

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA

ESCUELA DE MATEMÁTICA



Universidad de El Salvador

Hacia la libertad por la cultura

“Metodología de Superficie de Respuesta (MSR), conceptos y aplicación para obtener el valor óptimo en un experimento”

TRABAJO DE GRADUACION PARA OPTAR AL TITULO DE:

LICENCIADO EN ESTADÍSTICA

PRESENTAN:

**Joaquín Nóchez Hernández
Alan Jesús Ventura Hernández**

CIUDAD UNIVERSITARIA, SAN SALVADOR, MARZO DE 2009

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR

RECTOR
ING. RUFINO ANTONIO QUEZADA SÁNCHEZ

VICERRECTOR ACADÉMICO
MSC. MIGUEL ÁNGEL PÉREZ RAMOS

VICERRECTORA ADMINISTRATIVO
MSC. OSCAR NOÉ NAVARRETE ROMERO

SECRETARIO GENERAL
LIC. DOUGLAS VLADIMIR ALFARO CHÁVEZ

FISCAL GENERAL
DR. RENÉ MADECADEL PERLA JIMENEZ

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA

DECANO
DR. RAFAEL ANTONIO GÓMEZ ESCOTO

VICEDECANO
LICDA. MARTHA NOEMÍ MARTÍNEZ HERNÁNDEZ

SECRETARIO
LICDA. MARÍA TRINIDAD TRIGUEROS DE CASTRO

ASESORES DE TESIS
DR. JOSÉ NERYS FUNES TORRES
MSC. ALBA IDALIA CORDOVA CUELLAR

AGRADECIMIENTOS

A Jesucristo, mi Señor y Salvador, por haber tenido misericordia de mi vida; gracias Señor, por todo lo bueno que has sido conmigo. A mis padres Alba Yolanda de Ventura y Jesús Ventura Santos, por confiar en mí. A mis hermanas Irasema Astrid Ventura y Nidia Isella Ventura por su comprensión y cariño. A mis asesores, familia y amigos, un gran profundo agradecimiento.

Alan Jesús Ventura Hdez.

Este gran paso que he dado en mi vida, se lo agradezco al igual que la mayoría a: Dios Todopoderoso, el cual me ha permitido estar sano, con vida, con un trabajo y regalarme el Don de la sabiduría y en especial por permitirme tener todo lo mejor que tengo (Familia, Amigos, Compañeros).

Agradezco a todas las personas que estuvieron colaborando conmigo de alguna u otra manera, a mi familia (Abuela, Mamá, Tíos, Primos) por sus oraciones, cariño, comprensión, colaboración económica por su apoyo en los momentos difíciles de vida incluyendo mis estudios.

Agradezco por mi éxito, a mis amigos y amigas, compañeros de Universidad con los cuales aprendí a no rendirme, a mis asesores de tesis que estuvieron pendientes exigiéndome para verme triunfar en la vida.

Joaquín Nóchez Hernández.

INDICE

1.1 Introducción al Diseño de Experimentos	1
1.2 Diseños Experimentales para ajustar Superficie de Respuesta	4
1.2.1 Diseño Factorial 2^k	5
1.2.1.1 Diseño Factorial 2^2	6
1.2.1.2 Diseño Factorial 2^3	19
1.2.1.3 Diseño Factorial General 2^k	32
1.2.2. Diseño Factorial Fraccionario de dos niveles.....	44
1.2.2.1 Fracción un medio del Diseño 2^k	45
1.2.2.2 Fracción un cuarto del Diseño 2^k	63
1.2.2.3 Diseño Factorial Fraccionario 2^{k-p} General.....	75
1.2.3 Diseño Simplex.....	90
1.2.4 Diseño Central Compuesto.....	101
2.1 Introducción.....	113
2.2 Método de Escalamiento ascendente (o descendente).....	114

2.2.1 Mejoramiento del proceso (camino de paso ascendente).....	116
2.2.2 Región de confianza para la dirección del Paso Ascendente.....	127
2.2.3 Paso Ascendente para una Restricción Lineal.....	132
2.3 Superficie de Respuesta de segundo Orden.....	138
2.3.1 Función de segundo orden y Superficie de Respuesta.....	139
2.3.2 Representación gráfica de la Superficie de Respuesta de segundo orden...	140
2.3.3 Forma analítica para aproximar un modelo de segundo orden.....	143
2.3.3.1 Localización del punto estacionario.....	143
2.3.3.2 La naturaleza del punto estacionario (Análisis canónico).....	144
2.3.3.3 El Sistema de Cadena (o cordillera).....	150
2.3.4 Análisis de Cadena (o cordillera) a través de gráficas de contorno.....	156
2.3.5 Importancia del análisis de cadena.....	157
2.3.6 Desarrollo Matemático del Análisis de Cadena.....	159
2.4 Error Estándar de respuesta Pronosticado.....	161
2.5 Región de confianza en la Posición del Punto Estacionario.....	170
Bibliografía.....	181

CAPÍTULO I: Diseños de experimentos para superficie de respuesta.

1.1 Introducción al Diseño de Experimentos

La naturaleza secuencial de la Metodología de Superficie de Respuesta (MSR), inicia cuando existe una característica de interés a ser medida y continúa con la generación de ideas para determinar el conjunto de factores o variables controlables significativas que determinan su comportamiento. Los factores que se sospecha que determinan el comportamiento de la variable de respuesta, son analizados en diseños de experimentos iterativos y a través del análisis de varianza se determinan cuales son significantes. Antes de entrar en el análisis de la superficie de respuesta se considera importante profundizar en los diseños de experimentos clásicos.

¿Qué es un diseño experimental?

El diseño de un experimento es la secuencia completa de los pasos que se deben tomar de antemano, para planear y asegurar la obtención de toda la información relevante y adecuada al problema bajo investigación, la cual será analizada estadísticamente para obtener conclusiones válidas y objetivas con respecto a los objetivos planteados.

Cuando se realiza un diseño experimental es necesario tener en cuenta los siguientes objetivos:

1. Determinar cuales variables tienen mayor influencia en la respuesta o variable dependiente (y).
2. Determinar el mejor valor de las variables de entrada (x) que influyen en (y), de modo que (y) tenga casi siempre un valor cercano al valor nominal deseado.
3. Determinar el mejor valor de las (x) que influyen en (y), de modo que la variabilidad de (y) sea pequeña.

Propósitos de un diseño experimental

El propósito de cualquier Diseño Experimental, es proporcionar una cantidad máxima de información pertinente al problema que se está investigando, y ajustar el diseño que sea lo más simple y efectivo; para ahorrar dinero, tiempo, personal y material experimental que se va a utilizar. Es de hacer mención, que la mayoría de los diseños estadísticos simples, no sólo son fáciles de analizar, sino también son eficientes en el sentido económico y en el estadístico.

CONCEPTOS BÁSICOS

- ▶ **DISEÑO:** Consiste en planificar la forma de hacer el experimento, materiales y métodos a usar, etc.
- ▶ **EXPERIMENTO:** Conjunto de pruebas o ensayos cuyo objetivo es obtener información, que permita mejorar el producto o el proceso en estudio.
- ▶ **TRATAMIENTO:**
 - Es un conjunto particular de condiciones experimentales definidas por el investigador.
 - Son el conjunto de circunstancias creadas por el experimento, en respuesta a la hipótesis de investigación y son el centro de la misma.
- ▶ **FACTOR:** Es un grupo específico de tratamientos. (Ejemplo, Temperatura, humedad, tipos de suelos, etc.).
- ▶ **NIVELES DEL FACTOR:** Son diversas categorías de un factor. (Por ejemplo, los niveles de temperatura son 20°C, 30°C, etc.). Un factor Cuantitativo tiene niveles asociados con puntos ordenados en alguna escala de medición, como temperatura; mientras que los niveles de un factor cualitativo representan distintas categorías o clasificaciones, como tipo de suelo, que no se puede acomodar conforme a alguna magnitud.
- ▶ **RÉPLICA:** Son las repeticiones que se realizan del experimento básico.

- ▶ **UNIDAD EXPERIMENTAL:**
 - Es el material experimental unitario que recibe la aplicación de un tratamiento.
 - Es la entidad física o el sujeto expuesto al tratamiento independientemente de las otras unidades. La unidad experimental una vez expuesta al tratamiento constituye una sola réplica del tratamiento.
 - Es el objeto o espacio al cual se aplica el tratamiento y donde se mide y analiza la variable que se investiga.
 - Es el elemento que se está estudiando.
- ▶ **UNIDAD MUESTRAL:** Es una fracción de la unidad experimental que se utiliza para medir el efecto de un tratamiento.
- ▶ **ERROR EXPERIMENTAL:** Es una medida de variación que existe entre dos o más unidades experimentales, que han recibido la aplicación de un mismo tratamiento de manera idéntica e independiente.
- ▶ **FACTORES CONTROLABLES:** Son aquellos parámetros o características del producto o proceso, para los cuales se prueban distintas variables o valores con el fin de estudiar cómo influyen sobre los resultados.
- ▶ **VARIABILIDAD NATURAL:** es la variación entre las unidades experimentales, que el experimentador no puede controlar ni eliminar.
- ▶ **VARIABLE DEPENDIENTE:** es la variable que se desea examinar o estudiar en un experimento. (Variable Respuesta).
- ▶ **HIPÓTESIS:**
 - Es una suposición o conjetura que se plantea el investigador de una realidad desconocida.
 - Es el supuesto que se hace sobre el valor de un parámetro (constante que caracteriza a una población) el cual puede ser validado mediante una prueba estadística.

1.2 Diseños experimentales para ajustar Superficies de Respuesta.

El ajuste y análisis de una superficie de respuesta se facilita con la elección apropiada de un diseño experimental. Entre los diseños que se aplican en esta metodología tenemos:

Diseños para ajustar Modelos de Primer Orden.

En esta clase de diseños se encuentran los diseños ortogonales de primer orden, es decir aquellos en la que dada la matriz $x = [I, x_1, x_2, \dots, x_k]$, donde cada $x_j \in \{-1, 1\}$, y el producto $(x'x)$ resulta una matriz diagonal, lo cual implica que los productos cruzados de las columnas $(x_i, x_j), i \neq j$ de la matriz son igual a cero.

Por ejemplo: Dada la matriz

$$x = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 \\ \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} & \text{Su transpuesta es: } x' = & \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Y el producto de estas matrices es: $x'x = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}$ la cual se calcula fácilmente y se

comprueba que es una matriz diagonal. Por lo tanto podemos aplicar un diseño de primer orden.

En esta clase de diseños ortogonales de primer orden se incluyen:

- a. Diseños Factoriales 2^k
- b. Fracciones de la serie 2^k
- c. Diseños Simplex

Diseños para ajustar Modelos de Segundo Orden.

Para ajustar un modelo de segundo orden un diseño experimental debe tener al menos tres niveles de cada factor (-1, 0, +1). Así como en el diseño de primer orden se desea la ortogonalidad, en éste se desea que sea un diseño rotable. Se dice que un diseño es rotable cuando la varianza de la respuesta predicha en algún punto es función sólo de la distancia del punto al centro y no es una función de la dirección.

La rotabilidad es una propiedad importante, dado que la finalidad de la Metodología de Superficies de Respuesta es optimizar si desconocemos la localización del óptimo, tiene sentido utilizar un diseño que proporcione estimaciones precisas en todas las direcciones.

Dentro de los diseños rotables de segundo orden el más común y por ende el más utilizado es el Diseño Central Compuesto.

1.2.1 Diseño Factorial 2^k

Este tipo de diseño son los utilizados en los experimentos en los que intervienen k factores, donde se esta interesado en una variable de respuesta la cual depende de estos factores, cada uno de los k factores tiene dos niveles (bajo, alto), cuando se realizan experimentos con estas características es donde se aplica el análisis del diseño factorial. Una replica completa de tal diseño requiere que se recopilen $2 \times 2 \times \dots \times 2 = 2^k$ observaciones y se conoce como diseño factorial 2^k .

A continuación se presentan métodos especiales para el análisis de los tipos de Diseños Factoriales 2^2 , 2^3 y una generalización de estos (2^k), en ambos casos supondremos que:

- a. Los Factores son Fijos.
- b. Los Diseños son Completamente Aleatorizados.
- c. Que satisfacen la suposición usual de normalidad.

1.2.1.1 Diseño Factorial 2^2

Este Diseño Factorial es el primero de la serie 2^k , en el cual sólo existen dos factores en estudio (A y B), cada uno con dos niveles; que se suelen considerar como "alto" y "bajo". El nivel alto tanto del Factor A como del Factor B se denota con el signo mas "+" y el nivel bajo con el signo menos "-".

En este Diseño habrá cuatro combinaciones de tratamiento que son:

1. bajoA-bajoB.
2. altoA-bajoB.
3. bajoA-altoB.
4. altoA-altoB.

En general una combinación de tratamiento se representa por una serie de letras minúsculas, de la siguiente forma:

a : alto A-bajo B

b : bajo A-alto B

ab : alto A-alto B

(1) : bajo A-bajo B

Las cuales verbalmente significan:

a : Representa la combinación de tratamiento, en la que el factor A se encuentra en el nivel alto y el factor B en el nivel bajo.

b : Representa la combinación de tratamiento, en la que el factor A se encuentra en el nivel bajo y el factor B en el nivel alto.

ab : Representa la combinación de tratamiento, en la que ambos factores (A y B) se encuentran en el nivel alto.

(1) : Representa la combinación de tratamiento, en la que ambos factores (A y B) se encuentran en el nivel bajo.

Por lo tanto, el nivel "alto" de cualquier factor de una combinación de tratamiento está representado por la presencia de la letra minúscula correspondiente.

Las letras minúsculas (1), a , b y ab también se usaran para representar los totales de las n réplicas de las combinaciones de tratamientos correspondientes.

Las combinaciones de tratamientos se representan geoméricamente de la siguiente forma:

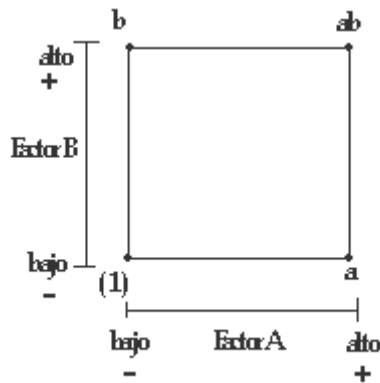


Figura 1.1: Representación gráfica de un diseño 2^2

El uso de las palabras alto y bajo, es arbitrario y no tiene un significado particular en el análisis. Tratándose de un factor cuantitativo, un nivel tendrá un valor más alto y el otro un valor más bajo; coincidiendo con la simbología adoptada, pero si se trata de un factor cualitativo no habrá esta ordenación entre los niveles de los factores, y podría señalarse arbitrariamente a uno como "alto" y al otro como "bajo".

Las letras mayúsculas A, B y AB se utilizaran para denotar el efecto de un factor; por lo tanto:

"A" : Se refiere al efecto del factor A.

"B" : Se refiere al efecto del factor B.

"AB": Se refiere al efecto de la interacción del factor A y el factor B.

Como en los Diseños Factoriales 2^2 , el número de factores son dos con dos niveles cada uno y en cada nivel existen "n" réplicas del Experimento; entonces, el número total de observaciones en el Experimento es de $N = 2 \times 2 \times n = 4n$.

Estimación de los Efectos de los Factores

En general, el efecto de un factor vendrá dado por el promedio del efecto del mismo factor en los niveles bajo y alto del otro factor, siendo "n" el número de réplicas.

En muchos libros de Diseños de Experimentos se utilizan dos métodos para encontrar los efectos de los factores y de la interacción que proporcionan resultados equivalentes, sin embargo, en este documento se presenta uno de los dos métodos, en el cual, se utiliza la representación geométrica para calcular dichos efectos.

Efecto promedio del factor A

En la figura 1.1 se ha representado las combinaciones de tratamientos; tomando sus valores de derecha a izquierda se observa que:

El efecto del Factor A en el nivel bajo del Factor B es: $\frac{(a - (1))}{n}$

El efecto del Factor A en el nivel alto del Factor B es: $\frac{(ab - b)}{n}$

Por lo tanto, el efecto promedio de A será:

$$A = \frac{1}{2} \left[\frac{(a - (1))}{n} + \frac{(ab - b)}{n} \right]$$

$$A = \frac{1}{2n} (a - (1) + ab - b)$$

$$A = \frac{1}{2n} (ab + a - b - (1))$$

Ecuación 1.1

Efecto promedio del factor B

De la representación geométrica de las combinaciones de tratamientos; tomando de arriba hacia abajo se observa que:

El efecto del Factor B en el nivel bajo del Factor A es: $\frac{(b - (1))}{n}$

El efecto del Factor B en el nivel alto del Factor A es: $\frac{(ab - a)}{n}$

Por lo tanto:

$$B = \frac{1}{2} \left[\frac{(b - (1))}{n} + \frac{(ab - a)}{n} \right]$$

$$B = \frac{1}{2n} (b - (1) + ab - a)$$

$$B = \frac{1}{2n} (ab + b - a - (1)) \quad \text{Ecuación 1.2}$$

Efecto promedio de la interacción AB.

Se define como la diferencia promedio entre el efecto del factor A en el nivel alto del Factor B, que es $\left[\frac{(ab - b)}{n} \right]$; y su efecto promedio en el nivel bajo del Factor B, que es

$$\left[\frac{(a - (1))}{n} \right].$$

Por lo tanto:

$$AB = \frac{1}{2} \left[\frac{(ab - b)}{n} - \frac{(a - (1))}{n} \right]$$

$$AB = \frac{1}{2n} (ab - b - a + (1))$$

$$AB = \frac{1}{2n} (ab + (1) - a - b) \quad \text{Ecuación 1.3}$$

Este último efecto, también se puede definir como la diferencia promedio entre el efecto del Factor B en el nivel alto del Factor A, que es $\left[\frac{(ab - a)}{n} \right]$; y el efecto promedio del Factor B en el nivel bajo del Factor A, que es $\left[\frac{(b - (1))}{n} \right]$.

Por lo tanto:

$$AB = \frac{1}{2} \left[\frac{(ab - a)}{n} - \frac{(b - (1))}{n} \right]$$

$$AB = \frac{1}{2n} [ab - a - b + (1)]$$

$$AB = \frac{1}{2n} (ab + (1) - a - b)$$

El efecto principal de un factor es el efecto promedio que se produce a consecuencia de cambiarlo del nivel bajo al nivel alto a ese factor.

La interacción entre dos factores se da cuando el efecto de uno de ellos es diferente para los niveles alto y bajo del otro factor.

Ejemplo 1.1: Para ilustrar el uso de este diseño, consideremos una investigación llevada a cabo para estudiar el efecto que tienen la concentración de un reactivo y la presencia de un catalizador sobre el tiempo de reacción de un proceso químico. Sea la concentración del reactivo el factor A con dos niveles de interés, 15% y 20%. El catalizador constituye el factor B; el nivel alto (o superior) denota el uso de dos sacos de catalizador y el nivel bajo (o inferior) denota el uso de solo un saco. El experimento se realiza (“réplica” o “repite”) tres veces, y los datos obtenidos son los siguientes:

Combinación de Tratamiento	Réplicas			Total
	I	II	II	
A baja, B baja	28	25	27	80
A alta, B baja	36	32	32	100
A baja, B alta	18	19	23	60
A alta, B alta	31	30	29	90

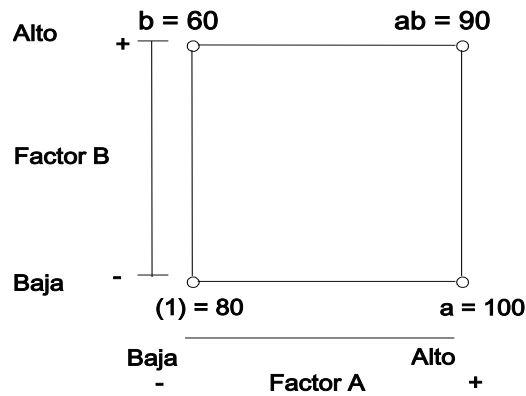


Figura 1.2: Representación gráfica.

En esta figura se presentan las combinaciones de tratamientos para este diseño. Utilizando la información representada en la figura anterior y las ecuaciones 1.1, 1.2 y 1.3, entonces las estimaciones de los efectos promedios son:

$$A = \frac{1}{2n} [ab + a - b - (1)] = \frac{1}{2(3)} [90 + 100 - 60 - 80] = \frac{50}{6} = 8.33$$

$$B = \frac{1}{2n} [ab + b - a - (1)] = \frac{1}{2(3)} [90 + 60 - 100 - 80] = \frac{-30}{6} = -5.00$$

$$AB = \frac{1}{2n} [ab + (1) - a - b] = \frac{1}{2(3)} [90 + 80 - 100 - 60] = \frac{10}{6} = 1.67$$

El efecto de A (Concentración de reactivo) es positivo, esto sugiere que al elevar el factor A del nivel (15%) al nivel (25%) incrementará el rendimiento. El efecto B (Catalizador) es negativo, esto sugiere que elevar la cantidad de catalizador agregado al proceso reducirá el rendimiento. Al parecer, el efecto de interacción es pequeño comparado con los dos efectos principales, pero más adelante se concluirá sobre este efecto.

Sumas de Cuadrados

El Análisis de Varianza en los Diseños 2^k se utilizará para examinar la magnitud y la dirección de los efectos de los factores y para determinar las variables que sean significativamente importantes.

A continuación, se presenta un método rápido para llevar a cabo los cálculos del Análisis de Varianza.

Si se observa, en los efectos encontrados para A, B y AB anteriormente están involucrados o inmersos sus respectivos contrastes, que son los que se encuentran entre paréntesis en dichos efectos, como se muestra en la siguiente tabla:

Factor	Efecto	Contraste
A	$\frac{1}{2n} [ab + a - b - (1)]$	$ab + a - b - (1)$
B	$\frac{1}{2n} [ab + b - a - (1)]$	$ab + b - a - (1)$
AB	$\frac{1}{2n} [ab + (1) - a - b]$	$ab + (1) - a - b$

Tabla 1.1: Contraste para los factores A, B y AB.

Por lo tanto, de la tabla anterior se tiene que:

$$\text{Contraste}_A = ab + a - b - (1)$$

$$\text{Contraste}_B = ab + b - a - (1)$$

$$\text{Contraste}_{AB} = ab + (1) - a - b$$

A estos contrastes se suelen denominar efecto total de A, B y AB respectivamente. La suma de cuadrados para cada uno puede calcularse como el contraste elevado al cuadrado, entre el producto del número de observaciones de cada total del contraste y la suma de los

cuadrados de los coeficientes del mismo. Es decir, que $SS_C = \frac{\left(\sum_{i=1}^a c_i y_i\right)^2}{n \sum_{i=1}^a c_i^2}$

Por lo tanto, las sumas de cuadrados de los efectos principales (A,B) y la interacción (AB) puede obtenerse por el contraste respectivo elevado al cuadrado entre el número total de observaciones; tal como:

$$SS = \frac{(\text{contraste})^2}{4n}.$$

Entonces la suma de cuadrados de A, B y AB es:

$$SS_A = \frac{[ab + a - b - (1)]^2}{4n} \quad \text{ecuación 1.4}$$

$$SS_B = \frac{[ab + b - a - (1)]^2}{4n} \quad \text{ecuación 1.5}$$

$$SS_{AB} = \frac{[ab + (1) - a - b]^2}{4n} \quad \text{ecuación 1.6}$$

La suma total de cuadrados y la suma de cuadrados del error se obtiene de forma usual.

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}^2 - \frac{y_{\dots}^2}{4n} \quad \text{ecuación 1.7}$$

$$SS_E = SS_T - SS_A - SS_B - SS_{AB} \quad \text{ecuación 1.8}$$

Donde:

y_{ijk} :Representa cada una de las observaciones bajo las distintas combinaciones de tratamiento.

y...: Representa el total de los totales.

SS_T : Tiene $4n-1$ grados de libertad; ya que hay un total de $N = 4n$

SS_E : Tiene $4(n-1)$ grados de libertad; porque, cada uno de los efectos principales y efectos doble tiene un grado de libertad.

Retomando los datos del ejemplo 1.1 y usando las ecuaciones 1.4, 1.5 y 1.6 las sumas de cuadrados nos quedarían:

$$SS_A = \frac{[ab + a - b - (1)]^2}{4n} = \frac{(50)^2}{4(3)} = 208.33$$

$$SS_B = \frac{[ab + b - a - (1)]^2}{4n} = \frac{(-30)^2}{4(3)} = 75.00$$

$$SS_{AB} = \frac{[ab + (1) - a - b]^2}{4n} = \frac{(10)^2}{4(3)} = 8.33$$

Además:

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}^2 - \frac{y_{...}^2}{4(3)} = 9398.00 - 9075.00 = 323$$

$$SS_E = SS_T - SS_A - SS_B - SS_{AB} = 323 - 208.33 - 75 - 8.33 = 31.34$$

Una forma rápida y sencilla de encontrar la tabla de análisis de varianza, es utilizar el paquete SPSS, para los datos del ejemplo 1.1, se obtiene:

Fuente de Variación	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Media de Cuadrados	F
A	208,333	1	208,333	53,191
B	75,000	1	75,000	19,149
A * B	8,333	1	8,333	2,128
Error	31,333	8	3,917	
Total	323,000	11		

Tabla 1.2: Tabla de Análisis de Varianza para los datos del ejemplo 1.1.

Podemos observar que los resultados son los mismos y se ahorra nuestro tiempo. También que nuestras conclusiones anteriores son ciertas, ya que utilizando el criterio de la Distribución F, si comparamos los valores dados en la corrida con el valor de F de tablas $F_{tablas} = f_{0.99,1,8} = 11.26$, ambos efectos principales son significativos al 1%. Dado que ambos valores de F son mayores que el F_{tablas} .

Análisis de Residuos.

Otra manera de confirmar las conclusiones es haciendo una prueba de residuos, es fácil calcularlo por medio de un modelo de regresión. Para el resultado y conclusiones del ejemplo 1.1, el modelo de regresión es:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon$$

Ya que concluimos que solo los efectos principales eran significativos, no así su interacción.

El modelo de regresión ajustado es:

$$\hat{y} = 27.5 + \left(\frac{8.33}{2}\right)x_1 + \left(\frac{-5.00}{2}\right)x_2$$

Donde la ordenada al origen se obtiene como el promedio de todas las observaciones, en este caso el promedio de las 12 observaciones es 27.5, y los coeficientes de regresión $\hat{\beta}_1$ y $\hat{\beta}_2$ se obtienen como un medio de las estimaciones de los efectos de los factores correspondientes, los cuales se calcularon anteriormente.

Dichos valores de $\hat{\beta}_1$ y $\hat{\beta}_2$ también se obtienen fácilmente utilizando el programa del SPSS haciendo un análisis de regresión para nuestros datos.

La causa de que los coeficientes de regresión sean la mitad de la estimación del efecto es que un coeficiente mide el efecto de un cambio unitario en x sobre la media de y , y la estimación de nuestros efectos se basa en un cambio de dos unidades (de -1 a +1).

Este modelo puede utilizarse para generar los valores predichos de y , en los cuatro puntos del diseño, es decir las cuatro combinaciones de tratamientos.

Cuando ambos efectos están en el nivel bajo, es decir, $x_1 = -1$ y $x_2 = -1$ el rendimiento

predicho es:

$$\hat{y} = 27.5 + \left(\frac{8.33}{2}\right)(-1) + \left(\frac{-5.00}{2}\right)(-1)$$
$$= 25.835$$

Como existen tres observaciones para esta combinación bajo-bajo los residuos $e = y - \hat{y}$ son:

$$e_1 = 28 - 25.835 = 2.165$$

$$e_2 = 25 - 25.835 = -0.835$$

$$e_3 = 27 - 25.835 = 1.165$$

Cuando el efecto de A es alto y el de B bajo, es decir, $x_1 = 1$ y $x_2 = -1$ el rendimiento

predicho es:

$$\hat{y} = 27.5 + \left(\frac{8.33}{2}\right)(1) + \left(\frac{-5.00}{2}\right)(-1)$$
$$= 34.165$$

Así

$$e_4 = 36 - 34.165 = 1.835$$

$$e_5 = 32 - 34.165 = -2.165$$

$$e_6 = 32 - 34.165 = -2.165$$

Cuando el efecto de A es bajo y el de B alto, es decir, $x_1 = -1$ y $x_2 = 1$ el rendimiento

predicho es:

$$\hat{y} = 27.5 + \left(\frac{8.33}{2}\right)(-1) + \left(\frac{-5.00}{2}\right)(1)$$
$$= 20.835$$

y los errores son:

$$e_7 = 18 - 20.835 = -2.835$$

$$e_8 = 19 - 20.835 = -1.835$$

$$e_9 = 23 - 20.835 = 2.165$$

Finalmente ambos efectos en nivel alto:

$$\hat{y} = 27.5 + \left(\frac{8.33}{2}\right)(1) + \left(\frac{-5.00}{2}\right)(1)$$

$$= 29.165$$

y los errores son:

$$e_{10} = 31 - 29.165 = 1.835$$

$$e_{11} = 30 - 29.165 = 0.835$$

$$e_{12} = 29 - 29.165 = -0.165$$

En la figura siguiente se presenta una gráfica de probabilidad normal de estos residuos, y los residuos contra los dos factores.

Figura 1.3: Gráfica de los factores contra residuos

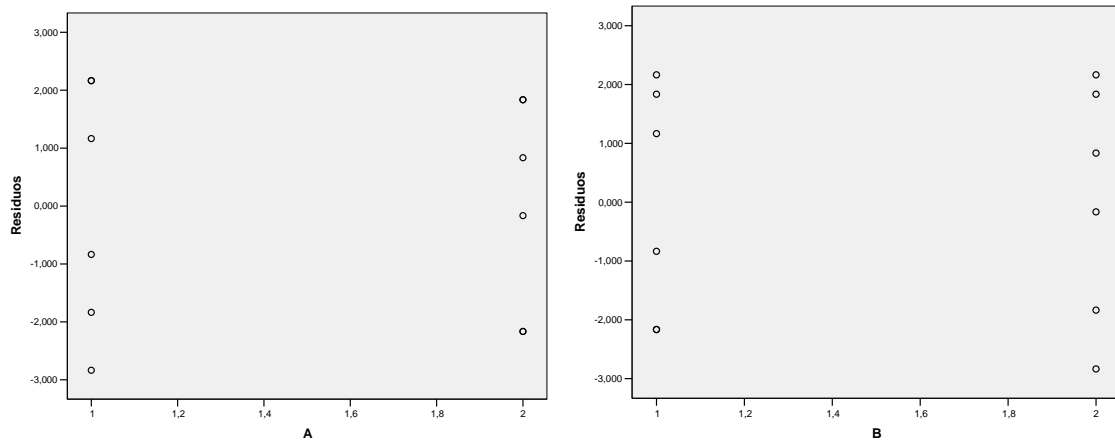
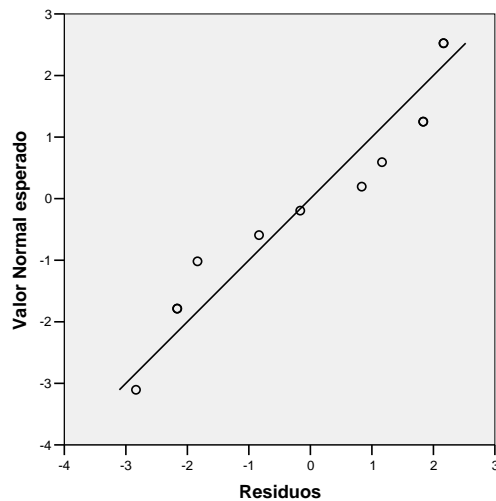


Figura 1.4: Gráfica de los residuos.



Al parecer estas gráficas indican resultados satisfactorios, ya que en la figura 1.4 podemos observar que los residuos parecen ajustarse a una línea recta, por lo que no tenemos motivos para sospechar que existan problemas en cuanto a la validez de nuestras conclusiones.

Orden Estándar.

Las combinaciones de tratamientos es posible escribirlas en el orden (1) , a , b y ab ; el cual se conoce como **Orden Estándar**, y está formada por los coeficientes de los contrastes usados para estimar los efectos, y siempre son +1 ó -1, como se presenta en la siguiente tabla:

Efectos	(1)	a	b	ab
A	-1	+1	-1	+1
B	-1	-1	+1	+1
AB	+1	-1	-1	+1

De la tabla anterior se puede elaborar una tabla de signos algebraicos (positivos y negativos), en la cual en el encabezado de las columnas se encuentran los efectos principales (A y B), la interacción (AB), e I, que representa el total o el promedio de todo el experimento.

Combinación de Tratamientos	Efecto Factorial			
	I	A	B	AB
(1)	+	-	-	+
a	+	+	-	-
b	+	-	+	-
ab	+	+	+	+

En la tabla anterior se puede observar que la columna encabezada por I, que representa el total o el promedio de todo el experimento, esta formada sólo por signos positivos; los signos de la columna AB se obtiene como el producto de los signos de los dos efectos principales (A y B), es decir, multiplicando los signos de las columnas encabezadas por A y B.

Esta tabla puede ser utilizada para encontrar los coeficientes de los contrastes, con el fin de estimar cualquier efecto; simplemente multiplicando los signos de la columna apropiada por la correspondiente combinación de tratamientos, y luego sumándolos.

En este sentido, los contrastes para estimar A, B y AB se obtienen:

$$\text{Contraste}_A = - (1) + a - b + ab$$

$$\text{Contraste}_B = - (1) - a + b + ab$$

$$\text{Contraste}_{AB} = (1) - a - b + ab$$

Como puede observarse estos contrastes coinciden con los que se obtuvieron anteriormente.

1.2.1.2 Diseño Factorial 2^3

Si en un Experimento se estudian tres factores A, B y C, cada uno con dos niveles. Este Diseño se conoce como Diseño Factorial 2^3 .

Para el estudio de este Diseño Factorial se retomará la notación definida en el Diseño Factorial 2^2 , que fue planteada anteriormente.

En este Diseño habrá ocho combinaciones de tratamiento ($2^3 = 8$) que son (1), a, b, c, ab, ac, bc, abc, las cuales se pueden representar geoméricamente mediante un cubo de la siguiente manera:

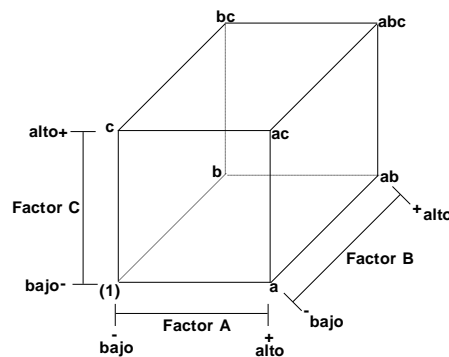


Figura 1.5: Representación gráfica de un diseño 2^3

Estas combinaciones de tratamientos representan los niveles a los que se encuentran dichos factores y significan:

(1): el factor A, B y C se encuentra en el nivel bajo

a : alto A-bajo B-bajo C

b : bajo A-alto B-bajo C

c : bajo A-bajo B-alto C

ab : alto A-alto B-bajo C

ac : alto A-bajo B-alto C

bc : bajo A-alto B-alto C

abc : alto A-alto B-alto C

Representación simbólica de los Datos

Ya que en los Diseños Factoriales 2^3 , el número de factores son tres (A, B y C) con dos niveles cada uno y en cada nivel existen "*n*" réplicas del Experimento; entonces el número total de observaciones en el Experimento es $N = 2 \times 2 \times 2 \times n = 8n$; ya que se realizaron *n* réplicas.

La tabla de los datos será:

Corrida o combinación de Tratamientos.	Factor		
	A	B	C
1	-	-	-
2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	-
5	-	-	+
6	+	-	+
7	-	+	+
8	+	+	+

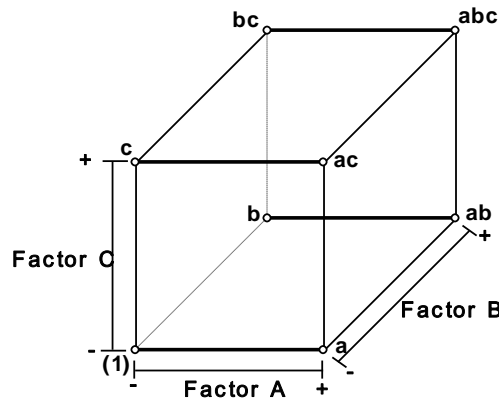
Estimación de los Efectos de los Factores

Las estimaciones de los efectos principales y las interacciones; igual que en el Diseño 2^2 se pueden calcular por medio de dos métodos, sin embargo, en este documento se presenta uno de los dos métodos.

Efecto del Factor A

El efecto promedio del factor A vendrá dado como el promedio de la suma de los efectos del factor A de las diferentes combinaciones de los niveles de los factores B y C.

La forma de visualizarlo en el cubo es desplazando el factor A a las diferentes combinaciones de los niveles alto y bajo de los factores B y C; tomando las combinaciones de derecha a izquierda. Es decir, los vértices de los segmentos gruesos del cubo siguiente:



De la figura anterior se obtiene la siguiente tabla:

Factor B	Factor C	Efecto del Factor A
Nivel bajo	Nivel bajo	$\frac{(a - (1))}{n}$
Nivel alto	Nivel bajo	$\frac{(ab - b)}{n}$
Nivel bajo	Nivel alto	$\frac{(ac - c)}{n}$
Nivel alto	Nivel alto	$\frac{(abc - bc)}{n}$

El efecto promedio del factor A es:

$$A = \frac{1}{4} \left[\frac{(a - (1))}{n} + \frac{(ab - b)}{n} + \frac{(ac - c)}{n} + \frac{(abc - bc)}{n} \right]$$

$$= \frac{1}{4n} [a - (1) + ab - b + ac - c + abc - bc]$$

Con la misma lógica se calcula el efecto promedio del factor B y el efecto promedio del factor C.

El efecto promedio del factor B es:

$$B = \frac{1}{4} \left[\frac{(b - (1))}{n} + \frac{(ab - a)}{n} + \frac{(bc - c)}{n} + \frac{(abc - ac)}{n} \right]$$

$$= \frac{1}{4n} [b + ab + bc + abc - (1) - a - c - ac]$$

El efecto promedio del factor C es:

$$C = \frac{1}{4} \left[\frac{(c - (1))}{n} + \frac{(ac - a)}{n} + \frac{(bc - b)}{n} + \frac{(abc - ab)}{n} \right]$$

$$= \frac{1}{4n} [c + ac + bc + abc - (1) - a - b - ab]$$

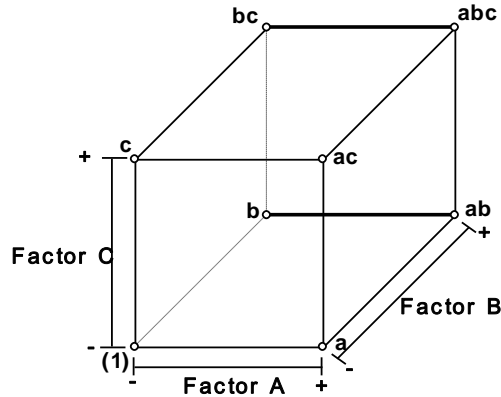
Efecto de las Interacciones Dobles

Efecto de AB

El efecto promedio de la interacción AB vendrá dada como la diferencia del promedio de la suma de los efectos del factor A, a las diferentes combinaciones de los niveles del factor B, cuando el factor C se encuentra en los niveles alto y bajo. Como se muestra a continuación.

El factor B a nivel alto

La forma de visualizarlo en el cubo es desplazando el factor A al nivel alto de B, y luego observando los vértices para los niveles alto y bajo del factor C; tomando las combinaciones de tratamiento de derecha a izquierda. Es decir, los vértices de los dos segmentos gruesos del cubo:

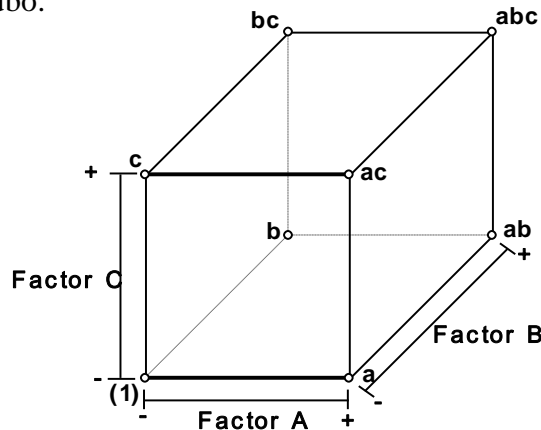


De la figura anterior se obtiene la siguiente tabla:

Efecto de A para el nivel alto del factor B	
Nivel alto del factor C	Nivel bajo del factor C
$\frac{(abc - bc)}{n}$	$\frac{(ab - b)}{n}$

El factor B a nivel bajo

La forma de visualizarlo en el cubo es desplazando el factor A al nivel bajo de B, y luego observando los vértices para los niveles alto y bajo del factor C; tomando las combinaciones de tratamiento de derecha a izquierda. Es decir, los vértices de los dos segmentos gruesos del cubo:



De la figura anterior se obtiene la siguiente tabla:

Efecto de A para el nivel bajo del factor B	
Nivel alto del factor C	Nivel bajo del factor C
$\frac{(ac - c)}{n}$	$\frac{(a - (1))}{n}$

Por lo tanto, el efecto promedio de AB es:

$$\begin{aligned}
 AB &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{(abc - bc)}{n} + \frac{(ab - b)}{n} - \left[\frac{(ac - c)}{n} + \frac{(a - (1))}{n} \right] \right\} \\
 &= \frac{1}{4n} \{ (abc - bc) + (ab - b) - [(ac - c) + (a - (1))] \} \\
 &= \frac{1}{4n} [(1) - a - b + ab + c - ac - bc + abc]
 \end{aligned}$$

De forma análoga, al proceso utilizado en la obtención del efecto de AB, se obtiene el efecto promedio de la interacción AC y el efecto promedio de la interacción BC

Por lo tanto, el efecto promedio de AC es:

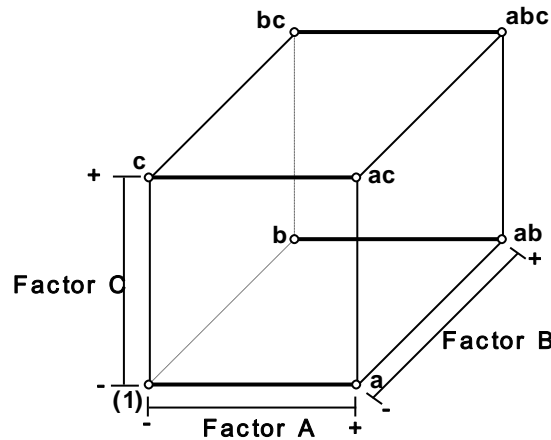
$$\begin{aligned}
 AC &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{(abc - bc)}{n} + \frac{(ac - c)}{n} - \left[\frac{(ab - b)}{n} + \frac{(a - (1))}{n} \right] \right\} \\
 &= \frac{1}{4n} \{ (abc - bc) + (ac - c) - [(ab - b) + (a - (1))] \} \\
 &= \frac{1}{4n} [(1) - a + b - ab - c + ac - bc + abc]
 \end{aligned}$$

Además, el efecto promedio de BC es:

$$\begin{aligned}
 BC &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{(abc - ac)}{n} + \frac{(bc - c)}{n} - \left[\frac{(ab - a)}{n} + \frac{(b - (1))}{n} \right] \right\} \\
 &= \frac{1}{4n} \{ (abc - ac) + (bc - c) - [(ab - a) + (b - (1))] \} \\
 &= \frac{1}{4n} [(1) + a - b - ab - c - ac + bc + abc]
 \end{aligned}$$

Efecto de ABC

Este efecto se define como la diferencia promedio entre la interacción AB para el nivel bajo y alto del factor C. Es decir, los vértices de los segmentos gruesos del cubo siguiente:



De la figura anterior se obtiene la siguiente tabla:

Efecto de la interacción AB	
Nivel alto del factor C	Nivel bajo del factor C
$\frac{(abc - bc) - (ac - c)}{4n}$	$\frac{(ab - b) - (a - (1))}{4n}$

Por lo tanto, el efecto promedio de ABC es:

$$ABC = \left\{ \frac{(abc - bc) - (ac - c)}{4n} - \left[\frac{(ab - b) - (a - (1))}{4n} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{4n} \{(abc - bc) - (ac - c) - [(ab - b) - (a - (1))]\} \\
 &= \frac{1}{4n} \{(abc - bc) - (ac - c) - (ab - b) + (a - (1))\} \\
 &= \frac{1}{4n} [abc - bc - ac + c - ab + b + a - (1)]
 \end{aligned}$$

Fácilmente se puede determinar las sumas de cuadrados de los efectos, porque a cada una le corresponde un contraste de un solo grado de libertad. En el diseño 2^3 con n réplicas, la suma de cuadrados de cualquier efecto sería:

$$SS = \frac{(\text{Contraste})^2}{8n} \quad \text{Ecuación 1.9}$$

En el siguiente ejemplo calcularemos los Efectos y sus respectivas Sumas de cuadrados aplicando las fórmulas o ecuaciones obtenidas anteriormente.

