



300618
10
2ej
UNIVERSIDAD LA SALLE

**ESCUELA DE QUIMICA
INCORPORADA A LA U. N. A. M.**

**APLICACIONES DE LA METODOLOGIA DEL DISEÑO DE
EXPERIMENTOS EN LA INGENIERIA QUIMICA**

TESIS PROFESIONAL

**QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO**

P R E S E N T A N

**GUTIERREZ RAMIREZ SILVIA ELISA
VALERO PEREZ VARGAS ALEJANDRA**

DIRECTOR DE TESIS: ALMA ROSA G. ZETINA VELEZ

MEXICO, D. F.

1992

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

OBJETIVO:

El propósito de este trabajo es, por un lado, el de presentar una serie de herramientas estadísticas (Metodología del Diseño de Experimentos) que son de gran utilidad en los diversos campos de trabajo de un Ingeniero Químico como producción, control de calidad, desarrollo de nuevos productos e investigación. Y por el otro lado, mostrar su aplicación en dos casos prácticos; Fabricación de Yoghurt y Cinética de Oxidación.

En México es bastante poco lo que se conoce y se aplica de este tema, por lo cual nosotras nos hemos propuesto presentar en este trabajo, de una manera sencilla para el lector, los métodos estadísticos y destacar su importancia en el desarrollo de nuevas tecnologías, así como su aplicación en la industria.

INDICE

INTRODUCCION

CAPITULO 1. INTRODUCCION AL DISEÑO DE EXPERIMENTOS

- 1.1 Generalidades
 - 1.1.1 Proceso Experimental
- 1.2 Por qué no se usa entonces con mas frecuencia el Diseño de Experimentos?

CAPITULO 2. PRINCIPIOS DE LA ESTRATEGIA DE EXPERIMENTACION

- 2.1 Como esta Situado el Diseño de Experimentos en un Proceso de Investigación?
 - 2.1.1 Objetivos
 - 2.1.2 Identificación de Variables
 - 2.1.2.1 Variables Independientes
 - 2.1.2.2 Variables Dependientes
 - 2.1.3 Identificación del Error Experimental
 - 2.1.4 Elección del Número Apropriado de Corridas
 - 2.1.5 Evolución del Programa Experimental
 - 2.1.5.1 Etapa de Visualización
 - 2.1.5.2 Etapa de Diseños de Superficie de respuestas
 - 2.1.5.3 Etapa Teórica
- 2.2 Conceptos Básicos de Estadística Aplicados en Diseño de Experimentos
- 2.3 Elección del Número de Observaciones

CAPITULO 3. DISEÑOS FACTORIALES

- 3.1 Introducción
- 3.2 Plan Factorial 2^k
 - 3.2.1 Variables Codificadas
 - 3.2.2 Geometría General
 - 3.2.3 Geometría de los Efectos Principales
 - 3.2.4 Efectos de Interacción de Dos Variables
 - 3.2.5 Efecto de Interacción Múltiple o de Alto Orden
- 3.3 Formación de una Matriz de Experiencias (Arreglo Estándar)
 - 3.3.1 Ejemplo
 - 3.3.2 Planeación Experimental
 - 3.3.2.1 Matriz de Diseño
 - 3.3.2.2 Experimentación
 - 3.3.2.3 Cálculo de Efectos
 - 3.3.3 Análisis de Efectos
 - 3.3.3.1 Error Estandar y Límite de Confianza
- 3.4 Diseños de Tamiz
 - 3.4.1 Diseños Factoriales Fraccionados
 - 3.4.1.1 Patrones de Diseño
 - 3.4.2 Diseños Plackett-Burman

CAPITULO 4. SUPERFICIES DE RESPUESTAS

- 4.1 Generalidades
 - 4.1.1 Usos de los Modelos de Superficies de Respuestas
 - 4.1.2 Función General para el Modelo Empírico y su Representación
 - 4.1.3 Aproximaciones Polinomiales
 - 4.1.3.1 Aproximaciones de Primer Grado (o Primer Orden)
 - 4.1.3.2 Aproximaciones de Segundo Grado (o Segundo Orden)
 - 4.1.4 Superficies de Respuestas vs. Método de una Variable-a-la-vez
- 4.2 Relación entre la Aproximación Polinomial y la Superficie de Respuesta Verdadera
- 4.3 Uso del Método de Ascenso Acelerado y el Método Simplex
 - 4.3.1 Qué hace el Método de Ascenso Acelerado?
 - 4.3.2 Ejemplo
 - 4.3.3 Comentarios Generales sobre el Método de Ascenso Acelerado
 - 4.3.4 El Diseño de Primero Orden como Piedra Angular
 - 4.3.5 Método Simplex
 - 4.3.6 Fórmula de Cálculo de Coordenadas
 - 4.3.7 Simplex de Tamaño Fijo
 - 4.3.8 Simplex de Tamaño Variable
 - 4.3.9 Obtención del Simplex para Variables Codificadas
- 4.4 Ajuste de Modelos de Segundo Orden
 - 4.4.1 Verificaciones de Curvatura e Interacción
 - 4.4.2 Análisis de Varianza de los Datos
 - 4.4.3 Verificaciones para el uso de Mínimos Cuadrados
 - 4.4.4 Puntos Disparados
 - 4.4.5 Transformación de las Variables
- 4.5 Modelos de Segundo Orden
 - 4.5.1 Diseños de Box-Wilson (Estrella)
 - 4.5.2 Diseños Compuestos
 - 4.5.3 Diseños de Box-Behnken
- 4.6 Propiedades de las Matrices de Experiencias
 - 4.6.1 Propiedades Intrínsecas
 - 4.6.2 Calidad de los Estimadores
 - 4.6.3 Calidad Previsional del Modelo Matemático
 - 4.6.4 Propiedades de la Respuesta Calculada
- 4.7 Exploración de Máximos con Modelos de Segundo Orden
 - 4.7.1 Ejemplo
 - 4.7.1.1 Segunda Serie de Experimentos
 - 4.7.2 Localización del Máximo en la Superficie Calculada
- 4.8 Análisis de Superficies de Respuesta
 - 4.8.1 Aplicación de la Superficie de Respuestas
 - 4.8.2 Sistemas con más de dos Variables
 - 4.8.3 Análisis Gráfico de la Superficie Obtenida
 - 4.8.4 Análisis de Superficies mediante las Formas Canónicas
- 4.9 Consideraciones Prácticas

CAPITULO 5. DISEÑO DE EXPERIMENTOS CON MEZCLAS

- 5.1 Generalidades
 - 5.1.1 Modelos de Mezclas
 - 5.1.2 Interpretación de los Coeficientes
 - 5.1.3 Relación entre el Espacio Factorial sin Restricciones y el Restringido
- 5.2 Diseño Simplex
 - 5.2.1 Método Lattice o de Arreglo de Red
 - 5.2.2 Resolución de Modelos
 - 5.2.3 Bondad de Ajuste
- 5.3 Comentarios Generales

CAPITULO 6. CONTROL DE CALIDAD

- 6.1 Introducción
- 6.2 Métodos de Control de Calidad en Línea
 - 6.2.1 Recolección de Datos
 - 6.2.1.1 Histogramas
 - 6.2.1.2 Gráficas de Control
- 6.3 Metodo Taguchi
 - 6.3.1 Introducción
 - 6.3.2 Control de Calidad Fuera de Línea
 - 6.3.3 Diseño de Parámetros
 - 6.3.4 Ejemplo
 - 6.3.4.1 Función de Pérdida
- 6.4 Conclusiones

CAPITULO 7. OPERACIONES EVOLUTIVAS

- 7.1 Ideas Básicas
- 7.2 Investigación en Pequeña y en Gran Escala
- 7.3 Operaciones Evolutivas y Estáticas
- 7.4 Ajuste del Proceso
- 7.5 Ejemplo
 - 7.5.1 Variables Bajo Estudio
 - 7.5.2 Patrón de Variantes o Diseño
 - 7.5.3 Respuestas de Interés
 - 7.5.4 Tablero de Información
 - 7.5.5 Límites de Error
- 7.6 Análisis del Tablero de Información
- 7.7 Esquema con Tres Variables
- 7.8 Equipo EVOP
 - 7.8.1 Retroalimentación
- 7.9 Cuando no parar

CAPITULO 8. APLICACIONES PRACTICAS

- 8.1 Introducción
- 8.2 Caso Práctico I
 - 8.2.2 Objetivo
 - 8.2.3 Antecedentes
 - 8.2.4 Desarrollo del Experimento
 - 8.2.5 Conclusiones
- 8.3 Caso Práctico II
 - 8.3.2 Objetivo
 - 8.3.3 Antecedentes
 - 8.3.4 Desarrollo del Experimento
 - 8.3.5 Conclusiones

CONCLUSIONES GENERALES

APENDICES

BIBLIOGRAFIA

INTRODUCCION

En la actualidad, y a pesar de los avances tecnológicos, es muy común ver que se utilicen métodos experimentales ineficientes; se emplea poco tiempo en la etapa de planeación de un proyecto, no se establecen claramente los objetivos y todo esto resulta en un desperdicio de trabajo, tiempo y dinero.

Para resaltar la importancia que tiene el diseño se puede decir lo siguiente. El diseño se refiere a cómo se planean los experimentos. El análisis se refiere a cómo extraer la información relevante de los datos recolectados. Entre el análisis y el diseño, el diseño se considera más importante. No importa lo ingenioso del análisis, si los datos están sacados de un diseño muy pobre. En cambio, un diseño bien hecho no necesita más que técnicas sencillas de análisis.

Los Diseños de Experimentos son una herramienta indispensable para el Ingeniero Químico en varias de sus áreas de desempeño.

Este trabajo tiene como objetivo general presentar la importancia de la metodología del diseño de experimentos en la mejora y optimización de éstos, aplicándola en áreas de investigación y desarrollo de nuevos productos, control de calidad y de procesos.

Si se pretende hacer un experimento determinado en donde el efecto de muchas variables debe ser investigado (es decir, cada variable se mueve en un rango determinado de valores), la metodología de experimentación clásica consistiría en mantener fijo el valor de una variable y mover los valores de las demás (una-variable-a-la-vez, cap. 4.1.4).

El método de diseño de experimentos utiliza un enfoque estadístico para resolver este problema, en donde con un número mínimo de experimentos se obtengan resultados aún más valiosos y desde luego más reutilizables que los obtenidos por la metodología clásica.

Son muchas las áreas del Ingeniero Químico donde se pueden aplicar estas técnicas. A continuación mencionaremos algunas de estas áreas y se hará además una comparación de los métodos:

CASO 1: CONTROL DE CALIDAD

Se requiere controlar una característica del producto que está saliendo fuera de especificaciones (viscosidad). Se sabe que hay 5 variables que pueden estar afectándola (materia prima A, materia prima B, temperatura, abertura del molino, tiempo de agitación de todas las materias primas).

a) Método Clásico (Una-variable-a-la-vez) - Se decidió hacer un ajuste en la cantidad de la materia prima A dejando el resto de las variables a su valor actual. La viscosidad no mejoró. Después se cambió el valor de la materia prima B y así se hizo también con las otras variables, hasta que se detectó que la temperatura era la que ocasionaba la mayor parte del problema; sin embargo, el problema no se resolvió totalmente.

b) Método Estadístico - Se planeó una estrategia experimental que permitió conocer cuáles variables afectaban el valor de la viscosidad, en que magnitud y también el efecto entre variables. Esto permitió elaborar un modelo que además de optimizar la viscosidad nos dio un amplio conocimiento de nuestro proceso. Esto resultó en mejoras del proceso y en un ahorro. Es decir, la materia prima A no tenía ningún efecto, por lo que la cantidad de esta materia prima se redujo resultando en ahorros significativos.

CASO 2: DESARROLLO DE PRODUCTOS

Se necesita optimizar los niveles de 3 activos en una fórmula suavizante de telas que reditúan en el mejor desempeño del producto. Las variables son el activo A, activo B y activo C.

a) Método Clásico - Se mantuvo fijo el nivel de dos activos y se movió el nivel del otro. Los jueces posteriormente calificaron la suavidad obtenida en toallas dada por cada fórmula. El número de experimentos fue de 10 ya que se manejaron 4 niveles de las variables, pero la suavidad obtenida a este nivel de activos era igual que la que brindan los productos competidores.

b) Método Estadístico - Se construyó un diseño factorial que nos dio un resultado mejor en cuanto a desempeño del producto comparado con el Método Clásico. El plan factorial involucró 8 experimentos y se pudo conocer el efecto que tiene cada una de las variables. Posteriormente con el método de ascenso acelerado (2 experimentos mas) se llegó al nivel de desempeño de producto óptimo para las variables manejadas y que resultaba en una suavidad superior a la proporcionada por productos competidores. En este caso el número de experimentos fue igual, pero el método estadístico dio un mejor resultado.

