLAM** e sobre o ambiente de desenvolvimento **AweSim 2.0**, a ela associado, usados para modelar e simular todos os casos de estudo analisados neste trabalho.

Para uma primeira análise, ao longo do tempo, da dependência do tempo médio, no sistema, em relação ao número de réplicas usado, decidimos simular uma fila $M/M/1$, procurando abranger uma ampla gama de valores do respectivo factor de utilização, ρ , desde o seu valor *crítico* ($\rho = 1$), até um valor correspondente a condições assintóticas, ou *hiper-crítico* (tentámos $\rho = 10$), passando por um valor intermédio, ou *super-crítico* (tentámos $\rho = 2$). Em resumo, considerámos três situações, para os seguintes valores do factor de utilização, ρ , da taxa de chegada, λ , e da taxa de serviço, μ , numa fila de espera $M/M/1$:

- a) Intensidade de tráfego crítica, $\rho = 1$, com $\lambda = 1$ e $\mu = 1$;
- b) Intensidade de tráfego super-crítica, $\rho = 2$, com $\lambda = 2$ e $\mu = 1$;
- c) Intensidade de tráfego hiper-crítica, $\rho = 10$, com $\lambda = 2$ e $\mu = 1$.

Pareceu-nos que seria adequado utilizar, para cada réplica, uma duração de 200 unidades de tempo e um intervalo de recolha de dados de 1 unidade de tempo, a começar na origem; assim, em cada réplica, recolheu-se o número de entidades, no sistema, em cada um dos instantes $t = 0, 1, \dots, 199$. As condições iniciais foram, sempre, a fila vazia e o sistema inactivo.

Em seguida, fizemos variar o número de réplicas, de 5 em 5, até um número que nos pareceu suficiente, *a priori* (50), e calculámos as respectivas séries cronológicas médias; ou seja, definimos um conjunto de 10 números de réplicas,

$$\{r_l : l = 1, \dots, 10\} = \{5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 \text{ e } 50\},$$

e calculámos, para cada um dos instantes de tempo, a média das observações correspondentes (“cruzadas”) a cada um dos conjuntos de r_l réplicas, para $l = 1, \dots, 10$. Representando, por $Y_{j,t}$, a observação, no instante de tempo t , da j -ésima réplica, em que $j = 1, 2, \dots, 50$ e $t = 0, 1, \dots, 199$ (no instante 0, a média é, evidentemente, nula), temos o seguinte conjunto (total) de observações:

$$\begin{array}{ccccc} Y_{1,0} & Y_{1,1} & \dots & Y_{1,198} & Y_{1,199} \\ Y_{2,0} & Y_{2,1} & \dots & Y_{2,198} & Y_{2,199} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ Y_{50,0} & Y_{50,1} & \dots & Y_{50,198} & Y_{50,199} \end{array}$$

Estas observações permitem, para cada conjunto de réplicas, $l = 1, \dots, 10$, a construção da correspondente série cronológica média, dada por $\bar{Y}_{l,0}, \bar{Y}_{l,1}, \dots, \bar{Y}_{l,199}$, onde,

para cada t ,

$$\bar{Y}_{l,t} = \frac{1}{r_l} \sum_{j=1}^{r_l} Y_{j,t}.$$

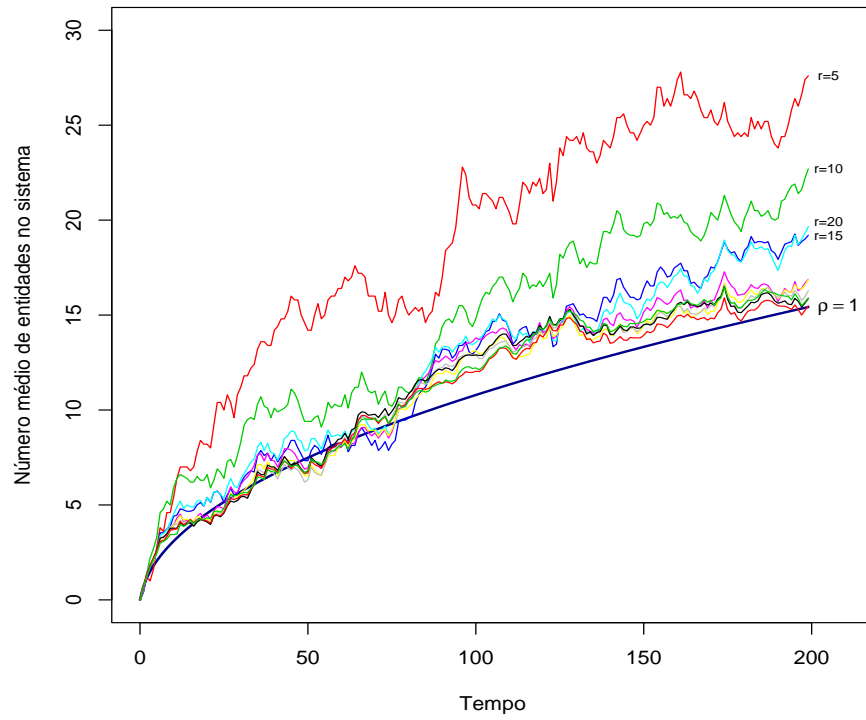
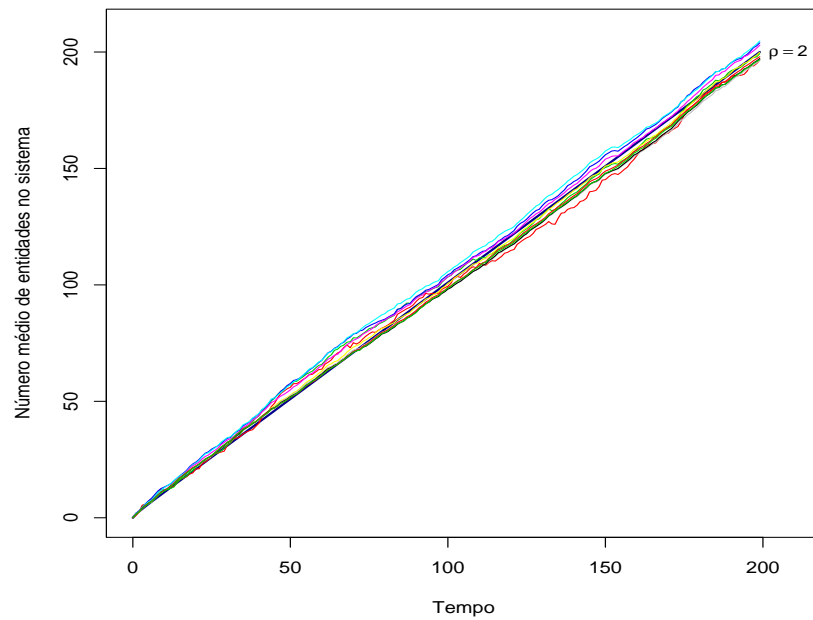
Para fazer esta e outras sumariações de dados, representações gráficas e diferentes análises estatísticas, mais ou menos complexas, também sentimos a necessidade de escolher um *software* específico, que permitisse, numa forma suficientemente flexível, tratar a informação produzida pelos vários modelos de simulação estudados no âmbito deste trabalho. Tendo em conta os pacotes de análise estatística disponíveis, acabámos por escolher a linguagem R—ver R Development Core Team (2004)—para efectuar toda a análise de resultados dos sistemas simulados, por, nomeadamente:

- ser um *software* de distribuição pública;
- permitir o manuseamento de grandes quantidades de dados;
- ter um vasto conjunto de funções implementadas, em especial, as necessárias à estimação dos metamodelos, à construção de gráficos, à realização de múltiplos testes estatístico, etc; e, não menos importante,
- permitir a definição de novas funções.

Na Figura 3.3, representamos graficamente as várias séries cronológicas médias (curvas irregulares, de várias cores), bem como a curva teórica (curva suave, a azul e traço grosso), dada pelo metamodelo para o número médio de entidades, no sistema, descrito na Proposição 3.1, para o caso de $\lambda = \mu$ e, na Figura 3.4, a informação correspondente, para $\rho = 2$ (caso de $\lambda > \mu$).

Observando a Figura 3.3, verificamos que, com excepção das séries médias com menos de 20 réplicas, o comportamento do número médio de entidades, no sistema, representado pelas restantes curvas, é muito similar e próximo da curva teórica. No caso de $\rho = 2$, o comportamento de todas as séries médias é muito similar e próximo da curva teórica, curva esta, que mal se distingue das restantes.

Por forma a complementar esta análise inicial, de sensibilidade em relação ao número de réplicas utilizado, decidimos, igualmente, estimar as probabilidades de cobertura de intervalos de confiança a 95%, baseados nos números de réplicas seleccionados. O novo estudo experimental consistiu numa simulação de Monte Carlo, em que foi gerado um conjunto total de 50×400 réplicas independentes dos modelos de simulação correspondentes, cada uma com a duração de 200 unidades de tempo. As condições iniciais foram, sempre, a fila vazia e o sistema inactivo. Desta vez, em cada

Figura 3.3: Número médio de entidades no sistema (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)Figura 3.4: Número médio de entidades no sistema (fila $M/M/1$, com $\rho = 2$)

réplica, registámos o número de entidades, no sistema, para instantes separados por 30 unidades de tempo, $t = 5, 35, 65, 95, 125, 155$ e 185 . Tal como anteriormente, foi calculado, para cada instante t , o número médio de entidades no sistema, com base em r_l réplicas, $l = 1, \dots, 10$, do modelo de simulação, com

$$\{r_l : l = 1, \dots, 10\} = \{5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 \text{ e } 50\},$$

bem como os respectivos intervalos de confiança, com probabilidade de cobertura de 95%. Como estamos perante observações independentes, a expressão utilizada, para o cálculo dos intervalos de confiança, foi

$$\bar{Y}_{l,t} \pm t_{r_l-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_{l,t}}{\sqrt{r_l}}, \quad (3.18)$$

onde

$$\hat{\sigma}_{l,t} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{r_l} (Y_{j,t} - \bar{Y}_{l,t})^2}{r_l - 1}}.$$

Em seguida, estimámos a probabilidade de cobertura de intervalos de confiança a 95%, para o número de entidades, no sistema, ao fim de 5, 35, ..., 185 unidades de tempo, com base em 400 desses intervalos, cada um deles calculado para 5, 10, ..., 50 réplicas do modelo de simulação.

Na Tabela 3.1 estão sumariados os resultados obtidos, em que também estão representadas as amplitudes médias dos intervalos.

Como podemos observar, as estimativas, da probabilidade de cobertura dos intervalos de confiança, estão muito próximas do respectivo valor nominal, para os vários números de réplicas, por vezes, até ultrapassando esses valores. Por outro lado, como se previa, as amplitudes médias dos intervalos de confiança, para cada instante t , diminuem, à medida que o número de réplicas aumenta. Constata-se, ainda, que, para o mesmo número de réplicas, se verifica um aumento das amplitudes médias, à medida que o instante t aumenta, indicando um correspondente aumento na variabilidade das amostras.

Em face das análises realizadas, tornou-se claro que, desde que o número de réplicas não fosse inferior a 20, os resultados não iriam estar muito dependentes do número de réplicas, que usássemos, na nossa abordagem, por não existir um caso que se destacasse dos restantes. Assim, decidimos escolher, para o número de réplicas a utilizar, no trabalho a realizar posteriormente, o valor 30, por ser, geralmente, considerado um valor, a partir do qual, se está perante uma amostra de grande dimensão.

Esta análise de sensibilidade, que acabámos de efectuar, permitiu-nos, igualmente, verificar que as condições, que poderíamos considerar como assintóticas, eram atingidas para valores, substancialmente inferiores ao que esperávamos, do factor de utilização, ρ ; na realidade, a partir de $\rho = 2$, não parecia haver grande diferença na natureza dos resultados. Assim, no resto deste trabalho, passámos a considerar, como intensidade de tráfego hiper-crítica, valores de $\rho \geq 2$, e, como super-crítica, valores de $\rho \approx 1.5$.

3.2.2 Avaliação Experimental da Metodologia

Para avaliar a *performance*, da metodologia proposta, resolvemos analisar, experimentalmente, o seu desempenho, aplicando-a à simulação do (único) caso em que se conhecem alguns resultados analíticos e que já usámos na secção anterior: uma fila de espera $M/M/1$, em três situações não estacionárias distintas, caracterizadas pelos seguintes valores do factor de utilização:

- a) $\rho = 1$, com $\lambda = 1$ e $\mu = 1$ (crítico);
- b) $\rho = 1.5$, com $\lambda = 1.5$ e $\mu = 1$ (super-crítico); e
- c) $\rho = 2$, com $\lambda = 2$ e $\mu = 1$ (hiper-crítico).

Com esta análise, pretendíamos verificar, até que ponto, era possível identificar um metamodelo, adequado, para descrever o valor esperado do número de entidades no sistema e se, através da construção de intervalos de confiança, a 95%, para o valor esperado do número de entidades no sistema, no instante t , a probabilidade de cobertura, estimada com base em 100 desses intervalos, se aproximava do valor teórico (conhecido).

Para este efeito, efectuámos um estudo de Monte Carlo, consistindo em 100 repetições do procedimento básico (que sintetiza a nossa metodologia), cada uma delas baseada em 30 réplicas independentes (*runs*) de cada um dos modelos de simulação atrás referidos, num total de $100 \times 30 \times 3$ execuções independentes do(s) modelo(s) de simulação da fila de espera $M/M/1$. Como no caso da secção anterior, considerámos, para condições iniciais, a fila vazia e o sistema inactivo.

Também à semelhança do que se verificou para a secção anterior, escolhemos, para duração da simulação, 200 unidades de tempo, e decidimos efectuar a recolha do número de entidades no sistema (passo 1 da metodologia) em instantes consecutivos, separados de uma unidade de tempo, começando a recolha no instante 0. Em seguida,

calculámos, para cada instante t , a respectiva média amostral, com base nos valores correspondentes das 30 réplicas independentes, dando origem a uma série cronológica média de 200 observações; no mesmo instante t e a partir das mesmas observações correspondentes, nos 30 *runs*, calculámos, igualmente, a variância corrigida da amostra, utilizando o estimador

$$\hat{\sigma}_t^2 = \frac{1}{r-1} \sum_{j=1}^r (Y_{j,t} - \bar{Y}_t)^2, \quad \text{para } t = 0, 1, \dots, 199 \quad \text{e } r = 30.$$

Como resultado das 100 repetições deste procedimento básico, obtivemos, da recolha e respectivo tratamento dos dados, 100 séries médias e 100 séries com as variâncias estimadas, cada uma delas baseadas em 30 réplicas independentes.

O passo seguinte (passo **2** da metodologia) consiste em identificar o tipo de meta-modelo, adequado, para descrever o comportamento das série médias. Para ilustração dos passos seguidos, vamos considerar uma série média, de cada uma das três filas de espera, descritas no início desta secção. Em primeiro lugar, construímos um cronograma para cada uma das séries; ver a Figura 3.5.

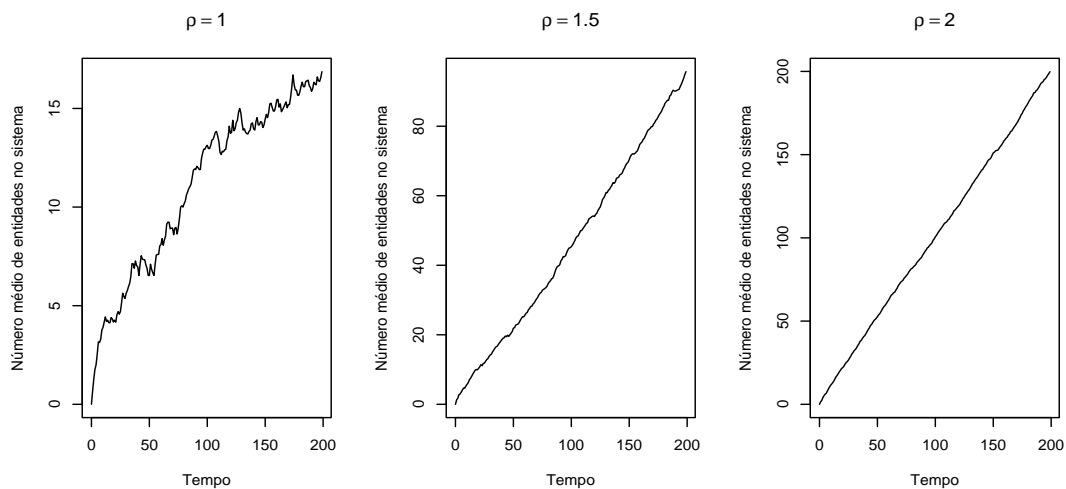


Figura 3.5: Séries médias da fila $M/M/1$ (para $\rho = 1$, $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$)

Observando a representação gráfica das três séries médias, constata-se que, ao contrário das duas últimas (que têm um comportamento, claramente, linear), a curva da primeira apresenta uma concavidade acentuada, pelo que decidimos, em primeiro lugar, tentar ajustar os seguintes metamodelos:

$$\bar{Y}_t = \beta_1 \sqrt{t} + u_t, \text{ para } \rho = 1, \quad (3.19)$$

e

$$\bar{Y}_t = \beta_1 t + u_t, \text{ para } \rho = 1.5 \text{ e } \rho = 2, \quad (3.20)$$

onde u_t representa a componente estocástica do metamodelo.

Note-se que, para as três situações, a curva escolhida passa na origem, o que é justificado pelas condições iniciais dos respectivos modelos de simulação.

Escolhido o metamodelo e como, neste caso, estamos perante metamodelos lineares (em relação aos parâmetros a estimar), de acordo com o passo **3** da metodologia, efectuámos uma estimação preliminar, utilizando o método dos mínimos quadrados usuais. Aos resíduos desta estimação, tentámos ajustar, em primeiro lugar, um modelo ARMA(p, q), analisando, como é habitual, o comportamento da função de autocorrelação (FAC) e da função de autocorrelação parcial (FACP) estimadas. Para a série média correspondente a $\rho = 1$, representada, na Figura 3.5, a FAC e a FACP dos resíduos da estimação preliminar estão representadas na Figura 3.6.

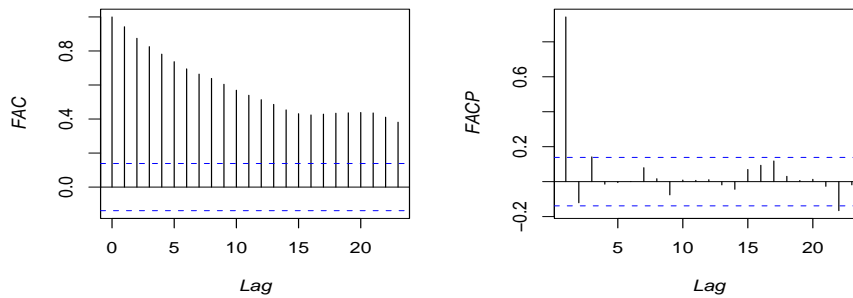


Figura 3.6: FAC e FACP dos resíduos da estimação preliminar da série média para $\rho = 1$

Apesar da FAC apresentar um lento decaimento para zero, verificou-se que era possível ajustar um modelo AR(1) válido aos resíduos. O modelo AR(1) estimado passou no teste de Ljung-Box, os parâmetros eram significativos e verificou-se, ainda, que os resíduos, obtidos da estimação do modelo AR(1), eram normalmente distribuídos. Conhecida a estrutura de autocorrelação dos resíduos da estimação preliminar, calculámos, então, as estimativas de máxima verosimilhança do metamodelo

$$\bar{Y}_t = \beta_1 \sqrt{t} + \phi_1 u_{t-1} + \varepsilon_t,$$

onde se assume que $\varepsilon_t \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$. Este processo foi repetido para as outras duas séries, representadas na Figura 3.5, em que os metamodelos considerados foram

$$\bar{Y}_t = \beta_1 t + \phi_1 u_{t-1} + \varepsilon_t, \text{ para } \rho = 1.5,$$

e

$$\bar{Y}_t = \beta_1 t + \phi_1 u_{t-1} + \phi_2 u_{t-2} + \varepsilon_t, \text{ para } \rho = 2.$$

As estimativas, obtidas para os parâmetros, os respectivos desvios padrão e o valor da estatística t_i dada pela equação (3.6), são apresentados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Metamodelos estimados para a fila $M/M/1$ (para $\rho = 1$, $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$)

Metamodelo	Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão	t_i
$\rho = 1$	β_1	1.1833	0.0276	42.8732
	ϕ_1	0.9397	0.0226	41.5796
$\rho = 1.5$	β_1	0.4736	0.0070	67.6571
	ϕ_1	0.9814	0.0124	79.1452
$\rho = 2$	β_1	1.0042	0.0064	156.9063
	ϕ_1	0.9254	0.0709	13.0522
	ϕ_2	0.0544	0.0710	0.7662

Finalmente, aos resíduos obtidos, nesta segunda estimação, foi novamente efectuada uma análise, para verificar a adequação, dos metamodelos ajustados, aos dados (passo 4 da metodologia). Esta análise consistiu em verificar se os resíduos eram não correlacionados (teste de Ljung-Box) e se eram normalmente distribuídos (teste de Shapiro-Wilk). Estes critérios foram satisfeitos, pelo que, os metamodelos foram aceites.

Para verificar, até que ponto, a nossa abordagem permite discriminar, entre modelos semelhantes, experimentou-se, também, ajustar outros metamodelos à série média, para o caso de $\rho = 1$, nomeadamente, um metamodelo polinomial de ordem 2 e um metamodelo não linear. As expressões destes metamodelos são, respectivamente,

$$\bar{Y}_t = \beta_1 t + \beta_2 t^2 + u_t \quad \text{e} \quad \bar{Y}_t = \beta_1 t^{\beta_2} + u_t.$$

A estimação, dos parâmetros destes metamodelos, seguiu os mesmos passos, que descrevemos, anteriormente, para o caso dos metamodelos (3.19) e (3.20); isto é, estimação preliminar, análise dos resíduos, estimação final e análise dos resíduos finais.

A única diferença é que, para efectuar a estimação preliminar do metamodelo não linear, é utilizado o método dos mínimos quadrados não lineares.

As estimativas, obtidas para os parâmetros, os respectivos desvios padrão e o valor da estatística t_i , para os dois metamodelos alternativos, são apresentados na Tabela 3.3.

Tabela 3.3: Metamodelos alternativos (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)

Metamodelo	Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão	t_i
$\bar{Y}_t = \beta_1 t + \beta_2 t^2 + \phi_1 u_{t-1} + \varepsilon_t$	β_1	0.1647	0.0110	14.9727
	β_2	-0.0004	6×10^{-5}	-6.6667
	ϕ_1	0.9510	0.0218	43.6239
$\bar{Y}_t = \beta_1 t^{\beta_2} + \phi_1 u_{t-1} + \varepsilon_t$	β_1	0.8721	0.1445	6.0353
	β_2	0.5634	0.0339	16.6195
	ϕ_1	0.9282	0.0248	37.4274

Na Tabela 3.4, apresentamos algumas estatísticas de diagnóstico dos três metamodelos estimados, nomeadamente, a soma dos quadrados dos resíduos (SSE), o erro quadrático médio (MSE), o critério de Akaike (AIC) e o critério de Schwarz (BIC). É de salientar que, as estatísticas SSE e MSE são calculadas com base nos resíduos da componente determinística.

Tabela 3.4: Comparação de metamodelos alternativos (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)

Metamodelo	SSE	MSE	AIC	BIC
$\bar{Y}_t = \beta_1 \sqrt{t} + \phi_1 u_{t-1} + \varepsilon_t$	119.2204	0.5961	28.9585	38.8535
$\bar{Y}_t = \beta_1 t + \beta_2 t^2 + \phi_1 u_{t-1} + \varepsilon_t$	151.3294	0.7566	39.0237	52.217
$\bar{Y}_t = \beta_1 t^{\beta_2} + \phi_1 u_{t-1} + \varepsilon_t$	97.0328	0.4852	26.9226	40.1159

Como podemos observar, o metamodelo, com melhores resultados em três das estatísticas, é o metamodelo não linear. Apesar disso, como os valores do metamodelo linear são muito próximos do metamodelo não linear e atendendo a que é, geralmente, preferível trabalhar com metamodelos lineares, a nossa escolha recaiu sobre este.

Assim, considerando o metamodelo (3.19), para o caso de $\rho = 1$, e o metamodelo (3.20), para $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$, procedeu-se à estimação dos parâmetros, dos mesmos, para as restantes 99 séries médias.

Após a estimação do conjunto total de 100 séries, verificou-se que, para o caso de $\rho = 1$, a utilização do metamodelo linear (3.19) nem sempre permitia descrever, convenientemente, a componente determinística dos modelos simulados, como podemos observar na Figura 3.7 (a curva, a preto, representa a série média e a curva, a azul, a componente determinística do metamodelo estimado). A título de exemplo, para o metamodelo, representado no gráfico (c), o valor de SSE é 2942.5096, claramente um valor muito elevado.

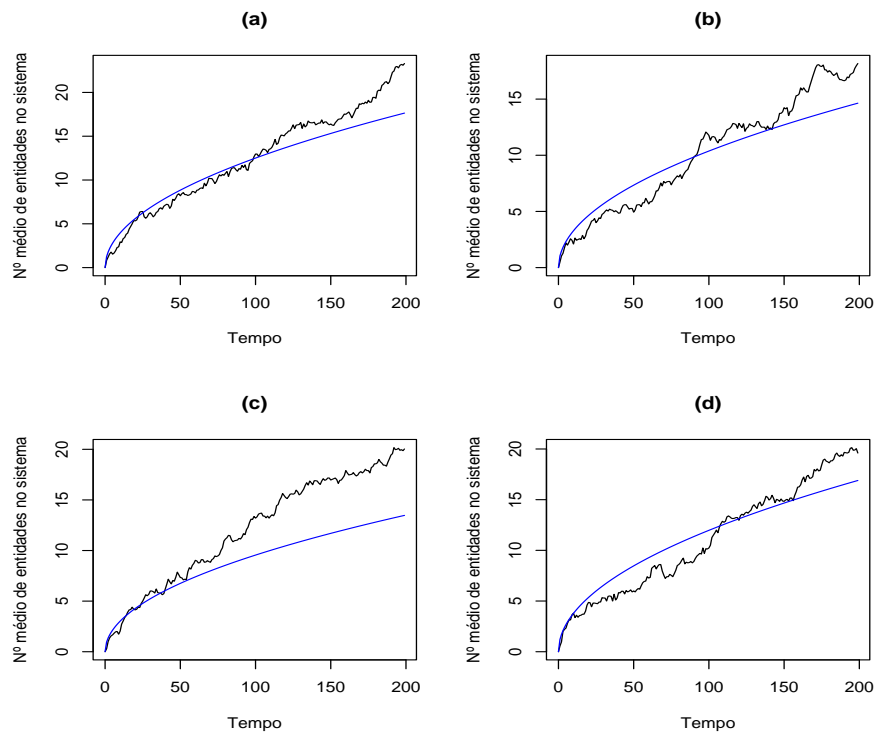


Figura 3.7: Metamodelos pouco aceitáveis (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)

Decidiu-se, então, ajustar o metamodelo não linear às mesmas 100 séries médias da fila $M/M/1$, com $\rho = 1$. Verificou-se que, para o metamodelo da série média representada no gráfico (c), o valor de SSE era, agora, 63.9538.

Na Figura 3.8, representamos graficamente as 100 séries médias (à esquerda) e as correspondentes séries ajustadas (à direita), que representam a componente determinística do metamodelo (3.19); neste último gráfico, encontra-se igualmente representada a curva teórica, dada pela Proposição 3.1, para o caso de $\lambda = \mu$ (curva a azul claro).

Comparando estes dois gráficos, verificamos que as componentes determinísticas, dos metamodelos ajustados, conseguem capturar, quase na globalidade, o comporta-

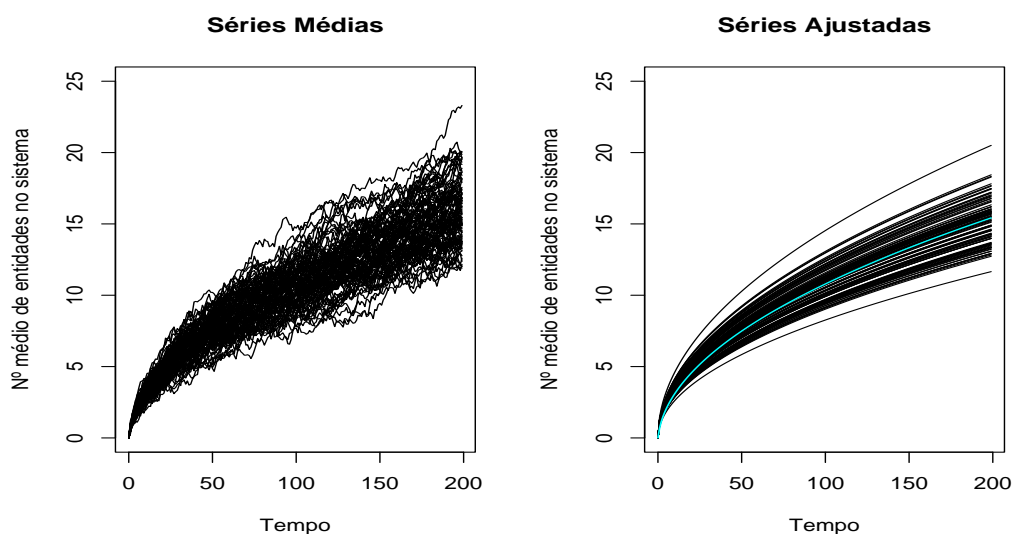


Figura 3.8: Metamodelos ajustados (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)

mento fundamental das correspondentes séries médias. Podemos observar, igualmente, que, algumas das séries médias, apresentam um comportamento bastante distinto do previsto pelo respectivo metamodelo teórico.

A análise efectuada, até este ponto, permite-nos concluir que é, efectivamente, possível, através da metodologia proposta, identificar e estimar metamodelos, adequados, para descrever o valor esperado de respostas seleccionadas dum sistema em estudo, o que foi ilustrado, neste caso, para uma fila $M/M/1$, com o número de entidades, no sistema, no instante t . Mais ainda, verificámos que o tipo de função, obtido com a aplicação da metodologia, era compatível com os resultados assintóticos, descritos na Proposição 3.2.

Dispondo dum metamodelo adequado, poderíamos responder a perguntas de interesse prático, como as formuladas no último parágrafo da Secção 1.1 (passo 5 da metodologia), sem ter de recorrer a novas simulações e/ou análises de resultados.

3.2.3 Construção de Intervalos de Confiança

O outro objectivo, proposto para a análise do desempenho da metodologia proposta (passo 6), passa pela construção de intervalos de confiança, para o número esperado de entidades, no sistema, no instante t . Uma primeira abordagem, a este problema, seria a construção de intervalos de confiança, de previsão, para futuras observações, como é comumente utilizado na análise de regressão. No entanto, como, no nosso caso,

estamos a trabalhar com séries médias, a informação, sobre a variabilidade inerente a cada instante t , não seria considerada. Uma maneira, de ultrapassar esta dificuldade, consiste em construir intervalos de confiança, em cada instante t , utilizando a expressão definida em (3.18). Uma das desvantagens, associada a esta abordagem, é a necessidade de guardar os valores referentes às séries médias e às séries das variâncias. Por outro lado, também não seria possível (ou válido) inferir sobre um instante t , não coincidente com um dos instantes em que houve recolha de dados.

Surgiu, então, a ideia de ajustar, igualmente, um metamodelo à série da variância; assim, com base no metamodelo, ajustado à série média, em conjugação com o metamodelo, ajustado à série da variância, poder-se-ia construir um intervalo de confiança, semelhante ao definido em (3.18), em que a média e a variância, estimadas em cada instante t , são obtidas a partir dos valores previstos pelos respectivos metamodelos. A expressão, para o intervalo de confiança proposto, é, pois, a seguinte

$$\hat{Y}_t \pm t_{r-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\hat{V}_t}{r}}, \quad (3.21)$$

em que $\hat{Y}_t = f(\mathbf{X}, t; \hat{\beta}_1)$ é o valor previsto pelo metamodelo ajustado à série média, $\hat{V}_t = g(\mathbf{X}, t; \hat{\beta}_2)$ é valor previsto pelo metamodelo ajustado à série da variância e r o número de réplicas da série média.

Procedemos, então, ao ajustamento das séries das variâncias, seguindo a mesma metodologia, utilizada para a construção de metamodelos para as séries médias.

As séries das variâncias, como resultam de uma única observação em cada instante, têm um comportamento, muito mais irregular, do que as respectivas séries médias. Verificou-se, também, que, em cada série, a variância era heterogénea, pelo que, era necessário ponderar a influência, de cada ponto, na estimação. Admitiu-se que a variância das séries das variâncias crescia exponencialmente. Após uma análise preliminar, foi considerada a estimação de metamodelos, para as 100 séries das variâncias, em três situações distintas:

- (i) Metamodelo linear $V_t = \beta_1 t + u_t$ (variância heterogénea);
- (ii) Melhor entre $V_t = \beta_1 t + u_t$ e $V_t = \beta_1 t + \beta_2 t^2 + u_t$ (variância heterogénea);
- (iii) Metamodelo não linear $V_t = \beta_1 t^{\beta_2} + u_t$ (variância homogénea).

Em relação ao metamodelo não linear, não foi possível estimar um metamodelo, em que se admitia a variância heterogénea, pelo que, os metamodelos estimados, admitem a homogeneidade da variância.

Em seguida, procedeu-se à construção dos seguintes intervalos de confiança, com base nas expressões (3.18) ou (3.21), para instantes t seleccionados, e em que foram considerados os seguintes estimadores para a média e variância, respectivamente:

- IC1 - Valores previstos pelos metamodelos lineares da média e da variância;
- IC2 - Valores previstos pelo metamodelo linear, para a média, e pelo melhor metamodelo da variância, definido em (ii);
- IC3 - Valores previstos pelos metamodelos não lineares da média e da variância;
- IC4 - Média da amostra e variância amostral corrigida.

Na Figura 3.9, encontram-se representados, para duas séries médias distintas, os intervalos de confiança IC2 (metamodelo, ajustado para a média, a rosa, e limites, a vermelho), IC3 (metamodelo, ajustado para a média, a laranja, e limites, a verde) e IC4 (série média, a azul claro, e limites, a azul escuro), bem como o valor teórico, dado, pela Proposição 3.1, para o factor de utilização $\rho = 1$. A correspondente representação de uma série média, para os dois factores de utilização $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$, pode ser observada na Figura 3.10.

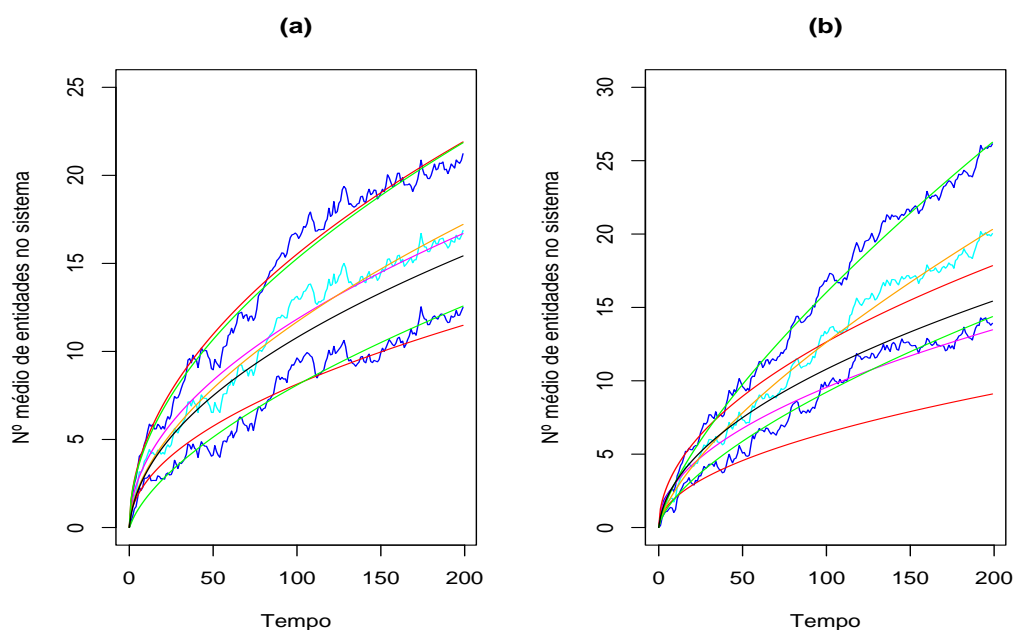


Figura 3.9: Comparação dos intervalos de confiança (fila $M/M/1$, com $\rho = 1$)

Observando o gráfico (b) da Figura 3.9, podemos verificar a grande diferença, que existe, entre as componentes determinísticas dos metamodelos linear e não linear,

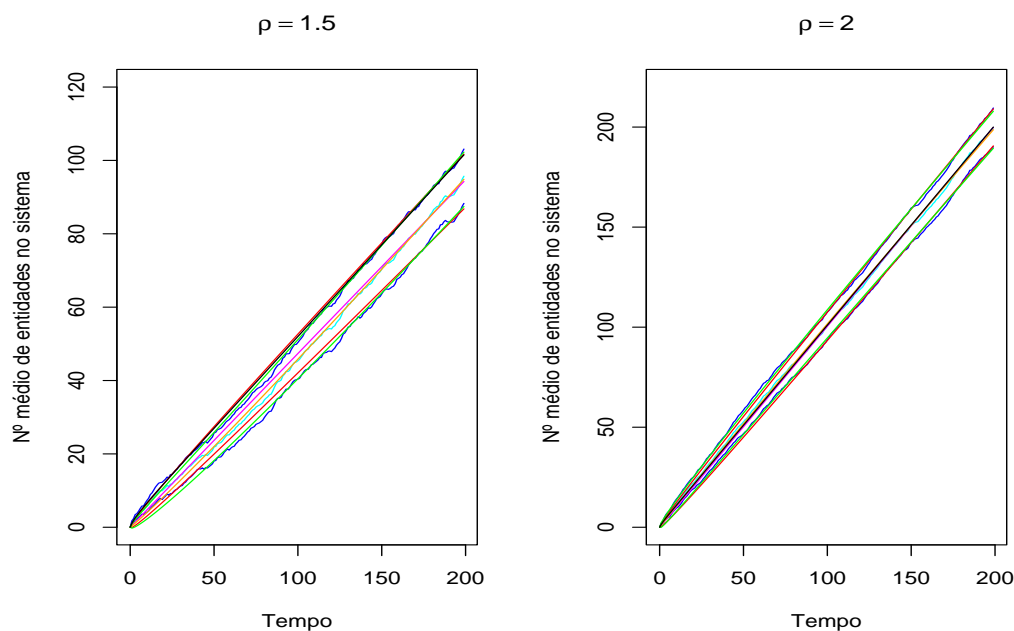


Figura 3.10: Comparação dos intervalos de confiança (fila $M/M/1$, com $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$)

ajustados, e, conseqüentemente, nos limites dos intervalos de confiança IC2 e IC3. É de salientar que, a série média, representada no gráfico (b) da Figura 3.9, corresponde à série representada no gráfico (c) da Figura 3.7, pelo que, os resultados, que acabámos de referir, eram previsíveis. Por outro lado, podemos também observar que, para a fila $M/M/1$ com $\rho = 1$ (gráfico (a) da Figura 3.9), existem algumas diferenças, entre os vários limites dos intervalos de confiança representados, o que não acontece para os restantes factores de utilização, onde quase não se conseguem distinguir os vários limites dos intervalos de confiança.