Ejemplo 1.2: “Problema de embotellamiento de Gaseosa” un embotellador de bebida gaseosa desea obtener mayor uniformidad en la altura de llenado de las botellas que salen de su proceso de manufactura. En teoría, la máquina llenadora introduce líquido en cada botella hasta la altura objetivo correcta, pero en la práctica existe variación alrededor de este objetivo, el fabricante quisiera comprender mejor las fuentes de esta variabilidad.

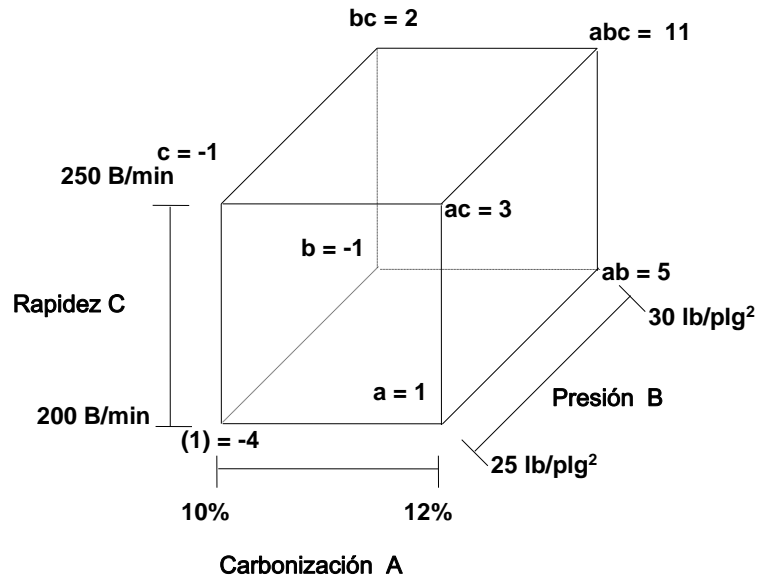
El ingeniero de proceso puede controlar tres variables durante el proceso de llenado: porcentaje de Carbonatación (A), presión de trabajo en la llenadora (B) y número de botellas que se llenan por minuto, o velocidad de la línea (C).

Para los fines de un experimento, el ingeniero controla la Carbonatación a 10 y 12%. Elige dos niveles para la presión (25 y 30 $lb / pl g^2$) y dos para la velocidad de la línea (200 y 250 botellas por minuto). Decide hacer dos réplicas de un diseño factorial. La variable de respuesta observada es la desviación promedio respecto a la altura de llenado objetivo que se observa en una corrida de producción de botellas en cada conjunto de condiciones. En la tabla 1.3 se presentan los datos que resultan de este experimento.

Tabla 1.3: Datos del problema de altura de llenado.

Porcentaje de Carbonatación (A)	25 lb/ pl g ² Presión de Operación 30 lb/ pl g ²			
	Rapidez de la línea (C)		Rapidez de la línea (C)	
	200	250	200	250
10	-3	-1	-1	1
	-1	0	0	1
12	-4 = (1)	-1 = c	-1 = b	2 = bc
	0	2	2	6
	1	1	3	5
	1 = a	3 = ac	5 = ab	11 = abc

Figura 1.6: Diseño para el experimento de la desviación en la altura de llenado.



Utilizando los totales de las combinaciones de tratamientos que se muestran en la tabla 1.3, es posible estimar los efectos de los factores:

$$A = \frac{1}{4n} [a - (1) + ab - b + ac - c + abc - bc] = \frac{1}{8} [1 - (-4) + 5 - (-1) + 3 - (-1) + 11 - 2] = 3.00$$

$$B = \frac{1}{4n} [b + ab + bc + abc - (1) - a - c - ac] = \frac{1}{8} [-1 + 5 + 2 + 11 - (-4) - 1 - (-1) - 3] = 2.25$$

$$C = \frac{1}{4n} [c + ac + bc + abc - (1) - a - b - ab] = \frac{1}{8} [-1 + 3 + 2 + 11 - (-4) - 1 - (-1) - 5] = 1.75$$

$$AB = \frac{1}{4n} [ab - a - b + (1) + abc - bc - ac + c] = \frac{1}{8} [5 - 1 - (-1) + (-4) + 11 - 2 - 3 + (-1)] = 0.75$$

$$AC = \frac{1}{4n} [(1) - a + b - ab - c + ac - bc + abc] = \frac{1}{8} [-4 - 1 + (-1) - 5 - (-1) + 3 - 2 + 11] = 0.25$$

$$BC = \frac{1}{4n} [(1) + a - b - ab - c - ac + bc + abc] = \frac{1}{8} [-4 + 1 - (-1) - 5 - (-1) - 3 + 2 + 11] = 0.50$$

$$ABC = \frac{1}{4n} [a - (1) - ab + b - ac + c + abc - bc] = \frac{1}{8} [1 - (-4) - 5 + (-1) - 3 + (-1) + 11 - 2] = 0.5$$

Los mayores efectos son para Carbonatación (A= 3.00), Presión (B= 2.25), Rapidez (C= 1.75) e Interacción Carbonatación-Presión (AB= 0.75), aunque este último no es tan grande como los efectos principales.

Para comprobarlo utilicemos el análisis de variancia. A partir de la ecuación 1.9, las sumas de cuadrado son:

$$SS_A = \frac{(24)^2}{16} = 36.00; \quad SS_B = \frac{(18)^2}{16} = 20.25; \quad SS_C = \frac{(14)^2}{16} = 12.25$$

$$SS_{AB} = \frac{(6)^2}{16} = 2.25; \quad SS_{AC} = \frac{(2)^2}{16} = 0.25; \quad SS_{BC} = \frac{(4)^2}{16} = 1.00; \quad SS_{ABC} = \frac{(4)^2}{16} = 1.00$$

Tabla 1.4: Análisis de Varianza para los datos de la figura 1.6.

Fuente de Variación	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Media de Cuadrados	F
A	36,000	1	36,000	57,600
B	20,250	1	20,250	32,400
C	12,250	1	12,250	19,600
A * B	2,250	1	2,250	3,600
A * C	,250	1	,250	,400
B * C	1,000	1	1,000	1,600
A * B * C	1,000	1	1,000	1,600
Error	5,000	8	,625	
Total	78,000	15		

La suma total de cuadrados es $SS_T = 78.00$, y por sustracción, $SS_E = 5.00$. El análisis de variancia se resume en la Tabla 1.4 obtenida con el SPSS, y confirma la significancia de los efectos principales, ya que utilizando el criterio de la Distribución F, comparando los valores dados en la corrida con el valor de F de tablas $F_{tablas} = f_{0.99,1,8} = 11.26$, los efectos principales son significativos al 1%. Dado que sus respectivos valores de F son mayores que el F_{tablas} .

La interacción AB es significativa a un nivel aproximado del 10% ya que $F_{tablas} = f_{0.90,1,8} = 3.46$; por lo tanto, existe una ligera interacción entre Carbonatación y presión que afecta el llenado de las botellas.

Prueba de Residuos.

Para confirmar nuestras conclusiones haremos una prueba de residuos. Ya que hemos concluido que los efectos principales del ejemplo anterior y la interacción de carbonatación y presión son significativos, el modelo de regresión es:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2$$

El modelo de regresión ajustado es:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_3 + \hat{\beta}_{12} x_1 x_2$$

$$\hat{y} = 1.00 + \left(\frac{3.00}{2}\right)x_1 + \left(\frac{2.25}{2}\right)x_2 + \left(\frac{1.75}{2}\right)x_3 + \left(\frac{0.75}{2}\right)x_1 x_2$$

Donde la ordenada al origen es el promedio de todas las observaciones, en este caso el promedio de las 16 observaciones es 1 y los coeficientes de regresión son un medio de las estimaciones de los efectos de los factores correspondientes.

La causa de que los coeficientes de regresión sean la mitad de la estimación del efecto es que un coeficiente mide el efecto de un cambio unitario en x sobre la media de y, y la estimación de nuestros efectos se basa en un cambio de dos unidades (de -1 a +1).

Este modelo puede utilizarse para generar los valores predichos de y, en los ocho puntos del diseño.

Cuando los tres efectos principales están en nivel bajo, es decir, $x_1 = -1, x_2 = -1$

$x_3 = -1$ y $x_1 x_2 = 1$ la altura de llenado predicho es:

$$\begin{aligned} \hat{y} &= 1.00 + \left(\frac{3.00}{2}\right)(-1) + \left(\frac{2.25}{2}\right)(-1) + \left(\frac{1.75}{2}\right)(-1) + \left(\frac{0.75}{2}\right)(1) \\ &= -2.125 \end{aligned}$$

Como existen dos observaciones para esta combinación bajo-bajo-bajo los residuos

$e = y - \hat{y}$ son:

$$e_1 = -3 - (-2.125) = -0.875$$

$$e_2 = -1 - (-2.125) = 1.125$$

Los demás residuos se encuentran usando la misma lógica:

Cuando el efecto de A es alto, el de B está en el nivel bajo al igual que el C, es decir,

$x_1 = 1, x_2 = -1, x_3 = -1$ y $x_1 x_2 = -1$ la altura de llenado predicho es:

$$\begin{aligned} \hat{y} &= 1.00 + \left(\frac{3.00}{2}\right)(1) + \left(\frac{2.25}{2}\right)(-1) + \left(\frac{1.75}{2}\right)(-1) + \left(\frac{0.75}{2}\right)(-1) \\ &= 0.125 \end{aligned}$$

Y

$$e_3 = 0 - (0.125) = -0.125$$

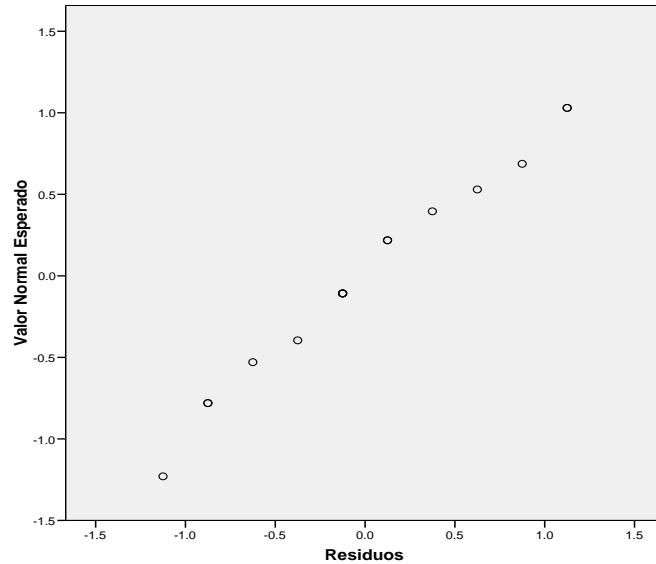
$$e_4 = 1 - (0.125) = 0.875$$

Y así tenemos que los valores predichos y errores estimados serían:

i	\hat{y}	e_i	i	\hat{y}	e_i
1	-2.125	-0.875	9	3.125	-1.125
2	-2.125	1.125	10	3.125	-0.125
3	0.125	-0.125	11	1.875	0.125
4	0.125	0.875	12	1.875	-0.875
5	-0.625	-0.375	13	1.125	-0.125
6	-0.625	0.625	14	1.125	-0.125
7	-0.375	-0.625	15	4.875	1.125
8	-0.375	0.375	16	4.875	0.125

En la figura 1.7 se presenta una gráfica de probabilidad normal de estos residuos, a fin de verificar la suposición de normalidad de los residuos.

Figura 1.7. Gráfica de probabilidad normal de los residuos



Esta gráfica indica resultados satisfactorios, es decir, los residuos parecen tender a una línea recta, por lo tanto, no tenemos motivos para sospechar que existan problemas en cuanto a la validez de nuestras conclusiones.

1.2.1.3 Diseño Factorial General 2^k

Cuando se considera un Diseño Factorial 2^k , se está generalizando los Diseños Factoriales de dos niveles que tienen k factores. En general el Modelo Estadístico del Diseño Factorial

2^k tiene a los k factores principales, $\binom{k}{2} = \frac{k!}{2!(k-2)!}$ interacciones de dos factores,

$\binom{k}{3} = \frac{k!}{3!(k-3)!}$ interacciones de tres factores, y así sucesivamente una interacción de k

factores; es decir, que el Modelo completo tiene $2^k - 1$ efectos.

Las combinaciones de tratamientos pueden escribirse en el orden estándar, introduciendo los factores de uno en uno, combinado en forma sucesiva cada nuevo factor con aquellos introducidos anteriormente. Por ejemplo, el orden estándar para un Diseño 2^4 es: (1), a, b, ab, c, ac, bc, abc, d, ad, bd, abd, cd, acd, bcd, y abcd. En el cual cd representa la combinación de tratamientos en la que el Factor C y Factor D se encuentran en el nivel superior, mientras que A y B están en el nivel inferior.

Para estimar cualquier efecto o calcular su correspondiente Suma de Cuadrado es necesario determinar el contraste de cada uno de los efectos; los cuales se pueden obtener utilizando una tabla de signos positivos y negativos; pero para un número grande de factores (k grande), resulta demasiado tedioso o complicado; y por lo tanto, es preferible utilizar otro método para encontrar los contrastes.

A continuación se presenta una forma o método más general y sencillo para obtener los contrastes de cada uno de los Efectos del Diseño Factorial.

En general, el contraste para el efecto AB...K, se obtiene desarrollando el segundo miembro de la siguientes ecuación.

$$\text{Contraste}_{AB...K} = (a \pm 1)(b \pm 1) \dots (k \pm 1)$$

Para encontrar un contraste determinado, en la ecuación anterior del conjunto de paréntesis se debe usar el signo negativo si el factor esta presente en el efecto (para todas aquellas letras que aparecen en el contraste) y positivo en caso contrario.

Al terminar de desarrollar los factores de la ecuación, se debe reemplazar el "1" por (1) en la expresión final. Luego de haber obtenido los contrastes para los efectos, la estimación de los efectos y la Suma de Cuadrado de cada uno de ellos, se puede determinar mediante las siguientes expresiones generales.

La forma general para obtener los efectos, viene dada por:

$$AB...K = \frac{2}{n2^k} (\text{contraste}_{AB...K}) \quad \text{o} \quad AB...K = \frac{1}{n2^{k-1}} (\text{contraste}_{AB...K})$$

Por lo tanto, la forma general de obtener las sumas de cuadrados, vendrá dada por:

$$SS_{AB...K} = \frac{1}{n2^k} (\text{contraste}_{AB...K})^2 \text{ en las ecuaciones anteriores } n \text{ es el número de réplicas.}$$

Ejemplo 1.3

- 1) En un Diseño Factorial 2^3 , el contraste para la interacción BC, utilizando la ecuación anterior se obtiene de la siguiente manera:

Como $k = 3$:

$$\begin{aligned} \text{Contraste}_{BC} &= (a+1)(b-1)(c-1) \\ &= (ab - a + b - 1)(c-1) \\ &= abc - ac + bc - c - ab + a - b + 1 \\ &= abc + bc + a + (1) - ab - b - ac - c \end{aligned}$$

En un Diseño Factorial de 2^5 , el contraste para la interacción BCDE, utilizando la ecuación anterior se obtiene de la siguiente manera:

Como $k = 5$

$$\begin{aligned} \text{Contraste}_{BCDE} &= (a+1)(b-1)(c-1)(d-1)(e-1) \\ &= abcde + bcde + ade + de + ace + ce + abe + be + acd + dc + abd + bd + bde + abc + bc + a + (1) \\ &\quad - acde - cde - abde - abce - bce - ae - e - abce - bcd - ad - d - ac - c - ab - b \end{aligned}$$

- 2) El efecto de BC de un Diseño Factorial 2^3 se obtiene utilizando la expresión general anterior de la siguiente manera:

Como $k=3$, entonces

$$\begin{aligned} BC &= \frac{2}{2 \times 2^3} (\text{Contraste}_{BC}) \\ &= \frac{2}{16} (abc + bc + a + (1) - ab - b - ac - c) \end{aligned}$$

El efecto de BCDE en un Diseño Factorial 2^5 se obtiene de la siguiente manera:

Como $k=5$, entonces

$$BCDE = \frac{2}{2 \times 2^5} (\text{Contraste}_{BCDE})$$

$$= \frac{2}{64} \left(\begin{array}{l} abcde + bcde + ade + de + ace + ce + abe + be + acd \\ + cd + abd + bd + bde + abc + bc + a + (1) - acde - cde \\ - abde - bce - ae - e - abce - bcd - ad - d - ac - c - ab - b \end{array} \right)$$

- 3) La Suma de cuadrados de BC en un Diseño Factorial 2^3 , se obtiene utilizando la fórmula general planteada anteriormente de la siguiente forma: Como $k=3$

$$SS_{BC} = \frac{1}{2 \times 2^3} (\text{contraste}_{BC})^2 = \frac{1}{16} (abc + bc + a + (1) - ab - b - ac - c)^2$$

La Suma de Cuadrado del efecto de BCDE en un Diseño Factorial 2^5 se obtendrá de la siguiente manera:

$$SS_{BCDE} = \frac{1}{64} \left(\begin{array}{l} abcde + bcde + ade + de + ace + ce + abe + be + acd \\ + cd + abd + bd + bde + abc + bc + a + (1) - acde - cde \\ - abde - bce - ae - e - abce - bcd - ad - d - ac - c - ab - b \end{array} \right)^2$$

Tabla de Análisis de Varianza para el Diseño 2^k

Fuente de Variación	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad
K efectos principales		
A	SS_A	1
B	SS_B	1
C	SS_C	1
⋮	⋮	⋮
K	SS_K	1
$\binom{k}{2}$ interacciones de dos factores		
AB	SS_{AB}	1
AC	SS_{AC}	1
⋮	⋮	⋮
JK	SS_{JK}	1
$\binom{k}{3}$ interacciones de Tres factores		
ABC	SS_{ABC}	1
ABD	SS_{ABD}	1
⋮	⋮	⋮
IJK	SS_{IJK}	1
⋮	⋮	⋮
$\binom{k}{k}$ interacciones de k factores		
ABC...K	$SS_{ABC...K}$	1
Error	SS_E	$2^k(n-1)$
Total	SS_T	$n2^k-1$

Ejemplo 1.4: Una sola Réplica del diseño 2⁴

Un producto químico se produce en un recipiente a presión. Se realiza un experimento factorial en la planta piloto para estudiar los efectos que se cree influyen sobre la tasa de filtración de ese producto.

Los cuatro factores son Temperatura (A), Presión (B), Concentración de los reactivos (C) y rapidez de mezclado (D). Cada factor esta presente en dos niveles, en la tabla 1.5 y en la figura 1.8 se muestran los datos recopilados de una sola réplica del experimento 2⁴. Los 16 ensayos se realizaron en forma aleatoria. El ingeniero de proceso esta interesado en maximizar la rapidez de filtración.

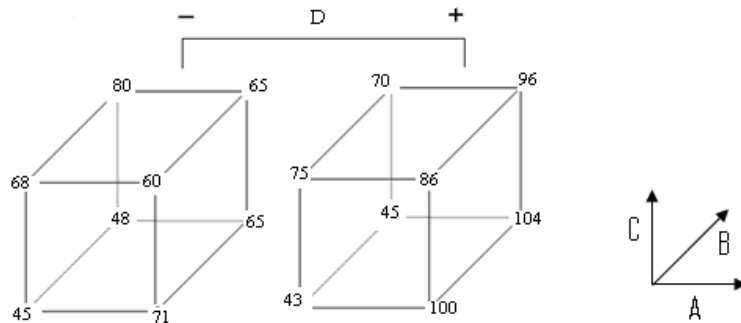
Las condiciones actuales del proceso dan por resultado velocidad de filtración aproximadas de 75gal/h, además en el proceso se utiliza actualmente el nivel alto del factor C, concentración de formaldehído.¹ El ingeniero desearía reducir todo lo posible esta concentración, pero ha sido incapaz de hacerlo en virtud de que ello siempre ha dado por resultado menores velocidades de filtración.

Tabla 1.5: Datos del experimento de rapidez de filtración en una planta piloto.

Número de corrida	Factor				Combinación de tratamientos	Rapidez de filtración (gal/h)
	A	B	C	D		
1	-	-	-	-	(1)	45
2	+	-	-	-	<i>a</i>	71
3	-	+	-	-	<i>b</i>	48
4	+	+	-	-	<i>ab</i>	65
5	-	-	+	-	<i>c</i>	68
6	+	-	+	-	<i>ac</i>	60
7	-	+	+	-	<i>bc</i>	80
8	+	+	+	-	<i>abc</i>	65
9	-	-	-	+	<i>d</i>	43
10	+	-	-	+	<i>ad</i>	100
11	-	+	-	+	<i>bd</i>	45
12	+	+	-	+	<i>abd</i>	104
13	-	-	+	+	<i>cd</i>	75
14	+	-	+	+	<i>acd</i>	86
15	-	+	+	+	<i>bcd</i>	70
16	+	+	+	+	<i>abcd</i>	96

¹ El formaldehído es un producto químico que se utiliza ampliamente como bactericida o conservante, muy extendido ya que se encuentra presente en múltiples productos y se incorpora a otros muchos en los procesos de fabricación incluyendo plásticos, fluidos de corte, medicamentos, telas, cosméticos y detergentes.

Figura 1.8: Datos del experimento de rapidez de filtración en una planta piloto.



Comenzaremos el análisis de estos datos graficando las estimaciones de los efectos en papel probabilidad normal. La tabla 1.6 es la tabla de signos mas y menos para los contrastes del diseño 2^4 .

Recordemos que para estimar el efecto A sería:

$$A = \frac{(-45 + 71 - 48 + 65 - 68 + 60 - 80 + 65 - 43 + 100 - 45 + 104 - 75 + 86 - 70 + 96)}{8}$$

$$= 21.63$$

Este resultado se obtiene utilizando los signos y las respectivas observaciones de la tabla 1.5.

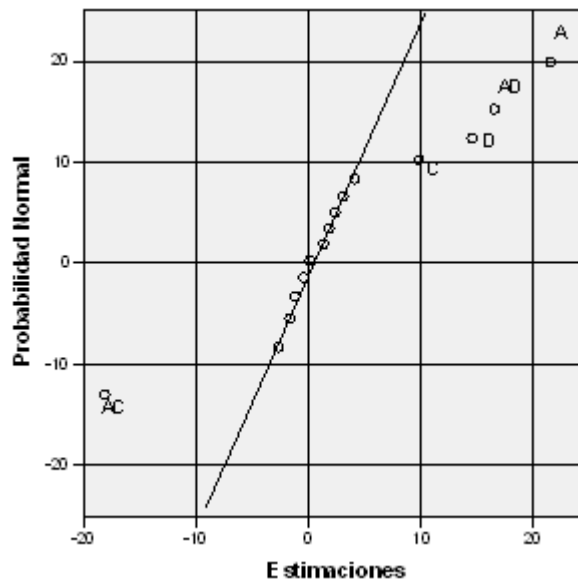
Siguiendo este ejemplo las estimaciones en orden positivo y negativo serían:

Efecto	Estimación
A	21.63
AD	16.63
D	14.63
C	9.88
ABD	4.13
B	3.13
BC	2.38
ABC	1.88
ABCD	1.38
AB	0.13
CD	-0.38
BD	-1.13
ACD	-1.63
BCD	-2.63
AC	-18.13

Tabla 1.6: Constantes de contrastes para el diseño 2^4

	A	B	AB	C	AC	BC	ABC	D	AD	BD	ABD	CD	ACD	BCD	ABCD
(1)	-	-	+	-	+	+	-	-	+	+	-	+	-	-	+
a	+	-	-	-	-	+	+	-	-	+	+	+	+	-	-
b	-	+	-	-	+	-	+	-	+	-	+	+	-	+	-
ab	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-	-	+	+	+	+
c	-	-	+	+	-	-	+	-	+	+	-	-	+	+	-
ac	+	-	-	+	+	-	-	-	-	+	+	-	-	+	+
bc	-	+	-	+	-	+	-	-	+	-	+	-	+	-	+
abc	+	+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-	-
d	-	-	+	-	+	+	-	+	-	-	+	-	+	+	-
ad	+	-	-	-	-	+	+	+	+	-	-	-	-	+	+
bd	-	+	-	-	+	-	+	+	-	+	-	-	+	-	+
abd	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+	+	-	-	-	-
cd	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	+
acd	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-
bcd	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-
abcd	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

Figura 1.9: Efectos ordenados para el diseño 2^4 del ejemplo 1.4.



En la figura 1.9, se presenta la gráfica de probabilidad normal de estos efectos. Todos los efectos que se encuentran sobre la línea son despreciables, mientras que los efectos grandes o importantes se encuentran lejos de ella, es decir, los efectos principales A, C y D y las interacciones AC y AD.

A continuación mostramos la tabla de análisis de variancia para poder fortalecer nuestras conclusiones.

Tabla 1.7: Análisis de variancia para los datos de la planta piloto.

Fuente de Variación	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Media de Cuadrados	F
A	1870,563	1	1870,563	83,368
C	390,063	1	390,063	17,384
D	855,563	1	855,563	38,131
A * C	1314,063	1	1314,063	58,565
A * D	1105,563	1	1105,563	49,273
C * D	5,063	1	5,063	,226
A * C * D	10,563	1	10,563	,471
Error	179,500	8	22,438	
Total	5730,938	15		

El análisis de variancia que resume la Tabla 1.7 obtenida con el SPSS, confirma la significancia de los efectos principales A, C y D, además, de las interacciones AC y AD, ya que utilizando el criterio de la Distribución F, comparando los valores dados en la corrida con el valor de F de tablas $F_{tablas} = f_{0,99,1,8} = 11.26$, dichos efectos son significativos al 1%.

Dado que sus respectivos valores de F son mayores que el F_{tablas} .

Los efectos principales de A, C y D se grafican en la figura 1.10. Los tres efectos son positivos, y si consideramos solo estos tres efectos principales, podemos correr los tres factores al nivel alto para maximizar la rapidez de filtración. Sin embargo, siempre es necesario examinar cualquier interacción que puede ser importante. Recuerde que los efectos principales no tienen mucho sentido cuando están implicados en interacciones significativas.

En la figura 1.11 se grafican las interacciones AC y AD. Estas interacciones son las claves para resolver el problema. En la interacción AC el efecto de la temperatura es muy pequeño cuando la concentración se encuentra en el nivel alto y muy grande en caso contrario; los mejores resultados se obtienen para baja concentración y alta temperatura. La interacción AD indica que la rapidez de agitación D tiene poco efecto a baja temperatura, pero un gran efecto positivo a temperatura elevada. Por lo tanto, las mayores velocidades de filtración se obtienen al parecer cuando A y D están a nivel alto y C está en nivel bajo. Esto permitirá reducir la concentración de formaldehído a un nivel más bajo, otro objetivo del experimentador.

Figura 1.10: Gráfico de los efectos principales A (Temperatura), C (Concentración de reactivos) y D (Rapidez de mezclado).

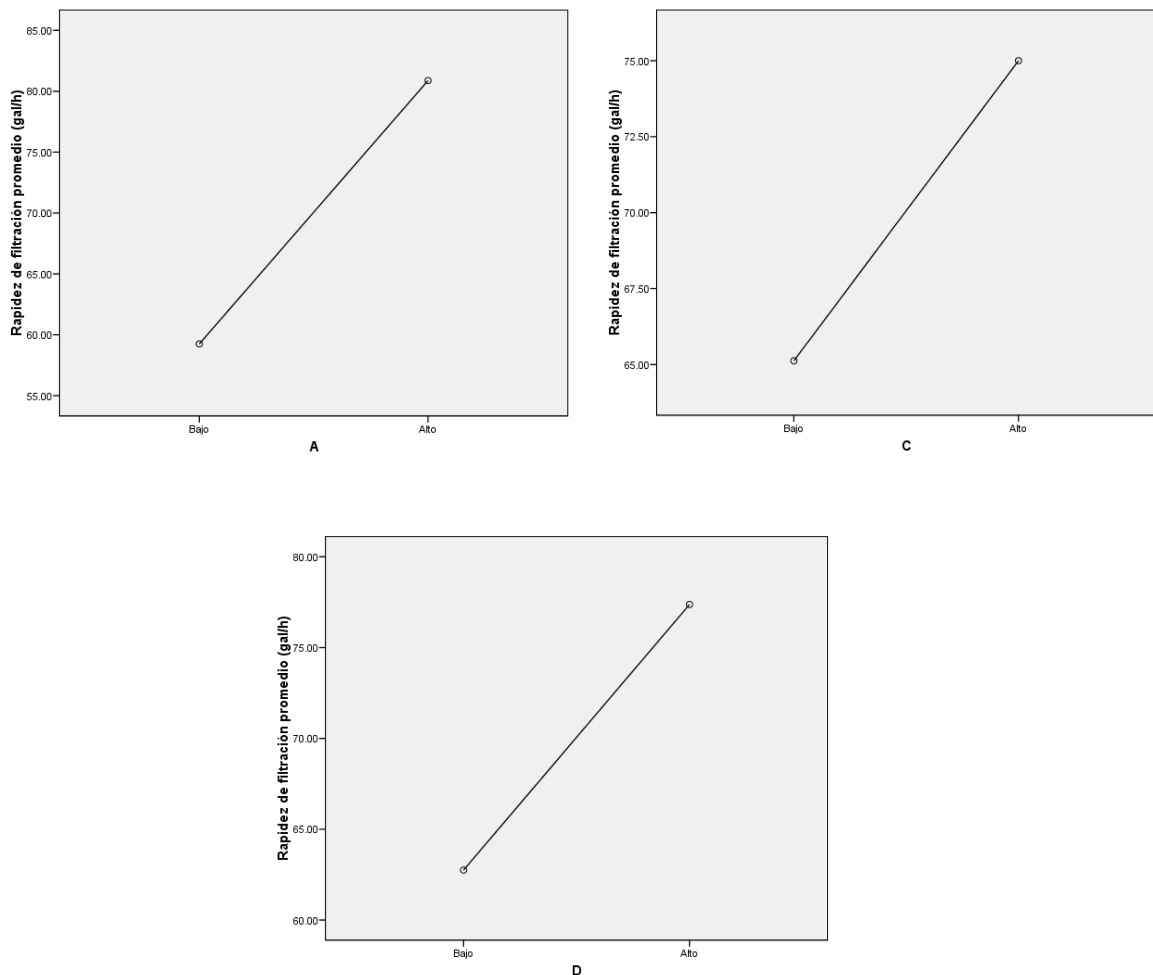
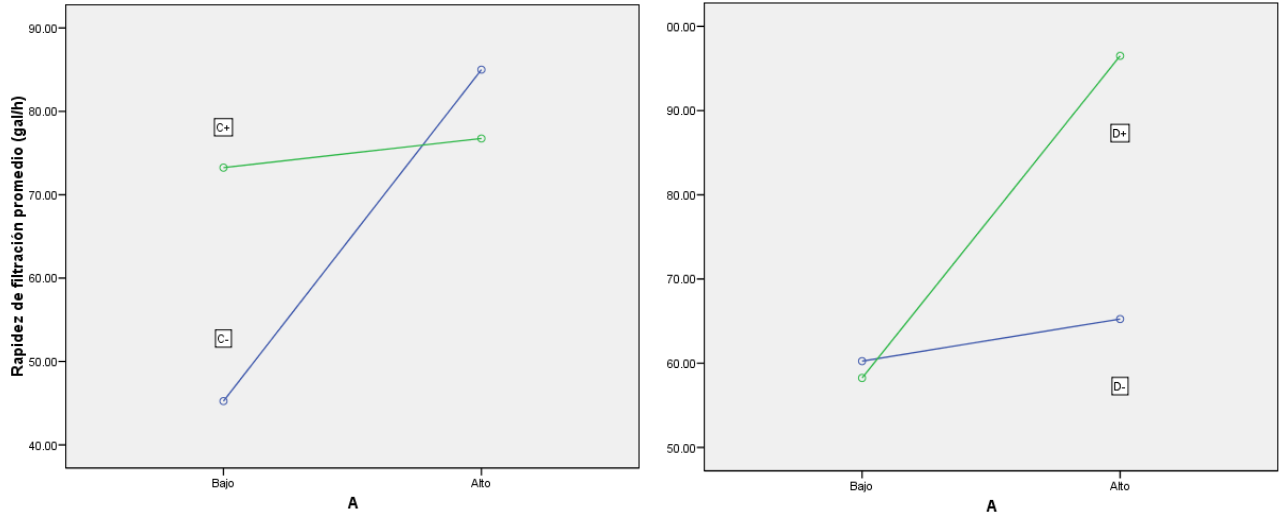


Figura 1.11: Gráfico de las interacciones AC (Temperatura y Concentración de reactivos) y AD (Temperatura y Rapidez de mezclado).



Prueba de Diagnóstico. Las pruebas de diagnóstico usuales deben aplicarse a los residuos de un diseño 2^k , nuestro análisis indica que los únicos efectos significativos son $A = 21.63, C = 9.88, D = 14.63, AC = -18.13$ y $AD = 16.63$

Si esto es verdadero, la tasa de filtración estimada en los vértices del diseño será:

$$\hat{y} = 70.06 + \left(\frac{21.63}{2}\right)x_1 + \left(\frac{9.88}{2}\right)x_3 + \left(\frac{14.63}{2}\right)x_4 - \left(\frac{18.13}{2}\right)x_1x_3 + \left(\frac{16.63}{2}\right)x_1x_4$$

Donde 70.06 es la respuesta promedio, y las variables codificadas x_1, x_3, x_4 toman los valores +1 ó -1. La rapidez de filtración predicha en la corrida (1) es:

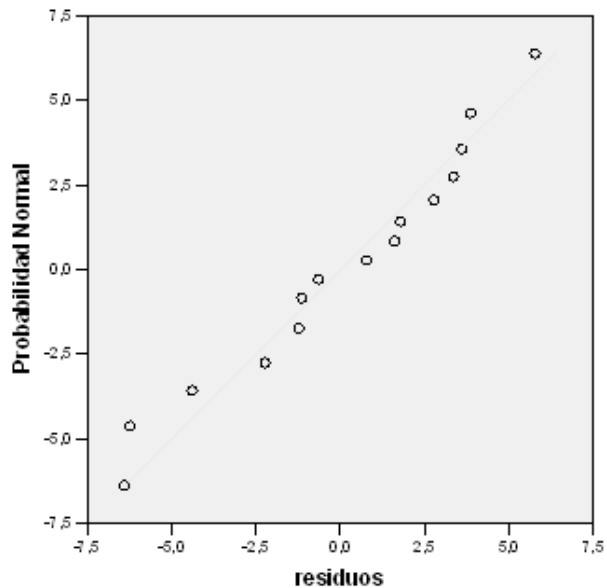
$$\begin{aligned} \hat{y} &= 70.06 + \left(\frac{21.63}{2}\right)(-1) + \left(\frac{9.88}{2}\right)(-1) + \left(\frac{14.63}{2}\right)(-1) - \left(\frac{18.13}{2}\right)(-1)(-1) + \left(\frac{16.63}{2}\right)(-1)(-1) \\ &= 46.22 \end{aligned}$$

Como el valor observado es 45, el residuo es $e = y - \hat{y} = 45 - 46.22 = -1.22$. Los valores de $y, \hat{y}, e = y - \hat{y}$ para las 16 observaciones se muestran a continuación:

	Rapidez de filtración (gal/h)	\hat{y}	$e = y - \hat{y}$
(1)	45	46.22	-1.22
<i>a</i>	71	69.39	1.61
<i>b</i>	48	46.22	1.78
<i>ab</i>	65	69.39	-4.39
<i>c</i>	68	74.23	-6.23
<i>ac</i>	60	61.14	-1.14
<i>bc</i>	80	74.23	5.77
<i>abc</i>	65	61.14	3.86
<i>d</i>	43	44.22	-1.22
<i>ad</i>	100	100.65	-0.65
<i>bd</i>	45	44.22	0.78
<i>abd</i>	104	100.65	3.35
<i>cd</i>	75	72.23	2.77
<i>acd</i>	86	92.40	-6.40
<i>bcd</i>	70	72.23	-2.23
<i>abcd</i>	96	92.40	3.60

Figura 1.12: Gráfica de probabilidad normal para los residuos del ejemplo 1.4.

En la figura 1.12 aparece una gráfica de los residuos, los puntos de la gráfica se encuentran razonablemente cerca de una línea recta. Esto apoya nuestra conclusión de que A, C, D, AC y AD son los únicos efectos significativos, y que se satisfacen las suposiciones en las que se basa el análisis.



1.2.2. Diseño Factorial Fraccionario de dos niveles.

Cuando el número de factores en un diseño factorial aumenta, el número de ensayos sobrepasa rápidamente los recursos de los experimentadores. Una replica completa de un diseño 2^6 requiere 64 ensayos. Los diseños factoriales fraccionarios se encuentran entre los tipos más ampliamente usados para el diseño de productos y procesos y para la detección y solución de este tipo de problemas.

Un uso importante de los factoriales fraccionarios se da en los experimentos de escrutinio, también llamado de tamizado o cribado². Estos son experimentos en los cuales se considera muchos factores con el fin de identificar aquellos que tienen efectos importantes, de haberlos. Los factores que se identifican como importantes se investigan entonces con mayor detalle en experimentos posteriores.

El empleo exitoso de los diseños factoriales fraccionarios se basan en tres ideas claves:

1. **El principio de dispersidad de efectos:** Cuando existen varias variables, es probable que el sistema o proceso sea influido principalmente por algunos de los efectos principales e interacciones de orden inferior.
2. **La propiedad de proyección:** Los diseños factoriales fraccionarios pueden proyectarse en diseños más poderosos (más grandes) en el subconjunto de factores significativos.
3. **Experimentación Secuencial:** Es posible combinar las corridas de 2 ó más factoriales fraccionarios para conformar de manera secuencial un diseño más grande y estimar los efectos de los factores y las interacciones de interés.

² Cribado es la etapa inicial de la optimización de un proceso, en la que se tienen muchos factores que pueden incluir en la variable de interés.

1.2.2.1 Fracción un medio del diseño 2^k .

Considerando el caso en el que estudiamos tres factores de dos niveles cada uno, pero en el que los experimentadores no pueden costear las $2^3 = 8$ combinaciones de tratamientos. Pero se pueden costear 4 observaciones. Esto sugiere una fracción un medio de un diseño 2^3 . La fracción un medio de un diseño 2^3 se conoce también como un diseño 2^{3-1} porque tiene $2^{3-1} = 4$ combinaciones de tratamientos.

En la tabla 1.8 aparecen los signos positivos y negativos del diseño 2^3 . Supóngase que para componer la fracción un medio, se seleccionan las combinaciones de tratamientos a, b, c y abc, ya que estas forman las combinaciones de tratamientos que producen un signo positivo sobre la columna ABC. Estas se representan en la parte superior de la tabla 1.8. Para tales combinaciones de tratamientos se usa indistintamente la notación convencional (a, b, c,...) y la de signos positivos y negativos. La equivalencia de las dos notaciones se muestra a continuación.

Notación 1	Notación 2
a	+ - -
b	- + -
c	- - +
abc	+ + +

Por esto ABC se denomina generador de esta fracción en particular. Además la columna identidad I siempre es positiva, por lo cual $I = ABC$ (Ya que ambas columnas tienen signo + en la tabla 1.8) se denominará relación definitoria de nuestro diseño.

Las combinaciones de tratamientos del diseño 2^{3-1} producen tres grados de libertad que pueden usarse para estimar los efectos principales. De la tabla 1.8, se obtienen las combinaciones lineales de las observaciones que se utilizan para estimar los efectos principales A, B, C que son las siguientes:

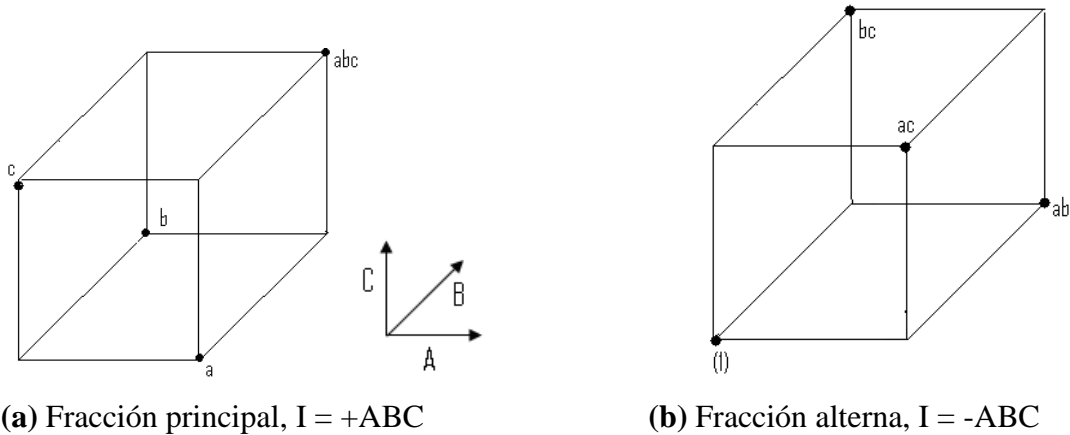
$$\begin{aligned} \ell_A &= 1/2 (a - b - c + abc) \\ \ell_B &= 1/2 (-a + b - c + abc) \\ \ell_C &= 1/2 (-a - b + c + abc) \end{aligned}$$

Donde ℓ representa las combinaciones lineales de los efectos.

Tabla 1.8. Signos positivos para el diseño factorial 2^3

Combinación de Tratamientos	Efecto factorial							
	I	A	B	C	AB	AC	BC	ABC
a	+	+	-	-	-	-	+	+
b	+	-	+	-	-	+	-	+
c	+	-	-	+	+	-	-	+
abc	+	+	+	+	+	+	+	+
ab	+	+	+	-	+	-	-	-
ac	+	+	-	+	-	+	-	-
bc	+	-	+	+	-	-	+	-
(1)	+	-	-	-	+	+	+	-

Figura 1.13. Graficas de las dos semifracciones del diseño 2^3 .



También es fácil verificar que las combinaciones lineales que se usan para estimar las interacciones de dos factores son:

$$\ell_{BC} = 1/2 (a - b - c + abc)$$

$$\ell_{AC} = 1/2 (-a + b - c + abc)$$

$$\ell_{AB} = 1/2 (-a - b + c + abc)$$

Por lo tanto, $l_A = l_{BC}$, $l_B = l_{AC}$, $l_C = l_{AB}$. Esto hace imposible distinguir entre A y BC, entre B y AC y entre C y AB. Es posible mostrar que cuando se estiman A, B y C, en realidad, lo que se hace es estimar A + BC, B + AC y C + AB, respectivamente. Dos o más efectos que tienen esta propiedad se conocen como alias. Esto se indica empleando la notación $l_A \rightarrow A + BC$, $l_B \rightarrow B + AC$, y $l_C \rightarrow C + AB$.