CASO 3: CONTROL DE PROCESOS

El proceso actual requiere del manejo de condiciones de operación de alto riesgo o inseguras para el personal (temperatura, presión y cantidades de ácidos) y es difícil de reproducir día a día. El mantenimiento es además demasiado caro (materias primas y energía a alto costo, corrosión en los equipos que lleva a desgaste frecuente, ocasiona altos niveles de contaminación atmosférica). Por lo tanto se necesita investigar si existen otros niveles de las variables involucradas que lleve a una reducción de los problemas mencionados obteniendo un producto con las características deseadas.

a) Método Clásico - Se mantuvieron constantes los niveles de 2 variables y se movió el otro. Sin embargo, después de toda esta experimentación, no se llegó a ningún resultado positivo.

b) Método Estadístico - Se elabora primeramente un plan factorial que se usó como base para obtener una ecuación de segundo grado que predice el efecto de las variables en la respuesta. Al graficar la ecuación, los ingenieros observaron que la respuesta caía en una región de la gráfica insensible a los cambios, por lo que se pudo reducir el costo de la operación, disminuyendo el riesgo del personal y abatiendo significativamente el problema de la contaminación.

Como se puede observar en los tres casos presentados, la aplicación del tema de este trabajo en Ingeniería Química es de gran utilidad. Existen además de estos otros campos en donde también es aplicable, como diseño de plantas, reutilización de equipos ya construídos para otra función diferente a la que fueron diseñados, estudio de reacciones, etc.

Con la importancia que hoy en día se le da a la calidad del producto, sinónimo de cumplimiento de requisitos con una variabilidad mínima, y la necesidad crítica de introducir rápidamente nuevos productos en el mercado, las estrategias del Diseño de Experimentos son cada vez más empleadas en la industria como un recurso invaluable.

Este trabajo presentará primeramente las bases estadísticas en las que se sustenta el método. Posteriormente se desarrolla cada etapa a seguir en el diseño de experimentos mediante los métodos propuestos por la literatura. Esto involucra la selección de variables, su tamizado, encontrar sus efectos e interacciones en la respuesta dada, elaboración de superficies de respuestas, optimización y análisis de éstas. Se da esta metodología también para el caso donde el experimento involucra mezclas (proporciones de ingredientes). Se presentan diferentes casos de aplicación que nos llevarán al cumplimiento del objetivo del trabajo.

En algunos capítulos de este trabajo se utilizan ejemplos tomados de las bibliografías citadas cuyo objeto es facilitar al lector la comprensión de la técnica discutida. Por otra parte se presentan ejemplos desarrollados personalmente por las autoras.

El capítulo uno presenta generalidades del tema.

El segundo capítulo proporciona las bases teóricas de estadística en las cuales están basados los principios de las técnicas de Diseño de Experimentos. En el capítulo número tres se inicia la discusión de las técnicas de tamizado así como los pasos a seguir en las primeras etapas de la experimentación. Adicionalmente, se discuten los diseños de primer grado y la construcción de modelos de primer orden.

El capítulo cuatro titulado "Superficies de Respuestas" está dedicado a la construcción de modelos de segundo grado, elaboración de superficies de respuestas y diseños de segundo orden. Además da los lineamientos para obtener los puntos óptimos del sistema.

El capítulo cinco, "Diseño de Experimentos con Mezclas" aplica los mismos principios desarrollados en los capítulos anteriores y los enfoca a la optimización de mezclas.

El capítulo seis contempla la filosofía japonesa de Calidad mediante la comparación de dos métodos distintos y su enfoque hacia el Diseño de Experimentos.

El capítulo siete "Operaciones Evolutivas" discute y ejemplifica la aplicación de las estrategias de diseño factorial a la optimización de procesos de manufactura ya operando. Además propone planes para convertir esto un programa continuo que tiene como objeto que no solamente se produzca en la planta el producto en cuestión, sino también información que lleve a la optimización continua del proceso.

El último capítulo presenta aplicaciones prácticas de las Técnicas de Diseño de Experimentos: en Cinética y en la Fabricación de un Yoghurt. En uno de los ejemplos se muestra la utilización del programa de computación "Design Ease". Al terminar la lectura de estos ejemplos se invita al lector a preguntarse: ¿Qué hubiera pasado si no se hubiera planeado el diseño estadístico? ¿Se hubiera obtenido la misma información?

CAPITULO 1

GENERALIDADES

1.1 DEFINICIONES

Un diseño experimental se puede definir como una estrategia para cambiar deliberadamente las variables de entrada para evaluar sus efectos en las variables de salida. Existe una amplia gama de estrategias de diseño de experimental, sobre las cuales se hablará más adelante.

Los fundamentos de diseño estadístico de experimentos empezaron a principios de 1920 con el trabajo de R. A. Fisher. Su estímulo para iniciar investigaciones en esta área fue su trabajo en el campo de la agricultura que ocasionó problemas para generar datos y en el análisis de los mismos.

Su mayor preocupación era la estimación de errores en las observaciones, el establecimiento de pruebas de significancia estadística y el desarrollo de técnicas para que la variación de los datos pudiera ser adecuadamente identificada como:

- 1) efectos de las variables bajo estudio (variedad de fertilizantes, en este caso),
- 2) efectos aleatorios (diferentes granjas, estaciones del año),
- 3) errores en la medición del proceso mismo.

Los principios en los cuales se basa el Diseño de Experimentos están dados en el libro de Fisher "El Diseño de Experimentos" (1935). Este libro está precedido por otro libro de Fisher "Métodos Estadísticos para Trabajadores de la Investigación" (1925). Este libro describe la lógica de experimentación, establecimiento de hipótesis, la importancia de la aleatorización, la construcción de pruebas de significancia estadística y los orígenes del análisis de varianza. El segundo libro de Fisher describe el análisis de diseños aleatorizados y sobre todo, los diseños factoriales. Todos los libros sobre diseño estadístico de experimentos derivan de una u otra forma del trabajo de Fisher.

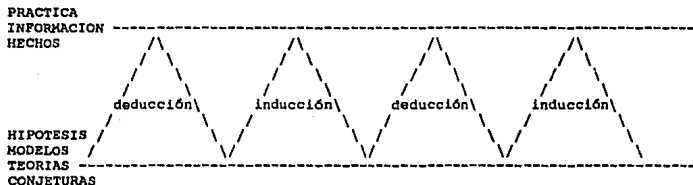
La adaptación de las técnicas de Diseño de Experimentos a problemas relacionados con Química empezaron después de la Segunda Guerra Mundial, siendo los trabajos de G.E.P. Box los más notables dentro de este campo. Especialmente su trabajo en cuanto a la construcción de superficies de respuesta, modelos de segundo orden, Operaciones Evolutivas, y que son las bases de este trabajo.

1.1.1 Proceso Experimental

La experimentación es un proceso donde deliberadamente se obtienen datos que son empleados para determinar la relación entre variables, desarrollo de modelos, predecir el comportamiento futuro de un sistema, confirmar o desechar una teoría.

En el caso de ingenieros, químicos o científicos que estudian un proceso físico o de comportamiento, los datos experimentales sirven para entender mejor el comportamiento del mundo complejo en el que se vive.

Relacionado a esta necesidad, G. E. P. Box, menciona que el aprendizaje es un proceso iterativo y lo ilustra de la siguiente forma:



En donde para confirmar una hipótesis inicial, ésta puede ser comparada con datos experimentales por medio de un proceso de Deducción. Al no coincidir los resultados teóricos con los experimentales, se modifica la hipótesis planteada por medio de un proceso Inductivo, comenzando así un segundo ciclo iterativo.

Este proceso permite modificaciones en la hipótesis y mejorar el conocimiento.

Cuando una compañía inicia un proceso de investigación, desarrollo de un producto y proceso o la operación de producción, encuentra una dependencia muy fuerte de los resultados experimentales para determinar el éxito en estas operaciones. La información obtenida deberá ser objetiva, confiable y oportuna para poder tomar una decisión adecuada. Las estrategias de experimentación desarrolladas por la estadística son una herramienta indispensable para lograr este fin.

1.2 ¿POR QUÉ NO SE USA ENTONCES CON MÁS FRECUENCIA EL DISEÑO DE EXPERIMENTOS?

Existen varias razones por las cuales el Diseño de Experimentos no se usa más frecuentemente, a pesar de haber probado ser de gran utilidad en un sinnúmero de ocasiones.

- a) No se reconoce el valor de los experimentos planeados estadísticamente y muchas veces tampoco se reconoce que un experimento mal planeado puede comprometer la calidad de los datos.
- b) La percepción errónea de que los diseños planeados estadísticamente son costosos, largos e imprácticos, y que los no planeados darán resultados útiles.
- c) Ignorancia hacia estrategias experimentales.
- d) Miedo a usar herramientas desconocidas.
- e) Falta de recursos técnicos combinada con una falta de apoyo y dirección por parte de gerentes.
- f) Percepción por parte de los gerentes de que solamente se avanza cuando se está llevando a cabo el experimento y no cuando se planea. Esto únicamente impide que se haga el trabajo bien desde la primera vez.

Sin embargo, ingenieros e investigadores con poco o ningún entrenamiento formal, pueden usar métodos de diseño de experimentos. Estas técnicas permiten:

- a) Alcanzar los objetivos a menor costo.
- b) Disminuir el tiempo de desarrollo.
- c) Optimizar la capacidad del proceso incrementando los rendimientos.
- d) Minimizar los efectos de variaciones en las condiciones de manufactura.
- e) Alcanzar el mejor proceso para producir un producto de calidad.

CAPITULO 2

"PRINCIPIOS DE LA ESTRATEGIA DE EXPERIMENTACION"

2.1 ¿COMO ESTA SITUADO EL DISEÑO DE EXPERIMENTOS EN UN PROCESO DE INVESTIGACION?

El hecho de obtener una buena o mala experimentación dependerá del ambiente que le rodea. Algunos de los puntos que forman este ambiente son los siguientes:

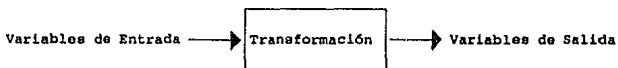
- Objetivos
- Variables: número y naturaleza
- Identificación del error experimental
- Elección del número apropiado de corridas
- Evolución típica del programa experimental

2.1.1 Objetivos

Es la primera y más importante etapa en la estrategia experimental. Normalmente esta idea es muy fácilmente aceptada, pero pocos son los investigadores que invierten tiempo para cumplirla. Es frecuente encontrar que después de efectuar una experimentación, los resultados obtenidos de ésta no concuerdan con los objetivos reales. El objetivo de un experimento debe responder a la pregunta: ¿Qué es lo que quiero saber cuando el experimento termine?

2.1.2 Identificación de Variables

Un sistema envuelve tres elementos básicos: variables de entrada (independientes), transformación y variables de salida (dependientes):



2.1.2.1 Variables Independientes

Son aquellas que tienen una influencia potencial sobre las respuestas de un sistema. El valor de estas variables debe controlarse deliberadamente en la realización de un experimento, ya que son decisivas para la obtención de cualquier resultado.

Sin embargo, hay algunas variables que por su naturaleza no pueden ser estrictamente controladas, por ejemplo, diversas condiciones ambientales; pero se cuenta con el hecho de que al menos dichas variables son medibles considerando que la variable adquirió distintos valores en las corridas experimentales.

Algunos de los nombres empleados para las variables independientes en varios contextos son:

- Factores (Diseño de Experimentos)
- Variables de Proceso (Procesos de Manufactura)
- Tratamiento (Agricultura)
- Dosis (Ensayos Biológicos)
- Proporciones (Diseño de Experimentos con Mezclas)

Los distintos valores de una variable de entrada se conocen como niveles.

Las variables independientes deben ser claramente identificadas para impedir un "enmascaramiento" de su influencia o la realización de experimentos inútiles (exceso de variables).

Las variables independientes se clasifican a su vez en continuas y discretas:

Las continuas son aquéllas que pueden tomar cualquier valor numérico en un rango establecido (cuantitativas).

Un factor discreto es aquél al que puede asignársele un nivel específico (cualitativo). Por ejemplo, tipo de catalizador (paladio o platino), material de construcción (acero o cerámica), etc.