Com base nestes intervalos de confiança, estimou-se a probabilidade de cobertura e a respectiva amplitude média. Os resultados obtidos encontram-se sumariados na Tabela 3.5.

Como podemos observar, com excepção de alguns instantes iniciais, a proporção de intervalos de confiança, que contêm o valor esperado do número de entidades no sistema no instante t , é próxima da (ou superior à) probabilidade de cobertura teórica; em alguns casos, 100% dos intervalos contêm o valor teórico.

Podemos constatar, também, na Tabela 3.5, que, para cada instante, as amplitudes médias apresentam diferenças pouco significativas, entre os vários tipos de intervalos de confiança calculados. Por outro lado e tal como se previa, a amplitude média, dos mesmos, aumenta, à medida que o instante t aumenta. No entanto, comparando, as

Tabela 3.5: IC a 95% para o número no sistema no instante t - cobertura e dimensão (fila $M/M/1$, para $\rho = 1$, $\rho = 1.5$ e $\rho = 2$)

ρ	Instantes											
	5	25	45	65	85	105	125	145	165	185		
1	IC1	.96	.99	.99	.99	.99	.99	.99	.99	.99	.99	
		1.26	3.09	4.18	5.04	5.77	6.42	7.01	7.56	8.06	8.54	
	IC2	.96	.99	1	1	.99	.99	.99	.99	.99	.99	
		1.29	3.16	4.27	5.13	5.87	6.51	7.08	7.60	8.08	8.52	
	IC3	.85	.96	.98	.99	1	.99	.99	.99	.98	.98	
		1.34	3.09	4.16	5.03	5.78	6.46	7.08	7.66	8.21	8.73	
	IC4	.91	.95	.96	.95	.95	.94	.92	.95	.99	.94	
		1.27	3.10	4.29	5.13	5.84	6.39	7.03	7.67	8.19	8.76	
	1.5	IC1	.40	.98	.98	.98	.98	.98	.98	.97	.96	.96
			2.22	5.45	7.38	8.89	10.19	11.34	12.38	13.34	14.24	15.08
		IC2	.31	.99	.99	.99	.99	.99	.99	.97	.96	.96
			2.16	5.32	7.25	8.80	10.13	11.34	12.44	13.47	14.44	15.36
IC3		.69	.88	.95	.98	.98	.97	.96	.96	.95	.96	
		2.04	5.17	7.14	8.75	10.16	11.42	12.59	13.68	14.71	15.69	
IC4		.95	.94	.95	.93	.94	.94	.92	.92	.95	.98	
		1.78	5.02	7.11	8.90	10.23	11.48	12.51	13.67	14.71	15.66	
2		IC1	1	1	1	.99	.98	.97	.97	.96	.96	.95
			2.51	6.14	8.32	10.03	11.49	12.79	13.96	15.04	16.06	17.01
		IC2	1	1	1	.99	.98	.97	.97	.96	.96	.95
			2.50	6.12	8.31	10.03	11.51	12.82	14.01	15.10	16.13	17.09
	IC3	.90	.93	.93	.96	.98	.96	.95	.95	.95	.95	
		2.52	6.03	8.20	9.95	11.46	12.81	14.06	15.22	16.31	17.34	
	IC4	.96	.97	.91	.94	.92	.92	.92	.92	.94	.95	
		2.20	6.01	8.37	10.12	11.57	12.83	14.03	15.29	16.36	17.28	

amplitudes médias, com o respectivo valor teórico, verifica-se que, as diferenças relativas, nas amplitudes médias, decrescem, com o aumento do instante t , apresentando valores compreendidos entre: 57% e 65%, para $\rho = 1$; 16% e 58%, para $\rho = 1.5$; e 9% e 42%, para $\rho = 2$.

Com base na experimentação efectuada, para as três situações de intensidade de tráfego, do modelo da fila de espera $M/M/1$, algumas considerações finais podem, ainda, ser retiradas.

Em primeiro lugar, como já referimos anteriormente, é possível estimar metamodelos, adequados, para representar o comportamento esperado de respostas de interesse. Por outro lado, com a estimação de um metamodelo para a série da variância, torna-se possível a construção de intervalos de confiança alternativos (IC1, IC2, e IC3), ao intervalo de confiança clássico (IC4), para o valor esperado de uma resposta de interesse, com resultados equivalentes e que permitem inferir sobre quaisquer instantes, coincidentes, ou não, com os instantes de recolha de dados.

4

Simulações Não Estacionárias Aperiódicas

O principal motivo, que nos levou a iniciar este trabalho de investigação, foi a tentativa de esclarecer uma dúvida, persistente, sobre a viabilidade de analisar, de uma forma significativa, a simulação de sistemas reais, em condições de não estacionaridade, assunto, em relação ao qual, a literatura especializada de simulação era, basicamente, omissa. Desde o início, sentimos que, devido à natureza altamente autocorrelacionada das respostas de interesse, em qualquer modelo de simulação discreta, a metodologia clássica das séries cronológicas (Box-Jenkins) iria ter um papel extremamente relevante.

Assim, uma das primeiras abordagens, que realizámos, à análise de resultados, provenientes de simulações não estacionárias, consistiu na avaliação da eventual aplicação dos modelos de séries cronológicas $ARIMA(p, d, q)$, como potenciais metamodelos para a simulação de sistemas de filas de espera, em condições de tráfego críticas. Alguns dos resultados, então obtidos, foram apresentados, em Setembro de 2002, no X Congresso da Sociedade Portuguesa de Estatística; ver Brandão e Porta Nova (2003b). Nessa abordagem, generalizávamos o uso, dos modelos clássicos de séries cronológicas, ao caso de simulações não estacionárias, o que constituía uma forma expedita de *explicar os resultados* produzidos por simulações não estacionárias, sem grandes preocupações de formular hipóteses estruturais, mas, pragmaticamente, desenvolvendo metamodelos que apresentavam uma grande aderência aos resultados das simulações não estacionárias, dispensando a realização de novas execuções do modelo computacional, com posteriores, e sempre morosas, análises de resultados. Até certo ponto, poderia ser considerada uma perspectiva *mecanicista* de metamodelação em simulações não estacionárias.

Na sequência dessa abordagem inicial, investigámos, posteriormente, a eventual existência de modelos intrínsecos ao sistema em estudo, que, de algum modo, permitissem expor o comportamento fundamental das respostas em análise, nomeadamente através da expressão dos respectivos valores esperados; isso obrigou-nos, naturalmente, a formular algumas hipóteses estruturais, sobre alguns sistemas usados, como casos de estudo, na literatura sobre simulação. Nomeadamente, foi, sempre, nossa convicção, que haveria uma sobreposição de duas componentes fundamentais, para explicar o comportamento das respostas de simulações não estacionárias: uma, determinística, evoluindo gradualmente, numa forma suave; e outra, estocástica, com evolução muito brusca, irregular e imprevisível. Ao contrário da perspectiva referida no parágrafo anterior, esta poder-se-ia considerar uma perspectiva *fundamentalista* de metamodelação em simulações não estacionárias.

A síntese do trabalho desenvolvido, em relação às duas perspectivas de metamodelação atrás mencionadas, culminou na formulação de uma metodologia, inovadora, para a construção de metamodelos de simulação, que descrevemos no Capítulo 3. Neste capítulo, também avaliámos, experimentalmente, a metodologia, por nós proposta, usando, como referência, uma única medida de *performance* (número de entidades no sistema) dum (único) caso de estudo (fila de espera $M/M/1$), uma vez que é a única situação para a qual existem (e são muito pouco conhecidos) alguns resultados analíticos (e no contexto da área científica das probabilidades e estatística).

Contudo, pareceu-nos que este trabalho ficaria incompleto, se não alargássemos a análise experimental a outros casos e outras medidas de *performance*, para os quais, necessariamente, não existem resultados teóricos; isto é, de resto, o que ocorre na generalidade dos casos de interesse prático, com demasiadas restrições, ou complexidade, para um tratamento analítico. Assim, neste capítulo, ilustramos e avaliamos experimentalmente a aplicação, da metodologia proposta, a vários tipos de modelos não estacionários, que se encontram descritos na literatura; é, igualmente, efectuada uma discussão dos resultados obtidos com a experimentação efectuada.

A avaliação experimental da metodologia, para cada caso de estudo, consistiu numa experimentação de Monte Carlo, em que foram realizadas 100 repetições do procedimento básico, associado à metodologia proposta, sendo, cada uma delas, baseada em 30 réplicas independentes (*runs*) de cada um dos modelos de simulação, descritos a seguir, num total de 100×30 execuções independentes de cada um desses modelos de simulação. Cada uma das execuções, dos vários modelos de simulação analisados, teve uma duração variável, dependente do sistema em estudo; com excepção do sis-

tema de filas de espera com retroacção, estudado na Secção 4.3, a recolha de dados foi efectuada a intervalos de tempo regulares, igualmente espaçados e previamente especificados. Para todos os modelos de simulação, que envolveram filas de espera, escolhemos para condições iniciais, o sistema inactivo e as filas vazias, ocorrendo, a chegada da primeira entidade, ao sistema, no instante zero. Esta é a opção, de defeito, do comando para criação de entidades, na linguagem de simulação **Visual SLAM**, que nós usámos, estando, igualmente, implementada em muitos “pacotes” de *software* de simulação, disponíveis comercialmente. Decidimos, assim, analisar os vários casos de estudo, em condições que, ou por opção, ou involuntariamente, são frequentemente escolhidas por um grande número de utilizadores.

A classe dos modelos, de séries cronológicas, $ARIMA(p, d, q)$ (modelos integrados mistos autoregressivos e médias móveis) assume um papel preponderante, neste capítulo, pelo que se justifica relembrar a definição, formal, desses modelos, que correspondem, à classe de séries cronológicas, que podem ser transformadas em estacionárias, por aplicação do operador diferença simples, definido pelas relações

$$\nabla Y_t = Y_t - Y_{t-1} = (1 - B)Y_t \quad \text{e} \quad \nabla^d Y_t = (1 - B)^d Y_t.$$

Definição 4.1. Seja d um número inteiro, não negativo. Diz-se que $\{Y_t\}$ é um *processo integrado misto autoregressivo e de médias móveis* e representa-se por $ARIMA(p, d, q)$, quando

$$\phi(B)(1 - B)^d Y_t = \theta_0 + \theta(B)\varepsilon_t, \quad t \in \mathbb{Z},$$

onde $\{\varepsilon_t\}$ é uma sequência de variáveis aleatórias i.i.d., com média 0 e variância σ_ε^2 , e em que os polinómios

$$\phi(z) = 1 - \phi_1 z - \phi_2 z^2 - \dots - \phi_p z^p \quad \text{e} \quad \theta(z) = 1 - \theta_1 z - \theta_2 z^2 - \dots - \theta_q z^q$$

não têm raízes no círculo unitário, nem raízes comuns.

4.1 Sistemas de Filas de Espera $M/M/s$

Como primeiro caso de estudo, considerámos três sistemas de filas de espera $M/M/s$, isto é, com intervalo de tempo entre chegadas e tempo de serviço exponenciais e com s servidores paralelos idênticos. Como já tínhamos investigado, no capítulo anterior, a dependência, do número médio de entidades num sistema $M/M/1$, em relação ao factor de utilização, ρ , vamos, agora, analisar, de que maneira, o número

de servidores paralelos, s , num sistema $M/M/s$, influencia as medidas de *performance* seleccionadas. Escolhemos três valores distintos para o número de servidores e , para o factor de utilização, $\rho = \lambda/(s\mu)$, os valores já utilizados na Secção 3.2.2; λ e μ representam as taxas de chegada e serviço, respectivamente. Assim, considerámos:

- (i) $s = 1$, $\lambda = 2$ e $\mu = 1$, resultando $\rho = 2$;
- (ii) $s = 2$, $\lambda = 2$ e $\mu = 1$, resultando $\rho = 1$; e
- (iii) $s = 3$, $\lambda = 4.5$ e $\mu = 1$, resultando $\rho = 1.5$.

As respostas analisadas foram o comprimento da (número de entidades na) fila de espera e o tempo médio de permanência no sistema, num dado instante. Para duração, de cada execução do modelo de simulação, escolhemos o valor de referência de 60 unidades de tempo (“hora de ponta”). No entanto, a duração efectiva variou, pois, cada *run* terminava, apenas, quando a última entidade, que chegasse ao sistema, antes do instante 60, abandonasse o mesmo.

A recolha, do comprimento da fila, foi efectuada a intervalos de tempo regulares, com amplitude $\delta_t = 0.5$ e 1, para $t \in (0, 60]$. Assim, para $\delta_t = 0.5$, recolhemos observações nos instantes 0.5, 1, 1.5, ..., 60. Em relação ao tempo de permanência no sistema, em cada réplica do modelo de simulação, todas as observações foram registadas, sendo posteriormente ordenadas por instante de chegada e seleccionada, apenas, a primeira observação pertencente a cada intervalo de tempo de amplitude δ_t . Por exemplo, para $\delta_t = 0.5$, a primeira observação seleccionada foi a primeira que pertence ao intervalo $[0, 0.5)$. De seguida, para cada instante (na prática, cada intervalo), foi calculada a média das observações correspondentes, nas 30 réplicas.

Repetindo este cálculo, para todos os conjuntos de 30 réplicas, obtivemos, para cada intervalo δ_t e para cada medida, 100 séries cronológicas médias, às quais aplicámos a metodologia proposta. O número de observações, em cada série média, é de 120 e 60, para $\delta_t = 0.5$ e 1.0, respectivamente. É de notar que, no caso da medida “tempo de permanência no sistema”, o número de observações, correspondente a cada uma das séries médias, pode variar, de instante para instante, não sendo necessariamente 30, pois, podem ocorrer réplicas onde, num dado intervalo, não foram registadas quaisquer observações, bem como outras, em que haja mais do que uma observação, no mesmo intervalo elementar.

Embora a análise, que passamos a descrever, tenha sido efectuada para os vários intervalos de recolha, δ_t , só iremos apresentar os gráficos referentes a $\delta_t = 0.5$, uma vez que, os resultados obtidos, são muito similares.

4.1.1 Abordagem *Mecanicista* (Metamodelos ARIMA)

Em primeiro lugar, vamos descrever os resultados obtidos, usando a primeira abordagem inicialmente desenvolvida para a construção de metamodelos, para dois dos sistemas de filas de espera, correspondentes aos casos (i) e (ii), atrás.

Como anteriormente referimos, o objectivo, desta primeira abordagem, era, essencialmente, verificar, se seria viável, a aplicação directa dos modelos $ARIMA(p, d, q)$, para a construção de metamodelos de simulação, em condições de não estacionariedade. Assim, pretendemos ajustar, a cada série média, um modelo $ARIMA(p, d, q)$ adequado, seguindo os passos da metodologia de Box-Jenkins (identificação, estimação e avaliação do diagnóstico).

(i) Fila $M/M/1$ Hiper-crítica ($\rho = 2$)

Analisando a evolução, no tempo, de uma série média, correspondente ao comprimento médio da fila de espera (ver a Figura 4.1, à esquerda), podemos concluir que o processo não é estacionário em média, quer pelo aspecto da série, quer porque a função de autocorrelação (FAC) estimada decresce muito lentamente para zero; também está representada, na figura, a função de autocorrelação parcial (FACP) estimada. No gráfico da série original (a traço, ponto, traço), representamos, igualmente, o metamodelo ajustado (linha contínua azul).

Ao diferenciarmos a série (ver a Figura 4.1, à direita), constatámos que ela ficou estacionária, não aparentando, a FAC e a FACP estimadas, terem qualquer valor estatisticamente significativo. Este facto foi confirmado através da realização do teste de Box-Ljung. Podemos, pois, ajustar, neste caso, o modelo $ARIMA(0,1,0)$ ao comprimento médio da fila (modelo $ARIMA$ mais simples, em que a primeira diferença é ruído branco e que é denominado de passeio aleatório).

A análise foi repetida para as restantes 99 séries médias, obtendo-se os resultados reproduzidos na Tabela 4.1. Constata-se que, o mesmo modelo $ARIMA(0,1,0)$ foi consistentemente validado para quase 100% dos casos, quando $\delta_t = 0.5$, e para cerca de 90% dos casos, quando $\delta_t = 1.0$.

Na Figura 4.2, estão representadas as 100 séries médias, bem como os correspondentes metamodelos ajustados. Cada metamodelo ajustado, representado nesta

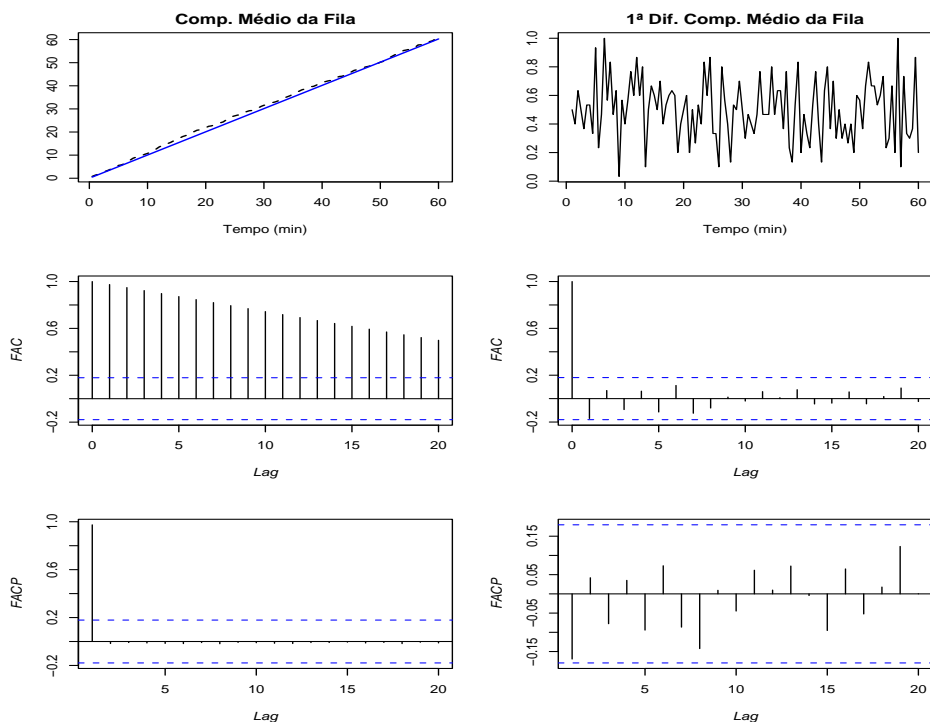


Figura 4.1: Comprimento médio da fila $M/M/1$, com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$

Tabela 4.1: Modelos ARIMA para comprimento médio da fila $M/M/1$, com $\rho = 2$

Modelo ARIMA(0, 1, q)	Intervalo		Modelo ARIMA(p, 1, 0)	Intervalo	
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$		$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
ARIMA(0, 1, 0)	97	89	ARIMA(0, 1, 0)	97	89
ARIMA(0, 1, 4)		1	ARIMA(1, 1, 0)		1
ARIMA(0, 1, 5)	1	3	ARIMA(2, 1, 0)		1
ARIMA(0, 1, 6)		1	ARIMA(3, 1, 0)	1	4
ARIMA(0, 1, 7)	1	2	ARIMA(4, 1, 0)		3
ARIMA(0, 1, 8)	1	4	ARIMA(5, 1, 0)		1
			ARIMA(6, 1, 0)	1	1
			ARIMA(7, 1, 0)	1	

figura, corresponde ao modelo com menor ordem e, no caso de empate, os modelos autoregressivos foram seleccionados.

Comparando os dois gráficos, observamos que, ambos os conjuntos de séries têm, no essencial, o mesmo comportamento, significando que, os metamodelos ARIMA, ajustados, são capazes de descrever a tendência linear, que as séries médias apresentam.

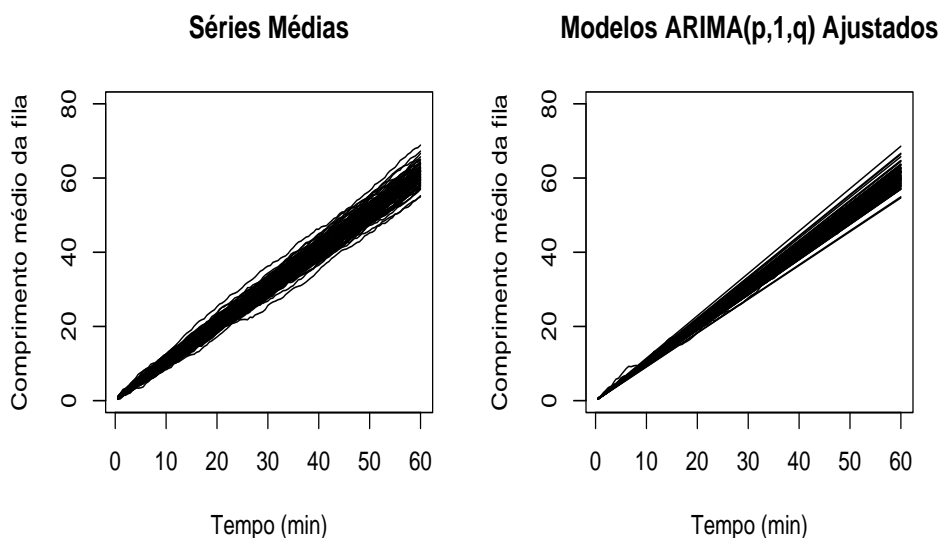


Figura 4.2: Séries originais e ajustadas: comprimento da fila $M/M/1$ ($\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)

Uma análise similar foi efectuada para o tempo médio de permanência no sistema. Neste caso, a diferenciação não resultou em ruído branco, com excepção de um quarto das séries médias e apenas para $\delta_t = 1.0$.

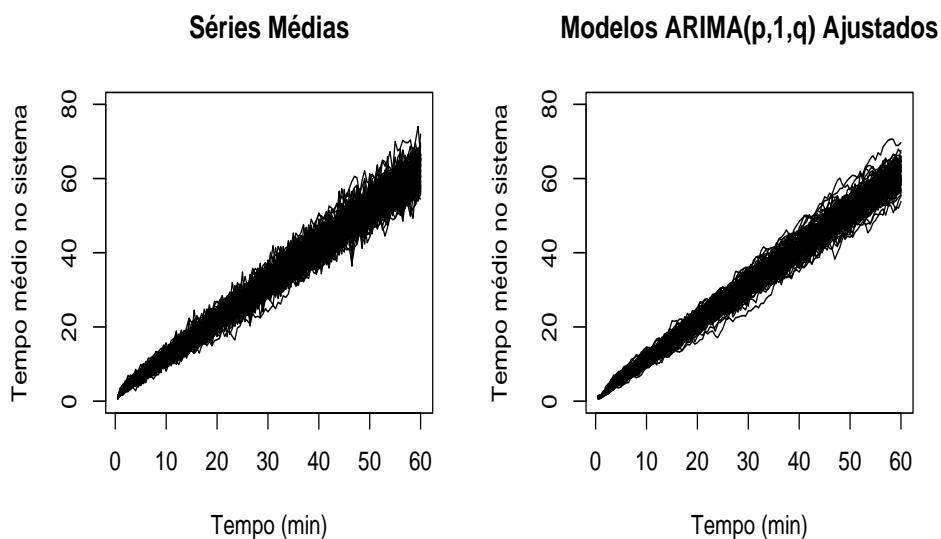
O número, dos diferentes modelos $ARIMA(p, 1, q)$, que foram ajustados às 100 séries médias do tempo médio de permanência no sistema, está registado na Tabela 4.2. Apesar do número de ordens, dos modelos $ARIMA(p, 1, q)$, necessário para cobrir 90% das séries médias ter aumentado substancialmente, verificamos que os vários metamodelos ajustados descrevem, bastante bem, o comportamento fundamental das séries médias—ver a Figura 4.3. No entanto, neste caso, não existe um modelo que aparente dominar os restantes e, se compararmos o tipo de modelo (autoregressivo ou de médias móveis), verificamos que a diferença, entre os valores máximos das respectivas ordens, é, apenas, de 1 ($p = 7$ e $q = 8$).

(ii) Fila $M/M/2$ Crítica ($\rho = 1$)

Analisando, para este caso, o comprimento médio da fila de espera (linha a tracejado na Figura 4.4, à esquerda), podemos observar, como no caso anterior, que existe uma tendência linear na série média; novamente, a FAC estimada decrescente muito lentamente para zero, indicando que a série não é estacionária em média. Repetindo a aplicação da metodologia de Box-Jenkins às 100 séries médias do comprimento médio da fila, foi, novamente, possível ajustar um número elevado de modelos $ARIMA(0,1,0)$.

Tabela 4.2: Modelos ARIMA para tempo médio no sistema (fila $M/M/1$, $\rho = 2$)

Modelo ARIMA(0, 1, q)	Intervalo		Modelo ARIMA(p, 1, 0)	Intervalo	
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$		$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
ARIMA(0, 1, 0)		24	ARIMA(0, 1, 0)		24
ARIMA(0, 1, 1)	16		ARIMA(1, 1, 0)	13	
ARIMA(0, 1, 2)	16	21	ARIMA(2, 1, 0)	28	13
ARIMA(0, 1, 3)	19	24	ARIMA(3, 1, 0)	8	24
ARIMA(0, 1, 4)	23	26	ARIMA(4, 1, 0)	2	22
ARIMA(0, 1, 5)	13	2	ARIMA(5, 1, 0)	15	10
ARIMA(0, 1, 6)	8	3	ARIMA(6, 1, 0)	17	3
ARIMA(0, 1, 7)	5		ARIMA(7, 1, 0)	10	3
			ARIMA(8, 1, 0)	7	1

Figura 4.3: Séries originais e ajustadas: tempo médio no sistema (fila $M/M/1$, $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)

Este facto levou-nos a pensar que a diferenciação simples resultaria em ruído branco; no entanto, estes modelos ajustados falhavam na detecção duma certa curvatura inicial, que as séries médias apresentavam, e que era incompatível com a hipótese de linearidade.

Para ultrapassar este problema, admitimos a hipótese do comprimento médio da fila constituir um processo *trend stationary*; ver Hamilton (1994, p.435):

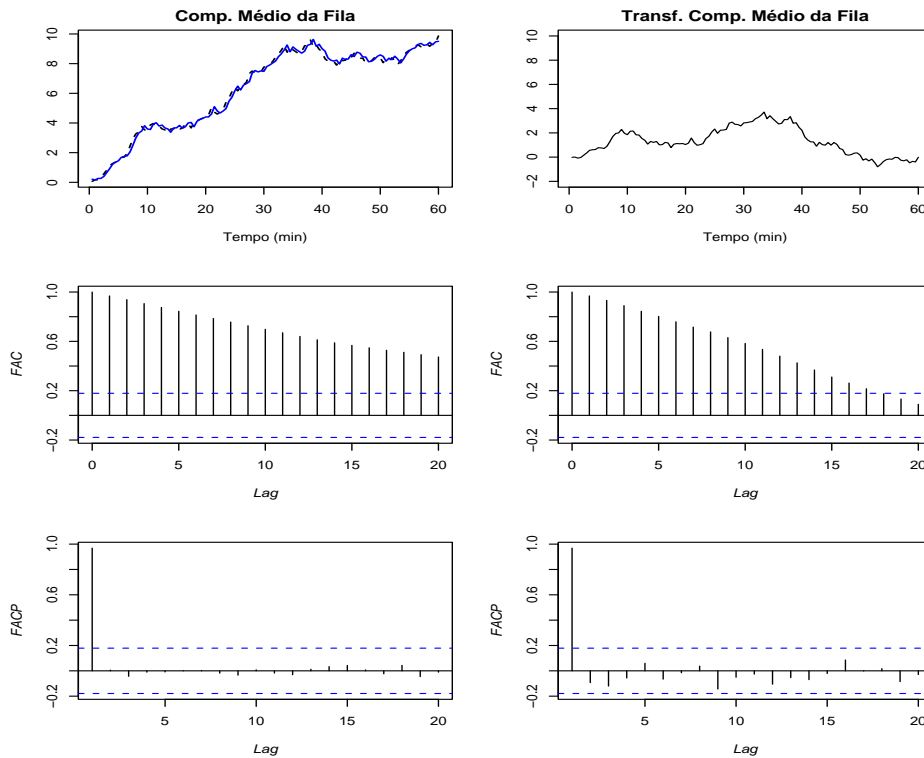


Figura 4.4: Comprimento médio da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + \psi(B)\varepsilon_t,$$

onde a média do processo cresce linearmente ao longo do tempo, $E[\bar{Y}_t] = \beta_0 + \beta_1 t$, B representa o operador de atraso, $\sum_{j=0}^{\infty} |\psi_j| < \infty$, as raízes de $\psi(z) = 0$ admitem valores fora do círculo unitário e ε_t é uma série de ruído branco, com média nula e variância σ_ε^2 .

Neste caso, para tornar o processo estacionário, em média, é necessário extrair a componente $\beta_1 t$ de \bar{Y}_t , tendo o parâmetro β_1 sido estimado pela média da série, resultante da primeira diferenciação de \bar{Y}_t .

O comportamento, de uma série típica, após a referida transformação, encontra-se, igualmente, representado na Figura 4.4 (à direita); estão, ainda, ilustradas as respectivas FAC e FACP estimadas. No gráfico, correspondente à série média (a traço, ponto, traço), representamos, igualmente, o metamodelo ajustado (linha azul contínua).

Procedeu-se, de seguida, à estimação de modelos $AR(p)$ e $MA(q)$ às séries transformadas, obtendo-se os resultados reproduzidos na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Modelos AR e MA para o comprimento médio da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$

Modelo MA(q)	Intervalo		Modelo AR(p)	Intervalo	
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$		$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
MA(1)		3	AR(1)	88	95
MA(2)		9	AR(2)	8	4
MA(3)	1	16	AR(3)	3	1
MA(4)	2	23	AR(4)	1	
MA(5)	5	18			
MA(6)	10	11			
MA(7)	9	7			
MA(8)	13	3			
MA(9)	19				
MA(10)	18				
MA(11)	14				
MA(12)	9				

Como podemos observar, o modelo autoregressivo de ordem $p = 1$, AR(1) destaca-se dos restantes modelos, que foram ajustados às séries transformadas do comprimento médio da fila. Podemos, também, constatar que, as ordens necessárias para ajustar, adequadamente, modelos de médias móveis, MA(q) podem ser muito elevadas, em especial, se o intervalo de tempo elementar, δ_t , for muito pequeno.

Na Figura 4.5, representamos as séries médias e as correspondentes séries ajustadas.

Com a transformação *trend*, verificou-se que, as séries ajustadas passavam a decrescer, cabalmente, o comportamento típico das séries médias.

Para além desta transformação, recomendada para processos *trend stationary*, também experimentámos uma transformação alternativa, a transformação de Box-Cox, para a estabilização das séries médias, frequentemente sugerida na literatura especializada; ver Brandão e Porta Nova (2003c). Embora seja, principalmente, utilizada para reduzir a heterogeneidade da variância das séries cronológicas, esta transformação reduz, frequentemente, a não linearidade dessas séries, pelo que decidimos aplicá-la às 100 séries médias; as 100 séries médias originais e as correspondentes séries ajustadas, com base nesta transformação, encontram-se representadas na Figura 4.6.

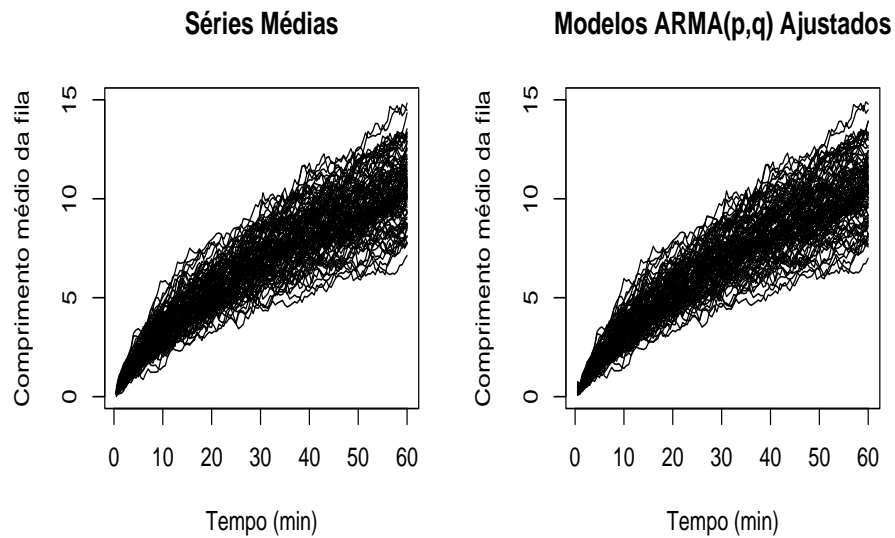


Figura 4.5: Séries originais e ajustadas: comprimento médio da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$ (transformação *trend*)

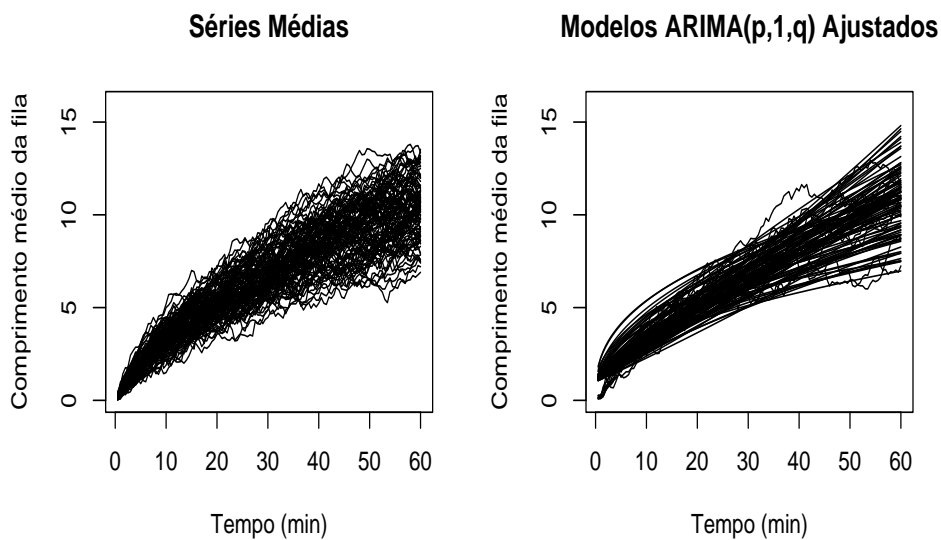


Figura 4.6: Séries originais e ajustadas: comprimento médio da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$ (transformação de Box-Cox)

No entanto e apesar de termos obtido resultados razoáveis, a transformação *trend stationary* revelou-se melhor, como se pode constatar, comparando, o comportamento das séries médias e ajustadas, nas Figuras 4.5 e 4.6. É de salientar que, apesar das

séries médias, em cada uma das experiências ter sido distinta, o comportamento que estas apresentam é bastante semelhante.

No que diz respeito ao tempo médio de permanência no sistema da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$, os resultados obtidos foram muito similares aos obtidos para a fila $M/M/1$ (ver a Figura 4.7). É, igualmente, visível uma tendência linear no comportamento das séries médias.

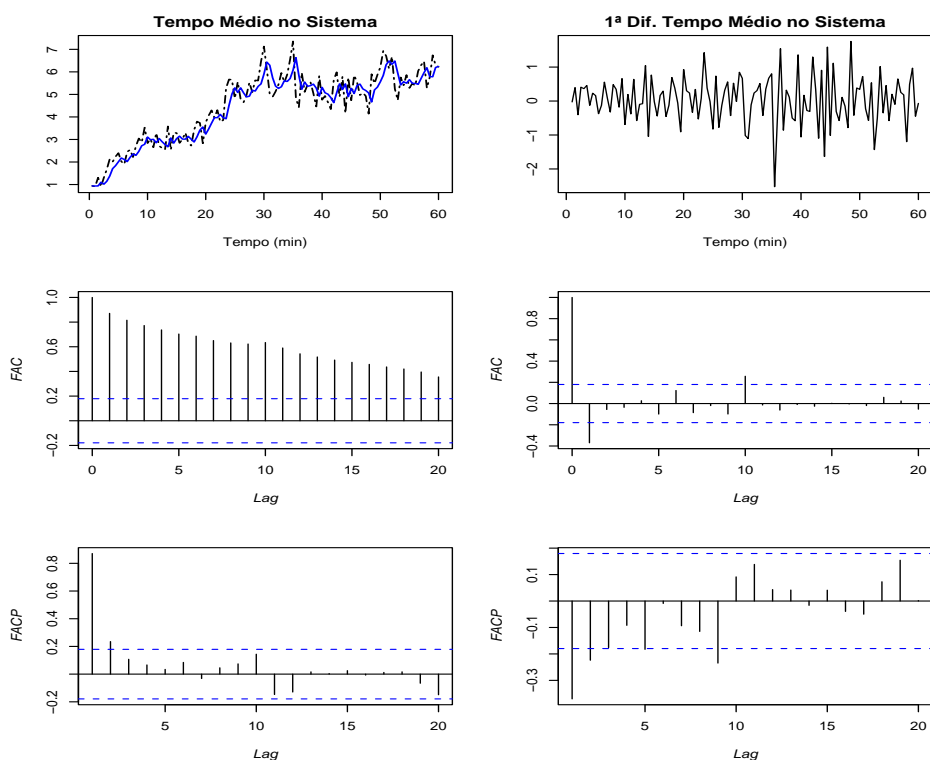


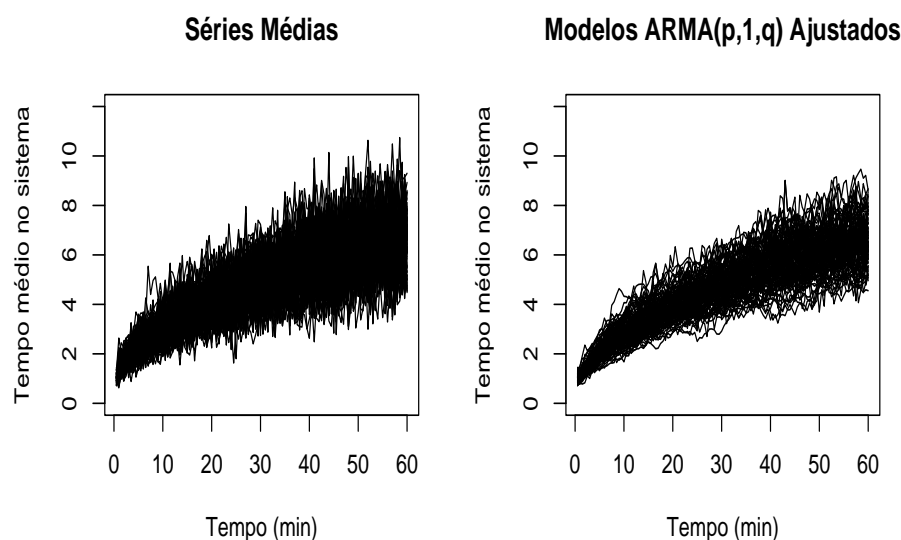
Figura 4.7: Tempo médio de permanência no sistema (fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Ajustámos, então, o mesmo tipo de modelos $ARIMA(p,1,q)$ às 100 séries médias, obtendo-se os resultados, que podem ser consultados, na Tabela 4.4.