La estructura de los alias de este diseño puede determinarse fácilmente con la relación $I = ABC$. Multiplicando cualquier efecto por la relación que define al diseño, da como resultado los alias de dicho efecto. Por ejemplo los alias de A son:

$$A \cdot I = A \cdot ABC = A^2BC$$

Dado que el cuadrado de cualquier columna es simplemente la identidad I,

$$A = BC$$

Esta fracción un medio o semifracción, con $I = +ABC$, suele llamarse fracción principal.

Ahora supóngase que se eligió la otra mitad de la réplica. Esta se compone de las combinaciones de tratamientos que en la tabla 1.8 tienen el signo negativo asociado con ABC, llamada fracción 1/2 alterna o complementaria, esta se muestra en la Figura 1.13b. Nótese que consta de las siguientes corridas:

Notación 1	Notación 2
(1)	- - -
ab	+ + -
ac	+ - +
bc	- + +

La relación definitoria de este diseño es

$$I = - ABC$$

Usando la fracción alterna y el razonamiento anterior, las combinaciones lineales de las fracciones, l'_A , l'_B y l'_C son:

$$\begin{aligned} \ell'_A &\rightarrow A - BC \\ \ell'_B &\rightarrow B - AC \\ \ell'_C &\rightarrow C - AB \end{aligned}$$

Por lo tanto, en realidad se está estimando $A - BC$, $B - AC$ y $C - AB$ al estimar A , B y C con esta fracción.

En la práctica, no importa cual de las dos fracciones se utilice. Ambas fracciones pertenecen a la misma familia; en otras palabras estas dos fracciones forman el diseño 2^3 completo (figura 1.13).

Supóngase que después de recopilar una de las fracciones de un medio del diseño 2^3 , también se recopila la otra fracción. Por lo tanto, tenemos disponibles los ocho ensayos asociados con el diseño 2^3 completo. En este caso pueden obtenerse las estimaciones de todos los efectos, sin los alias, analizando los ocho ensayos en un diseño 2^3 completo con dos bloques de cuatro ensayos cada uno. Esto también se logra sumando y restando la combinación lineal a los efectos de las dos fracciones individuales. Por ejemplo, considérese $\ell_A \rightarrow A + BC$ y $\ell'_A \rightarrow A - BC$. Esto implica que

$$1/2 (\ell_A + \ell'_A) = 1/2 (A + BC + A - BC) \rightarrow A$$

y que

$$1/2 (\ell_A - \ell'_A) = 1/2 (A + BC - A + BC) \rightarrow BC$$

Por lo tanto, usando los tres pares de combinaciones lineales se obtiene lo siguiente:

Tabla 1.9: Estimaciones de efectos sin utilizar alias

i	De $1/2 (\ell_i + \ell'_i)$	De $1/2 (\ell_i - \ell'_i)$
A	A	BC
B	B	AC
C	C	AB

Resolución del diseño. El diseño anterior 2^{3-1} se conoce como diseño de resolución III.

En tal diseño los alias de los efectos principales son interacciones de dos factores. Un diseño es de resolución R si ningún efecto de p factores es alias de otro efecto que tenga menos de R – p factores. Se emplea el numeral romano como subíndice para indicar la resolución del diseño. Así, la fracción un medio del diseño 2^3 definido por la relación $I = ABC$ (o bien $I = -ABC$) constituye un diseño 2^{3-1}_{III} .

Los diseños de resolución III, IV y V son de importancia primordial. A continuación, se presentan las definiciones de estos diseños junto con un ejemplo.

- 1. Diseños de Resolución III.** Estos son diseños en los que ningún efecto principal es alias de otro, pero sí lo son de interacciones de dos factores; a su vez, estas últimas son alias entre si. El diseño 2^{3-1} de la tabla 1.8 es de resolución tres (2^{3-1}_{III}).
- 2. Diseños de Resolución IV.** En estos diseños ningún efecto principal es alias de otro efecto principal, o bien, de alguna interacción de dos factores, las interacciones de dos factores son “alias” entre si. Un diseño 2^{4-1} con $I = ABCD$ es de resolución IV (2^{4-1}_{IV}).
- 3. Diseños de Resolución V.** Estos son diseños en los que ningún efecto principal o interacción de dos factores es alias de algún efecto principal o interacción de dos factores. Sin embargo, las interacciones de dos factores son alias de las interacciones de tres factores. Un diseño 2^{5-1} con $I = ABCDE$ es de resolución V (2^{5-1}_V).

En general, la resolución de un diseño factorial fraccionario de dos niveles es igual al mínimo número de letras de cualquier palabra de la relación que define al diseño, es decir, se nombrará a la resolución del diseño igual al mínimo número de letras de los generadores por ejemplo: El generador de 2^{5-1} es $I = ABCDE$ por lo que es un diseño de resolución V y los de 2^{5-2} son $I = ABD = ACD = BCDE$ por lo que es un diseño de resolución III.

En consecuencia, los diseños anteriores, a menudo, se conocen como diseños de tres, cuatro y cinco letras, respectivamente. Las funciones generadoras, sus alias para cada Resolución ya están y aparecen de manera estándar para no andar empleando tiempo innecesario para buscar los alias.

Aunque el objetivo del diseño fraccionario es reducir el número de experimentos (Diseño 2^{k-1}) no podemos dejar afuera ningún efecto y necesitamos trabajar de alguna forma con un diseño fraccionario (2^k).

Construcción de Fracciones un medio.

Es posible construir una fracción un medio de mayor resolución, de un diseño 2^K , escribiendo primero las combinaciones de tratamiento del diseño 2^{K-1} completo y agregando después el k-ésimo factor identificando sus niveles positivos y negativos mediante los signos positivos y negativos de la interacción de mayor orden ABC... (k-1).

Por lo tanto, el diseño factorial fraccionario 2^{3-1}_{III} se obtiene escribiendo el diseño 2^2 completo e igualando después el factor C con la interacción AB. La fracción alterna se obtiene igualando el factor C con la interacción $-AB$.

Este enfoque aparece en la Tabla 1.10. Obsérvese que el diseño básico siempre tiene el número correcto de corridas (renglones), pero que falta una columna. Entonces en el generador $I = ABC...K$ se despeja la columna faltante (k), de modo que $K = ABC... (K-1)$ define el producto de signos mas y menos por usar en cada renglón a fin de producir los niveles para el k-ésimo factor.

Nótese que cualquier efecto de interacción puede usarse para generar la columna del k-ésimo factor. Sin embargo, si no se utiliza el efecto ABC... (k-1) no se produce el diseño de mayor o más alta resolución.

Otra manera de interpretar la construcción de una fracción un medio del diseño consiste en asignar los ensayos a dos bloques, confundiendo la interacción de mayor orden ABC...K. Cada bloque de 2^{K-1} ensayos es un diseño factorial fraccionario 2^{K-1} de máxima resolución.

Tabla 1.10. Las dos fracciones un medio del diseño

Corrida	Factorial 2^2 Completa (diseño básico)		2_{III}^{3-1} , I = ABC			2_{III}^{3-1} , I = -ABC		
	A	B	A	B	C = AB	A	B	C = -AB
1	-	-	-	-	+	-	-	-
2	+	-	+	-	-	+	-	+
3	-	+	-	+	-	-	+	+
4	+	+	+	+	+	+	+	-

Proyección de fracciones en diseños factoriales.

Cualquier diseño factorial fraccionario de resolución R contiene diseños factoriales completos (o posiblemente réplicas de diseños factoriales) de cualquier subconjunto de R-1 factores. Este concepto es muy importante y útil. Por ejemplo, si un experimentador tiene varios factores de posible interés, pero considera que sólo R-1 de ellos tienen efectos importantes, la elección de un diseño factorial fraccionario de resolución R resulta apropiada. Si el experimentador está en lo correcto el diseño factorial fraccionario de resolución R se proyectará en un diseño factorial completo de los R-1 efectos significativos. En la figura 1.14 se presenta este proceso para un diseño 2_{III}^{3-1} que se proyecta en un diseño 2^2 en cada subconjunto de dos factores.

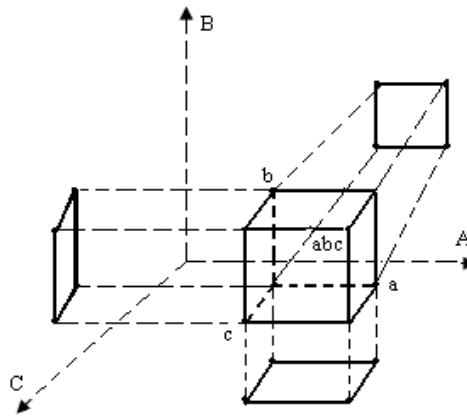


Figura 1.14. Proyección de un diseño 2_{III}^{3-1} en tres diseños 2^2

Ya que la resolución máxima de una fracción un medio de un diseño 2^k es $R = k$, todo diseño 2^{k-1} se proyectará en un diseño factorial completo de cualquiera de los $(k-1)$ factores originales. Además un diseño 2^{k-1} se proyecta en dos réplicas de un diseño factorial completo de cualquier subconjunto de $k-2$ factores, cuatro réplicas de un diseño factorial completo se proyectan en cualquier subconjunto de $k-3$ factores, y así sucesivamente.

Sucesiones de Diseños Factoriales Fraccionarios.

El uso de diseños factoriales fraccionarios a menudo conduce a una gran economía y eficiencia en la experimentación, especialmente si los ensayos pueden hacerse en sucesión. Por ejemplo, suponga que se están investigando $k = 4$ factores ($2^4 = 16$ ensayos). Por lo general, es preferible realizar un diseño fraccionario 2^{4-1}_{IV} (8 ensayos), analizar los resultados y decidir el mejor conjunto de ensayos que deben recopilarse después. De ser necesario, siempre será posible recurrir a la fracción complementaria y complementar el diseño 2^4 para resolver alguna ambigüedad. Cuando se usa este método para completar el diseño, las dos fracciones constituyen los bloques del diseño completo con la interacción de más alto orden confundida con los bloques (en este caso ABCD estará confundida ver tabla 1.10). Por lo tanto, el único resultado de la experimentación sucesiva es la pérdida de la información que se refiere a la interacción de mayor orden. Por otro lado, en muchos casos se aprende lo suficiente de la fracción un medio para continuar con la siguiente etapa de la experimentación. Esta puede incluir, eliminar o agregar factores, cambiar la respuesta o variar los factores sobre nuevos intervalos.

Ejemplo 1.5: Aplicación de las Sucesiones de Diseños Factoriales Fraccionarios.

Considérese el experimento de la rapidez de filtración del ejemplo 1.4. El diseño original, mostrado en la tabla 1.5, consta de una réplica del diseño 2^4 . En este estudio, los efectos principales A, C, D y las interacciones AC y AD, resultaron diferentes de cero. Ahora regresamos a este experimento y simularemos lo que habría ocurrido de haberse corrido una semifracción del diseño 2^4 en vez del factorial completo.

Utilizaremos el diseño 2^{4-1} con $I = ABCD$, y esta elección del generador dará por resultado un diseño de la máxima resolución posible (IV).

Para construir el diseño, primero se escribe el diseño básico, que es 2^3 , como se muestra en las primeras tres columnas de la tabla 1.10. Este diseño básico tiene el número necesario de corridas (8), pero solo tres columnas (factores).

Para hallar los niveles del cuarto factor, se despeja D en $I = ABCD$, o sea $D = ABC$. Así, el nivel de D en cada corrida es el producto de los signos mas y menos en las columnas A, B y C. El proceso se ilustra en la tabla 1.10. Dado que el generador ABCD es positivo, este diseño 2^{4-1}_{IV} es la fracción principal. El diseño se presenta gráficamente en la Figura 1.15.

Utilizando la relación definitoria, se observa que el alias de cada efecto principal es una interacción trifactorial; esto es, $A = A^2BCD = BCD$, $B = AB^2CD = ACD$, $C = ABC^2D = ABD$, y $D = ABCD^2 = ABC$. Además, el alias de cada interacción bifactorial es otra interacción bifactorial. Estas relaciones de alias son $AB = CD$, $AC = BD$, y $BC = AD$.

Los cuatro efectos principales más los tres pares de alias de interacciones bifactoriales explican los siete grados de libertad del diseño.

En este punto, normalmente aleatorizaríamos las ocho corridas y realizaríamos el experimento. Dado que ya hemos corrido el diseño 2^4 completo, simplemente elegimos las ocho velocidades de filtración observadas del ejemplo 4 que corresponde a las corridas en el diseño 2^{4-1}_{IV} . Estas observaciones se muestran en la última columna de la tabla 1.11 y también se ilustran en la figura 1.15.

En la tabla 1.12 se presentan las estimaciones de los efectos obtenidos a partir del diseño 2^{4-1}_{IV} . Para ilustrar los cálculos, la combinación lineal de las observaciones asociadas con el efecto A es:

$$\ell_A = \frac{1}{4}(-45+100-45+65-75+60-80+96) = 19.00 \rightarrow A + BCD$$

Mientras para el efecto AB se obtiene:

$$\ell_{AB} = \frac{1}{4}(45 - 100 - 45 + 65 + 75 - 60 - 80 + 96) = -1.00 \rightarrow AB + CD$$

Tabla 1.11. Diseño 2^{4-1}_{IV} con la relación definitoria I = ABCD

Corrida	Diseño básico			D = ABC	Combinación de tratamientos	Rapidez de filtración
	A	B	C			
1	-	-	-	-	(1)	45
2	+	-	-	+	ad	100
3	-	+	-	+	bd	45
4	+	+	-	-	ab	65
5	-	-	+	+	cd	75
6	+	-	+	-	ac	60
7	-	+	+	-	bc	80
8	+	+	+	+	abcd	96

Figura 1.15. Diseño 2^{4-1}_{IV} para el experimento de rapidez de filtración del ejemplo 1.5

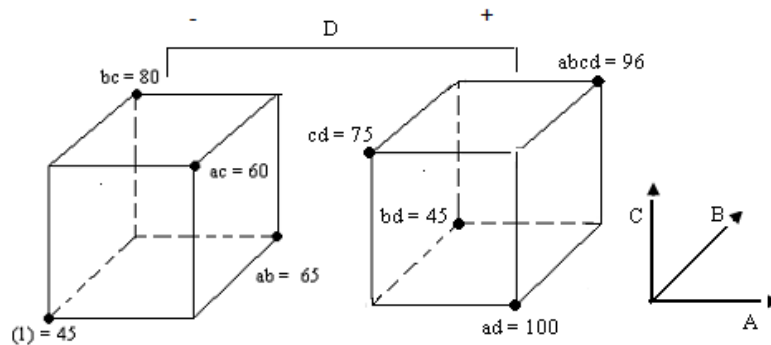


Tabla 1.12: Efectos estimados y alias del Ejemplo 1.5

Estimación	Estructura de alias
$l_A = 19.00$	$l_A \rightarrow \mathbf{A} + \mathbf{BCD}$
$l_B = 1.50$	$l_B \rightarrow \mathbf{B} + \mathbf{ACD}$
$l_C = 14.00$	$l_C \rightarrow \mathbf{C} + \mathbf{ABD}$
$l_D = 16.50$	$l_D \rightarrow \mathbf{D} + \mathbf{ABC}$
$l_{AB} = -1.00$	$l_{AB} \rightarrow \mathbf{AB} + \mathbf{CD}$
$l_{AC} = -18.50$	$l_{AC} \rightarrow \mathbf{AC} + \mathbf{BD}$
$l_{BC} = 19.00$	$l_{BC} \rightarrow \mathbf{BC} + \mathbf{AD}$

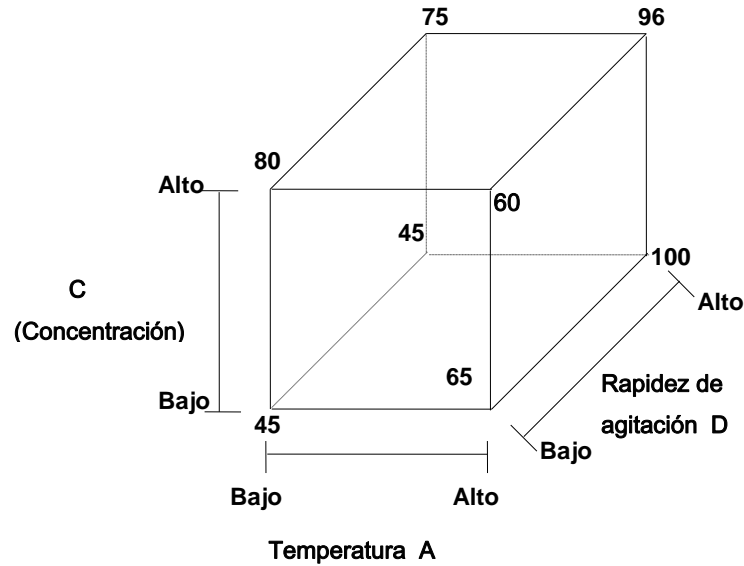
Los efectos significativos se muestran en negritas.

Un análisis de la tabla 1.12 muestra que es razonable concluir que los efectos principales A, C y D son grandes, y que las interacciones AC y AD también son significativas. Esto apoya las conclusiones del análisis del diseño 2^4 completo del ejemplo 1.4. Por otra parte, como el factor B no es significativo, puede eliminarse. En consecuencia, el diseño 2_{IV}^{4-1} puede proyectarse en una réplica de un diseño 2^3 con los factores A, C y D. Esto aparece en la figura 1.16. La inspección visual de este diagrama de cubo nos da mayor seguridad en cuanto a las conclusiones que se llegó antes.

Obsérvese que si la temperatura (A) se encuentra en el nivel bajo, la concentración (C) tiene un gran efecto positivo, mientras que si la temperatura esta en el nivel alto, el efecto de la concentración es muy pequeño. Esto se debe probablemente a una interacción AC. Además, si la temperatura esta en el nivel bajo, el efecto de la velocidad de agitación (D) es despreciable, pero si está en el nivel alto, dicha velocidad tiene un gran efecto positivo. Ahora, suponga que el experimentador decide recurrir a la fracción complementaria, definida mediante $I = -ABCD$. Fácilmente puede mostrarse que el diseño y las respuestas son las siguientes:

Corrida	A	B	C	D = -ABC	Combinación de Tratamientos	Rapidez de filtración
1	-	-	-	+	d	43
2	+	-	-	-	a	71
3	-	+	-	-	b	48
4	+	+	-	+	abd	104
5	-	-	+	-	c	68
6	+	-	+	+	acd	86
7	-	+	+	+	bcd	70
8	+	+	+	-	abc	65

Figura 1.16: Proyección del diseño 2^{4-1}_{IV} en un diseño 2^3 con A, C y D para el ejemplo 1.5.



Las combinaciones lineales de las observaciones que se obtienen con esta fracción complementaria son:

$$\begin{aligned}
 \ell'_A &= 24.25 \rightarrow A - BCD & \ell'_B &= 4.75 \rightarrow B - ACD \\
 \ell'_C &= 5.75 \rightarrow C - ABD & \ell'_D &= 12.75 \rightarrow D - ABC \\
 \ell'_{AB} &= 1.25 \rightarrow AB - CD & \ell'_{AC} &= -17.75 \rightarrow AC - BD \\
 \ell'_{BC} &= -14.25 \rightarrow BC - AD
 \end{aligned}$$

Estas fracciones alternas pueden combinarse con las de la fracción principal un medio, para producir las siguientes estimaciones de los efectos:

i	De $\frac{1}{2}(\ell_i + \ell'_i)$	De $\frac{1}{2}(\ell_i - \ell'_i)$
A	21.63 \rightarrow A	-2.63 \rightarrow BCD
B	3.13 \rightarrow B	-1.63 \rightarrow ACD
C	9.75 \rightarrow C	4.13 \rightarrow ABD
D	14.63 \rightarrow D	1.88 \rightarrow ABC
AB	0.13 \rightarrow AB	-1.13 \rightarrow CD
AC	-18.13 \rightarrow AC	-0.38 \rightarrow BD
BC	2.38 \rightarrow BC	16.63 \rightarrow AD

Estas estimaciones coinciden con las del análisis original de los datos del diseño factorial 2^4 con una sola réplica, mencionado en el ejemplo 1.4.

Ejemplo 1.6: Un diseño 2^{5-1} Utilizado para mejorar un proceso.

Con el objetivo de mejorar el rendimiento del proceso de manufactura de un circuito integrado, en un diseño 2^{5-1} se investigaron cinco factores del proceso. Los cinco factores fueron **A** = apertura del diafragma (pequeña, grande), **B** = tiempo de exposición (20% abajo y arriba del nominal), **C** = tiempo de revelado (30, 45 s), **D** = dimensión de la pantalla (pequeña, grande) y **E** = tiempo de corrosión selectiva (14.5, 15.5 s). En la tabla 1.13 se presenta la construcción del diseño 2^{5-1} .

Tabla 1.13. Diseño 2^{5-1} para el ejemplo 1.6

Corrida	A	B	C	D	E = ABCD	Combinación de Tratamiento	Rendimiento
1	-	-	-	-	+	e	8
2	+	-	-	-	-	a	9
3	-	+	-	-	-	b	34
4	+	+	-	-	+	abe	52
5	-	-	+	-	-	c	16
6	+	-	+	-	+	ace	22
7	-	+	+	-	+	bce	45
8	+	+	+	-	-	abc	60
9	-	-	-	+	-	d	6
10	+	-	-	+	+	ade	10
11	-	+	-	+	+	bde	30
12	+	+	-	+	-	abd	50
13	-	-	+	+	+	cde	15
14	+	-	+	+	-	acd	21
15	-	+	+	+	-	bcd	44
16	+	+	+	+	+	abcde	63

Obsérvese que esa construcción consistió en escribir el diseño básico con 16 corridas (un diseño 2^4 en A, B, C y D), elegir ABCDE como el generador, y establecer los niveles del quinto factor E = ABCD. En la figura 1.17 se muestra una representación gráfica del diseño.

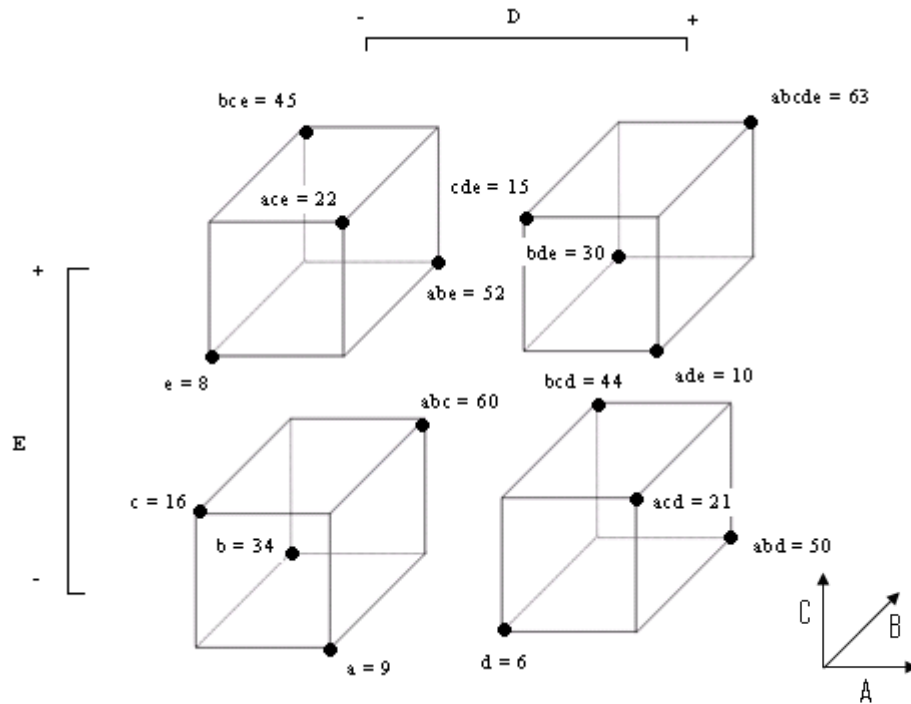
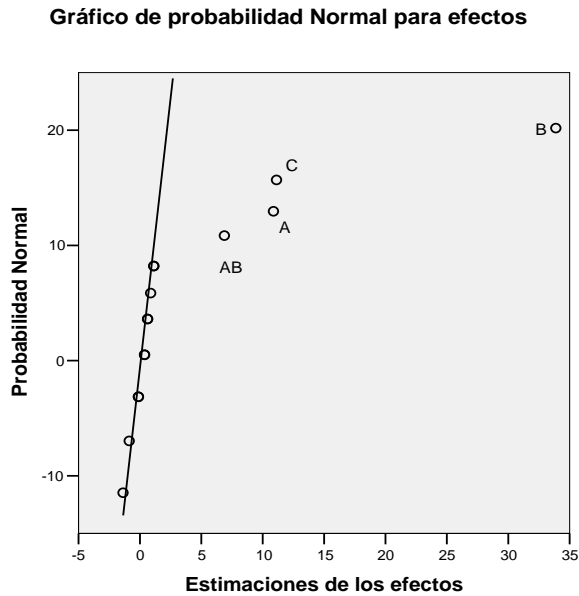


Figura 1.17. Diseño 2^{5-1}_V para el ejemplo 1.6.

Obteniendo las estimaciones para los datos de la tabla 1.13 tenemos los siguientes resultados.

Estimación	Estructura del alias
$l_A = 11.125$	$l_A \rightarrow A + BCDE$
$l_B = 33.875$	$l_B \rightarrow B + ACDE$
$l_C = 10.875$	$l_C \rightarrow C + ABDE$
$l_D = -0.875$	$l_D \rightarrow D + ABCE$
$l_E = 0.625$	$l_E \rightarrow E + ABCD$
$l_{AB} = 6.875$	$l_{AB} \rightarrow AB + CDE$
$l_{AC} = 0.375$	$l_{AC} \rightarrow AC + BDE$
$l_{AD} = 1.125$	$l_{AD} \rightarrow AD + BCE$
$l_{AE} = 1.125$	$l_{AE} \rightarrow AE + BCD$
$l_{BC} = 0.625$	$l_{BC} \rightarrow BC + ADE$
$l_{BD} = -0.125$	$l_{BD} \rightarrow BD + ACE$
$l_{BE} = -0.125$	$l_{BE} \rightarrow BE + ACD$
$l_{CD} = 0.875$	$l_{CD} \rightarrow CD + ABE$
$l_{CE} = 0.375$	$l_{CE} \rightarrow CE + ABD$
$l_{DE} = -1.375$	$l_{DE} \rightarrow DE + ABC$

Figura 1.18: Gráfico de probabilidad normal para los efectos del Ejemplo 1.6.



La relación definitoria para el diseño es $I = ABCD$. En consecuencia, el alias de cada efecto principal es una interacción tetrafactorial (Por ejemplo, $\ell_A \rightarrow A + BCDE$), y el alias de cada interacción bifactorial es una interacción trifactorial (por ejemplo, $\ell_{AB} \rightarrow AB + CDE$). De este modo el diseño tiene resolución V. Se esperaría que este diseño 2^{5-1} proporcionara excelente información respecto a los efectos principales y las interacciones bifactoriales.

En la figura 1.18 se representa una gráfica de probabilidad normal para las estimaciones de los efectos en este experimento. Los efectos principales de A, B y C y la interacción AB son grandes. Recuérdese que, debido a la existencia del alias, estos efectos son en realidad $A + BCDE$, $B + ACDE$, $C + ABDE$ y $AB + CDE$. Sin embargo, dado que parece plausible que las interacciones trifactoriales y de orden superior sean despreciables, existe seguridad al incluir que solo A, B, C y AB son efectos importantes.

En la tabla 1.14 se resume el análisis de varianza para este experimento. La suma de cuadrados del modelo es $SS_{\text{modelo}} = SS_A + SS_B + SS_C + SS_{AB} = 5747.25$, y esto explica más del 99% de la variabilidad total en el rendimiento.

En la figura 1.19 se presenta una gráfica de probabilidad normal para los residuos y la figura 1.20 es una gráfica de los residuos contra los valores predichos. Ambas gráficas son satisfactorias.

Tabla 1.14: Análisis de variancia para el ejemplo 1.6.

Fuente de Variación	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Media de Cuadrados	F
A	495,063	1	495,063	193,200
B	4590,063	1	4590,063	1791,240
C	473,063	1	473,063	184,610
A * B	189,063	1	189,063	73,780
Error	28,188	11	2,563	
Total	5775,438	15		

Además, $F_{tablas} = f_{0,99,1,11} = 9.65$ lo que implica que los resultados de la tabla anterior donde el valor de F es mayor al de F_{tablas} confirma que nuestra conclusión es válida.

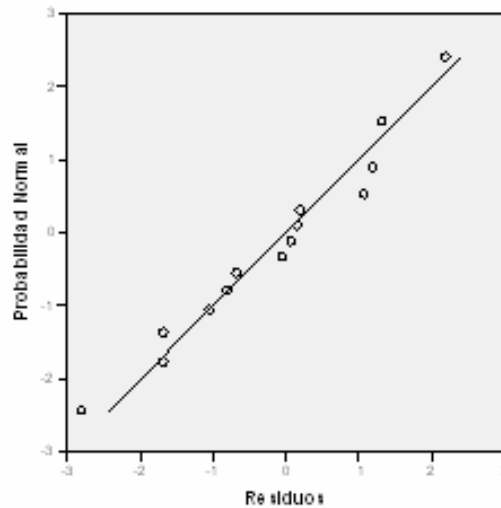


Figura 1.19: Gráfica de probabilidad normal para los residuos

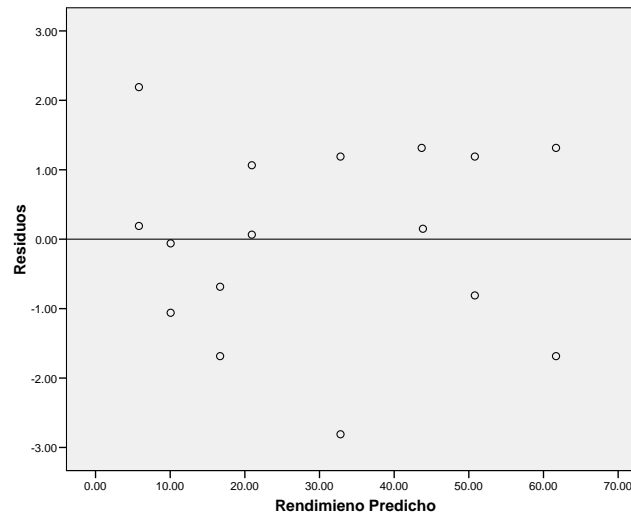


Figura 1.20: Gráfica de los residuos contra los valores predichos.

Los tres factores A, B y C tienen efectos positivos grandes. La interacción AB, apertura y tiempo de exposición, se grafica en la figura 1.21. Esta gráfica confirma que los rendimientos son mayores cuando, tanto A como B se encuentran en el nivel alto.

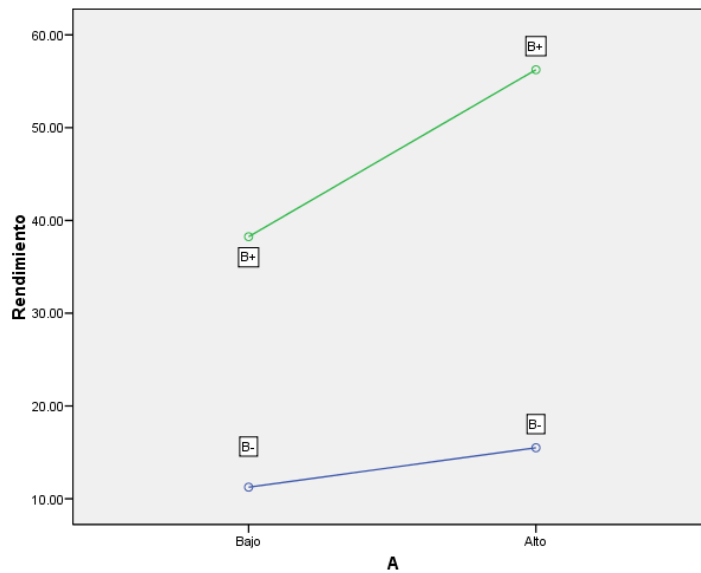
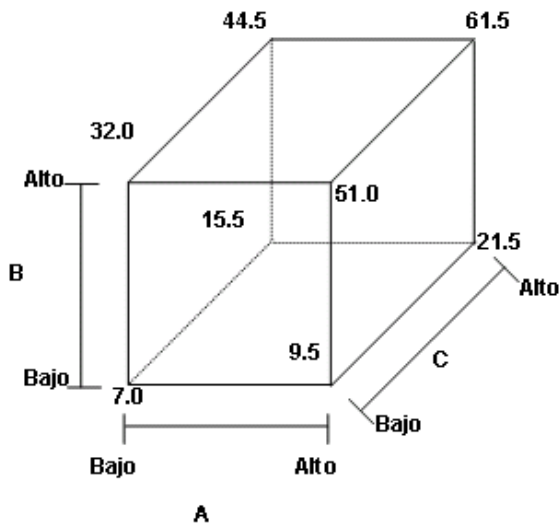


Figura 1.21: Interacción entre apertura y tiempo de exposición para el ejemplo 1.6.

El diseño 2^{5-1} se contrae a dos réplicas de un diseño 2^3 en tres cualesquiera de los cinco factores originales. (Obsérvese la figura 1.17 para visualizar mejor). La figura 1.22 es un diagrama de cubo en los factores A, B y C, con los rendimientos promedios superpuestos en los ocho vértices. Por inspección del diagrama de cubo resulta obvio que los máximos rendimientos se producen cuando A, B y C se encuentran en un nivel alto. Los factores D y E tienen escaso efecto sobre el rendimiento promedio del proceso, y pueden fijarse en valores que optimicen otros objetivos (como el costo).

Figura 1.22: Proyección del diseño 2^{5-1}_{IV} del ejemplo 1.6 en dos réplicas de un diseño 2^3 con los factores A, B y C.



Las proyecciones de Resolución **R**, como se dijo anteriormente contiene diseños factoriales completos de cualquier subconjunto **R-1** factores. En este ejemplo, los factores significativos son A, B y C, por lo que de la tabla 1.13 para extraer las proyecciones de un diseño 2^3 sería:

Para la proyección de $a = 9.5$ este se obtiene, de sumar los respectivos valores de $(a + ade)/2$ de la tabla 1.13, es decir, $(9 + 10)/2 = 9.5$ ya que d y e no son significativos es como que $ade \approx a$.

Para la proyección de $bc = 44.5$ este se obtiene, de sumar los respectivos valores de $(bce + bcd)/2$ de la tabla 1.13, es decir, $(45 + 44)/2 = 44.5$ ya que d y e no son significativos es como que $bce \approx bcd \approx bc$.

Con la misma lógica se obtienen los demás valores de la figura 1.22.

1.2.2.2 Fracción un cuarto del diseño 2^k

Con frecuencia son útiles fracciones más pequeñas del diseño 2^k cuando hay un número moderadamente grande de factores. Considere una fracción de un cuarto del diseño 2^k . Este diseño contiene 2^{k-2} ensayos, y por lo regular, se conoce como factorial fraccionario 2^{k-2} .

Este diseño se puede construir escribiendo primero las combinaciones de tratamientos asociadas con el factorial completo con $k-2$ factores. Después se asocian las dos columnas adicionales con las interacciones, elegidas apropiadamente, que incluyen los primeros $k-2$ factores. Por lo tanto, la cuarta parte de un diseño 2^k tiene dos generadores o generatrices. Si P y Q representan las generatrices elegidas, entonces las relaciones $I = P$ e $I = Q$ se conocen como relaciones generadoras del diseño. Los signos de P y Q (ya sean + o bien -) determinan cual de las cuatro fracciones se forma. Las cuatro fracciones asociadas con la elección de los generadores $\pm P$ y $\pm Q$ pertenecen a la misma familia. La fracción en la que P y Q son ambas positivas se conoce como fracción principal.

La relación completa que define este diseño consta de P, Q y la interacción generalizada PQ; en otras palabras, la relación que define al diseño es $I = P = Q = PQ$. Los alias de cualquier efecto se determinan multiplicando el efecto por cada palabra de la relación que define al diseño. Claramente, el efecto tiene tres alias. El experimentador debe tener cuidado al elegir los generadores, de manera que efectos potencialmente importantes no sean alias entre sí. Como ejemplo, considere el diseño 2^{6-2} . Suponga que se eligen las relaciones generadoras $I = ABCE$ e $I = BCDF$. Ahora bien, la interacción generalizada de los generadores ABCE y BCDF es ADEF. Entonces, la relación completa que define al diseño es

$$I = ABCE = BCDF = ADEF$$

En consecuencia, este diseño es de resolución IV. Para determinar los alias de cualquier efecto (Por ejemplo, los de A) se multiplica el efecto por cada palabra de la relación definitoria. Por A, y así tendríamos:

$$A = BCE = ABCDF = DEF$$

Fácilmente puede verificarse que cada efecto principal es alias de interacciones de tres o cinco factores, mientras que las interacciones de dos factores son alias entre sí o de interacciones de mayor orden. Por lo tanto, cuando se estime A, por ejemplo, en realidad lo que se está estimando es $A + BCE + DEF + ABCDF$. La estructura completa de los alias de este diseño aparece en la Tabla 1.15.

Tabla 1.15: Estructura de alias para el diseño 2_{IV}^{6-2} con $I = ABCE = BCDF = ADEF$

A = BCE = DEF = ABCDF	AB = CE = ACDF = BDEF
B = ACE = CDF = ABDEF	AC = BE = ABDF = CDEF
C = ABE = BDF = ACDEF	AD = EF = BCDE = ABCF
D = BCF = AEF = ABCDE	AE = BC = DF = ABCDEF
E = ABC = ADF = BCDEF	AF = DE = BCEF = ABCD
F = BCD = ADE = ABCEF	BD = CF = ACDE = ABEF
	BF = CD = ACEF = ABDE
ABD = CDE = ACF = BEF	
ACD = BDE = ABF = CEF	

Este diseño proporciona estimaciones precisas de los efectos principales si las interacciones entre tres o más factores son despreciables.

Para construir este diseño, primero se escriben las combinaciones de tratamientos para el diseño $2^{6-2} = 2^4$ completo con los factores A, B, C y D. Después se agregan los factores E y F asociando sus niveles positivos y negativos a los signos positivos y negativos de las interacciones ABC y BCD, respectivamente. Este procedimiento se muestra en la tabla 1.16.

Tabla 1.16: Construcción del diseño 2^{6-2}_{IV} con los generadores I = ABCE e I = BCDF

Corrida	A	B	C	D	E = ABC	F = BCD
1	-	-	-	-	-	-
2	+	-	-	-	+	-
3	-	+	-	-	+	+
4	+	+	-	-	-	+
5	-	-	+	-	+	+
6	+	-	+	-	-	+
7	-	+	+	-	-	-
8	+	+	+	-	+	-
9	-	-	-	+	-	+
10	+	-	-	+	+	+
11	-	+	-	+	+	-
12	+	+	-	+	-	-
13	-	-	+	+	+	-
14	+	-	+	+	-	-
15	-	+	+	+	-	+
16	+	+	+	+	+	+

Otra forma de construir este diseño consiste en deducir los cuatro bloques del diseño 2^6 con ABCE y BCDF confundidos, y después elegir el bloque cuyas combinaciones de tratamientos son positivas para ABCE y BCDF. Este sería un factorial 2^{6-2} fraccionario con las relaciones generadoras I = ABCE e I = BCDF. Esta resulta ser la fracción principal porque ambas generadoras ABCE y BCDF son positivas.

Por supuesto, hay tres fracciones alternas para este diseño 2^{6-2}_{IV} particular. Estas son las fracciones con las relaciones generadoras I = ABCE e I = -BCDF; I = - ABCE e I = BCDF, e I = -ABCE e I = - BCDF. Estas fracciones pueden construirse fácilmente usando el método de la tabla 1.16. Por ejemplo, si se desea determinar la fracción en la que I = ABCE e I = -BCDF, entonces en la última columna de la tabla 1.16 se hace F = -BCD y los niveles del factor F se transforman en

++-----++--++++--

La relación definitoria completa para esta fracción alterna es I = ABCE = -BCDF = -ADEF.

Algunos signos de la estructura de los alias de la tabla 1.15 son ahora diferentes. Por ejemplo, los alias de A son $A = BCE = -DEF = -ABCDF$. Por lo tanto, la combinación lineal de las observaciones ℓ_A , en realidad estima $A + BEC - DEF - ABCDEF$.

Finalmente hay que notar que el diseño factorial fraccionario pasa a ser una sola réplica de un diseño 2^4 en cualquier subconjunto de cuatro factores que no sea una palabra de la relación que define al diseño. También se convierte en una fracción un medio de un diseño 2^4 con réplicas en cualquier subconjunto de cuatro factores que sea una palabra de la relación que define al diseño. Así, el diseño de la tabla 1.13 se transforma en dos replicas de un diseño 2^{4-1} para los factores ABCE, BCDF, y ADEF, ya que estas son las palabras de la relación de definición. Existen otras 12 combinaciones de los seis factores, como serían ABCD, ABCF, etc., para las cuales el diseño pasa a ser en una sola réplica de un diseño 2^4 . Este diseño también se convierte en dos réplicas de un factorial 2^3 de cualquier subconjunto de tres de los seis factores, o en cuatro réplicas de un diseño 2^2 de cualquier subconjunto de dos factores. En general, cualquier diseño factorial fraccionario 2^{k-2} puede contraerse a un factorial completo o a un factorial fraccionario en algún subconjunto de $r \leq k-2$ de los factores originales. Estos subconjuntos de variables que forman factoriales completos no son palabras en la relación definitoria completa.

Ejemplo 1.7

Se observa que los componentes manufacturados en cierto proceso de moldeo por inyección presentan contracción (“Encogimiento”) excesiva; esto causa problemas en las operaciones de montaje posteriores al moldeo. Un equipo de mejoramiento de la calidad ha decidido emplear un experimento diseñado a fin de estudiar el proceso de moldeo por inyección y tratar de reducir la contracción. El equipo decide investigar seis factores: temperatura del molde (**A**), rapidez de alimentación (**B**), tiempo de retención (**C**), tiempo de ciclo (**D**), tamaño de la compuesta (**E**) y presión de retención (**F**), cada uno a dos niveles, con el objetivo de descubrir la forma en que cada factor influye en la contracción y como interactúan los factores.

El equipo decide emplear el diseño factorial fraccionario de dos niveles con las 16 corridas de la tabla 1.16. El diseño se muestra una vez más en la tabla 1.17, junto con la contracción observada (x 10) para el componente de prueba producido en cada una de las 16 corridas del diseño.