2.1.2.2 Variables Dependientes

Son aquéllas que resultan de la realización de un experimento bajo determinadas condiciones (variables independientes). Los términos más empleados son:

- Respuestas (Literatura Estadística)
- Propiedades del Producto (Manufactura)

Por ejemplo, la temperatura, concentración y tiempo son variables independientes típicas que son importantes en una reacción, mientras que la conversión, pureza y cantidad de producto son las variables dependientes (aunque en una reacción la temperatura se comporta a veces como una variable dependiente).

2.1.3 Identificación del Error Experimental

En cualquier estrategia experimental es muy importante reconocer la presencia del error experimental o un cierto rango de variación de los resultados. Se pueden presentar tres tipos de errores:

- Por sesgo (bias)
- Azar (aleatorio, ruido)
- Por equivocación

A continuación se presenta una tabla con las características principales de cada uno de estos errores, así como las herramientas disponibles para su manejo.

TIPO DE ERROR	CARACTERISTICAS	SOLUCIONES
SESGO	<ul style="list-style-type: none"> - Los valores tienden a seguir un patrón constante por deberse a un ciclo (hora, estación del año) - Se deben a causas específicas (diferentes lotes de materia prima) 	<ul style="list-style-type: none"> - Aleatorización (orden al azar) - Formación de subgrupos (bloques) en corridas experimentales
AZAR	<ul style="list-style-type: none"> - Los valores cambian sin guardar un patrón consistente. - Tiende a seguir una distribución normal - Se mezcla con los efectos de las variables dependientes 	<ul style="list-style-type: none"> - La mejor herramienta estadística es la repetición
EQUIVOCACION	<ul style="list-style-type: none"> - No se detecta fácilmente. El experimentador no sabe qué sucede (falta de orden y/o administración, descuidos, etc.) 	<ul style="list-style-type: none"> - No existe una herramienta estadística determinada, simplemente deben evitarse situaciones que propicien el error

2.1.4 Elección del Número Apropiado de Corridas

Todo investigador está interesado en el tamaño (número de corridas) de un experimento dado, el cual debe ser lo suficientemente amplio como para poder tener una probabilidad alta de detectar los efectos de las variables independientes en las respuestas y además lo necesariamente pequeño como para que el costo y el tiempo invertidos para obtener resultados estén dentro del límite práctico. Aunque existen diferencias en varios campos de aplicación, el tamaño adecuado de corridas para un experimento está entre el rango 8-80, pero más frecuentemente entre 12 y 60. En la sección 2.3 se explicará detalladamente esto.

2.1.5 Evolución del Programa Experimental

En el desarrollo de una investigación con esta metodología, se establece una serie de etapas consecutivas. Es importante que el investigador conozca cuáles son y dónde se encuentran para poder obtener un máximo provecho de dicha estrategia experimental. En la figura 2.1.1 se resumen estas etapas y sus características.

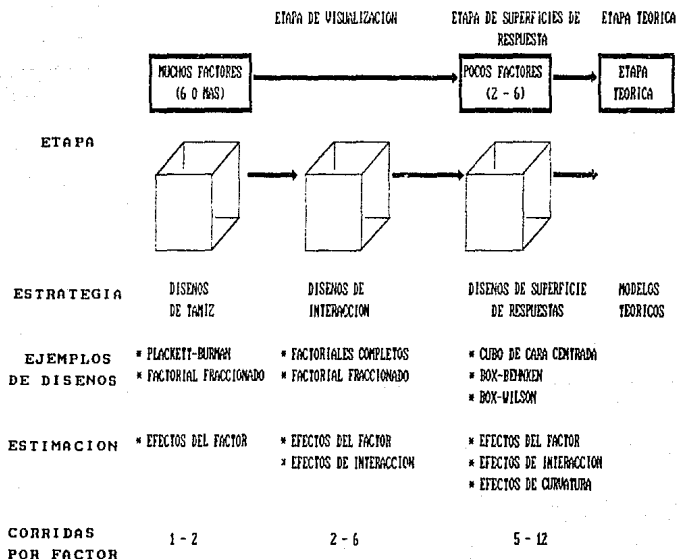
2.1.5.1 Etapa de Visualización

Es la primera etapa. El experimentador necesita información a grandes rasgos acerca de cuáles variables son realmente importantes.

Se refiere a elaborar una visualización sobre los objetivos, el nivel de conocimiento del sistema a ser estudiado y del número de variables

Fig. 2.1.1

EVOLUCION DEL PROGRAMA EXPERIMENTAL



independientes a manejar, es decir, se trata de que el investigador se ubique en el lugar donde se encuentra para trabajar a partir de ese punto y posteriormente determinar la evolución de la experimentación que se llevará a cabo.

Todo experimento debe proporcionar información que dé predicciones válidas acerca de comportamientos futuros del sistema. Un experimentador que tan sólo llena notas con registros de observaciones, pero no produce resultados útiles, no está realizando una buena labor como científico. Esto último debe evitarse al tener presentes los objetivos del experimento siempre, para recabar únicamente la información que ayude a alcanzar dichos objetivos.

Las bases del conocimiento sobre un sistema bajo estudio pueden tener un origen teórico, empírico o una mezcla de ambos. En el caso de partir de un modelo teórico para establecer una estrategia experimental, es importante tomar en cuenta lo siguiente:

- a) Que el ajuste del modelo empleado a datos experimentales se encuentre dentro del error esperado, es decir, que la verificación del modelo sea posible; a esto se le llama "bondad de ajuste".
- b) La mayoría de los modelos teóricos no incluyen todas las variables que afectan las respuestas reales.

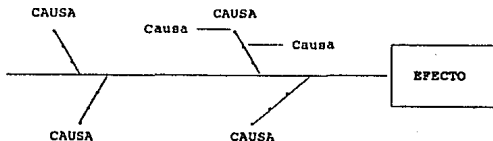
Por otra parte, en el caso de partir de un modelo empírico o querer establecerlo, debe tomarse en cuenta que su uso se restringe a una región experimental estrictamente determinada, como se comprenderá claramente en los capítulos siguientes.

Se ha señalado que no hay "modelos verdaderos", sino más bien modelos "útiles"; es decir, datos obtenidos a partir de un modelo empírico pueden ser usados para poder desarrollar un buen modelo teórico en una etapa posterior. En el capítulo relacionado a "Superficies de Respuestas" se verá el tema con mayor profundidad.

Entre las características del programa experimental está el número de variables independientes del experimento. Si solamente hay tres, por ejemplo, se puede hacer una exploración razonablemente completa de los efectos de estas variables mediante un número moderado de corridas. Por otro lado, se necesitan muchas corridas experimentales para explorar los efectos de treinta factores con minuciosidad comparable.

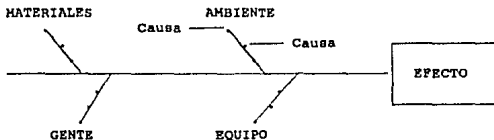
Al encontrarse ante la etapa inicial de su estudio, el experimentador cuenta con varias herramientas que le auxilian. Estas herramientas son muy útiles y prácticas:

- DIAGRAMA DE CAUSA Y EFECTO (O DE HUESO DE PESCADO)



Este diagrama consta de dos partes: las causas o factores que influyen en un efecto determinado. Para utilizar correctamente esta herramienta, es mejor contar con la opinión de varias personas y hacer una "tormenta de ideas" que consiste en que cada una menciona los factores que considera como influyentes para el efecto.

Generalmente es más práctico agrupar a su vez dichos factores, por ejemplo:



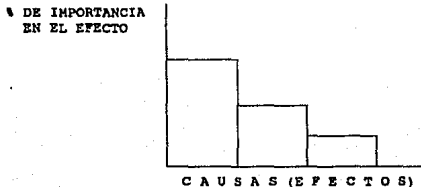
Cada mecanismo potencial trae consigo sus correspondientes variables; por ejemplo, si la transferencia de calor es importante, entonces las posibles variables serían temperatura, velocidad de agitación y materiales de construcción, es decir estas tres últimas variables serían las "causas de la causa (transferencia de calor)".

Los métodos tradicionales de experimentación podrían hacer ver una larga lista de variables como un problema experimental sin esperanza de solución, no es así. Los diseños de tamiz, (de los cuales trataremos posteriormente) pueden ser usados para examinar 10, 20 o hasta 30 factores para determinar cuáles son los verdaderamente importantes y cuáles deben ser estudiados en futuras etapas de experimentación más minuciosas, mientras que los factores restantes se pueden despreciar, es decir, mantenerlos constantes a un valor conveniente o fijo que sea económicamente favorable.

- DIAGRAMA DE PARETO

Consiste en ordenar las causas de acuerdo a su importancia en cuanto a la influencia dentro de un efecto determinado.

Nuevamente, aquí es favorable contar con la opinión de varias personas, documentos y antecedentes relacionados con el tema



Además, la teoría del diagrama de Pareto señala que una o dos variables son las que determinan el valor de un efecto dado en un 80%, mientras que el resto de las otras variables contribuirán con el 20% restante. Es decir, si el investigador logra manejar la(s) variable(s) señaladas en primera instancia, podrá entonces controlar el 80% del efecto estudiado.

Una vez seleccionadas las variables que afectan mayormente al efecto estudiado (gracias a los diseños tamiz), se continúa con otro tipo de diseños: los diseños a dos niveles (también llamados diseños de interacción). Se incluyen todas las combinaciones de dos niveles de cada factor de diseño.

2.1.5.2 Etapa de Diseños de Superficie de Respuestas

Los diseños de superficie de respuestas incluyen combinaciones seleccionadas de los factores a más de dos niveles. Al avanzar en el programa experimental, es claro que el número de variables independientes críticas disminuye, la complejidad del modelo aumenta y se requiere mayor calidad en la predicción.

2.1.5.3 Etapa Teórica

La etapa final, "modelos teóricos", requiere estudios matemáticos más profundos que los de las primeras dos etapas, ya que es donde se elaboran los modelos teóricos (expresados por medio de una ecuación) que representan el comportamiento del sistema bajo estudio.

2.2 CONCEPTOS BASICOS DE ESTADISTICA APLICADOS EN DISEÑO DE EXPERIMENTOS

En esta sección se definen términos y conceptos que se requieren en el diseño de experimentos.

La media, la desviación estándar y la varianza son algunos de los parámetros más importantes que pueden estimar las características pertenecientes a una población.

La media representa el centro físico de un conjunto de datos y la varianza y la desviación estándar son medidas de dispersión. La media y la desviación estándar son particularmente útiles, ya que en la mayoría de las ocasiones contienen toda la información acerca de una población.

Debido a que es imposible incluir un número infinito de valores de una población, nunca conoceremos los valores exactos de ésta. Sin embargo, se pueden determinar los parámetros de una muestra de la población, para utilizarlos como estimadores de los parámetros propios de la población; es obvio que entre más medidas de muestras existan, las propiedades de éstas se aproximarán cada vez más a las de la población. Para entender mejor esto, tenemos la siguiente tabla:

	Población	Muestra
Definición	Un grupo hipotético de "N" observaciones (generalmente "N" es muy grande)	Un grupo de "n" observaciones que son parte de "N" observaciones
Media	$\mu = \frac{y(1) + y(2) + \dots + y(N)}{N}$	$\bar{y} = \frac{y(1) + y(2) + \dots + y(n)}{n}$
Varianza	$\sigma^2 = \frac{(y(1) - \mu)^2 + \dots + (y(N) - \mu)^2}{N}$	$s^2 = \frac{(y(1) - \bar{y})^2 + \dots + (y(n) - \bar{y})^2}{n-1}$
Desviación Estándar	$\sigma = \sqrt{\sigma^2}$	$s = \sqrt{s^2}$

Supongamos un experimento en donde el objetivo es obtener la conversión de cierto reactivo después de 60 segundos iniciada la reacción y se tienen los siguientes resultados:

# de Experiencia	Resultado
1	32.53%
2	32.53%
3	32.61%

Si sólo se hubieran realizado los dos primeros experimentos, se concluiría que la variación es cero; sin embargo, con el tercer experimento se demuestra que no es así y que una sola medición no representa en sí el valor de la variable dependiente estudiada, o expresado de otra manera, una sola muestra no representa el valor de la población.

Después de realizar nueve corridas y ordenándolas en orden creciente, obtenemos lo siguiente:

EVALUACION	5	8	4	1	2	6	9	3	7
RESPUESTA	32.48	32.51	32.52	32.53	32.53	32.54	32.54	32.55	32.57

Las respuestas varían desde un valor de 32.48 hasta 32.57, en un rango de 0.09. Es de hacerse notar que la mayoría de las respuestas tienden a un valor central aproximadamente igual a 32.53, sólo algunos resultados se alejan de tal valor.

A la medida de la tendencia central demostrada, se le conoce con el nombre de media, también llamada a veces promedio. Se define como la suma de todos los valores de las corridas dividida entre el número de dichas corridas. La media es una medida de centralización.