Novamente, a diferenciação, das séries médias, não resultou em ruído branco, a não ser, tal como para a fila $M/M/1$, para $\delta_t = 1.0$, agora em 30% dos casos. O modelo, com maior número de ajustamentos conseguidos, para os dois intervalos, δ_t , considerados, foi o $ARMA(0,1,1)$. Neste caso, em comparação com os resultados da fila $M/M/1$, verificou-se que, as ordens máximas dos modelos eram ligeiramente inferiores. Por outro lado, a curvatura, presente no início das séries médias, é, agora, captada pelas séries ajustadas, como podemos observar na Figura 4.8.

Tabela 4.4: Modelos ARIMA para o tempo médio no sistema (fila $M/M/2$, $\rho = 1$)

Modelo ARIMA(0, 1, q)	Intervalo		Modelo ARIMA(p, 1, 0)	Intervalo	
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$		$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
ARIMA(0, 1, 0)		30	ARIMA(0, 1, 0)		30
ARIMA(0, 1, 1)	77	57	ARIMA(1, 1, 0)	20	47
ARIMA(0, 1, 2)	9	6	ARIMA(2, 1, 0)	41	16
ARIMA(0, 1, 3)	7	4	ARIMA(3, 1, 0)	20	4
ARIMA(0, 1, 4)	2	2	ARIMA(4, 1, 0)	9	1
ARIMA(0, 1, 5)	2	1	ARIMA(5, 1, 0)	7	2
ARIMA(0, 1, 6)	3		ARIMA(6, 1, 0)	3	

Figura 4.8: Séries originais e ajustadas: tempo médio no sistema (fila $M/M/2$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

4.1.2 Abordagem *Fundamentalista* (Metamodelos de Regressão)

Nesta secção, passamos a descrever os resultados, obtidos pela aplicação da perspectiva mais *fundamentalista* da metodologia proposta na Secção 3.1, para os três sistemas de filas de espera, (i), (ii) e (iii), descritos no início da Secção 4.1.

O processo de recolha de dados é idêntico nos três casos e já foi descrito no início da Secção 4.1. Vamos considerar, a partir deste momento, que, para cada um dos três

sistemas de filas de espera, atrás referidos, dispomos de 100 séries médias, para cada uma das medidas, em estudo, e para cada intervalo de tempo, de recolha de dados, δ_t .

(i) Fila M/M/1 Hiper-crítica ($\rho = 2$)

Após a recolha dos dados relevantes, é necessário identificar o tipo de função, para o metamodelo a ajustar. Não existindo razões físicas para esta escolha, procedemos à análise gráfica do comportamento de uma série média típica; veja-se a Figura 4.9. No gráfico do comprimento médio da fila, encontra-se, igualmente, representada (a azul) a primeira série, das 30 que foram usadas para construir a série média.

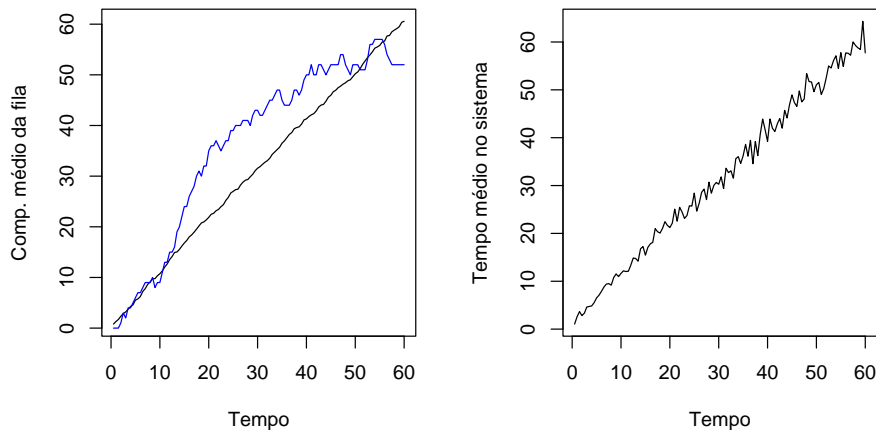


Figura 4.9: Exemplos de séries médias (fila $M/M/1$ com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)

Ao compararmos o comportamento, da série individual, com o da respectiva série média, representada na Figura 4.9, verificamos que a série média tem uma muito menor variabilidade e que o comportamento intrínseco é bastante mais fácil de ser identificado, corroborando a nossa opção pelo estudo das séries médias, em detrimento das individuais.

Após a observação do comportamento das séries médias, decidimos ajustar, para as duas medidas em estudo, o seguinte metamodelo:

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + u_t, \quad \text{com } t = 0.5, 1, \dots, 60. \quad (4.1)$$

Identificado o tipo de metamodelo a ajustar, procedemos à estimação dos parâmetros do mesmo. Em primeiro lugar, efectuámos uma estimação preliminar, através do método dos mínimos quadrados usuais e analisámos a estrutura de auto-

correlação dos resíduos obtidos, escolhendo os modelos adequados, através do teste de Ljung-Box, em que, de uma forma sequencial, verificámos o ajuste de modelos $AR(p)$ e $MA(q)$. Para as séries, representadas na Figura 4.9, os modelos, que passaram o referido teste, foram o $AR(1)$ e $MA(7)$, para o comprimento médio da fila, e o $AR(5)$ e $MA(5)$, para o tempo médio de permanência no sistema. De seguida, procedeu-se à estimação final dos dois metamodelos candidatos, para as duas respostas, através do método da máxima verosimilhança, implementado, na linguagem R, através da função `gls`.

Após a estimação final dos metamodelos candidatos, procedeu-se à validação dos mesmos, analisando os resíduos finais. Em primeiro lugar, escolheu-se, dos metamodelos candidatos, que passavam o teste de Ljung-Box, o que tinha menor valor no critério AIC e, de seguida, completou-se essa análise, verificando se os resíduos eram normalmente distribuídos (teste de Shapiro-Wilk) e se os parâmetros eram estatisticamente significativos. Na Figura 4.10, representamos o histograma, o papel de probabilidade normal e a FAC e FACP dos resíduos do metamodelo estimado para o comprimento médio da fila, em que o modelo ajustado, para a componente estocástica, foi o $AR(1)$.

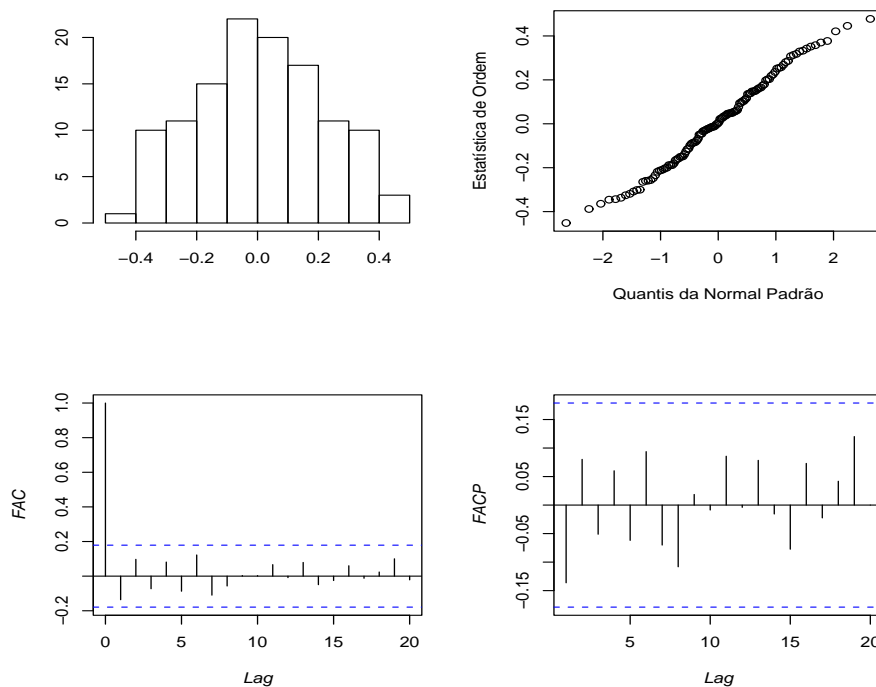


Figura 4.10: Diagnóstico dos resíduos: comprimento médio da fila $M/M/1$, com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$

Para a resposta “tempo de permanência no sistema”, o metamodelo, com menor valor no critério AIC, foi o MA(5). Verificou-se, também, que ambos, os metamodelos seleccionados, passavam no teste de Shapiro-Wilk e que os parâmetros da componente determinística eram significativos; em relação aos parâmetros da componente estocástica, o parâmetro do modelo AR(1) também era significativo, mas, para o modelo MA(5), apenas o parâmetro θ_5 o era. Os valores obtidos, para SSE, foram 39.0538 e 250.2374, para o comprimento médio da fila e para o tempo médio de permanência no sistema, respectivamente.

A análise, que acabámos de descrever, foi, depois, repetida para as restantes 99 séries médias, de cada medida do sistema em estudo, e para cada um dos dois intervalos de tempo, δ_t . Para o intervalo de recolha $\delta_t = 1$, os valores de t são, neste caso, 1, 2, ..., 60. Na Tabela 4.5, apresentamos um resumo das estimativas dos parâmetros das componentes determinísticas de todos os metamodelos ajustados, que, no máximo, podem ser 200, pois considera-se o ajuste de modelos AR(p) e MA(q) para a componente estocástica, que foram ajustados separadamente; nos casos, onde ocorreu o ajuste de séries de ruído branco o número total de modelos é igual ao número de séries de ruído branco, acrescido do número de modelos AR(p) e do número de modelos MA(q) ajustados – por exemplo, 154=46 RB+54 AR(p) + 54 MA(q). Para cada parâmetro estimado, determinámos os valores máximo, mínimo e médio, de cada conjunto de metamodelos estimados. Encontra-se, igualmente, registado o número de modelos estimados para cada resposta e para cada δ_t .

Tabela 4.5: Ajustamento das componentes determinísticas para a fila $M/M/1$, com $\rho = 2$

	Comprimento médio da fila				Tempo médio de permanência no sistema			
	$\delta_t = 0.5$		$\delta_t = 1.0$		$\delta_t = 0.5$		$\delta_t = 1.0$	
	β_0	β_1	β_0	β_1	β_0	β_1	β_0	β_1
Máx.	2.8818	1.1403	3.1964	1.1425	4.3333	1.1787	3.4962	1.1891
Média	0.3405	1.0081	0.3733	1.0076	1.6625	1.0104	0.9583	1.0122
Mín.	-2.05	0.8895	-2.0906	0.887	-0.6965	0.8724	-1.2263	0.8721
N.º Mod.	200		199		154		165	

Analisando os resultados obtidos, podemos verificar que existe uma variabilidade significativa nos valores estimados para o parâmetro β_0 , o que era de esperar, pois

corresponde à ordenada, na origem (*intercept*), que é muito sensível aos valores iniciais das séries, o mesmo não acontecendo em relação ao parâmetro β_1 , que representa o declive das rectas estimadas. Podemos, assim, concluir que, as séries médias têm um comportamento muito semelhante.

Na Figura 4.11, representamos duas das séries médias (a primeira e a última séries), bem como as respectivas componentes determinísticas dos metamodelos estimados; os gráficos (a) e (c) correspondem à primeira série e os gráficos (b) e (d) à última. A representação, da totalidade das 100 séries médias e das respectivas componentes determinísticas dos metamodelos ajustados, para $\delta_t = 0.5$, pode ser observada na Figura 4.12.

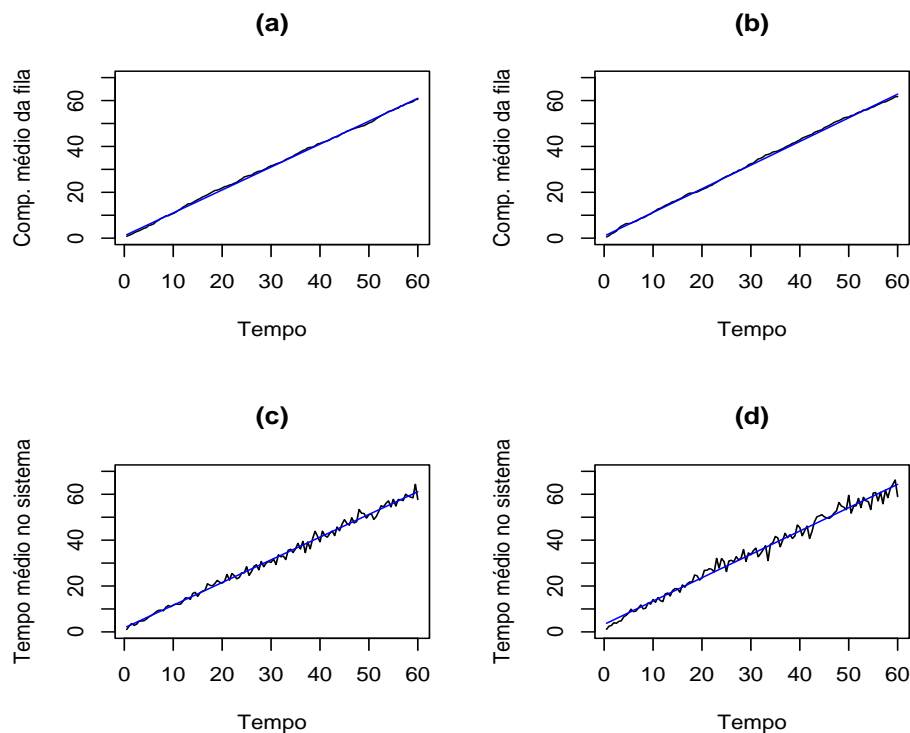


Figura 4.11: Metamodelos ajustados (2 séries, fila $M/M/1$, com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)

Podemos constatar que, o comportamento das séries médias, é bastante bem descrito pelas componentes determinísticas dos metamodelos ajustados (rectas), com excepção da fase inicial das séries, por influência do valor estimado para a ordenada na origem, parâmetro β_0 , que, como referimos atrás, apresenta uma grande variabilidade de valores; pensamos que esta variabilidade deverá estar intimamente ligada à ocorrência de chegadas no instante zero.

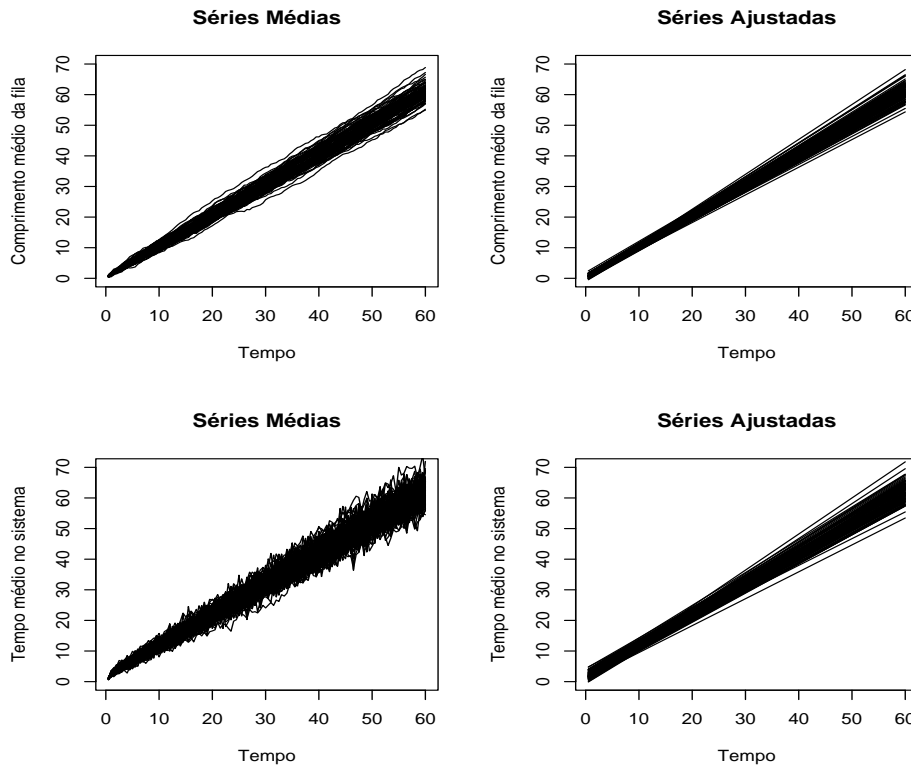


Figura 4.12: Metamodelos ajustados (100 séries, fila $M/M/1$, com $\rho = 2$ e $\delta_t = 0.5$)

No que diz respeito aos modelos ajustados às componentes estocásticas dos meta-modelos estimados, verifica-se, pela observação da Tabela 4.6, que o modelo com maior número de ajustes é o $AR(1)$, para o comprimento médio da fila, e que, para $\delta_t = 1.0$, a ordem máxima, dos modelos ajustados, aumentou consideravelmente. Note-se que, apenas se encontram, contabilizados, os valores dos melhores metamodelos estimados. Para o tempo médio de permanência no sistema, o número de séries de ruído branco foi bastante considerável e, apesar de uma grande dispersão em relação aos modelos ajustados, os modelos $AR(p)$, com ordens até $p = 4$, em conjunção com as séries de ruído branco, descrevem, quase na totalidade, os modelos estimados.

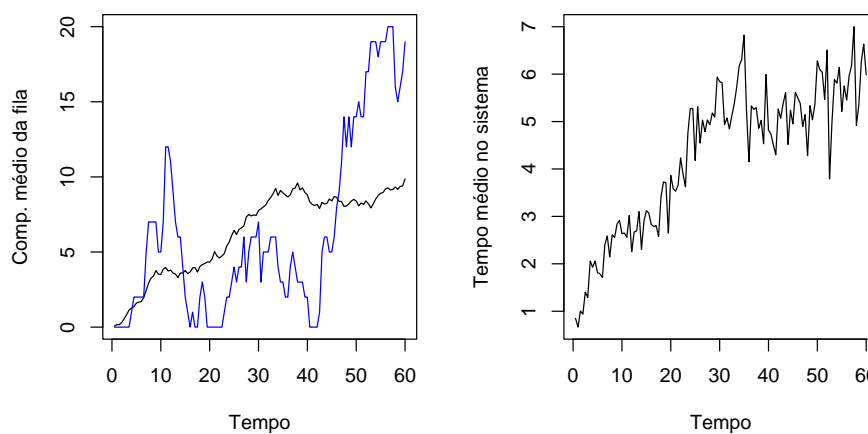
(ii) Fila $M/M/2$ Crítica ($\rho = 1$)

Após a recolha de dados e construção das séries médias, o passo seguinte, tal como para a fila $M/M/1$, é a representação gráfica das séries médias, para, visualmente, se decidir o tipo de relação funcional a ajustar. Na Figura 4.13, representamos uma série média típica, para cada resposta em estudo, bem como, para o comprimento da

Tabela 4.6: Ajustamento das componentes estocásticas para a fila $M/M/1$, com $\rho = 2$

Modelo	Comprimento médio da fila		Tempo médio de permanência no sistema	
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
Ruído Branco		1	46	35
AR(1)	93	78	12	44
AR(2)	3	3	12	8
AR(3)			7	3
AR(4)	1	1	3	1
AR(5)	1	2	4	
AR(6)				1
AR(7)			1	
AR(8)		1		
AR(12)			1	
MA(1)		1	2	2
MA(2)		1	3	
MA(3)		4	2	3
MA(4)		3	3	3
MA(5)			1	
MA(6)		2	2	
MA(7)		1	1	
MA(8)		2		
MA(11)	2			

fila, a sua primeira série individual (a azul); podemos observar que, a diferença, de comportamento, entre as séries individual e média, é bastante significativa.

Figura 4.13: Exemplos de séries médias (fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Neste caso e após a experimentação de vários metamodelos polinomiais, verificou-se ser, mais adequado, o seguinte metamodelo, para as duas medidas em estudo:

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2 + u_t, \quad (4.2)$$

com $t = 0.5, 1, \dots, 60$, para $\delta_t = 0.5$, e $t = 1, 2, \dots, 60$, para $\delta_t = 1.0$.

Procedeu-se, de seguida, à estimação dos parâmetros dos metamodelos, seguindo os passos habituais, que já foram descritos para a fila $M/M/1$. Para as séries, representadas na Figura 4.13, os modelos válidos, ajustados à componente estocástica do metamodelo (4.2), que corresponderam a um menor valor no critério AIC, foram o AR(1) e o AR(2), para o comprimento médio da fila e para o tempo médio de permanência no sistema, respectivamente. Na Figura 4.14, encontram-se representados alguns gráficos de diagnóstico dos resíduos finais, do metamodelo estimado para o comprimento médio da fila.

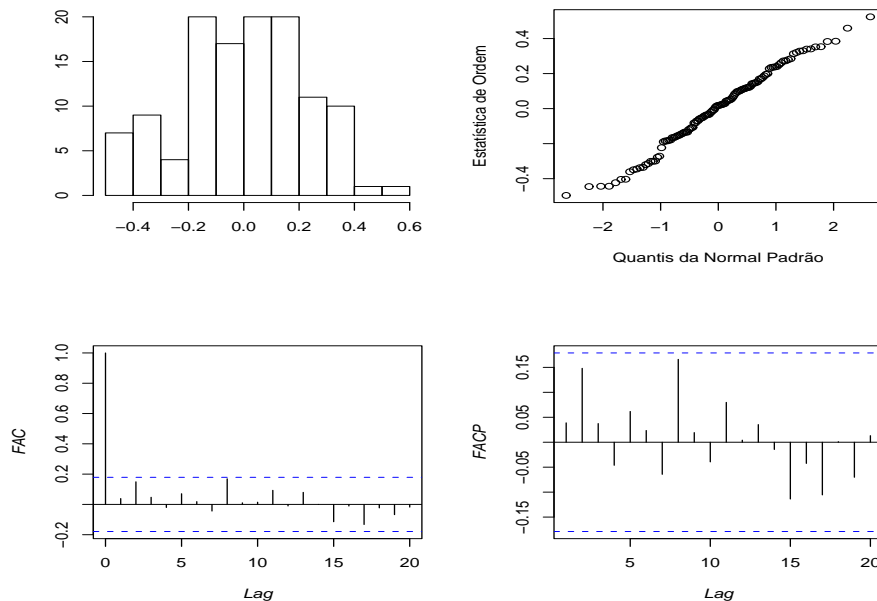


Figura 4.14: Diagnóstico dos resíduos: comprimento médio da fila $M/M/2$ com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$

Neste caso, somente os resíduos finais do metamodelo relativo ao comprimento médio da fila passaram no teste de normalidade de Shapiro-Wilk. Uma possível justificação, para esse resultado, é o facto de não haver a mesma quantidade de informação, em cada instante t , para o cálculo da série média do tempo de permanência no sistema.

Os valores da estatística SSE, obtidos para os metamodelos ajustados ao comprimento médio da fila e ao tempo médio de permanência no sistema, foram, respectivamente, 61.5912 e 42.2582.

De seguida, o processo foi repetido para as restantes 99 séries médias, obtendo-se os resultados, apresentados na Tabela 4.7, para a componente determinística dos metamodelos estimados.

Tabela 4.7: Ajustamento das componentes determinísticas para a fila $M/M/2$, com $\rho = 1$

	Comprimento médio da fila					
	$\delta_t = 0.5$			$\delta_t = 1.0$		
	β_0	β_1	β_2	β_0	β_1	β_2
Máx.	2.4033	0.4979	0.0009	2.504	0.4718	0.001
Média	0.5522	0.2671	-0.0017	0.6247	0.2626	-0.0017
Mín.	-0.6314	0.1049	-0.0056	-0.6495	0.0956	-0.0055
N.º Mod.	200			199		
	Tempo médio de permanência no sistema					
	$\delta_t = 0.5$			$\delta_t = 1.0$		
	β_0	β_1	β_2	β_0	β_1	β_2
Máx.	2.778	0.2554	0.0005	2.3872	0.2823	0.0003
Média	1.4433	0.135	-0.0009	1.2646	0.1368	-0.0009
Mín.	0.5264	0.0332	-0.0031	0.4537	0.0523	-0.0035
N.º Mod.	158			158		

Tal como no caso anterior, o número de metamodelos, cujos valores se apresentam na Tabela 4.7, corresponde a todos os metamodelos estimados, em que se considerou o ajuste de modelos $AR(p)$ e $MA(q)$ para a componente estocástica.

Como podemos verificar, pela análise da Tabela 4.7, o parâmetro, que apresenta valores com maior variabilidade, é o β_0 , para o qual os respectivos valores máximo, mínimo e médio são muito distintos, o mesmo não acontecendo com os restantes parâmetros.

É de salientar que, em algumas séries médias, constatámos que o parâmetro β_2 não era significativo, pelo que, nesses casos, as séries seriam convenientemente ajustadas por um metamodelo $\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + u_t$.

O tipo de modelo, ajustado às componentes estocásticas dos metamodelos estimados, pode ser consultado na Tabela 4.8 (100 modelos para cada medida).

Tabela 4.8: Ajustamento das componentes estocásticas para a fila $M/M/2$, com $\rho = 1$

Modelo	Comprimento médio da fila		Tempo médio de permanência no sistema	
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
Ruído Branco		1	42	42
AR(1)	82	72	15	36
AR(2)	3	4	15	9
AR(3)	2	1	8	1
AR(4)	3	2		1
AR(5)		3	2	
AR(6)	1	1		
AR(7)	1	1	1	
AR(11)	1			
AR(12)	1			
AR(13)	1			
MA(1)		2	1	1
MA(2)		3	3	5
MA(3)		4	3	3
MA(4)		3	3	2
MA(5)	1	2	3	
MA(6)	1	2		
MA(7)			1	
MA(10)	1		1	
MA(11)	1		2	
MA(12)	1			

Os resultados obtidos, para a fila $M/M/2$, são muito semelhantes aos da fila $M/M/1$. Para o comprimento médio da fila, o modelo, que se destaca, é o AR(1) e, para o tempo médio de permanência no sistema, 42% das séries são ruído branco. Em ambos os casos, os modelos autoregressivos, até à ordem 4, e/ou as séries de ruído branco descrevem uma percentagem bastante elevada dos ajustes. Por outro lado, apesar da grande variabilidade de modelos MA(q) estimados, a sua contribuição é diminuta.

Para ilustrar o ajuste, das componentes determinísticas dos metamodelos, apresentamos, nas Figuras 4.15 e 4.16, as séries médias *versus* as respectivas curvas ajustadas, para duas séries (a primeira e a última) e para a totalidade das 100 séries, respectivamente.

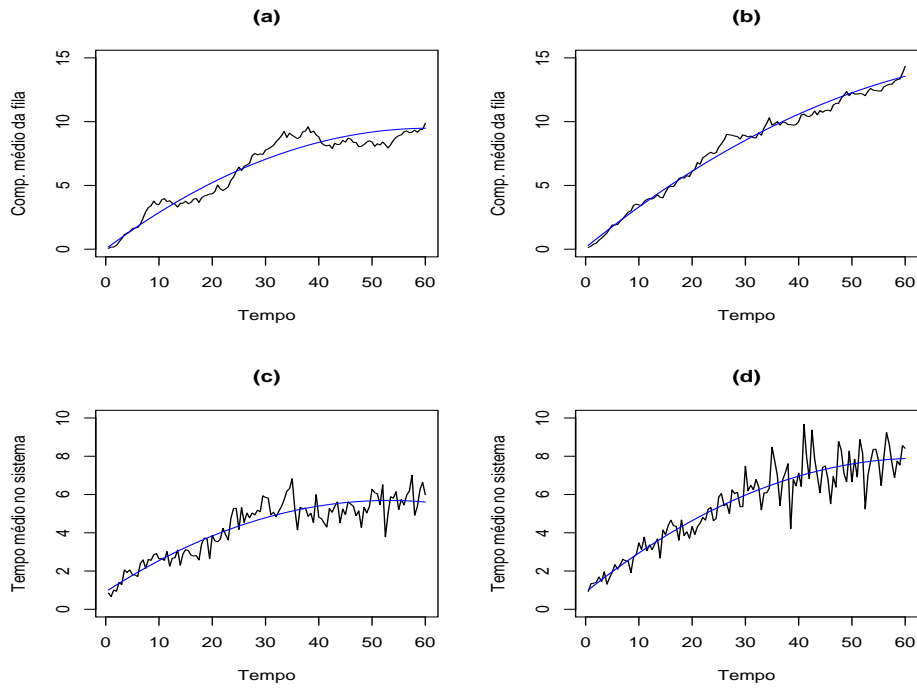


Figura 4.15: Metamodelos ajustados (2 séries, fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

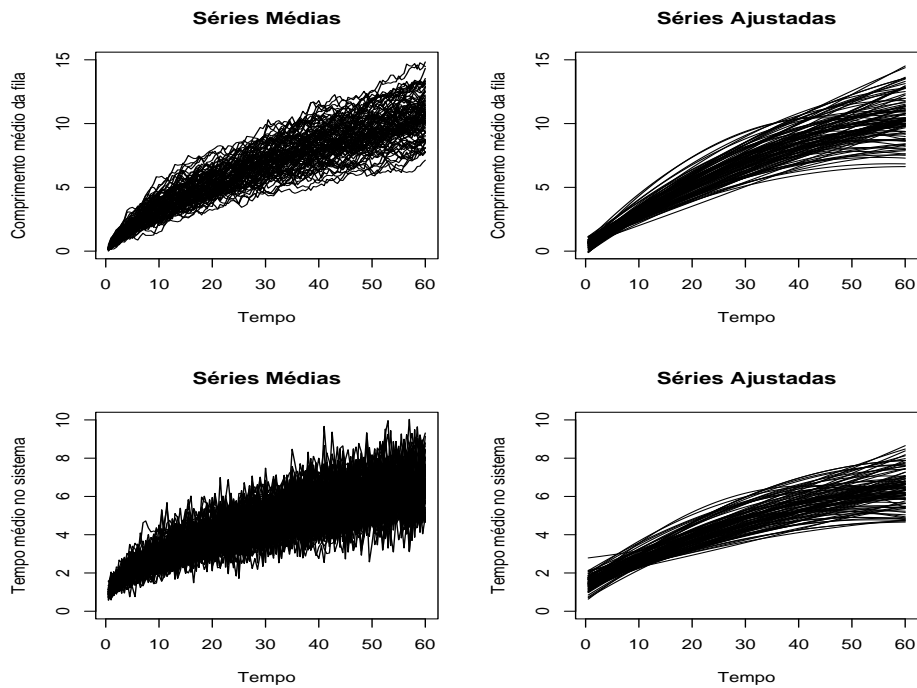


Figura 4.16: Metamodelos ajustados (100 séries, fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Como podemos observar, o comportamento fundamental das séries é razoavelmente descrito pelas componentes determinísticas dos metamodelos ajustados.

(iii) Fila M/M/3 Super-crítica ($\rho = 1.5$)

Ao estudarmos a fila M/M/3, constatámos que, o número de observações rejeitadas, para a construção da série média do tempo de permanência no sistema, tendo em conta $\delta_t = 0.5$ e $\delta_t = 1.0$, era bastante elevado, pelo que, decidimos também investigar o comportamento, das séries médias dessa medida, para um intervalo de recolha mais “fino”, $\delta_t = 0.2$; neste caso, o número de observações sequenciais, que compõem cada uma dessas séries cronológicas médias, passou a ser de 300.

O comportamento das séries médias, para as duas medidas e para os intervalos de recolha usados, δ_t , mostrou-se muito semelhante ao da fila M/M/1, como podemos observar na Figura 4.17, ou seja, ambas as medidas apresentam um crescimento linear.

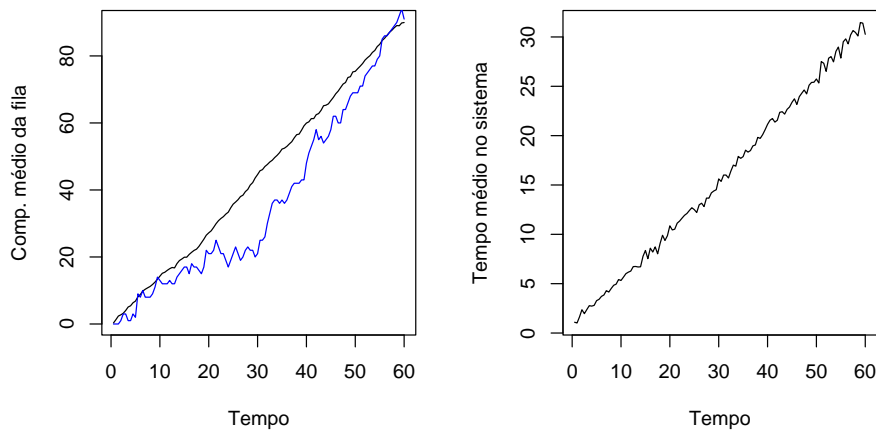


Figura 4.17: Exemplos de séries médias (fila M/M/3, com $\rho = 1.5$ e $\delta_t = 0.5$)

Assim sendo, o metamodelo que decidimos ajustar, para as duas medidas, foi:

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + u_t.$$

Para o comprimento médio da fila, considerou-se $t = 0.5, 1, \dots, 60$, para $\delta_t = 0.5$, e $t = 1, 2, \dots, 60$, para $\delta_t = 1.0$; no caso do tempo médio de permanência no sistema, como $\delta_t = 0.2$, os valores são $t = 0.2, 0.4, \dots, 60$.

A análise descrita, para as filas M/M/1 e M/M/2, foi, então, repetida para a fila M/M/3. Na Tabela 4.9, apresentamos os resultados do ajustamento das componentes determinísticas dos metamodelos. Neste caso, o número de metamodelos, cujo resumo

apresentamos, é exactamente de 100, uma vez que, decidimos ajustar, apenas, um modelo $ARMA(p, q)$ a cada série média. A escolha, do modelo adequado, foi efectuada através do teste de Ljung-Box, em que, de uma forma sequencial, verificámos o ajuste de modelos $ARMA(p, q)$, para $q = 0, 1, 2, 3$ e $p = 0, \dots, 10$, até que um modelo passasse no teste. O tipo de modelo, ajustado às componentes estocásticas dos metamodelos estimados, pode ser encontrado na Tabela 4.10.

Tabela 4.9: Ajustamento das componentes determinísticas para a fila $M/M/3$, com $\rho = 1.5$

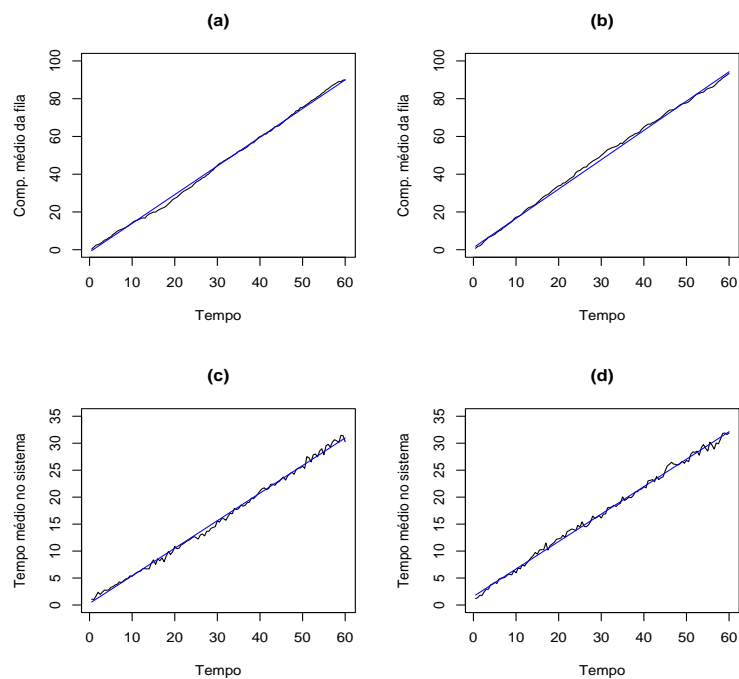
Comprimento médio da fila						
	$\delta_t = 0.5$		$\delta_t = 1.0$			
	β_0	β_1	β_0	β_1		
Máx.	1.3575	1.6606	1.6391	1.6655		
Média	-0.1866	1.5193	-0.19209	1.5194		
Mín.	-1.7865	1.3636	-2.0783	1.3611		
N.º Mod.	100		100			
Tempo médio de permanência no sistema						
	$\delta_t = 0.2$		$\delta_t = 0.5$		$\delta_t = 1.0$	
	β_0	β_1	β_0	β_1	β_0	β_1
Máx.	1.895	0.5708	1.6424	0.5637	1.3186	0.5611
Média	1.0855	0.5079	0.8656	0.5075	0.5797	0.5069
Mín.	-0.272	0.4543	-0.2806	0.4555	-0.3284	0.4542
N.º Mod.	100		100		100	

Como podemos constatar, os resultados obtidos, tanto para as componentes determinísticas, como para as estocásticas, são similares aos já obtidos para os outros dois casos; tal como antes, somente o parâmetro β_0 apresenta uma grande variabilidade, nos seus valores, e os modelos autoregressivos, com ordens inferiores ou iguais a 4, em conjugação com o ruído branco (somente para o tempo médio de permanência no sistema), descrevem a quase totalidade das séries estudadas.

Podemos constatar, observando as Figuras 4.18 e 4.19, que, as componentes determinísticas, dos metamodelos ajustados, apresentam um comportamento muito semelhante às respectivas séries médias originais.

Tabela 4.10: Ajustamento das componentes estocásticas da fila $M/M/3$, com $\rho = 1.5$

Modelo	Comprimento médio da fila		Tempo médio de permanência no sistema		
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$	$\delta_t = 0.2$	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
Ruído Branco			25	12	8
AR(1)	88	92	8	29	81
AR(2)	5	6	10	33	10
AR(3)	2	1	10	15	1
AR(4)	3	1	20	7	
AR(5)	1		8	1	
AR(6)	1		8	1	
AR(7)			6		
AR(8)			2	1	
AR(9)			2		
ARMA(9,1)			1		

Figura 4.18: Metamodelos ajustados (2 séries, fila $M/M/3$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

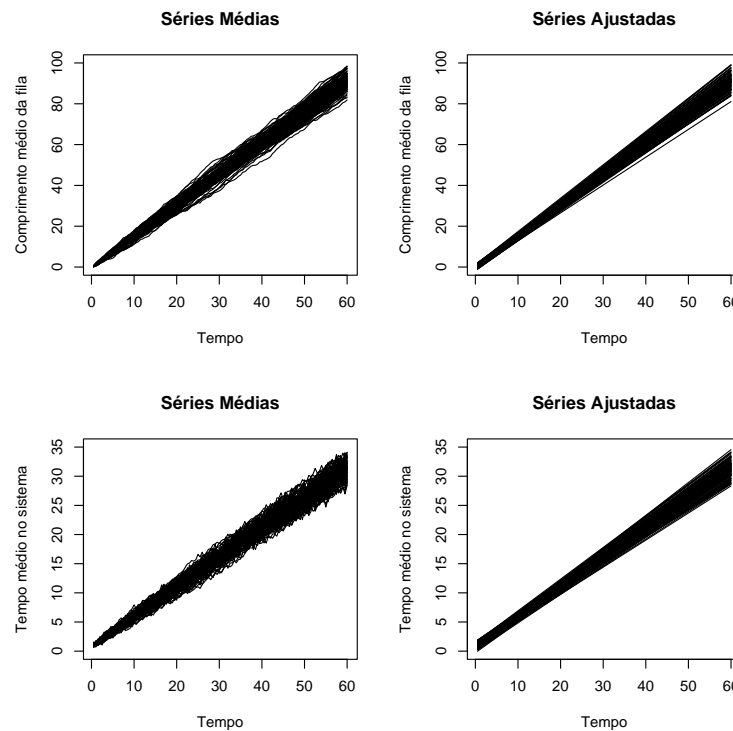


Figura 4.19: Metamodelos ajustados (100 séries, fila $M/M/3$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

4.1.3 Ajustamento de Metamodelos para a Variância

Nesta secção e a título de exemplo, estuda-se o comportamento das séries das variâncias para o sistema de filas de espera $M/M/2$ com factor de utilização $\rho = 1$ (situação (ii) descrita na Secção 4.1). As séries, que vamos analisar, correspondem à variância amostral corrigida, em cada instante t , da medida comprimento da fila, cujo intervalo de recolha foi $\delta_t = 0.5$. Tal como foi referido na Secção 3.2.3, o metamodelo estimado para a série da variância, em complemento ao metamodelo estimado para a série média, permite-nos construir intervalos de confiança para o valor esperado da medida de *performance* do sistema em estudo que, neste caso, é o comprimento médio da fila.