Tabla 1.17: Diseño 2_{IV}^{6-2} para el experimento de modelo por inyección del ejemplo 1.7

Corrida	A	B	C	D	E = ABC	F = BCD	Contracción observada (x 10)
1	-	-	-	-	-	-	6
2	+	-	-	-	+	-	10
3	-	+	-	-	+	+	32
4	+	+	-	-	-	+	60
5	-	-	+	-	+	+	4
6	+	-	+	-	-	+	15
7	-	+	+	-	-	-	26
8	+	+	+	-	+	-	60
9	-	-	-	+	-	+	8
10	+	-	-	+	+	+	12
11	-	+	-	+	+	-	34
12	+	+	-	+	-	-	60
13	-	-	+	+	+	-	16
14	+	-	+	+	-	-	5
15	-	+	+	+	-	+	37
16	+	+	+	+	+	+	52

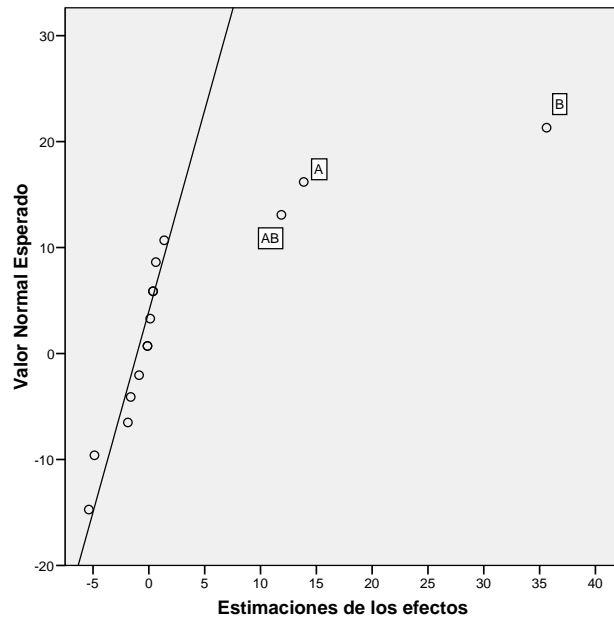
Las estimaciones de los efectos se presentan a continuación, donde la estimación del efecto A se calcula así:

$$A = (-6 + 10 - 32 + 60 - 4 + 15 - 26 + 60 - 8 + 12 - 34 + 60 - 16 + 5 - 37 + 52) / 8$$

Colocando los valores observados con los respectivos signos del efecto. Las demás estimaciones se calculan de igual manera:

Estimación
$l_A = 13.875$
$l_B = 35.625$
$l_C = -0.875$
$l_D = 1.375$
$l_E = 0.375$
$l_F = 0.375$
$l_{AB} = 11.875$
$l_{AC} = -1.625$
$l_{AD} = -5.375$
$l_{AE} = -1.875$
$l_{AF} = -5.875$
$l_{BD} = -0.125$
$l_{BF} = -1.375$

Figura 1.23: Gráfica de probabilidad normal para los efectos del ejemplo 1.7.



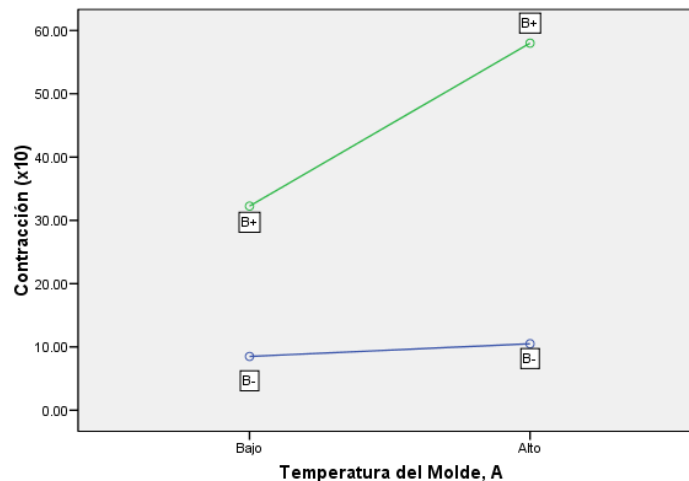
El análisis de varianza nos ayuda a tener más peso en nuestra conclusión, esta se muestra en la tabla 1.18.

Tabla 1.18: Análisis de Varianza de los datos del ejemplo 1.7.

Fuente	Suma de cuadrados	gl	Media cuadrática	F
A	770.063	1	770.063	37.149
B	5076.563	1	5076.563	244.899
A * B	564.063	1	564.063	27.211
Error	248.750	12	20.729	
Total corregida	6659.438	15		

El análisis de varianza que resume la Tabla 1.18 obtenida con el SPSS, manifiesta la significancia de los efectos principales A y B, además, de la interacción AB, ya que utilizando el criterio de la Distribución F, comparando los valores dados en la corrida con el valor de F de tablas (El cual ya sabemos buscar), los valores de F son mayores que el F_{tablas} . Podemos observar que tanto A, B y AB son los efectos significativos. En la figura 1.23 se presenta una gráfica de probabilidad normal para las estimaciones de efecto de este experimento. Los únicos efectos grandes son los de A (Temperatura del molde), B (rapidez de alimentación), y la interacción AB. A la luz de las relaciones de alias de la tabla 1.15, parece razonable adoptar estas conclusiones tentativas. La gráfica de la interacción AB en la fig. 1.24 revela que el proceso es muy insensible a la temperatura si la rapidez de alimentación se encuentra en el nivel bajo, pero es muy sensible a ella si dicha rapidez esta en el nivel alto. Con esta última en el nivel bajo, el proceso debe producir una contracción promedio aproximada al 10% sin importar el nivel de temperatura elegido.

Figura 1.24: Gráfica de la interacción AB (Temperatura del molde-rapidez de alimentación) para el ejemplo 1.7.



Con base en este análisis inicial, el equipo decide fijar la temperatura del molde y la velocidad de alimentación en el nivel bajo. Esta fijación de condiciones reducirá la contracción promedio de componentes alrededor del 10%. Sin embargo, la variabilidad de la contracción de un componente a otro sigue siendo un problema potencial.

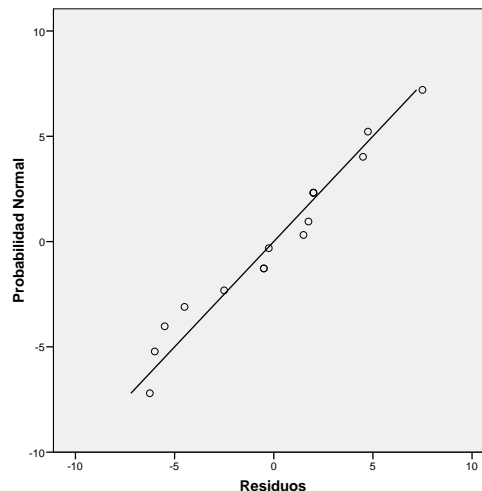
En efecto, la contracción promedio puede reducirse de manera adecuada por medio de las modificaciones anteriores; sin embargo, la variabilidad de la contracción de un componente a otro para una corrida de producción podría seguir causando problemas en el montaje. Una forma de abordar este asunto consiste en investigar si alguno de los factores del proceso influye en la variabilidad de la contracción.

En la fig. 1.25 se presenta la gráfica de probabilidad normal para los residuos, la cual parece satisfactoria. Entonces se trazan las gráficas de residuos contra cada factor. Una de estas gráficas, la de residuo contra factor C (Tiempo de retención) se muestra en la fig. 1.26. La gráfica revela que hay mucho menos dispersión en los residuos, para el nivel bajo de tiempo de retención que para el nivel alto. Estos residuos se obtuvieron de la manera usual a partir de un modelo para la contracción predicha,

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_{12} x_1 x_2 = 27.3125 + 6.9375 x_1 + 17.8125 x_2 + 5.9375 x_1 x_2$$

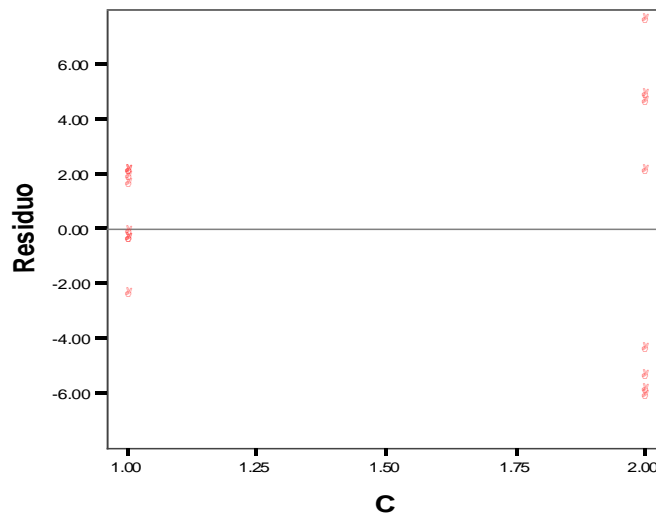
Donde x_1 , x_2 y $x_1 x_2$ son variables codificadas que corresponden a los factores A y B y la interacción AB, los residuos son entonces $e = y - \hat{y}$

Figura 1.25: Gráfica de probabilidad normal para los residuos del ejemplo 1.7.



El modelo de regresión utilizado para producir los residuos esencialmente elimina de los datos los efectos de localización de A, B y AB; por tanto los residuos contienen información sobre la variabilidad no explicada. La fig. 1.26 indica que existe un patrón en la variabilidad y que la variabilidad en la contracción de componentes puede ser menor cuando el tiempo de retención esta en el nivel bajo.

Figura 1.26: Residuos contra tiempo de retención (C) para el ejemplo 1.7.



Esto es amplificado a un más por el análisis de residuos que se muestran en la tabla 1.19. En esta tabla, los residuos están dispuestos en los niveles bajo (-) y alto (+) de cada factor, y se ha calculado, su desviación estándar a esos niveles.

Por ejemplo para calcular el valor correspondiente a $S(A^+)$, calculamos primero la media aritmética de los residuos que tenga el signo positivo en la columna del efecto A (Tabla 1.19).

$$\bar{x}_{A^+} = \frac{-0.5 + 2 + 4.5 + 2 + 1.5 + 2 - 5.5 - 6}{8} = 0,$$

Calcularemos su desviación:
$$S = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$$

$$S_{A^+} = \sqrt{\frac{(-0.5-0)^2 + (2-0)^2 + (4.5-0)^2 + \dots + (-6-0)^2}{7}} = \sqrt{\frac{101}{7}} = \sqrt{14.428} = 3.80$$

Para $S(C^-)$, calculamos primero la media aritmética de los residuos que tenga el signo negativo en la columna del efecto C (Tabla 1.19).

$$\bar{x}_{C^-} = \frac{-2.5 - 0.5 - 0.25 + 2 - 0.5 + 1.5 + 1.75 + 2}{8} = 0.4375$$

Su desviación es:
$$S = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$$

$$S_{C^-} = \sqrt{\frac{(-2.5-0.4375)^2 + (-0.5-0.4375)^2 + \dots + (2-0.4375)^2}{7}} = \sqrt{\frac{18.59375}{7}} = 1.63$$

Obsérvese que la desviación estándar con C en el nivel bajo [$S(C^-) = 1.63$] es considerablemente menor que la desviación estándar de los residuos con C en el nivel alto [$S(C^+) = 5.70$].

En la línea inferior de la tabla 1.19 se presenta la estadística

$$F_i^* = \ln \frac{S^2(i^+)}{S^2(i^-)}$$

Recuérdese que si las varianzas de los residuos en los niveles alto (+) y bajo (-) del factor i son iguales, entonces el cociente anterior tiene una distribución aproximadamente normal, con media 0 y desviación estándar unitaria, por lo que puede utilizarse para juzgar la diferencia en la variabilidad de la respuesta para los dos niveles del factor i . Dado que el cociente F_C^* excede el punto de $2\frac{1}{2}$ % superior $Z_{0.025}=1.96$, podríamos concluir que la dispersión aparente o efecto de variabilidad observado en la fig. 1.26 es real. Así, fijar el tiempo de retención en su nivel bajo contribuiría a reducir la variabilidad en la contracción de un componente a otro durante una corrida de producción.

Figura 1.27: Gráfica de probabilidad normal para los efectos de dispersión F_i^* del ejemplo 1.7.

En la fig. 1.27 se presenta una gráfica de probabilidad normal para los valores F_i^* de la tabla 1.19; también se indica que el factor C tiene un gran efecto de dispersión y esto le da mas fuerza a nuestra conclusión sobre dicho factor.

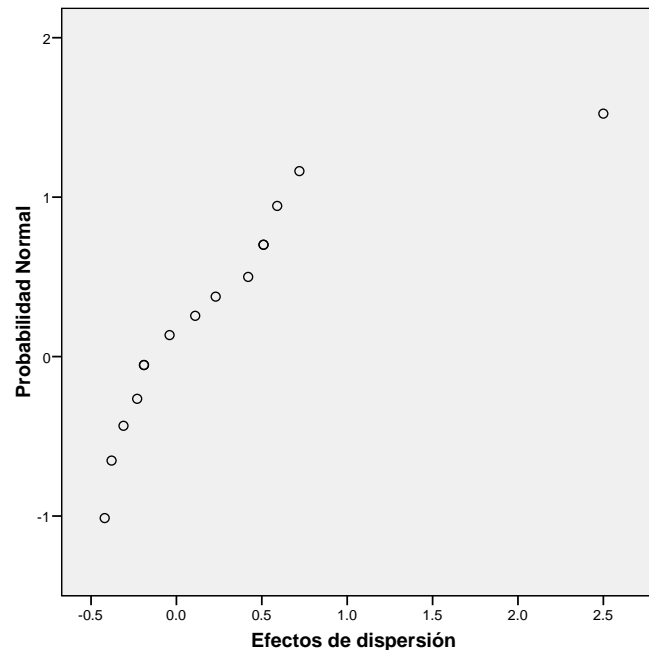


Tabla 1.19. Valores para el estadístico F_i^*

Corrida	A	B	AB=CE	C	AC=BE	AE=BC	E	D	AD=EF	BD=CE	ABD	BF=CD	ACD	F	AF=DE	Residuo
1	-	-	+	-	+	+	-	-	+	+	-	+	-	-	+	-2.50
2	+	-	-	-	-	+	+	-	-	+	+	+	+	-	-	-0.50
3	-	+	-	-	+	-	+	-	+	-	+	+	-	+	-	-0.25
4	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-	-	+	+	+	+	2.00
5	-	-	+	+	-	-	+	-	+	+	-	-	+	+	-	-4.50
6	+	-	-	+	+	-	-	-	-	+	+	-	-	+	+	4.50
7	-	+	-	+	-	+	-	-	+	-	+	-	+	-	+	-6.25
8	+	+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-	-	2.00
9	-	-	+	-	+	+	-	+	-	-	+	-	+	+	-	-0.50
10	+	-	-	-	-	+	+	+	+	-	-	-	-	+	+	1.50
11	-	+	-	-	+	-	+	+	-	+	-	-	+	-	+	1.75
12	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+	+	-	-	-	-	2.00
13	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	+	7.50
14	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	-5.50
15	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	4.75
16	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	-6.00
$S(i^+)$	3.80	4.01	4.33	5.70	3.68	3.85	4.17	4.64	3.39	4.01	4.72	4.71	3.50	3.88	4.87	
$S(i^-)$	4.60	4.41	4.10	1.63	4.53	4.33	4.25	3.59	2.75	4.41	3.51	3.65	3.12	4.52	3.40	
F_i^*	-0.38	-0.19	0.11	2.50	-0.42	-0.23	-0.04	0.51	0.42	-0.19	0.59	0.51	0.23	-0.31	0.72	

1.2.2.3 Diseño Factorial Fraccionario 2^{k-p} General.

Un diseño factorial fraccionario 2^k que contiene 2^{k-p} ensayos que se conoce como fracción $\frac{1}{2^p}$ del diseño factorial 2^k o simplemente diseño factorial fraccionario 2^{k-p} .

Estos diseños requieren que se elijan p generadoras independientes. La relación que define estos diseños consta de las p generadoras.

Generadoras originalmente elegidas de sus $2^p - p - 1$ interacciones generalizadas.

Tabla 1.20: Selección de diseños factorial fraccionarios

Número de Factores K	Fracción	Número de corridas	Generadores de Diseño	Número de Factores K	Fracción	Número de corridas	Generadores de Diseño		
3	2_{III}^{3-1}	4	$C = \pm AB$	8	2_{V}^{8-2}	64	$G = \pm ABCD$		
4	2_{IV}^{4-1}	8	$D = \pm ABC$		$H = \pm ABEF$				
5	2_{V}^{5-1}	16	$E = \pm ABCD$		2_{IV}^{8-3}	32	$F = \pm ABC$		
	2_{III}^{5-2}	8	$D = \pm AB$				$G = \pm ABD$		
6	2_{VI}^{6-1}	32	$E = \pm AC$		2_{IV}^{8-4}	16	$H = \pm BCDE$		
			$F = \pm ABCDE$				$E = \pm BCD$		
	2_{IV}^{6-2}	16	$F = \pm ABC$				$F = \pm ACD$		
7	2_{III}^{6-3}	8	$F = \pm BCD$		9	2_{VI}^{9-2}	128	$G = \pm ABC$	
			$D = \pm AB$					$H = \pm ABD$	
	$E = \pm AC$	2_{IV}^{9-3}	64					$H = \pm ACDFG$	
	$F = \pm BC$			$J = \pm BCEFG$					
	2_{VII}^{7-1}	64	$G = \pm ABCDEF$	2_{IV}^{9-4}				32	$G = \pm ABCD$
			2_{IV}^{7-2}						32
2_{IV}^{7-3}	16	$G = \pm ABDE$	2_{III}^{9-5}	16	$J = \pm CDEF$				
		$E = \pm ABC$			$F = \pm BCDE$				
		$F = \pm BCD$			$G = \pm ACDE$				
		$G = \pm ACD$			$H = \pm ABDE$				
2_{III}^{7-4}	8	$D = \pm AB$		$J = \pm ABCE$					
		$E = \pm AC$		$E = \pm ABC$					
		$F = \pm BC$		$F = \pm BCD$					
		$G = \pm ABC$		$G = \pm ACD$					
							$H = \pm ABD$		
							$J = \pm ABCD$		

Número de Factores K	Fracción	Número de corridas	Generadores de Diseño	Número de Factores K	Fracción	Número de corridas	Generadores de Diseño
10	2_{V}^{10-3}	128	$H = \pm ABCG$	11	2_{IV}^{11-5}	64	$G = \pm CDE$
	2_{IV}^{10-4}	64	$J = \pm ACDE$				$H = \pm ABCD$
			2_{IV}^{10-5}		32	$K = \pm ACDF$	$J = \pm ABF$
	2_{III}^{10-6}	16				$G = \pm BCDF$	$K = \pm BDEF$
				$H = \pm ACDF$	$L = \pm ADEF$		
			$J = \pm ABDE$	$F = \pm ABC$			
			$K = \pm ABCE$	2_{IV}^{11-6}	32	$G = \pm BCD$	
			$F = \pm ABCD$			$H = \pm CDE$	
			$G = \pm ABCE$	2_{III}^{11-7}	16	$J = \pm ACD$	
			$H = \pm ABDE$			$K = \pm ADE$	
			$J = \pm ACDE$			$L = \pm BDE$	
			$K = \pm BCDE$			$E = \pm ABC$	
			$E = \pm ABC$			$F = \pm BCD$	
			$F = \pm BCD$			$G = \pm ACD$	
			$G = \pm ACD$			$H = \pm ABD$	
			$H = \pm ABD$			$J = \pm ABCD$	
			$J = \pm ABCD$			$K = \pm AB$	
			$K = \pm AB$			$L = \pm AC$	

La estructura de los alias puede determinarse multiplicando cada efecto, por la relación que define al diseño. Se debe tener cuidado al elegir las generadoras para que los efectos de interés potencial no sean alias entre si. Cada efecto tiene $2^p - 1$ alias. Por lo regular, se suponen despreciables las interacciones de orden superior (Las de tercero, cuarto o mayor orden) cuando los valores de k son moderadamente grandes. Esto simplifica mucho la estructura de los alias. Es importante que las p generadoras para un diseño factorial fraccionario 2^{k-p} se elijan de tal modo que se obtengan las mejores relaciones de alias posibles. Un criterio razonable es elegir generadores tales que el diseño 2^{k-p} resultante tenga la máxima resolución de diseño posible. En la tabla anterior se presentó una selección de diseños factoriales fraccionarios 2^{k-p} para $k \leq 11$ factores y hasta $n \leq 128$ corridas. Los generadores sugeridos en dicha tabla darán por resultado un diseño con la máxima resolución posible.

Ejemplo 1.8:

Para ilustrar el uso de la tabla 1.20, supóngase que tenemos siete factores y que nos interesa estimar los siete efectos principales y obtener algún indicio sobre las interacciones bifactoriales. Estamos dispuesto a suponer que las interacciones trifactoriales y de orden superior son despreciables. Esta información sugiere que sería apropiado un diseño con resolución IV. La tabla 1.20 indica que existen dos fracciones con resolución IV: la 2_{IV}^{7-2} con 32 corridas y la 2_{IV}^{7-3} con 16 corridas.

El diseño completo se muestra en la tabla 1.21, observe que se construyó comenzando con el diseño 2^4 de las 16 corridas en A, B, C y D como diseño básico y agregando después las tres columnas $E = ABC, F = BCD, G = ACD$.

Los generadores son: $I = ABCE, I = BCDF$ e $I = ACDG$ (tabla 1.20).

La relación definitoria completa es

$$I = ABCE = BCDF = ADEF = ACDG = BDEG = CEF G = ABFG.$$

Tabla 1.21: Diseño Factorial Fraccionario 2_{IV}^{7-3}							
Corridas	Diseño Básico				$E = ABC$	$F = BCD$	$G = ACD$
	A	B	C	D			
1	-	-	-	-	-	-	-
2	+	-	-	-	+	-	+
3	-	+	-	-	+	+	-
4	+	+	-	-	-	+	+
5	-	-	+	-	+	+	+
6	+	-	+	-	-	+	-
7	-	+	+	-	-	-	+
8	+	+	+	-	+	-	-
9	-	-	-	+	-	+	+
10	+	-	-	+	+	+	-
11	-	+	-	+	+	-	+
12	+	+	-	+	-	-	-
13	-	-	+	+	+	-	-
14	+	-	+	+	-	-	+
15	-	+	+	+	-	+	-
16	+	+	+	+	+	+	+

Proyección del Factorial Fraccionario 2^{k-p}

El diseño 2^{k-p} se proyecta en un diseño factorial completo, o en un factorial fraccionario de cualquier subconjunto de $r \leq k - p$ de los factores originales. Los subconjuntos de factores que proporcionan factoriales fraccionarios son subconjuntos que aparecen como palabras en

las relaciones completas que definen al diseño. Esto es particularmente útil en los experimentos de cribado cuando al inicio de un experimento se sospecha que la mayoría de los factores tendrá efectos pequeños. El diseño factorial fraccionario 2^{k-p} original se podrá proyectar en un factorial completo con los factores más importantes. Las conclusiones a las que se llegue usando estos diseños deben considerarse tentativas y estar sujetas a un análisis posterior. Usualmente es posible encontrar explicaciones alternas para los datos en los que intervienen interacciones de orden superior.

Para ilustrar, considérese el diseño 2^{7-3}_{IV} del ejemplo 1.8. Este es un diseño de 16 corridas que implica siete factores. Se proyectará en un factorial completo en cuatro cualquiera de los siete factores originales, lo que no constituye una palabra en la relación definitoria.

Existen 35 subconjuntos de cuatro factores, siete de los cuales aparecerán en la relación definitoria completa (Ver tabla 1.21). Así, hay 28 subconjuntos de cuatro factores que formarían diseños 2^4 . Una combinación que resulta obvia al inspeccionar la tabla 1.21 es *A, B, C* y *D*.

Para demostrar de manera adecuada la utilidad de esta proyección, supóngase que realizamos un experimento para mejorar la eficiencia de un molino de bolas, y que los siete factores son:

- Velocidad del motor.
- Ganancia.
- Modo de alimentación.
- Tamaño de la carga de alimentación.
- Tipo de material.
- Ángulo de tamizado.
- Nivel de vibración del tamiz.

Tenemos bastante certeza de que la Velocidad del motor, Modo de alimentación, Tamaño de la carga de alimentación, Tipo de material influirán en la eficiencia, y de que dichos factores pueden interactuar. El efecto de los otros tres factores es menos conocido, pero es probable que sean despreciables. Una estrategia razonable sería asignar Velocidad del motor, Modo de alimentación, Tamaño de la carga de alimentación, Tipo de material a las columnas *A, B, C* y *D*, respectivamente, de la tabla 1.21. Ganancia, Ángulo de tamizado y

Nivel de vibración de tamiz se asignaría a las columnas E, F y G respectivamente. Si estamos en lo cierto y las “Variables menores” E, F y G son realmente despreciables, quedaremos con un diseño 2^4 completo con las variables clave del proceso.

Diseños de Resolución III

Como se indicó anteriormente, es muy útil el uso de diseños factoriales fraccionarios en forma sucesiva. A menudo, esto conduce a una gran economía y eficiencia en la experimentación. A continuación, se muestran estas ideas usando la clase de diseños de resolución III.

Es posible construir diseños de resolución III para investigar hasta $K = N - 1$ factores con solo N ensayos, en donde N es múltiplo de 4. Frecuentemente, estos diseños son útiles en la experimentación industrial. Se pueden construir diseños en los que N es una potencia de 2, usando los métodos presentados con anterioridad. Estos se presentan en primer lugar. De particular importancia son los que requieren 4 ensayos para hasta 3 factores, 8 ensayos para hasta 7 factores y 16 ensayos para hasta 15 factores. Se dice que el diseño factorial fraccionario está saturado si $K = N - 1$.

Un diseño para analizar hasta tres factores en cuatro ensayos es el diseño 2_{III}^{3-1} que fue presentado anteriormente. El diseño 2_{III}^{7-4} es otro diseño factorial fraccionario saturado muy útil para estudiar siete factores en ocho ensayos. El diseño es una fracción de un dieciseisavo de un diseño 2^7 . Este puede construirse escribiendo primero los niveles positivos y negativos de un diseño 2^3 completo con los factores A, B y C, y después asociando los niveles de los otros cuatro factores con las interacciones de los tres factores originales como aparece a continuación:

$D = AB, E = AC, F = BC$ y $G = ABC$. Así, las relaciones generadoras para este diseño

son $I = ABD, I = ACE, I = BCF$ e $I = ABCG$. Este diseño se muestra en la tabla 1.22.

Tabla 1.22: Diseño 2_{III}^{7-4} con los generadores

$$I = ABD, I = ACE, I = BCF \text{ e } I = ABCG.$$

Corrida	A	B	C	$D = AB$	$E = AC$	$F = BC$	$G = ABC$	
1	-	-	-	+	+	+	-	<i>def</i>
2	+	-	-	-	-	+	+	<i>afg</i>
3	-	+	-	-	+	-	+	<i>beg</i>
4	+	+	-	+	-	-	-	<i>abd</i>
5	-	-	+	+	-	-	+	<i>cdg</i>
6	+	-	+	-	+	-	-	<i>ace</i>
7	-	+	+	-	-	+	-	<i>bcf</i>
8	+	+	+	+	+	+	+	<i>abcdefg</i>

La relación completa que define este diseño se obtiene multiplicando las cuatro generadoras ABD , ACE , BCF y $ABCG$, primero por pares, después por ternas y, finalmente, las cuatro juntas, lo que da como resultado

$$I = ABD = ACE = BCF = ABCG = BCDE = ACDF = CDG = ABEF = BEG = AFG = DEF = ADEG = CEF G = BDFG = ABCDEFG$$

Para determinar el alias de cualquier efecto, simplemente se multiplica dicho efecto por cada palabra de relación definitoria. Por ejemplo los alias de B son:

$$B = AD = ABCE = CF = ACG = CDE = ABCDF = BCDG = AEF = EG = ABFG = BDEF = ABDEG = BCEFG = DFG = ACDEFG$$

Este diseño constituye una fracción un dieciseisavo y, además, es una fracción principal porque los signos elegidos para las generadoras son positivos. También es de resolución III ya que el número mínimo de letras de cualquier palabra de la relación que lo define es tres.

Se puede construir cualquiera de los 16 diferentes diseños 2_{III}^{7-4} de esta familia usando los generadores con una de las 16 posibles combinaciones de los signos de

$$I = \pm ABD, I = \pm ACE, I = \pm BCF, I = \pm ABCG.$$

Es posible utilizar los siete grados de este diseño para estimar los siete efectos principales. Cada uno de estos efectos tiene 15 alias. Sin embargo, la estructura de los alias se simplifica considerablemente si se supone que las interacciones de tres o más factores son despreciables.

Haciendo esta suposición, cada combinación lineal asociada a los siete efectos principales de diseños realmente estima el efecto principal y tres interacciones bifactoriales:

$$l_A \rightarrow A + BD + CE + FG$$

$$l_B \rightarrow B + AD + CF + EG$$

$$l_C \rightarrow C + AE + BF + DG$$

$$l_D \rightarrow D + AB + CG + EF \quad \text{Ecuación 1.10}$$

$$l_E \rightarrow E + AC + BG + DF$$

$$l_F \rightarrow F + BC + AG + DE$$

$$l_G \rightarrow G + CD + BE + AF$$

El diseño saturado 2_{III}^{7-4} de la tabla 1.22 puede usarse para obtener diseños de resolución III, con el propósito de estudiar menos de siete factores en ocho ensayos. Por ejemplo, para generar un diseño para seis factores con ocho ensayos, simplemente se descarta cualquier columna de la tabla 1.22 digamos la columna G, esto conduce al diseño mostrado en la tabla 1.23.

Tabla 1.23: Diseño 2_{III}^{6-3} con los generadores $I = ABD, I = ACE$ e $I = BCF$

Corrida	A	B	C	$D = AB$	$E = AC$	$F = BC$	
1	-	-	-	+	+	+	<i>def</i>
2	+	-	-	-	-	+	<i>af</i>
3	-	+	-	-	+	-	<i>be</i>
4	+	+	-	+	-	-	<i>abd</i>
5	-	-	+	+	-	-	<i>cd</i>
6	+	-	+	-	+	-	<i>ace</i>
7	-	+	+	-	-	+	<i>bcf</i>
8	+	+	+	+	+	+	<i>abcdef</i>

Fácilmente se verifica que este diseño también es de resolución III. De hecho es un diseño 2_{III}^{6-3} o una fracción de un octavo del diseño 2^6 . La relación que define al diseño 2_{III}^{6-3} es la misma que la del diseño original 2_{III}^{7-4} , descartando cualquier palabra que contenga la letra G. Por lo tanto, la relación que define el nuevo diseño es

$$I = ABD = ACE = BCF = BCDE = ACDF = ABEF = DEF$$

En general, cuando se descartan d factores para producir un nuevo diseño, la nueva relación que lo define se obtiene con las palabras de la relación original que no tienen las letras que fueron descartadas. Hay que tener cuidado de obtener el mejor arreglo posible cuando se usa este método para construir diseños. Si se descartan las columnas B, D, F y G en la tabla 1.22 se obtiene un diseño para tres factores con ocho ensayos; sin embargo, las combinaciones de tratamientos corresponden a dos réplicas de un diseño 2^2 . Probablemente, el experimentador prefiera llevar a cabo un diseño 2^3 completo con los factores A, C y E .

También es posible obtener un diseño de resolución III para estudiar hasta 15 factores con 16 ensayos. Este diseño 2_{III}^{15-11} , saturado, puede generarse escribiendo primero las 16 combinaciones de tratamientos asociadas a un diseño 2^4 con los factores A, B, C y ED , para después igualar los 11 nuevos factores con las interacciones de 2, 3 y 4 factores de los 4 originales. Un enfoque similar se puede usar para el diseño 2_{III}^{31-26} que permite estudiar hasta 31 factores con 32 ensayos.

Combinación secuencial de fracciones para separar efectos.

Combinando diseños factoriales fraccionarios en los que ciertos signos se cambian, pueden aislarse efectos potencialmente importantes. La estructura de los alias de cualquier fracción en la que se cambian los signos de uno o más factores se obtienen cambiando los signos de los factores apropiados de la estructura de los alias en la fracción original.

Considere el diseño 2_{III}^{7-4} mostrado en la tabla 1.22. Suponga que además de la fracción principal, se obtiene una segunda fracción en la que los signos de la columna D se invierten. En otras palabras, los signos en la columna D de la segunda fracción son

$$- + + - - + + -$$

Los efectos que pueden estimarse con la primera fracción se presentan en la ecuación 1.10 mientras que con la segunda se obtiene

$$\ell'_A \rightarrow A - BD + CE + FG$$

$$\ell'_B \rightarrow B - AD + CF + EG$$

$$\ell'_C \rightarrow C + AE + BF - DG$$

Ecuación 1.11

$$\ell'_D \rightarrow D - AB - CG - EF$$

Es decir

$$\ell'_{-D} \rightarrow -D + AB + CG + EF$$

$$\ell'_E \rightarrow E + AC + BG - DF$$

$$\ell'_F \rightarrow F + BC + AG - DE$$

$$\ell'_G \rightarrow G - CD + BE + AF$$

Suponiendo que las interacciones de tres o más factores son insignificantes. Ahora bien, partiendo de las dos combinaciones lineales $\frac{1}{2}(\ell_i + \ell'_i)$ y $\frac{1}{2}(\ell_i - \ell'_i)$ de los efectos se obtiene

i	De $\frac{1}{2}(\ell_i + \ell'_i)$	De $\frac{1}{2}(\ell_i - \ell'_i)$
A	$A + CE + FG$	BD
B	$B + CF + EG$	AD
C	$C + AE + BF$	DG
D	D	$AB + CG + EF$
E	$E + AC + BG$	DF
F	$F + BC + AG$	DE
G	$G + BE + AF$	CD

Así se han aislado el factor D y las interacciones de dos factores en la que interviene D. En general, si a un diseño factorial fraccionario de resolución III o mayor, se le suma una fracción con los signos de un solo factor cambiados, el diseño combinado proporciona estimaciones del efecto principal de dicho factor junto con sus interacciones de dos factores.

Ahora, suponga que a cualquier diseño factorial fraccionario se le agrega una segunda fracción en la que se han cambiado los signos de todos los factores. Este procedimiento descompone el vínculo de los alias entre los efectos principales y las interacciones de dos factores. En otras palabras, puede usarse el diseño combinado para estimar todos los efectos principales libres de las interacciones de dos factores. El siguiente ejemplo ilustra la técnica.

Ejemplo 1.9:

Un investigador del desempeño humano lleva a cabo un experimento para estudiar el tiempo que tarda el ojo en enfocarse. Ha construido un aparato en el que se pueden controlar varios factores durante una prueba. Los factores que inicialmente considera importantes son agudeza visual (**A**), distancia del objeto al ojo (**B**), forma del objeto (**C**), nivel de iluminación (**D**), tamaño del objeto (**E**), densidad del objeto (**F**) y sujeto (**G**). Se consideran dos niveles de cada factor. Sospecha que solo unos cuantos de estos siete factores son importantes y que las interacciones de orden superior son despreciables. Con base a esta suposición, el experimentador decide llevar a cabo un experimento de cribado con el propósito de identificar los factores más importantes para concentrar los estudios futuros sobre estos factores. Para cribar estos siete factores obtiene las combinaciones de tratamientos del diseño 2_{III}^{7-4} de la tabla 1.22. En orden aleatorio, obteniendo el tiempo de enfocamiento en milisegundos mostrados en la tabla 1.24.

Tabla 1.24: Diseño 2_{III}^{7-4} para el experimento del tiempo de enfoque del ojo

Corrida	A	B	C	D = AB	E = AC	F = BC	G = ABC		Tiempo
1	-	-	-	+	+	+	-	<i>def</i>	85.5
2	+	-	-	-	-	+	+	<i>afg</i>	75.1
3	-	+	-	-	+	-	+	<i>beg</i>	93.2
4	+	+	-	+	-	-	-	<i>abd</i>	145.4
5	-	-	+	+	-	-	+	<i>cdg</i>	83.7
6	+	-	+	-	+	-	-	<i>ace</i>	77.6
7	-	+	+	-	-	+	-	<i>bcf</i>	95.0
8	+	+	+	+	+	+	+	<i>abcdefg</i>	141.8

Con estos datos es posible estimar siete efectos principales y sus alias. Usando la ecuación 1.10 se observa que los efectos principales y sus alias son:

$$\ell_A = 20.63 \rightarrow A + BD + CE + FG$$

$$\ell_B = 38.38 \rightarrow B + AD + CF + EG$$

$$\ell_C = -0.28 \rightarrow C + AE + BF + DG$$

$$\ell_D = 28.88 \rightarrow D + AB + CG + EF$$

$$\ell_E = -0.28 \rightarrow E + AC + BG + DF$$

$$\ell_F = -0.63 \rightarrow F + BC + AG + DE$$

$$\ell_G = -2.43 \rightarrow G + CD + BE + AF$$

Por ejemplo:

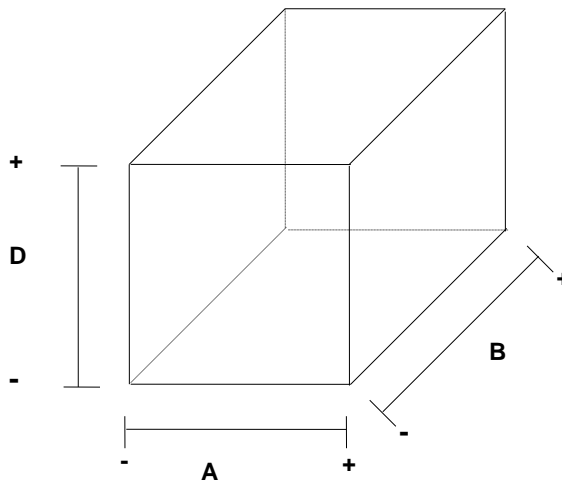
$$\ell_A = \frac{1}{4}(-85.5 + 75.1 - 93.2 + 145.4 - 83.7 + 77.6 - 95.0 + 141.8) = 20.63$$

Los tres efectos más grandes son ℓ_A, ℓ_B y ℓ_D . La interpretación más simple de los datos es que los efectos principales de A, B y D son significativos. Sin embargo, esta interpretación no es única, ya que se puede concluir lógicamente que A, B y la interacción AB , o quizá B, D y la interacción BD , o quizá A, D y la interacción AD son los efectos verdaderos.

Observe que ABD es una palabra en la relación definitoria para este diseño. Por tanto, este diseño 2_{III}^{7-4} no se proyecta en un factorial 2^3 completo en ABD ; más bien, se proyecta en dos réplicas de un diseño 2^{3-1} , como se muestra en la figura 1.28.

Dado que el diseño 2^{3-1} es de resolución III, A tendrá como alias a BD , B a AD y D a AB , de modo que las interacciones no pueden separarse de los efectos principales. Al parecer el experimentador no tuvo éxito. Si hubiera asignado el nivel de iluminación a C en vez de a D , el diseño se habría proyectado en un diseño 2^3 completo.

Figura 1.28: Diseño 2_{III}^{7-4} proyectado en dos réplicas de un diseño 2^{3-1} con A , B y D .



Para separar los efectos principales y las interacciones bifactoriales, se corre una fracción con todos los signos invertidos. Este diseño plegado se muestra en la tabla 1.25 junto con las respuestas observadas. Observe que cuando se pliega de esta manera un diseño con resolución III, realmente cambiamos el signo de los generadores con número par de letras.

Tabla 1.25: Un segundo diseño 2_{III}^{7-4} para el experimento del tiempo de enfoque del ojo

Corrida	A	B	C	$D = -AB$	$E = -AC$	$F = -BC$	$G = ABC$		Tiempo
1	+	+	+	-	-	-	+	<i>abcg</i>	91.3
2	-	+	+	+	+	-	-	<i>bcde</i>	136.7
3	+	-	+	+	-	+	-	<i>acdf</i>	82.4
4	-	-	+	-	+	+	+	<i>cefg</i>	73.4
5	+	+	-	-	+	+	-	<i>abef</i>	94.1
6	-	+	-	+	-	+	+	<i>bdfg</i>	143.8
7	+	-	-	+	+	-	+	<i>adeg</i>	87.3
8	-	-	-	-	-	-	-	(1)	71.9

Los efectos estimados por esta fracción son:

$$\ell'_A = -17.68 \rightarrow A - BD - CE - FG$$

$$\ell'_B = 37.73 \rightarrow B - AD - CF - EG$$

$$\ell'_C = -3.33 \rightarrow C - AE - BF - DG$$

$$\ell'_D = 29.88 \rightarrow D - AB - CG - EF$$

$$\ell'_E = 0.53 \rightarrow E - AC - BG - DF$$

$$\ell'_F = 1.63 \rightarrow F - BC - AG - DE$$

$$\ell'_G = 2.68 \rightarrow G - CD - BE - AF$$

Al combinar esta fracción con la original se obtienen las siguientes estimaciones de los efectos.

I	De $\frac{1}{2}(\ell_i + \ell'_i)$	De $\frac{1}{2}(\ell_i - \ell'_i)$
A	$A = 1.48$	$BD + CE + FG = 19.15$
B	$B = 38.05$	$AD + CF + EG = 0.33$
C	$C = -1.80$	$AE + BF + DG = 1.53$
D	$D = 29.38$	$AB + CG + EF = -0.50$
E	$E = 0.13$	$AC + BG + DF = -0.40$
F	$F = 0.50$	$BC + AG + DE = -1.53$
G	$G = 0.13$	$CD + BE + AF = -2.55$

Los efectos más grandes son B y D . Además el tercer efecto mayor es $BD + CE + FG$. Razonablemente, se puede atribuir esto a la interacción BD .

Diseños de Resolución IV Y V.

Un diseño 2^{k-p} es de resolución IV si los efectos principales están libres de interacciones bifactoriales y algunas de estas relaciones son alias entre si. De este modo, si se suprimen las interacciones trifactoriales y de orden superior, los efectos principales pueden estimarse directamente en un diseño 2_{IV}^{k-p} . Un ejemplo es el diseño 2_{IV}^{6-2} de la tabla 1.25. Asimismo, las dos fracciones combinadas del diseño 2_{III}^{7-4} del ejemplo 1.9 dan por resultado un diseño 2_{IV}^{7-3} .

Todo diseño 2_{IV}^{k-p} debe contener al menos $2k$ corridas. Los diseños de resolución IV que contienen exactamente esta cantidad de corridas se denominan diseños mínimos. Es posible obtener diseños de resolución IV a partir de diseños de resolución III por el proceso de plegamiento. Para plegar un diseño 2_{III}^{k-p} simplemente se suma a la fracción original una segunda fracción con todos los signos invertidos. De este modo, los signos positivos en la columna identidad I de la primera fracción pueden invertirse en la segunda fracción, y un $(k+1)$ -ésimo factor asociarse a esta columna.

El resultado es un diseño factorial fraccionario 2_{IV}^{k+1-p} . El proceso se ilustra en la tabla 1.26 para el diseño 2_{III}^{3-1} . Es fácil verificar que el diseño resultante es un 2_{IV}^{4-1} con relación definitoria $I = ABCD$.

También es posible plegar diseños de resolución IV para separar interacciones bifactoriales con relación de alias entre si. Para hacerlo, se corre una segunda fracción en la cual se invierte el signo en cada generador de diseño que tenga un número par de letras. Para ilustrar esto, consideremos el diseño 2_{IV}^{6-2} empleado para el experimento de moldeo por inyección del ejemplo 1.7. Los generadores para el diseño de la tabla 1.17 son $I = ABCE$ e $I = BCDF$. En la segunda fracción se emplearían los generadores $I = -ABCE$ e $I = -BCDF$, y el generador único para el diseño combinado sería $I = ADEF$. De este

modo, el diseño combinado sigue siendo un diseño factorial fraccionario de resolución IV. Sin embargo, las relaciones de alias serán mucho más sencillas que en el diseño fraccionario 2_{IV}^{6-2} original. En efecto, las únicas interacciones bifactoriales con relación de alias son $AD = EF$, $AE = DF$ y $AF = DE$. Todas las demás interacciones bifactoriales pueden estimarse con el diseño combinado.

Como otro ejemplo, considérese el diseño 2_{IV}^{8-3} con 32 corridas. En la tabla 1.19 se indica que el mejor conjunto de generadores para este diseño es $I = ABCF$, $I = ABDG$ e $I = BCDEH$. Si plegamos este diseño, la segunda fracción tendrá los generadores $I = -ABCF$, $I = -ABDG$ e $I = BCDEH$. El diseño combinado tiene los generadores $I = CDFG$ e $I = BCDEH$, y la relación definitoria completa es $I = CDFG = BCDEH = BEFGH$

Tabla 1.26: Diseño 2_{III}^{4-1} obtenido por plegamiento

D			
1	A	B	C
2_{III}^{3-1} original I = ABC			
+	-	-	+
+	+	-	-
+	-	+	-
+	+	+	+
Segundo 2_{III}^{3-1} con los signos invertidos			
-	+	+	-
-	-	+	+
-	+	-	+
-	-	-	-

El diseño combinado es de resolución IV, pero las únicas interacciones bifactoriales que siguen teniendo relación de alias son $CD = FG$, $CF = DG$ y $CG = DF$. Esta es una considerable simplificación de las relaciones de alias en la fracción original. Observe que cuando se parte de un diseño con resolución III, el plegamiento asegura que el diseño combinado será de resolución IV, y por tanto asegura que todos los efectos principales puedan separarse de sus alias de interacción bifactorial. Cuando se pliega un diseño de resolución IV, no necesariamente se separan todas las interacciones bifactoriales. De hecho, si la fracción original tiene estructura de alias con más de dos interacciones bifactoriales en cualquier cadena de alias, el plegamiento no separará por completo todas las interacciones de dos factores. Ambos ejemplos anteriores, el de 2_{IV}^{5-2} y el de 2_{IV}^{8-3} , tienen al menos una de tales cadenas de alias de interacciones bifactoriales.