Varianza.- Es una medida de la dispersión o variación de los valores de la variable alrededor de su media. Para cada dato de una serie determinada de resultados, existen dos componentes: la media de la respuesta y el residuo, que consiste en el valor absoluto de la diferencia o desviación entre el valor del dato y la media de la respuesta. En el caso del ejemplo mencionado, para la corrida #7 se obtiene el valor más alto de todos: 34.57, por lo que el residuo es $|34.57-34.53| = 0.04$; en la corrida #5 se obtuvo el valor más bajo: 34.48 para el cual el residuo es $|34.48-34.53| = 0.05$. Si los residuos de las respuestas son pequeños, se dice que el sistema puede ser reproducido; en el caso contrario, entonces se dice que el sistema es pobremente reproducido.

La varianza se define como la suma de los cuadrados de los residuos dividida entre el número de grados de libertad (asociados con el número de residuos). Aplicando este concepto para los datos del ejemplo mencionado, tenemos lo siguiente:

DATO	32.48	32.51	32.52	32.53	32.53	32.54	32.54	32.55	32.57
RESIDUO	0.05	0.02	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	0.04

$$s^2 = \frac{(0.05)^2 + [2 * (0.02)^2] + [3 * (0.01)^2] + (0.04)^2}{9-1} = 0.00065$$

Si los valores tienden a concentrarse alrededor de la media, la varianza es pequeña; en tanto que si los valores tienden a distribuirse lejos de la media, la varianza es grande. La situación se representa gráficamente en la figura 2.2.1.

Varianza Ponderada .- No es frecuente que podamos repetir las condiciones experimentales muchas veces para obtener estimados precisos. Es por esto que nos preguntamos cuántas medidas de muestras necesitamos para obtener los parámetros de la población. En muchos casos, dos o tres medidas son suficientes para obtener un valor adecuado de la media.

Sin embargo, se necesitan más de dos o tres medidas para calcular la varianza de una variable dependiente con precisión práctica, ya que, como se demostró con el ejemplo que ayudó a la comprensión del concepto de media, la mayoría de los resultados tienden al valor de ésta y solamente dos datos de los nueve del ejemplo, representan los extremos inferior y superior de los resultados, que generarán una parte importante en la suma de los residuos y por lo tanto en el cálculo de la varianza.

Esto significaría que en un experimento donde las condiciones (variables independientes) van tomando distintos valores en cada corrida, se tendría que hacer mínimo nueve veces dicha corrida para calcular la varianza del experimento; esto sería prácticamente imposible, de ahí que se utilice el concepto de varianza ponderada, que consiste en una especie de promedio de las varianzas de cada corrida, asumiendo que la varianza es casi la misma para todas las combinaciones de factores en el experimento.

$$sp^2 = \frac{1}{(n-1)} \frac{1}{2} s^2 + \frac{1}{(n-1)} \frac{2}{2} s^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)} \frac{k}{k} s^2$$

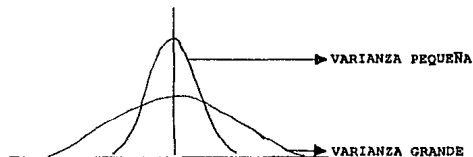
donde:

$s_1^2, s_2^2, \dots, s_k^2$ = Varianzas individuales.

n_1, n_2, \dots, n_k = Número de repeticiones por cada combinación.

El denominador representa el número de grados de libertad asociados con el cálculo ponderado y es igual a la suma de los grados de libertad de los cálculos individuales.

FIG 2.2.1



Grados de Libertad.- Con frecuencia surge la pregunta: ¿Por qué para obtener la varianza de la muestra se divide entre " $(n-1)$ " en vez de " n "?. La razón de esto está relacionada con el número de grados de libertad en la estimación de la varianza de la muestra. El número de grados de libertad representa el número de piezas independientes que forman la información en la varianza. Debido a que la estimación de la varianza de " n " observaciones incluye el cálculo de la media, se ha usado entonces un grado de libertad y solamente quedan " $(n-1)$ " piezas de información.

Para entender mejor esto, tenemos el siguiente ejemplo: supongamos que a una persona se le pide que diga dos números enteros; las respuestas son muy variables, puede contestar "5 y 10" o "14 y 28", etc. Debido a que la persona no tiene ninguna restricción, está en la libertad de escoger dos números cualquiera; se dice que tiene dos grados de libertad.

Pero si a esa misma persona ahora se le pide que diga dos números que suman un total de 10, entre sus posibles respuestas podrían estar "-17 y 27", "4 y 6", etc. Sin embargo, ahora la persona en cuestión sólo está en la libertad de escoger un número, ya que el segundo estará dado por la restricción de que debe sumar 10 con el primero; es decir únicamente tiene un grado de libertad.

En pocas palabras, el número de grados de libertad se refiere a cuántos datos pueden ser especificados.

Cuando se explicó por medio de un ejemplo el concepto de media, éste fue 32.53. Si este dato es utilizado en alguna etapa posterior de cálculo en donde se ven involucrados los valores de las respuestas medidas " n ", entonces se tendrán " $n-1$ " grados de libertad.

Desviación Estándar.- También se le conoce como "desviación típica" o error estándar y es igual a la raíz cuadrada de la varianza.

Para los datos del ejemplo que se ha presentado, tenemos lo siguiente:

$$s_y = \sqrt{(0.00065)} = 0.0255$$

Las unidades de desviación estándar son las empleadas en las observaciones individuales y no en unidades al cuadrado de la varianza. Es por esto que en ocasiones se prefiere como medida de dispersión.

El error estándar y la desviación estándar se calculan ambos como la raíz cuadrada de la varianza. Normalmente se usa "desviación estándar" para describir una variable observada directamente, mientras que "error estándar" se utiliza para describir la desviación estándar de un parámetro a partir de una combinación de observaciones.

Desviación Estándar Ponderada ó de la Población.- Es igual a la raíz cuadrada de la varianza ponderada.

Distribución Normal.- Es la representación de observaciones en las que el error experimental varía continuamente alrededor de un valor central en una distribución simétrica y en la cual desviaciones pequeñas ocurren más frecuentemente que aquéllas grandes.

El área total bajo la curva de distribución, o función de densidad, debe ser igual a 1, es decir, 100%. Más aún, la función de densidad debe ser positiva o igual a cero para todos los valores de la variable aleatoria. La proporción del área bajo cualquier sección de la función de densidad es la probabilidad de que la variable tenga un valor en el intervalo correspondiente.

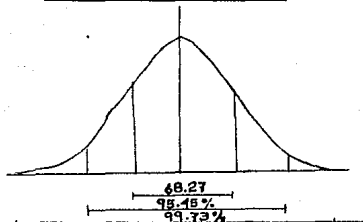
Existen tablas que permiten conocer lo anterior (apéndice I). Utilizando los datos del ejemplo anterior, tenemos un valor de media igual a $y = 34.53$, con una desviación estándar $s = 0.0255$. La pregunta es: ¿Qué probabilidad existe de que se obtenga un valor de 34.50 en una corrida?

$$z_0 = \frac{|y_0 - y|}{s} = \frac{|34.50 - 34.53|}{0.0255} = 1.18$$

Con el valor de 1.18 y la tabla correspondiente a Distribución Normal del apéndice I, obtenemos un valor igual a 0.3810, lo cual significa que existe una probabilidad de un 38.10% en cuanto a que se obtenga un valor de 34.50 en alguna de las corridas experimentales.

FIG 2.2.2

DISTRIBUCION NORMAL ESTANDAR



Distribución de Promedios y Límites de Confianza.- Una meta importante en el diseño de experimentos es poder estimar el promedio de una respuesta bajo determinadas condiciones experimentales. Para estimar la precisión de este promedio se recurre al Teorema del Límite Central, que nos dice que:

a) Para cualquier combinación de factores, existen múltiples muestras, cada una de tamaño "n".

b) Una muestra de medias tiende a comportarse como una distribución normal y está centrada alrededor de la media de la población.

c) El error estándar de las medias de las muestras será más pequeña que la desviación estándar de una observación individual por un factor de $1/\sqrt{n}$ para una muestra de tamaño "n":

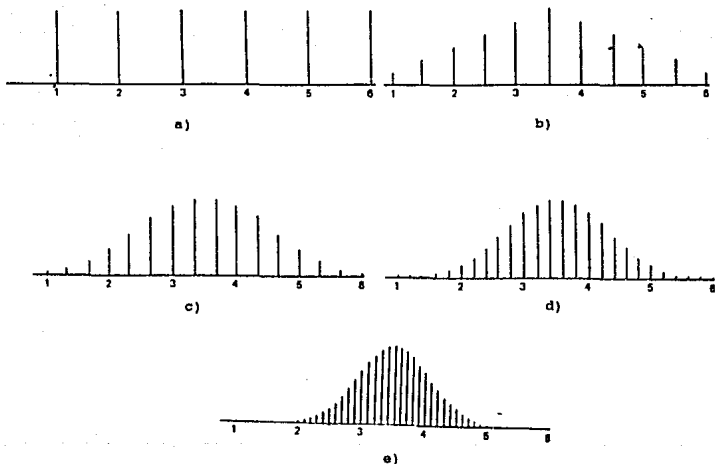
$$\sigma_y = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$$

Un dado nos da una buena ilustración para comprobar lo anterior. Este cuerpo tiene seis lados y las caras se identifican por el número de puntos de uno a seis. Suponiendo que el dado está bien hecho y balanceado, cada una de las seis caras tiene una probabilidad idéntica (1/6) de aparecer el mismo número e veces cuando el dado se tira.

La figura 2.2.3.a. muestra la distribución de las posibles distintas respuestas cuando se tira un dado, es decir, existen seis valores distintos que tienen la misma posibilidad de aparecer. La media es el promedio de estos seis valores, es decir, $\bar{y}=3.5$. La figura 2.2.3.b. muestra la distribución del promedio resultante de tirar el dado dos veces, mientras que las figuras 2.2.3.c., 2.2.3.d.y 2.2.3.e ilustran la distribución de los promedios calculados cuando se tira el dado 3, 5 y 10 veces, respectivamente.

FIG 2.2.3

DISTRIBUCION DE PROMEDIOS PARA DIVERSAS TIRADAS DE UN DADO



Se puede notar claramente que la distribución de observaciones individuales (valores para una sola tirada) se aleja de la forma de campana de una distribución normal. Sin embargo, las ordenadas de la distribución de promedios son aproximadamente las mismas que las ordenadas de una distribución normal, siempre y cuando "n" sea mayor de 5.

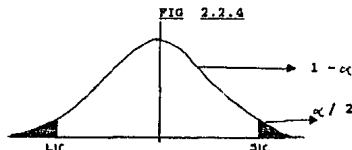
Muchas veces no es suficiente estimar un parámetro poblacional de manera puntual, debido a que el estimador es una variable aleatoria y la probabilidad de que tome el mismo valor del parámetro es prácticamente nula.

Para aumentar la probabilidad de que la estimación coincida con el parámetro deseado, se debe establecer un intervalo que contenga cierta probabilidad al parámetro. Dicho intervalo se denomina intervalo de confianza.

Para comprender esto, pongamos un ejemplo en el cual se desea estudiar la variación propia de un proceso productivo para una determinada variable. La diferencia entre el nivel alto y el bajo, dará una diferencia igual a $\Delta = y_2 - y_1$. Ahora se necesita saber cuál es la varianza (o desviación estándar, según como se quiera manejar) de las observaciones. El experimentador quizá tenga un buen estimado de σ , obtenida a partir de gráficas de control que señalen el comportamiento del sistema gracias a que ya se tienen trabajos realizados previamente en éste. Se puede decir que dos terceras partes de las observaciones caen dentro de los límites 72 y 78, lo cual sugiere que la media del proceso es $\mu = 75$ y la desviación estándar es aproximadamente $\sigma = 3$. Para una distribución normal el intervalo $\mu \pm \sigma$ contiene el 68.27% de las observaciones. La pregunta es ahora: ¿qué tan seguro está el experimentador de que el intervalo ± 3 contiene la media? ¿90%, 95% o quizá un 60%. Obviamente entre más seguro quiera estar, necesita tener una confianza mayor.

Todos los investigadores quisieran que los posibles de errores fuesen lo más pequeños posibles; sin embargo, el costo para realizar un número de corridas que hiciera posible esto, sería prohibitivo. Algunas personas consideran que el tener un 50% de error es bastante perjudicial para obtener resultados prácticos y utilizables a partir de un experimento; usualmente, el porcentaje de error está dentro del rango 5% - 10%, es decir, generalmente se prefiere un porcentaje de confianza del 90 - 95%, aunque a partir de un 80% ya se puede decir que los resultados serán bastante representativos.