O comportamento de duas séries típicas da variância (a primeira e a última séries) encontra-se representado na Figura 4.20.

Analisando o comportamento das séries das variâncias decidimos considerar, como candidatos, os seguintes metamodelos polinomiais lineares:

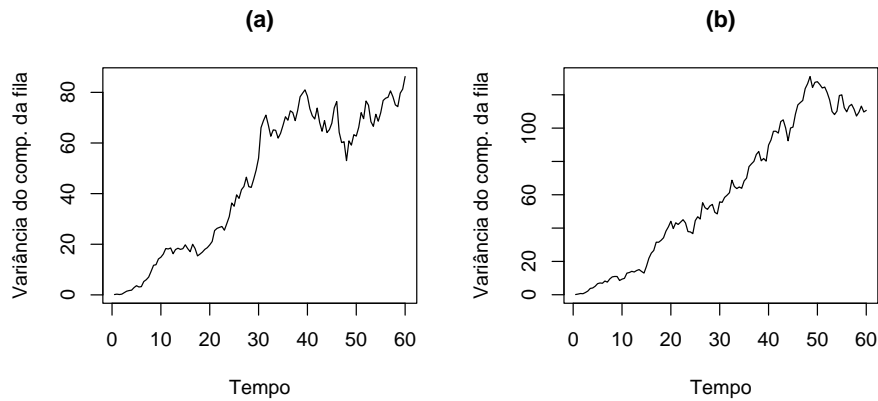


Figura 4.20: Exemplos de séries das variâncias (fila $M/M/2$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Mod 1: $V_t = \beta_0 + \beta_1 t + u_t$

Mod 2: $V_t = \beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2 + u_t$

Mod 3: $V_t = \beta_1 t + \beta_2 t^2 + u_t$

Identificado o tipo de metamodelo a considerar, procedeu-se à estimação dos respectivos parâmetros, seguindo os passos habituais, que já foram descritos na secção anterior. É de salientar que, o modelo válido, ajustado às componentes estocásticas dos três metamodelos alternativos, foi o AR(1).

Na Tabela 4.11, apresentamos os valores dos critérios de Akaike e de Schwarz para os três metamodelos estimados para a série da variância representada na Figura 4.20 (a).

Tabela 4.11: Critérios AIC e BIC (variância do comprimento da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$)

Metamodelo	AIC	BIC
Mod 1	631.68	642.83
Mod 2	632.83	646.76
Mod 3	631.16	642.31

Como podemos observar, o metamodelo, que apresenta menor valor nos critérios AIC e BIC, é o “Mod 3”. Podemos, ainda, confirmar a escolha do metamodelo “Mod 3” aplicando o teste da razão de verosimilhança: primeiro, comparando o

“Mod 1” com o “Mod 2” e, em seguida, comparando o “Mod 3” com o “Mod 2”, uma vez que, em qualquer dos casos, o metamodelo, que pretendemos testar, é um caso particular do metamodelo alternativo. Assim, no primeiro caso, para hipótese nula, temos que o metamodelo “Mod 1” é correcto *versus* o metamodelo “Mod 2” e, no segundo caso, a hipótese nula é que o metamodelo “Mod 3” é correcto *versus* o metamodelo “Mod 2”. Os valores da estatística de teste, para os dois casos, e das respectivas probabilidades de significância (*p-value*) podem ser observados na Tabela 4.12.

Tabela 4.12: Teste da razão de verosimilhança (variância do comprimento da fila $M/M/2$, com $\rho = 1$)

Hipóteses	LR	p -value
Mod 1 <i>vs.</i> Mod 2	0.8527	0.36
Mod 3 <i>vs.</i> Mod 2	0.3299	0.57

A aplicação dos dois testes anteriores permite-nos concluir que, tanto o metamodelo “Mod 1”, como o “Mod 3”, são preferíveis ao metamodelo “Mod 2”; no entanto, a escolha entre o “Mod 1” e o “Mod 3” só pode ser efectuada recorrendo ao metamodelo com menor valor nos critérios AIC e BIC, que corresponde ao “Mod 3”.

Na Figura 4.21, representamos as séries das variâncias *versus* as respectivas curvas ajustadas pelo metamodelo “Mod 3”.

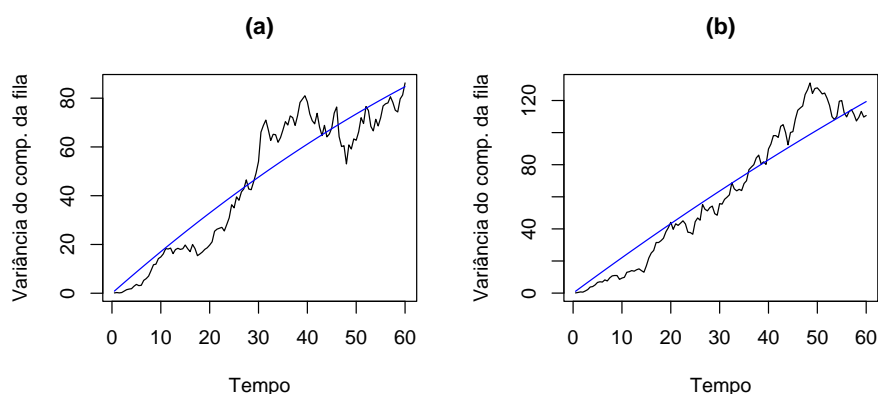


Figura 4.21: Metamodelos estimados (2 séries das variâncias, fila $M/M/2$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Como podemos observar, o comportamento fundamental das séries das variâncias é razoavelmente descrito pelas componentes determinísticas dos metamodelos ajustados. Assim, procedemos à estimação do metamodelo “Mod 3” para as restantes 99 séries das variâncias. Na Tabela 4.13, apresentamos um resumo das estimativas dos parâmetros das componentes determinísticas dos 100 metamodelos ajustados.

Tabela 4.13: Ajustamento das componentes determinísticas das séries das variâncias (fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Comprimento da fila		
	β_1	β_2
Máx.	2.9856	0.0314
Média	1.3801	0.0020
Mín.	0.3734	-0.0236
N.º Mod.	100	

O número de modelos $AR(p)$, ajustados às componentes estocásticas dos metamodelos estimados, pode ser verificado na Tabela 4.14; neste caso, pesquisou-se apenas o ajuste de modelos $AR(p)$, tendo-se obtido ordens não superiores a 10.

Tabela 4.14: Ajustamento das componentes estocásticas das séries das variâncias (fila $M/M/2$, com $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Comprimento da fila							
Modelo Ajustado							
AR(1)	AR(2)	AR(3)	AR(4)	AR(5)	AR(6)	AR(7)	AR(10)
77	5	3	4	5	1	2	3

Neste caso, verifica-se que os parâmetros estimados apresentam valores bastante díspares (em particular, o parâmetro β_1) indicando que o comportamento das séries das variâncias é bastante irregular. Por outro lado, observamos a dominância do modelo $AR(1)$ no ajustamento às componentes estocásticas dos metamodelos.

Estando perante um metamodelo para representar a série média (metamodelo estimado na secção anterior) e um metamodelo para representar a respectiva série da variância, podemos, facilmente, construir intervalos de confiança, utilizando a ex-

pressão definida pela equação (3.21) e que reproduzimos, novamente,

$$\text{IC1: } \hat{Y}_t \pm t_{r-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\hat{V}_t}{r}}.$$

Por outro lado, como vimos na Secção 3.2.3, é também possível a construção de intervalos de confiança com base na média da amostra e na variância amostral corrigida, utilizando a expressão

$$\text{IC2: } \bar{Y}_t \pm t_{r-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_t}{\sqrt{r}},$$

onde

$$\hat{\sigma}_t = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^r (Y_{j,t} - \bar{Y}_t)^2}{r-1}}.$$

Na Figura 4.22, encontram-se representados, para duas séries distintas, os intervalos de confiança IC1 (metamodelo ajustado para a média, a rosa, e limites, a vermelho) e IC2 (série média, a azul claro, e limites, a azul escuro), com um nível de significância de 5% ($\alpha = 0.05$).

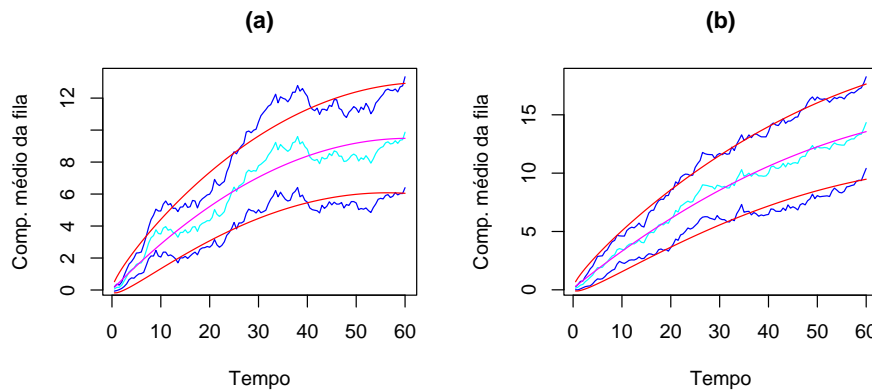


Figura 4.22: Intervalos de confiança (2 séries, fila $M/M/2$, $\rho = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Como podemos observar e era de esperar, os limites do intervalo IC2 são mais irregulares que os limites do IC1, uma vez que, os limites do IC2 são calculados com base na variância amostral corrigida. É, também, visível o aumento da amplitude dos intervalos de confiança à medida que o instante t aumenta, o que corresponde a uma maior variabilidade nas séries individuais.

4.2 Redes de Filas de Espera em *Tandem*

Nesta secção, estuda-se uma rede de filas de espera em *tandem*, constituída por duas filas de espera $M/M/1$, dispostas em série. Os clientes chegam, de acordo com um processo de Poisson, com taxa λ , ao primeiro servidor; após serem atendidos, pelo primeiro servidor, os clientes juntam-se à fila do segundo servidor. Os tempos de serviço, para cada servidor, seguem uma distribuição exponencial, com tempo médio constante e igual a $1/\mu_i$, $i = 1, 2$. Na Figura 4.23, representamos um esquema deste sistema.

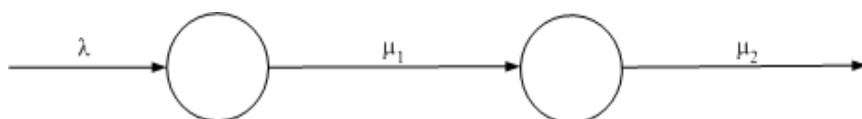


Figura 4.23: Diagrama esquemático de uma rede de filas de espera em *tandem*

Vamos considerar que, a capacidade das filas, para ambos os servidores, é infinita e que, cada servidor, atende um cliente de cada vez.

Estudaram-se duas configurações distintas do sistema, que correspondem aos seguintes valores para as taxas de chegada e de serviço:

- (i) $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$, para $i = 1, 2$;
- (ii) $\lambda = 2$ e $\mu_i = 1$, para $i = 1, 2$.

Neste caso, as respostas, que decidimos analisar, foram o número de entidades à espera, em ambas as filas, e o tempo de permanência no sistema, num dado instante; o objectivo é exprimir a evolução, destas medidas, ao longo do tempo.

O processo, de recolha dos dados e de construção das séries médias, foi idêntico ao descrito na Secção 4.1, bem como a duração de referência de cada simulação. Os intervalos, de recolha de dados, considerados foram, igualmente, $\delta_t = 0.5$ e $\delta_t = 1.0$.

(i) Duas Filas $M/M/1$ em *Tandem*, com $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$

A representação gráfica, das séries médias do número de entidades nas filas e do tempo de permanência no sistema, revelou-se muito semelhante ao registado para a fila $M/M/2$, como podemos observar na Figura 4.24. Podemos, também, constatar que, o comportamento da série individual (a azul) é bastante distinto do da respectiva série média.

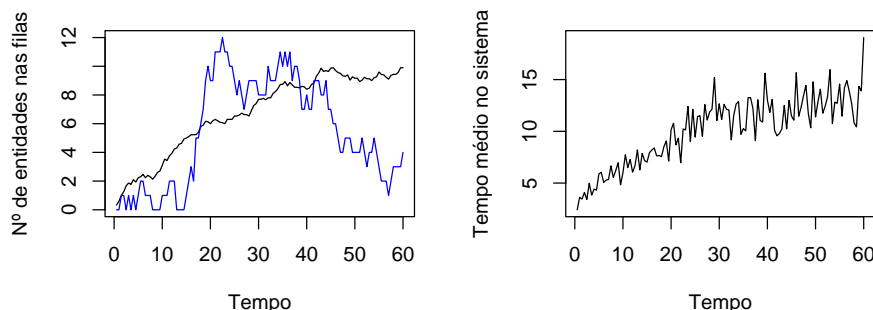


Figura 4.24: Exemplos de séries médias (filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Tendo, por base, a análise gráfica efectuada e após a experimentação de vários metamodelos polinomiais, decidimos ajustar, a cada uma das medidas, um polinómio de grau 2, cuja expressão é dada pela equação (4.2) e que reproduzimos, novamente,

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2 + u_t.$$

O processo, de estimação dos metamodelos, foi idêntico ao descrito para os casos estudados na Secção 4.1.2, isto é, após a estimação preliminar, através do método dos mínimos quadrados usuais, procedeu-se à análise dos resíduos, estimando-se o metamodelo final, tendo em conta a estrutura de autocorrelação identificada, através do método da máxima verosimilhança.

Para as séries, representadas na Figura 4.24, os modelos ajustados, à componente estocástica dos metamodelos estimados, foram o AR(3) e o MA(4), para o número médio de entidades nas filas, e uma série de ruído branco, para o tempo médio de permanência no sistema. No primeiro caso, o metamodelo final, com menor valor no critério AIC, correspondeu ao modelo AR(3). É de salientar que, as estimativas preliminares e finais, dos parâmetros, obtidas, para o metamodelo do tempo de permanência no sistema, são as mesmas, uma vez que os resíduos são não correlacionados.

Na Figura 4.25, representamos alguns gráficos de diagnóstico dos resíduos do metamodelo ajustado à série média do tempo de permanência no sistema.

Ao observarmos o histograma dos resíduos do metamodelo, para o tempo de permanência no sistema, intuitivamente, se chega à conclusão que, a hipótese de normalidade não é satisfeita. Esta suspeita foi confirmada, após a realização do teste de Shapiro-Wilk. Apesar disso, o metamodelo foi validado, pois os restantes critérios foram satisfeitos (significância dos parâmetros, teste de Ljung-Box, valor não muito

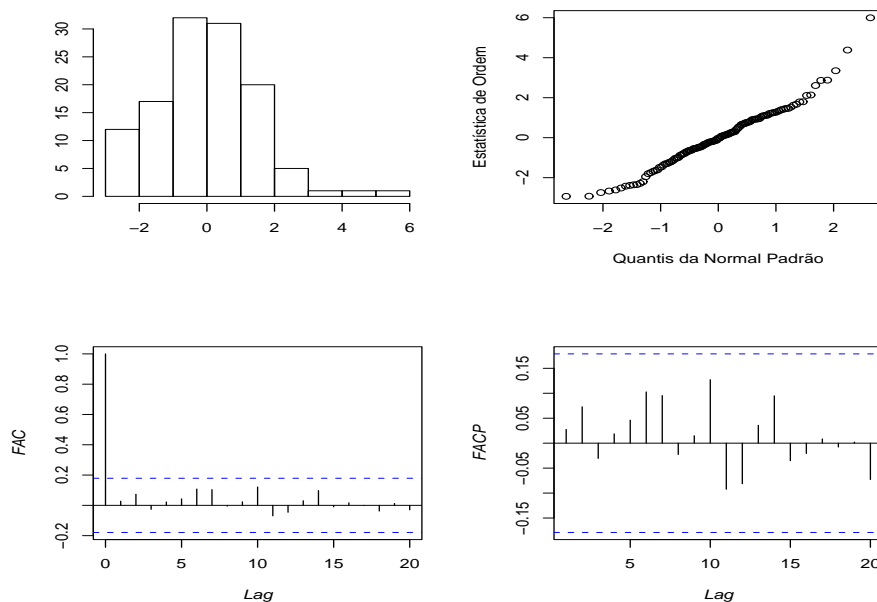


Figura 4.25: Diagnóstico dos resíduos: tempo médio de permanência no sistema (filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

elevado, 269.73, para SSE) e porque a sua componente determinística descreve, de uma forma bastante satisfatória, o comportamento médio da série; ver o gráfico (c) da Figura 4.26. Por outro lado, todos estes critérios foram satisfeitos para o meta-modelo do número de entidades nas filas (no gráfico (a), encontra-se representado o respectivo metamodelo estimado).

Ao repetirmos a análise, para as restantes 99 séries médias de cada medida, obtivemos os resultados, para as componentes determinísticas e estocásticas, que podem ser consultados nas Tabelas 4.15 e 4.16.

Ao analisarmos os resultados obtidos, para as componentes determinísticas dos metamodelos, verificamos, tal como anteriormente, que os valores máximo, mínimo e médio são muito distintos, para β_0 , e que, para os restantes parâmetros, tal não acontece. Por outro lado, registou-se uma percentagem muito elevada (75% e 70%) de séries de ruído branco ajustadas ao tempo médio de permanência no sistema, ao contrário do que anteriormente ocorreu; para o número médio de entidades nas filas, o modelo, com maior número de ajustes, continuou a ser o AR(1), embora, em alguns casos, tenha sido necessário ajustar modelos AR(p) e MA(q) com ordens bastante elevadas.

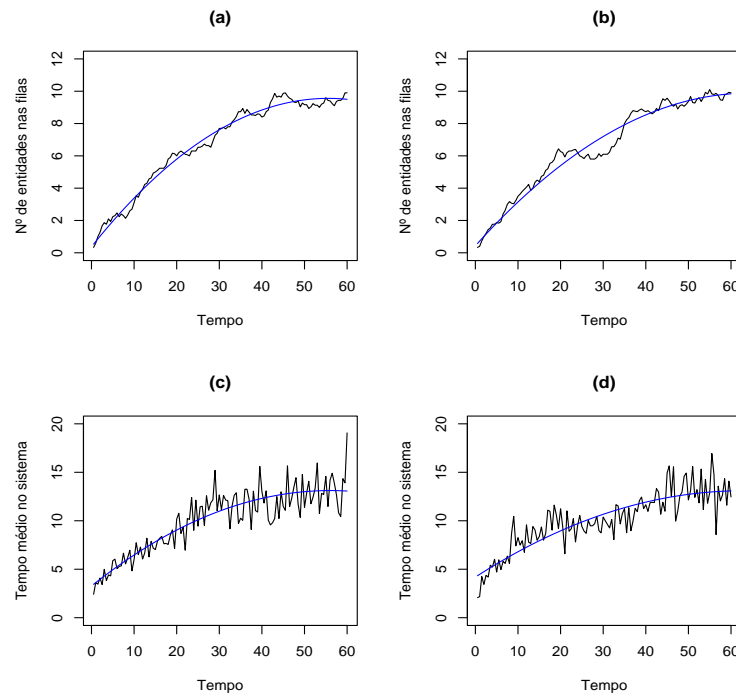


Figura 4.26: Metamodelos ajustados (2 séries, filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Tabela 4.15: Ajustamento das componentes determinísticas (filas em *tandem*, $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$)

Número médio de entidades nas filas						
	$\delta_t = 0.5$			$\delta_t = 1.0$		
	β_0	β_1	β_2	β_0	β_1	β_2
Máx.	1.6251	0.4544	0.0005	1.6563	0.45	0.0005
Média	0.5998	0.3010	0.0019	0.6632	0.2966	-0.0019
Mín.	-0.1455	0.1496	-0.0048	-0.1272	0.1369	-0.0047
N.º Mod.	200			200		
Tempo médio de permanência no sistema						
	$\delta_t = 0.5$			$\delta_t = 1.0$		
	β_0	β_1	β_2	β_0	β_1	β_2
Máx.	5.2808	0.6198	0.0003	4.998	0.6262	0.0006
Média	3.8411	0.3310	-0.0023	3.3791	0.3412	-0.0025
Mín.	2.3933	0.1714	-0.0072	1.9709	0.1699	-0.0072
N.º Mod.	125			130		

Tabela 4.16: Ajustamento das componentes estocásticas (filas em *tandem*, $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$)

Modelo	Número médio de entidades nas filas		Tempo médio de permanência no sistema	
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
Ruído Branco			75	70
AR(1)	84	86	9	14
AR(2)	1	1	2	6
AR(3)	5		3	
AR(4)		1		
AR(5)	1			
AR(6)	1	1		
AR(8)	1			1
AR(9)	1		1	
AR(10)			1	
AR(11)	1			
AR(13)	1			
MA(1)		1		5
MA(2)		5	2	
MA(3)		2	1	3
MA(4)				1
MA(5)	1		1	
MA(6)		2	1	
MA(8)	2	1		
MA(9)	1		2	
MA(11)			1	
MA(16)			1	

Pode-se obter uma visão global, do comportamento das séries médias e respectivos metamodelos ajustados (apenas para as componentes determinísticas), consultando a Figura 4.27.

Podemos afirmar, pelo aspecto dos dois gráficos, relativos a cada uma das medidas, que os metamodelos ajustados descrevem, de uma forma bastante satisfatória, o comportamento intrínseco das respectivas séries médias, uma vez que conseguem captar as suas componentes fundamentais; veja-se, por exemplo, os metamodelos ajustados às duas séries individuais, representados na Figura 4.26.

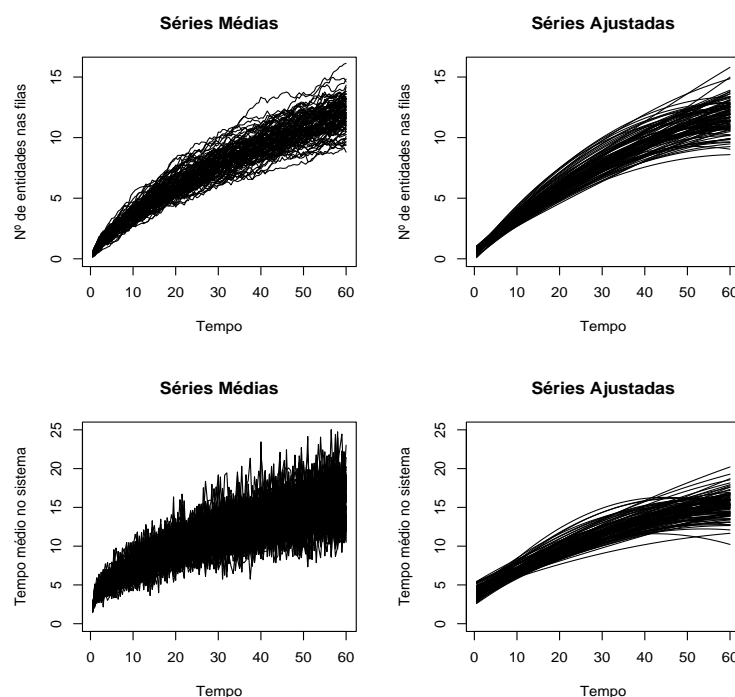


Figura 4.27: Metamodelos ajustados (100 séries, filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

(ii) Duas Filas M/M/1 em *Tandem*, com $\lambda = 2$ e $\mu_i = 1$

Neste modelo, o número médio de entidades nas filas e o tempo médio de permanência no sistema, seguem basicamente uma recta, como podemos observar nos gráficos da Figura 4.28. Nesta figura, encontram-se igualmente representados os metamodelos estimados (a azul).

Assim sendo, o tipo de metamodelo escolhido, para tentar descrever o comportamento das duas medidas, foi a relação linear simples, dada pela equação (4.1) e que transcrevemos, aqui,

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + u_t.$$

O processo de estimação e validação dos 100 metamodelos de cada medida, neste caso de estudo, seguiu os mesmos passos dos sistemas anteriormente analisados. Assim, nas Tabelas 4.17 e 4.18, apresentamos um resumo dos resultados obtidos, para as componentes determinísticas e estocásticas, respectivamente.

Tal como se tem vindo a verificar, o único parâmetro, que continua a apresentar valores, compreendidos num intervalo de amplitude considerável, é o β_0 , provavelmente, devido ao motivo já referido atrás (chegadas no instante zero). Podemos observar,

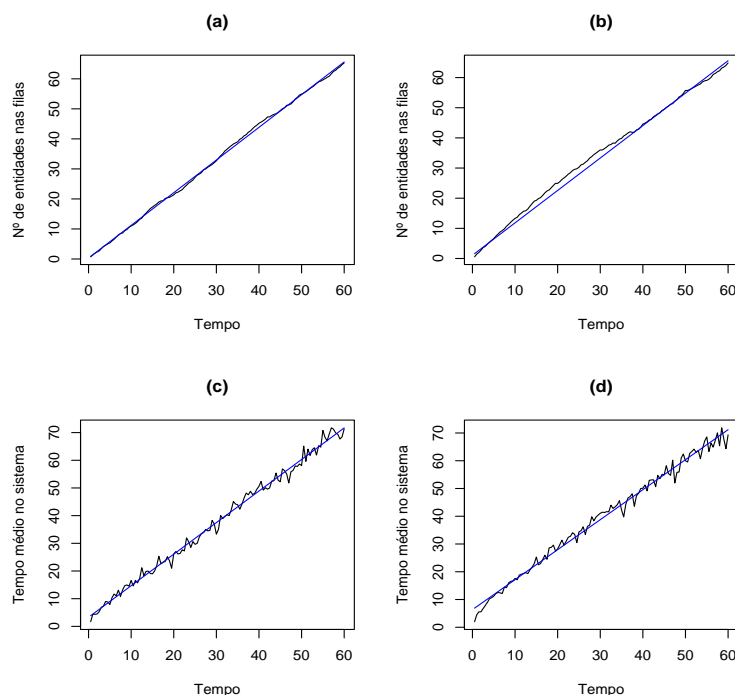


Figura 4.28: Metamodelos ajustados (2 séries, filas em *tandem*, $\lambda = 2$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Tabela 4.17: Ajustamento das componentes determinísticas (filas em *tandem*, $\lambda = 2$ e $\mu_i = 1$)

	Número médio de entidades nas filas				Tempo médio de permanência no sistema			
	$\delta_t = 0.5$		$\delta_t = 1.0$		$\delta_t = 0.5$		$\delta_t = 1.0$	
	β_0	β_1	β_0	β_1	β_0	β_1	β_0	β_1
Máx.	3.5918	1.2194	3.6252	1.2127	7.7986	1.303	6.8019	1.3041
Média	1.0890	1.121	1.4589	1.1197	4.9623	1.166	3.9621	1.1717
Mín.	-0.6486	1.0083	-0.6723	1.0081	2.6547	1.0468	1.9636	1.057
N.º Mod.	200		199		173		183	

também, que, se compararmos as amplitudes desses intervalos, para as duas medidas, constatamos que, as amplitudes dos intervalos, respeitantes ao tempo médio de permanência no sistema, têm valores bastante superiores; este facto é bem visível graficamente (por exemplo, na Figura 4.29, os dois gráficos da direita).

Ao analisarmos os resultados obtidos, para as componentes estocásticas dos me-

Tabela 4.18: Ajustamento das componentes estocásticas (filas em *tandem*, $\lambda = 2$ e $\mu_i = 1$)

Modelo	Número médio de entidades nas filas		Tempo médio de permanência no sistema	
	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$	$\delta_t = 0.5$	$\delta_t = 1.0$
Ruído Branco		1	27	17
AR(1)	88	89	24	55
AR(2)	5	1	17	13
AR(3)	2	1	6	3
AR(4)			3	1
AR(5)			4	1
AR(6)			1	1
AR(7)	1		1	
AR(8)	1			
AR(9)			1	
AR(10)		1		1
AR(11)		1	1	
AR(15)			1	
MA(1)				1
MA(2)		3	6	3
MA(3)		1	3	1
MA(4)			3	
MA(5)	1	1	1	2
MA(6)	1		1	
MA(7)		1		
MA(9)	1			
MA(18)			1	

nos modelos estimados, verificamos a dominância do modelo AR(1) nas séries médias do número de entidades nas filas e que, em relação ao tempo médio de permanência no sistema, os modelos autoregressivos, com ordens inferiores a 2, conjugados com as séries de ruído branco, correspondem a uma percentagem bastante elevada (68% e 85%). Podemos observar que, continua a ocorrer um número significativo de modelos com ordens, p e q , bastante distintas e que a ordem máxima atinge o valor 18; neste modelo, em particular, somente os parâmetros θ_2 , θ_8 , θ_9 e θ_{17} são significativos.

A representação gráfica de todas as séries médias, bem como as respectivas componentes determinísticas dos metamodelos estimados, pode ser observada na Figura

4.29. Podemos concluir que, os metamodelos ajustados descrevem convenientemente as séries médias, apesar de se observar uma amplitude superior nos valores iniciais das séries estimadas (gráficos da direita), em cada uma das medidas; no entanto, a respectiva diferença é insignificante.

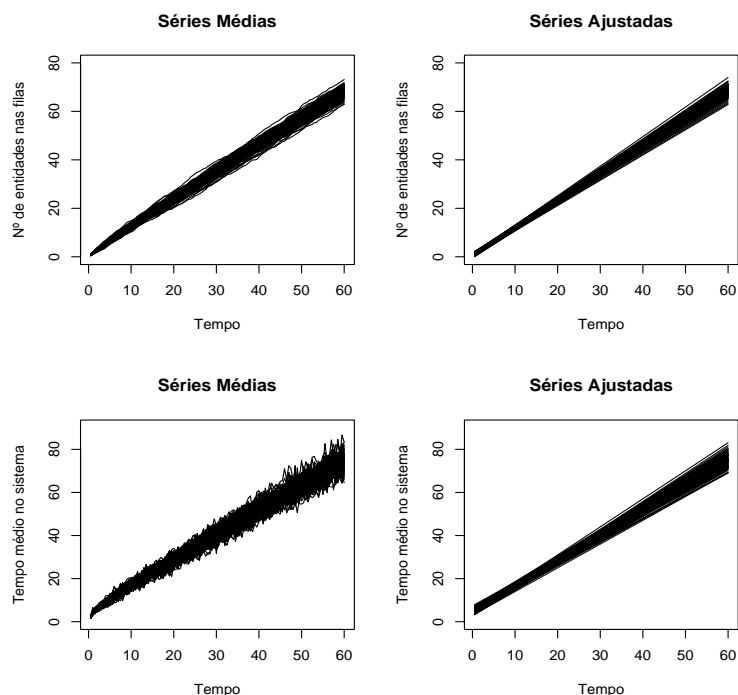


Figura 4.29: Metamodelos ajustados (100 séries, filas em *tandem*, $\lambda = 2$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

4.2.1 Ajustamento de Metamodelos para a Variância

Nesta secção e tal como foi efectuado na Secção 4.1.3, vamos estimar metamodelos para as séries das variâncias, como passo intermédio para a construção de intervalos de confiança para o valor esperado de uma medida de *performance* de uma rede de filas de espera em *tandem*.

Neste caso, decidimos escolher uma medida de desempenho do sistema que fosse distinta da anteriormente estudada; assim, decidiu-se estudar o tempo médio de permanência no sistema, tendo-se escolhido a configuração do sistema com $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$.

Dois exemplos do comportamento das séries das variâncias, para um intervalo de recolha $\delta_t = 0.5$, podem ser observados na Figura 4.30.

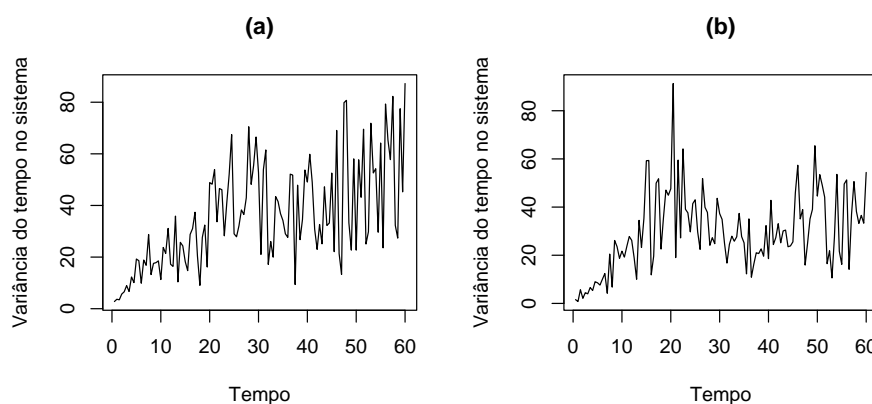


Figura 4.30: Exemplos de séries das variâncias (filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Após o ajustamento de vários metamodelos polinomiais à série representada na Figura 4.30 (a), verificou-se ser, mais adequado, o metamodelo polinomial de ordem 2,

$$V_t = \beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2 + u_t,$$

para descrever as séries das variâncias do tempo de permanência no sistema. Nesta estimação, admitiu-se que a variância, da série da variância, era heterogénea e que aumentava de acordo com uma potência dos valores ajustados; este comportamento, assumido para a variância, foi levado em conta através da função `varPower` da linguagem R. A escolha, do metamodelo mais adequado, foi efectuada analisando os valores observados para os critérios AIC e BIC e, nos casos em que tal era possível, aplicando o teste da razão de verosimilhança.

Procedeu-se, de seguida, à estimação do tipo de metamodelo anterior para as restantes 99 séries das variâncias, obtendo-se os seguintes valores, para as componentes determinísticas dos metamodelos (Tabela 4.19) e para o número de modelos $AR(p)$ ajustados às componentes estocásticas dos metamodelos estimados (Tabela 4.20).

Ao analisarmos os resultados obtidos, verificamos que, todos os parâmetros apresentam uma grande dispersão nos seus valores, indicando, assim, que o comportamento das séries das variâncias é bastante diferenciado. Por outro lado, observa-se uma percentagem muito elevada de séries de ruído branco (76%), ajustadas às componentes estocásticas dos metamodelos.

As componentes determinísticas dos metamodelos, ajustados às séries representadas na Figura 4.30, podem ser observadas na Figura 4.31 (curvas a azul).

Tabela 4.19: Ajustamento das componentes determinísticas das séries das variâncias (filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Tempo de permanência no sistema			
	β_0	β_1	β_2
Máx.	11.4946	3.3987	0.0368
Média	3.4659	1.4824	-0.0051
Mín.	-0.6128	0.2768	-0.0417
N.º Mod.	100		

Tabela 4.20: Ajustamento das componentes estocásticas das séries das variâncias (filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Tempo de permanência no sistema					
Modelo Ajustado					
Ruído Branco	AR(1)	AR(2)	AR(3)	AR(6)	AR(8)
76	12	7	3	1	1

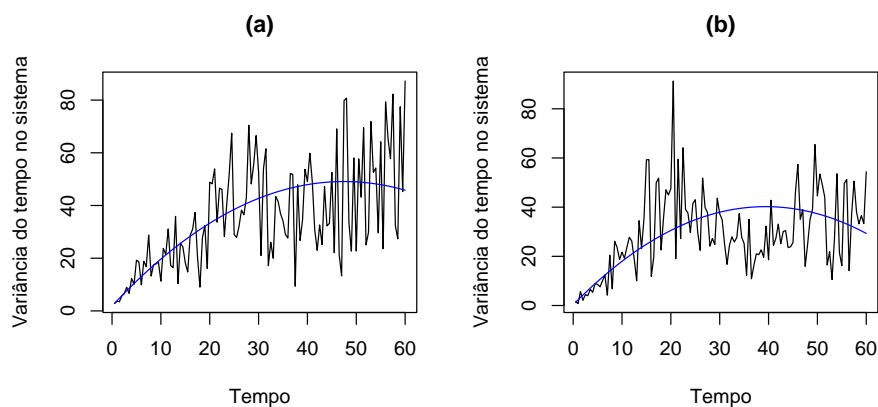


Figura 4.31: Metamodelos ajustados (2 séries de variâncias, filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Como podemos observar, as séries são bastante irregulares, pelo que, o metamodelo estimado descreve, apenas, o comportamento fundamental da medida em estudo.

Seguidamente, procedeu-se à construção de intervalos de confiança para o valor esperado do tempo de permanência no sistema, utilizando as expressões dos dois

intervalos de confiança alternativos:

$$\text{IC1: } \hat{Y}_t \pm t_{r_t-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\hat{V}_t}{r_t}} e$$

$$\text{IC2: } \bar{Y}_t \pm t_{r_t-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_t}{\sqrt{r_t}}.$$

É de notar que, em cada instante t , o número de observações, que contribuíram para o cálculo da série média, r_t , pode assumir valores entre 1 e 30; assim, torna-se necessário guardar esse número de observações, r_t , para permitir o cálculo posterior dos intervalos de confiança.

A representação gráfica, para duas séries distintas, dos intervalos de confiança IC1 (metamodelo ajustado para a média, a rosa, e limites, a vermelho) e IC2 (série média, a azul claro, e limites, a azul escuro) para o tempo médio de permanência no sistema, encontra-se na Figura 4.32.

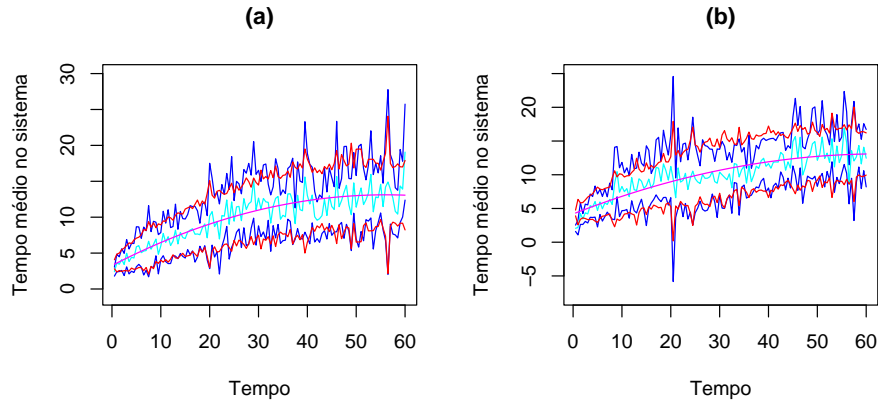


Figura 4.32: Intervalos de confiança (2 séries, filas em *tandem*, $\lambda = 1$, $\mu_i = 1$ e $\delta_t = 0.5$)

Neste caso, os limites dos intervalos de confiança IC1 e IC2 são ambos bastante irregulares, o que é justificável, atendendo a que o valor de r_t é variável. Observa-se, igualmente, um aumento da amplitude dos intervalos de confiança, à medida que o instante t aumenta. Contrariamente ao que ocorre no caso da medida em estudo ser persistente no tempo (por exemplo, o comprimento da fila), onde é possível estimar intervalos de confiança, do tipo IC1, para instantes em que não foram registadas observações, para as respostas do sistema baseadas em observações, tal não é possível.