Los diseños de resolución V son factoriales fraccionarios en los cuales los efectos principales y las interacciones bifactoriales no tienen como alias otros efectos principales e interacciones de dos factores. Estos son diseños muy poderosos, que permiten estimar de manera única todos los efectos principales e interacciones bifactoriales siempre que todas las interacciones trifactoriales y de orden superior sean despreciables. La palabra más pequeña en la relación definitoria de tal diseño debe tener cinco letras. El diseño 2^{5-1} con la relación generadora $I = ABCDE$ es de resolución V.

1.2.3. Diseños simplex

Diseños ortogonales de primer orden: El Diseño Simplex.

La mayoría de aplicaciones de los diseños Ortogonales para modelos de primer orden deberían sugerir el uso de los diseños de dos niveles (Bajo y Alto).

Es importante estar conciente que la clase de los diseños ortogonales de primer orden están saturados³. Esta clase es llamada la clase de diseño Simplex. Debe quedar claro que estos

³ Saturados: Los diseños son saturados sino se dispone de la información de todos los estudios de las interacciones.

diseños son saturados por un modelo de primer orden, lo que implica que no dispone de información de todos los estudios de las interacciones.

La principal característica de los diseños Simplex es que requieren $N = K + 1$ observaciones para corresponder a un modelo de primer orden en K variables. Geométricamente, el diseño de puntos representa los vértices de una figura que tiene lados regulares. Que es, el diseño de puntos, dadas por las filas del diseño de la matriz \mathbf{D} , son puntos en k dimensiones tales que el ángulo que dos puntos cualesquiera hacen con el origen es θ , donde:

$$\text{Cos } \theta = -\frac{1}{N-1} = -\frac{1}{k}$$

$$\mathbf{D} = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & \cdots & x_k \\ \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{1N} & x_{2N} & \cdots & x_{kN} \end{bmatrix} & & & & \end{matrix} \quad \text{Matriz 1.1}$$

Para demostrar que $\text{Cos } \theta = -\frac{1}{k}$, partiremos de casos particulares.

Dada una matriz ortogonal:

$$D = \begin{matrix} & x_1 & x_2 \\ \begin{bmatrix} \sqrt{3/2} & -1/\sqrt{2} \\ -\sqrt{3/2} & -1/\sqrt{2} \\ 0 & 2/\sqrt{2} \end{bmatrix} & & \end{matrix} \quad \text{Matriz 1.2}$$

Sabemos que u, v son cualquier par de filas, para este caso ($k = 2$) sean:

$$v = \left(-\sqrt{\frac{3}{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \text{ y } u = \left(\sqrt{\frac{3}{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right)$$

Recordando, la norma de un vector v cuya notación es: $\|v\|$ representa la raíz cuadrada de la sumatoria de los cuadrados de cada uno de los elementos del vector, es decir,

$$\|v\| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_k^2}$$

Tenemos que:
$$\cos \theta = \frac{\|v\|^2 + \|u\|^2 - \|v-u\|^2}{2\|u\|\|v\|}$$

Sustituyendo:

$$= \frac{\left(\sqrt{\frac{3}{2} + \frac{1}{2}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{3}{2} + \frac{1}{2}}\right)^2 - \left(\sqrt{4\left(\frac{3}{2}\right) + 0}\right)^2}{2\sqrt{2}\sqrt{2}}$$

$$= \frac{2 + 2 - 6}{4} = -\frac{1}{2} \quad \text{Esto implica que: } \cos \theta = -\frac{1}{2} \text{ para } k=2$$

Una Matriz ortogonal para $k=3$ puede ser:

$$D = \begin{matrix} & \begin{matrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} & \text{Matriz 1.3} \end{matrix}$$

Ahora u y v pueden ser:

$$v = (-1, 1, -1) \text{ y } u = (1, -1, -1) \text{ donde } \cos \theta = \frac{\|v\|^2 + \|u\|^2 - \|v-u\|^2}{2\|u\|\|v\|}$$

$$= \frac{(\sqrt{3})^2 + (\sqrt{3})^2 - (\sqrt{4+4})^2}{2\sqrt{3}\sqrt{3}} = \frac{3+3-8}{2} = -\frac{1}{3}$$

Esto implica que: $\cos \theta = -\frac{1}{3}$ para $k=3$

Generalización para cualquier k , por definición tenemos que v y u pueden ser cualquier fila de la matriz 1:

Como $\text{Cos } \theta = \frac{\|v\|^2 + \|u\|^2 - \|v-u\|^2}{2\|u\|\|v\|}$ y las normas de cada vector es igual a su dimensión,

entonces:

$$\text{Cos } \theta = \frac{k+k-\|v-u\|^2}{2k} = \frac{k+k-2(k+1)}{2k} = \frac{2k-2k-2}{2k} = \frac{-2}{2k} = -\frac{1}{k}$$

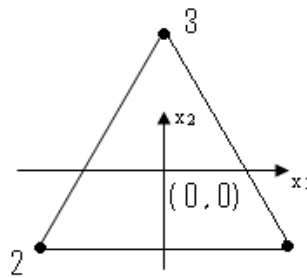
Para $K = 2, N = 3, \text{Cos } \theta = -\frac{1}{2}$

Despejando $\theta = \text{Cos}^{-1}\left(-\frac{1}{2}\right)$

Y así $\theta = 120^\circ$, los puntos (filas) son coordenadas de un triángulo equilátero. Para $K = 3$ y $N = 4$, el diseño de puntos son los vértices de un tetraedro. La figura 1.29 revela que el diseño para $K = 2$ contiene puntos en los vértices de un triángulo equilátero. Las tres filas en el diseño de la matriz corresponden a los puntos 1, 2, y 3, respectivamente. La matriz X es el diseño de la matriz aumentada por una columna de unos. Así, la matriz aumentada de la matriz 1.2 es:

$$X = \begin{matrix} & x_1 & x_2 \\ \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3}/2 & -1/\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{3}/2 & -1/\sqrt{2} \\ 1 & 0 & 2/\sqrt{2} \end{bmatrix} & \text{Matriz 1.4; con Transpuesta } X' = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \sqrt{3}/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 2/\sqrt{2} \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Figura 1.29: Diseño de puntos para el Simplex en dos variables



Como resultado, uno puede fácilmente observar la ortogonalidad

$$X'X = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

Para $K = 3$ el diseño consiste en el uso de $N = 4$ puntos y dos puntos cualesquiera hacen un ángulo θ con el origen, donde el $\text{Cos } \theta = -\frac{1}{3}$. El diseño apropiado esta dado por:

$$D = \begin{array}{c} x_1 \quad x_2 \quad x_3 \\ \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{array} \quad \text{Ecuación 1.12}$$

Si usamos $X = [1/D]$, es claro que:

$$X'X = 4I_4$$

Y por lo tanto, el diseño es ortogonal por corresponder al modelo de primer orden. La figura 1.30 muestra las coordenadas exhibidas en tres dimensiones. Note que dos puntos cualesquiera forman el mismo ángulo con el origen $(0, 0, 0)$. Note también que en el caso especial, el simplex es una fracción un medio de un 2^3 . El mismo que hemos elegido exhibir es la fracción de resolución III con $I = ABC$ como la relación definida. Ciertamente, la fracción formada de $I = -ABC$ también es un diseño simplex.

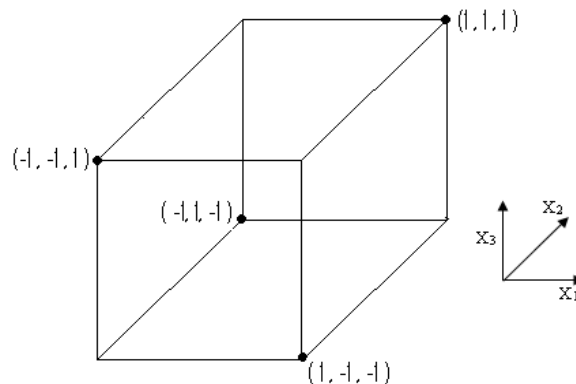


Figura 1.30: Diseño simplex en tres variables

Rotación y construcción del Diseño Simplex.

Para un valor específico de k hay numerosos diseños simplex que pueden ser construidos. De hecho, si uno gira las filas del diseño de la matriz a través de un ángulo ϕ , el resultado del diseño es todavía un simplex, y todavía posee la propiedad de ser ortogonal de primer orden. Por ejemplo, un cambio en la orientación del triángulo equilátero del diseño en la matriz 1.2 resultará en un segundo simplex. Para $K = 3$, una alternativa para el diseño mostrado en la ecuación (1.12) está dado por:

$$D = \begin{matrix} & \begin{matrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & -1 \\ -\sqrt{2} & 0 & 1 \\ 0 & -\sqrt{2} & -1 \\ \sqrt{2} & 0 & 1 \end{bmatrix} & \end{matrix} \quad \text{Ecuación 1.13}$$

Es fácil ver que el diseño es también ortogonal de primer orden, aunque de un punto de vista pragmático el diseño en la ecuación (1.12) es preferible.

La construcción de la matriz \mathbf{X} para las k dimensiones del simplex es muy sencilla. Simplemente iniciamos con una matriz ortogonal \mathbf{O} de orden $N \times N$ con los elementos de la primer columna iguales. La matriz \mathbf{X} es entonces

$$\mathbf{X} = \mathbf{O} * N^{1/2}$$

Así, es fácil ver que $\mathbf{X}'\mathbf{X} = N (\mathbf{O}'\mathbf{O}) = N\mathbf{I}_N$. Por ejemplo, el simplex para $K = 2$ en la matriz 1.4 puede ser construida de la matriz ortogonal

$$\mathbf{O} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 0 & 2/\sqrt{6} \end{bmatrix}$$

$$X = O \times \sqrt{3} = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3/2} & -1/\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{3/2} & -1/\sqrt{2} \\ 1 & 0 & 2/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

La cual es la matriz **X** o matriz 1.4.

La matriz **X** dada en el diseño de la ecuación (1.12) puede ser construida de la matriz ortogonal simple

$$O = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}$

Se debe tener en mente que el diseño simplex es saturado de primer orden, lo cual implica que la información no esta disponible por falta de ajuste. Si el analista espera interacción del sistema o curvatura cuadrática pura en absoluto, el simplex no es un diseño apropiado.

Ejemplo 1.10:

Un diseño simplex es usado en un experimento de laboratorio diseñado para construir un modelo de primer orden que relaciona al crecimiento (y) de un organismo particular con el % de glucosa (x_1), el % de extracto de levadura (x_2), y el tiempo en horas (x_3) permitido para el crecimiento del organismo. Los datos se muestran en la siguiente tabla:

Número de corridas	Glucosa x_1 (%)		Levadura x_2 (%)		Tiempo x_3 (hrs)		Crecimiento ($g/litros$)
	No codificadas	Codificadas	No codificadas	Codificadas	No codificadas	Codificadas	
1	3.0	0	0.641	$\sqrt{2}$	30	-1	8.52
2	1.586	$-\sqrt{2}$	0.500	0	60	1	9.76
3	3.0	0	0.359	$-\sqrt{2}$	30	-1	7.38
4	4.414	$\sqrt{2}$	0.500	0	60	1	12.50

Donde claramente observamos que el simplex a utilizar es la matriz de la ecuación 1.13.

Las fórmulas para estandarizar las variables son:

$$x_1 = \frac{glu \cos a - 30\%}{1.0}$$

$$x_2 = \frac{levadura - 0.5\%}{0.10}$$

$$x_3 = \frac{tiempo - 45hr}{15}$$

Donde el valor de cada numerador (30%,0.5% y 45hr) son el promedio de las x no codificadas, y el valor de cada denominador (1.0,0.10 y 15) son el promedio del producto entre x codificada y las x no codificada respectivamente.

Utilizando dichas fórmula obtenemos que:

x_1	x_2	x_3	y
2.7	5.91	-1	8.52
1.286	4.5	1	9.76
2.7	3.09	-1	7.38
4.114	4.5	1	12.50

Utilizando un análisis de regresión lineal con los nuevos datos obtenemos nuestro modelo:

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

Donde β_0 es el promedio de las y , los coeficientes obtenidos con el SPSS son:

Modelo	Coeficientes		t	Sig.
	B	Std. Error		
1			.	.
B1	.969	.000	.	.
B2	.404	.000	.	.
B3	1.590	.000	.	.

Por lo que el modelo obtenido por medio del simplex será:

$$\hat{y} = 9.54 + 0.97x_1 + 0.40x_2 + 1.59x_3$$

Varianza de Predicción

Se sabe que el diseño ortogonal de primer orden de dos niveles con los niveles en los extremos de ± 1 da como resultado varianzas de coeficientes que se minimizan. Esto provee la inspiración para el término “varianza óptima” que usamos constantemente cuando discutimos ejemplos y aplicamos el concepto a modelos que envuelven términos con interacción. Los criterios consisten en varianzas de coeficientes que son ciertamente importantes. El concepto de la predicción de varianza es un aspecto importante del estudio de los diseños de experimentos. Es importante para el lector familiarizarse con este tipo de escenario, el modelo de primer orden.

Varianza de Predicción para el Modelo de primer orden

Recuerde que la varianza de predicción, o la varianza de un valor predicho, está dado por:

$$Var\left[\hat{y}(x)\right] = x^{(m)'}(X'X)^{-1}x^{(m)}.\sigma^2$$

Donde $x^{(m)}$ es una función de la posición en el diseño de las variables en la cual predice y también es una función del modelo, es decir, la m en $x^{(m)}$ refleja el modelo. En el caso de un modelo estricto de primer orden, obtenemos:

$$x^{(1)'} = [1, x_1, x_2, \dots, x_k]$$

Para $k=2$ el modelo contiene x_1, x_2 y sus interacciones, obtenemos:

$$x^{(1)'} = [1, x_1, x_2, x_1x_2]$$

Uno puede fácilmente ver que $Var\left[\hat{y}(x)\right]$ varía de posición a posición en el espacio del diseño. Además, la presencia de $(X'X)^{-1}$ atestigua al hecho que el criterio es una función muy importante del diseño de experimento. El lector debe observar la varianza de predicción como una reflexión de que tan bien es la predicción del modelo.

En estudios que se hacen para comparar diseños, a menudo es conveniente modificar a escala la varianza de predicción, es decir, trabajar con:

$$\frac{NVar\left[\hat{y}(x)\right]}{\sigma^2} = Nx^{(m)'}(X'X)^{-1}x^{(m)} \quad \text{Ecuación 1.14}$$

La división de σ^2 hace la cantidad de escala libre, y la multiplicación por N permite la cantidad para reflejar la varianza por sobre una base de observación. Esto es, si dos diseños son comparados la ampliación de N castiga automáticamente al diseño con el mayor tamaño de muestras.

La escala de la varianza de predicción en la ecuación 1.14 es muy simple para el caso de la varianza óptima en un diseño ortogonal de primer orden. De hecho, porque $(X'X)^{-1} = \left(\frac{1}{N}\right)I_p$, tenemos:

$$\frac{NVar\left[\hat{y}(x)\right]}{\sigma^2} = [1, x_1, x_2, x_1x_2] \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix} = 1 + \sum_{i=1}^k x_i^2 = 1 + \rho_x^2 \quad \text{Ecuación 1.15}$$

Donde ρ_x es la distancia del punto $x' = [x_1, x_2, \dots, x_k]$ al origen del diseño. Como resultado, $NVar\left[\hat{y}(x)\right] = 1$ en el centro del diseño y se vuelve mayor como uno se mueva hacia el perímetro del diseño. Como una ilustración, para un factorial 2^3 los siguientes son valores de $NVar\left[\hat{y}(x)\right]/\sigma^2$ en diferentes posiciones donde se tenga el deseo de predecir:

Localización	$NVar\left[\hat{y}(x)\right]/\sigma^2$
0,0,0	1
$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$1\frac{3}{4}$
$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$	$2\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}, 1, 1$	$3\frac{1}{4}$
1,1,1	4

Así, los incrementos de la escala de la predicción de variancia aumentan cuatro veces según se mueva del centro del diseño al perímetro del diseño. Es decir, un factorial 2^5 en el perímetro [es decir, $(\pm 1, \pm 1, \pm 1, \pm 1, \pm 1)$], $NVar\left[\hat{y}(x)\right]/\sigma^2 = 6$ y por lo tanto la variancia incrementa 6 veces. En el caso que el diseño sea inferior (es decir, no es variancia óptima, o incluso ortogonal), esta inestabilidad de la predicción de variancia es aun más pronunciada. Por ejemplo, considere una fracción un medio (Resolución III) de un factorial 2^3 con cuatro corridas de centro como una alternativa de un 2^3 . Sabemos que este diseño es ortogonal pero no es de variancia óptima. Tenemos:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad X'X = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ & 4 & 0 & 0 \\ & & 4 & 0 \\ & & & 4 \end{bmatrix}$$

Con la matriz de variancia y covarianza (sin σ^2) es:

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}$$

Como resultado

$$\begin{aligned} \frac{NVar\left[\hat{y}(x)\right]}{\sigma^2} &= 8 \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \\ &= 1 + 2(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \\ &= 1 + 2\rho_x^2 \end{aligned}$$

1.2.4. Diseño Central Compuesto

Cuando el experimentador necesita utilizar 3 niveles (-1, 0, 1) de cada factor, los diseños de primer orden vistos anteriormente podrían no ser útiles, por lo que se debe aplicar otro tipo de diseño, estos son conocidos como diseños de segundo orden.

El diseño central compuesto (CCD), es sin duda la clase más popular de los diseños de segundo orden. Los modelos ahora ajustados serán de la forma:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j=2}^k \sum_{j=2}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon$$

Esto implica el uso de un factorial de dos niveles o fracción (resolución V) combinado con los siguientes 2k puntos axiales o de estrella.

x_1	x_2	\dots	x_k
$-\alpha$	0	\dots	0
α	0	\dots	0
0	$-\alpha$	\dots	0
0	α	\dots	0
\vdots	\vdots		\vdots
0	0	\dots	$-\alpha$
0	0	\dots	α

El diseño consiste en, F puntos factoriales, 2k puntos axiales, y n_c corridas de centros. La secuencia natural de los diseños se vuelve muy obvia. Los puntos factoriales representan un diseño de variancia óptima para un modelo de primer orden o un modelo de interacción de dos factores y de primer orden. Las corridas de centro claramente proveen información sobre la existencia de la curvatura en el sistema. Si la curvatura es encontrada en el sistema, la adición de puntos axiales permite la estimación eficiente de los términos cuadráticos puros. Mientras el inicio de estos diseños es derivado de la experimentación secuencial, el CCD es un diseño muy eficiente en situaciones que llamamos un experimento poco secuencial en el experimento de superficie de respuesta. De hecho, los tres componentes del diseño juegan papeles importantes y un poco diferentes.

1. La fracción de resolución V contribuye en una mejor manera en la estimación de términos lineales y en interacciones de dos factores. Esto es la varianza óptima para estos términos. Los puntos del factorial son los únicos puntos que contribuyen a la estimación de la interacción de términos.
2. Los puntos axiales contribuyen en gran manera a la estimación de los términos cuadráticos. Sin los puntos axiales, solo la suma de los términos cuadráticos $\sum_{i=1}^k \beta_{ii}$, pueden ser estimados. Los puntos axiales no contribuyen a la estimación de la interacción de términos.
3. Las corridas del centro proveen una estimación interna del error (error puro) y contribuyen hacia la estimación de términos cuadráticos.

Las áreas de flexibilidad en el uso del diseño central compuesto reside en la selección de α , la distancia axial, y n_c , el número de corridas centrales. La elección de estos dos parámetros puede ser muy importante. La elección de α depende en gran medida en la región de operabilidad y la región de interés.

La elección de n_c a menudo tiene una influencia en la distribución de $N \text{Var} [\hat{y}(x)]/\sigma^2$ en la región de interés. La figura 1.31 muestra el diseño CCD para $K = 2$, el valor de α , la distancia axial es $\sqrt{2}$. Para $K = 2$ el diseño representa ocho puntos igualmente espaciados en un círculo, más las corridas del centro.

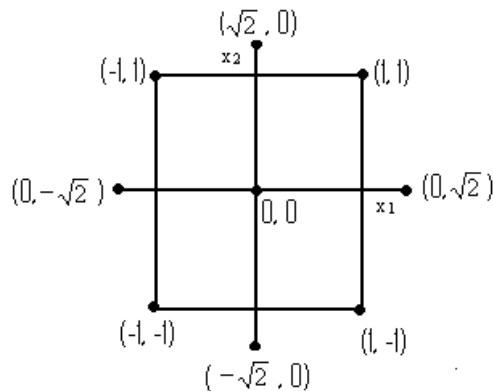


Figura 1.31: Diseño Central Compuesto para $k = 2$ y $\alpha = \sqrt{2}$

La figura 1.32 muestra el diseño CCD para $K = 3$, el valor de α , la distancia axial es $\sqrt{3}$. Para $K = 3$ el diseño representa 14 puntos todos en una esfera común, más las corridas del centro.

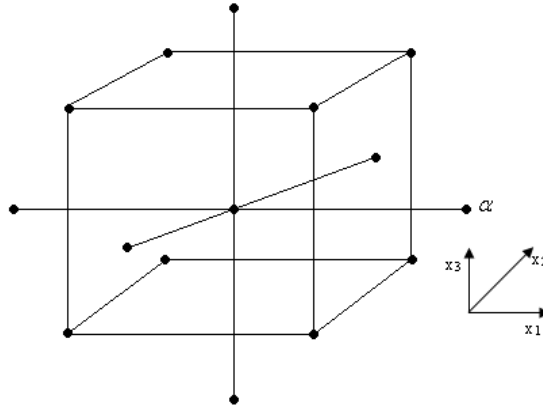


Figura 1.32 Diseño Central Compuesto para $k = 3$ y $\alpha = \sqrt{3}$

El valor de la distancia axial generalmente varía de 1.0 a \sqrt{k} , los puntos axiales forman la cara del cubo o hipercubo, el último resultado coloca todos los puntos en una esfera común. Hay por cuando dos o más corridas en el centro las cuales son necesarias y por cuando una o dos son suficientes. Discutiremos la elección de α y n_c después de un ejemplo numérico del uso de un CCD.

Ejemplo 1.11: Un experimento de envoltura de pan.

Un experimento referente a la fuerza de la envoltura del pan en gramos por pulgada cuadrada para sellar la temperatura (x_1), temperatura de barra de refrigeración (x_2) y el porcentaje aditivo de polietileno (x_3).

Los datos o variables no codificadas ordenados de menor a mayor son:

x_1	204.5	225	255	285	305.5
x_2	39.9	46	55	64	70.1
x_3	0.09	0.5	1.1	1.7	2.11

La definición de los niveles del diseño es:

$$x_1 = \frac{temp - 255^\circ F}{30}$$

$$x_2 = \frac{temp - 55^\circ F}{9}$$

$$x_3 = \frac{polietileno - 1.1\%}{0.6}$$

Donde el valor a restar en el numerador es el dato central de cada variable y el valor del denominador es la distancia que hay del nivel bajo y del nivel alto al valor central en cada variable

Los cinco niveles de los factores involucrados en este diseño (valores codificados y naturales de los niveles) se muestran a continuación:

	-1.682	-1	0	1	1.682
x_1	204.5	225	255	285	305.5
x_2	39.9	46	55	64	70.1
x_3	0.09	0.5	1.1	1.7	2.11

El diseño de la matriz D y el vector Y de respuesta es:

$$D = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 \\ \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ -1.682 & 0 & 0 \\ 1.682 & 0 & 0 \\ 0 & -1.682 & 0 \\ 0 & 1.682 & 0 \\ 0 & 0 & -1.682 \\ 0 & 0 & 1.682 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & & & \end{matrix} \quad y = \begin{bmatrix} 6.6 \\ 6.9 \\ 7.9 \\ 6.1 \\ 9.2 \\ 6.8 \\ 10.4 \\ 7.3 \\ 9.8 \\ 5.0 \\ 6.9 \\ 6.3 \\ 4.0 \\ 8.6 \\ 10.1 \\ 9.9 \\ 12.2 \\ 9.7 \\ 9.7 \\ 9.6 \end{bmatrix}$$

Tomemos en cuenta que si $K=3$ el CCD usa $\alpha = 1.682$ y tiene $n_c = 6$ corridas de centro antes de completar el análisis de MSR de los datos, puede ser instructivo examinar las matrices X y $X'X$, y así tener una visión más clara de las propiedades del diseño central compuesto.

$$X'X = \begin{bmatrix} 20 & 0 & 0 & 0 & 13.658 & 13.658 & 13.658 & 0 & 0 & 0 \\ & 13.658 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 13.658 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 13.658 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 24 & 8 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & 24 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & 24 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & 8 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & 8 & 0 \\ & & & & & & & & & 8 \end{bmatrix}$$

Ecuación 1.17

Notamos muchos ceros en $X'X$. Las columnas lineales son ortogonales una con otra y todas las demás columnas. Lo mismo sucede con la interacción de las demás columnas.

Las columnas cuadráticas, por supuesto, no son ortogonales una con otra y no son ortogonales para la columna inicial (Aunque la ortogonalidad entre la columna x_i^2 y la columna de unos puede existir si las columnas x_i^2 están centradas).

Aplicando Regresión Lineal en el Software Estadístico SPSS obtenemos las siguientes estimaciones de los parámetros:

Coefficientes

Model		Coeficientes no estandarizados		Coeficientes estandarizados	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	B0	10.165	.444		22.878	.000
	B1	-1.104	.295	-.450	-3.744	.004
	B2	.087	.295	.036	.296	.773
	B3	1.020	.295	.416	3.462	.006
	B11	-.760	.287	-.321	-2.647	.024
	B22	-1.042	.287	-.440	-3.632	.005
	B33	-1.149	.287	-.485	-4.002	.003
	B12	-.350	.385	-.109	-.909	.385
	B13	-.500	.385	-.156	-1.298	.223
	B23	.150	.385	.047	.389	.705

La función de respuesta de segundo orden es:

$$\hat{y} = 10.165 - 1.1036x_1 + 0.087x_2 + 1.020x_3 - 0.760x_1^2 - 1.042x_2^2 - 1.149x_3^2 - 0.350x_1x_2 - 0.500x_1x_3 + 0.150x_2x_3$$

Propiedad de rotabilidad.

Es importante para un diseño de segundo orden poseer una distribución razonablemente estable de la escala de la varianza de predicción $N \text{ Var} [\hat{y}(x)]/\sigma^2$ en toda la región experimental del diseño. Debe quedar claro que el experimentador no conoce al principio en que espacio del diseño quiere predecir, o en que espacio del diseño los óptimos son falsos. Así, una escala razonablemente estable de varianza de predicción $N \text{ Var} [\hat{y}(x)]/\sigma^2$ provee seguramente calidad de $\hat{y}(x)$ como una predicción de valores futuros de respuesta es lo mismo en todo lo largo de la región de interés. Con este fin Box y Hunter (1957) desarrollaron la noción de rotabilidad del diseño.

Un diseño rotable es aquel para el cual $N \text{ Var} [\hat{y}(x)]/\sigma^2$ tiene el mismo valor en dos posiciones distintas que tienen la misma distancia del centro del diseño.

El propósito de la idea de rotabilidad del diseño fue, en parte, para imponer un tipo de estabilidad en $N \text{ Var} [\hat{y}(x)]/\sigma^2$. La justificación razonada de rotabilidad es que dos posiciones en el espacio del diseño \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 para lo cual las distancias del origen son las mismas, es decir, $(x_1 \dot{x}_1)^{1/2} = (x_2 \dot{x}_2)^{1/2}$ los valores previstos $\hat{y}(\mathbf{x}_1)$ y $\hat{y}(\mathbf{x}_2)$ deberían ser igualmente buenos, esto es, tener igual varianza. Mientras la misma rotabilidad no asegura estabilidad o aún estabilidad cercana en lo largo de la región del diseño, en muchos casos esto provee ciertas guías útiles para la elección del diseño de parámetros, por ejemplo, la elección de α y n_c en el CCD. La importancia de la rotabilidad como una propiedad del diseño depende en muchas cosas de la naturaleza de la región de interés y la región de operabilidad. Es importante notar que la rotabilidad o la rotabilidad cercana es a menudo más fácil de lograr sin el sacrificio de otras propiedades importantes del diseño.

El concepto de momentos del diseño.

Muchas propiedades del diseño de experimentos son cuantificadas a través de la elección de los valores de los momentos del diseño. El concepto es bastante análogo a los momentos de las distribuciones de los que tratamos en teoría de la probabilidad. Dado el diseño de la matriz

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{1N} & x_{2N} & \cdots & x_{kN} \end{bmatrix}$$

Los momentos relevantes del diseño son

$$[i] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}, \quad [ii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2, \quad [ij] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju},$$

$$[iii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^3, \quad [iijj] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2, \quad [iiii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^4 \quad \text{etc.}$$

Estos momentos caracterizan la forma en la cual los puntos del diseño son distribuidos en k-dimensiones en el espacio del diseño.

Note que los momentos del diseño vienen de $N^{-1}(X'X)$, a la que llamamos diseño de la matriz de los momentos; y de las ecuaciones (16) y (17) es aparente que para el CCD, todo los momentos impares a través de orden cuatro son ceros. Es decir $[i]$, $[ij]$, $[iij]$, $[iii]$, $[ijk]$, $[ijjj]$, y $[iijk]$ son cero (para todo $i \neq j \neq k$). Cero momentos impares sugiere simetría en el diseño, el cual es bastante aparente cuando uno observa el diseño de la matriz en las figuras 1.31 y 1.32. De hecho, los únicos momentos no ceros para $k = 3$ CCD son $[ii]$, $[iijj]$, y $[iiii]$, para todo $i \neq j$.

La idea de los momentos del diseño amablemente puede simplificar la propiedad importante de ortogonalidad para los diseños de primer orden. Sabemos que el diseño de primer orden se dice que es ortogonal si $(X'X)$ es una matriz diagonal, esto es, si

$$N^{-1}(X'X) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & [11] & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & [22] & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & & & [kk] \end{bmatrix}$$

En el caso del modelo de segundo orden, los momentos que afectan la rotabilidad (o cualquier propiedad de varianza) son los momentos a través del orden 4. Las condiciones necesarias y suficientes para la rotabilidad son las siguientes:

1. Todos los momentos impares a través del orden 4 son cero.
2. La proporción de momentos $[iii] / [ijj] = 3$, $(i \neq j)$ Ecuación 1.18

Las condiciones no son simples, pero relativamente fácil de lograr, particularmente con un CCD.

Rotabilidad y el diseño CCD.

En el caso del CCD, la rotabilidad es lograda haciendo una elección correcta de α , la distancia axial. La condición 1 se cumplirá siempre y cuando la porción del factorial sea un 2^k completo o una fracción con resolución V o más alta. El balance entre +1 y -1 en las columnas del factorial y la ortogonalidad entre ciertas columnas en la matriz \mathbf{X} para el CCD resultará en todos los momentos impares siendo cero. Utilizando la condición 2, uno simplemente busca α para lo cual sabemos que:

$$\frac{[iii]}{[ijj]} = \frac{x_i^2 x_i^2}{x_i^2 x_j^2}, \text{ Donde utilizando la matriz o ecuación 16 obtenemos que:}$$

Tabla 1.27: Valores de α para un Diseño Central Compuesto Rotable.

<i>K</i>	<i>F</i>	<i>N</i>	α
2	4	8+n _c	1.414
3	8	14+ n _c	1.682
4	16	24+ n _c	2.000
5	32	42+ n _c	2.378
5(1/2 rep)	16	26+ n _c	2.000
6	64	76+ n _c	2.828
6(1/2 rep)	32	44+ n _c	2.378
7	128	142+ n _c	3.364
7(1/2 rep)	64	78+ n _c	2.828

Note que para $k = 2$ y $k = 4$ el CCD rotatable contiene 8 y 24 puntos (con la excepción de las corridas de centro), respectivamente, estas son equidistantes del centro del diseño. Para $k = 3$, el valor de $\alpha = 1.682$ correspondiente a el CCD usado en el ejemplo 1.11 de la envoltura de pan. Para $k = 2, 3$, y 4 el CCD rotatable es casi exactamente un diseño esférico; es decir, todos los puntos (con la excepción de las corridas de centro) están exactamente (o aproximadamente para $k = 3$) a una distancia \sqrt{k} del centro del diseño.

CAPÍTULO 2: Metodología de Superficie de Respuesta (MSR).

2.1 Introducción

En el capítulo I dedicamos el estudio a la construcción y aplicación de diseños de experimentos con vista hacia la construcción de modelos. Los diseños discutidos son muy eficientes para el desarrollo de ecuaciones empíricas que asocian factores controlables con una respuesta de interés. Las ecuaciones de regresión empíricas sirven para proporcionar información acerca de las propiedades del sistema donde los datos son tomados. Los signos y magnitudes de los coeficientes, la presencia o ausencia de interacción en el sistema son piezas importantes de información para el usuario.

Existen muchas situaciones en las cuales un modelo de regresión es usado para optimizar el proceso o mejorarlo. Un análisis estadístico es relacionado con un análisis técnico y matemático con el propósito de optimizar la respuesta. En este capítulo trataremos con optimización de procesos para una variedad de situaciones posibles. Asumiendo que se está experimentando con un sistema; (Posiblemente un sistema nuevo) aunque la meta no es encontrar un punto óptimo de respuesta, pero se busca una nueva región en que el proceso o producto es mejorado. Posiblemente la región con la que se esta trabajando para el diseño de experimento esta basada en la experiencia, o en experimentaciones previas con una escala diferente de elaboración. Debe estar claro, que el mejoramiento del experimento puede ser encontrado, por ejemplo, en un proceso químico uno quiere encontrar una nueva región donde se obtenga la mejora del rendimiento del proceso.

La técnica de optimización a utilizar depende del tipo de modelo ajustado y existen básicamente tres métodos, que son:

1. Escalamiento ascendente (o descendente).
2. Análisis Canónico.
3. Análisis de Cordillera.

El método escalamiento ascendente es utilizado para modelos de primer orden y los otros dos métodos son para modelos de segundo orden.

También, en este tipo de problemas es frecuente utilizar, gráficas de contorno o mapas de contorno que proveen una de las formas más reveladoras de ilustrar e interpretar los sistemas de superficie de respuesta. Los mapas de contorno son exclusivamente gráficas de dos dimensiones (o a veces de tres dimensiones) que muestran contornos de la respuesta constante con el sistema del eje siendo un par específico del diseño de variables, es decir, x_i y x_j , mientras las otras variables del diseño se mantienen constantes. En casi todas las prácticas de situaciones de superficie de respuesta, el analista debe guiarse con un mapa de contorno. Los mapas son particularmente necesarios cuando el punto estacionario no es de significado práctico (un punto de silla, o decir un punto máximo cuando se busca un punto de respuesta mínima) o cuando el punto estacionario es remoto de la región del diseño. Claramente, los sistemas de cadena solo pueden ser interpretados cuando se observa un sistema de dos dimensiones como un conjunto de tomas de la región del diseño. Por supuesto, si hay un número excesivo de variables en el diseño, los mapas de contornos son más difíciles, por lo que muchos factores necesitan ser mantenidos constantes.

El investigador debe tener en mente que los contornos son solo estimaciones, y si el conjunto de datos repetidos fueron observados usando el mismo diseño, la textura del sistema de respuesta puede cambiar levemente o drásticamente. En otras palabras, los contornos no son generados por ecuaciones determinísticas. Cada punto en un contorno tiene un error estándar.

2.2 Método de Escalamiento ascendente (o descendente).

Los diseños de experimentos, la construcción de modelos y la experimentación secuencial son usados para buscar una región de mejoramiento de la respuesta y constituyen el método de paso ascendente. Se debe tener en mente que la estrategia es moverse secuencialmente de una región de factores a otra, que produzca mejores resultados. Como resultado de la operación total uno puede utilizar más de un experimento. Sin embargo, la economía en el

diseño y un modelo sencillo será lo importante. Comenzaremos asumiendo que un modelo de primer orden (Representación de un plano) es una aproximación razonable del sistema en una región inicial de x_1, x_2, \dots, x_k .

El método de Escalamiento Ascendente contiene las siguientes etapas:

1. Se ajusta un modelo de primer orden usando un diseño ortogonal. El diseño de dos niveles será completamente apropiado, aunque las corridas de centro son a menudo recomendadas.
2. Calculamos el camino de paso ascendente se busca maximizar la respuesta. El camino de paso ascendente es calculado hasta que uno supone el máximo incremento en respuesta. Si buscamos minimizar la respuesta debe calcularse el camino de paso descendente, este producirá un camino que resulte la máxima disminución en la respuesta.
3. Comportamiento experimental de corridas a lo largo del camino. Esto es, haciendo una o varias corridas, y observar el valor de la respuesta. El resultado normalmente mostrará mejores valores de la respuesta. En alguna región a lo largo del camino el mejoramiento declinará y eventualmente desaparecerá. Debemos frenar frente a la deterioración del modelo simple de primer orden una vez nos hayamos alejado mucho de la región experimental inicial. A menudo la primera corrida experimental debe tomarse cerca del perímetro del diseño (Coordenada correspondiente al valor de uno en una variable importante) esto servirá como una confirmación experimental.
4. Algún punto donde una aproximación del máximo (o mínimo) de la respuesta es localizada en el camino, será base para la elección de un segundo experimento. El diseño debería ser nuevamente de primer orden. Es muy probable que las corridas centrales que definen curvatura, y los grados de libertad para las interacciones carezcan de ajuste en este punto.

5. Un segundo experimento es conducido, y otro modelo de primer orden es ajustado a los datos. Una prueba de ajuste debe ser realizada. Si la falta de ajuste no es significativa, un segundo camino basado en el nuevo modelo debe ser calculado. Esto es a menudo llamado corrección en medio curso. Es muy probable que el mejoramiento no sea demasiado obvio como lo fue en el primer camino. Después el mejoramiento disminuye, y tendremos una base para conducir un experimento más elaborado y un proceso más sofisticado de optimización.

2.2.1 Mejoramiento del proceso. (Camino de paso ascendente)

Las coordenadas a lo largo del camino del paso ascendente dependen de los signos y magnitudes de los coeficientes de regresión del modelo de primer orden ajustado. A continuación se describe el movimiento, es decir, x_j ($j=1,2,\dots,k$) relativo al movimiento de los otros factores. Debemos tener en mente que las variables están en forma codificada con el centro del diseño en $x_1 = x_2 = \dots = x_k = 0$.

El movimiento en x_j a lo largo del camino del paso ascendente es proporcional a la magnitud de los coeficientes de regresión b_j con la dirección tomada según el signo del coeficiente. Paso descendente tomará la dirección opuesta al signo del coeficiente.

Por ejemplo, si la regresión ajustada produce una ecuación $\hat{y} = 20 + 3x_1 - 1.5x_2$, el camino del paso ascendente resultará moviendo x_1 en dirección positiva y x_2 en dirección negativa. Además, x_1 se moverá 2 veces más rápido que x_2 , esto es, x_1 se moverá 2 unidades por cada unidad de x_2 . La figura 2.1 indica la naturaleza del camino del paso ascendente para este ejemplo. El camino es indicado por la flecha. Note que el camino es perpendicular a las líneas de respuesta constante.

Para $k=3$, estas líneas hacen planos y el camino de paso ascendente se mueve perpendicularmente a estos planos.

Ahora considere el modelo de regresión ajustado de primer orden:

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k$$

Por camino de paso ascendente nos referimos a que produciremos una estimación de respuesta máxima con la condición de que $\sum_{i=1}^k x_i^2 = r^2$. En otras palabras, todos los puntos están a una distancia fija r del centro del diseño, buscamos estos puntos $x_1, x_2, x_3, \dots, x_k$ para que \hat{y} sea maximizada. Recordemos que en la métrica la variable codificada del diseño central es $(0, 0, \dots, 0)$. Como un resultado, la condición dada por $\sum_{i=1}^k x_i^2 = r^2$ es una esfera con radio r .

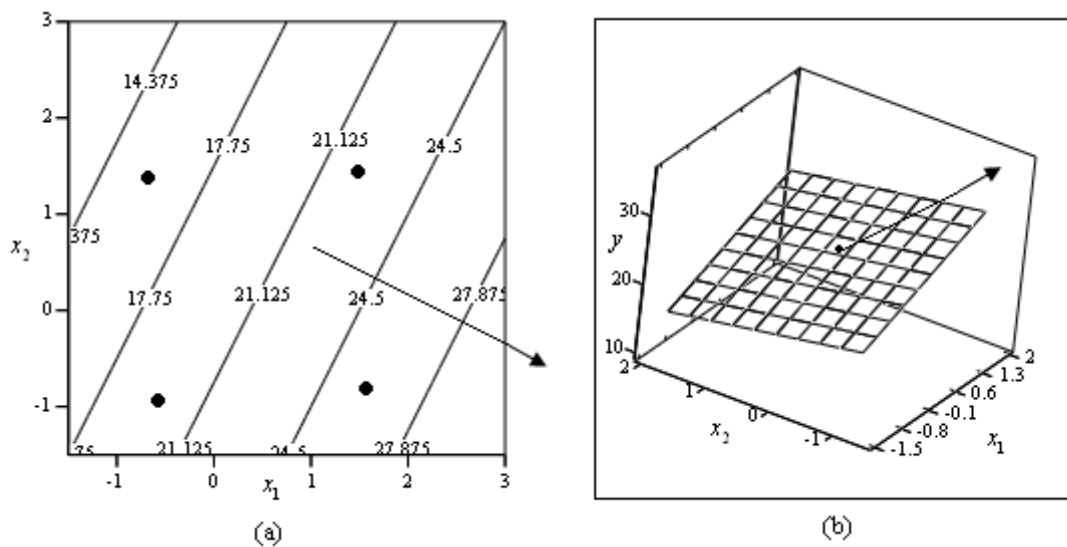


Figura 2.1: El camino del paso ascendente. (a) Gráfico de contorno. (b) Superficie de respuesta vista en tres dimensiones.

La solución a estos problemas de optimización envuelve el uso de los multiplicadores de Lagrange. La maximización requiere la derivada parcial con respecto a x_j ($j = 1, 2, \dots, k$) de

$$L = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k - \lambda \left(\sum_{i=1}^k x_i^2 - r^2 \right) \quad \text{Ecuación 2.1}$$

La derivada parcial con respecto a x_j es $\frac{\partial L}{\partial x_j} = b_j - 2\lambda x_j \quad (j=1,2,\dots,k)$

Ajustando $\frac{\partial L}{\partial x_j} = 0$ se obtienen las siguientes coordenadas de x_j del camino de paso

ascendente
$$x_j = \frac{b_j}{2\lambda} \quad (j=1,2,\dots,k)$$

Ahora, la cantidad $(1/2\lambda) = \rho$ puede verse como una constante de proporcionalidad. Es decir, las coordenadas están dadas por

$$x_1 = \rho b_1, x_2 = \rho b_2, \dots, x_k = \rho b_k \quad \text{Ecuación 2.2}$$

Donde para el paso ascendente, la constante ρ es positiva. Para el paso descendente, ρ es negativa. Esto implica que la elección de ρ , la cual está relacionada a λ , solamente determina la distancia del centro del diseño a donde residirá el punto resultante.