En la práctica, los valores de la media de la población, o la varianza de ésta, no se conocen. Sin embargo, estimados de estos parámetros pueden ser utilizados para construir intervalos de confianza para la media de la población (como se explicó en el ejemplo anterior). Un intervalo de confianza determina un rango de valores que incluirán a la media de la población con una probabilidad específica. El nivel de confianza puede ir desde casi el 0% hasta casi el 100%, dependiendo de cómo se calcule dicho intervalo.



donde:

LIC y SIC = Límites de confianza
 $IC = 1 - \alpha$ = Nivel de confianza

Para establecer los límites de confianza de un parámetro "P", se parte de una distribución normal; en la distribución de la figura 2.2.4. puede observarse que el complemento del nivel de confianza (α) se distribuye en dos partes iguales en los extremos de la curva, con el objeto de centrarlo.

Nosotros utilizaremos el concepto de intervalo de confianza solamente para el parámetro media, por lo cual es importante tomar en cuenta lo siguiente:

Si $n > 30$, la distribución muestral del estadístico tiende a una distribución normal. Por otra parte, cuando se utiliza una distribución normal, se conoce el valor de la desviación estándar.

Si $n < 30$, se tendrá una distribución que se aproxima a la normal y cuya forma y características varían considerablemente dependiendo del tamaño de la muestra. A esta distribución se le conoce como Distribución de Student.

En el apéndice I están incluidos los valores bajo la curva para cada una de estas distribuciones.

Distribución de Student. - Para obtener la posibilidad de ocurrencia por medio de una distribución normal, se asume que los valores de la media y el error estándar de la población son conocidos. Sin embargo, generalmente el valor σ no se sabe; para solucionar este problema se cuenta con la distribución "t de Student" en la que se asume el conocimiento del valor del error estándar de una muestra.

$$t = \frac{\bar{y} - \bar{y}}{\sqrt{s^2/n}}$$

La distribución "t" de Student es una distribución en forma de campana similar a la distribución normal, pero con "colas" más largas. La longitud de las "colas" depende del número de grados de libertad asociados con el error estándar "s" de la muestra. Las colas son mucho más largas para desviaciones estándar calculadas a partir de muestras pequeñas. Cuando el número de grados de libertad es grande, la distribución de Student es idéntica a la normal.

Un porcentaje "P%" de intervalo de confianza de la media poblacional puede ser determinado a partir de la media de la muestra (\bar{y}), el error estándar de la muestra (s) y con el valor de la "t" de Student. Los límites que definen el intervalo de confianza I.C (P%) son:

$$I.C. = \bar{y} \pm t \cdot s / \sqrt{n}$$

donde:

- t = Porcentaje de la distribución de Student para el número de grados de libertad en el estimado; (ver tabla #2 del apéndice I).
- s = Error estándar de la muestra.
- n = Número de observaciones.

2.3 ELECCION DEL NUMERO DE OBSERVACIONES

En esta sección se proponen lineamientos para la elección del número apropiado de corridas experimentales.

En el caso de los diseños factoriales completos F^k , donde el "F" representa el número de niveles o valores (digamos que 2) que toma cada "k" variable independiente (supongamos que son 3), es obvio que por el concepto de la matriz $F \times k$, se requiere un número de corridas igual a $2^3 = 8$. Pero en un experimento en donde se tienen muchas variables indepen-

dientes por estudiar, el número de corridas aumentaría demasiado; para estos casos, como se mostró en la figura de Evolución del Programa Experimental, se recurre a los experimentos de tamis en donde los diseños permiten seleccionar los factores que influyen en el valor de una respuesta mediante un número modesto de corridas. En el capítulo siguiente se comprenderá mejor este concepto.

Así como los límites de confianza de dos medias de la población se usarán para analizar los resultados de experimentos ya diseñados, es posible utilizar la fórmula de intervalos de confianza antes de correr el estudio, para así poder calcular el número de corridas requerido para asegurar el éxito. Si un experimentador quiere obtener la probabilidad de cambiar en un proceso dado el valor del nivel actual y_1 de la viscosidad de un producto determinado a uno nuevo y_2 , es decir, espera encontrar una diferencia $\Delta = y_2 - y_1$, entonces el espaciamento total de intervalo de confianza para la diferencia debe ser igual o menor al Δ mismo.

Si Δ es igual a la expresión para el espaciamento del intervalo de confianza de la diferencia de dos medias:

$$\Delta = [(\bar{y}_1 - \bar{y}_2) + 2ts / (\sqrt{N})] - [(\bar{y}_1 - \bar{y}_2) - 2ts / (\sqrt{N})]$$

$$\Delta = 4ts / (\sqrt{N})$$

Despejando para tamaño de muestra "n":

$$n = \left(\frac{4t}{\Delta / s} \right)^2$$

Si se aproxima "t" a 2 (que es cuando el número de corridas se aproxima a 30, es decir, cuando la distribución de Student tiende a la normal), tenemos:

$$n = \left(\frac{8}{\Delta / s} \right)^2$$

Δ / s es una "señal a ruido", donde la señal es Δ , y el ruido "s", es el error experimental. De hecho, el "8" es algo conservador y "7" sería más adecuado en ciertas ocasiones. De ahí se deduce:

- 12 a 16 corridas se requieren para detectar una diferencia del doble tamaño del error experimental, $(\Delta / s) = 2$.
- Se requieren de 48 a 64 corridas para detectar una diferencia del tamaño del error experimental, $(\Delta / s) = 1$.
- Se requieren 196 a 256 corridas para detectar una diferencia de la mitad del error experimental, $(\Delta / s) = 0.5$.

Aparte de este método analítico, existe uno que consiste en la consulta de tablas y gráficas; se utiliza básicamente para detectar la diferencia entre los resultados de una determinada variable por medio de dos métodos distintos (*, **).

En resumen, hay métodos analíticos, gráficos y/o tablas para establecer el número de corridas que se requieren según el objetivo: cálculo de efectos de una variable independiente en una respuesta determinada, variación de una respuesta en un proceso dado o diferencia en ésta al tener métodos distintos de evaluación, etc., pero siempre es necesario que el que elija finalmente cuántos experimentos le permitirán conocer sus objetivos, sea el experimentador, basándose en su criterio y soportándose por los diseños con que se cuenta. El uso de los diseños factoriales que se tratarán en los siguientes capítulos nos permite obtener un mejor valor de un número limitado de corridas explorando más de un factor en cada una de las observaciones.

(*) "Design of Experiments, a Realistic Approach" - Anderson & McLean
Marcel Dekker, N.Y. and Basel. 1974

(**) Chemical Engineering - March 28, 1966 ("In-Plant Experimentation" by J. Stuart Hunter)

"DISEÑOS FACTORIALES"3.1 INTRODUCCION

En la figura 2.1.1 del capítulo anterior, referente a la Evolución del Programa Experimental, se hacen notar algunos diseños. En este capítulo se expondrán los principales conceptos para poder asimilar las bases de los diseños factoriales completos y los de tamiz (factoriales fraccionados y Plackett-Burman).

Siguiendo dicha evolución, en un caso práctico generalmente al inicio se deben manejar muchas variables de entrada, por lo que se utilizan diseños de tamiz en esta etapa; posteriormente el número de dichas variables disminuye y es entonces cuando los diseños factoriales y/o de superficies de respuesta son aplicados.

Sin embargo, para una mayor facilidad de asimilación del tema, en este capítulo se invertirá el orden, es decir, primero se abordará el diseño factorial y posteriormente los de tamiz.

Es importante que antes de leer este capítulo, esté comprendido el tema contenido en el apéndice II, titulado "Álgebra Matricial".

3.2 PLAN FACTORIAL 2^k

Como se mencionó anteriormente, el exponente (k) se refiere al número de factores o variables independientes de un experimento, mientras que la base (2) se refiere a los distintos niveles o valores que toma cada una de esas variables.

Los diseños factoriales permiten la estimación de los efectos en una respuesta (variable dependiente) cada una de las variables independientes involucradas. Con la misma precisión, también pueden ser estimados los efectos de la interacción de dos (o más) de ellas en dicha respuesta.

El número de corridas experimentales "n", requeridas en un diseño factorial de "k" factores con "L" niveles por factor es:

$$n = L^k$$

Esto es práctico siempre y cuando no se tengan más de 5 factores, ya que, por ejemplo, para 6 factores, tenemos 2⁶ (64 corridas), lo cual es prácticamente prohibitivo. En caso de tener más de 6 factores, se utiliza un diseño de tamizado (Plackett-Burman, Factoriales Fraccionados) en la primera etapa del experimento, que nos permita hacer una selección de las variables más importantes y así después trabajemos más profundamente con pocas variables. Más adelante se explicarán estos diseños.

Las características generales de Diseños 2^k son las siguientes:

- Se pueden usar factores continuos y discretos
- Experiencias uniformemente distribuidas en el espacio
- Son usados para estimar efectos principales y de interacción, pero no se pueden estimar efectos de curvatura.

3.2.1 Variables Codificadas

La transformación de las variables reales en codificadas es una herramienta muy útil para poder comparar los valores de los efectos de las variables, además de que facilitan los cálculos.

Los valores de las variables reales (cuya clasificación se vió en el capítulo anterior) se transforman o codifican en dos niveles, -1 y +1 (menor y mayor para variables continuas; condición "A" y condición "B" para variables discretas) de la siguiente manera:

Variable Real Continua	Valores Reales de las Variables	
	150 °C	180 °C
Variable Real Discreta	Catalizador Platino	Cat. Paladio
Variable Codificada	-1	+1

Explicación:

Variable Codificada:

$$X_i = \frac{x_i - x_0}{A/2}$$

donde:

$$A = \text{Rango} = x_2 - x_1 \quad (\text{valor mayor} - \text{valor menor})$$

$$x_0 = x_1 + \frac{A}{2}$$

x_i = Valor real de la variable real continua.

En el caso de las variables discretas, es lógico que no se hace ninguna operación, simplemente el experimentador elige la codificación aleatoriamente.

Ahora podemos deducir cómo se obtuvo la codificación de la variable continua (temperatura) del ejemplo anterior:

$$A = 180 - 150 = 30$$

$$x_0 = 150 + \frac{30}{2} = 165$$

$$\text{Variable Codificada} = \frac{\text{Temperatura} - 165}{15}$$

Variable Real

$$x = 150$$

$$x = 180$$

Variable Codificada

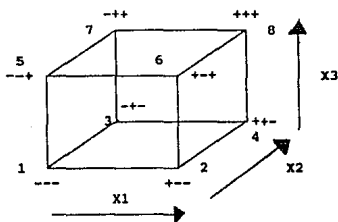
$$X = (150 - 165)/15 = -1$$

$$X = (180 - 165)/15 = +1$$

De esta manera, obtenemos un diseño experimental con variables codificadas que se puede representar geomótricamente en la figura 3.2.1.

Fig. 3.2.1

DISEÑO FACTORIAL 2^k



3.2.2 Geometría General

Cuando algún científico está interesado en conocer cómo se va afecta cierta respuesta por la influencia de factores x_1, x_2, \dots, x_k , el hecho de escoger correctamente un determinado camino experimental a seguir llevará seguramente a un ahorro de tiempo y gastos económicos. De hecho, si se desea estimar en una relación polinomial dichas influencias-respuesta, un diseño experimental bien aplicado, puede proveer una mejor eficiencia para estimar los coeficientes del modelo representado por una ecuación. El arreglo está dado por:

$$D = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \dots & x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} & \dots & x_{k2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1n} & x_{2n} & \dots & x_{kn} \end{bmatrix}$$

que indica las combinaciones de los niveles escogidos para los factores de entrada y que caracteriza el plan experimental; se le conoce como "matriz de diseño".

Escoger un diseño apropiado para una determinada situación no es tan sencillo; los niveles o valores que tomará cada variable de entrada están en función del conocimiento e interés de cada experimentador.

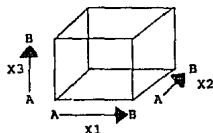
El tipo de experimento a ser estudiado en esta sección es el factorial completo.

En la figura 3.2.2, se representa la región experimental correspondiente a tres factores, dentro de la cual se efectuarán corridas experimentales. Cada dimensión del cubo representa un factor (es decir, una variable independiente) en el experimento (X_1 , X_2 , X_3).