4.3 Rede de Filas de Espera com Retroacção

O exemplo de aplicação, tratado nesta secção, é uma versão, ligeiramente modificada, do modelo apresentado em Schruben (1982).

Consideremos uma rede de filas de espera, composta por três filas do tipo $M/M/s$, com retroacção, isto é, os clientes, que são bloqueados (os que não podem entrar na fila a que se dirigem), têm de retornar à fila do servidor que os acabou de atender. Por outro lado, os que chegam, ao sistema, e encontram a fila inicial com a sua capacidade esgotada, abandonam o mesmo. O diagrama esquemático deste sistema está representado na Figura 4.33.

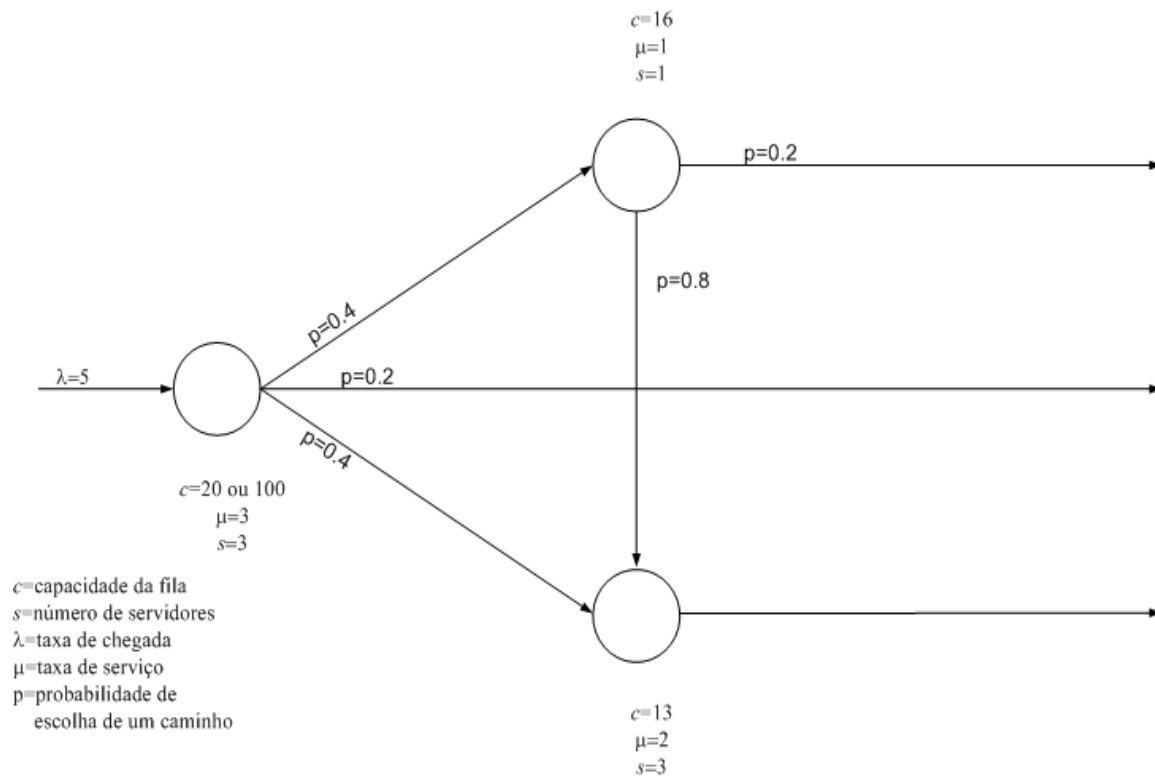


Figura 4.33: Diagrama esquemático de uma rede de filas de espera com retroacção

Ao contrário dos exemplos estudados nas secções anteriores, em que a capacidade, das filas de espera, era infinita, neste caso, todas as três filas $M/M/s$ têm capacidade limitada. Por outro lado, é um sistema onde, ao fim de um certo tempo, as suas medidas de *performance* tendem a estabilizar.

Com o objectivo de experimentar a metodologia, numa situação distinta das anteriormente estudadas, escolhemos, para medida de desempenho, o tempo de permanência

no sistema, do i -ésimo cliente que saiu, por ter sido completado o seu atendimento; para isso, era registado, para cada cliente, o respectivo tempo de permanência no sistema, à medida que estes iam saindo. Desde modo, pretendemos explicar a evolução do tempo de permanência em função da ordem, pela qual, os clientes completaram o seu atendimento.

Decidimos, também, estudar o funcionamento do sistema em duas situações distintas, correspondentes a dois valores para a capacidade da fila inicial, 20 e 100. Para as restantes filas, apenas foi considerada uma capacidade; os respectivos valores encontram-se representados na Figura 4.33.

Em relação ao modelo descrito em Schruben (1982), foram efectuadas duas modificações: um valor adicional para a capacidade da fila inicial (100) e a redução da taxa de chegadas, ao sistema, para 5, por unidade de tempo, para permitir que a fase transiente inicial fosse mais prolongada.

Após termos realizado algumas simulações e analisado o comportamento do sistema, fazendo variar o número de observações registadas, em cada *run* dos correspondentes modelos de simulação, pareceu-nos que seria adequado registar, em cada réplica, o tempo de permanência no sistema, de 500 clientes; as séries, com esta dimensão, permitem captar o funcionamento do sistema na sua fase inicial e, ao mesmo tempo, abranger a fase de equilíbrio. Esta escolha implicou uma duração variável, para cada *run* do modelo de simulação correspondente. Neste caso, cada um dos valores da série média, $\{\bar{Y}_i : i = 1, 2, \dots, 500\}$, resultou do cálculo da média, para o i -ésimo cliente a abandonar o sistema, das observações correspondentes nas 30 réplicas.

O comportamento de uma série média, para as duas capacidades da fila inicial, é ilustrado na Figura 4.34; encontra-se igualmente representada a primeira série individual, para cada uma delas.

Como podemos observar e se esperava, o comportamento das séries individuais é bastante mais instável do que a correspondente série média. Por outro lado, é nítido um comportamento não linear. A função não linear, que nos pareceu mais adequada para descrever o comportamento das séries médias, foi a curva logística. Assim, a expressão, para o metamodelo considerado, foi:

$$\bar{Y}_i = \frac{\beta_1}{1 + e^{-\frac{i-\beta_2}{\beta_3}}} + u_i, \quad i = 1, 2, \dots, 500, \quad (4.3)$$

onde β_1 é o parâmetro que representa a assíntota, β_2 representa o valor da abcissa i no ponto de inflexão e β_3 um parâmetro de escala, em i . Em Seber e Wild (2003,

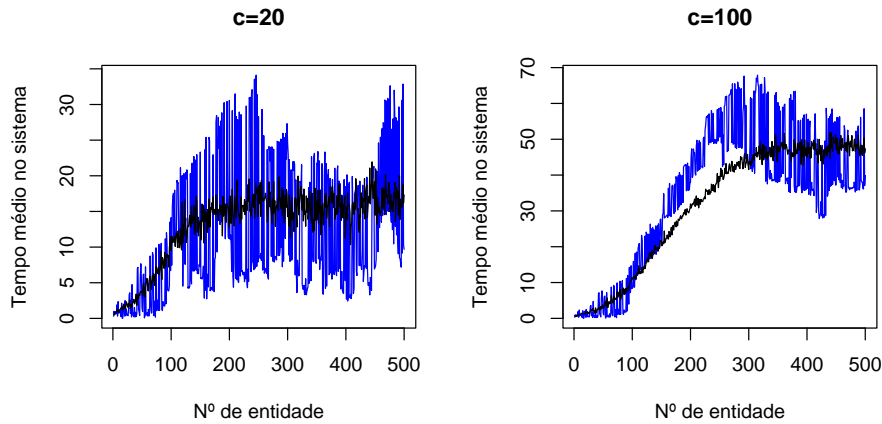


Figura 4.34: Exemplos de séries médias (rede de filas com retroacção, para $c = 20$ e $c = 100$)

p. 330), pode ser consultada uma discussão, com algum detalhe, do modelo logístico.

A estimação dos parâmetros do metamodelo, para cada uma das 100 séries médias, de cada uma das duas variações do sistema descrito, foi um processo muito moroso, uma vez que, tratando-se de um metamodelo não linear, foi necessário especificar os valores iniciais adequados, para os parâmetros $\{\beta_j : j = 1, 2, 3\}$, antes do metamodelo ser estimado, apesar destes cálculos terem sido simplificados, pela existência da função `SSlogis` na linguagem R. Por outro lado e tal como nos sistemas que foram estudados anteriormente, antes da estimação dos parâmetros do metamodelo final, foi necessário efectuar uma estimação preliminar e, de seguida, a identificação de um modelo adequado para representar a componente estocástica, u_i , do metamodelo. Neste caso, as funções, da linguagem R, adequadas para a estimação preliminar e final, foram a `nls` e a `gnls`, respectivamente; na função `nls`, é aplicado o método dos mínimos quadrados não lineares e, na função `gnls`, o método de máxima verosimilhança.

Na Figura 4.35, representamos graficamente as séries médias e os respectivos metamodelos ajustados, para as duas capacidades da fila inicial; os gráficos (a) e (b) correspondem a $c = 20$ e os gráficos (c) e (d) a $c = 100$.

Tal como anteriormente, apresentamos, na Tabela 4.21, um resumo das estimativas dos parâmetros das componentes determinísticas e o número de metamodelos ajustados ($AR(p)$ e $MA(q)$ para as componentes estocásticas). No entanto, numa percentagem bastante elevada de séries médias, não foi possível ajustar um modelo de médias móveis válido. Houve, também, situações em que foi necessário pesquisar

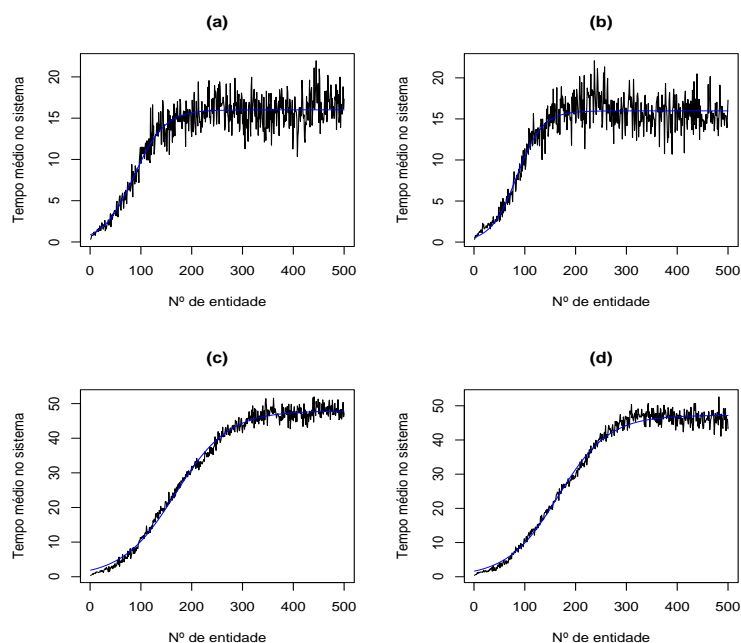


Figura 4.35: Metamodelos ajustados (2 séries, rede de filas com retroacção, para $c = 20$ e $c = 100$)

o ajuste de modelos $ARMA(p, q)$. Daí, $103=97 AR(p)+3 MA(q)+3 ARMA(p, q)$ e $164=13 RB+85 AR(p)+64 MA(q)+2 ARMA(p, q)$.

Tabela 4.21: Ajustamento das componentes determinísticas da rede de filas de espera com retroacção

	Tempo de permanência no sistema da entidade i					
	20			100		
	β_1	β_2	β_3	β_1	β_2	β_3
Máx.	16.9041	104.3296	45.3412	52.3095	199.874	68.3881
Média	15.9873	84.7077	28.9710	48.4071	167.4422	53.8806
Mín.	15.3676	66.7248	20.5785	45.8064	144.3664	45.5666
N.º Mod.	164			103		

Nos valores observados, para os parâmetros das componentes determinísticas dos metamodelos estimados, constatou-se que dois parâmetros apresentavam uma grande variabilidade (β_2 e β_3), resultando em valores de i bastante distintos, no ponto de inflexão, para cada curva ajustada.

Na Tabela 4.22, resume-se a informação relativa aos melhores modelos para as

componentes estocásticas dos metamodelos estimados, nos casos em que existiram modelos alternativos.

Tabela 4.22: Ajustamento das componentes estocásticas para a rede de filas de espera com retroacção

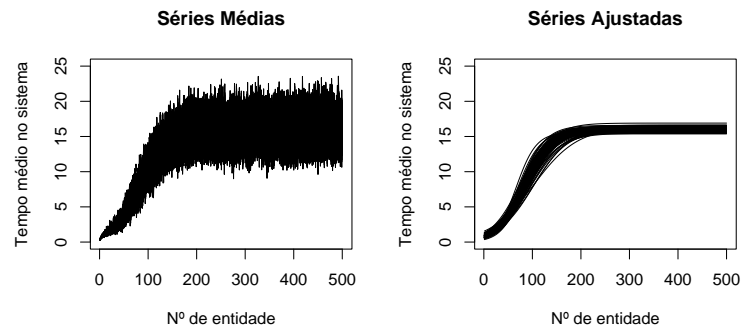
Modelo	Capacidade da Fila Inicial	
	20	100
Ruído Branco	13	
AR(1)	6	
AR(2)	5	
AR(3)	14	
AR(4)	11	4
AR(5)	14	21
AR(6)	11	11
AR(7)	9	13
AR(8)	2	12
AR(9)	1	8
AR(10)	2	5
AR(11)		6
AR(12)		5
AR(11)		6
AR(13)	1	4
AR(14)		5
AR(15)		2
MA(2)	1	
MA(5)	1	
MA(6)	4	1
MA(8)	1	
ARMA(1,1)	1	2
ARMA(4,1)	1	
ARMA(4,2)		1

Em relação às componentes estocásticas dos metamodelos ajustados, só se registaram séries de ruído branco no caso em que a capacidade da fila inicial é 20. Verifica-se, também, que não existe um modelo $AR(p)$ ou $MA(q)$ que se destaque e que, apesar da dominância dos modelos autoregressivos, foi necessário aumentar a respectiva ordem máxima.

O comportamento global, das séries médias e respectivos metamodelos ajustados, é apresentado nos gráficos da Figura 4.36. Novamente, verifica-se que, na globali-

dade, o comportamento esperado das séries médias é capturado pelas componentes determinísticas dos correspondentes metamodelos ajustados.

$$c = 20$$



$$c = 100$$

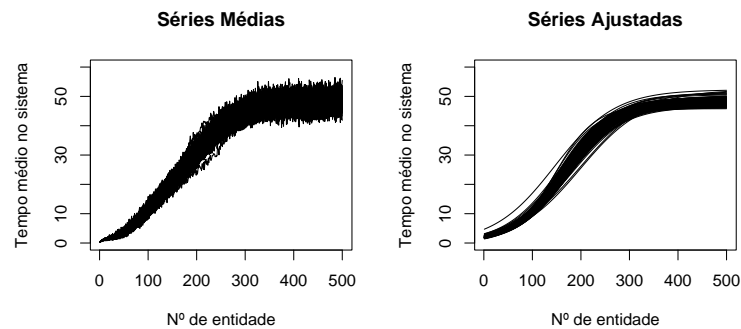


Figura 4.36: Metamodelos ajustados (100 séries, rede de filas com retroacção, para $c = 20$ e $c = 100$)

4.3.1 Ajustamento de Metamodelos para a Variância

Nesta secção, escolhemos analisar o comportamento das séries das variâncias da rede de filas de espera com retroacção, para o caso da capacidade da fila inicial ser $c = 20$.

O comportamento, de duas séries das variâncias, é ilustrado na Figura 4.37. Como podemos observar, é nítido um comportamento não linear e muito semelhante ao observado para as correspondentes séries médias. Assim sendo, considerámos, como metamodelo hipotético, o modelo logístico, cuja expressão é dada por (4.3); verificou-se, ainda, que seria conveniente admitir a heterogeneidade da variância, na estimação dos metamodelos. No entanto, para completar o estudo, foram também analisados

outros metamodelos alternativos, nomeadamente, modelos polinomiais de grau 2 e 3 e o modelo de crescimento de Gompertz, cuja expressão é dada por

$$f(x) = \beta_1 e^{-\beta_2 \beta_3^x}.$$

Em todos os casos, admitiu-se que a variância das séries das variâncias crescia em função de uma potência dos valores ajustados.

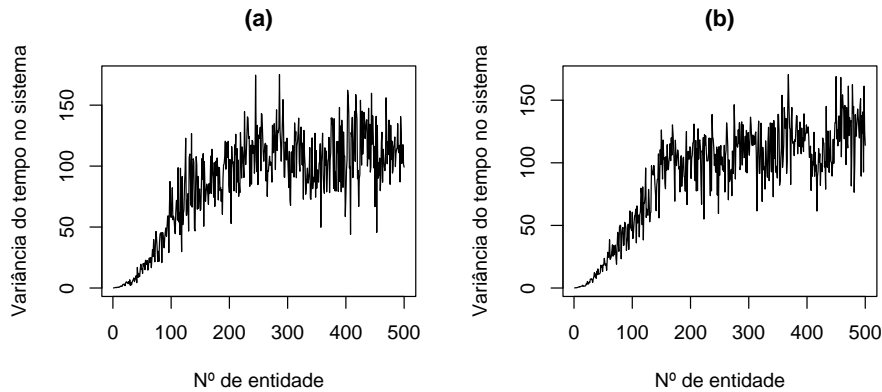


Figura 4.37: Exemplos de séries das variâncias (rede de filas com retroacção, para $c = 20$)

Ajustando, os vários metamodelos hipotéticos, à série apresentada na Figura 4.37(a) verificou-se que, tal como se esperava, os metamodelos polinomiais não conseguiam descrever, de uma forma aceitável, o comportamento das séries da variância. Em relação ao ajuste dos modelos logístico e de crescimento de Gompertz, verificou-se que ambos descreviam convenientemente as séries da variância; no entanto, o modelo de crescimento de Gompertz apresentou valores inferiores nos critérios AIC e BIC, pelo que foi seleccionado. Com base nestes resultados, procedeu-se, então, à estimação do seguinte metamodelo, para todas as 100 séries das variâncias:

$$V_i = \beta_1 e^{-\beta_2 \beta_3^i} + u_i, \quad i = 1, \dots, 500.$$

Na Figura 4.38, representamos graficamente, para as duas séries da Figura 4.37, as componentes determinísticas (curvas a azul) dos metamodelos ajustados e as respectivas séries das variâncias. Como podemos observar, o comportamento essencial das séries das variâncias é convenientemente descrito pelas componentes determinísticas dos metamodelos ajustados.

Um resumo, das estimativas dos parâmetros das componentes determinísticas dos metamodelos, pode ser consultado na Tabela 4.23.

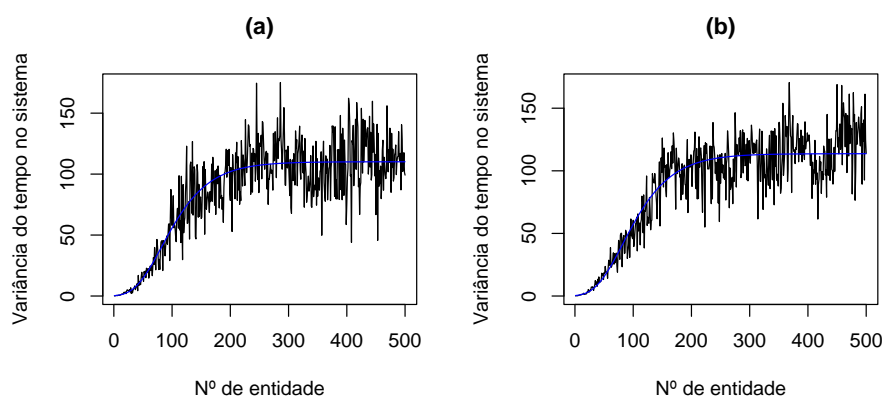


Figura 4.38: Metamodelos ajustados (2 séries das variâncias, rede de filas com retroação, para $c = 20$)

Tabela 4.23: Ajustamento das componentes determinísticas das séries das variâncias (rede de filas de espera com retroação, para $c = 20$)

Tempo de permanência no sistema			
	β_1	β_2	β_3
Máx.	119.7176	7.0529	0.9815
Média	110.7670	6.2908	0.9766
Mín.	100.9431	5.6098	0.9711
N.º Mod.	100		

Podemos constatar que, os valores estimados dos parâmetros dos metamodelos não apresentam muita variabilidade, indicando que, o comportamento da variância das séries médias é muito semelhante, em cada um dos 30 conjuntos de réplicas.

Na Tabela 4.24, registamos o número de modelos $AR(p)$ ajustados às componentes estocásticas. Neste caso, não existe um modelo que se destaque dos outros; no entanto, uma percentagem elevada é descrita pelos modelos com ordens entre 3 e 5.

Apesar de, na maioria dos casos, a ordem do modelo $AR(p)$, necessária para descrever a componente estocástica ser superior a 1, não foi possível, nestes casos, estimar um metamodelo que levasse em conta a estrutura de autocorrelação dos resíduos. Assim, os metamodelos estimados consideraram, apenas, a heterogeneidade da variância e assumiram que os erros constituíam ruído branco.

Tabela 4.24: Ajustamento das componentes estocásticas das séries das variâncias (rede de filas de espera com retroacção, para $c = 20$)

Modelo	Capacidade da Fila Inicial $c = 20$
Ruído Branco	3
AR(1)	6
AR(2)	9
AR(3)	17
AR(4)	22
AR(5)	23
AR(6)	8
AR(7)	4
AR(8)	2
AR(9)	3
AR(10)	3

Após a estimação de metamodelos para as séries das variâncias, podemos, tal como foi efectuado para os outros casos de estudo, calcular intervalos de confiança para o valor esperado do tempo de permanência no sistema, utilizando as duas expressões alternativas,

$$\text{IC1: } \hat{Y}_i \pm t_{r-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\hat{V}_i}{r}}$$

$$\text{IC2: } \bar{Y}_i \pm t_{r-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_i}{\sqrt{r}} .$$

Neste caso, o valor de r é fixo, para todos os valores de i , isto é, $r = 30$ para $i = 1, 2, \dots, 500$.

Na Figura 4.39, ilustramos, para as (mesmas) duas séries da Figura 4.37, os dois intervalos de confiança, com um nível de significância de 5%. Para o intervalo IC1, o metamodelo, ajustado à série, está representado a rosa e os limites, a vermelho; para o IC2, a série média corresponde à curva a azul claro e os respectivos limites estão a azul escuro.

Observando a Figura 4.39, podemos verificar que, os limites do intervalo de confiança IC2 são muito mais suaves do que os limites do IC1. É, igualmente, perceptível que, existe um aumento inicial na amplitude dos intervalos de confiança e que, a partir de um determinado índice i , estes valores tendem a estabilizar. Este comportamento advém do facto das medidas de *performance* do sistema estabilizarem, ao fim de um certo tempo.

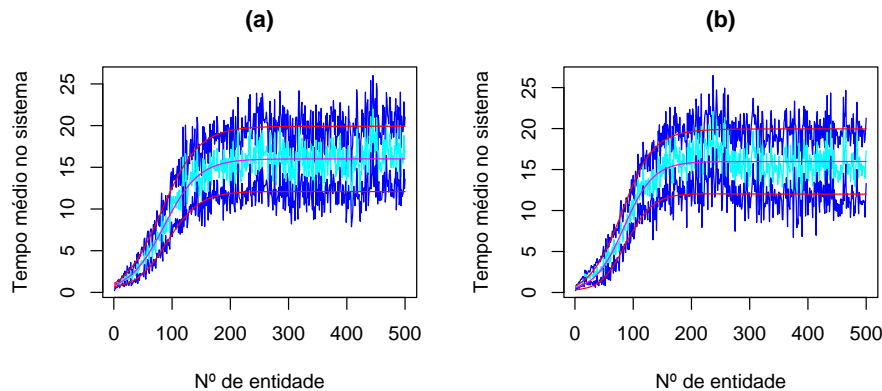


Figura 4.39: Intervalos de confiança (2 séries, rede de filas com retroacção, para $c = 20$)

4.4 Séries $y_t = bt$ com Resíduos ARMA

Nesta secção, o exemplo de aplicação, que analisamos, corresponde a uma construção artificial de um modelo, com uma componente determinística linear, ao qual se acrescentaram resíduos aleatórios. Este tipo de modelos é frequentemente escolhido como caso de estudo, quando se pretende avaliar experimentalmente um determinado procedimento; por exemplo, em Yuan e Nelson (1994), são simulados vários modelos $AR(p)$, para testar o desempenho do *método* autoregressivo (de análise de resultados), na construção de intervalos de confiança, em simulações estacionárias.

Assim, decidimos usar três modelos simples, tendo começado, por gerar, valores segundo uma recta, aos quais foram adicionados resíduos, de acordo com os seguintes modelos: $AR(2)$, $MA(4)$ e $ARMA(3,3)$. A recta considerada foi $y = bt$, com $b = 0.05$ e $t = 1, 2, \dots, 200$. Os parâmetros, escolhidos para os modelos ARMA, foram os seguintes:

- (i) modelo $AR(2)$: $\phi_1 = 0.5$ e $\phi_2 = 0.25$;
- (ii) modelo $MA(4)$: $\theta_1 = 0.3$, $\theta_2 = 0.25$, $\theta_3 = 0.1$ e $\theta_4 = 0.2$;
- (iii) modelo $ARMA(3,3)$: $\phi_1 = 0.35$, $\phi_2 = 0.25$, $\phi_3 = 0.15$, $\theta_1 = 0.25$, $\theta_2 = 0.1$ e $\theta_3 = 0.2$.

É de notar que, o modelo $AR(2)$ especificado foi um dos que foram utilizados por Yuan e Nelson (1994).

Nos três casos considerados, os valores de ε_i (as inovações) foram gerados, de acordo com um processo de ruído branco, com distribuição normal padrão.

Os modelos foram escolhidos com a finalidade acrescida de verificar se, a utilização do teste de Ljung-Box, conjugada com o critério de selecção de metamodelos AIC, permitia identificar correctamente a estrutura de autocorrelação, nos metamodelos estimados, dos resíduos das componentes determinísticas.

Assim, à semelhança dos casos anteriormente estudados, foram geradas, para cada um dos casos, 100×30 réplicas independentes dos modelos descritos e calculada a média das observações correspondentes, em cada instante t , para cada conjunto de 30 réplicas. É de salientar que, neste caso, não foi necessário recorrer ao *software* específico de simulação, tendo sido realizada a geração desses dados na linguagem R.

Na Figura 4.40, representamos uma série média típica, para cada um dos três modelos, bem como uma série individual; podemos observar que, a diferença, entre as séries individual e média, é bastante significativa.

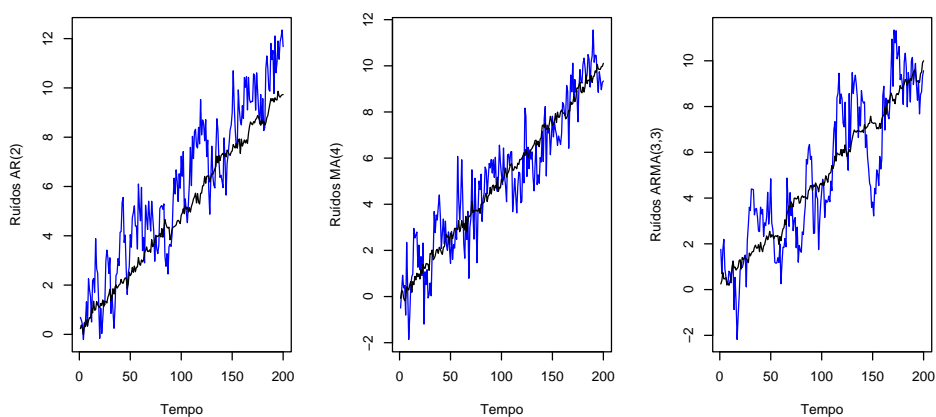


Figura 4.40: Exemplos de séries médias (séries $y_t = bt$, com resíduos AR(2), MA(4) e ARMA(3,3))

Tendo em conta o comportamento linear das séries médias, o metamodelo hipotético considerado, numa primeira análise, foi:

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + u_t, \quad \text{com } t = 1, 2, \dots, 200.$$

No entanto, verificou-se que, as estimativas, obtidas para o parâmetro β_0 , não eram significativas, pelo que, passámos a ajustar o metamodelo simplificado:

$$\bar{Y}_t = \beta_1 t + u_t, \quad \text{com } t = 1, 2, \dots, 200.$$

Após uma primeira estimação da componente determinística do metamodelo, através do método dos mínimos quadrados, analisámos a estrutura de autocorrelação dos resíduos e, em seguida, procedemos à estimação do metamodelo final, através do método da máxima verosimilhança. No entanto, como pretendíamos verificar se a utilização do teste de Ljung-Box, em conjugação com o critério AIC, permitia identificar correctamente a ordem do modelo da componente estocástica, comparámos os modelos estimados, com ordens inferiores à ordem efectiva dos modelos ARMA gerados, escolhendo o modelo com menor valor no critério AIC.

Para as séries representadas na Figura 4.40, verificou-se que, os modelos ajustados, que passaram o teste de Ljung-Box, foram, respectivamente, o AR(1), o MA(1) e o ARMA(1,1); no entanto, ao compararmos os valores do critério AIC, para os metamodelos estimados, com resíduos de acordo com os correspondentes modelos “teóricos”, verificou-se que, os últimos tinham um valor inferior, pelo que foram escolhidos.

Na Figura 4.41, encontram-se representados alguns gráficos de diagnóstico dos resíduos finais, para a série média com resíduos MA(4), que se encontra representada na Figura 4.40.

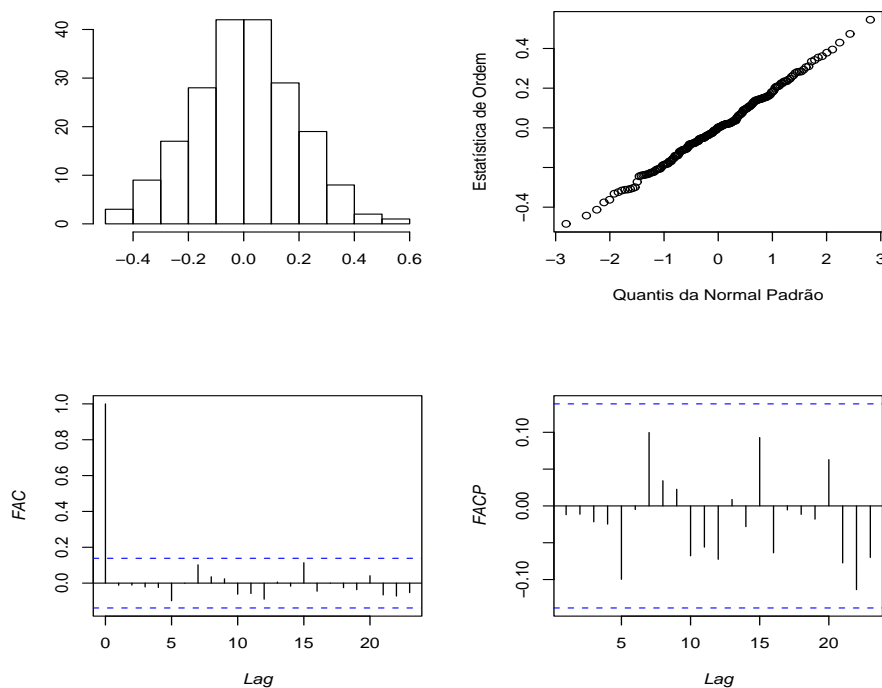


Figura 4.41: Diagnóstico dos resíduos: série $y_t = bt$, com resíduos MA(4)

Pelo aspecto do histograma dos resíduos finais, podemos concluir que a hipótese de normalidade é razoável; esta conclusão foi corroborada pelo teste de Shapiro-Wilk, o mesmo acontecendo para as outras duas séries médias.

Nas Tabelas 4.25 e 4.26, resumem-se os resultados obtidos. Note-se que, apenas se apresentam os resultados dos metamodelos que satisfizeram os critérios especificados.

Tabela 4.25: Ajustamento das componentes determinísticas: séries $y_t = bt$, com resíduos AR(2), MA(4) e ARMA(3,3)

β_1	Resíduos		
	AR(2)	MA(4)	ARMA(3,3)
Máx.	0.0511	0.0506	0.0515
Média	0.04999	0.05	0.0499
Mín.	0.0491	0.0494	0.0482
N.º Mod.	100	100	100

Ao analisarmos os resultados da Tabela 4.25, podemos constatar que, as estimativas do parâmetro β_1 , dos metamodelos ajustados, estão muito próximas do valor “teórico”, $b = 0.05$.

Tabela 4.26: Ajustamento das componentes estocásticas: séries $y_t = bt$, com resíduos AR(2), MA(4) e ARMA(3,3)

Resíduos AR(2)		Resíduos MA(4)		Resíduos ARMA(3,3)	
AR(1)	3	MA(1)	3	ARMA(1,1)	13
AR(2)	94	MA(2)	4	ARMA(3,1)	8
AR(3)	1	MA(4)	88	ARMA(3,2)	2
AR(4)	1	MA(5)	2	ARMA(1,3)	3
AR(9)	1	MA(7)	2	ARMA(2,3)	1
		MA(10)	1	ARMA(3,3)	72
				ARMA(4,3)	1

Verificámos que, para o caso das séries geradas com resíduos AR(2), em 48 séries, foi ajustado o modelo AR(1); no entanto, comparando com o metamodelo em que se ajustou o modelo AR(2), constatou-se que se obtinha um valor inferior para o critério

AIC. Para as séries com resíduos MA(4), foram ajustados 68 modelos com ordens inferiores a 4, mas, quando comparados com o modelo MA(4), este apresentava um menor valor para o critério AIC. Finalmente, para as séries com resíduos ARMA(3,3), a situação repetiu-se para 67 modelos.

Em face dos resultados obtidos, podemos concluir, que, deve ser efectivamente investigado o ajuste de modelos alternativos, para representar as componentes estocásticas dos metamodelos hipotéticos, e que o teste de Ljung-Box, conjugado com o critério AIC, permitiu identificar, de uma forma correcta, as ordens dos modelos ARMA(p, q) gerados.

O comportamento de todas as séries médias e das respectivas componentes determinísticas dos metamodelos ajustados, para os três tipos de resíduos, está representado na Figura 4.42.

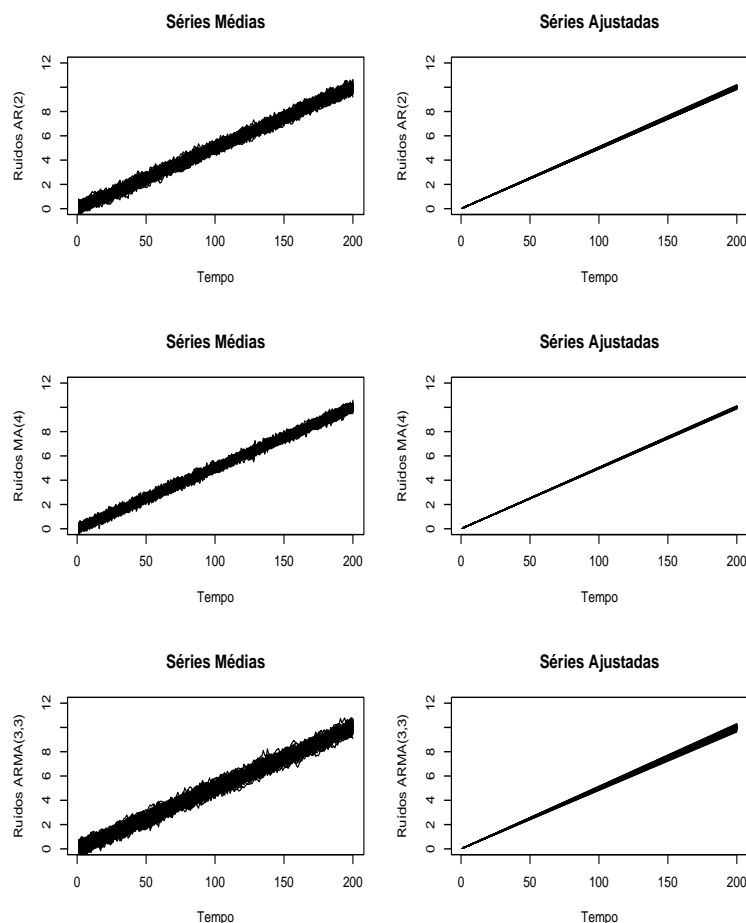


Figura 4.42: Metamodelos ajustados (100 séries $y_t = bt$, com resíduos AR(2), MA(4) e ARMA(3,3))

Neste caso, podemos constatar que, os metamodelos ajustados descrevem, de uma forma bastante adequada, o comportamento das respectivas séries. Existem, apenas, algumas discrepâncias nos valores iniciais, que resultam do facto de, ao não incluirmos o parâmetro β_0 no metamodelo estimado, se ter “filtrado” a variabilidade (constante, ao longo do tempo), que as séries médias apresentam no início.

4.4.1 Ajustamento de Metamodelos para a Variância

Na secção anterior, efectuámos a análise das séries médias, correspondentes a três modelos construídos artificialmente. Para complementar esta análise, vamos, agora, estudar as séries das variâncias para um desses casos. Assim e sem motivo especial, escolhemos analisar as séries das variâncias para o modelo cujos resíduos foram gerados de acordo com um processo MA(4).

Tratando-se de um modelo artificialmente construído, cuja componente estocástica foi gerada de acordo com um processo MA(4) estacionário, em que as inovações são ruído branco, com distribuição normal padrão, era previsível que se observaria um comportamento estacionário nas séries das variâncias. Efectivamente, ao observarmos as curvas, a preto, na Figura 4.43, podemos concluir que, os valores das variâncias, ao longo do tempo, oscilam em torno de um determinado valor constante.

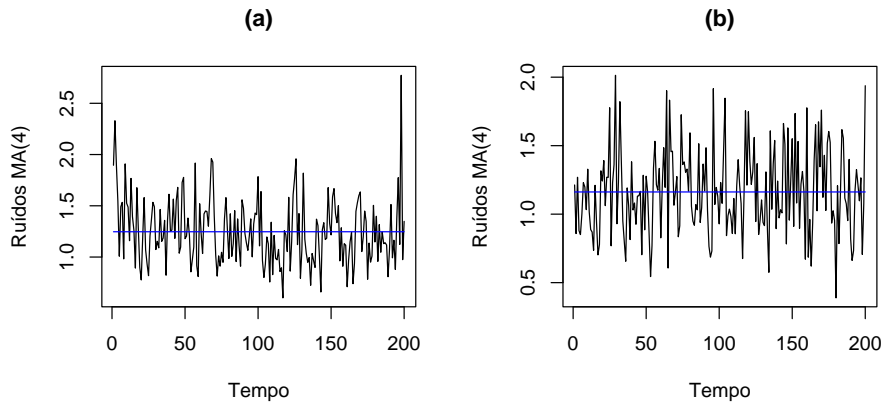


Figura 4.43: Exemplos de séries das variâncias (séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4))

Assim, considerámos, como metamodelo hipotético,

$$V_t = \beta_0 + u_t. \quad (4.4)$$

Decidiu-se, igualmente, considerar o seguinte metamodelo alternativo

$$V_t = \beta_0 + \beta_1 t + u_t.$$

No entanto, verificou-se que as estimativas, obtidas para o parâmetro β_1 , não eram significativas, pelo que o metamodelo ajustado, a todas as 100 séries das variâncias, foi o que é dado pela expressão (4.4).