Suponga otra vez que $\hat{y} = 20 + 3x_1 - 1.5x_2$, los puntos sobre el camino son vistos como localización de valores máximos de \hat{y} en un radio fijo. Cada punto del camino es un punto de respuesta máxima. Nuevamente, vemos que el camino implica un movimiento en dirección positiva para x_1 y negativa para x_2 , con un cambio de 2 unidades en x_1 por cada unidad de x_2 . Uno puede ver el camino generado del paso ascendente como se muestra en la fig. 2.2.

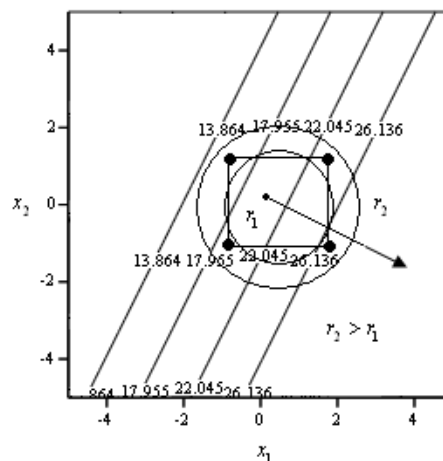


Figura 2.2: El camino del paso ascendente pasando por el valor máximo de y en una distancia fija r del diseño central.

Aplicación del método de paso ascendente.

A continuación ilustraremos 2 ejemplos, los cuales determinan el proceso para el escalamiento ascendente.

Ejemplo 2.1: El proceso plasma de agua fuerte.

Una etapa de procesamiento en la fabricación de semiconductores es el plasma de agua fuerte de obleas de silicio. En este ejemplo, la tasa de agua fuerte es la respuesta típica de interés (y). La tabla 2.1 presenta datos de un diseño factorial 2^2 con 4 corridas de centro (las que proporcionan más grados de libertad para el error aleatorio) para estudiar estos procesos, los datos aparecen tanto en forma natural como codificadas. Las variables de interés son la brecha ánodo-cátodo y la potencia aplicada en el cátodo, x_1 y x_2 representan las variables codificadas de la brecha y la potencia respectivamente. La tasa de agua fuerte observada es demasiado baja, y el experimentador desea moverse a una región donde la tasa del agua fuerte este alrededor de 1000Å/min.

Tabla 2.1: Experimento plasma agua fuerte.

Brecha (cm)	Potencia (W)	x_1	x_2	y
1.20	275	-1	-1	775
1.60	275	1	-1	670
1.20	325	-1	1	890
1.60	325	1	1	730
1.40	300	0	0	745
1.40	300	0	0	760
1.40	300	0	0	780
1.40	300	0	0	720

La tabla 2.2 muestra la prueba de ajuste resultante de este experimento utilizando el SPSS V.15 (Análisis Univariante). Al utilizar el criterio de la distribución F a un nivel de significancia del 5% se observa que el término de interacción no es significativo en la prueba de ajuste, mientras que si comparamos los valores dados en la corrida con el valor

de F de tablas $F_{tablas} = F_{0,95,1,3} = 10.1$, ambos efectos principales son significativos al 5%.

Dado que ambos valores de F son mayores que el F_{tablas} .

Tabla 2.2: Análisis del experimento tasa del agua fuerte.

Source	Type III Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
Model	4632031,250 ^a	5	926406,250	1448,453	,000
x2	7656,250	1	7656,250	11,971	,041
x1	17556,250	1	17556,250	27,450	,014
x1x2	756,250	1	756,250	1,182	,356
Error	1918,750	3	639,583		
Total	4633950,000	8			

a. R Squared = 1,000 (Adjusted R Squared = ,999)

Utilizando la subrutina (análisis de regresión) del SPSS V.15 la estimación de los parámetros será:

Model		Coeficientes No estandarizados		Coeficientes estandarizado	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	758,750	8,839		85,843	,000
	x1	-66,250	12,500	-,787	-5,300	,003
	x2	43,750	12,500	,520	3,500	,017

El modelo de primer orden usado para construir el camino del paso ascendente es:

$$\hat{y} = 766.25 - 66.25x_1 + 43.75x_2$$

Podemos observar de la tabla anterior que el valor de la constante (758.75) que resulta en la corrida del SPSS es diferente a la constante (766.25) que expresamos en el modelo. Esto se debe a que la constante es el promedio de las y del diseño factorial, es decir sin los puntos centrales.

Donde el signo del coeficiente de x_1 es negativo y el signo de x_2 es positivo, si disminuimos la brecha y aumentamos la potencia incrementará la tasa. Como \hat{b}_1 es el mayor coeficiente del modelo, x_1 es el factor con mayor influencia, con lo que se asegura que los pasos en el factor restante x_2 será de menor amplitud y proporcional a su

coeficiente, por lo que, en cada cambio de unidad en la brecha x_1 , cambiaremos la potencia $\frac{43.75}{(-66.25/-1)} = 0.66$ unidades (dividiendo el coeficiente de x_2 entre el coeficiente de x_1).

En consecuencia, el tamaño del paso de la brecha codificada será $\Delta x_1 = -1.0$, entonces el tamaño del paso de la potencia codificada es $\Delta x_2 = 0.66$. El tamaño del paso de las variables naturales será $\Delta brecha = -0.20cm$ por ser el factor de mayor influencia tomamos los valores en unidades originales, restamos al valor del nivel alto el valor del nivel bajo y dividimos entre dos y este resultado lo multiplicamos por $\Delta x_1 = -1.0$, es decir, $((1.60 - 1.20)/2)(-1) = -0.20$ y para el otro factor el tamaño del incremento de las unidades originales $\Delta potencia = 16.5W$ que resulta de restar al valor del nivel alto el valor del nivel bajo y dividimos entre dos y este resultado lo multiplicamos por $\Delta x_2 = 0.66$, es decir, $((325 - 275)/2)(0.66) = 16.5$.

La tabla 2.3 y la figura 2.3 muestran el resultado de aplicación del paso ascendente de este proceso. El primer punto del camino del paso ascendente, denotado base + Δ en la tabla 2.3, tiene $brecha = 1.20cm$ y $potencia = 316.5W$. La respuesta observada en estos puntos es $y = 845 \text{ \AA}/\text{min}$. Note que ese valor está cerca de $821.25 \text{ \AA}/\text{min}$. de la gráfica de contorno. Es siempre una buena idea correr el primer punto del camino cerca de la región experimental original como una prueba de confirmación, para garantizar que las condiciones experimentadas durante el experimento original no han cambiado. En $Base + 2\Delta$ la tasa del agua fuerte incrementó a $950 \text{ \AA}/\text{min}$. y en $Base + 3\Delta$ alcanzó $1040 \text{ \AA}/\text{min}$.

Tabla 2.3: Cálculos del camino del paso ascendente para el proceso plasma agua fuerte.

Punto	Variables Naturales		Variables codificadas		
	Brecha(cm)	Potencia(W)	x_1	x_2	y
Base (punto de salida)	1.40	300	0	0	
Δ	-0.20	16.5	-1	0.66	
Base + Δ	1.20	316.5	-1	0.66	845
Base + 2 Δ	1.00	333	-2	1.32	950
Base + 3 Δ	0.80	349.5	-3	1.98	1040

Claramente hemos llegado a una región cerca a la deseada de la tasa de agua fuerte de 1000Á/min. Por lo que concluimos que en lugar de trabajar con los valores iniciales (1.20,1.60) para la brecha y (275,325) para la potencia, trabajaremos mejor con (0.80,1) para la brecha y (333,349.5) para la potencia, y con esta nueva región nos estaríamos acercando más a nuestro valor deseado de la tasa de agua fuerte de 1000Á/min.

Ya que la tasa del experimento del plasma de agua fuerte del ejemplo 2.1 tiene solamente dos variables, un experimentador podría implementar el método del paso ascendente gráficamente, refiriéndose a un gráfico de contorno semejante a la figura 2.3. Sin embargo, cuando son más de $k = 2$ factores del diseño, un procedimiento formal puede ser útil, como el presentado en este ejemplo.

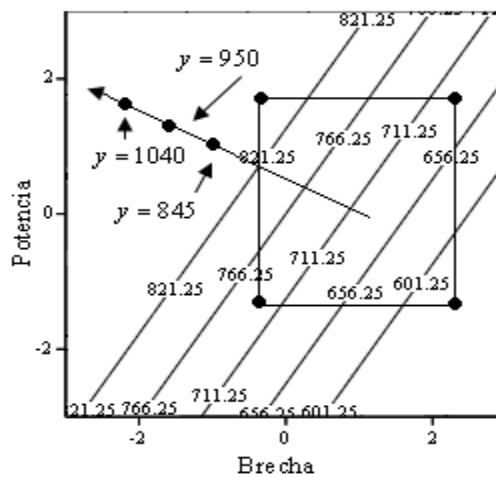


Figura 2.3: El camino del paso ascendente para el experimento del plasma agua fuerte del ejemplo 2.1.

Es fácil dar un algoritmo general para determinar las coordenadas de un punto sobre el camino del paso ascendente (o descendente). Asumiendo que los puntos $x_1 = x_2 = \dots = x_k = 0$ es la base o punto original. Entonces

1. Elegimos el tamaño del paso en una de las variables del proceso, es decir Δx_i . Usualmente seleccionamos la variable sobre la que más conocemos, o seleccionamos la variable que tenga el coeficiente de regresión más alto en valor absoluto $|b_i|$.
2. El tamaño del paso de las otras variables es (ecuación 2.2)

$$\Delta x_j = \frac{b_j}{b_i / \Delta x_i}, \quad j = 1, 2, \dots, k, \quad i \neq j \quad \text{Ecuación 2.3}$$

3. Convertimos el Δx_j de la variable codificada a la variable natural.

Ilustraremos este procedimiento con un ejemplo de cuatro variables a través del paso descendente.

Ejemplo 2.2: Ilustración del paso descendente con cuatro variables.

Muchas compañías manufactureras usan partes moldeadas como componentes del proceso. El encogimiento es a menudo un problema. A menudo una parte moldeada se construye más grande de lo normal, para permitir el encogimiento de la parte. En el siguiente experimento una nueva parte esta siendo producida, y últimamente es importante encontrar los valores correctos para minimizar el encogimiento. En el siguiente experimento, los valores de respuesta son desviaciones normales del encogimiento. Los niveles de los factores naturales y las unidades del diseño son los siguientes:

Factor	Unidades del Diseño	
	-1	1
x_1 : Velocidad de Inyección (<i>ft/sec</i>)	1.0	2.0
x_2 : Molde de temperatura (<i>°C</i>)	100	150
x_3 : Molde de presión (<i>Psi</i>)	500	1000
x_4 : Contrapresión (<i>Psi</i>)	75	120

Donde los respectivos valores de centro son: 1.5, 125, 750 y 97.5.

El diseño es un factor 2^4 con una réplica. La respuesta está en unidades de 10^{-4} cm . Los valores originales de la variable respuesta no son proporcionados, pero el modelo de primer orden ajustado a los datos es:

$$\hat{y} = 80 - 5.28x_1 - 6.22x_2 - 1.21x_3 - 1.07x_4$$

El propósito de este ejemplo es acercarnos y buscar la combinación de los factores que minimicen la variable de interés (el encogimiento), los coeficientes del modelo anterior serán utilizados para aplicar el método descendente.

Este modelo de regresión lineal predice el encogimiento para el diseño de las variables en unidades codificadas. Esta claro que un movimiento en la región, con un nivel alto de velocidad de inyección y del molde de temperatura serán beneficiosos. Además un leve incremento en el molde de presión y contrapresión también es beneficioso.

Debemos tener en cuenta que buscamos el camino del paso descendente. Entonces un incremento proporcional de los coeficientes de regresión en cada factor definirá el camino correcto para experimentos futuros.

Suponga que seleccionamos x_1 como la variable para definir el tamaño del paso (note que x_1 es uno de los dos valores con coeficientes de regresión más grandes). Sea $\Delta x_1 = 1$, que corresponde a $(2.0 - 1.0)/(2/1) = 0.5$ (ft/sec) de la velocidad de inyección en la variable natural.

Entonces de la ecuación (2.3) tenemos:

$$\Delta x_2 = \frac{b_2}{b_1} = \frac{6.22}{5.28} = 1.178 \quad \text{Diseño de unidades de incremento en } x_2$$

$$\Delta x_3 = \frac{b_3}{b_1} = \frac{1.21}{5.28} = 0.23 \quad \text{Diseño de unidades de incremento en } x_3$$

$$\Delta x_4 = \frac{b_4}{b_1} = \frac{1.07}{5.28} = 0.203 \quad \text{Diseño de unidades de incremento en } x_4$$

Los respectivos cambios en términos de las unidades naturales son:

$$\Delta (\text{Molde de temperatura}) = (1.178)(25) = 29.45$$

$$\Delta (\text{Molde de presión}) = (0.23)(250) = 57.5$$

$$\Delta (\text{Contra presión}) = (0.203)(22.5) = 4.57$$

El valor de 25 en el Δ (Molde de temperatura) se calcula de la diferencia del dato central y el nivel alto (o el bajo) de los datos no codificados. $(150-125)$ o $(125-100)$.

La tabla 2.4 muestra el camino del paso descendente en términos de las variables codificadas y naturales. La estrategia implica hacer corridas experimentales a lo largo de este camino hasta que no haya mejoramiento observado en el encogimiento (Variable respuesta).

Tabla 2.4: El paso descendente del ejemplo 2.2.

	Unidades codificadas				Unidades naturales			
	x_1	x_2	x_3	x_4	(ft/sec)	(°C)	(Psi)	(Psi)
Base	0	0	0	0	1.5	125	750	97.50
Incremento = Δ	1.0	1.178	0.23	0.203	0.5	29.45	57.5	4.57
Base + Δ	1.0	1.178	0.23	0.203	2.0	154.45	807.5	102.07
Base + 2 Δ	2.0	2.356	0.46	0.406	2.5	183.90	865.0	106.64
Base + 3 Δ	3.0	3.534	0.69	0.609	3.0	213.35	922.5	111.21
Base + 4 Δ	4.0	4.712	0.92	0.812	3.5	242.80	980.0	115.78

Ahora, con estos nuevos datos se hacen las corridas experimentales y se ajusta nuevamente el modelo a fin de verificar la obtención del valor óptimo de la variable respuesta, este proceso se detendrá en el momento en que se observe que no hay disminución en la variable observada (y) con estos datos.

Notas prácticas considerando el paso ascendente (o descendente).

1. El paso ascendente de primer orden basado en el gradiente, técnica de optimización. Cuando usamos un punto extremo cerca de la verdadera superficie de respuesta, el paso ascendente usualmente resulta en un movimiento corto fuera del punto de inicio. Esto podría ser una indicación a considerar expandiendo el modelo o agregando términos de orden superior.
2. Hemos ilustrado observaciones individuales en cada punto del camino. En algunos casos de réplica o corridas repetidas son útiles. Por ejemplo, si estamos optimizando un proceso químico de vapor depositado, la variabilidad en la capa de espesor, generará incremento con el promedio de la capa de espesor depositada. Usando medidas repetidas en diferentes lugares en la unidad o procesando varias unidades al mismo tiempo y determinando en ambos el promedio y la desviación estándar de la respuesta, pueden ser muy útiles.
3. Otras técnicas de optimización de primer orden puede ser empleadas, como alternativa el paso descendente. Estos procedimientos más automáticos de escalamiento de colina no proporcionan información del proceso acerca de los efectos de los factores obtenidos del diseño factorial.
4. Algunos experimentadores ajustan el tamaño del paso después de las primeras etapas, dependiendo de los resultados obtenidos. Por ejemplo, si la respuesta esta cambiando lentamente, el tamaño del paso puede ser alargado. Esto debe ser hecho con mucho cuidado, sin embargo, es fácil rebasar la región del óptimo si el tamaño del paso es bastante largo.

2.2.2 Región de Confianza para la dirección del Paso Ascendente.

Para evaluar la naturaleza del camino del paso ascendente, es útil probar la variación de los coeficientes. Se debe tener en mente que el camino esta basado en los coeficientes de regresión, y estos coeficientes tienen que satisfacer propiedades caracterizadas por el error estándar. En consecuencia, en el camino se tiene que probar la variación. Al probar la variación puede conducir a una región de confianza para el camino mismo. El valor de la región de confianza puede ser derivada por gráficos, obviamente, en el caso de dos o tres variables. Un análisis gráfico puede indicar el grado de flexibilidad que se tiene en el experimento a lo largo del camino. Una región más cerrada nos da confianza que el camino esta siendo bien estimado.

Supongamos que hay k variables en el diseño con coeficientes estimados b_1, b_2, \dots, b_k (en este caso el modelo estimado es $\hat{y}_i = b_1x_1 + \dots + b_kx_k$ por simplicidad se ha eliminado el término constante) proveen el movimiento relativo de las variables a lo largo del camino. Suponiendo que el modelo de primer orden es correcto, el camino verdadero está definido por B_1, B_2, \dots, B_k (la variable observada es $y_i = \beta_1x_1 + \dots + \beta_kx_k + \varepsilon_i$) y $E(b_i) = B_i$ ($i = 1, 2, \dots, k$) los coeficientes verdaderos son proporcionales al movimiento relativo a lo largo del camino [es decir, Ecuación (2.2)] implica

$$\beta_i = \gamma X_i \quad (i = 1, 2, \dots, k) \quad \text{Ecuación 2.4}$$

Donde las X_i son las direcciones del camino. En otras palabras X_1, X_2, \dots, X_k son constantes que, sabemos, pueden ser usadas para calcular cualquier coordenada en el camino verdadero. Podemos ver la relación en la ecuación (2.4) como un modelo de regresión sin intercepto, el cual, a través de la estructura de regresión puede parecer poco ortodoxo. Consideremos el modelo:

$$b_i = \gamma X_i + \varepsilon_i \quad (i = 1, 2, \dots, k) \quad \text{Ecuación 2.5}$$

La varianza de los b_i es constante a través de todos los coeficientes si usamos un diseño ortogonal estándar de dos niveles. Llamamos la varianza estimada a s_b^2 , Una segunda

varianza, s_b^{2*} , es encontrada a través del error cuadrático medio de la regresión de la ecuación (2.5).

La cantidad s_b^{2*} está dada por:

$$s_b^{2*} = \frac{\sum (b_i - \hat{\gamma} X_i)^2}{k-1}$$

Donde

$$\hat{\gamma} = \frac{\sum_{i=1}^k b_i X_i}{\sum_{i=1}^k X_i^2}$$

Entonces, $k-1$ es el número de grados de libertad del error para la regresión. Resultando,

$$\frac{s_b^{2*}}{s_b^2} \approx F_{k-1, v_b} \quad \text{Ecuación 2.6}$$

Donde v_b es el número de grados de libertad del error asociados con el estimador s_b^2 (del experimento de pasos ascendentes). Los valores de X_1, X_2, \dots, X_k que caen dentro de la región de confianza son los valores para los cuales el resultado de $\frac{s_b^{2*}}{s_b^2}$ no aparecen rechazados en la ecuación (2.6). En particular, las coordenadas fuera de la región de confianza son aquellos para los que s_b^{2*} es significativamente más grande que s_b^2 . Resulta que la región de confianza $100(1-\alpha)\%$ está definida como el conjunto de valores X_1, X_2, \dots, X_k para los cuales:

$$\sum_{i=1}^k \frac{(b_i - \hat{\gamma} X_i)^2 / (k-1)}{s_b^2} \leq F_{\alpha, k-1, v_b} \quad \text{Ecuación 2.7}$$

Donde $F_{\alpha, k-1, v_b}$ es el punto superior $100(1-\alpha)\%$ de la distribución $F_{\alpha, k-1, v_b}$.

¿Región de confianza media?

Debemos entender que las coordenadas X_1, X_2, \dots, X_k especifican la dirección a lo largo del camino. Por ejemplo $X_1 = \sqrt{0.5}$, $X_2 = \sqrt{0.3}$, y $X_3 = \sqrt{0.2}$ especifican una dirección y también representan las coordenadas que están a una unidad de distancia lejos del origen del diseño. La región de confianza resulta ser un cono (o un hipercono en más de tres variables) con el vértice en el origen del diseño y todos los puntos a una unidad de distancia del origen, satisfaciendo que

$$\frac{\sum_{i=1}^k b_i^2}{(k-1)} - \frac{\sum_{i=1}^k b_i^2 X_i^2}{(k-1)\sum_{i=1}^k X_i^2} \leq s_b^2 F_{\alpha, k-1, v_b} \quad \text{Ecuación 2.8}$$

Verificación: De la ecuación (2.7) se tiene:

$$\sum_{i=1}^k \frac{(b_i - \hat{\gamma} X_i)^2 / (k-1)}{s_b^2} \leq F_{\alpha, k-1, v_b} \quad \text{Ahora resolviendo el cuadrado del binomio tenemos}$$

$$\frac{\sum_{i=1}^k (b_i^2 - 2b_i \hat{\gamma} X_i + \hat{\gamma}^2 X_i^2)}{k-1} \leq s_b^2 F_{\alpha, k-1, v_b} \quad \text{Sustituyendo } \hat{\gamma} = \frac{\sum_{i=1}^k b_i X_i}{\sum_{i=1}^k X_i^2}, \text{ Tenemos}$$

$$\frac{\sum_{i=1}^k b_i^2 - 2 \sum_{i=1}^k b_i X_i \frac{\sum_{i=1}^k b_i X_i}{\sum_{i=1}^k X_i^2} + \sum_{i=1}^k X_i^2 \left(\frac{\sum_{i=1}^k b_i X_i}{\sum_{i=1}^k X_i^2} \right)^2}{k-1} \leq s_b^2 F_{\alpha, k-1, v_b}$$

$$\frac{\sum_{i=1}^k b_i^2 - 2 \frac{\left(\sum_{i=1}^k b_i X_i \right)^2}{\sum_{i=1}^k X_i^2} + \frac{\left(\sum_{i=1}^k b_i X_i \right)^2 \sum_{i=1}^k X_i^2}{\left(\sum_{i=1}^k X_i^2 \right)^2}}{k-1} \leq s_b^2 F_{\alpha, k-1, v_b} \quad \text{Eliminando términos en el}$$

numerador obtenemos

$$\sum_{i=1}^k b_i^2 - 2 \frac{\left(\sum_{i=1}^k b_i X_i \right)^2}{\sum_{i=1}^k X_i^2} + \frac{\left(\sum_{i=1}^k b_i X_i \right)^2}{\sum_{i=1}^k X_i^2} = \sum_{i=1}^k b_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^k b_i X_i \right)^2}{\sum_{i=1}^k X_i^2}$$

Luego con toda la expresión obtenemos

$$\frac{\sum_{i=1}^k b_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^k b_i X_i \right)^2}{\sum_{i=1}^k X_i^2}}{k-1} \leq s_b^2 F_{\alpha, k-1, v_b} \quad \frac{\sum_{i=1}^k b_i^2}{(k-1)} - \frac{\left(\sum_{i=1}^k b_i X_i \right)^2}{(k-1)\sum_{i=1}^k X_i^2} \leq s_b^2 F_{\alpha, k-1, v_b}$$

Ejemplo 2.3 Un Ejemplo con k = 2

Considere el camino del paso ascendente ilustrado en la figura 2.1. Los coeficientes son $b_1 = 3$ y $b_2 = -1.5$. Para calcular la región de confianza supongamos que los estimadores de las varianzas de los coeficientes son ambos $\frac{1}{4}$ y hay cuatro grados de libertad del error. El valor $F_{0.05,1,4} = 7.71$. Resulta que, la región de confianza del 95% para el camino del paso ascendente en distancia fija $X_1^2 + X_2^2 = 1.0$ es determinado por la solución (X_1, X_2) para

$$9 + 2.25 - (3X_1 - 1.5X_2)^2 \leq \frac{1}{4}(7.71) \quad \text{o} \quad (3X_1 - 1.5X_2)^2 \geq 9.3225 \quad \text{Ecuación 2.9}$$

Resulta que, el total de la región de confianza en el camino es como lo ilustrado en la figura 2.4. Los acercamientos gráficos para problema similares son razonables para $k = 3$. Para $k > 3$ no podemos exhibir un gráfico de la región de confianza. Por supuesto, podemos sustituir cualquier valor (X_1, X_2, \dots, X_k) en la ecuación (2.7) para determinar si el punto cae dentro de la región de confianza. En general, puede ser bastante difícil determinar el tamaño relativo de la región de confianza, y aun necesitaríamos tener alguna indicación de si o no es permisible continuar. Box y Draper (1987) describen un método analítico interesante para determinar que porcentaje de las posibles direcciones fueron excluidas por el 95% de la región de confianza. Esto produce alguna impresión sobre que tan cerrada es la región de confianza para algún ejemplo específico. En nuestro ejemplo $k = 2$, esto podría corresponder a la determinación del ángulo θ en la figura 2.4. Resulta que:

$$\theta = \arcsin \left\{ \frac{(k-1)s_b^2 F_{\alpha, k-1, v_2}}{\sum_{i=1}^k b_i^2} \right\}^{1/2} \quad \text{Ecuación 2.10}$$

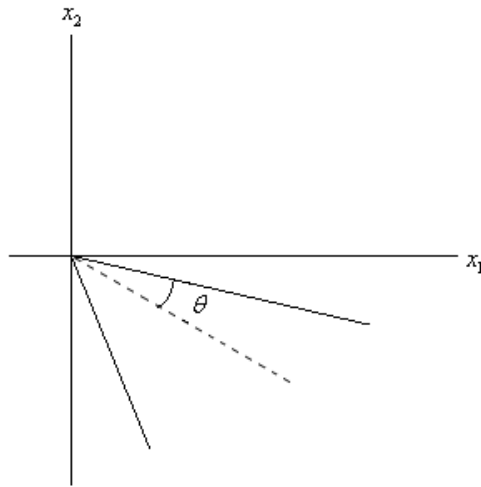


Figura 2.4: Región de confianza en el camino del paso ascendente de la figura 2.1.

Por ejemplo, tenemos:

$$\theta = \arcsin \left\{ \left[\left(\frac{1}{4} \right) (7.71) \left(\frac{1}{11.25} \right) \right]^{1/2} \right\}$$

$$= \arcsin[0.413]$$

Así $\theta \cong 24.4^\circ$. Resulta que, la región de confianza ilustrada por la figura 2.4 barre un ángulo de $2\theta = 48.8^\circ$. La proporción de interés es $48.8/360 = 0.135$, sugiriendo que 86.5% $(1-0.135)$ de las posibles direcciones tomadas del origen del diseño son excluidas. Claramente, un gran porcentaje. Para $k = 3$ la región de confianza es un cono y la calidad de la región de confianza depende de la fracción del área de la esfera que es ocupada por un ángulo sólido creado por la confianza del cono. Considerando, por ejemplo, la figura 2.5. La línea punteada representa el camino calculado. La porción del área sombreada para el área de la esfera determina la calidad del camino calculado.

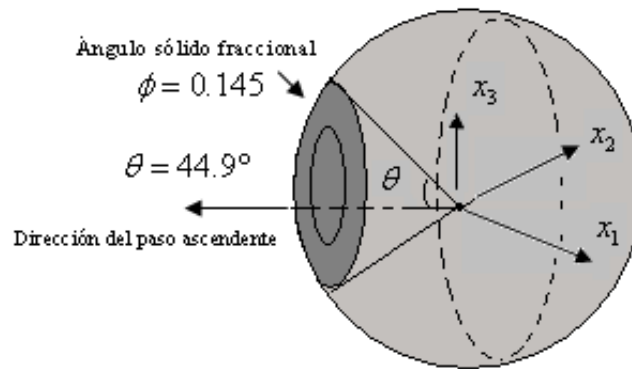


Figura 2.5: La confianza viene por la dirección de paso ascendente para $k = 3$ [Ver Box y Draper (1987)].

2.2.3 Paso Ascendente para una Restricción Lineal.

En cualquier momento un investigador encuentra una pregunta de experimentación secuencial que implica considerables movimientos, existe la posibilidad que el camino se moverá en un área del espacio del diseño, donde una o más de las variables no están en un rango permisible para el punto de vista de un ingeniero o científico. Por ejemplo, está dentro de lo posible que la concentración de un ingrediente pueda exceder los límites prácticos. Resulta que, en muchas situaciones se vuelve necesario construir el camino de paso ascendente con una restricción impuesta en las variables del diseño. Supongamos, de hecho, que miramos la restricción en forma de un límite. Es decir, definido por:

$$c_0 + c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_kx_k = 0 \quad \text{Ecuación 2.11}$$

Este límite no necesita involucrar las k variables. Por ejemplo, $x_j = c_0$ puede representar un límite en una sola variable del diseño. Se debe tener presente que en la práctica la restricción debe ser formulada en términos de variables naturales (descodificadas) y luego escrito en la forma de variables codificadas para manipulación.

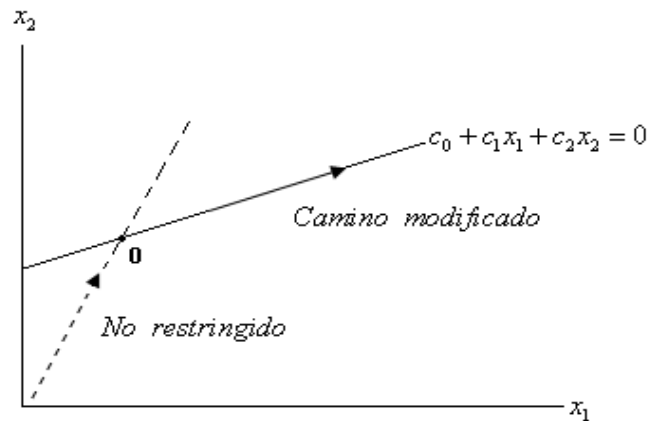


Figura 2.6 Paso ascendente con una restricción lineal.

La figura 2.6 ilustra, para $k = 2$, lo necesario del método de paso ascendente cuando una restricción lineal debe ser aplicada. El proceso es el siguiente:

1. Proceder a lo largo del camino usual del paso ascendente hasta que el contacto sea hecho con la línea de restricción (o el plano para $k > 2$). Llamamos a este punto de contacto **O**.
2. El comienzo en el punto **O**, procede a lo largo de un ajuste o modificación del camino.
3. Conducir experimentos a lo largo del camino modificado, usualmente, con la regla de retención basada en los mismos principios generales como los discutidos en la sección 2.1.

¿Cuál es el camino modificado?

La figura 2.6 claramente esboza el camino modificado para $k = 2$. Sin embargo, la dirección correcta del vector es la que satisface la restricción y todavía hace el máximo progreso posible hacia la maximización (o minimización) de la respuesta (Claramente el camino modificado en nuestra ilustración es el correcto).

Resulta que (y es intuitivamente razonable) el camino modificado está dado por la dirección del vector

$$b_i - dc_i \quad (i = 1, 2, \dots, k) \quad \text{Ecuación 2.12}$$

Por el cual

$$\sum_{i=1}^k (b_i - dc_i)^2$$

es minimizada. Esto es, la dirección a lo largo de la línea de restricción (o plano) es tomado a fin de estar más cerca del camino original. Otra vez podemos considerar una simple situación de regresión en la cual los b_i están siendo restados contra el c_i . Resulta que, la cantidad d juega el papel de la pendiente de regresión, y la minimización de la suma de cuadrados de los residuos produce el valor:

$$d = \frac{\sum_{i=1}^k b_i c_i}{\sum_{i=1}^k c_i^2} \quad \text{Ecuación 2.13}$$

Así, el camino modificado inicia en el punto \mathbf{O} y se obtiene usando la dirección del vector $b_1 - dc_1, b_2 - dc_2, \dots, b_k - dc_k$.

Queda por determinar el punto \mathbf{O} , que es, el punto de intersección del camino original y el plano de restricción. De la ecuación (2.2) sabemos que $x_j = \rho b_j$ para $j=1, 2, \dots, k$. Pero sabemos que para el punto \mathbf{O} , la ecuación de restricción [Ecuación (2.11)] debe tener aplicación. Resulta que, la colisión entre el camino original del paso ascendente y la restricción del plano debe ocurrir para $\rho = \rho_0$ satisfaciendo:

$$c_0 + (c_1 b_1 + c_2 b_2 + \dots + c_k b_k) \rho_0 = 0$$

Así

$$\rho_0 = \frac{-c_0}{\sum_{i=1}^k c_i b_i} \quad \text{Ecuación 2.14}$$

Resulta que, el camino modificado empieza en $x_{j,0} = \rho_0 b_j$ para $j=1, 2, \dots, k$ y se mueve a lo largo del camino modificado, siendo definido por:

$$x_{j,m} = x_{j,0} + \lambda(b_j - dc_j) \quad j=1, 2, \dots, k \quad \text{Ecuación 2.15}$$

Donde d está dada por la ecuación (2.13) y λ es una constante de proporcionalidad. Note que el camino modificado es como el camino estándar excepto que no inicia en el origen y el coeficiente de regresión b_j es remplazado por $b_j - dc_j$ en orden para acomodar la restricción.

La restricción lineal en las variables del diseño ocurre frecuentemente en la práctica. En el producto químico y los campos relacionados, las restricciones son a menudo impuestas en situaciones en las cuales el diseño de las variables representa la concentración de los componentes en un sistema. En un sistema de mezcla de gasolina ciertamente habrá una restricción impuesta en los componentes del sistema. En el ejemplo siguiente ilustramos el paso ascendente en una situación donde los factores de mezcla son implicados y la restricción lineal debe ser aplicada para modificar el camino del paso ascendente.

Ejemplo 2.4 El experimento de la fuerza de la tela.

Consideremos una situación en la cual la fuerza de ruptura (en gramos por pulgada cuadrada) de un cierto tipo de tela está en función de la cantidad de tres componentes importantes en un kilogramo de materia prima. Llamaremos los componentes ξ_1, ξ_2 y ξ_3 . Los niveles usados en el experimento son los siguientes:

Material	Cantidad en gramos	
	-1	+1
1	100	150
2	50	100
3	20	40

Con los valores de centro 125, 75, 30 respectivamente.

Los demás componentes en la materia prima se sabe que no tienen efecto en la fuerza de la tela.

Sin embargo, es importante que ξ_1 y ξ_2 , las cantidades del material 1 y 2 respectivamente, son restringidas por la siguiente ecuación: $\xi_1 + \xi_2 \leq 500$

Los diseños de las variables codificadas y la escala de las variables naturales son dados por:

$$x_1 = \frac{\xi_1 - 125}{25}, \quad \xi_1 = 25x_1 + 125$$

$$x_2 = \frac{\xi_2 - 75}{25}, \quad \xi_2 = 25x_2 + 75$$

$$x_3 = \frac{\xi_3 - 30}{10}, \quad \xi_3 = 10x_3 + 30$$

Sustituyendo resulta que la restricción disminuye para:

$$25x_1 + 25x_2 \leq 300$$

Supongamos que la función de regresión adecuada está dada por:

$$\hat{y} = 150 + 1.7x_1 + 0.8x_2 + 0.5x_3$$

Ya que deseamos encontrar la condición para incrementar la fuerza de la tela, el camino del paso ascendente procederá con el incremento de valores de los tres componentes. El incremento a lo largo del camino corresponde a los cambios en ξ_1 de 25g/plg^2 , o unidad en el diseño. Esto corresponde a los cambios en x_2 y x_3 de 0.47 (se calcula $(0.8/1.7)$) y 0.294 (se calcula $(0.5/1.7)$) unidades, respectivamente, con cambios de 11.75 (el 11.75 se obtiene de $((100-50)/2) (0.47)$) y 2.94 (el 2.94 se obtiene de $((40-20)/2) (0.294)$) para ξ_2 y ξ_3 respectivamente.

Ahora, basados en la información anterior, el camino estándar del paso ascendente puede ser calculado. Pero ¿En qué punto hace el camino contacto con la restricción y con la restricción del plano. De la ecuación (2.14) obtenemos:

$$\rho_0 = \frac{300}{(25)(1.7) + (25)(0.8)} = \frac{300}{62.5} = 4.8$$

Resulta que, el camino modificado inicia en

$$x_{j,0} = 4.8b_j \quad (j = 1, 2, 3)$$

$$x_{1,0} = (4.8)b_1 = (4.8)(1.7) = 8.16$$

Y así sucesivamente para los demás valores lo cual resulta en las coordenadas (8.16, 3.84, 2.4) (Producto de 4.8 por cada coeficiente de estimación 1.7, 0.8 y 0.5) en unidades del diseño (coordenadas de la intersección **O**). Resulta que, las coordenadas del camino modificado son dadas por la ecuación (2.15); esto es:

$$x_{j,m} = 4.8b_j + \lambda(b_j - dc_j) \quad (j=1,2,3)$$

Donde

$$d = \frac{\sum_{i=1}^k b_i c_i}{\sum_{i=1}^k c_i^2} = \frac{(25)(1.7) + (25)(0.8)}{25^2 + 25^2} = \frac{(25)(1.7) + (25)(0.8)}{1,250} = 0.05$$

Resulta que, el camino modificado es dado por:

$$x_{1,m} = 8.16 + \lambda(0.45) \quad (\text{Donde } 0.45 = (1.7 - (0.05)25))$$

$$x_{2,m} = 3.84 + \lambda(-0.45)$$

$$x_{3,m} = 2.4 + \lambda(0.5) \quad (\text{Ya que } c_3 = 0)$$

Así, la siguiente tabla muestra un conjunto de coordenadas en el camino de pasos ascendentes, seguido por puntos a lo largo del camino modificado.

	x_1	x_2	x_3
Base	0	0	0
Δ	1	0.47	0.294
Base + Δ	1	0.47	0.294
Base + 2Δ	2	0.94	0.598
·	·	·	·
·	·	·	·
·	·	·	·
Base + 5Δ	5	2.35	1.470
Punto O	8.16 (<i>Sumamos 0.45</i>)	3.84 (<i>Sumamos (-0.45)</i>)	2.4 (<i>Sumamos (0.5)</i>)
	8.61	3.39	2.9
	9.06	2.94	3.4
	9.51	2.49	3.9
	·	·	·
	·	·	·
	·	·	·

Para el camino modificado usamos $\lambda = 1.0$ por conveniencia. Note que en todos los puntos de la tabla anterior, el camino modificado satisface la restricción $25x_1 + 25x_2 \leq 300$.

En conclusión, al hacer el cambio de nuestros valores encontrados en la tabla anterior a valores naturales, continuaremos nuestras corridas hasta que no se cumpla la restricción $\xi_1 + \xi_2 \leq 500$, o hasta que haya un cambio en la tendencia de y (en nuestro ejemplo cuando el valor de y disminuya).

2.3 Superficie de Respuesta de segundo Orden.

Anteriormente, hemos trabajado con modelos de primer orden en el diseño de las variables, éstos con o sin términos de interacción. En el Capítulo 1, la atención fue enfocada en el diseño de dos niveles. Estos diseños son modelos de primer orden que contienen efectos principales e interacciones de bajo orden. En la sección anterior se desarrolló el paso ascendente utilizando solo modelos de primer orden. No obstante, a menudo mencionamos la necesidad para modelos adecuados de segundo orden en superficie de respuesta. El interés se centra en la detección de la curvatura del modelo, esto es, la detección de términos cuadráticos puros $\beta_{11}x_1^2, \beta_{22}x_2^2, \dots, \beta_{kk}x_k^2$. Recordemos que el uso de las corridas de centro para aumentar un diseño estándar de dos niveles permite solo un grado de libertad para la estimación de estos coeficientes de segundo orden. Las estimaciones eficientes de $\beta_{11}, \beta_{22}, \dots, \beta_{kk}$ requieren puntos de diseño adicional.

En la sección anterior, indicamos la mejora de un producto, a través de la **técnica del gradiente, llamado Paso Ascendente**, el investigador encontrará situaciones donde la prueba de ajuste atribuible para la curvatura de estos términos puros de segundo orden es muy significativa. En estos casos es probable que el modelo que contenga solo términos de primer orden e interacción de términos de dos factores $\beta_{12}, \beta_{13}, \dots, \beta_{k-1,k}$ sea inadecuado. Como resultado, un modelo de superficie de respuesta de segundo orden puede ser una elección razonable.

2.3.1 Función de Segundo orden y Superficie de respuesta.

En la metodología de la superficie de respuesta (MSR) asumimos que la función de relación es:

$$y = f(x, \theta) + \varepsilon \quad \text{Ecuación 2.16}$$

la cual, es desconocida. Las variables x_1, x_2, \dots, x_k están centradas y las unidades del diseño en escala. La aproximación inicial del modelo de primer orden o el modelo que contiene términos de primer orden e interacción de términos de bajo orden es la aproximación de las series de Taylor de la ecuación (2.16), si consideramos términos de segundo orden resultará un modelo del tipo:

$$\begin{aligned} y &= \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \beta_{11} x_1^2 + \dots + \beta_{kk} x_k^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \dots + \beta_{k-1,k} x_{k-1} x_k + \varepsilon \\ &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j}^k \sum_{j=2}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.17}$$

El modelo de la ecuación (2.17) es el **modelo de superficie de respuesta de segundo orden**. Note que contiene todos los términos del modelo a través del orden dos. El término ε es el componente aleatorio usual de error.

El modelo de la ecuación (2.17) es un modelo interesante y muy flexible para describir datos experimentales en los cuales existe curvatura. La intención no es decir que todos los sistemas que contienen curvatura son bien acomodados por este modelo. Hay veces en las cuales un modelo no lineal en los parámetros es necesario. En casos pocos comunes se puede requerir el uso de términos cúbicos (es decir, $x_1^2 x_2$, $x_1 x_2^2$ etc.) para lograr un ajuste adecuado. En otros casos la curvatura puede ser fácilmente manipulada a través del uso de transformaciones en la respuesta misma; por ejemplo, en el caso donde $k = 2$,

$$\ln y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon$$

En otras situaciones, la transformación del diseño de las variables permite guiar a una función de aproximación satisfactoria, por ejemplo:

$$y = \beta_0 + \beta_1 \ln x_1 + \beta_2 \ln x_2 + \varepsilon$$

A veces, una transformación en la variable respuesta y del diseño puede ser necesaria.

Observe que en la ecuación (2.17) el modelo contiene $1 + 2k + k(k - 1)/2$ parámetros. El diseño experimental usado debe contener al menos $1 + 2k + k(k - 1)/2$ puntos distintos del diseño. Además, el diseño debe contener al menos tres niveles $(-1, 0, 1)$ de cada variable para estimar los términos cuadráticos puros.

La forma geométrica de la función de segundo orden es mostrado en la figura 2.7, 2.8 y 2.9, la figura 2.7 y 2.8 muestra contornos de respuesta constante para una situación hipotética con $k = 2$ variables. En la figura 2.7 el centro del sistema, o punto estacionario, es un punto de respuesta máxima. En la figura 2.8 el punto estacionario es un punto de respuesta mínima. En ambos casos la respuesta de la figura mostrada son elipses concéntricas. En la figura 2.9, se muestra un sistema de contornos hiperbólicos. Note que en el centro no hay ningún punto máximo o mínimo. En este caso es llamado silla de montar o sistema de mini tope. La detección de la naturaleza del sistema y la localización del punto estacionario son una parte importante del análisis de segundo orden. Las gráficas de tres dimensiones pueden ser muy útiles para el análisis de datos en la determinación de la naturaleza de una superficie de respuesta.

2.3.2 Representación gráfica de la superficie de respuesta de segundo orden.

El sistema de superficie de respuesta (máximo, mínimo o punto de silla), depende de los signos y de la magnitud de los coeficientes en el modelo de la ecuación (2.17). Los coeficientes de segundo orden (interacción y términos cuadráticos) juegan un papel vital.