Si se llevan a cabo una o más corridas experimentales en cada esquina del cubo, el conjunto de dichas corridas se simboliza en un diseño experimental llamado 2^3 , en donde el exponente (3) simboliza el número de factores y la base (2) indica el número de condiciones o niveles seleccionados para cada factor. El resultado numérico de 2^3 es 8, que equivale a las combinaciones posibles entre los tres factores a dos niveles, representadas por las esquinas del cubo.

Fig. 3.2.2

DISÑO FACTORIAL 2^3



A = Nivel Bajo
B = Nivel Alto

Es obvio que una representación geométrica se hace más complicada conforme aumenta el número de variables, por lo que en un caso práctico de muchas variables, sería poco convencional tratar de comprender por medio de geometría el desarrollo del experimento. Es por eso que si se entiende el concepto manejando dos o tres variables, aún ayudados por representaciones de este tipo, será fácil la planeación del trabajo a realizar cuando se presente un caso más complicado y el desarrollo de las operaciones matemáticas no se traducirá sólo en números abstractos que no nos dejen comprender lo que se está haciendo sino hasta la obtención de algún resultado definitivo. La matriz codificada de este diseño es la siguiente:

X_1	X_2	X_3	y
-	-	-	y_1
+	-	-	y_2
-	+	-	y_3
+	+	-	y_4
-	-	+	y_5
+	-	+	y_6
-	+	+	y_7
+	+	+	y_8

Está dada por un orden estándar alternando los signos "-" y "+", elaborado por un método conocido como arreglo de Yates; los signos representan el nivel bajo y alto, respectivamente, de cada variable.

Una tabla como la anterior es construida fácilmente para cualquier diseño factorial 2^k . Empezando con la columna llena de "1's" (signos "+") que representa la media de la corrida, para la siguiente "c" columna se adopta la regla de repetición de signos: 2^{c-1} , donde "c" es el número de la columna que se está formando. Por ejemplo, si se trata de la primera columna (X_1), se tiene $2^{1-1} = 2^0 = 1$, lo cual significa que habrá un sólo signo en forma alternada y por convención se inicia con un "-" y después con un "+" y así sucesivamente.

En el transcurso de los ejemplos, se continuará explicando este arreglo de Yates, ya que es una herramienta que facilita los cálculos de los efectos de las variables y de sus interacciones, así como el análisis de resultados.

3.2.3 Geometría de los Efectos Principales

El efecto principal de un factor (por ejemplo, X_1) es igual a la diferencia de los promedios de las respuestas (representadas por " \bar{y} ") al cambiar su valor de un nivel a otro.

En la figura 3.2.3 se muestra el efecto principal del factor X_1 . Por ejemplo, al considerar la línea frontal de la base del cubo, se observa que a lo largo de ella los valores de X_2 y X_3 permanecen constantes. Al final del recorrido de dicha línea, se han obtenido dos puntos experimentales que difieren únicamente respecto a X_1 .

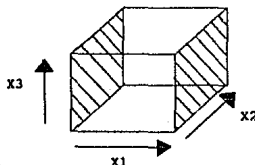
El promedio de los cuatro estimados de X_1 cuando X_2 y X_3 permanecieron constantes, se llama "efecto principal de X_1 ":

$$\begin{aligned} \text{Efecto de } X_1 &= \bar{X}_1 = \frac{(y_2-y_1)+(y_4-y_3) - (y_6-y_5)+(y_8-y_7)}{4} \\ &= \frac{(y_2+y_4+y_6+y_8) - (y_1+y_3+y_5+y_7)}{4} \end{aligned}$$

Es decir, el efecto principal de X_1 es una comparación del promedio de las respuestas " y " en la cara derecha del cubo (cuando X_1 tiene su nivel alto) y las de la cara izquierda del mismo (cuando X_1 tiene su nivel bajo).

Fig. 3.2.3

EFFECTO PRINCIPAL DE X_1



4 corridas a X_1 alto
4 corridas a X_1 bajo

Estos cálculos pueden ser más fácilmente elaborados utilizando la matriz del diseño, al multiplicar el valor de los datos de la columna de "y's" por la columna de signos encabezada por X1 y dividiendo el valor entre el número de signos "+" que se encuentra en esta última columna mencionada:

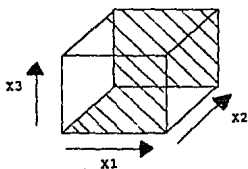
$$\begin{aligned} \lambda_{X1} &= \frac{(-y1+y2-y3+y4-y5+y6-y7+y8)}{4} \\ &= \frac{(y2+y4+y6+y8)-(y1+y3+y5+y7)}{4} \\ &= \frac{\sum y_i X_i}{n/2} \end{aligned}$$

que es exactamente lo mismo que se obtuvo al deducir la secuencia de cálculo con ayuda de la figura 3.2.3.

De la misma manera, el efecto principal de X2 se determina por la diferencia de los promedios de las respuestas entre los planos posterior y frontal del cubo, mientras que el efecto principal de X3 se obtiene utilizando los planos superior e inferior (ver figuras 3.2.4 y 3.2.5); o bien, multiplicando la columna de "y's" por los signos de las columnas "X2" y "X3".

Fig. 3.2.2.2

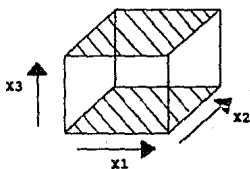
EFFECTO PRINCIPAL DE X2



$$X2 = \frac{(y3+y4+y7+y8)-(y1+y2+y5+y6)}{4}$$

Fig. 3.2.2.3

EFFECTO PRINCIPAL DE X3



$$X3 = \frac{(y5+y6+y7+y8)-(y1+y2+y3+y4)}{4}$$

3.2.4 Efectos de Interacción de dos Variables

La interacción de dos variables independientes, digamos X1 y X2 está dada por lo siguiente:

$$\begin{aligned} \lambda_{X1 \times X2} &= \frac{1}{2} \{ (\text{promedio del efecto de X1 cuando X2 tiene su valor alto}) \\ &\quad - (\text{promedio del efecto de X1 cuando X2 tiene su valor bajo}) \} \end{aligned}$$

Es decir,

$$\begin{aligned} \lambda_{X1 \times X2} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{(y4-v3)+(y8-v7)}{2} - \frac{(y2-v1)+(y6-v5)}{2} \right\} \\ &= \frac{(y1+v4+y5+v8) - (y2+v3+v6+v7)}{4} \end{aligned}$$

Es importante notar que este efecto de interacción puede expresarse equivalentemente como la diferencia de los promedios de las respuestas para X2 cuando X1 está en su nivel alto.

Por medio de la matriz, también el efecto de interacción es más fácilmente calculado, gracias a la formación de una nueva columna que resulta de multiplicar las dos representadas por X1 y X2:

y	X1	X2	X1X2
y1	-	-	+
y2	+	-	-
y3	-	+	-
y4	+	+	+
y5	-	-	+
y6	+	-	-
y7	-	+	-
y8	+	+	+

y si esta nueva columna es multiplicada por los datos de la columna "y" y dividida entre el número de signos "+" (4), tenemos:

$$\begin{aligned} \lambda_{X1X2} &= \frac{(y1-v3+y4+y5-v6-v7+y8)}{4} \\ &= \frac{(y1+y4+y5+y8) - (y2+v3+v6+v7)}{4} \end{aligned}$$

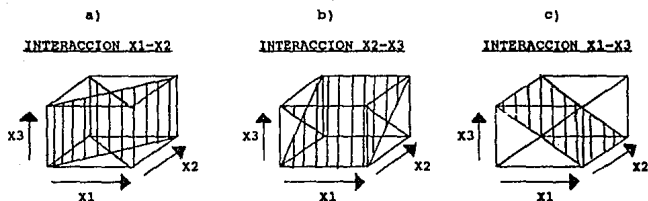
que es nuevamente lo mismo que se obtuvo a partir de la figura del cubo.

El resultado se representa geoméricamente en las figura 3.2.6.a, como dos planos diagonales que se forman al unir pares de puntos opuestos. Tratando de la misma manera a las demás interacciones entre dos variables que pueden obtenerse (X2-X3 y X1-X3), obtenemos las figuras 3.2.6 "b" y "c", respectivamente.

$$\lambda_{X2X3} = \frac{(y1+y2-v3-v4-y5-v6+v7+v8)}{4} = \frac{(y1+y2+v7+v8)}{4} - \frac{(v3+v4+y5+v6)}{4}$$

$$\lambda_{X1X3} = \frac{(y1-y2+v3-v4-y5+v6-v7+v8)}{4} = \frac{(y1+v3+v6+v8)}{4} - \frac{(y2+v4+y5+y7)}{4}$$

Fig. 3.2.6



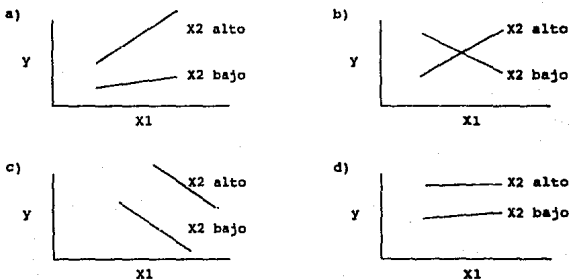
En la serie de figuras 3.2.7 (a, b, c y d), puede observarse el efecto de distintos tipos de interacciones de X1 y X2 en una variable dependiente "y".

La fig. a), muestra que el efecto de X1 en "y" es más fuerte cuando X2 tiene un valor alto; es decir, el efecto de X1 está en función del valor que tome la variable X2. En la fig. b), el efecto de X1 en "y" cambia de signo (es decir, afecta contrariamente) según el valor que tome X2; este tipo de interacción es poco común, pero por su naturaleza es muy peligrosa cuando llega a presentarse, ya que puede ocasionar confusión en el experimentador.

La fig. c), muestra que el efecto de X1 en "y" es el mismo a cualquier valor de X2, por lo cual no existe interacción entre ellas. En la fig. d), las líneas que representan el efecto de X1 en "y" a distintos valores de X2, son paralelas y casi horizontales, lo cual revela que X1 tiene muy poco efecto en "y".

Fig. 3.2.7

INTERACCION ENTRE X1 Y X2



3.2.5 Efecto de Interacción Múltiple o de Alto Orden (Más de dos variables)

La interacción entre tres factores X1, X2 y X3 está dada por la comparación del valor del efecto de la interacción X1 y X2 cuando el nivel de X3 varía:

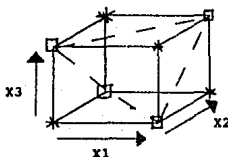
Interacción X1*X2	X3
$\frac{(y_8-y_7)-(y_6-y_5)}{2} = \frac{(y_5+y_8)-(y_6+y_7)}{2}$	ALTO
$\frac{(y_4-y_3)-(y_2-y_1)}{2} = \frac{(y_1+y_4)-(y_2+y_3)}{2}$	BAJO
$\text{Interacción ABC} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(y_5+y_8)-(y_6+y_7)}{2} - \frac{(y_1+y_4)-(y_2+y_3)}{2} \right\}$ $= \frac{1}{4} \{ (y_2+y_3+y_5+y_8) - (y_1+y_4+y_6+y_7) \}$	

Esta interacción múltiple en tres dimensiones o tres factores, se representa geoméricamente en la figura 3.2.8 y es el promedio de los valores de las respuestas en dos grupos de puntos. Los puntos de cada uno de esos grupos han sido enlazados por medio de líneas punteadas que forman el contorno de una pirámide equilátera. Cada grupo se define por un valor constante obtenido a partir de los valores +1 y -1 asignados a cada nivel de los puntos en el diseño. Un grupo quedará representado por +1 y otro por -1.

Esta agrupación de "bloques" es muy utilizada en este tema. Cada bloque representa una serie de corridas experimentales que están "balanceadas" geoméricamente, como se muestra en la figura 3.2.8, donde cada bloque (grupo de corridas experimentales) forma una pirámide ortogonal respecto a la pirámide del otro grupo.

Fig. 3.2.8

INTERACCION DE 3 VARIABLES



2 Grupos "equilibrados"
geoméricamente:

" - 1 " : □

" + 1 " : *

Nuevamente aquí la matriz de diseño facilita los cálculos y se llega al mismo resultado obtenido a partir de la figura geométrica. Gracias a la formación de la nueva columna X1X2X3 que surge de multiplicar los signos de las columnas X1, X2 y X3 (que es lo mismo que multiplicar la columna X1X2 por la columna X3), finalmente, la tabla de signos queda de la siguiente manera:

Fig. 3.2.9

I	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1X2X3	y
+	-	-	-	+	+	+	-	y1
+	+	-	-	-	-	+	+	y2
+	-	+	-	-	+	-	+	y3
+	+	+	-	+	-	-	-	y4
+	-	-	+	+	-	-	+	y5
+	+	-	+	-	+	-	-	y6
+	-	+	+	-	-	+	-	y7
+	+	+	+	+	+	+	+	y8

La tabla de signos se acompleta por la adición de una columna de ocho signos "+" encabezada por "I". Es necesaria para obtener el promedio de las respuestas. Esto está explicado en el apéndice II (Álgebra Matricial).