Os resultados obtidos, para as componentes determinísticas e estocásticas dos metamodelos estimados, encontram-se sumariados nas Tabelas 4.27 e 4.28.

Tabela 4.27: Ajustamento das componentes determinísticas das séries das variâncias: séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4)

Parâmetro	Máximo	Média	Mínimo
β_0	1.2739	1.2080	1.1394

Tabela 4.28: Ajustamento das componentes estocásticas das séries das variâncias: séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4)

Modelo Ajustado					
Ruído Branco	AR(1)	AR(2)	AR(3)	AR(5)	AR(8)
80	15	1	2	1	1

É de salientar o registo de um número muito elevado de séries de ruído branco (80% das séries) e que, nestes casos, o parâmetro β_0 foi estimado através da média amostral; nos restantes casos, o valor de β_0 corresponde à média do processo AR(p) estimado.

A recta, a azul, em cada um dos gráficos representados na Figura 4.43, corresponde à componente determinística do respectivo metamodelo estimado.

Tal como foi abordado anteriormente, o passo seguinte, para a caracterização das medidas de desempenho do sistema, é a construção de intervalos de confiança. Neste caso, propomos, novamente, os seguintes intervalos de confiança alternativos, cujas expressões reproduzimos:

$$\text{IC1: } \hat{Y}_i \pm t_{r-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\hat{V}_i}{r}} \text{ e}$$

$$\text{IC2: } \bar{Y}_i \pm t_{r-1, 1-\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_i}{\sqrt{r}} .$$

O comportamento gráfico, para duas séries, pode ser observado na Figura 4.44. Os limites do intervalo IC1 correspondem às curvas a vermelho e os limites do intervalo

IC2 às curvas a azul escuro, enquanto que, o metamodelo estimado para a série média (curva a azul claro) se encontra representado pela curva com a cor rosa.

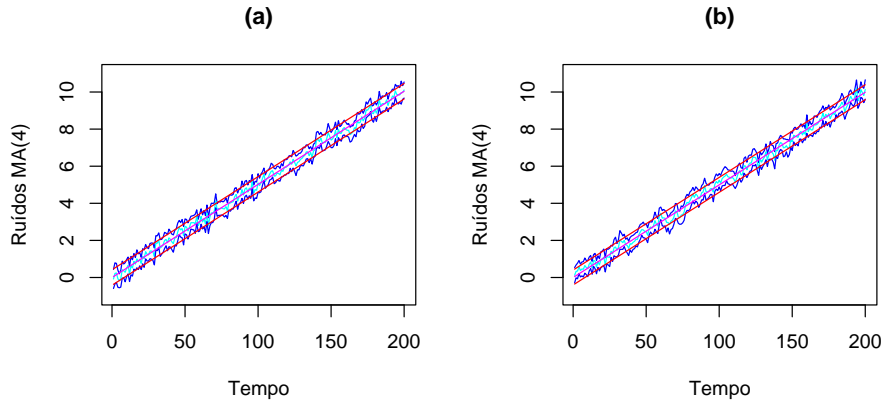


Figura 4.44: Intervalos de confiança (2 séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4))

Como podemos observar, as amplitudes dos intervalos de confiança, para cada instante t , são constantes, no caso do IC1, e muito próximas de um valor constante, no caso de IC2. Estas conclusões eram esperadas, em virtude de, na construção dos intervalos IC1, os metamodelos para as séries das variâncias corresponderem a um valor constante e, para o intervalo IC2, as séries das variâncias apresentarem um comportamento estacionário.

Como, neste caso, sabemos que o valor esperado do modelo

$$Y_t = 0.05t + \varepsilon_t + 0.3\varepsilon_{t-1} + 0.25\varepsilon_{t-2} + 0.1\varepsilon_{t-3} + 0.2\varepsilon_{t-4}$$

é dado por

$$E[Y_t] = 0.05t, \quad \text{com } t = 1, 2, \dots, 200,$$

podemos estimar a probabilidade de cobertura dos 100 intervalos de confiança IC1 e IC2, calculados para cada instante t . Na Tabela 4.29, apresentamos os resultados obtidos para os instantes 10, 30, 50... , 190.

É de salientar que, no caso do intervalo IC1, para cada um dos instantes $t = 1, 2, \dots, 200$, 100% dos intervalos calculados continham o valor esperado da resposta do sistema em estudo. Por outro lado, em relação ao intervalo IC2, a proporção mínima, máxima e média dos intervalos que continham o valor esperado foi, respectivamente, de 89% (instantes 87 e 98), 100% (instante 8) e 94.95%. Podemos, assim,

Tabela 4.29: IC a 95% para as séries $y_t = bt$, com resíduos MA(4)

	Instantes									
	10	30	50	70	90	110	130	150	170	190
IC1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
IC2	.93	.95	.96	.95	.97	.96	.96	.94	.95	.96

constatar o bom desempenho dos intervalos de confiança analisados, o que nos permite inferir, com segurança, sobre o comportamento esperado da resposta de interesse.

4.5 Conclusões da Análise Experimental

Com base na extensa experimentação efectuada, para os vários casos de estudo, algumas conclusões podem ser retiradas.

Em primeiro lugar, verificámos que, a utilização das séries médias nos permite identificar, mais facilmente, a evolução do comportamento intrínseco, ao longo do tempo, das respostas seleccionadas dos sistemas em estudo. Na quase totalidade dos sistemas analisados, seria praticamente impossível o ajustamento de metamodelos adequados a séries individuais.

Mostrámos que, os modelos clássicos de séries cronológicas podem ser usados, como metamodelos eficazes, em simulação não estacionária, tendo ilustrado essa abordagem, que também permite a estimação das medidas de desempenho usuais, através da análise de duas filas de espera, em condições de tráfego críticas. Contudo e apesar dos bons resultados obtidos, optámos por investigar, igualmente, uma perspectiva *fundamentalista*, que fosse capaz de identificar eventuais metamodelos explicativos, para o comportamento do valor esperado das respostas em análise.

Constatámos que, seguindo os passos da metodologia proposta no Capítulo 3, foi sempre possível estimar um metamodelo válido, cuja componente determinística permitia descrever globalmente o comportamento intrínseco das respostas estudadas, directamente em função do tempo, ou através de um índice indirecto, inteiro (por exemplo, número da entidade processada, como se fez no caso tratado na Secção 4.3).

Nos sistemas de filas de espera estudados, em que o factor de utilização era superior a 1.5, verificámos que as respostas analisadas apresentavam um comportamento linear e com pouca variabilidade, pelo que, foram ajustados modelos de regressão linear

simples. Por outro lado, para as situações de intensidade de tráfego próxima do valor crítico, as respostas estudadas apresentaram um comportamento mais irregular; no entanto, verificou-se que, os modelos polinomiais eram adequados para modelar esses comportamentos.

Verificaram-se, também, resultados bastante positivos na utilização de metamodelos de regressão não lineares, como se observou no caso de estudo apresentado na Secção 4.3. Neste mesmo exemplo, mostrámos que, apesar de se tratar dum modelo estacionário, conseguimos captar a evolução da resposta estudada, descrevendo, inclusivamente, a sua fase transiente.

Uma situação inesperada, que verificámos, em alguns dos sistemas estudados e em algumas das suas respostas, foi a ocorrência de um número significativo de séries de ruído branco, para descrever a componente estocástica dos metamodelos estimados, contrariando a expectativa de elevada autocorrelação em observações sucessivas. Constatou-se, ainda, que, na maioria dos outros casos, os modelos autoregressivos se destacaram dos restantes.

Tendo em conta os resultados obtidos, na experimentação dos diferentes casos de estudo, podemos concluir que, a metodologia, aqui proposta, para analisar simulações não estacionárias, através da construção de metamodelos explicativos, constitui uma abordagem extremamente válida para a análise de resultados em simulação estocástica.

5

Simulações Não Estacionárias Cíclicas

A análise experimental dos vários casos de estudo, desenvolvida no Capítulo 4, teve em consideração vários comportamentos não estacionários, com a excepção de um tipo especial de não estacionaridade – o comportamento cíclico, ou periódico.

A análise de resultados provenientes de simulações, com comportamento cíclico ou periódico, continua a ser um tópico pouco explorado na literatura especializada da simulação. Uma excepção é a breve referência, apresentada em Law e Kelton (2000), sobre a utilização do método das réplicas independentes para obter estimativas, pontuais e de intervalos de confiança, para a média cíclica do processo de resultados. No entanto, muitos sistemas reais apresentam algum tipo de comportamento cíclico, nomeadamente, em áreas como a gestão de tráfego, sistemas bancários, sistemas de inventário e de produção. Por exemplo, em problemas de gestão de tráfego, as luzes vermelha e verde dos semáforos alternam em cada direcção, fazendo com que, os comprimentos das filas e respectivos tempos de permanência no sistema oscilem, dentro de determinados limites.

Uma parte muito significativa, deste trabalho de investigação, foi, exactamente, a introdução duma metodologia que possibilitasse a abordagem deste tipo de problemas, de óbvia utilidade e aplicação na prática. Assim, foram desenvolvidos procedimentos, que permitem representar a evolução esperada, no tempo, das respostas de interesse, através de metamodelos de simulação. A componente determinística do modelo é estimada através da aplicação de métodos de regressão não-linear e da utilização de séries de Fourier, para a especificação da função a estimar. A análise dos resíduos, resultantes da estimação da componente determinística do modelo, é efectuada através

da utilização de modelos $SARIMA(p, d, q) \times (P, D, Q)_S$, isto é, modelos com uma ou mais componentes integradas mistas, entre componentes sazonais (periódicas) e componentes simples.

A metodologia, proposta neste capítulo, segue, no essencial, os passos apresentados na Secção 3.1; no entanto, o tipo de modelos, utilizado para descrever a componente estocástica, corresponde, agora, aos modelos SARIMA.

Na Secção 5.1, apresentamos alguns conceitos básicos sobre as séries de Fourier e sobre os modelos SARIMA e, na Secção 5.2, ilustramos a aplicação da metodologia proposta, através da análise de uma situação de interrupção de tráfego. Versões preliminares desta metodologia e/ou alguns resultados experimentais, então disponíveis, foram apresentados em Brandão e Porta Nova (2003a, 2004).

5.1 Alguns Conceitos Básicos

Relembremos, em primeiro lugar, a noção de função periódica.

Definição 5.1. Seja f uma função real, definida em \mathbb{R} . Diz-se que f é uma *função periódica*, se existe um número real $L > 0$ tal que, para todo o $x \in \mathbb{R}$, se tem

$$f(x + L) = f(x).$$

O número L diz-se um *período* de f ; se L for o menor inteiro positivo, nessas condições, diz-se que é um *período fundamental*.

Por uma questão de simplificação, sempre que nos referirmos a período, estaremos a considerar o período fundamental.

Definição 5.2. Uma função f diz-se *seccionalmente contínua*, no intervalo $] -L, L[$, se: f está definida em $] -L, L[$, excepto possivelmente num número finito de pontos, x_1, x_2, \dots, x_n , com $-L < x_1 < x_2 < \dots < x_n < L$; f é contínua em cada sub-intervalo $] -L, x_1[,]x_1, x_2[, \dots,]x_{n-1}, x_n[,]x_n, L[$; existem os limites de f , à esquerda e à direita de cada ponto $x_j, j = 1, \dots, n$; também existem os limites de f , à esquerda de L e à direita de $-L$.

A definição, que se segue, expressa uma função f como a soma infinita de funções seno e co-seno.

Definição 5.3. Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função periódica, com período $2L$, e seccionalmente contínua. A *série de Fourier* de f é a série dada, para todo $x \in \mathbb{R}$, por

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left[a_n \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) + b_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \right],$$

onde os coeficientes a_0, a_n e b_n , designados *coeficientes de Fourier de f* , são dados por

$$\begin{cases} a_0 = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(t) dt \\ a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(t) \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dt, \quad n > 1 \\ b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(t) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dt, \quad n > 1 \end{cases}$$

As proposições, que se seguem, permitem a simplificação da expressão dos coeficientes de Fourier, para o caso da função ser par ou ímpar.

Proposição 5.1. *Seja $g : [-L, L] \rightarrow \mathbb{R}$, com $L > 0$, uma função seccionalmente contínua.*

i) Se g for ímpar em $] - L, 0[\cup] 0, L[$, então, $\int_{-L}^L g(x) dx = 0$.

ii) Se g for par em $] - L, 0[\cup] 0, L[$, então, $\int_{-L}^L g(x) dx = 2 \int_0^L g(x) dx$.

Em consequência da Proposição 5.1, obtemos os seguintes resultados, para os coeficientes de Fourier de uma função periódica, com período $2L$, par ou ímpar, em $] - L, 0[\cup] 0, L[$.

Proposição 5.2. *Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, com $L > 0$, uma função periódica, com período $2L$, e seccionalmente contínua.*

i) Se f for ímpar em $] - L, 0[\cup] 0, L[$, então, os seus coeficientes de Fourier verificam

$$a_n = 0 \quad e \quad b_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(t) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dt.$$

ii) Se f for par em $] - L, 0[\cup] 0, L[$, então, os seus coeficientes de Fourier verificam

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(t) \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dt \quad e \quad b_n = 0.$$

No exemplo, que se segue, representamos graficamente o comportamento de uma função periódica e determinamos a expressão da sua respectiva série de Fourier.

Exemplo 5.1. Consideremos a seguinte onda triangular inclinada, definida por

$$f(x) = \begin{cases} \frac{ax}{L+\frac{L}{m}}, & 0 \leq x \leq L + \frac{L}{m}, \\ \frac{a(2L-x)}{L-\frac{L}{m}}, & L + \frac{L}{m} < x \leq 2L, \end{cases} \quad \text{e } f(x+2L) = f(x), \forall x \in \mathbb{R}. \quad (5.1)$$

Para o caso particular de $a = 3$, $m = 2$ e $L = 10$, o gráfico da função f , no intervalo $[0, 20]$, está representado na Figura 5.1 (a) e, no intervalo $[-100, 100]$, na Figura 5.1 (b).

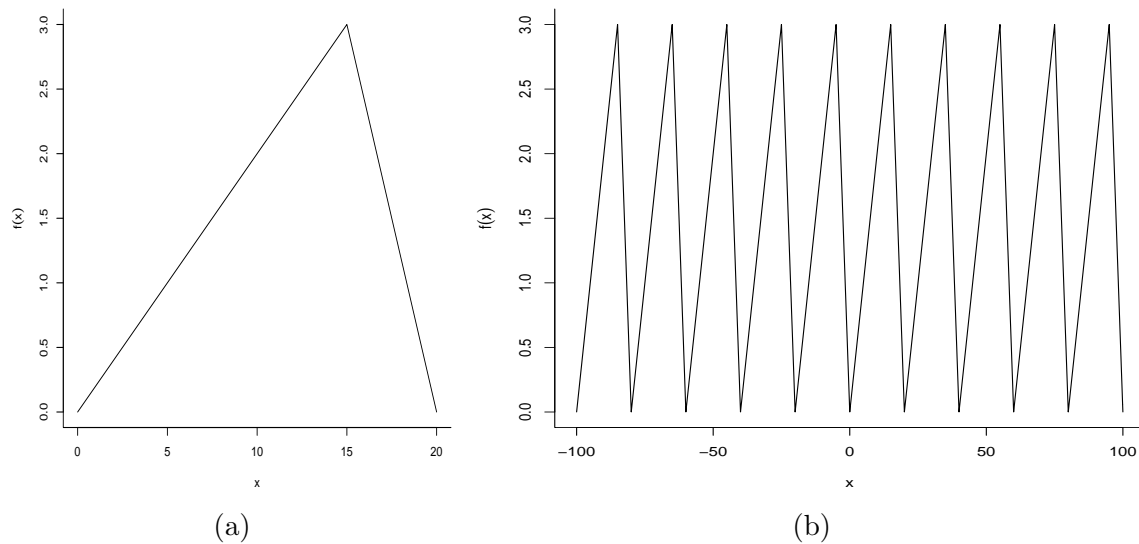


Figura 5.1: Onda triangular inclinada, com $a = 3$, $m = 2$ e $L = 10$

A série de Fourier de f é dada por

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left[a_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + b_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right], \quad (5.2)$$

com

$$\begin{cases} a_0 = a \\ a_n = \frac{2am^2 \left\{ \cos\left[\frac{(m+1)n\pi}{m}\right] - 1 \right\}}{(m^2-1)n^2\pi^2} \\ b_n = \frac{2am^2 \operatorname{sen}\left(\frac{(m+1)n\pi}{m}\right)}{(m^2-1)n^2\pi^2} \end{cases} .$$

Substituindo a_0, a_n e b_n em (5.2), vem

$$\frac{a}{2} + \frac{2am^2}{(m^2 - 1)\pi^2} \left\{ \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\cos \left[\frac{(m+1)n\pi}{m} \right] - 1}{n^2} \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\text{sen} \left[\frac{(m+1)n\pi}{m} \right]}{n^2} \text{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \right\}. \quad (5.3)$$

□

Nos capítulos anteriores, utilizámos a classe de modelos de séries cronológicas ARMA, para representar a componente estocástica dos metamodelos definidos por (3.1), e a classe ARIMA, para representar as respostas de simulações não estacionárias. Em seguida, iremos apresentar a generalização da classe dos modelos ARIMA, que permite modelar séries com componentes cíclicas, ou periódicas.

Definição 5.4. Sejam d e D dois números inteiros não negativos. $\{Y_t\}$ diz-se um *processo multiplicativo integrado sazonal* e representa-se por SARIMA(p, d, q) \times (P, D, Q) $_S$, quando

$$\Phi(B^S)\phi(B)(1 - B^S)^D(1 - B)^d Y_t = \Theta(B^S)\theta(B)\varepsilon_t, \quad \text{para } t \in \mathbb{Z},$$

onde $\{\varepsilon_i\} \sim \text{RB}(0, \sigma_\varepsilon^2)$ é uma sequência de variáveis aleatórias i.i.d. (ruído branco), com média 0 e variância σ_ε^2 , e em que os polinômios, de cada um dos seguintes pares,

$$\phi(z) = 1 - \phi_1 z - \phi_2 z^2 - \dots - \phi_p z^p \quad \text{e} \quad \theta(z) = 1 - \theta_1 z - \theta_2 z^2 - \dots - \theta_q z^q$$

$$\Phi(z) = 1 - \Phi_1 z - \Phi_2 z^2 - \dots - \Phi_P z^P \quad \text{e} \quad \Theta(z) = 1 - \Theta_1 z - \Theta_2 z^2 - \dots - \Theta_Q z^Q$$

não têm raízes no círculo unitário e também não têm raízes comuns, ou seja, $\phi(z) \neq 0$, $\theta(z) \neq 0$, $\Phi(z) \neq 0$ e $\Theta(z) \neq 0$ para $|z| \leq 1$.

Na definição anterior, d representa a ordem de diferenciação, D a ordem de diferenciação sazonal e S o período.

5.2 Exemplo: Tráfego Interrompido

A aplicação, da metodologia proposta, na análise de simulações não estacionárias cíclicas, é ilustrada através de uma versão, ligeiramente modificada, do exemplo

clássico, da literatura de simulação, *Single-Lane Traffic Analysis*, utilizado, por exemplo, em Nozari, Arnold e Pegden (1984) e Pritsker e O'Reilly (1999), versão essa que passamos a enunciar.

Numa estrada, com duas faixas e trânsito a circular nos dois sentidos, uma das faixas necessita de ser reparada, pelo que foi encerrada, numa extensão de 500 metros, tendo sido colocados semáforos, nas extremidades da zona encerrada, para permitir controlar o tráfego. Os semáforos permitem a circulação, num determinado sentido, por um período de tempo especificado: quando a luz dum semáforo passa a verde, os veículos, que estão à espera, iniciam o seu andamento, passando, pelo semáforo, de 2 em 2 segundos; um veículo que chegue e não encontre veículos parados, quando a luz do semáforo está verde, prossegue a sua marcha, sem qualquer atraso. Suporemos que o tempo necessário, para atravessar a zona de reparação, é de 60 segundos. Um ciclo (completo) de luzes dos semáforos consiste em: verde no sentido 1 (vermelho no sentido 2), ambas as luzes vermelhas, verde no sentido 2 (vermelho no sentido 1) e, novamente, ambas as luzes vermelhas; depois, este ciclo repete-se. Ambas as luzes se mantêm vermelhas durante 55 segundos, para permitir que os veículos em trânsito passem a zona em reparação, antes do tráfego do outro sentido se iniciar. Durante a maior parte do dia, os tempos, entre chegadas consecutivas dos veículos, seguem uma distribuição exponencial, com um valor médio de 12 segundos, se vierem no sentido 1, e 9 segundos, se vierem no sentido 2. No entanto, no fim do dia, existe uma hora de ponta, em que a média do tempo entre chegadas consecutivas, no sentido 2, diminui para metade. Na Figura 5.2, encontra-se representado o diagrama esquemático deste sistema. O objectivo é determinar ciclos de luzes adequados, para os períodos de tráfego normal e de ponta, por forma a minimizar os tempos médios de espera, em ambos os sentidos.

Para além do objectivo principal, especificado no enunciado deste problema de tráfego, tínhamos outro objectivo complementar, neste trabalho, que era investigar a possibilidade de utilizar a metodologia, por nós proposta, para construir modelos adequados, que pudessem caracterizar o comportamento do sistema, tanto em condições de tráfego normais, como em condições de tráfego congestionado. Duas medidas, de natureza diferente, foram analisadas, com este propósito: o comprimento médio da fila e o tempo médio de permanência no sistema, para cada um dos sentidos.

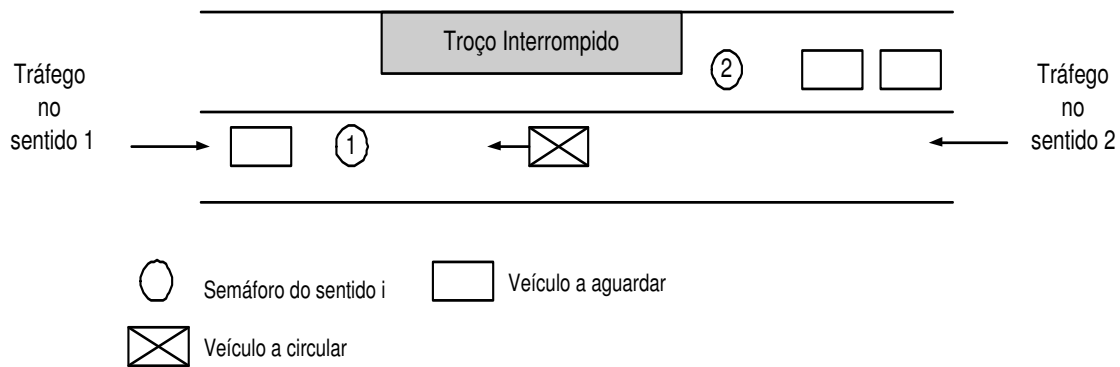


Figura 5.2: Diagrama esquemático do exemplo de tráfego interrompido

Para avaliar, objectivamente, a metodologia e à semelhança do que já tínhamos feito nos capítulos anteriores, realizámos uma experiência de Monte Carlo, que consistiu em 100 repetições do procedimento básico da metodologia proposta, cada uma delas baseada em 30 réplicas independentes do modelo de simulação, num total de 100×30 execuções independentes, para cada uma das duas situações consideradas (tráfego normal e hora de ponta).

Cada modelo de simulação tinha uma duração, de referência, de 3600 segundos (1 hora); contudo, a duração efectiva, de cada *run*, variou, pois a execução, de cada réplica, só terminava quando a última entidade, que chegasse, ao sistema, antes do segundo 3600, abandonasse o mesmo. No início de cada simulação, as filas encontravam-se vazias, chegando, a primeira entidade, a cada uma delas, no instante zero. O comprimento da fila (em cada um dos sentidos) foi registado a intervalos de tempo regulares, cada um com uma amplitude de 10 segundos, ou seja, para $t = 10, 20, \dots, 3600$, começando no início da luz vermelha do sentido oposto. De seguida, foi calculada a média das observações correspondentes, em cada uma das 30 réplicas. O tempo de permanência, no sistema, foi ordenado, por instante de chegada das entidades ao sistema, recolhendo-se, apenas, a primeira observação em cada intervalo de 10 segundos e calculando, posteriormente, a média das observações correspondentes, nas 30 réplicas. As observações adicionais, em cada intervalo de 10 segundos, foram rejeitadas, para manter a independência das usadas para o cálculo da série cronológica média.

5.2.1 Situação de Tráfego Normal

Considerando a situação de tráfego normal, simulámos o tempo de duração da luz verde, nos dois sentidos, fazendo-a variar, de 5 em 5 segundos, em torno da duração de 60 segundos, incluindo-se, no intervalo analisado, os valores sugeridos por Pritsker e

O'Reilly (1999). Analisando o tempo médio de espera, para 30 réplicas independentes do correspondente modelo de simulação, em cada uma das duas filas, e o tempo de espera global, ou seja, o tempo de espera dos veículos, independentemente do sentido donde vinham, chegámos à conclusão que, os melhores resultados eram obtidos quando se fixava 50 segundos, para a duração da luz verde do sentido 1, e 60 segundos, para o sentido 2. Assim, para as condições de tráfego normal, podemos representar o ciclo *afinado* (ou “otimizado”) de luzes dos semáforos por 50-55-60-55. Na Tabela 5.1, resumimos os resultados obtidos.

Tabela 5.1: Tráfego normal: tempo médio de espera *vs.* duração do ciclo

Ciclo	Tempo de Espera			
		Sent. 1	Sent. 2	Global
45-55-55-55	Máximo	93.479	93.502	89.533
	Média	79.733	80.045	79.941
	Mínimo	73.651	69.484	74.361
40-55-60-55	Máximo	153.551	78.115	109.170
	Média	97.662	71.456	82.661
	Mínimo	81.319	64.102	75.361
45-55-60-55	Máximo	90.847	80.597	83.954
	Média	83.991	74.942	78.864
	Mínimo	70.854	65.724	73.049
50-55-60-55	Máximo	84.682	83.889	82.685
	Média	78.779	78.685	78.745
	Mínimo	74.443	70.186	73.431
55-55-60-55	Máximo	82.624	93.843	86.398
	Média	77.101	83.583	80.849
	Mínimo	68.817	76.021	75.808
55-55-65-55	Máximo	87.413	82.354	81.953
	Média	80.788	77.202	78.750
	Mínimo	76.111	70.463	75.181
60-55-70-55	Máximo	86.574	86.600	84.716
	Média	80.563	78.583	79.440
	Mínimo	74.719	72.138	74.290

Em relação à procura de metamodelos explicativos, também analisámos, em primeiro lugar, o comportamento do sistema nas condições de tráfego normais. Representamos graficamente, nas Figuras 5.3 e 5.4, para a séria cronológica média, o

comprimento médio da fila e o tempo médio de permanência no sistema, nos sentidos 1 e 2.

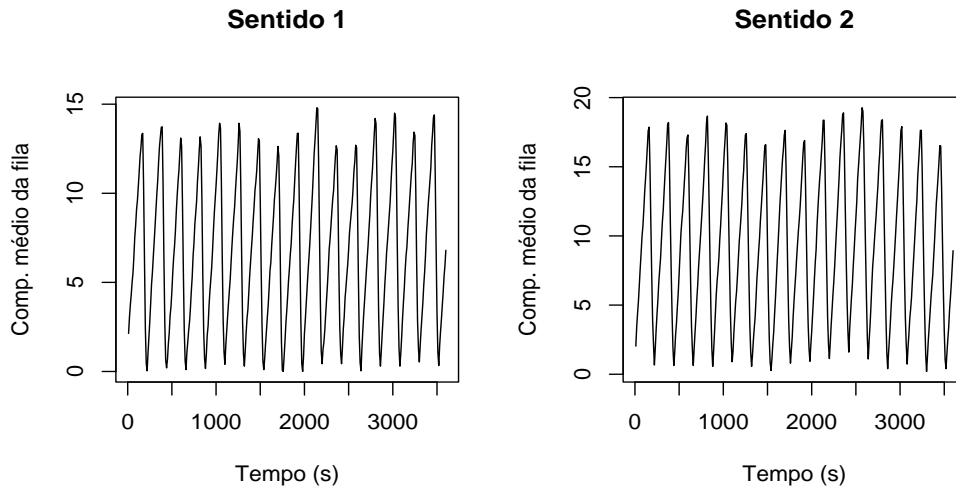


Figura 5.3: Comprimento médio da fila, nos dois sentidos (tráfego normal)

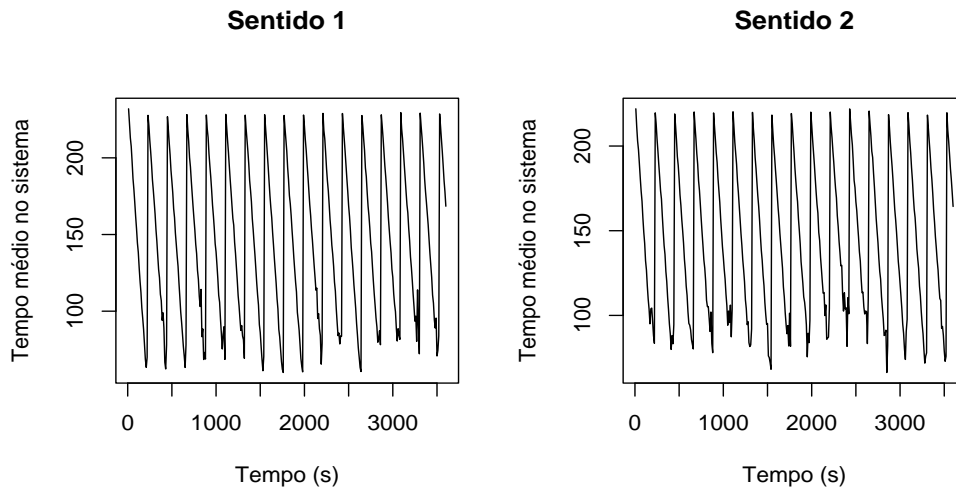


Figura 5.4: Tempo médio no sistema, nos dois sentidos (tráfego normal)

Atendendo ao comportamento cíclico, ou periódico, das medidas em estudo, decidimos, numa primeira fase, tentar ajustar algumas ondas conhecidas a estas séries, nomeadamente, a onda dente de serra, a onda triangular, etc. Os resultados obtidos foram pouco satisfatórios, surgindo, assim, a necessidade de definir uma onda triangular específica (inclinada), cujo valor máximo é atingido a uma distância L/m de L , sendo L a metade do valor do período. A expressão da onda, aqui descrita, é dada pela equação (5.1). Definida a equação da onda a ajustar e calculada a correspondente expressão da sua série de Fourier, dada pela equação (5.3), onde foram considerados

18 termos, procedemos ao ajustamento, através do método dos mínimos quadrados não lineares, da componente determinística do seguinte metamodelo:

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + f(t; \boldsymbol{\beta}) + u_t, \quad \text{com } t = 1, 2, \dots, 360, \quad (5.4)$$

onde β_0 é um parâmetro, incluído no metamodelo, para permitir a translação no eixo dos y , $\boldsymbol{\beta}$ é o vector dos parâmetros da função f , definida por (5.1), isto é, $\beta_1 = a$, $\beta_2 = m$ e $\beta_3 = L$, e u_t é a representação da componente estocástica, descrita por um modelo SARIMA.

Embora a análise tenha sido efectuada para ambos os sentidos de tráfego, só iremos apresentar os gráficos correspondentes ao sentido 1, pois, os resultados obtidos, para os dois sentidos, foram muito semelhantes.

Na Figura 5.5, estão representadas, para o sentido 1, as séries originais (a tracejado) e as correspondentes séries ajustadas (linha azul), para as duas medidas anteriormente mencionadas.

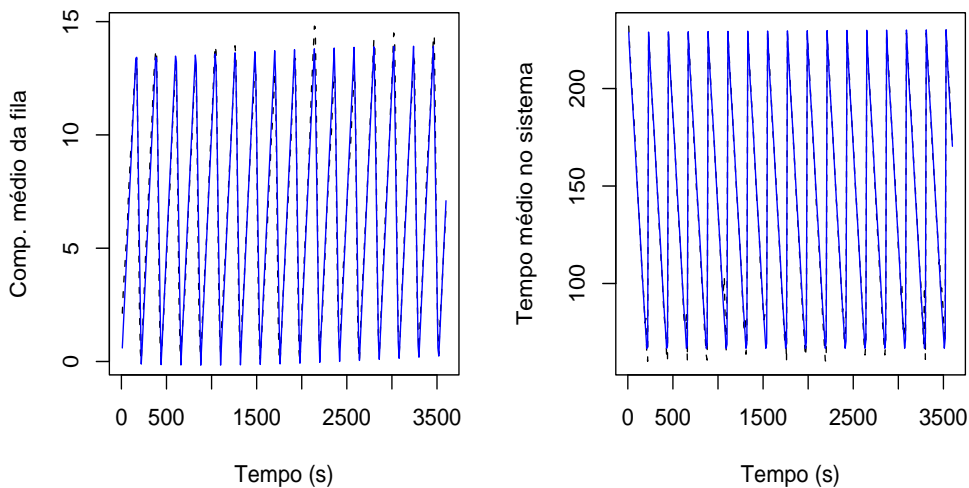


Figura 5.5: Comprimento da fila e tempo no sistema, médios - Séries originais e ajustadas (sentido 1, tráfego normal)

Comparando as duas curvas, verificamos que, para cada uma das medidas, ambas as séries (a original e a ajustada) têm, basicamente, o mesmo comportamento, indicando que, a componente determinística, do metamodelo ajustado, representa correctamente as séries originais. Só uma análise mais detalhada, a ampliações das figuras anteriores (ver a Figura 5.6), revela alguns desvios, pouco significativos, entre as duas curvas, para cada uma das medidas em estudo.

Na Tabela 5.2, resumimos os resultados obtidos, para as séries representadas nas Figuras 5.3 e 5.4.

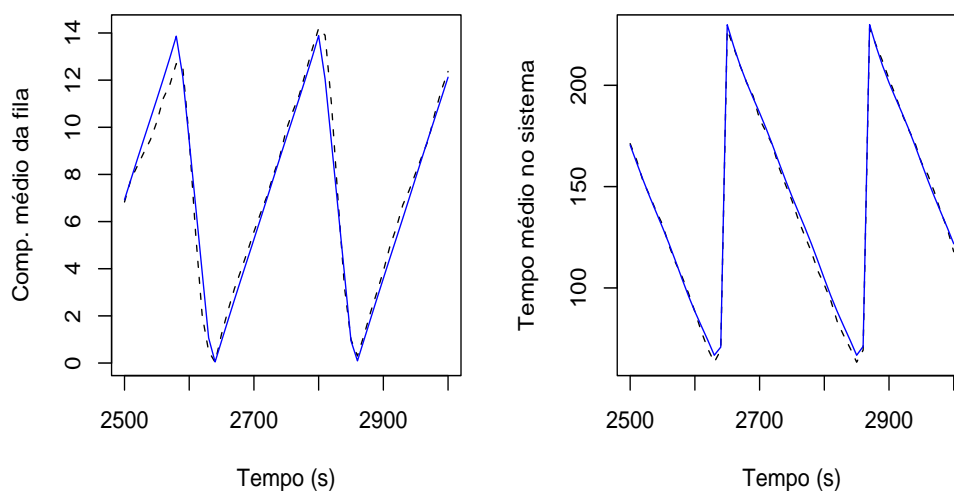


Figura 5.6: Comprimento da fila e tempo no sistema, médios - Séries originais e ajustadas (de 2500 a 3000 seg.)

Tabela 5.2: Ajustamento da componente determinística (1 série, tráfego normal)

Parâmetro	Comp. fila sentido 1		Tempo sistema sentido 1	
	Estimativa	Desvio padrão	Estimativa	Desvio padrão
β_0	-0.3029	0.0801	234.6072	0.6036
β_1	14.3565	0.14	-183.7008	1.1034
β_2	1.9006	0.0224	0.9302	0.0024
β_3	10.9798	0.0021	10.9981	6×10^{-4}
Parâmetro	Comp. fila sentido 2		Tempo sistema sentido 2	
	Estimativa	Desvio padrão	Estimativa	Desvio padrão
β_0	-0.3206	0.095	224.1737	0.5668
β_1	18.2482	0.1658	-169.8637	1.0345
β_2	2.2778	0.0318	0.9352	0.003
β_3	10.9815	0.002	10.9978	7×10^{-4}

Identificada a componente determinística do metamodelo, procedemos à análise dos resíduos obtidos. Assim, aplicamos a metodologia de Box-Jenkins, seguindo as três etapas usuais: identificação, estimação e avaliação do diagnóstico. A identificação das ordens, das várias componentes do modelo SARIMA, é efectuada através do exame da função de autocorrelação (FAC) e da função de autocorrelação parcial (FACP) estimadas. Em primeiro lugar, é necessário escolher as duas ordens de di-

ferenciação, sazonal (D) e não sazonal (d), por forma a que a série resultante seja estacionária. De seguida, passamos à identificação das ordens p , q , P , e Q . As ordens P e Q devem ser identificadas, a partir da análise da FAC e FACP estimadas da série cronológica (média), nas ordens múltiplas de S , enquanto que, as ordens p e q devem ser identificadas, também a partir da análise das FAC e FACP estimadas da série, mas nas ordens $1, 2, \dots, S - 1$. Na Figura 5.7, estão representadas a FAC e a FACP estimadas dos resíduos obtidos, após ter sido ajustada a componente determinística do metamodelo, para o comprimento médio da fila no sentido 1, antes e depois da primeira diferenciação sazonal.