Se debe tener presente que los coeficientes usados son estimadores de las β 's de la ecuación (2.17). Como resultado los contornos (o superficies) representan contornos de respuesta estimada. Así, aun el mismo sistema (máximo, mínimo o punto de silla) es parte de la estimación del proceso. El punto estacionario y el sistema en general surgen como resultado de un modelo apropiado, y no de la verdadera estructura. Considerando el ejemplo de la figura 2.7, para el cual el modelo de segundo orden adecuado está dado por:

$$\hat{y} = 100 + 5x_1 + 10x_2 + 8x_1^2 - 12x_2^2 - 12x_1x_2$$

Un análisis de esta función de respuesta permitirá determinar la posición del punto estacionario y lo natural del sistema de respuesta. La figura 2.7 muestra la superficie de respuesta con contornos de la constante \hat{y} trazados contra x_1 y x_2 . Claramente se muestra que el sistema produce un punto estacionario que tiene un máximo como respuesta estimada.

El punto estacionario es la solución para $\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_2} = 0$

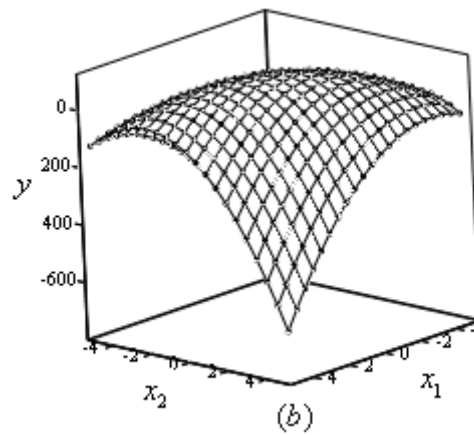
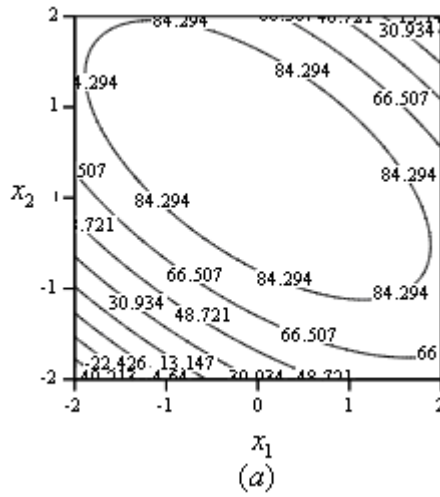


Figura 2.7 Sistema de segundo orden mostrando un máximo (a) Gráfico de Contorno (b) Superficie de Respuesta.

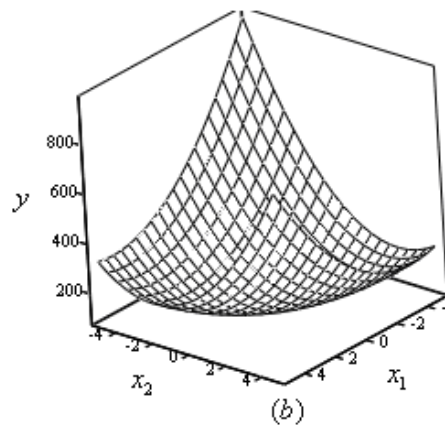
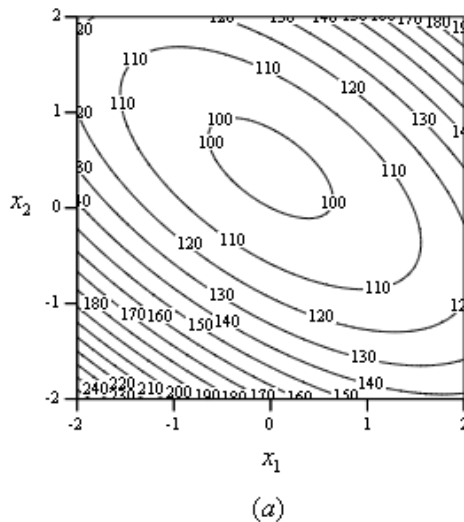


Figura 2.8 Sistema de segundo orden mostrando un mínimo (a) Gráfico de Contorno (b) Superficie de Respuesta.

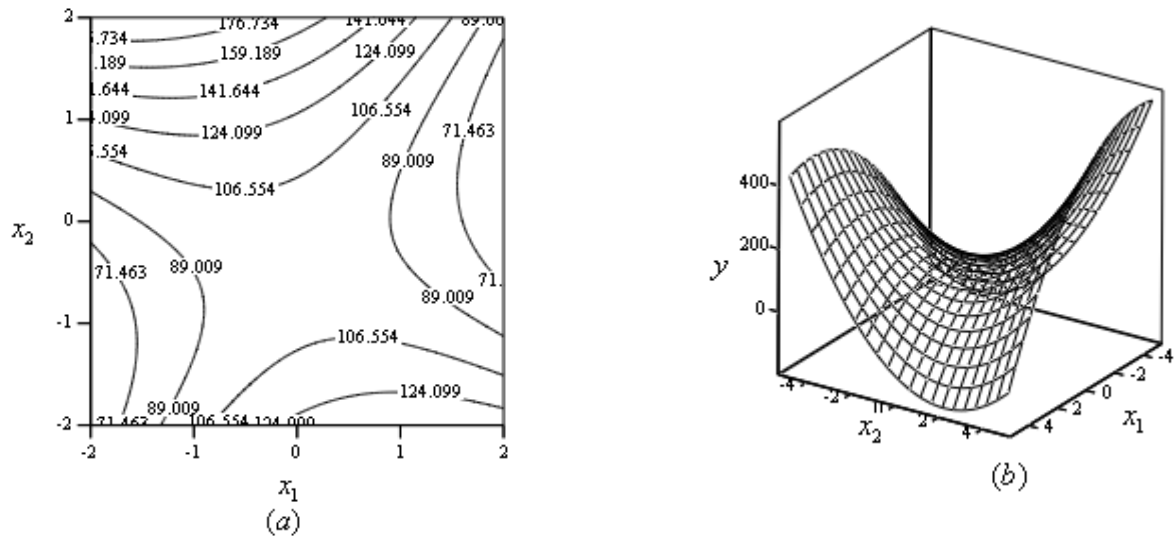


Figura 2.9 Sistema de segundo orden mostrando un punto de silla (a) Gráfico de Contorno (b) Superficie de Respuesta.

El resultado de derivar e igualar a cero dichas derivadas es el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{aligned} 16x_1 - 12x_2 &= -5 \\ 12x_1 + 24x_2 &= 10 \end{aligned}$$

Del sistema anterior se obtiene el punto estacionario

$$x_1 = 0, \quad x_2 = \frac{5}{12}$$

Sustituyendo estos valores en el modelo de segundo orden, la respuesta estimada para el punto estacionario está dada por: $\hat{y} = 102.08$.

El análisis gráfico, incluyendo mapas de contornos, juegan un importante papel, aunque, lo mejor es un análisis formal. Esto es particularmente importante cuando varias variables en el diseño ($k > 2$) son involucradas. A menudo la naturaleza del sistema es ilustrado a través de la combinación de técnicas analíticas y despliegues gráficos. Además, es necesario para el científico o ingeniero usar una optimización limitada para llegar a las condiciones de operación potenciales. Esto es particularmente cierto cuando el punto estacionario es un punto de silla o un punto máximo o mínimo de respuesta que reside fuera de la región experimental.

2.3.3 Forma analítica para aproximar un modelo de segundo orden

Considerando de nuevo la ecuación del modelo de superficie de respuesta de segundo orden (2.17). Consideremos el modelo adecuado en notación matricial como:

$$\hat{y} = b_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} \quad \text{Ecuación 2.18}$$

Donde b_0 , \mathbf{b} , y $\hat{\mathbf{B}}$ son los estimadores del intercepto, coeficientes lineales, y los coeficientes de segundo orden, respectivamente. Es decir $\mathbf{x}' = [x_1, x_2, \dots, x_k]$, $\mathbf{b}' = [b_1, b_2, \dots, b_k]$, y $\hat{\mathbf{B}}$ es la matriz simétrica $k \times k$

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12}/2 & \cdots & b_{1k}/2 \\ & b_{22} & \cdots & b_{2k}/2 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & b_{kk} \end{bmatrix} \quad \text{La matriz es simétrica. Ecuación 2.19}$$

2.3.3.1 Localización del punto estacionario.

Para dar una expresión general de la posición del punto estacionario, \mathbf{x}_s , podemos derivar \hat{y} en la ecuación (2.18) con respecto a \mathbf{x} y obtener:

$$\partial \hat{y} / \partial \mathbf{x} = \mathbf{b} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

Haciendo la derivada igual a cero, podemos resolver el sistema del punto estacionario

$$\mathbf{x}_s = -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{B}}^{-1}\mathbf{b} \quad \text{Ecuación 2.20}$$

La respuesta predicha del punto estacionario es:

$$\begin{aligned} \hat{y}_s &= b_0 + \mathbf{x}'_s\mathbf{b} + \mathbf{x}'_s\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}_s \\ &= b_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}'_s\mathbf{b} \end{aligned}$$

2.3.3.2 La naturaleza del punto estacionario (Análisis Canónico).

La naturaleza del punto estacionario es determinada por los signos de los autovalores de la matriz $\hat{\mathbf{B}}$. Resulta que las magnitudes relativas de estos autovalores son útiles para la total interpretación. Por ejemplo, sea \mathbf{P} la matriz de $k * k$, cuyas columnas son los autovectores normalizados asociados a los autovalores de $\hat{\mathbf{B}}$. Sabemos que:

$$\mathbf{P}\hat{\mathbf{B}}\mathbf{P} = \mathbf{\Lambda} \quad \text{Ecuación 2 .21}$$

Donde $\mathbf{\Lambda}$ es una matriz diagonal conteniendo los autovalores de $\hat{\mathbf{B}}$ como elementos principales de la diagonal. Ahora si trasladamos el modelo de la ecuación (2.18) a un nuevo centro, es decir el punto estacionario, y giramos los ejes correspondientes a los ejes principales del contorno del sistema, tenemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{z} &= \mathbf{x} - \mathbf{x}_s \quad \text{ya que } \mathbf{x} = \mathbf{z} + \mathbf{x}_s \\ \mathbf{w} &= \mathbf{P}'\mathbf{z} \quad \text{Ecuación 2 .22} \end{aligned}$$

El proceso es ilustrado en la figura 2.10. La traslación da el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} \hat{y} &= b_0 + (\mathbf{z} + \mathbf{x}_s)'\mathbf{b} + (\mathbf{z} + \mathbf{x}_s)'\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{z} + \mathbf{x}_s) \\ &= \left[b_0 + \mathbf{x}_s'\mathbf{b} + \mathbf{x}_s'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}_s \right] + \mathbf{z}'\mathbf{b} + \mathbf{z}'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{z} + 2\mathbf{x}_s'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{z} \\ &= \hat{y}_s + \mathbf{z}'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{z} \end{aligned}$$

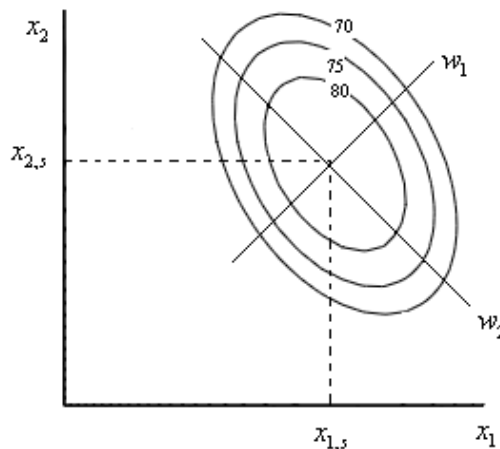


Figura 2.10 Forma Canónica de un Modelo de Segundo Orden

Observe que se ha utilizado $2\hat{\mathbf{x}}_s' \hat{\mathbf{B}} \mathbf{z} = -\mathbf{z}' \mathbf{b}$ que se obtiene de la ecuación (2.20). La rotación proporciona la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \hat{y} &= \hat{y}_s + \mathbf{w}' \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{B}} \mathbf{P} \mathbf{w} \\ &= \hat{y}_s + \mathbf{w}' \hat{\Lambda} \mathbf{w} \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.23}$$

Los ejes \mathbf{w} son los principales ejes del contorno del sistema. La ecuación (2.23) puede ser escrita

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2 \quad \text{Ecuación 2.24}$$

Donde \hat{y}_s es la respuesta estimada del punto estacionario y $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ son los autovalores de $\hat{\mathbf{B}}$. Las variables w_1, w_2, \dots, w_k son llamadas variables canónicas.

La traslación y rotación se describe en la ecuación (2.24). Esta ecuación describe fácilmente la naturaleza del punto estacionario y la naturaleza del sistema alrededor del punto estacionario. Los signos de los λ 's determinan la naturaleza de $\hat{\mathbf{x}}_s$ y la magnitud relativa de los autovalores ayuda al usuario a mejorar el entendimiento del sistema de respuesta:

1. Si $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ son todos negativos, el punto estacionario es un punto de respuesta máxima.
2. Si $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ son todos positivos, el punto estacionario es un punto de respuesta mínimo.
3. Si $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ son mezclados en signos, el punto estacionario es un punto de silla.

La traslación y rotación total de los ejes es llamada análisis canónico del sistema de respuesta. Obviamente, si un sistema de silla ocurre, el experimentador a menudo será

guiado a una alternativa para el tipo de análisis. Sin embargo, si un máximo o un mínimo residen en \mathbf{x}_s , el análisis canónico puede ser útil. Esto es cierto aún cuando se está tratando con un número relativamente pequeño de variables en el diseño. Por ejemplo, supongamos $k=3$ y buscamos un valor grande para la respuesta. Supongamos también que \mathbf{x}_s es un punto de respuesta máxima (los tres autovalores son negativos) pero $|\lambda_1| \cong 0$ y $|\lambda_2| \cong 0$. Lo que implica que existe una considerable flexibilidad en localizar un conjunto aceptable de condiciones de operación. Es decir, existe un plano entero en vez de solo un punto donde la respuesta se aproxima al valor máximo. Es simple ver que las condiciones descritas por $w_3 = 0$ puede de hecho describir un conjunto de condiciones cercanas a la respuesta máxima.

$$w_3 = \mathbf{p}_3' \begin{bmatrix} x_1 - x_{1,s} \\ x_2 - x_{2,s} \\ x_3 - x_{3,s} \end{bmatrix} = 0$$

Ahora, $w_3 = 0$ describe el plano

Donde el vector \mathbf{p}_3 es el autovector normalizado asociado con el autovalor negativo λ_3 .

Ejemplo 2.5 Análisis Canónico.

La tabla 2.7 presenta los datos resultados de una investigación en el efecto de dos variables. Supongamos un proceso químico en el cual la reacción de la temperatura y la concentración del reactivo fueron estudiadas, y la respuesta de la variable fue la conversión porcentual de un proceso químico. Usamos el diseño central compuesto mostrado en la tabla 2.5.

Recordemos que se nos proporcionará el nivel alto (1) y bajo (-1) que se utiliza en el proceso con los cuales estandarizamos o codificamos nuestras variables.

$$x_{cod} = \frac{x_{nat} - \text{valor central}}{\text{distancia del centro al nivel alto}}$$

Para poder hacer el análisis de un modelo de segundo orden necesitamos los valores axiales 1.414 por ejemplo, así que con este valor volvemos al valor natural, por ejemplo:

Sustituyendo los valores que conocemos y escribiendo el que buscamos $1.414 = \frac{x_{nat} - 225}{25}$

despejando tenemos que $x_{nat} = 260.35$, también para $-1.414 = \frac{x_{nat} - 20}{5}$, tenemos que $x_{nat} = 12.93$ y así sucesivamente.

Tabla 2.5: Diseño central compuesto para el ejemplo de un proceso químico.

Observaciones	Corrida(*)	A		B		
		Temperatura (°C)		x_1	x_2	y
		ξ_1	ξ_2			
1	4	200	15	-1	-1	43
2	12	250	15	1	-1	78
3	11	200	25	-1	1	69
4	5	250	25	1	1	73
5	6	189.65	20	-1.414	0	48
6	7	260.35	20	1.414	0	76
7	1	225	12.93	0	-1.414	65
8	3	225	27.07	0	1.414	74
9	8	225	20	0	0	76
10	10	225	20	0	0	79
11	9	225	20	0	0	83
12	2	225	20	0	0	81

(Orden de la corrida, es decir la observación 7 representa la corrida 1)*
 El modelo ajustado usando SPSS V. 15 (Análisis de regresión) es:

$$\hat{y} = 79.75 + 9.836x_1 + 4.22x_2 - 8.88x_1^2 - 5.13x_2^2 - 7.75x_1x_2$$

Y la gráfica del contorno para este modelo está dada en la figura 2.11

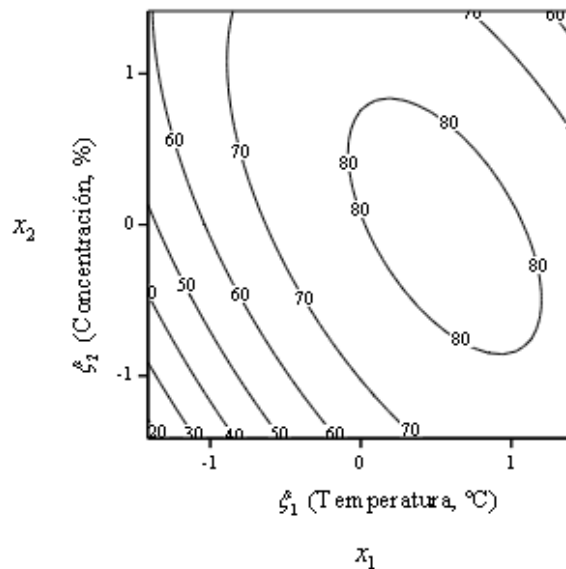


Figura 2.11 Gráfica de contorno para el ejemplo 2.5

Note que hay cinco niveles (-1.414, -1, 0, 1, 1.414) en el diseño de experimentos que implican tres componentes. Estos son (i) Un factorial 2^2 , en niveles ± 1 , (ii) Los puntos axiales del arreglo dado por

\mathbf{x}_1	\mathbf{x}_2
-1.414	0
1.414	0
0	-1.414
0	1.414

y (iii) cuatro corridas de centro (Ver sección 1.2.4 Diseño Central Compuesto). Una descripción gráfica de este diseño fue dado en la figura 1.31 (Capítulo 1). El diseño esencialmente consiste de ocho puntos espaciados equitativamente en un círculo de radio $\sqrt{2}$ y cuatro corridas en el centro del diseño. Los cuatro puntos del diseño mostrados sobre la figura 1.31 son llamados puntos axiales. Esta terminología resulta del hecho que los puntos descansan sobre el eje x_1 o el eje x_2 .

Resulta que nada de la información en cuanto a la interacción de $\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2$ es proveída por esta parte del diseño. Sin embargo, la parte axial permite una estimación eficiente de los términos cuadráticos puros, esto es x_1^2 y x_2^2 .

Análisis Canónico. Iniciamos el análisis canónico para determinar la posición del punto estacionario.

De ecuación 2.19 tenemos: $\hat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} -8.88 & -3.875 \\ -3.875 & -5.13 \end{bmatrix}$, $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 9.83 \\ 4.22 \end{bmatrix}$

Y de la ecuación (2.20)

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_s &= -\frac{1}{2} \hat{\mathbf{B}}^{-1} \mathbf{b} \\ &= -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -0.16798 & 0.12689 \\ 0.12689 & -0.29078 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9.83 \\ 4.22 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.5579 \\ -0.0101 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{1,s} \\ \mathbf{x}_{2,s} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Donde la predicción en el punto estacionario es $\hat{y}_s = 82.47$ (sustituyendo los valores de $\mathbf{x}_{1,s}$ y $\mathbf{x}_{2,s}$ en el modelo), en las unidades naturales, el punto estacionario es:

$$\text{Temperatura} = 225 + 25x_{1,s} = 225 + 25(0.5579) = 238.9^{\circ}C$$

$$\text{Concentración} = 20 + 5x_{2,s} = 20 + 5(-0.0101) = 19.75\%$$

Recordemos que las variables se codifican $xcod = \frac{xnat - \text{valor central}}{\text{distancia del centro al nivel alto}}$

Estamos de acuerdo, en que este valor está cerca del óptimo observado en la figura 2.11.

Los autovalores de la matriz $\hat{\mathbf{B}}$ son la solución de la ecuación

$$|\hat{\mathbf{B}} - \lambda \mathbf{I}| = 0$$

o

$$\begin{vmatrix} -8.88 - \lambda & -3.875 \\ -3.875 & -5.13 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Esto se reduce a la ecuación cuadrática

$$\lambda^2 + 14.01\lambda + 30.54 = 0$$

Las raíces de esta ecuación, $\lambda_1 = -11.3098$ y $\lambda_2 = -2.7002$ son los autovalores. Así, la forma canónica del modelo de segundo orden es:

$$\begin{aligned} \hat{y} &= \hat{y}_s + \lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 \\ &= 82.47 - 11.3098 w_1^2 - 2.7002 w_2^2 \end{aligned}$$

Como ambos valores son negativos, el punto estacionario es un máximo (como es obvio de la inspección de la figura 2.11). Además, como $|\lambda_1| > |\lambda_2|$, la superficie es un poco alargada en la dirección canónica de w_2 .

2.3.3.3 El Sistema de Cadena (o cordillera).

Las variaciones de la superficie en el mínimo puro, máximo puro y el punto de silla son bastantes comunes. De hecho, sugerimos tal situación anteriormente donde hubo $k = 3$ variables y dos de los autovalores fueron aproximadamente cero ($|\lambda_1| \cong 0, |\lambda_2| \cong 0$). Un autovalor pequeño (esencialmente cero) implica un considerable alargamiento de la superficie de respuesta en esa dirección canónica, resultando un sistema de cadena.

Cadena Estacionaria.

Consideremos la situación mostrada en la **figura 2.12** para $k = 2$, donde $\lambda_1 < 0$ y $\lambda_2 < 0$ con $|\lambda_1| \cong 0$. El modelo canónico para esta superficie es $\hat{y} = \hat{y}_s + \lambda_2 w_2^2$.

El punto estacionario está en la región del diseño experimental. Este tipo de superficie de respuesta es un sistema de cadena estacionaria. El punto estacionario es un máximo, y aun existe un máximo aproximado en una línea dentro de la región del diseño. Es decir, hay esencialmente una línea de máximos.

Considerando las posiciones en la región del diseño, donde $w_2 = 0$; la insensibilidad de la respuesta a un movimiento hacia delante del eje w_1 resulta en un pequeño cambio en la respuesta como nos movamos fuera del punto estacionario. Los contornos de respuestas constantes son elipses concéntricas que son bastante alargadas a lo largo del eje w_1 .

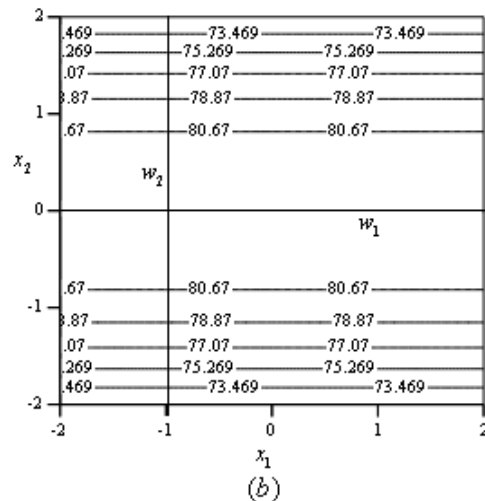
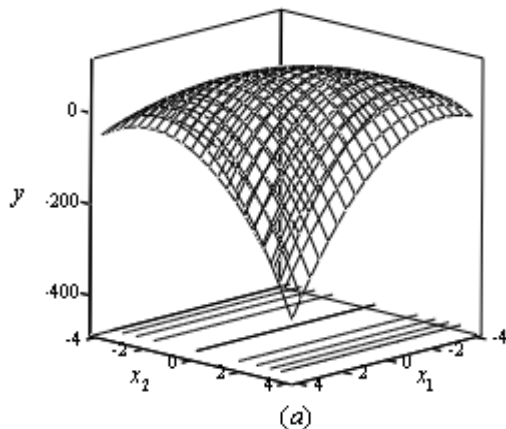


Figura 2.12 Sistema estacionario de cadena para $k = 2$. (a) Superficie de Respuesta. (b) Gráfica de contorno

Escalamiento de cadena.

Existen otros sistemas de cadena, que señalan ciertos movimientos en la estrategia para el analista. Mientras la cadena estacionaria sugiera flexibilidad en la elección de las condiciones de operación, el escalamiento (o caída) de la cadena, sugiere los movimientos fuera de la región experimental para que la experimentación adicional pueda garantizar consideraciones. Por ejemplo, considere la situación para $k = 2$ en la cual el punto estacionario es remoto en la región experimental. Se asume que necesitamos maximizar la respuesta. Sean λ_1 y λ_2 negativos, asumimos a λ_1 cercano a cero. La condición se muestra en la figura 2.13. La lejanía del punto estacionario de la región experimental podría sugerir que un movimiento a lo largo de w_1 puede resultar en un incremento en los valores de respuesta. Ciertamente el escalamiento (o caída) de cadena a menudo es una señal para el investigador que ha hecho una selección defectuosa o prematura de la región del diseño experimental. Esto no está fuera de lo común en aplicaciones de MSR.

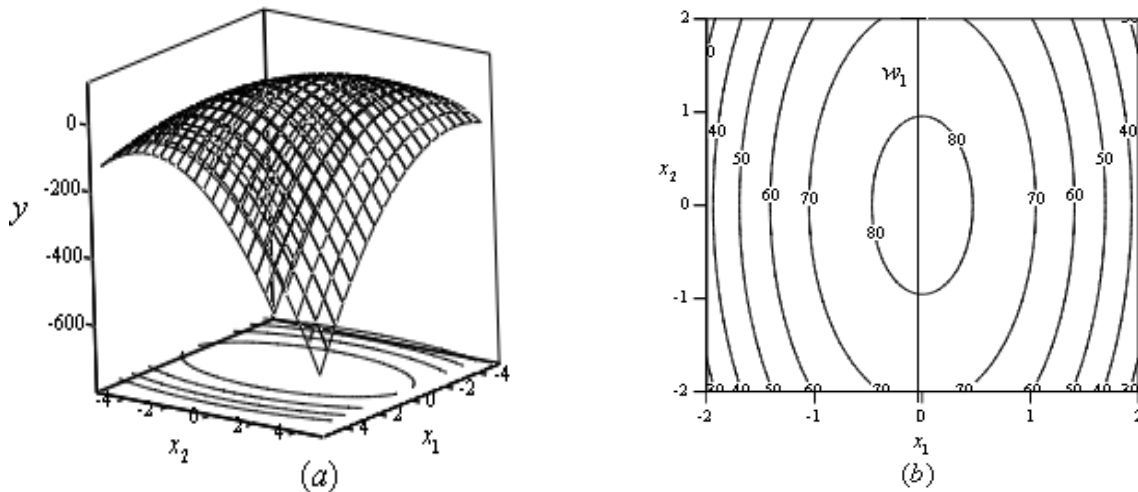


Figura 2.13 Sistema de escalamiento de cadena para $k = 2$. (a) Superficie de respuesta. (b) Gráfica de contorno.

El escalamiento de cadena es señalado por un punto estacionario que es remoto de la región del diseño. Además, uno de los autovalores es cercano a cero. El límite de condición para las tres variables es mostrado en la figura 2.14. Los autovalores que acompañan a w_1 , w_2 y w_3 son $(-, -, \cong 0)$, esto significa que los dos primeros autovalores son negativos, pero el autovalor que acompaña a w_3 es bastante cercano a cero, lo que resulta en un sistema de cadena y esto implica que una experimentación a lo largo del eje w_3 hacia el punto estacionario es lo sugerido.

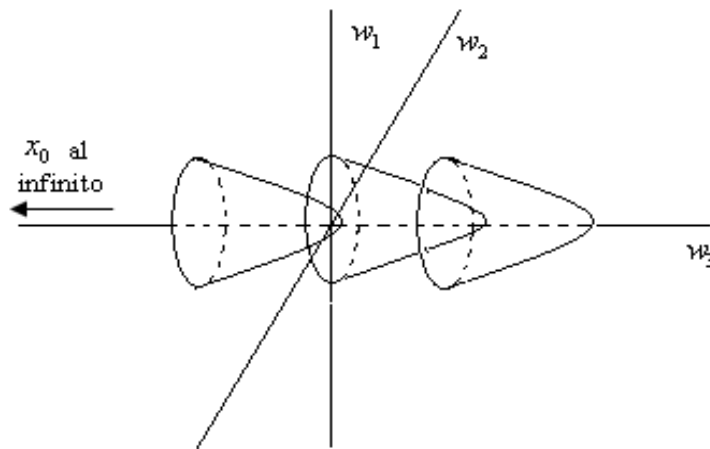


Figura 2.14 Condiciones de escalamiento de cadena en $k = 3$ variables.

Ejemplo 2.6 Gráfica de contorno de los datos de supervivencia.

Los siguientes datos fueron tomados de un experimento diseñado para estimar las condiciones óptimas para el almacenamiento de semen de bovino para obtener una máxima supervivencia. Las variables bajo estudio son porcentaje de citrato de sodio, porcentaje de glicerol y el equilibrio de tiempo en horas. La respuesta observada es el porcentaje de

supervivencia de espermatozoides móviles. Los datos con los niveles del diseño en unidades codificadas se muestran en la tabla 2.6.

Los niveles del diseño guardan relación con los niveles naturales de la siguiente manera:

	-2	-1	0	1	2
Citrato de sodio	1.6	2.3	3.0	3.7	4.4
Glicerol	2.0	5.0	8.0	11.0	14.0
Tiempo de equilibrio	4.0	10.0	16.0	22.0	28.0

Note que el diseño consiste de un componente factorial 2^3 , una corrida de centro, y seis puntos axiales.

Tabla 2.6 Supervivencia de datos para el ejemplo 2.6

Combinación de tratamiento	% de Citrato De sodio (x_1)	% de Glicerol (x_2)	Tiempo de Equilibrio (x_3)	% de Supervivencia
1	-1	-1	-1	57
2	1	-1	-1	40
3	-1	1	-1	19
4	1	1	-1	40
5	-1	-1	1	54
6	1	-1	1	41
7	-1	1	1	21
8	1	1	1	43
9	0	0	0	63
10	-2	0	0	28
11	2	0	0	11
12	0	-2	0	2
13	0	2	0	18
14	0	0	-2	56
15	0	0	2	46

La estimación de los parámetros se hizo empleando el programa del SPSS V.15, el resultado se presenta a continuación:

Coefficientes

Model		Coeficientes no estandarizados		Coeficientes estandarizados	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	66.111	11.522		5.738	.002
	x1	-1.312	3.266	-.076	-.402	.704
	x2	-2.312	3.266	-.134	-.708	.511
	x3	-1.062	3.266	-.061	-.325	.758
	x1cuadra	-11.264	3.925	-.780	-2.870	.035
	x2cuadra	-13.639	3.925	-.944	-3.475	.018
	x3cuadra	-3.389	3.925	-.235	-.863	.427
	x1x2	9.125	4.619	.373	1.976	.105
	x1x3	.625	4.619	.026	.135	.898
	x2x3	.875	4.619	.036	.189	.857

Las 15 corridas del experimento, implican tres factores en cinco niveles uniformemente espaciados, es otro ejemplo del diseño central compuesto. La función de respuesta ajustada para el modelo de segundo orden está dada por:

$$\hat{y} = 66.111 - 1.312x_1 - 2.312x_2 - 1.062x_3 - 11.264x_1^2 - 13.639x_2^2 - 3.389x_3^2 + 9.125x_1x_2 + 0.625x_1x_3 + 0.875x_2x_3$$

De la ecuación (2.20) el punto estacionario está dado por:

$$\mathbf{x}_s = \begin{bmatrix} x_{1,s} \\ x_{2,s} \\ x_{3,s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1158 \\ -0.1294 \\ -0.1841 \end{bmatrix}$$

Y los autovalores de la matriz $\hat{\mathbf{B}}$ son: $\lambda_1 = -3.327$, $\lambda_2 = -7.797$, $\lambda_3 = -17.168$

El análisis del punto estacionario y canónico indica que el punto estacionario es un punto de respuesta máxima estimado (Ya que los λ son todos negativos), que es, un porcentaje de supervivencia máximo estimado. La respuesta estimada en el máximo es $\hat{y} = 66.435$.

Como resultado, la condición estimada buscada por el experimentador es encontrada dentro de la región del diseño experimental. La figura 2.15(a) muestra los contornos de la superficie de respuesta en la vecindad del óptimo con un tiempo de equilibrio de 14.9 hrs.

Es decir, $x_3 = 14.9$ por lo que el modelo viene dado por:

$$\hat{y} = 66.111 - 1.312x_1 - 2.312x_2 - 1.062x_3 - 11.264x_1^2 - 13.639x_2^2 - 3.389x_3^2 + 9.125x_1x_2 + 0.625x_1x_3 + 0.875x_2x_3$$

Sustituyendo $x_3 = 14.9$

$$\hat{y} = 66.111 - 1.313x_1 - 2.313x_2 - 1.063(14.9) - 11.264x_1^2 - 13.639x_2^2 - 3.357(14.9)^2 + 9.125x_1x_2 + 0.625x_1(14.9) + 0.875x_2(14.9)$$

Será ahora: $\hat{y} = -695.02 + 7.9995x_1 + 10.7245x_2 - 11.264x_1^2 - 13.639x_2^2 + 9.125x_1x_2$

Igual sucede en cada una de las demás gráficas (b) $x_3 = 14.0hrs$ (c) Tiempo $x_3 = 12.0hrs$ (d) $x_3 = 10.0hrs$ respectivamente.

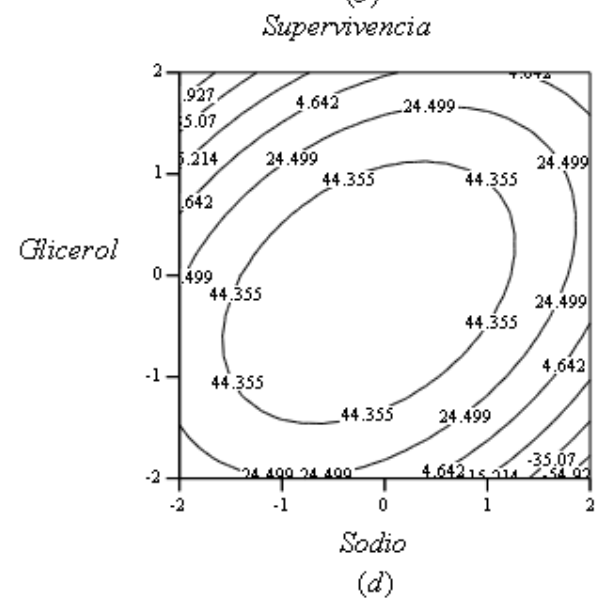
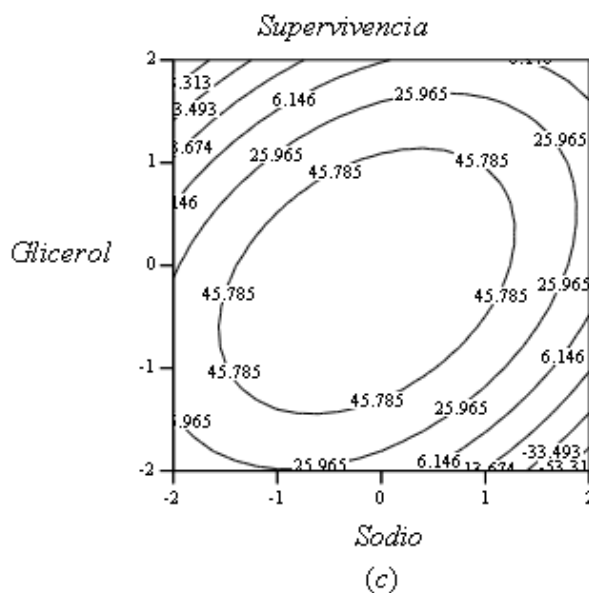
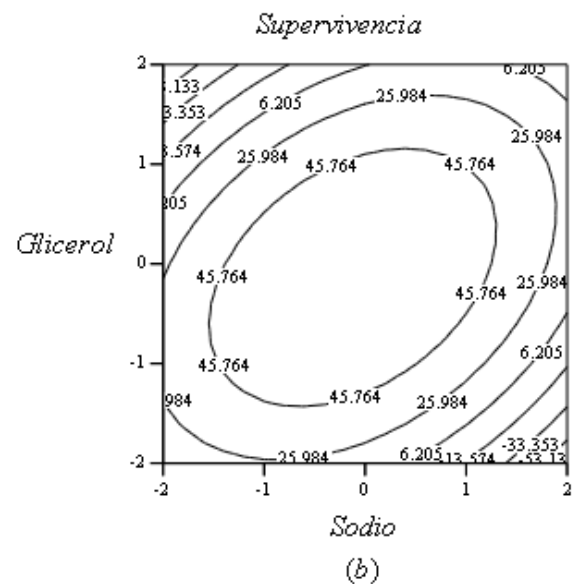
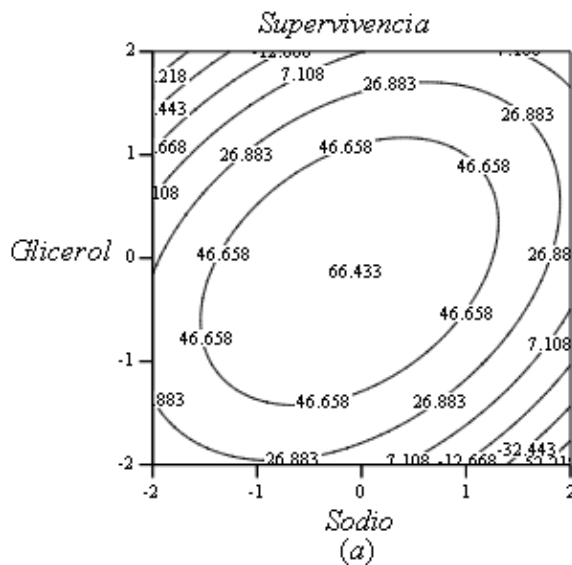


Figura 2.15 Gráficas de contorno constantes del porcentaje de supervivencia, Ejemplo 2.6 (a) Tiempo 14.9 hrs. (b) tiempo 14.0 hrs. (c) Tiempo 12.0 hrs. (d) Tiempo 10.0 hrs.

Claramente, en este caso, el investigador puede estar bastante satisfecho para operar en las condiciones del punto estacionario calculado. Sin embargo, debido a las consideraciones económicas y condiciones científicas del problema, a menudo es de interés determinar cuan sensible es la respuesta estimada al movimiento lejano del punto estacionario. En cuanto a esto, el mapeo de contorno puede ser muy útil. Por ejemplo, en este caso, el punto estacionario x_s corresponde al 2.9% del citrato de sodio, 7.61% de glicerol, y 14.9 hrs del tiempo de equilibrio. El tiempo de equilibrio es demasiado desde un punto de vista práctico, aun cuando el nivel óptimo está dentro de la región del diseño experimental. La curiosidad científica sugiere la necesidad para determinar cuánto se ha perdido en estimar el % de supervivencia, si el tiempo de equilibrio es puesto en 14, 12 y 10 hrs. Un procedimiento analítico, daría la respuesta, pero uno gana más información del conjunto de cuadros producidos por el mapeo de contornos. Las figuras 2.15 (b), 2.15 (c) y 2.15 (d) revela el mapa de dos dimensiones dados por los contornos de las constantes estimadas del porcentaje de supervivencia para valores fijos del tiempo de equilibrio de 14, 12, y 10 hrs, respectivamente. Para el tiempo de equilibrio de 14 hrs, el tiempo máximo estimado de supervivencia es muy cercano a 65%. De hecho, la figura 2.15 (d) revela que un tiempo de equilibrio tan bajo como 10 hrs puede resultar en un tiempo de supervivencia estimado que excede el 64%. Se podría recomendar usar valores del tiempo de equilibrio considerablemente debajo del óptimo y no se perdería mucho en el % de supervivencia.

2.3.4 Análisis de Cadena (o cordillera) a través de gráficas de contornos.

A menudo el analista se encuentra con situaciones en las cuales el punto estacionario no es esencialmente un valor de interés. Por ejemplo, el punto estacionario, puede ser un punto de silla, que por supuesto no es ni máximo ni mínimo de la respuesta estimada. De hecho, aun si uno encuentra un punto estacionario que es un punto de respuesta máximo o mínimo, pero está fuera de la región experimental, no se aconsejaría como candidato para la condición de operaciones porque el modelo adecuado no es confiable fuera de la región del experimento. Ciertamente el uso del mapa de contorno puede ser beneficioso en esta

situación. Por supuesto, la meta del análisis es determinar la naturaleza del sistema dentro o en el perímetro de la región experimental. Como consecuencia, un método útil involucra un algoritmo restringido de optimización. El algoritmo es particularmente útil cuando varias variables del diseño están en el modelo de superficie de respuesta. La metodología, llamada análisis de cadena, produce un lugar geométrico de puntos, cada uno es un punto de respuesta máxima, con la restricción que el punto reside en una esfera de un cierto radio. Por ejemplo, el diseño de variables para $k = 2$ un típico análisis de cadena podría producir el lugar geométrico de puntos como en la **figura 2.16**. El origen es $x_1 = x_2 = 0$, el centro del diseño, un punto dado, es decir \mathbf{x}_p , es un punto de respuesta estimado máximo (o mínimo) con la restricción que el punto debe estar en la esfera de radio $(\mathbf{x}_p - \hat{\mathbf{x}}_p)^{1/2} = r_p$. En otras palabras, todos los puntos son puntos estacionarios restringidos. Ciertamente, si el punto estacionario del sistema no es un máximo (o mínimo) dentro de la región experimental, entonces el punto en el perímetro del diseño, es el punto de respuesta estimada máximo (o mínimo) sobre todos los puntos en el camino. Este, puede ser visto como un candidato razonable para recomendar las condiciones de operación.

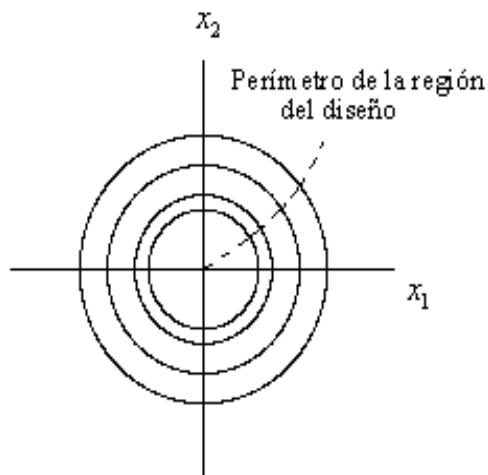


Figura 2.16 Un análisis de cadena en un lugar geométrico de puntos para $k = 2$.

2.3.5 Importancia del análisis de cadena.

El propósito del análisis de cadena es fijar el punto estacionario dentro de la región experimental. La salida del análisis es el conjunto de coordenadas máxima (o mínima) con

la respuesta predicha, \hat{y} , en cada uno de los puntos calculados en la dirección. De esto, el analista obtiene información interesante suponiendo los papeles de los diseños de las variables dentro de la región experimental. A él o ella le son sugeridas algunas localizaciones del candidato para las condiciones de operación. Esto no debe inferir en la información adicional que no venga de los mapas de contorno. Cuando uno se encuentra con una gran cantidad de variables en el diseño, muchos mapas de contornos son requeridos. La salida típica del análisis de cadena simplemente podría ser un conjunto de trazos de dos dimensiones, a pesar del valor de k . Por ejemplo, considere las figuras 2.17 y 2.18.