3.3 FORMACION DE UNA MATRIZ DE EXPERIENCIAS (ARREGLO ESTANDAR)

En esta sección se llevará a cabo un ejercicio que ayudará de manera práctica a comprender cómo se aplica esta metodología de experimentación en un problema dado. Este ejemplo se desarrolló utilizando información de la revista Chemical Engineering Progress (Vol. 56, No. 11), Noviembre de 1960; "Fitting Yield and Cost Response Surfaces" por Lind. Elmer E., Hickman John B. y Goldin J.

3.3.1. Ejemplo

En un proceso que consiste en varias etapas secuenciales de purificación y extracción, se obtiene un antibiótico. Esta operación se caracteriza por la separación de pequeñas cantidades de productos fermentados a partir de toneladas de materia inerte e impura. Cada etapa del proceso sirve para eliminar algunas impurezas y así, finalmente, obtener el medicamento.

La etapa de extracción con solventes es la de interés en este problema, ya que los materiales utilizados aquí son los más caros y además las principales propiedades del antibiótico se obtienen en esta parte del proceso.

En la etapa anteriormente mencionada el antibiótico está contenido en una solución y es extraído de ésta en un agente orgánico. Los agentes A y B se combinan con el antibiótico y forman una molécula que se disuelve en el solvente. Las cantidades de los agentes A y B, así como el pH en el cual la extracción se lleva a cabo, tienen un fuerte efecto en las características del producto.

3.3.2. Planeación Experimental

Una vez comprendido el objetivo del problema, es necesario establecer los pasos que se van a seguir, con el fin de que el trabajo sea más sencillo.

En cuanto a los dos primeros pasos (riesgos de materiales y procesos, recopilación de información), vamos a asumir que ya los conocemos, por lo que lo siguiente es evaluar de manera experimental la influencia de las variables en el % de producto recuperado a partir de la materia prima y que los efectos de éstas se representen en una ecuación matemática.

El proceso ya ha sido revisado y gracias a diversos datos de operación, todas las variables del proceso están plenamente identificadas, por lo que sólo tres de ellas han sido las seleccionadas por considerarse que son las que tienen una mayor influencia en el porcentaje de producto final respecto a la materia prima: x_1 = % de agente A, x_2 = pH y x_3 = % de agente B.

3.3.2.1. Matriz de Diseño

Como es la primera vez que se plantea este problema y se tienen que evaluar sólo tres variables, haremos el experimento con sólo dos valores (niveles) para cada variable, por lo que el diseño experimental será 2^3 . La matriz está dada por la figura 3.2.9, pero además se ha decidido investigar si existe una curvatura en la curva que representa la respuesta y por lo tanto si una ecuación lineal es la adecuada para el sistema; para investigar la existencia de dicha curvatura, se correrá un punto central con coordenadas (0,0,0).

Es claro que una vez realizado nuestro experimento no sólo sabremos de que manera influye cada una de las tres variables, sino también cómo lo hacen las interacciones entre ellas.

El paso siguiente es plantear las variables reales y las variables codificadas. Las variables reales son las siguientes:

Símbolo	Factor	Valores (min.,máx.)		Rango A	$x = x_1 + \frac{\Delta}{2}$	
		x_1	x_2		x_0	Δ
x_1	%A	0	2.5	2.5		1.25
x_2	pH	4.5	5.5	1		5
x_3	%B	0	2.5	2.5		1.25

Variables Codificadas:

$$X1 = \frac{x1 - x0}{A/2}$$

$$X1 = \frac{\% \text{ de agente A} - 1.25}{1.25}$$

$$X2 = \frac{\text{pH} - 5}{0.5}$$

$$X3 = \frac{\% \text{ de agente B} - 1.25}{1.25}$$

3.3.2.2 Experimentación

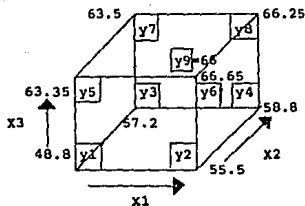
Ya teniendo nuestro diseño experimental, lo siguiente es decidir cuántas pruebas se harán para cada condición y qué tan posible es eliminar al máximo los errores de sesgo.

La duración de cada experimento es de 2hrs., aproximadamente y el costo nos permite hacer dos corridas para cada condición; debido a la naturaleza de las variables, la formación de subgrupos de corridas (bloques) es factible.

Una vez resuelto esto, tenemos los siguientes resultados:

No. Exp.	Corrida	X1	X2	X3	Bloque	y1	y2	\bar{y}	$ y1-y2 $	s^2
8	1 10	+	+	+	1 2	69.2	63.3	66.25	5.9	17.41
2	2 11	+	-	-	1 2	55.8	55.2	55.50	0.6	0.18
3	3 12	-	+	-	1 2	57.8	56.6	57.20	1.2	0.72
5	4 13	-	-	+	1 2	65.2	61.5	63.35	3.7	6.85
1	5 14	-	-	-	1 2	48.7	48.9	48.80	0.2	0.02
6	6 15	+	-	+	1 2	69.3	64.0	66.65	5.3	14.05
4	7 16	+	+	-	1 2	59.1	58.5	58.80	0.6	0.18
7	8 17	-	+	+	1 2	65.2	61.8	63.50	3.4	5.78
9	9 18	0	0	0	1 2	68.6	63.4	66.0	5.2	13.52

Para facilitar el desarrollo y la explicación de este ejemplo, vamos a colocar los resultados en forma de cubo:



3.3.2.3 Cálculo de Efectos

EFFECTOS PRINCIPALES

Variable	Operación	Resultado
X1	$\frac{(55.5+58.8+66.65+66.25)-(48.8+57.2+63.35+63.5)}{4}$	= + 3.59
X2	$\frac{(57.2+58.8+63.5+66.25)-(48.8+55.5+63.35+66.65)}{4}$	= + 2.86
X3	$\frac{(63.35+66.65+63.5+66.25)-(48.8+55.5+57.2+58.8)}{4}$	= + 9.86

EFFECTOS DE INTERACCION ENTRE DOS VARIABLES

Variables	Operación	Resultado
X1X2	$\frac{(48.8+58.8+63.35+66.25)-(55.5+57.2+66.65+63.5)}{4}$	= - 1.41
X2X3	$\frac{(48.8+55.5+63.5+66.25)-(57.2+58.8+63.35+66.65)}{4}$	= - 2.90
X1X3	$\frac{(48.8+57.2+66.65+66.25)-(55.5+58.8+63.35+63.5)}{4}$	= - 0.56

EFFECTO DE INTERACCION DE TRES VARIABLES (ORDEN MULTIPLE):

Variables	Operación	Resultado
X1X2X3	$\frac{(55.5+57.2+63.35+66.25)-(48.8+58.8+66.65+63.5)}{4}$	= + 1.14

Estos cálculos se facilitaron gracias a la interpretación de la figura geométrica y como se comprobó en secciones anteriores, el mismo resultado puede obtenerse a partir de la tabla de signos. Esta tabla se acompaña con otros renglones y columnas, logrando así el arreglo estándar de Yates. Las instrucciones para construir dicha tabla son las siguientes (nótese que aquí ya tenemos los dos primeros puntos):

1) Copiar la tabla 3 de signos correspondiente al número de factores de entrada (apéndice I).

2) Escribir el promedio de las respuestas para cada corrida a la derecha de la tabla. Asegurarse que corresponde al orden del experimento y no al orden en que se llevaron las corridas aleatoriamente.

3) Sumar en cada columna las respuestas que corresponden a los signos "+" y escribir el resultado en la línea "Sum +".

4) Sumar en cada columna las respuestas que corresponden a los signos "-" y escribir el resultado en la línea "Sum -".

5) Sumar los valores de "Sum +" y "Sum -" para cada columna. Escribir el resultado en la línea "Verificar" (en todas las columnas este dato deberá ser el mismo).

6) Restar "Sum -" de "Sum +". Escribir el resultado en la línea "Dif".

7) Dividir la diferencia "Dif" entre el número de signos "+" de esa columna. Este número es el efecto del factor (principal o de interacción, según la columna). El efecto para la primera columna (I) es el promedio de todas las esquinas del "cubo".

Los dos últimos renglones (LIC, SIC) corresponden a los límites de confianza, cuya obtención se explicará posteriormente.

El arreglo para este ejemplo es el representado por la figura 3.3.3.

3.3.3 Análisis de Efectos

En esta sección se identifican los efectos reales, es decir, aquéllos que son los que verdaderamente pueden describir el comportamiento del sistema del ejercicio; se obtendrá además una ecuación de primer grado que represente la respuesta en función de los efectos reales mencionados. Finalmente, se investigará si es necesario o no hacer un diseño de mayor grado, es decir, se verificará si el polinomio de primer grado es funcional para este sistema.

3.3.3.1 Error Estándar y Límite de Confianza

Si el efecto de un factor o interacción es grande en cuanto a valor absoluto se refiere, es casi seguro que dicho efecto se incluirá en la descripción del sistema y que influirá notablemente en el comportamiento de éste. Sin embargo, si el valor absoluto de un efecto tiende a cero, entonces el significado del efecto no es fácil de determinar. Existe un análisis de límites de confianza que auxilia en cuanto a la verificación de cuáles efectos son los que representan en sí al sistema. Si el intervalo de confianza incluye cero entre sus límites inferior (LIC) y superior (SIC), se puede decir que el efecto en cuestión no influye en el sistema, mientras que si por el contrario, dicho intervalo no incluye cero, entonces el efecto tiene una influencia en el mismo.

Los límites de confianza se pueden estimar de dos maneras, dependiendo de la forma en que el estimado del error experimental "s" haya sido obtenido:

1) Efecto de Factores No Asignados:

Esto se utiliza cuando en las columnas de la tabla están representadas variables que no están consideradas como factores de entrada o bien, interacciones de dichas variables, pero que su influencia se manifiesta en los efectos obtenidos para esas columnas. Esta técnica no requiere de una medida de la variabilidad del sistema ni replicación en las diferentes condiciones experimentales. Se usa particularmente en los diseños de tamiz (sección 3.4, en donde se explica un ejemplo utilizando esta técnica).

Si existen "q" efectos no asignados, el error estándar es:

$$Sfe = \sqrt{\frac{Ufe(1)^2 + Ufe(2)^2 + \dots + Ufe(q)^2}{q}}$$

donde Ufe() es el efecto del factor o interacción no asignado.

Posteriormente, utilizando el valor de "t" (en función del porcentaje de confianza que se requiera y de los grados de libertad del sistema), se obtiene la parte positiva y/o negativa del intervalo de confianza tsfe:

$$tsfe = Sfe * t$$

El límite de confianza inferior se obtiene sustrayendo este valor de cada efecto y el límite superior, adicionándolo. Estos valores se colocan en las dos últimas líneas de la tabla, LIC y SIC, respectivamente.

2) Error por replicación:

Si en el diseño se incluyen mínimo dos corridas para cada condición experimental (combinación de signos), entonces los límites de confianza se obtienen a partir del estimado del error estándar ponderado, s.

Es necesario obtener el error estándar del efecto como una etapa intermedia. Solamente depende del tamaño del diseño y del número de corridas o réplicas de cada condición:

$$Sfe = \frac{2s}{\sqrt{n}}$$

donde "n" es el total de corridas, incluyendo réplicas.

Para el ejemplo que se está explicando, tenemos lo siguiente:

Varianza ponderada:

$$sp = \frac{(17.41)^2 + (0.18)^2 + (0.72)^2 + (6.85)^2 + (0.02)^2 + (14.05)^2 + (0.18)^2 + (5.78)^2 + (13.52)^2}{(9)}$$

$$sp = 84.91$$

Desviación Estándar:

$$s = \sqrt{84.91}$$

$$s = 9.21$$

Error Estándar:

$$Sfe = \frac{2 * 9.21}{\sqrt{18}}$$

$$Sfe = 4.34$$

El valor de "t" para 9 grados de libertad del sistema y un 97.5% de nivel de confianza requerido para este experimento es 2.26, por lo que el valor de tsfe es:

$$tsfe = 4.34 * 2.26$$

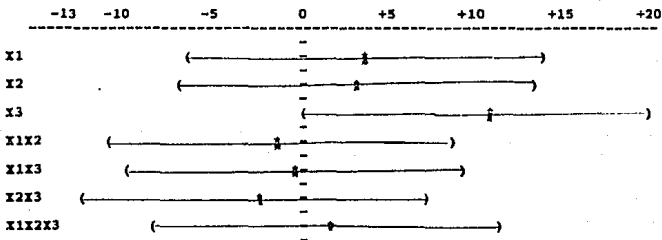
$$tsfe = 9.80$$

Los límites de confianza superior e inferior se obtienen sumando o restando, respectivamente, este valor a cada efecto y el resultado se coloca en los dos últimos renglones de la figura 3.3.3.