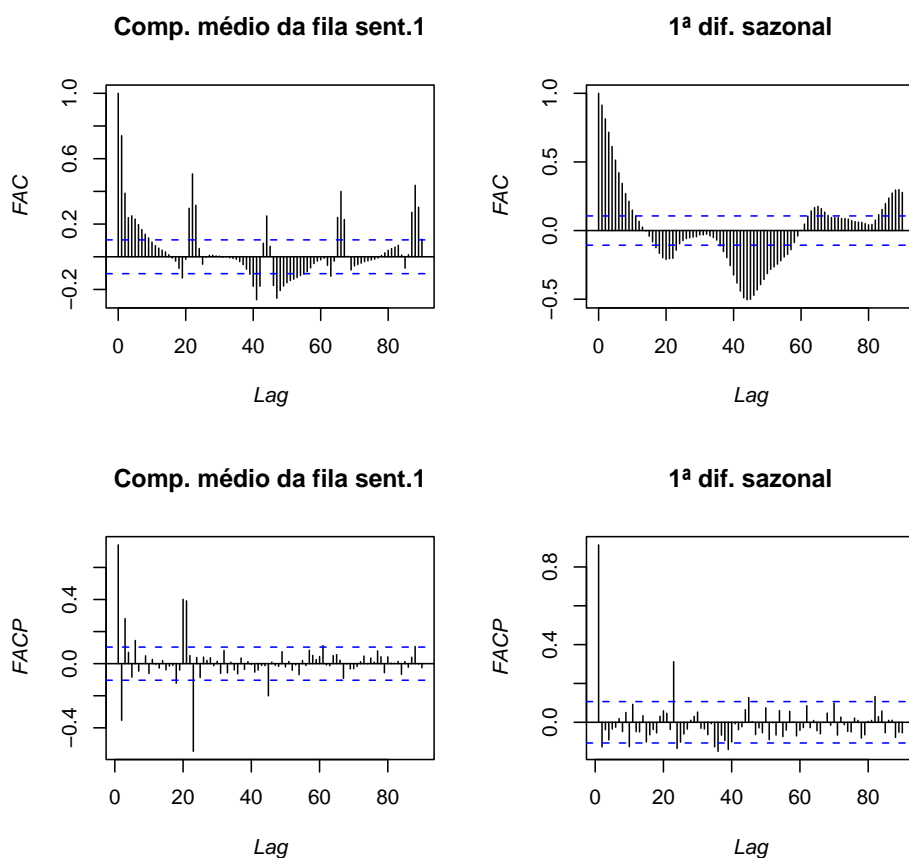


Figura 5.7: FAC e FACP estimadas do comprimento médio fila do sentido 1

Como podemos observar, a identificação das ordens, do modelo SARIMA, é um processo complexo. Assim, a escolha, das respectivas ordens, foi efectuada de uma forma iterativa, em que, para cada modelo candidato, se estimaram os respectivos parâmetros, através do método da máxima verosimilhança, e, de seguida, se verifi-

cava se o modelo passava no teste de Ljung-Box; o processo terminava, quando era identificado um modelo SARIMA, que passava o referido teste.

No caso das séries representadas nas Figuras 5.3 e 5.4, ajustámos o modelo SARIMA(4, 0, 0) \times (0, 1, 3)₂₂ ao comprimento médio da fila no sentido 1, o modelo SARIMA(2, 0, 0) \times (0, 1, 1)₂₂ ao comprimento médio da fila no sentido 2 e o modelo SARIMA(1, 0, 0) \times (0, 1, 1)₂₂ ao tempo médio de permanência no sistema nos sentidos 1 e 2.

Após a estimação e validação dos metamodelos, estamos em condições de responder a algumas questões de interesse prático, como, por exemplo:

(i) A que distância devem ser colocados os semáforos, por forma a acomodar todos os carros à espera, sem perturbar o trânsito nos cruzamentos contíguos ao troço em obras?

O valor máximo, para o comprimento médio da fila do sentido 1, é aproximadamente 14 (valor dado por $\beta_0 + \beta_1$) e 18 para o sentido 2. Considerando, para comprimento médio de um veículo, 4.5 metros e que, por exemplo, 0.5 metros devem separar os veículos (parados) adjacentes, então, os semáforos devem ser colocados às distâncias de 70 e 90 metros dos cruzamentos, para o sentido 1 e 2, respectivamente.

(ii) Na pior das hipóteses, qual é o valor máximo para o tempo que um condutor necessita, para atravessar o troço em reparação, desde que aí chega (ou seja, o máximo do tempo médio de permanência no sistema)?

Nesta caso, a resposta, a esta questão, é dada pelo valor do parâmetro β_0 , ou seja, em condições de tráfego normal, o máximo do tempo médio de permanência, no sistema, é de, aproximadamente, 235 e 224 segundos, para os sentidos 1 e 2, respectivamente.

O processo, que acabámos de descrever, foi, depois, repetido para as restantes 99 séries médias, de cada medida do sistema em estudo. Na Tabela 5.3, apresentamos um resumo das estimativas dos parâmetros das componentes determinísticas dos metamodelos ajustados. Para cada parâmetro estimado, determinámos os valores máximo, mínimo e médio, de cada um dos 100 metamodelos ajustados.

Analisando os resultados da Tabela 5.3, podemos verificar que, de um modo geral, as estimativas dos parâmetros, dos metamodelos ajustados às componentes determinísticas, apresentam pouca variabilidade, em cada um dos conjuntos de 100 séries.

Salientamos que, em quatro (das 100) séries médias da medida “tempo médio de permanência no sistema no sentido 1”, ao ajustarmos o metamodelo, definido em (5.4), os resultados produzidos foram bastante maus. Como, neste exemplo, o

Tabela 5.3: Ajustamento das componentes determinísticas (100 séries, tráfego normal)

Parâmetro	Comp. fila sentido 1			Tempo sistema sentido 1		
	Máx.	Média	Mín.	Máx.	Média	Mín.
β_0	-0.1407	-0.4040	-0.5437	236.5071	235.0022	232.2045
β_1	14.9557	14.4971	14.0503	-177.0055	-185.3017	-190.617
β_2	1.9196	1.8942	1.8707	0.9596	0.9300	0.9246
β_3	10.9856	10.9789	10.976	11.0019	10.9985	10.9964
Parâmetro	Comp. fila sentido 2			Tempo sistema sentido 2		
	Máx.	Média.	Mín.	Máx.	Média	Mín.
β_0	0.332	-0.1546	-0.4949	224.6263	222.4719	220.4993
β_1	18.6964	18.1689	17.6701	-152.494	-164.001	-170.696
β_2	2.3093	2.2684	2.2147	0.9713	0.9529	0.9307
β_3	10.9863	10.9826	10.9769	11.0041	10.9999	10.9934

valor do período era conhecido ($2\beta_3 = 22$), procedeu-se à estimação de um novo metamodelo, onde o valor de β_3 foi fixado, *a priori*, e não estimado pelo procedimento de metamodelação; nestas condições, os valores então obtidos, para os parâmetros β_0 e β_1 , após a estimação de novos metamodelos, já foram da ordem de grandeza dos restantes metamodelos.

Em relação aos modelos ajustados às componentes estocásticas dos metamodelos, que se encontram discriminados na Tabela 5.4, podemos observar que os modelos SARIMA ajustados são bastante diferenciados; no entanto, para todas as medidas, o modelo com maior percentagem de ajustes é o SARIMA(1, 0, 0) \times (0, 1, 1)₂₂, o que corresponde a quase 2/3 dos casos.

5.2.2 Situação de Tráfego em Hora de Ponta

Do ponto de vista da ilustração da metodologia, o período de hora de ponta revelou-se uma situação muito interessante, se o ciclo das luzes dos semáforos (50-55-60-55) se mantiver inalterado. Na Tabela 5.5, apresentamos os valores para o tempo médio de espera, em cada fila, e para o tempo médio (global) de espera, calculados a partir dos resultados de 30 réplicas independentes.

Os resultados da análise, de ambas as respostas do sistema, para o sentido 1, foram similares aos resultados descritos para a situação de tráfego normal, com exceção dos

Tabela 5.4: Modelos ajustados às componentes estocásticas (100 séries, tráfego normal)

Modelo	Sentido 1		Sentido 2	
	Comp. da fila	Tempo no sist.	Comp. da fila	Tempo no sist.
Ruído Branco		4		
SARIMA(0, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂		3		
SARIMA(1, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	68	68	70	51
SARIMA(2, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	9	15	15	24
SARIMA(3, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	3	4		5
SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂		1	1	3
SARIMA(5, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	1	2	1	1
SARIMA(6, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂			1	
SARIMA(7, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	1			
SARIMA(9, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	1			
SARIMA(11, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	1			
SARIMA(14, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	1			
SARIMA(5, 0, 6) × (0, 1, 1) ₂₂				1
SARIMA(1, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂	6		2	1
SARIMA(2, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂	2		2	2
SARIMA(3, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂		1	1	1
SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂				1
SARIMA(5, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂			1	
SARIMA(11, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂	1			
SARIMA(12, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂	1			
SARIMA(1, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂	2		5	1
SARIMA(2, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂				3
SARIMA(3, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂				4
SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂	1			
SARIMA(5, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂	1			
SARIMA(1, 0, 0) × (0, 1, 4) ₂₂				1
SARIMA(2, 0, 0) × (0, 1, 4) ₂₂		1	1	
SARIMA(0, 0, 1) × (2, 1, 0) ₂₂		1		
SARIMA(2, 0, 0) × (2, 1, 0) ₂₂				1
SARIMA(1, 1, 0) × (0, 1, 4) ₂₂	1			

Tabela 5.5: Tráfego Congestionado: tempo médio de espera do ciclo 50-55-60-55

Ciclo	Tempo de Espera			
	Sent. 1	Sent. 2	Global	
50-55-60-55	Máximo	87.684	887.882	582.591
	Média	80.204	776.965	509.603
	Mínimo	72.075	694.512	446.418

modelos SARIMA ajustados. No entanto, quando consideramos o sentido 2, ambas as respostas crescem sem limites, como podemos observar na Figura 5.8. Esta era uma situação previsível, uma vez que, neste caso, o factor de utilização, da fila do sentido 2, é superior a 1.

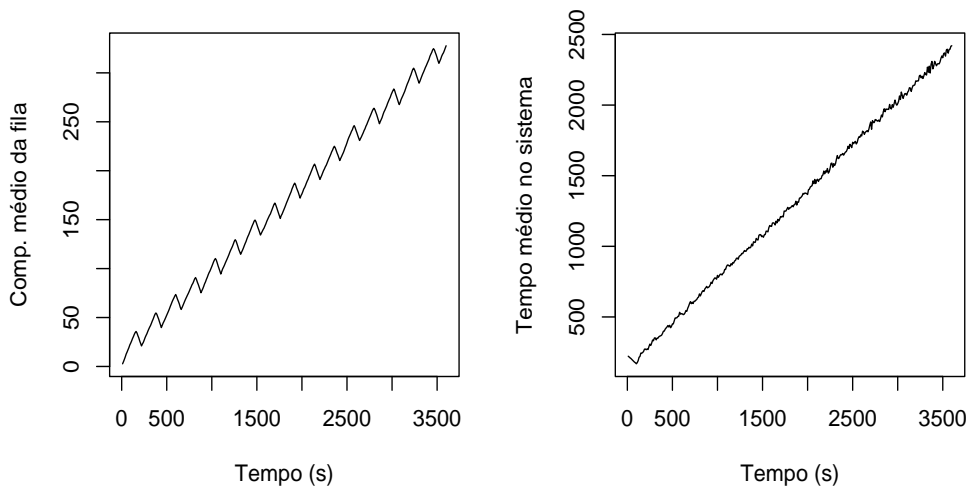


Figura 5.8: Comprimento da fila e tempo no sistema (médios, sentido 2 e tráfego congestionado)

Podemos observar que, o comprimento médio da fila apresenta uma tendência de crescimento linear, com um comportamento cíclico sobreposto. Por outro lado, para o tempo médio de permanência no sistema, apenas é visível uma tendência linear crescente. Consequentemente, o tipo de metamodelo, a ajustar, é distinto para os dois casos.

Analisemos, em primeiro lugar, o comprimento médio da fila do sentido 2. Seja $\bar{Y}_1, \bar{Y}_2, \dots, \bar{Y}_{360}$ a representação da série média correspondente aos instantes, em segundos, 10, 20, \dots , 3600. Consideremos $\bar{Z}_i = \bar{Y}_{i+1} - \bar{Y}_i$ a diferença das observações espaçadas de uma unidade de tempo, para $i = 1, 2, \dots, 359$ e $\bar{Z} = \frac{1}{359} \sum_{i=1}^{359} \bar{Z}_i$ a respectiva média. Fazemos a seguinte transformação, $\bar{V}_i = \bar{Y}_i - t\bar{Z}$, com $t = 1, 2, \dots, 360$, e,

de seguida, definamos $\bar{W}_i = \bar{V}_{i+22} - \bar{V}_i$, que corresponde à diferença das observações espaçadas de 22 unidades de tempo, para $i = 1, 2, \dots, 338$, e calculemos a sua média, $\bar{W} = \frac{1}{338} \sum_{i=1}^{338} \bar{W}_i$.

Após as transformações indicadas, vamos considerar o seguinte metamodelo, para descrever o comprimento médio da fila, ao longo do tempo:

$$\bar{Y}_t = \left(\bar{Z} + \frac{\bar{W}}{22} \right) t + \beta_0 + f(t, \boldsymbol{\beta}) + u_t, \quad \text{com } t = 1, 2, \dots, 360, \quad (5.5)$$

onde f representa a onda triangular, definida por (5.1), e u_t representa a componente estocástica, descrita por um modelo SARIMA.

Considerando o metamodelo (5.5), procedemos à estimação da sua componente determinística, através do método dos mínimos quadrados não lineares, ou seja, estimámos os parâmetros da função f e o parâmetro β_0 da série transformada

$$\bar{Y}_t - \left(\bar{Z} + \frac{\bar{W}}{22} \right) t.$$

As estimativas dos parâmetros, para a série apresentada, estão registadas na Tabela 5.6.

Na Figura 5.9(a), estão representadas a série original (a tracejado) e a correspondente série ajustada (linha contínua azul) e, na Figura 5.9(b), um excerto (ampliado) das séries anteriores, para se poderem distinguir.

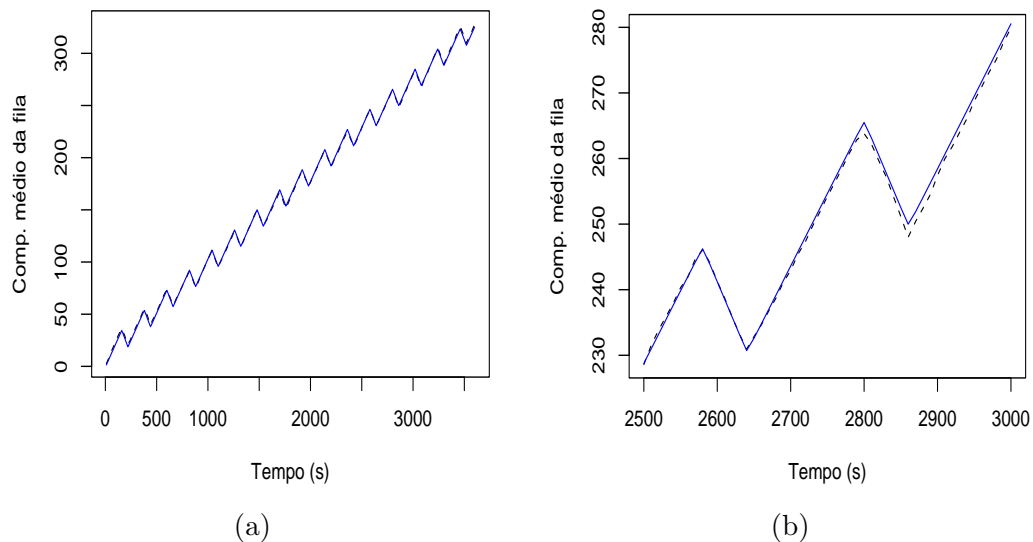


Figura 5.9: Comprimento médio da fila no sentido 2 (tráfego congestionado)

Novamente, o comportamento essencial, da série original, é basicamente “capturado” pela componente determinística do metamodelo ajustado. Como no caso

anterior, ajustámos um modelo SARIMA aos resíduos do ajustamento determinístico, que, neste caso, foi o modelo $\text{SARIMA}(1, 0, 0) \times (0, 1, 1)_{22}$.

Os modelos estimados, para as componentes estocásticas das medidas do sentido 1, foram o $\text{SARIMA}(5, 0, 0) \times (0, 1, 1)_{22}$ (para o comprimento médio da fila) e o $\text{SARIMA}(1, 0, 0) \times (0, 1, 2)_{22}$ (para o tempo médio de permanência no sistema).

Em relação ao tempo médio de permanência no sistema do sentido 2, o metamodelo considerado foi

$$\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_1 t + u_t, \quad \text{com } t = 1, 2, \dots, 360.$$

Neste caso, como estamos perante um modelo de regressão linear, em primeiro lugar, efectuámos uma estimação preliminar da componente determinística do metamodelo, através do método dos mínimos quadrados, e, de seguida, analisámos a estrutura de autocorrelação dos resíduos, identificando um modelo ARMA apropriado. Procedemos, então, à estimação do metamodelo final, utilizando o método da máxima verosimilhança, em que são estimados, conjuntamente, os parâmetros β_0 , β_1 e os parâmetros do modelo ARMA. Na Tabela 5.6, são reproduzidos os resultados obtidos, no ajustamento da componente determinística de uma série cronológica média, para cada uma das medidas em estudo e para cada um dos sentidos de tráfego.

Tabela 5.6: Ajustamento da componente determinística (1 série, tráfego congestionado)

Parâmetro	Comp. fila sentido 1		Tempo sistema sentido 1	
	Estimativa	Desvio padrão	Estimativa	Desvio padrão
β_0	-0.5143	0.0683	235.9982	0.4143
β_1	14.3646	0.1194	-189.1848	0.7572
β_2	1.8862	0.019	0.9265	0.0014
β_3	10.9767	0.0018	10.9978	4×10^{-4}
Parâmetro	Comp. fila sentido 2		Tempo sistema sentido 2	
	Estimativa	Desvio padrão	Estimativa	Desvio padrão
\bar{Z}	0.9052			
\bar{W}	-0.6528			
β_0	-0.7535	0.1401	137.4221	6.4775
β_1	21.3648	0.2446	6.3788	0.0303
β_2	2.2013	0.0429		
β_3	11.0015	0.0029		

Comparando com a situação de tráfego normal, verificamos que, para o sentido 1, os valores obtidos, para os parâmetros, são muito semelhantes. Em relação às medidas do sentido 2, verifica-se que, o comprimento médio da fila cresce a uma taxa de 0.087 por segundo, estando-lhe sobreposta uma onda triangular assimétrica, com uma amplitude aproximada de 21.4. Por outro lado, o tempo médio, de permanência no sistema, segue uma recta com um declive de 0.638 e uma ordenada, na origem, de 137.4.

A seguir, repetimos, a análise descrita, para as restantes 99 séries, para cada uma das duas medidas e para cada um dos dois sentidos, obtendo-se os resultados resumidos nas Tabelas 5.7 (ajustamento das componentes determinísticas) e 5.8 (modelos ajustados às componentes estocásticas).

Tabela 5.7: Ajustamento das componentes determinísticas (100 séries, tráfego congestionado)

Parâmetro	Comp. fila sentido 1			Tempo sistema sentido 1		
	Máx.	Média.	Mín.	Máx.	Média	Mín.
β_0	-0.25	-0.4008	-0.5222	236.3856	234.8992	232.2326
β_1	14.8804	14.4851	13.9813	-178.6102	-185.0329	-189.4622
β_2	1.9282	1.8946	1.8694	0.9626	0.9307	0.9239
β_3	10.9826	10.9789	10.974	11.0041	10.9986	10.9961
Parâmetro	Comp. Fila sentido 2			Tempo Sistema sentido 2		
	Máx.	Média.	Mín.	Máx.	Média	Mín.
\bar{Z}	0.9127	0.8837	0.8522			
\bar{W}	-0.4258	-0.5725	-0.731			
β_0	4.0913	1.0117	-2.6481	177.2398	149.1015	115.4714
β_1	22.4293	21.7501	21.2743	6.5814	6.2615	5.9943
β_2	2.2836	2.2157	2.163			
β_3	11.0042	11.0003	10.9972			

Para as medidas respeitantes ao sentido 1, as componentes determinísticas, dos metamodelos ajustados, apresentam resultados muito semelhantes aos obtidos para as condições de tráfego normais. Tal como já tinha acontecido para o caso de tráfego normal, também se verificou, neste caso, agora para seis séries médias do tempo de permanência no sistema, do sentido 1, que alguns dos resultados de aplicação da

metodologia proposta eram insatisfatórios, havendo necessidade, igualmente, de fixar, *a priori*, o valor de β_3 , para se poder estimar um metamodelo adequado.

No que respeita aos resultados obtidos para as medidas do sentido 2, somente os valores dos parâmetros β_0 , em ambos os metamodelos, apresentam valores com diferenças significativas, o que não é de estranhar, pois correspondem à ordenada na origem.

Em relação ao tipo de modelo, ajustado à componente estocástica de cada um dos metamodelos, verificou-se que, tal como no caso da situação de tráfego normal, o modelo, com maior número de ajustes, era o SARIMA(1, 0, 0) \times (0, 1, 1)₂₂. Apesar das elevadas percentagens, correspondentes a este modelo, continuou a existir alguma variedade de modelos ajustados. No que diz respeito ao tipo de modelos de modelos ARMA ajustados, verificou-se a inexistência de um modelo que se destacasse dos restantes, observando-se uma grande variedade de modelos ajustados.

5.2.3 Adaptação do Ciclo dos Semáforos à Hora de Ponta

Após termos analisado os resultados obtidos para a situação de tráfego na hora de ponta, verificámos que seria conveniente alterar o ciclo de relógio dos semáforos, para evitar o crescimento “incontrolável”, apresentado pelo comprimento da fila e pelos tempos de permanência no sistema, para os veículos que se deslocam no sentido 2.

Considerando fixo o valor “óptimo”, determinado para a duração da luz verde do sentido 1 (50 segundos), decidimos investigar o comportamento do sistema, analisando o tempo médio de espera, nas duas filas, fazendo variar o tempo de duração da luz verde no sentido 2, em torno da duração de 120 segundos. Este valor de referência foi escolhido, tendo em conta que, a média do tempo entre chegadas consecutivas, do sentido 2, diminuiu para metade, sugerindo-nos que seria necessário aumentar, a duração da luz verde do sentido 2, para o dobro.

Na Tabela 5.9, resumimos os resultados obtidos para o tempo médio de espera, em cada uma das duas filas e global, para diversas durações de ciclos. Estes resultados correspondem à média de 30 réplicas independentes do correspondente modelo de simulação, pelo que, os valores máximo e mínimo correspondem, respectivamente, aos valores máximo e mínimo obtidos, para o tempo médio de espera, num determinado *run*.

Como podemos observar, a escolha dum ciclo *afinado* não é fácil. No entanto, deveremos privilegiar a opção por um ciclo em que haja um certo equilíbrio entre os

Tabela 5.8: Modelos para as componentes estocásticas (100 séries, tráfego congestionado).

Modelo	Sentido 1		Sentido 2		
	Comp. fila	Tempo sist.	Comp. fila		Tempo sist.
SARIMA(0, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂		4		ARMA(0, 1)	3
SARIMA(1, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	50	59	86	ARMA(0, 2)	19
SARIMA(2, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	19	27	4	ARMA(0, 3)	5
SARIMA(3, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	3	3	1	ARMA(0, 4)	2
SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	2			ARMA(0, 5)	4
SARIMA(5, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	2		1	ARMA(0, 6)	7
SARIMA(8, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	1			ARMA(0, 8)	2
SARIMA(13, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	1			ARMA(0, 9)	1
SARIMA(15, 0, 0) × (0, 1, 1) ₂₂	1			ARMA(0, 10)	9
SARIMA(1, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂	6	2	1	ARMA(0, 15)	1
SARIMA(2, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂	3			ARMA(6, 1)	2
SARIMA(3, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂	1			ARMA(7, 1)	1
SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 2) ₂₂	2			ARMA(8, 1)	10
SARIMA(1, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂	3	2	1	ARMA(9, 1)	13
SARIMA(2, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂	1			ARMA(10, 1)	10
SARIMA(3, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂	2	2		ARMA(3, 2)	1
SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 3) ₂₂		1		ARMA(4, 2)	1
SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 4) ₂₂	1			ARMA(7, 2)	3
SARIMA(1, 0, 0) × (1, 1, 1) ₂₂	1			ARMA(9, 2)	1
SARIMA(6, 0, 0) × (1, 1, 1) ₂₂	1			ARMA(10, 2)	1
SARIMA(0, 1, 0) × (0, 1, 1) ₂₂			3	ARMA(5, 3)	1
SARIMA(2, 1, 0) × (0, 1, 1) ₂₂			1	ARMA(10, 3)	2
SARIMA(6, 1, 0) × (0, 1, 1) ₂₂			1		
SARIMA(9, 1, 0) × (0, 1, 1) ₂₂			1		

Tabela 5.9: Tráfego congestionado: tempo médio de espera *vs.* duração do ciclo

Ciclo	Tempo de Espera			
		Sent. 1	Sent. 2	Global
50-55-120-55	Máximo	262.819	312.830	286.773
	Média	144.603	180.456	170.872
	Mínimo	109.688	80.496	100.491
50-55-125-55	Máximo	294.373	259.505	257.649
	Média	155.947	142.217	146.384
	Mínimo	103.760	75.347	102.033
50-55-130-55	Máximo	325.926	235.614	249.174
	Média	171.761	129.228	141.446
	Mínimo	112.475	71.499	101.658
50-55-135-55	Máximo	354.123	189.354	219.874
	Média	184.679	110.314	130.081
	Mínimo	121.086	74.781	100.079
50-55-140-55	Máximo	381.409	171.415	209.734
	Média	198.094	103.216	127.934
	Mínimo	126.196	70.357	97.074

tempos de espera nos dois sentidos, levando igualmente em conta o tempo global de espera. Assim, a escolha deverá recair no ciclo 50-55-125-55. É de salientar que o ciclo escolhido corresponde, não ao que apresenta um menor tempo de espera global, mas sim ao mais equilibrado.

A título ilustrativo, representamos, nas Figuras 5.10, 5.11 e 5.12, o comportamento das médias (de 30 réplicas) das medidas comprimento da fila e tempo de permanência no sistema, para as durações de 125, 130 e 135 segundos, verificado durante uma hora e considerando um intervalo de recolha de dados de $\delta_t = 10$ segundos.

Analisando estes gráficos, podemos constatar que o comportamento das duas medidas, para as três durações consideradas, é, qualitativamente, bastante semelhante. A opção pelo ciclo 50-55-125-55 justifica-se, assim, porque é o único que assegura que

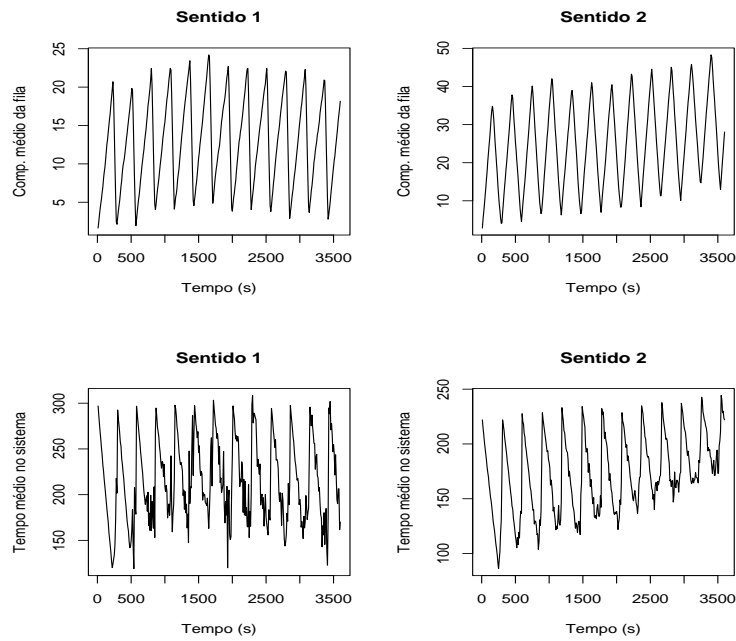


Figura 5.10: Tráfego congestionado: ciclo 50-55-125-55

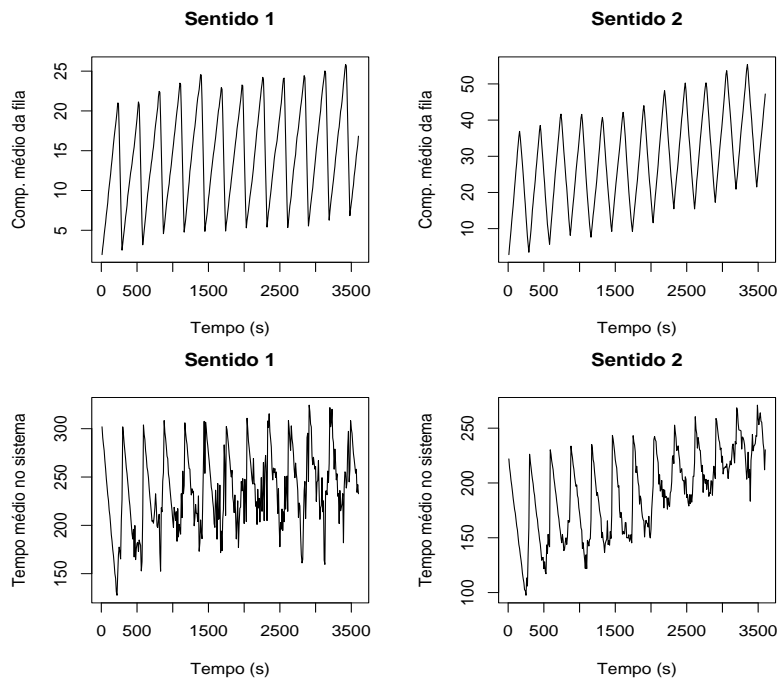


Figura 5.11: Tráfego congestionado: ciclo 50-55-130-55

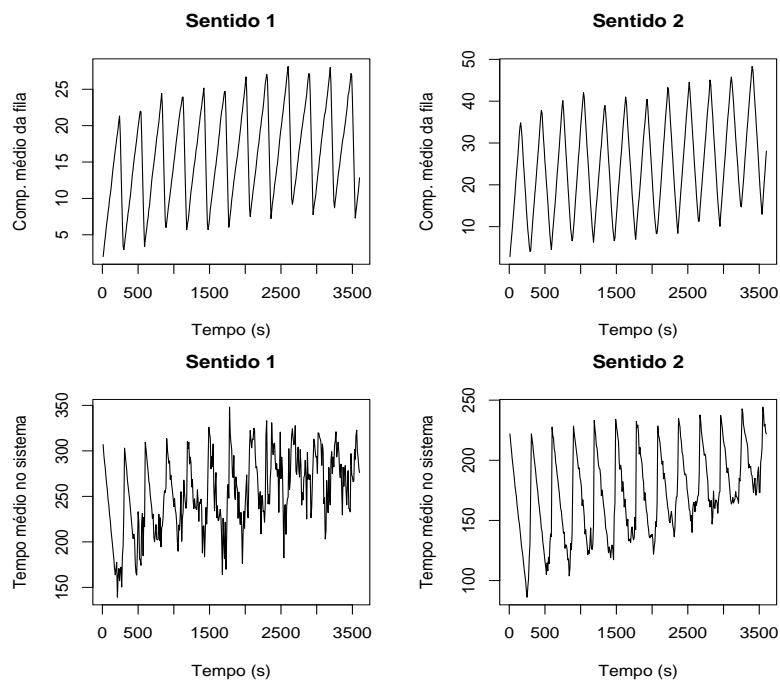


Figura 5.12: Tráfego congestionado: ciclo 50-55-135-55

o tempo máximo de espera, em qualquer dos sentidos, não ultrapassa os 5 minutos (300 segundos). No entanto, se se quisesse melhorar o comportamento do sistema, outros ciclos poderiam, eventualmente, ser investigados (por exemplo, fazendo variar a duração da luz verde do sentido 1).

Convém notar que o estudo, que realizámos para este caso, não corresponde a uma análise exaustiva para a determinação do ciclo “óptimo” dos semáforos, mas, apenas, a uma ilustração de como este tipo de problemas pode ser abordado e como a metodologia, por nós proposta, pode ser útil na resolução de problemas de interesse prático.

6

Conclusões e Recomendações

Neste capítulo, apresentamos um resumo das contribuições mais importantes, resultantes do trabalho, de investigação, desenvolvido em relação à análise de resultados de simulações não estacionárias, especificamente, na construção de metamodelos que descrevem a evolução, no tempo, das respostas de interesse. Concluímos, com a referência a alguns tópicos, para investigação adicional nesta área, que poderão ser explorados no futuro.

6.1 Conclusões da Investigação

O resultado principal, que se obteve com a investigação realizada, foi o desenvolvimento de uma metodologia, para a construção de metamodelos lineares ou não lineares, que permite analisar os resultados de simulações de acontecimentos discretos, em particular, os resultados correspondentes a simulações não estacionárias. Este era um tópico, essencialmente, inexplorado na literatura de simulação, por se considerar que as medidas de *performance* dos sistemas, nestas condições, evoluíam de uma forma incontrolável.

A metodologia proposta apresenta procedimentos para a recolha dos dados relevantes, selecção do tipo de metamodelo e estimação e validação do metamodelo seleccionado. Foram, especialmente, detalhados alguns dos procedimentos propostos, nomeadamente, os correspondentes aos passos de estimação e validação de metamodelos e construção de intervalos de confiança. Nestes passos, recorreremos a técnicas utilizadas na análise de regressão e na análise de séries cronológicas. No passo de validação, nem sempre foi possível apresentar testes quantitativos, pelo que, foram sugeridas algumas medidas qualitativas, logo, subjectivas.

Para complementar a caracterização dos resultados, obtidos por um modelo de simulação, desenvolvemos procedimentos, válidos e robustos, para determinar intervalos de confiança para as medidas de *performance* seleccionadas, do sistema em estudo, tendo apresentado duas maneiras alternativas de construir os intervalos de confiança. A primeira, baseada na aplicação, do método das réplicas independentes, aos 30 valores observados, em cada instante t . A segunda, tendo por a base a construção de um novo metamodelo, a ajustar à série das variâncias, cada uma delas calculada, em cada instante t , para a amostra (aleatória) constituída pelos valores, das respostas em análise, nos 30 *runs* independentes.

De grande importância, foi, também, a apresentação da generalização de alguns resultados analíticos, existentes, na literatura especializada de probabilidades e estatística, para modelos de filas de espera não estacionárias, e a avaliação experimental da metodologia proposta, em relação a esses resultados. Esta avaliação experimental foi alargada a outros casos de estudo e a outras medidas de *performance*, para os quais, necessariamente, não existem resultados teóricos. Nos casos de estudo, tratados no Capítulo 4, foram analisados sistemas com comportamento não estacionário aperiódico e, no Capítulo 5, foi estudado um exemplo, em que, as respostas de *performance* apresentavam um comportamento cíclico, ou periódico.

A experimentação realizada mostrou que, seguindo os passos da metodologia proposta, foi sempre possível estimar um metamodelo válido, cuja componente determinística descrevia globalmente o comportamento das respostas estudadas, ao longo do tempo ou em relação a um índice inteiro adequado, por exemplo, o número (sequencial) da entidade processada.

Ao longo deste trabalho, salientou-se a importância, que os modelos clássicos de séries cronológicas assumiam, na descrição do comportamento da componente estocástica dos metamodelos estimados. Em alguns casos, os modelos de séries cronológicas, por si só, conseguiam explicar o desempenho completo da resposta em estudo.

Em face dos resultados obtidos, propomos a denominação de *método clássico das séries cronológicas*, para descrever o método, de análise de resultados em simulação de acontecimentos discretos, que usa os modelos de Box-Jenkins, e que se mostrou ser válido para estudar os modelos de simulação, quer em condições estacionárias, quer não estacionárias.

6.2 Recomendações para Trabalho Futuro

O trabalho, desenvolvido até ao momento, não esgotou, como é lógico, as oportunidades de investigação na área da análise de resultados de simulações não estacionárias. É claro que muito haverá que fazer, para desenvolver e fundamentar a metodologia agora apresentada.

No contexto da validação dos metamodelos de simulação, foram sugeridos diversos procedimentos, que requerem um estudo mais aprofundado. Por outro lado, é também necessária a especificação de novas medidas quantitativas, que permitam avaliar a adequação da componente determinística dos metamodelos estimados e da sua capacidade previsiva.

Em alguns dos casos estudados, a assunção, das hipóteses de normalidade e de variância constante dos erros, não foi realística. Por conseguinte, torna-se importante efectuar um estudo sobre a importância relativa de cada uma destas hipóteses.

Será, igualmente, importante analisar novos exemplos de aplicação e investigar a existência de modelos analíticos, que relacionem, as respostas seleccionadas de modelos de simulação, com os parâmetros do metamodelo.

Também será interessante testar a aplicação da metodologia proposta a outros tipos de metamodelos como, por exemplo, os modelos de Taguchi, o modelo linear generalizado, redes neuronais artificiais, etc.

A indicação destes tópicos, citados para trabalho futuro, serve, apenas, para identificar alguns dos possíveis caminhos a percorrer. Achamos que se trata de uma área muito promissora e de indubitável interesse prático, que tencionamos continuar a explorar.

A

Listagem de Alguns Programas

Apresentamos, neste apêndice, listagens de alguns dos programas desenvolvidos para a elaboração deste trabalho. Sem preocupações de exaustividade, o objectivo principal deste apêndice é de, apenas, ilustrar alguns dos tipos de programas desenvolvidos e a variedade de *software* a que foi necessário recorrer. Assim, as secções encontram-se organizadas de acordo com o *software* específico que nelas foi utilizado.

A.1 Modelo na Linguagem Visual SLAM

Rede Visual SLAM do sistema descrito na Secção 4.2, para o caso de $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$.

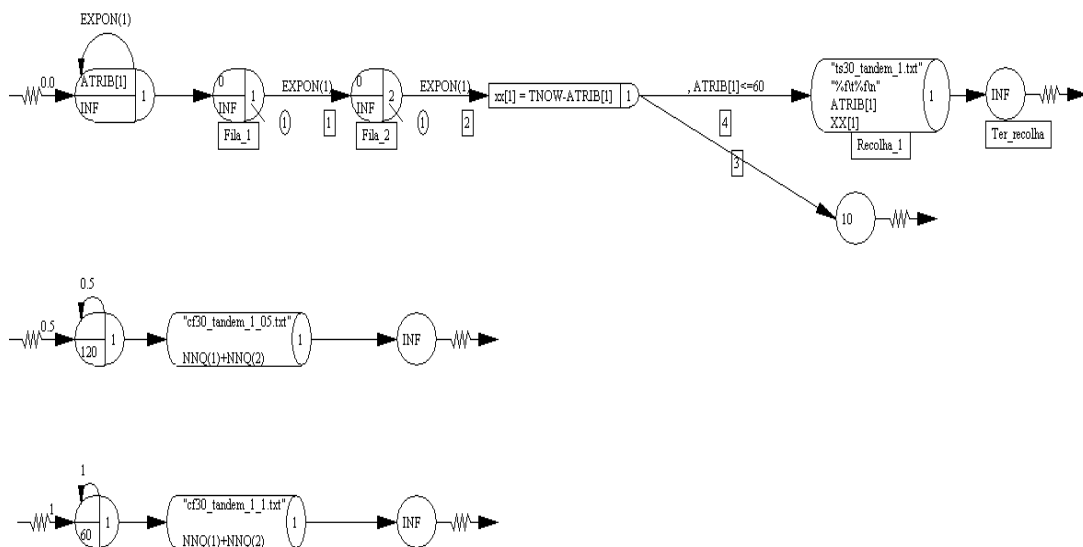


Figura A.1: Modelo na linguagem Visual Slam (filas em *tandem*, $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$)

A.2 Programas em FORTRAN 90

As enormes quantidades de dados, que era necessário processar, para obter alguns dos resultados analisados neste trabalho de investigação, obrigaram a desenvolver procedimentos muito eficientes para tarefas aparentemente básicas, sob pena de, levando em conta os meios computacionais disponíveis, a abordagem directa corresponder, na prática, a “ciclos infinitos” dos respectivos programas nos computadores pessoais utilizados. Uma dessas situações verificou-se na análise das medidas de *performance* baseadas em observações: tendo-se registado todas as ocorrências em cada execução dos modelos de simulação (que eram necessárias para estudar as medidas persistentes no tempo), foi, depois, necessário desenvolver um programa que eliminasse as observações repetidas em cada um dos intervalos de amplitude δ_t , considerados na abordagem proposta (passo 2 da recolha de dados relevantes). Na listagem que se segue, apresentamos o programa que foi, então, desenvolvido.