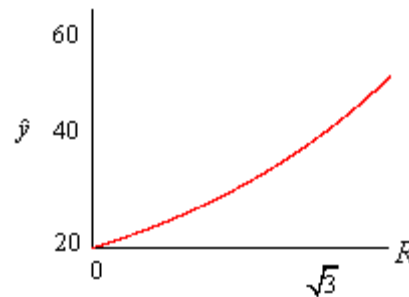


Figura 2.17 Respuesta máxima graficada contra el radio

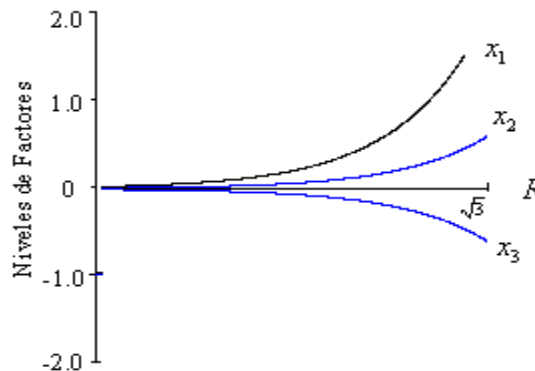


Figura 2.18 Gráfica de condiciones restringidas contra el radio

En este caso existen tres variables en el diseño; asumiremos que el perímetro del diseño experimental es de radio $\sqrt{3}$. Si uno busca maximizar la respuesta, un candidato del conjunto de condiciones es dado por $x_1 \cong 1.5, x_2 \cong 0.4, x_3 \cong -0.7$ la respuesta máxima es

$\hat{y} = 60$. Otra característica útil del análisis de cadena es que se pueden obtener algunas instrucciones relacionadas donde los experimentos futuros deberían ser hechos en orden para lograr condiciones que son más deseables que lo observado en el experimento actual. Se debe mantener en mente al análisis de cadena como una herramienta formal que es más ideal cuando la región del diseño es esférica, a menudo el diseño que ha sido usado no es esférico más bien es de naturaleza cuboidal. En el último caso, se puede obtener información importante sobre el comportamiento del sistema de respuesta dentro de la región experimental, particularmente cuando se encuentran varias variables importantes en el diseño.

2.3.6 Desarrollo Matemático del Análisis de Cadena.

En esta sección esquematizaremos el desarrollo del análisis de cadena, muchos de los detalles son similares a los utilizados en el modelo de segundo orden de pasos ascendentes. Recordemos que el objetivo del método de los pasos ascendentes es proveer un camino para un producto mejorado en el caso de un sistema que no se había estudiado. El análisis de cadena es generalmente usado cuando el experimentador observa que está dentro o muy cerca de la región del óptimo. Sin embargo, ambos son métodos limitados de optimización. Consideremos el modelo de superficie de respuesta de segundo orden dado en la ecuación

$$(2.18) \quad \hat{y} = b_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

Maximizamos \hat{y} bajo la restricción $\mathbf{x}'\mathbf{x} = R^2$

Donde $\mathbf{x}' = [x_1, x_2, \dots, x_k]$ y el centro de la región del diseño será: $x_1 = x_2 = \dots = x_k = 0$.

Usando los multiplicadores de lagrange, necesitamos diferenciar

$$L = b_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} - \mu(\mathbf{x}'\mathbf{x} - R^2) \quad \text{Ecuación 2 .25}$$

Derivando la función L con respecto al vector \mathbf{x} , se tiene: $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} - 2\mu\mathbf{x}$

Para determinar la restricción del punto estacionario colocamos $\partial L / \partial \mathbf{x} = 0$. Esto resulta en

$$(\hat{\mathbf{B}} - \mu I)\mathbf{x} = -\frac{1}{2}\mathbf{b} \quad \text{Ecuación 2 .26}$$

Como consecuencia, para μ fija, una solución de \mathbf{x} de la ecuación (2.26) es un punto estacionario en $R = (\mathbf{x}'\mathbf{x})^{1/2}$. Sin embargo, la solución apropiada de \mathbf{x} es la que resulta en un máximo de \hat{y} en R o un mínimo de \hat{y} en R , según sea el caso de estudio (buscar máximo o mínimo). Resulta que la elección apropiada de μ depende de los autovalores de $\hat{\mathbf{B}}$. Debemos recordar el papel importante de los autovalores en la determinación de la naturaleza del punto estacionario del sistema de respuesta. Las siguientes son reglas para la elección de los valores de μ :

1. Si μ excede al autovalor más grande de $\hat{\mathbf{B}}$, la solución de \mathbf{x} en la ecuación (2.26) resultará en un máximo absoluto para \hat{y} en $R = (\mathbf{x}'\mathbf{x})^{1/2}$.
2. Si μ es más pequeño que el menor autovalor de $\hat{\mathbf{B}}$, la solución en la ecuación (2.26) resultará en un mínimo absoluto para \hat{y} en $R = (\mathbf{x}'\mathbf{x})^{1/2}$.

El analista deseará observar resultados en un lugar geométrico de puntos como los representados en la figura (2.19). Resultará, por supuesto, la solución del radio para la ecuación (2.26) que debería caer en el intervalo $[0, R_b]$, donde R_b es un radio representando aproximadamente el límite de la región experimental. El valor de R es actualmente controlado a través de la elección de μ . En las regiones de trabajo de μ , $\mu > \lambda_k$ ó $\mu < \lambda_1$, donde λ_1 es el menor autovalor de $\hat{\mathbf{B}}$ y λ_k es el autovalor más grande de $\hat{\mathbf{B}}$, R es una función monoestimulante de μ . La figura 2.19 muestra la relación entre R y μ a través de la gama de los autovalores.

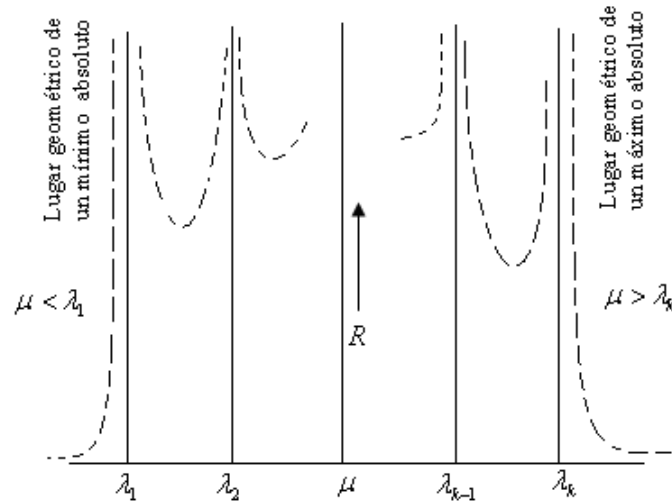


Figura 2.19 Relación entre R y μ en el análisis de cadena

Como resultado, un algoritmo calculado para el análisis de cadena consiste en la sustitución de $\mu > \lambda_k$ (para un diseño de respuesta máxima) incrementando a μ hasta el radio cerca del perímetro del diseño encontrado. Futuros incrementos en μ resulta en coordenadas que están cercanas al centro del diseño. Lo mismo se aplica para $\mu < \lambda_1$ (para buscar respuesta mínima), donde valores disminuidos de μ son requeridos.

2.4 Error Estándar de respuesta Pronosticado.

La propiedad de prueba más fundamental en cualquier modelo es el error estándar de respuesta pronosticado en algunos puntos de interés \mathbf{x} , a menudo denotado $s_{\hat{y}(\mathbf{x})}$, donde la estructura más general $\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{(m)'} \mathbf{b}$ y $\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{y}$. El vector $\mathbf{x}^{(m)}$ es una función de la posición en la cual es predicha la respuesta; la (m) indica que $\mathbf{x}^{(m)}$ es simplemente expandida para modelar el espacio de dimensión m . Por ejemplo, para $k = 2$ variables del diseño el modelo de segundo orden es:

$$\mathbf{x}^{(2)} = [1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1x_2] \quad \mathbf{b}' = [b_0, b_1, b_2, b_{11}, b_{22}, b_{12}]$$

Bajo la usual suposición de error iid (independiente idénticamente distribuida) para modelos de primer y segundo orden y por supuesto, con la suposición del error de varianza σ^2 constante, se tiene:

$$Var[\hat{y}(\mathbf{x})] = \mathbf{x}^{(m)'} (\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}^{(m)} \sigma^2$$

Como consecuencia, un error estimado estándar de $\hat{y}(\mathbf{x})$ está dado por:

$$s_{\hat{y}(\mathbf{x})} = s \sqrt{\mathbf{x}^{(m)'} (\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}^{(m)}} \quad \text{Ecuación 2 .27}$$

Donde $s = \sqrt{MS_E}$ es la raíz cuadrada del error cuadrático medio de la superficie de respuesta ajustada, esto es, para un modelo adecuado de p parámetros

$$s = \sqrt{\sum_{i=1}^k (y_i - \hat{y}_i)^2 / (n - p)}$$

El error estándar $s_{\hat{y}(\mathbf{x})}$ es usado en la construcción de límites de confianza alrededor de la respuesta pronosticada. Esto es, para $\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{(m)'} \mathbf{b}$, una predicción en alguna posición de \mathbf{x} , un intervalo de confianza del $100(1-\alpha) \%$ para la respuesta media $E(y | \mathbf{x})$ está dado por:

$$\hat{y}(\mathbf{x}) \pm t_{\alpha/2, n-p} s \sqrt{\mathbf{x}^{(m)'} (\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}^{(m)}} \quad \text{Ecuación 2 .28}$$

El valor del error estándar pronosticado $s_{\hat{y}(\mathbf{x})}$ y los correspondientes intervalos de confianza son la forma más simple de propiedades de prueba asociados con el análisis de MSR.

El error estándar puede proveer al usuario una idea de la calidad relativa de los valores de la respuesta predicha en varias posiciones del diseño de la región. Refirámonos a la tabla 2.7, la cual despliega el análisis de cadena para el ejemplo 2.7. Observe como la predicción, con esta superficie de respuesta de segundo orden se empeora cuando uno se aproxime al perímetro del diseño. Esto puede guiar, en algunos casos, a la conclusión que una elección

razonable de las condiciones de operación recomendadas podría estar más adentro del perímetro, cuando el valor predicho en el óptimo en el límite tiene un error estándar relativamente grande.

El error estándar de predicción puede ser calculado en cualquier punto que el investigador considere una posición potencialmente útil en la región del diseño.

Ejemplo 2.7 Análisis de cadena de una superficie de punto de silla.

Un proceso químico que convierte 1.2 de propanediol a 2.5 de dimethypiperazine, el objeto del experimento es determinar las condiciones óptimas del proceso, esto es, las condiciones para conversión máxima, los siguientes factores fueron estudiados:

$$x_1 = \frac{\text{cantidad}(NH_3) - 102}{51}, x_2 = \frac{\text{temperatura} - 250}{20}$$

$$x_3 = \frac{\text{cantidad}(H_2O) - 300}{200}, x_4 = \frac{\text{Presión de hidrogeno} - 850}{350}$$

Como en los ejemplos previos, el tipo de diseño usado para un modelo de segundo orden ajustado fue un diseño central compuesto. En los cuales podemos observar 25 combinaciones de tratamientos, una corrida central y ocho puntos axiales con niveles correspondientes en [-1.4, -1, 0, 1, 1.4]. Los siguientes datos son los que proporciona el experimentador, en los cuales podemos observar la matriz del diseño y el vector de observación, éstos se presentan a continuación:

$$\mathbf{D} = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1.4 & 0 & 0 & 0 \\ +1.4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1.4 & 0 & 0 \\ 0 & +1.4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1.4 & 0 \\ 0 & 0 & +1.4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1.4 \\ 0 & 0 & 0 & +1.4 \end{bmatrix} & , & \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 58.2 \\ 23.4 \\ 21.9 \\ 21.8 \\ 14.3 \\ 6.3 \\ 4.5 \\ 21.8 \\ 46.7 \\ 53.2 \\ 23.7 \\ 40.3 \\ 7.5 \\ 13.3 \\ 49.3 \\ 20.1 \\ 32.8 \\ 31.1 \\ 28.1 \\ 17.5 \\ 49.7 \\ 49.9 \\ 34.2 \\ 31.1 \\ 43.1 \end{bmatrix}
 \end{matrix}$$

El modelo ajustado de segundo orden está dado por:

$$\begin{aligned}
 \hat{y} = & 40.198 - 1.511x_1 + 1.284x_2 - 8.739x_3 + 4.955x_4 - 6.332x_1^2 \\
 & + 2.194x_1x_2 - 4.292x_2^2 - 0.144x_1x_3 + 8.006x_2x_3 + 0.0196x_3^2 \\
 & + 1.581x_1x_4 + 2.806x_2x_4 + 0.294x_3x_4 - 2.506x_4^2
 \end{aligned}$$

Por medio de este modelo de segundo orden logramos calcular la matriz $\hat{\mathbf{B}}$ de la cual obtenemos los autovalores.

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} -6.332 & 1.097 & -0.072 & 0.7905 \\ & -4.292 & 4.003 & 1.403 \\ & & 0.0196 & 0.147 \\ & & & -2.506 \end{bmatrix} \text{ es simétrica.}$$

El punto estacionario (en unidades de diseño) es dado por:

$x_{1,s} = 0.265, x_{2,s} = 1.034, x_{3,s} = 0.291$ y $x_{4,s} = 1.668$ dichos valores se obtienen de la ecuación $\mathbf{x}_s = -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{B}}^{-1}\mathbf{b}$ (2.20). La respuesta del punto estacionario es $\hat{y}_s = 43.52$, y los autovalores de la matriz $\hat{\mathbf{B}}$ son $-7.55, -6.01, -2.16$ y 2.60 , indicando un punto de silla (Ya que los signos de los autovalores se mezclan). Indican que un análisis de cadena podría revelar un razonable candidato para las condiciones de operación, puesto que hay una contradicción en cuanto al resultado de la tabla 2.7 (Indica un máximo) y el resultado de los autovalores (Indican un punto de silla), por lo que nuestro punto estacionario puede ser engañoso en el límite del diseño experimental. En este caso los puntos de diseño factoriales 2^4 de la matriz \mathbf{D} están a una distancia de dos unidades del centro del diseño, note que entre los candidatos razonables para las coordenadas, tenemos:

$$x_1 = -0.130824, x_2 = -0.786066, x_3 = -1.828127, x_4 = 0.151447 \text{ (ver tabla 2.7).}$$

Como podemos observar en la tabla 2.7 estos valores son los que generan un $\hat{y}_s = 64.61$ con un radio de dos unidades. Note también que el error estándar de predicción estimado en esta posición está dado por $s_{\hat{y}} = 16.543$.

Observe como el error estándar comienza a crecer más rápidamente después de un radio de 1.4, y si elegimos a los candidatos siguientes, con estos valores se perdería un objetivo de

lograr una estimación con el menor error posible. Recordemos que la distancia axial en el diseño es de 1.4, y los puntos factoriales están a una distancia de 2.0. Resulta que, una mejor elección de la distancia axial habría sido 2.0. Esto, ya que nuestro valor estimado es de 64.61 mucho mejor que el 55.62 del 1.4, pero del error estándar de predicción se recomienda las condiciones en un radio de 1.4 a 1.5, donde la respuesta predicha es más pequeña, pero el error estándar es considerablemente pequeño. Este criterio juega un papel crítico en discusiones que están relacionadas con la elección del diseño de experimento y la comparación entre diseño experimentales.

Tabla 2.7 Análisis de cadena para datos del ejemplo 2.7

Radios	x_1	x_2	x_3	x_4
0	0	0	0	0
0.100000	-0.012558	0.006391	-0.087085	0.047091
0.200000	-0.021700	0.001210	-0.177274	0.090009
0.300000	-0.028715	-0.014124	-0.269867	0.127073
0.400000	-0.034566	-0.037947	-0.364067	0.157545
0.500000	-0.039887	-0.068576	-0.459104	0.181466
0.600000	-0.045054	-0.104485	-0.554349	0.199375
0.700000	-0.050267	-0.144399	-0.649356	0.212036
0.800000	-0.055621	-0.187319	-0.743845	0.220255
0.900000	-0.061150	-0.232486	-0.837668	0.224773
1.000000	-0.066860	-0.279337	-0.930765	0.226226
1.100000	-0.072739	-0.327459	-1.023128	0.225144
1.200000	-0.078773	-0.376547	-1.114783	0.221959
1.300000	-0.084944	-0.426379	-1.205773	0.217020
1.400000	-0.091237	-0.476786	-1.296146	0.210608
1.500000	-0.097636	-0.527644	-1.385954	0.202951
1.600000	-0.104128	-0.578859	-1.475246	0.194235
1.700000	-0.110702	-0.630359	-1.564069	0.186612
1.800000	-0.117348	-0.682087	-1.652464	0.174207
1.900000	-0.124058	-0.734001	-1.740472	0.163123
2.000000	-0.130824	-0.786066	-1.828127	0.151447

Radio	Respuesta Estimada	Error Estándar de predicción
0	40.198215	8.321708
0.100000	41.207095	8.304643
0.200000	42.195254	8.254609
0.300000	43.175752	8.175379
0.400000	44.159990	8.073806
0.500000	45.157604	7.960229
0.600000	46.176477	7.848751
0.700000	47.222896	7.757356
0.800000	48.301790	7.707668
0.900000	49.416989	7.724092
1.000000	50.571468	7.832082
1.100000	51.767542	8.055561
1.200000	53.007026	8.414079
1.300000	54.291354	8.920649
1.400000	55.621668	9.581090
1.500000	56.998888	10.394958
1.600000	58.423759	11.357423
1.700000	59.896893	12.461286
1.800000	61.418794	13.698565
1.900000	62.989882	15.061512
2.000000	64.610510	16.543132

A continuación calcularemos un valor del error estándar de predicción.

Utilizaremos la ecuación (2.27):

$$s_{\hat{y}(\mathbf{x})} = s \sqrt{\mathbf{x}^{(m)T} (\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}^{(m)}}$$

Ahora calculamos la matriz \mathbf{X} a partir de la matriz \mathbf{D} la cual se muestra a continuación:

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_1^2	x_2^2	x_3^2	x_4^2	x_1x_2	x_1x_3	x_1x_4	x_2x_3	x_2x_4	x_3x_4
$\mathbf{X} =$	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1
	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	1	1	-1	-1
	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
	1	-1	-1	1	-1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	1
	1	1	-1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	1
	1	-1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1
	1	1	1	1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1
	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1
	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1
	1	-1	1	-1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	1
	1	1	1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1
	1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1
	1	1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	1	1	-1	-1
	1	-1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	-1.4	0	0	0	1.96	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	1.4	0	0	0	1.96	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	-1.4	0	0	0	1.96	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	1.4	0	0	0	1.96	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	-1.4	0	0	0	1.96	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	1.4	0	0	0	1.96	0	0	0	0	0	0

Habiendo obtenido la matriz \mathbf{X} ahora calculamos el vector $\mathbf{x}^{(m)}$ y su transpuesta $\mathbf{x}^{(m)T}$, en nuestro ejemplo $m = 4$ ya que tenemos cuatro variables, los valores para estas variables se toman de la tabla 2.7.

$$\mathbf{x}^{(4)} = \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_1^2 \\ x_2^2 \\ x_3^2 \\ x_4^2 \\ x_1x_2 \\ x_1x_3 \\ x_1x_4 \\ x_2x_3 \\ x_2x_4 \\ x_3x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -0.012558 \\ 0.006391 \\ -0.087085 \\ 0.047091 \\ 0.000157 \\ 0.000040 \\ 0.007583 \\ 0.002217 \\ -0.00008 \\ 0.001093 \\ -0.000591 \\ -0.000556 \\ 0.000300 \\ -0.004100 \end{bmatrix}$$

Con la matriz \mathbf{X} y el vector $\mathbf{x}^{(m)}$ calculamos $\sqrt{\mathbf{x}^{(m)'}(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}^{(m)}} = \sqrt{0.34848904} = 0.59032960$ y como $s = \sqrt{MS_E}$ dicho valor lo obtenemos a partir de la matriz \mathbf{X} utilizando el SPSS donde: $s = \sqrt{MS_E} = \sqrt{197.903} = 14.06780011$, ahora utilizando la ecuación 2.27 obtenemos:

$s_{\hat{y}(\mathbf{x})} = 14.06780011\sqrt{0.34848904} = 14.067780011(0.59032960) = 8.3046388$ dicho valor corresponde a la fila 2 columna 3 de la tabla 2.7.

Ahora calculamos un valor para la respuesta estimada, para lo cual utilizamos el modelo

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 40.198 - 1.511x_1 + 1.284x_2 - 8.739x_3 + 4.955x_4 - 6.332x_1^2 \\ & + 2.194x_1x_2 - 4.292x_2^2 - 0.144x_1x_3 + 8.006x_2x_3 + 0.0196x_3^2 \\ & + 1.581x_1x_4 + 2.806x_2x_4 + 0.294x_3x_4 - 2.506x_4^2 \end{aligned}$$

Por lo que necesitamos los valores del vector $x^{(4)}$ a excepción del valor de la primera fila, al sustituir estos valores en el modelo obtenemos $\hat{y} = 41.20709$ el cual es el valor de la fila 2 y la columna 2 de la tabla 2.7.

Con respecto al radio lo que se pretende es que todos los puntos estén a una distancia fija r del centro del diseño, ya que $\sum_{i=1}^k x_i^2 = r^2$, sustituyendo tenemos:

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^k x_i^2 &= (-0.028715)^2 + (-0.014124)^2 + (-0.269867)^2 + (0.127073)^2 \\ &= 0.089999 \cong 0.09\end{aligned}$$

Tomando un radio $r = 0.300000$ elevándolo al cuadrado tenemos: $r^2 = (0.300000)^2 = 0.09$

Por lo tanto lo que debemos procurar es que la sumatoria de los valores al cuadrado de x_1, x_2, x_3 y x_4 deben ser aproximados al radio.

Es de resaltar que en cualquier análisis de MSR el cálculo del punto estacionario es solo un estimado, y cualquier punto en cualquier contorno (y ciertamente, el propio contorno) posee pruebas de variabilidad. Así que, el error estándar y a veces regiones de confianza permiten al analista una valoración más realista de la calidad del punto estimado. Además, obliga al investigador a atenuar correctamente o moderar la interpretación en muchos casos. La interpretación que se hace, como si los resultados fueran los exactos pueden ser erróneos o altamente induciendo al error. El primer tipo de prueba que hemos introducido trata al error estándar de respuesta pronosticado, o el error estándar estimado en términos de respuesta.

2.5 Región de Confianza en la Posición del Punto Estacionario.

Existen situaciones donde el cálculo del punto estacionario es de considerable interés. Puede ser la posición en el espacio del diseño de las variables que representan las condiciones de operación recomendadas para el proceso. Sin embargo, aquí permanece una pregunta obvia, ¿Qué tan buenas son las estimaciones de estas coordenadas? Quizás existe suficiente ruido en un estimador principal que en uno secundario, el conjunto de condiciones resulta menos costoso en una respuesta media, esto no es significativamente diferente de lo producido por la posición del punto estacionario.

Supongamos de nuevo el modelo de superficie de respuesta ajustado de segundo orden

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i < j=2}^k b_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j=2}^k \sum_{i < j=2}^k b_{ij} x_i x_j = b_0 + \mathbf{x}\mathbf{b} + \mathbf{x}\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} \quad (\text{Forma matricial})$$

Podemos recordar de la **sección 2.3.5** que el punto estacionario es calculado colocando las derivadas $\partial \hat{y}(\mathbf{x}) / \partial \mathbf{x} = 0$. Tenemos:

$$\partial \hat{y}(\mathbf{x}) / \partial \mathbf{x} = \mathbf{b} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

La j -ésima derivada, $d_j(\mathbf{x})$, puede ser escrita $d_j(\mathbf{x}) = b_j + 2\hat{\mathbf{B}}'_j \mathbf{x}$, donde el vector $\hat{\mathbf{B}}'_j$ es la j -ésima fila de $\hat{\mathbf{B}}$, la matriz de coeficientes cuadráticos descrita en la ecuación (2.19). Estas derivadas son simples funciones lineales de x_1, x_2, \dots, x_k . Denotamos al vector de derivadas como el vector k -dimensional $\mathbf{d}(\mathbf{x})$. Ahora, supongamos que consideramos las derivadas evaluadas en \mathbf{t} , donde las coordenadas x_1, x_2, \dots, x_k de \mathbf{t} son las coordenadas del verdadero punto estacionario del sistema (el cual por supuesto es desconocido). Si los errores alrededor del modelo de la ecuación (2.17) son normalmente **i.i.d.** con $N(0, \sigma)$, entonces:

$$\mathbf{d}(\mathbf{t}) \sim N(0, \text{Var}(\mathbf{d}(\mathbf{t})))$$

Donde $\text{Var}(\mathbf{d}(\mathbf{t}))$ es la matriz varianza-covarianza de $\mathbf{d}(\mathbf{t})$. Como resultado [ver Graybill (1976), Myers y Milton (1991)],

$$\frac{\mathbf{d}'(\mathbf{t})[\text{Var}(\mathbf{d}(\mathbf{t}))]^{-1}\mathbf{d}(\mathbf{t})}{k} \sim F_{k, n-p} \quad \text{Ecuación 2.29}$$

Aquí, $F_{k, n-p}$ es la distribución F con k y $n-p$ grados de libertad. Es importante notar que $\text{Var}[\mathbf{d}(\mathbf{t})]$ es una matriz de $k * k$ que contiene el error de varianza σ^2 como un multiplicador. Además, $\text{Var}[\mathbf{d}(\mathbf{t})]$ es claramente una función de \mathbf{t} . Por ejemplo, en el caso de dos variables en el diseño,

$$d_1(\mathbf{t}) = b_1 + 2 \left(b_{11}t_1 + \frac{b_{12}}{2}t_2 \right)$$

$$d_2(\mathbf{t}) = b_2 + 2 \left(\frac{b_{12}}{2}t_1 + b_{22}t_2 \right) \quad \text{y}$$

$$\text{Var}[\mathbf{d}(\mathbf{t})] = \begin{bmatrix} \text{Var}[d_1(\mathbf{t})] & \text{Cov}[d_1(\mathbf{t}), d_2(\mathbf{t})] \\ \text{Cov}[d_1(\mathbf{t}), d_2(\mathbf{t})] & \text{Var}[d_2(\mathbf{t})] \end{bmatrix}$$

Se puede observar fácilmente que los elementos en esta matriz vienen de $(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}\sigma^2$, los coeficientes de regresión de la matriz de varianza-covarianza. El papel de \mathbf{t}_1 y \mathbf{t}_2 también debería ser aparente. En (2.29) el " \wedge " en $\text{Var}[\mathbf{d}(\mathbf{t})]$ exclusivamente implica que σ^2 es remplazado por s^2 , el término error cuadrático medio. Ahora, basados en (2.29) tenemos:

$$\mathbf{P}\{\mathbf{d}'(\mathbf{t})[\text{Vard}(\mathbf{t})]^{-1}\mathbf{d}(\mathbf{t}) \leq kF_{\alpha,k,n-p}\} = 1 - \alpha \quad \text{Ecuación 2 .30}$$

Donde $F_{\alpha,k,n-p}$ es el punto α -ésimo percentil superior de la distribución F para k y $n-p$ grados de libertad. Mientras \mathbf{t} es desconocida, todas las demás cantidades en la ecuación (2.30) son conocidas. En consecuencia, los valores t_1, t_2, \dots, t_k que caen dentro de la región de confianza del $100(1-\alpha)$ % para el punto estacionario son los que satisfacen la desigualdad

$$\mathbf{d}'(\mathbf{t})[\text{Vard}(\mathbf{t})]^{-1}\mathbf{d}(\mathbf{t}) \leq kF_{\alpha,k,n-p} \quad \text{Ecuación 2 .31}$$

Podemos observar de la ecuación (2.31), que el cálculo de la región de confianza es muy simple. Sin embargo, el despliegue de la región de confianza es muy complicada, particularmente cuando en el diseño son involucradas varias variables. Para dos o tres variables en el diseño, un gráfico aproximado puede ser muy informativo. El tamaño general o volumen de la región de confianza puede ser visualizado y el analista puede ganar algún entendimiento profundo en cuanto a la flexibilidad permitida en la recomendación de condiciones óptimas.

Ejemplo 2.8 Un Proceso Químico con $k = 2$.

Un Diseño Central Compuesto (DCC), fue usado para desarrollar una superficie de respuesta referente al rendimiento (y) para temperatura y tiempo de reacción. Los resultados de este experimento son mostrados en la tabla 2.8.

Tabla 2.8 El Diseño Central Compuesto para el Ejemplo 2.8

	x_1 (Temp.)	x_2 (Tiempo)			y
	-1	-1			88.55
	1	-1			85.80
	-1	1			86.29
	1	1			80.44
	-1.414	0			85.50
	1.414	0			85.39
	0	-1.414			86.22
	0	1.414			85.70
	0	0			90.21
	0	0			90.85
	0	0			91.31
Niveles codificados	-1.414	-1	0	1	1.414
Temperatura (°C)	110.86	115	125	135	139.14
Tiempo (Seg)	257.58	270	300	330	342.42

Utilizando el SPSS V.15 estimamos los coeficientes de regresión y los resultados se muestran a continuación:

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	,916 ^a	,839	,678	1,77878

a. Predictors: (Constant), x2cuadra, x1x2, x2, x1, x1cuadra

Model		Coeficientes no estandarizados		Coeficientes estandarizado	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	90,790	1,027		88,405	,000
	x1	-1,095	,629	-,312	-1,740	,142
	x2	-1,045	,629	-,298	-1,661	,158
	x1x2	-,775	,889	-,156	-,871	,423
	x1cuadra	-2,781	,749	-,698	-3,715	,014
	x2cuadra	-2,523	,749	-,633	-3,371	,020

El modelo de segundo orden ajustado es

$$\hat{y} = 90.790 - 1.095x_1 - 1.045x_2 - 2.781x_1^2 - 2.524x_2^2 - 0.775x_1x_2$$

Con el punto estacionario en $\mathbf{x}'_s = [-0.1716, -0.1806]$. Como se ve en la figura 2.20, este es un punto de respuesta máxima con la respuesta predicha en el punto estacionario, $\hat{y}_s = 90.978$. El valor de R^2 para este modelo es aproximadamente 0.84. Por lo tanto, podemos decir que 84% de la variación observada en el rendimiento es explicada por el modelo, lo cual nos dice que la calidad del ajuste es satisfactorio.

Los componentes principales en la desigualdad de la ecuación (2.31) son muy simples de determinar. Hay $p = 6$ parámetros en el sistema de segundo orden, y

$$d_1(\mathbf{t}) = -1.095 - 5.562 t_1 - 0.775 t_2$$

$$d_2(\mathbf{t}) = -1.045 - 0.775 t_1 - 5.048 t_2$$

La matriz \mathbf{X} está dada por:

$$\mathbf{X} = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_1^2 & x_2^2 & x_1 x_2 \\ \left[\begin{array}{cccccc} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1.414 & 0 & 1.99 & 0 & 0 \\ 1 & 1.414 & 0 & 1.99 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1.414 & 0 & 1.99 & 0 \\ 1 & 0 & 1.414 & 0 & 1.99 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right. \end{matrix}$$

Las varianzas y covarianzas son obtenidas de la matriz $(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}$ con

$$\begin{array}{cccccc}
 & b_0 & b_1 & b_2 & b_{11} & b_{22} & b_{12} \\
 \mathbf{X}\mathbf{X} = & \begin{bmatrix} 11 & 0 & 0 & 8 & 8 & 0 \\ & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 8 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 12 & 4 & 0 \\ & & & & 12 & 0 \\ & & & & & 4 \end{bmatrix} & \text{(La matriz es simétrica).}
 \end{array}$$

Por lo tanto:

$$(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} 1/3 & 0 & 0 & -1/6 & -1/6 & 0 \\ & 1/8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 1/8 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0.1772 & 0.0521 & 0 \\ & & & & 0.1772 & 0 \\ & & & & & 1/4 \end{bmatrix} \text{ La matriz es simétrica.}$$

La matriz $(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}$ representa la matriz de varianzas-covarianzas de los β 's . Es decir:

$$(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1} = \begin{array}{c} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_{11} \\ b_{22} \\ b_{12} \end{array} \begin{bmatrix} \text{Var}(b_0) & \text{Cov}(b_0, b_1) & \text{Cov}(b_0, b_2) & \text{Cov}(b_0, b_{11}) & \text{Cov}(b_0, b_{22}) & \text{Cov}(b_0, b_{12}) \\ & \text{Var}(b_1) & \text{Cov}(b_1, b_2) & \text{Cov}(b_1, b_{11}) & \text{Cov}(b_1, b_{22}) & \text{Cov}(b_1, b_{12}) \\ & & \text{Var}(b_2) & \text{Cov}(b_2, b_{11}) & \text{Cov}(b_2, b_{22}) & \text{Cov}(b_2, b_{12}) \\ & & & \text{Var}(b_{11}) & \text{Cov}(b_{11}, b_{22}) & \text{Cov}(b_{11}, b_{12}) \\ & & & & \text{Var}(b_{22}) & \text{Cov}(b_{22}, b_{12}) \\ & & & & & \text{Var}(b_{12}) \end{bmatrix}$$

(La matriz es simétrica)

El error cuadrático medio de la superficie de respuesta ajustada es $s^2 = 3.1635$ ($s = 1.77878$, con 5 grados de libertad, ver resultados de tabla 2.8). Con la excepción de s^2 , las varianzas y covarianzas de los coeficientes de la superficie de respuesta ajustada son los elementos de la matriz anterior $(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}$.

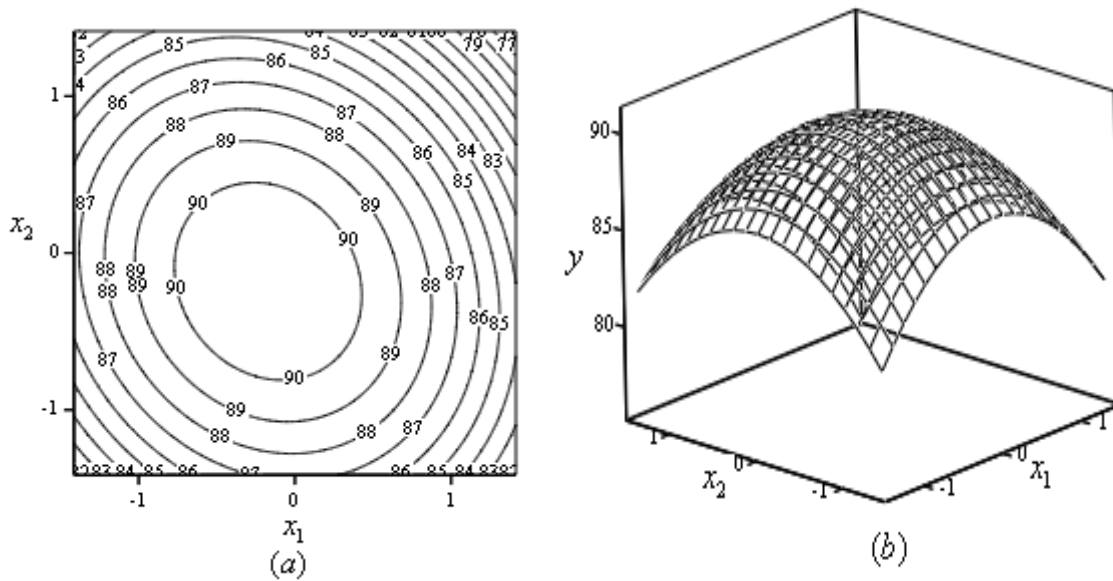


Figura 2.20 Modelo de segundo orden para el ejemplo 2.8 (a) Gráfica de contorno. (b) Superficie de Respuesta.

Los elementos de $Var[\mathbf{d}(\mathbf{t})]$ son fácilmente determinados

$$Var[\mathbf{d}_1(\mathbf{t})] = \frac{s^2}{\sigma^2} \{Varb_1 + 4t_1^2 Varb_{11} + t_2^2 Varb_{12}\}$$

Note que tanto las covarianzas que implican a b_1 y $Cov(b_{11}, b_{12}) = Cov(b_{12}, b_{22}) = 0$.

Así:

$$Var[\mathbf{d}_2(\mathbf{t})] = \frac{s^2}{\sigma^2} \{Varb_2 + t_1^2 Varb_{12} + 4t_2^2 Varb_{22}\}$$

$$Cov[\mathbf{d}_1(\mathbf{t}), \mathbf{d}_2(\mathbf{t})] = \frac{s^2}{\sigma^2} \{4t_1 t_2 Cov(b_{11}, b_{22}) + t_1 t_2 Varb_{12}\}$$

Tenemos con los datos de $(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}$.

$$Var[\mathbf{d}_1(\mathbf{t})] = 3.1635 \left\{ \frac{1}{8} + 4t_1^2 (0.1772) + \frac{1}{4} t_2^2 \right\}$$

$$Var[\mathbf{d}_2(\mathbf{t})] = 3.1635 \left\{ \frac{1}{8} + \frac{1}{4} t_1^2 + 4t_2^2 (0.1772) \right\}$$

$$Cov[\mathbf{d}_1(\mathbf{t}), \mathbf{d}_2(\mathbf{t})] = 3.1635 \left\{ 4(0.0521)t_1 t_2 + \frac{1}{4} t_1 t_2 \right\}$$

En la ecuación (2.31) podemos ahora usar el gráfico de la región de confianza. Debemos notar como el diseño tiene una profunda influencia en los elementos importantes de $(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}$. Las regiones de confianza son mostradas en la figura 2.21.

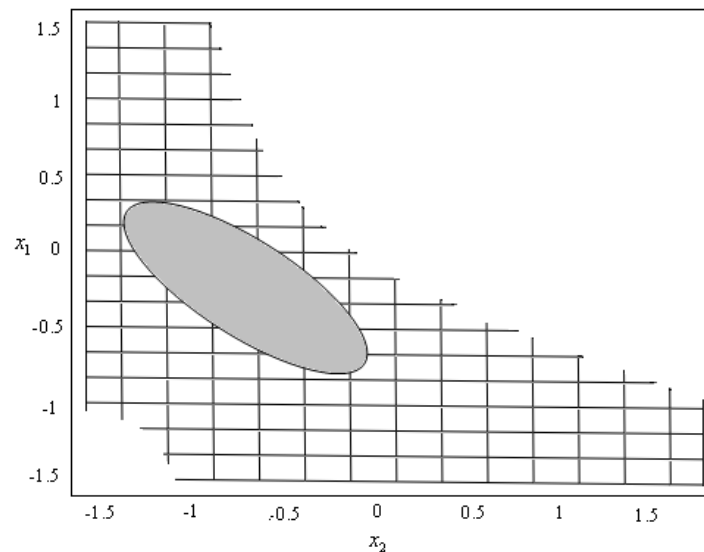


Figura 2.21 Regiones de confianza en posición del punto estacionario para datos del ejemplo 2.8.

El despliegue en la figura 2.21 presenta un cuadro desolado concerniente a la calidad de estimación del punto estacionario. Lo largo de las regiones cruzadas es el 95% de la región de confianza en la posición del punto estacionario, mientras la pequeña región sólida es el 90% de la región de confianza. No debemos olvidar la interpretación, la cual es la superficie de respuesta máxima verdadera en cualquier posición dentro del 95%, el contorno constantemente podría producir los datos que fueron observados. El intervalo del 95% no se acerca dentro de la región del diseño experimental.

La región de confianza en la posición óptima como las que se muestran en la figura 2.21 no son inusuales. La calidad de las regiones de confianza depende en gran manera de la

naturaleza del diseño y del modelo adecuado de los datos. Recordemos que R^2 es aproximadamente 84%.

Podemos notar el papel de las varianzas y coeficientes de covarianza (y por supuesto del error cuadrático medio) en el análisis. El aspecto de las regiones de confianza que se muestra en la figura 2.21 puede servir de lección referente al énfasis que es puesto en un punto estimado de condiciones óptimas. Como indicamos la mejora del proceso puede ser apreciado como una continuidad, iterativa del proceso, y cualquier óptimo encontrado en cualquier experimento dado no debería quizás ser considerado como claramente de utilidad en el proceso mejorado, se puede aprender del proceso en general.

Consideremos ahora un segundo conjunto de datos con el mismo diseño del ejemplo previo. Se notará que el segundo modelo es considerablemente adecuado. Los datos están en la tabla 2.9.

Tabla 2.9 Datos para el segundo ejemplo mostrando las regiones de confianza en posición del punto estacionario.

x_1	x_2	y
-1	-1	87.6
-1	1	85.7
1	-1	86.5
1	1	86.9
$-\sqrt{2}$	0	86.7
$\sqrt{2}$	0	86.8
0	$-\sqrt{2}$	87.4
0	$\sqrt{2}$	86.6
0	0	90.3
0	0	91.0
0	0	90.8

Realización del cálculo de los coeficientes en el SPSS obtenemos:

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	,995 ^a	,990	,980	,26728

a. Predictors: (Constant), x2cuadra, x1x2, x2, x1, x1cuadra

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	90.700	.154		587.886	.000
	x1	.030	.094	.014	.319	.762
	x2	-.329	.094	-.155	-3.481	.018
	x1cuadrado	-2.025	.112	-.836	-18.008	.000
	x2cuadrado	-1.900	.112	-.785	-16.896	.000
	x1x2	.575	.134	.191	4.304	.008

El modelo de segundo orden está dado por:

$$\hat{y} = 90.700 + 0.030x_1 - 0.329x_2 - 2.025x_1^2 - 1.900x_2^2 + 0.575x_1x_2$$

El valor de $R^2 = 0.990$.

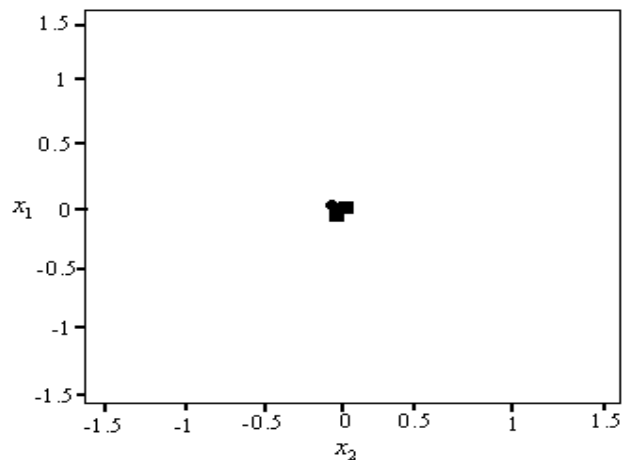


Figura 2.22 Regiones de confianza en posición del punto estacionario para datos de la tabla 2.9.

El punto estacionario (máximo) está en $(-0.004373, -0.08339)$ con $\hat{y}_s = 90.7130$. Ciertamente se esperaría que la región de confianza sea considerablemente más cerrada en este caso. La figura 2.22 muestra la región de confianza del 95% alrededor del punto estacionario estimado. Mostramos el gráfico usando la misma escala del ejemplo anterior para enfatizar el contraste. Claramente, el punto estacionario en este ejemplo es muy bien estimado. Debería ser enfatizado que una región de confianza grande no es necesariamente mala. Un modelo que se aproxima muy bien aunque genera una región de confianza grande

en el punto estacionario puede producir, una superficie plana, lo cual implica flexibilidad en la elección del óptimo. Esto es claramente de interés para el ingeniero o el científico.

Los dos ejemplos en esta sección ilustran situaciones en contraste. No se debe tener el presentimiento que el MSR en el primer ejemplo no producirá resultados importantes e interesantes sobre el proceso. Más bien debe tenerse presente que en muchas situaciones de MSR, la estimación de condiciones óptimas es bastante difícil.

BIBLIOGRAFÍA

- Myers y Montgomery , Response Surface Methodology (Process and Product Optimization Using Designed Experiments). Second Edition. John Wiley & Sons (2002).
- Gutiérrez Pulido y Román de la Vara Salazar, Análisis y Diseños de Experimentos, McGraw-Hill Segunda Edición.
- Montgomery, D. C. (2002), Diseño y Análisis de Experimentos, Editorial Limusa, Segunda edición. JMP IN 4, Maraca Registrada de SAS Institute INc, Cary, NC 27513.
- Melvin T. A. Response Surface Optimization using JMP Software, <http://www2.sas.com/proceedings/sugi22/STATS/PAPER265.PDF>
- Box, G. E. P., Wilson, K. G. (1951), On the experimental attainment of optimum conditions, Journal of the Royal Statistical Society, B13, 1-45.