ElimRep.f90

```
Program ElimRep
Character (Len=30) Nome
Dimension NORun(6000),NApr(6000), TCheg(800000),
Dimension TSist(800000), ObsAprov(800000,2)
Print *, 'Numero total de runs?'
Read *, NRuns
NTObs = 0
Print *, 'Ficheiro das Obs. por Run?'
read *, Nome
Open (5, File=Nome)
Print *, 'Ficheiro dos Tempos no Sistema?'
read *, Nome
Open (6, File=Nome)
Print *, 'Ficheiro para as observacoes aproveitadas?'
read *, Nome
Open (10, File=Nome)
Print *, 'Ficheiro para o numero das observacoes aproveitadas?'
read *, Nome
Open (7, File=Nome)
Print *, 'Intervalo?'
Read *, Delta
```

Continuação

```

Do I = 1, NRuns
  Read(5,*) NObs
  NORun(I) = NObs
  NTObs = NTObs + NObs
End Do
Print *, 'Fim da leitura das obs. por run. NTObs: ', NTObs
Read(6,*) (TCheg(I), TSist(I), I=1, NTObs)
Print *, 'Fim da leitura das obs. por run'
NAnal = 0
NOAprov = 0
NOAp=0
Do I=1, NRuns
  JIn = NAnal + 1
  NOAprov = NOAprov+1
  NOAp = NOAp+1
  JFim = NAnal + NORun(I)
  Ind1 = Int(TCheg(JIn)/Delta) + 1
  ObsAprov(NOAprov,1) = TCheg(JIn)
  ObsAprov(NOAprov,2) = TSist(JIn)
  Do J = JIn+1, JFim
    Ind2 = Int(TCheg(J)/Delta) + 1
    If (Ind2 /= Ind1) Then
      NOAprov = NOAprov + 1
      NOAp=NOAp+1
      ObsAprov(NOAprov,1) = TCheg(J)
      ObsAprov(NOAprov,2) = TSist(J)
      Ind1 = Ind2
    End If
  End Do
  NAnal = NAnal + NORun(I)
  NApr(I)=NOAp
  NOAp=0
End Do
Print *, 'Fim dos calculos'
Print *, 'N total Aprov ', NOAprov
Write(10,100) ((ObsAprov(I,J), J=1,2), I=1,NOAprov)
Write(7,98) (NApr(I), I=1,NRuns)
100 Format(2F15.9)
98 Format(I6)
End

```

Após a eliminação das observações repetidas em cada um dos intervalos “elementares” consecutivos, de amplitude δ_t , o passo seguinte corresponde ao cálculo de estatísticas simples das observações correspondentes nas várias réplicas. O programa que se segue foi desenvolvido para esse fim.

CalMed.f90

```

Program CalcMed
Character (Len=30) Nome
Dimension NORun(6000), TCheg(800000), TSist(800000), VMed(31000)
Dimension NOMed(31000)
Data VMed, NOMed / 62000 * 0.0 /
Print *, 'Numero total de runs?'
Read *, NRuns
NTObs = 0
Print *, 'Ficheiro das Obs. por Run?'
read *, Nome
Open (5, File=Nome)
Print *, 'Ficheiro dos Tempos no Sistema?'
read *, Nome
Open (6, File=Nome)
Print *, 'Ficheiro para as Medias?'
read *, Nome
Open (10, File=Nome)
Print *, 'Num. de Runs p/ Medias, Intervalo '
Read *, NRMed, Delta
Do I = 1, NRuns
  Read(5,*) NObs
  NORun(I) = NObs
  NTObs = NTObs + NObs
End Do
Print *, 'Fim da leitura das obs. por run '
Read(6,*) (TCheg(I), TSist(I), I=1, NTObs)
Print *, 'Fim da leitura das obs. por run '
NLinhas = 60. / Delta
NAnal = 0
Kfim = NRuns / NRMed
Print *, 'NLinhas, Kfim: ', NLinhas, Kfim

```

Continuação

```

Do K=1, Kfim
  NElem = 0
  Do J = (K-1)*NRMed+1, k*NRMed
    NElem = NElem + NORun(J)
  End Do
  Print *, 'K, NAnal, NElem: ', K, NAnal, NElem
  Do J = NAnal+1, NAnal+NElem
    Ind = (K-1)*NLinhas + Int(TCheg(J)/Delta) + 1
    VMed(Ind) = VMed(Ind) + TSist(J)
    NOMed(Ind) = NOMed(Ind) + 1
  End Do
  Do I = (K-1)*NLinhas+1, K*NLinhas
    If(NOMed(I) /= 0.) VMed(I) = VMed(I) / NOMed(I)
  End Do
  NAnal = NAnal + NElem
End Do
Print *, 'Fim dos calculos '
Write(10,100) (VMed(I), NOMed(I), I=1, Kfim*NLinhas)
100 Format(F15.9, I6)
End

```

A.3 Comandos do Mathematica

No Capítulo 3, apresentámos alguns resultados analíticos para o valor esperado do número de entidades no sistema, no instante t , para uma fila $M/M/1$ e, com base nesses resultados, procedeu-se a uma avaliação experimental da metodologia proposta. Tornou-se, assim, necessário o registo, em ficheiro, desses valores. Transcrevemos, seguidamente, os comandos do Mathematica necessários para o cálculo dos valores teóricos para o número de entidades no sistema da fila $M/M/1$, com factores de utilização $\rho = 1, 1.5$ e 2 .

bailey.nb

```

f = Function[{λ, t}, (e-(1-√λ)2t)/(2π)]
g = Function[{λ, w, t},  $\frac{\sqrt{w}\sqrt{1-we^{-4\sqrt{\lambda}tw}}}{(w + \frac{(1-\sqrt{\lambda})^2}{4\sqrt{\lambda}})^2}$ ]
h = Function[{λ, t}, (λ - 1)-1 + (λ - 1)t - NIntegrate[g[λ, w, t], {w, 0, 1}] * f[λ, t]]
y = Function[{t}, e-2t * (BesselI[0, 2t] + BesselI[1, 2t])]
j = Function[{x}, NIntegrate[y[t], {t, 0, x}]]
r1 = Table[0, {200}];
n = 0; While[n ≠ 200, r1[[n + 1]] = h[2, n]; n = n + 1];
Export["C : \\Exper_Bailey\\bailey_rho.2.0.txt", r1, "Table"]
r2 = Table[0, {200}];
n = 0; While[n ≠ 200, r2[[n + 1]] = h[1.5, n]; n = n + 1];
Export["C : \\Exper_Bailey\\bailey_rho.1.5.0.txt", r2, "Table"]
r3 = Table[0, {200}];
n = 0; While[n ≠ 200, r3[[n + 1]] = j[n]; n = n + 1];
Export["C : \\Exper_Bailey\\bailey_rho.1.0.txt", r3, "Table"]

```

A.4 Programas na Linguagem R

A estimação de metamodelos lineares e não lineares foi preponderante na experimentação realizada. Para os diversos sistemas e medidas em estudo, foram desenvolvidos diferentes programas, mas com um esquema semelhante ao que aqui se apresenta. Este programa, em particular, foi desenvolvido para a estimação dos metamodelos lineares $\bar{Y}_t = \beta_0 + \beta_t + u_t$, para o sistema de filas de espera em *Tandem*, com $\lambda = 2$ e $\mu_i = 1$. Neste caso, pesquisou-se o ajuste de modelos AR(p) e MA(q) com ordens inferiores a 20, escolhendo-se o metamodelo com menor valor no critério AIC.

contar_guardar_modelos_ajust_gls.R

```

library("nlme", character.only=TRUE)
setwd("C:/Documents_and_Settings/Rita/Os_meus_documentos/Doutoramento/
Exp_paper_2004/Fila_Tandem/ro=2")
writeLines(getwd())
source("C:/Documents_and_Settings/Rita/Os_meus_documentos/Doutoramento/
Exp_paper_2004/R_programas/FuncoesAux.R")
source("C:/Documents_and_Settings/Rita/Os_meus_documentos/Doutoramento/
Exp_paper_2004/R_programas/boxtest.R")

```

Continuação

```

source("C:/Documents_and_Settings/Rita/Os_meus_documentos/Doutoramento/
Exp_paper_2004/R_programas/gnls_lista2.R")

nomefich<-"mcf30_tandem2_05.txt"
nelem<-120
nome<-paste("Resultados_validos_gls_",nomefich,sep="")
nome1<-paste("Estimado_gls_",nomefich,sep="")
nome2<-paste("Contar_ajust_gls_",nomefich,sep="")
nome3<-paste("Tipo_modelo_gls_",nomefich,sep="")
#entra o ficheiro médias...
conta<-double(40)
for(i in 1:40) conta[i]<-0
conta00<-0
l<-double()
if(nelem==120) {
  l<-(1:120)/2
} else {
  l<-1:60
}
inic<-nelem/4
for(k in 0:99) {
  x<-read.table(file=nomefich,nrows=nelem,skip=nelem*k)
  y<-x[,1]
  mod<-glm(y~1,method="ML")
  residuos<-residuals(mod)
  ajustados<-fitted(mod)
  encont<-FALSE
  while(!encont){
    #Modelo ARMA(0,0)
    valor<-boxtest(residuals(mod),type="Ljung",lag=inic,param=0)$p.value
    if(valor>=0.05) {
      conta00<-conta00+1
      write(paste("Modelo_de_Regressão_ajustado_do_run",k+1,"\\n"),
            file=nome,append=TRUE)
      glsListar2(mod)
      write(paste("Soma_Quad._Residuos:_",round(sum(residuos^2),4),"\\n"),
            file=nome,append=TRUE)
      modeloARMA0(residuos,nome,k+1,inic)
    }
  }
}

```

Continuação

```

write(paste(1, "\t", y, "\t", ajustados, "\t", residuos), file=nome1,
      append=TRUE)
write(paste("Run_", k+1, "\t", "Modelo_ARMA(0,0)"), file=nome3,
      append=TRUE)
encont<-TRUE
}
if(!encont) {
  #Modelos MA
  encont1<-FALSE; ordemp<-0; ordemd<-0; ordemq<-1
  while(!encont1 && ordemq<=20){
    fit<-arima(residuals(mod), order=c(ordemp, ordemd, ordemq),
              method="ML", include.mean=FALSE)
    valor<-boxtest(fit$residuals, type="Ljung", lag=inic,
                  param=ordemq)$p.value
    if(valor >=0.05) {
      mod1<-update(mod, correlation=corARMA(q=ordemq))
      conta[ordemq]<-conta[ordemq]+1
      ajustadosMA<-fitted(mod1)
      write(paste("Modelo_de_Regressão_ajustado_do_run", k+1, "\n"),
            file=nome, append=TRUE)
      glsListar2(mod1)
      somaMA<-sum(residuals(mod1)^2)
      aicMA<-AIC(mod1)
      write(paste("Soma_Quad_Residuos:", round(somaMA, 4), "\n"),
            file=nome, append=TRUE)
      fitMA<-arima(residuals(mod1), order=c(ordemp, ordemd, ordemq),
                  method="ML", include.mean=FALSE)
      modeloARMApq(fitMA, ordemp, ordemq, nome, k+1, inic)
      ordq<-ordemq
      encont1<-TRUE
    }
    ordemq<-ordemq+1
  }
  #Modelos AR
  encont2<-FALSE
  ordemp<-1; ordemd<-0; ordemq<-0
  while(!encont2 && ordemp<=20){
    fit<-arima(residuals(mod), order=c(ordemp, ordemd, ordemq),
              method="ML", include.mean=FALSE)

```

Continuação

```

valor<-boxtest( fit$residuals , type="Ljung" , lag=inic ,
  param=ordemp)$p.value
if( valor >=0.05) {
  ll<-as.list( coef(mod))
  kk<-fit$coef
  for(i in 1:ordemp){ if (kk[i]>1) kk[i]<-0.99}
  if(k==98) {
    kk[2]<- -0.1
    mod1<-update(mod, correlation=corARMA( value=kk , p=ordemp))
  }
  else {
    mod1<-update(mod, correlation=corARMA( value=kk , p=ordemp))
  }
  conta[20+ordemp]<-conta[20+ordemp]+1
  ajustadosAR<-fitted( mod1)
  write( paste( " Modelo_de_Regressão_ajustado_do_run" , k+1, "\n" ) ,
    file=nome , append=TRUE)
  glsListar2( mod1)
  somaAR<-sum( residuals( mod1) ^ 2)
  aicAR<-AIC( mod1)
  write( paste( " Soma_Quad._Residuos:_ " , round( somaAR, 4 ) , "\n" ) ,
    file=nome , append=TRUE)
  fitAR<-arima( residuals( mod1) , order=c( ordemp , ordemd , ordemq ) ,
    method="ML" , include.mean=FALSE)
  modeloARMApq( fitAR , ordemp , ordemq , nome , k+1 , inic )
  ordp<-ordemp
  encont2<-TRUE
}
ordemp<-ordemp+1
}
if( aicAR<=aicMA) {
  write( paste( l , "\t" , y , "\t" , ajustadosAR , "\t" , fitAR$residuals ) ,
    file=nome1 , append=TRUE)
  write( paste( " Run_" , k+1 , "\t" , " modelo_autoregressivo_de_ordem" ,
    ordp , " ( " , ordq , " ) " ) , file=nome3 , append=TRUE)
}

```

Continuação

```

else {
  write(paste(1, "\t", y, "\t", ajustadosMA, "\t", fitMA$residuals),
        file=nome1, append=TRUE)
  write(paste("Run_", k+1, "\t", "modelo_medias_móveis_de_ordem",
             ordq, "(", ordp, ")"), file=nome3, append=TRUE)
}
encont<-(encont1 & encont2)
}
}
write(paste("-----", "\n"), file=nome, append = TRUE)
}

write(nomefich, file=nome2, append = TRUE)
write(paste("Resultados_da_análise_modelo_ARMA_(0,0)"), file=nome2,
      append = TRUE)
write(conta00, file=nome2, append = TRUE)
for(j in 1:20) {
  write(paste("Resultados_da_análise_modelo_ARMA_(0,\" ,j ,\")"), file=nome2,
        append = TRUE)
  write(conta[j], file=nome2, append = TRUE)
}
for(j in 21:40) {
  write(paste("Resultados_da_análise_modelo_ARMA_(\" ,j -20,\" ,0)"),
        file=nome2, append = TRUE)
  write(conta[j], file=nome2, append = TRUE)
}
}

```

A construção de intervalos de confiança, para as medidas de *performance* dos sistemas em estudo, foi um tópico explorado nos Capítulos 3 e 4. O programa, desenvolvido para calcular os limites dos intervalos de confiança, para a medida tempo no sistema, no caso das duas filas $M/M/1$ em *tandem*, com $\lambda = 1$ e $\mu_i = 1$, é apresentado de seguida.

calcular_ICs_modelos_temposistema.R

```
#Cálculo de um intervalo de confiança para a média
#com base nos 2 modelos ajustados e com base na média amostral

#Fila em tandem para rho=1

setwd("C:/Documents_and_Settings/PC00/Os_meus_documentos/Doutoramento/
Exp_Tese_Doutoramento/Analise_Variancia/Fila_em_tandem_1")
writeLines(getwd())

nelem<-120

nomefich<-"Estimado_gls_map_ts30_tandem1_05.txt"
nomefich1<-"Estimado_gls_var_mv_tandem1_05.txt"
nomefich2<-"mv_tandem1_05.txt"  nome1<-"ICs_mv_tandem1_05.txt"

for(k in 0:99) {
  x<-read.table(file=nomefich ,nrows=nelem , skip=k*nelem)
  y<-read.table(file=nomefich1 ,nrows=nelem , skip=k*nelem)
  z<-read.table(file=nomefich2 ,nrows=nelem , skip=k*nelem)
  nruns<-z[,3]
  #limites do IC calculado com base nos dois modelos
  linf<-x[,3]-qt(0.975,nruns-1)*sqrt(y[,3]/nruns)
  lsup<-x[,3]+qt(0.975,nruns-1)*sqrt(y[,3]/nruns)

  #limites do IC calculado com base na média e variância corrigida
  linf1<-x[,2]-qt(0.975,nruns-1)*sqrt(y[,2]/nruns)
  lsup1<-x[,2]+qt(0.975,nruns-1)*sqrt(y[,2]/nruns)

  #IC base na média/var e IC com base nos modelos (guardar num ficheiro)
  write(paste(x[,1],"\t",linf1,"\t",x[,2],"\t",lsup1,"\t",linf,"\t",
    x[,3],"\t",lsup,"\t",nruns),file=nome1,append=TRUE)
}
```

Ao longo deste trabalho, apresentou-se graficamente o comportamento de séries individuais, séries médias, metamodelos ajustados, gráficos de diagnóstico, etc. A título ilustrativo, reproduzimos o programa desenvolvido para a construção dos gráficos apresentados nas Figuras 4.13 e 4.14.

cronograma_series_medias_MM2_1serie_cf_ts.R

```

setwd("C:/Documents_and_Settings/PC00/Os_meus_documentos/Doutoramento/
Tese_de_Doutoramento/graficos-fich_R/Dados")
writeLines(getwd())

nomefich1<-"Estimado_gls_mcfila30_mm2_05.txt"
nomefich2<-"serie1_cf_mm2_05.txt"
nomefich3<-"Estimado_gls_mts30_mm2_05.txt"
li<-double()
for(i in 1:120) li[i]<-0.5*i
x1<-read.table(file=nomefich1,nrows=120)
x2<-read.table(file=nomefich2,nrows=120)
x3<-read.table(file=nomefich3,nrows=120)

analiseGrafica<-function(x1,x2,x3){
  oldpar<-par(mfrow=c(1,2))
  on.exit(par(oldpar))
  plot(li,x1[,2],type="l",xlab="Tempo",ylab="Comp._médio_da_fila",
        ylim=c(0,20))
  lines(li,x2[,1],col="blue")
  plot(li,x3[,2],type="l",xlab="Tempo",ylab="Tempo_médio_no_sistema")
}

analiseDiag<-function(x1){
  oldpar<-par(mfrow=c(2,2))
  on.exit(par(oldpar))
  hist(x1[,4],main="",ylab="",xlab="")
  n<-qqnorm(x1[,4],plot=FALSE)
  plot(n,xlab="Quantis_da_Normal_Padrão",ylab="Estatística_de_Ordem")
  g1<-acf(x1[,4],plot=FALSE)
  plot(g1,xlab="Lag",ylab="FAC",main="",font.lab=3)
  g2<-pacf(x1[,4],plot=FALSE)
  plot(g2,xlab="Lag",ylab="FACP",main="",font.lab=3)
}

```

B

Catálogo de Curvas

Neste apêndice, apresentamos um extracto dum possível catálogo de curvas, tão completo quanto possível, que contenha as representações gráficas das curvas que possam, eventualmente, ser úteis na escolha do metamodelo hipotético, a sujeitar à abordagem de metamodelação por nós proposta. Este extracto, como é óbvio, não é exaustivo, encontrando-se ilustradas, apenas, as curvas que foram analisadas no decorrer deste trabalho.

B.1 Curvas Polinomiais

$$f(x) = \beta_0 + \beta_1x + \beta_2x^2 + \dots + \beta_px^p \quad (\text{B.1})$$

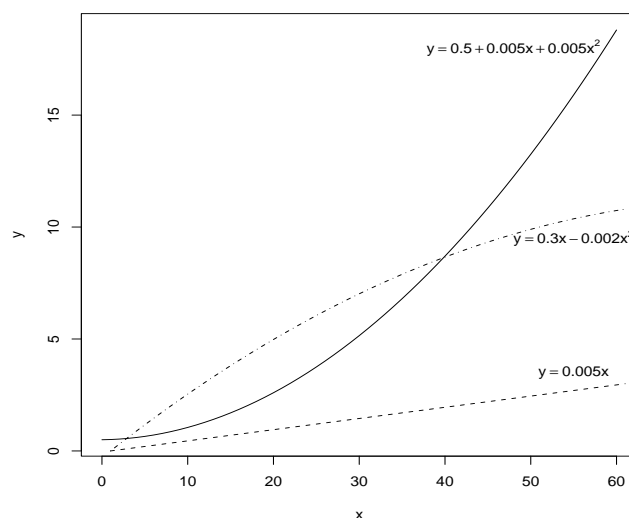


Figura B.1: Curvas polinomiais

B.2 Curvas com Potência de x Desconhecida

$$f(x) = \beta_0 + \beta_1 x^\beta \quad (\text{B.2})$$

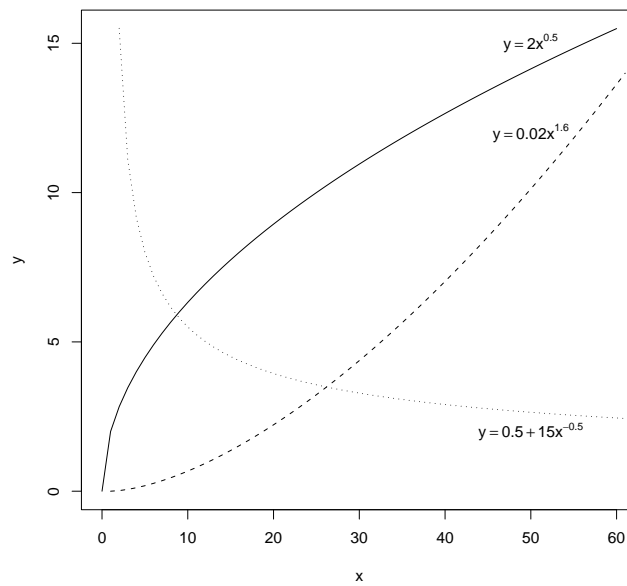


Figura B.2: Curvas com potência de x desconhecida

B.3 Curvas de Crescimento Sigmóide

B.3.1 Curva Logística

$$f(x) = \frac{\beta_1}{1 + \beta_2 e^{-\beta_3 x}} \quad (\text{B.3})$$

As expressões das curvas representadas na Figura B.3 são:

$$y = 15/(1 + 80e^{-0.03x}) \quad (\text{sólida})$$

$$y = 15/(1 + 80e^{-0.2x}) \quad (\text{tracejada})$$

$$y = 15/(1 + 50e^{-0.01x}) \quad (\text{pontilhada})$$

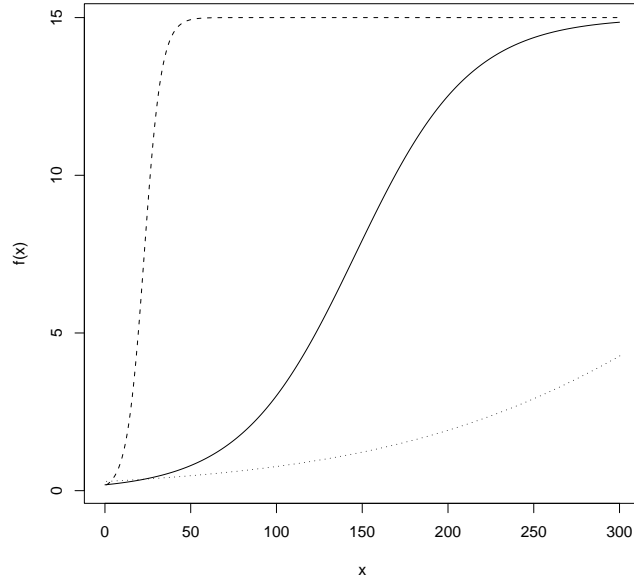


Figura B.3: Curvas logísticas

B.3.2 Curva de Crescimento Gompertz

$$f(x) = \beta_1 e^{-e^{-\beta_2(x-\beta_3)}} \quad (\text{B.4})$$

As expressões das curvas representadas na Figura B.4 são:

$$y = 15e^{-e^{-0.1(x+0.03)}} \quad (\text{sólida})$$

$$y = 15e^{-e^{-0.0161(x-80)}} \quad (\text{tracejada})$$

$$y = 15e^{-e^{-0.02(x-50)}} \quad (\text{pontilhada})$$

$$y = 15e^{-e^{-0.009(x-10)}} \quad (\text{traço-ponto})$$

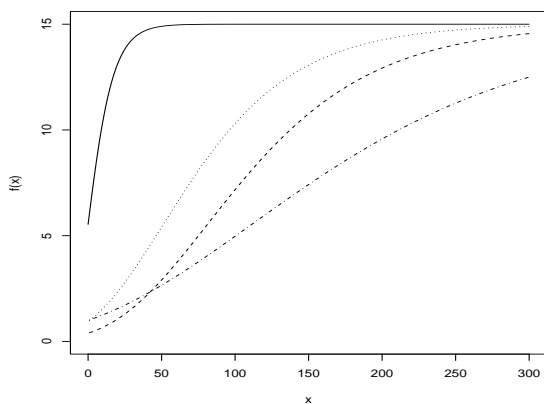


Figura B.4: Curvas de crescimento Gompertz

B.4 Curvas Periódicas

B.4.1 Onda Triangular

$$f(x) = \begin{cases} \beta_0 + \frac{\beta_1 x}{L}, & 0 \leq x \leq L, \\ \beta_0 + \frac{\beta_1(2L-x)}{L}, & L < x \leq 2L, \end{cases} \quad \text{e } f(x+2L) = f(x), \forall x \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.5})$$

Os parâmetros das curvas representadas na Figura B.5 são:

$\beta_0 = 0$, $\beta_1 = 1$ e $L = 2$ (sólida); $\beta_0 = 0$, $\beta_1 = 0.5$ e $L = 3$ (tracejada).

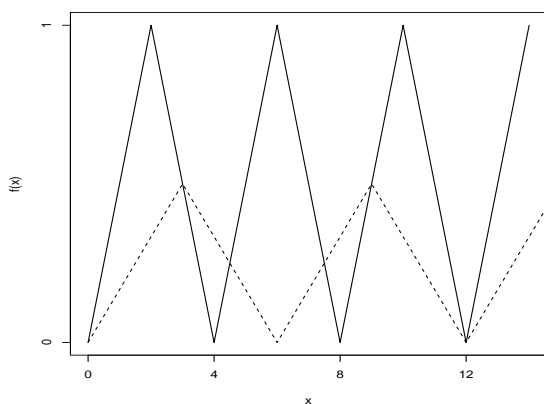


Figura B.5: Ondas triangulares

B.4.2 Onda Triangular Inclinada

$$f(x) = \begin{cases} \beta_0 + \frac{\beta_1 x}{L + \frac{L}{\beta_2}}, & 0 \leq x \leq L + \frac{L}{\beta_2}, \\ \beta_0 + \frac{\beta_1(2L-x)}{L - \frac{L}{\beta_2}}, & L + \frac{L}{\beta_2} < x \leq 2L, \end{cases} \quad \text{e } f(x+2L) = f(x), \forall x \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.6})$$

Os parâmetros das curvas representadas na Figura B.6 são:

$$\beta_0 = 0, \beta_1 = 1, \beta_2 = 2 \text{ e } L = 2 \text{ (sólida);}$$

$$\beta_0 = 0.5, \beta_1 = 0.5, \beta_2 = 3 \text{ e } L = 3 \text{ (tracejada).}$$

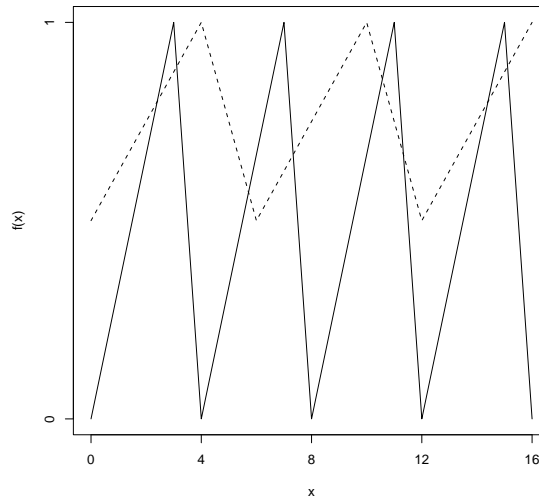


Figura B.6: Ondas triangulares inclinadas

B.4.3 Onda Dente de Serra

$$f(x) = \beta_0 + \frac{\beta_1 x}{2L}, \quad 0 < x < 2L \quad \text{e} \quad f(x+2L) = f(x), \forall x \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.7})$$

Os parâmetros das curvas representadas na Figura B.7 são:

$$\beta_0 = 0, \beta_1 = 1 \text{ e } 2L = 4 \text{ (sólida);}$$

$$\beta_0 = 0.5, \beta_1 = 0.5 \text{ e } 2L = 3 \text{ (tracejada).}$$

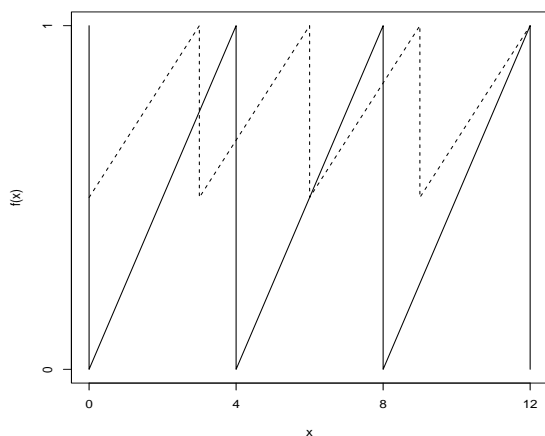


Figura B.7: Ondas dente de serra

B.4.4 Onda Sinusoidal

$$f(x) = \beta_0 + \beta_1 \cos(\beta_3 x) + \beta_2 \text{sen}(\beta_3 x) \quad (\text{B.8})$$

As expressões das curvas representadas na Figura B.8 são:

$$y = \cos(x) + 2 \text{sen}(x) \quad (\text{sólida})$$

$$y = 0.5 \cos(4x) + 2 \text{sen}(4x) \quad (\text{tracejada})$$

$$y = -0.5 \cos(x) + \text{sen}(2x) \quad (\text{pontilhada})$$

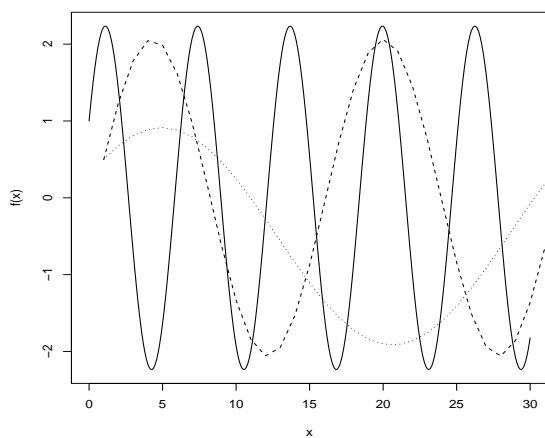


Figura B.8: Ondas sinusoidais

Bibliografia

- Akaike, H. (1974). A new look at the statistical model identification. *IEEE Trans. Autom. Contr. AC-19*, 716–723.
- Akaike, H. (1979). A bayesian extension of the minimum AIC procedure of autoregressive model fitting. *Biometrika* 66(2).
- Bailey, N. T. J. (1957). Some further results in the non-equilibrium theory of a simple queue. *J. R. Statist. Soc. B19*, 326–333.
- Bailey, N. T. J. (1964). *The Elements of Stochastic Processes with Applications to the Natural Sciences*. New York: John Wiley & Sons.
- Barton, R. R. (1992). Metamodels for simulation input-output relations. Em J. J. Swain, D. Goldsman, R. C. Crain, e J. R. Wilson (Eds.), *Proceedings of the 1992 Winter Simulation Conference*, pp. 289–299.
- Barton, R. R. (1994). Metamodeling: A state of the art review. Em J. D. Tew, S. Manivannan, D. A. Sadowski, e A. F. Seila (Eds.), *Proceedings of the 1994 Winter Simulation Conference*, pp. 237–243.
- Barton, R. R. (1998). Simulation metamodels. Em D. J. Medeiros, E. F. Watson, J. S. Carson, e M. S. Manivannan (Eds.), *Proceedings of the 1998 Winter Simulation Conference*, pp. 167–174.
- Box, G. E. P., G. M. Jenkins e G. C. Reinsel (1994). *Time Series Analysis: Forecasting and Control* (3^a ed.). Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall.
- Brandão, R. M. e A. M. O. Porta Nova (1999). An experimental evaluation of methods for simulation output analysis. Em G. Horton, D. Möller, e U. Rüde (Eds.), *Proceedings of the 1999 European Simulation Symposium*, pp. 601–607. The Society for Computer Simulation.
- Brandão, R. M. e A. M. O. Porta Nova (2003a). Analysis of non-stationary stochastic simulations using time series. Artigo de Investigação 2/2003, CEG-IST.

- Brandão, R. M. e A. M. O. Porta Nova (2003b). Análise de resultados da simulação de filas de espera não estacionárias usando séries cronológicas. Em P. Brito, A. Figueiredo, F. Sousa, P. Teles, e F. Rosado (Eds.), *Literacia e Estatística-Actas do X Congresso Anual da SPE*, pp. 133–140. Sociedade Portuguesa de Estatística.
- Brandão, R. M. e A. M. O. Porta Nova (2003c). Non-stationary queue simulation analysis using time series. Em S. Chick, P. J. Sánchez, D. Ferrin, e D. J. Morrice (Eds.), *Proceedings of the 2003 Winter Simulation Conference*, pp. 408–413.
- Brandão, R. M. e A. M. O. Porta Nova (2004). Output analysis of cyclical simulations. Em J. Marin e V. Koncar (Eds.), *Proceedings of the 2004 Industrial Simulation Conference*, pp. 12–16. EUROSIS.
- Brockwell, P. J. e R. A. Davis (2002). *Introduction to Time Series and Forecasting* (2ª ed.). New York: Springer-Verlag.
- Broersen, P. M. T. e E. Weinsink (1993). On finite sample theory for autoregressive model order selection. *IEEE Transactions on Signal Processing* 41(1), 194–204.
- Davidson, R. e J. G. Mackinnon (1993). *Estimation and Inference in Econometrics*. New York: Oxford University Press.
- Fishman, G. S. (1971). Estimating sample size in computing simulation experiments. *Management Science* 18(1), 21–38.
- Fishman, G. S. (1978). *Principles of Discrete Event Simulation*. New York: John Wiley & Sons.
- Fuller, W. A. (1976). *Introduction to statistical time series*. New York: John Wiley & Sons.
- Gray, H. L., G. D. Kelley e D. D. McIntire (1978). A new approach to ARMA modeling. *Communications in Statistics B7*, 78–96.
- Gross, D. e C. M. Harris (1998). *Fundamentals of Queueing Theory* (3ª ed.). New York: John Wiley & Sons.
- Hamilton, J. D. (1994). *Time Series Analysis*. Princeton, NJ: Princeton University Press.
- Kleijnen, J. P. C. (1974). *Statistical Techniques in Simulation*. New York: Marcel Dekker.

- Kleijnen, J. P. C. (1983). Cross-validation using the t statistic. *European Journal of Operational Research* 13, 133–141.
- Kleijnen, J. P. C. (1992). Regression metamodels for simulation with common random numbers: comparison of validation tests and confidence intervals. *Management Science* 13(8), 1164–1185.
- Kleijnen, J. P. C. (1998). Experimental design for sensitivity analysis, optimization, and validation of simulation models. Em J. Banks (Ed.), *Handbook of Simulation*. John Wiley & Sons.
- Kleijnen, J. P. C. (2005). An overview of the design and analysis of simulation experiments for sensitivity analysis. *European Journal of Operational Research* 164, 287–300.
- Kleijnen, J. P. C. e D. Deflandre (2006). Validation of regression metamodels in simulation: bootstrap approach. *European Journal of Operational Research* 170, 120–131.
- Kleijnen, J. P. C. e W. V. Groenendaal (1992). *Simulation, A Statistical Perspective*. New York: John Wiley & Sons.
- Kleijnen, J. P. C. e R. G. Sargent (2000). A methodology for fitting and validating metamodels in simulation. *European Journal of Operational Research* 120, 14–29.
- Law, A. M. e W. D. Kelton (2000). *Simulation Modeling and Analysis* (3^a ed.). New York: McGraw-Hill.
- Ljung, G. M. e G. E. P. Box (1978). On a measure of lack of fit in time series models. *Biometrika* 65, 67–72.
- Murteira, B. J. F., D. A. Müller e K. F. Turkman (1993). *Análise de Sucessões Cronológicas*. Portugal: McGraw-Hill.
- Nozari, A., S. F. Arnold e C. D. Pegden (1984). Control variates for multipopulation simulation experiments. *IIE Transactions* 16, 159–169.
- Panis, R. P., R. H. Myers e E. C. Houck (1994). Combining regression diagnostics with simulation metamodels. *European Journal of Operational Research* 73, 85–94.
- Peña, D., G. C. Tiao e R. S. Tsay (2001). *A Course in Time Series Analysis*. New York: John Wiley & Sons.

- Pritsker, A. A. B. e J. J. O'Reilly (1999). *Simulation with Visual SLAM and Awesim* (2^a ed.). New York: John Wiley & Sons.
- R Development Core Team (2004). *R: A language and environment for statistical computing*. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing. ISBN 3-900051-00-3.
- Rao, C. R. (1959). Some problems involving linear hypotheses in multivariate analysis. *Biometrika* 46, 49–58.
- Rissanen, J. (1986). Order estimation by accumulated prediction errors. Em J. Gani e M. B. Priestly (Eds.), *Essays in Time Series and Allied Processes*, Volume 23A de *J. Appl. Prob.*, pp. 55–61.
- Royston, J. P. (1982a). Algorithm as 181: The w test for normality. *Applied Statistics* 31(2), 176–180.
- Royston, J. P. (1982b). A extension of Shapiro and Wilk's W test for normality to large samples. *Applied Statistics* 31(2), 115–124.
- Royston, J. P. (1986). A remark on algorithm as 181: The w test for normality. *Applied Statistics* 35(2), 232–234.
- Santos, M. I. R. e A. M. O. Porta Nova (1999). The main issues in nonlinear simulation metamodel estimation. Em P. A. Farrington, H. B. Nembhard, D. T. Sturrock, e G. W. Evans (Eds.), *Proceedings of the 2003 Winter Simulation Conference*, pp. 502–509.
- Santos, M. I. R. e A. M. O. Porta Nova (2001). Validation of nonlinear simulation metamodels. Em M. H. Hamza (Ed.), *Proceedings of Applied Simulation and Modeling*, pp. 421–425.
- Schriber, T. J. e R. W. Andrews (1984). ARMA-based confidence intervals for simulation output analysis. *Am. J. Math. Management Science* 4(3 & 4), 345–373.
- Schruben, L. W. (1982). Detecting initialization bias in simulation output. *Operations Research* 30(3), 569–590.
- Schwarz, G. (1978). Estimating the dimension of a model. *Ann. Stat.* 6(2), 461–464.
- Seber, G. A. F. e C. J. Wild (2003). *Nonlinear Regression*. New Jersey: John Wiley & Sons.

- Shapiro, S. S. e M. B. Wilk (1965). An analysis of variance test for normality (complete samples). *Biometrika* 52(2), 491–611.
- Sheth-Voss, P. A., T. R. Willemain e J. Haddock (2005). Estimating the steady-state mean from short transient simulations. *European Journal of Operational Research* 162, 403–417.
- Yuan, M. e B. L. Nelson (1994). Autoregressive-output-analysis method revisited. *Annals of Operations Research* 53, 391–418.