Como se mencionó anteriormente, si el intervalo de confianza incluye cero, es muy probable que ese efecto no tenga influencia significativa en el comportamiento del sistema y sucede lo contrario si el cero está contenido en dicho intervalo. Para facilitar este análisis, se grafican los intervalos de cada efecto (ver figura 3.3.3).

Fig. 3.3.1

INTERVALOS DE CONFIANZA DE LOS EFECTOS



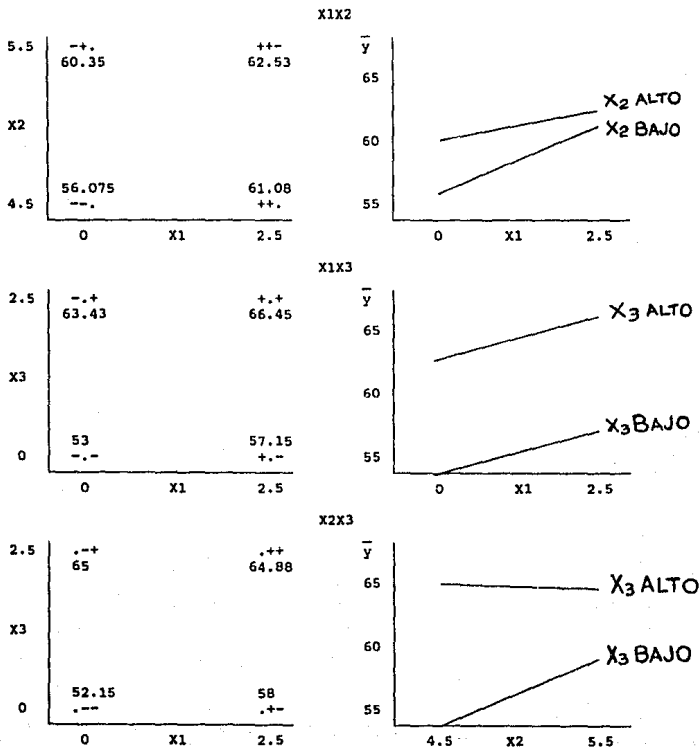
Es claro que X3 (t de agente B) es el factor que más influye en el sistema; el valor de su efecto es 9.86, mientras que el que más se le aproxima (X1) tiene 3.59.

En cuanto a valores negativos de efectos, significa que la respuesta y la variable o interacción son inversamente proporcionales, como en el caso de X2X3 (-2.98).

Por lo que se refiere a interacciones, los valores de los efectos de estas son muy pequeños, por lo que se puede decir que no influyen en el comportamiento del sistema. Las interacciones se pueden apreciar en la figura 3.3.2; los valores fueron obtenidos de promediar las dos respuestas "y" que se tienen para cada condición de signos: por ejemplo, en la gráfica X1X2, el punto (--) se obtuvo de: $\bar{y} = (48.8+63.35)/2 = 56.075$.

Fig. 3.3.2

INTERACCIONES DE DOS VARIABLES



El modelo matemático que representa el sistema está dado por la siguiente ecuación obtenida por el método de mínimos cuadrados:

$$Y = 60 + 1.795 X_1 + 1.43 X_2 + 4.93 X_3 - 0.705 X_1X_2 - 0.28 X_1X_3 - 1.49 X_2X_3 + 0.57 X_1X_2X_3$$

donde:

$$X_1 = \frac{\% \text{ Agente A} - 1.25}{1.25} \quad X_2 = \frac{pH - 5}{0.5} \quad X_3 = \frac{\% \text{ Agente B} - 1.25}{1.25}$$

que son las variables codificadas.

Nótese que no fue necesario realizar operaciones complicadas. El término independiente de la ecuación (60) es el valor del efecto de la media y los restantes (por ejemplo 1.795), se obtuvieron dividiendo entre dos los efectos de cada columna (en este caso para X_1 , 3.59/2).

La ecuación es un polinomio de segundo grado incompleto. Los coeficientes para las interacciones X_1X_2 , X_1X_3 , X_2X_3 y $X_1X_2X_3$ ha sido incluidos, pero los términos cuadráticos X_1^2 , X_2^2 , X_3^2 , no. Estos coeficientes son requeridos cuando en un sistema existen interacciones; si éstas no existen o son tan insignificantes sólo los términos de una ecuación de primer grado son necesarios. De la figura 3.3.2. se resume que en el sistema bajo estudio, esta situación es la que se presenta; en ninguna gráfica se nota algún cambio brusco en la curva de la respuesta al interacción las variables.

Las ecuaciones de predicción, como su nombre lo indica, se utilizan para predecir la respuesta correspondiente a varios niveles de las variables independientes; es sólo válida para aplicarse en las condiciones bajo la región experimental a partir de la cual se obtuvo, pero si se desea ser empleada en zonas fuera de dicha región experimental, deben hacerse más corridas experimentales para comprobar si la misma ecuación aplica o no. Esto se comprenderá en el capítulo siguiente.

La condición (0,0,0) se utiliza para investigar si existe o no curvatura en la respuesta. El análisis consiste en comparar la media de la respuesta en el punto central respecto a la media de la respuesta de los puntos en el diseño factorial (esquinas del cubo), ésta última representada por el efecto de la primera columna de la tabla:

$$\begin{aligned} \text{Curvatura} &= \bar{Y}_i - \bar{Y}_c \\ &= 60 - 66 \\ &= -6 \end{aligned}$$

Los límites inferior y superior de confianza para el punto central es tsc. El valor de "t" sigue siendo el mismo (2.26). El error estándar de la curvatura se obtiene a partir de la fórmula para el error estándar de la diferencia de dos medias:

$$S_c = s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{c}}$$

en donde "n" es el número de corridas en el diseño factorial y "c" el número de corridas en el punto central, por lo que para el ejemplo:

$$Sc = 9.21 \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{1}{2}}$$

$$= 6.91$$

El valor de tsc es:

$$tsc = t * Sc$$

$$= 2.26 * 6.91$$

$$= 15.62$$

y este valor se suma o resta al valor del efecto en el punto central, que es el que se obtuvo de la diferencia de $Y_f - \bar{y}_c$, para obtener así los límites de confianza superior e inferior, respectivamente, del punto central:

$$LIC = - 6 - 15.62 = - 21.62$$

$$SIC = - 6 + 15.62 = 9.62$$

El análisis es el mismo; debido a que el intervalo de confianza sí incluye cero, puede asegurarse que el efecto de curvatura no existe por lo que la ecuación de primer grado obtenida es representativa del comportamiento del sistema y no será necesario elaborar un diseño de superficie de respuestas en donde una ecuación de mayor grado polinomial deba obtenerse para poder expresar mediante ella la respuesta estudiada.

Cabe hacer mención que desde el momento en que se obtiene Sc es posible detectar cuántas réplicas deben correrse en el punto central. Un valor pequeño significa una alta sensibilidad para detectar la existencia de curvatura, aunado a que la suma bajo la raíz cuadrada también debe ser pequeña.

Fig. 3.3.3

NO. EXPERIMENTO	MEDIA	YA X1	PB X2	YB X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1X2X3	y
1	+	-	-	-	+	+	+	-	48.8
2	+	+	-	-	-	-	+	+	55.5
3	+	-	+	-	-	+	-	+	57.2
4	+	+	+	-	+	-	-	-	58.8
5	+	-	-	+	+	-	-	+	63.35
6	+	+	-	+	-	+	-	-	66.65
7	+	-	+	+	-	-	+	-	63.5
8	+	+	+	+	+	+	+	+	66.25
SUM(+)	488.05	247.2	245.75	259.75	237.2	238.9	234.05	242.3	
SUM(-)	0	232.85	234.3	228.3	242.05	241.15	246	237.75	
VERIFICAR	488.05	488.05	488.05	488.05	488.05	488.05	488.05	488.05	
DIF	488.05	14.35	11.45	39.45	- 5.65	- 2.25	-11.95	4.55	
EFECTO	60	3.59	2.86	9.86	- 1.41	- 0.56	- 2.98	1.14	
LIC	58.2	- 6.3	- 6.94	0.86	- 11.21	-18.36	-12.78	-8.66	
SIC	69.8	13.39	12.66	19.66	8.39	9.34	6.82	10.94	

3.4 DISEÑOS DE TAMIZ

En esta sección se presentan los diseños de tamiz: factoriales fraccionados y Plackett-Burman.

Los diseños de tamiz son de gran utilidad en la primera etapa del programa experimental, ya que su función es la de identificar algunas variables importantes a partir de una larga lista de factores con posibilidad de tener una fuerte influencia en el sistema.

La mayoría de estos diseños son obtenidos utilizando un subgrupo de condiciones de un plan factorial completo a dos niveles; dicho subgrupo específico es escogido de tal manera que permita una estimación eficiente de los efectos de los factores.

Estos diseños son muy eficientes debido a que no se requiere efectuar demasiados experimentos y porque todos los datos se utilizan para estimar cada efecto.

Con los diseños tamiz, los efectos de interacción no se pueden aislar en una primera etapa de los efectos principales, es decir, éstos son "confundidos" con dichas interacciones. Sin embargo, el propósito de estos diseños es seleccionar unas pocas variables que posteriormente serán investigadas con mayor detalle y entonces dichas interacciones sí serán tomadas en cuenta para estudio.

Aunque ambas familias de diseños tamiz permiten calcular los efectos principales de cada factor y estimarlos independientemente unos de otros, las interacciones son lo que marcan la diferencia:

Los diseños factoriales que proporcionan estimados con una varianza mínima para cada efecto son factibles para cuando N tiene múltiplos de 4. Cuando $k = N-1$, se llaman diseños factoriales fraccionados saturados. Los diseños saturados para $N = 4, 8, 12$ y 16 están dados en tablas del apéndice I. Los diseños para los cuales N es un múltiplo de 4 fueron determinados por Plackett y Burman. Los efectos principales en estos diseños, no son independientes completamente de todas las interacciones. Cada efecto principal está "confundido" con todas las interacciones en las cuales no participa como factor. Los patrones de confusión son complejos.

Los diseños factoriales fraccionados 2^{k-p} son subgrupos de diseños factoriales completos a dos niveles y están formados por una confusión total de los efectos principales. Confusión total significa que las columnas de los efectos principales son idénticas a las de los efectos de interacción. Los patrones de diversos órdenes están claramente definidos.

El hecho de trabajar con alguna de estas dos familias de diseños, depende del tamaño (número de variables) y de los patrones de confusión que mejor se adapten al caso bajo estudio.

Los estimados de los efectos de primer orden de cada factor pueden obtenerse tomando en cuenta el concepto de $\{(y_+) - (y_-)\}$. Así mismo, la función puede expresarse en una serie de Taylor del mismo orden:

$$\eta = S_0 + S_1X_1 + S_2X_2 + \dots + S_kX_k = S_0 + \sum S_iX_i$$

Los estimados por mínimos cuadrados de los coeficientes son $b_0 = \bar{y}$ (el promedio) y $b_1 = \{iy\} / N$, donde $\{iy\}$ es el producto escalar de las observaciones correspondiente a los elementos (+) y (-) en la columna- vector para el factor X_i .

Para los diseños factoriales fraccionados saturados a dos niveles, los coeficientes cuadráticos pueden obtenerse a partir del estimado de B_0 , mientras que los coeficientes de interacciones por medio de los coeficientes de primer orden B_i . En la siguiente tabla se muestra un diseño factorial fraccionado saturado:

1	2	3	4	5	6	7
-	-	-	+	+	+	-
+	-	-	-	-	+	+
-	+	-	-	+	-	+
+	+	-	+	-	-	-
-	-	+	+	-	-	+
+	-	+	-	+	-	-
-	+	+	-	-	+	-
+	+	+	+	+	+	+

en donde b_1 estima $B_1 + B_{24} + B_{35} + B_{67}$. Es decir, el estimado del efecto principal X_1 y el de las interacciones X_2X_4 , X_3X_5 y X_6X_7 están confundidos entre sí porque las columnas de signos son iguales.

3.4.1. Diseños Factoriales Fraccionados

Los diseños factoriales fraccionados más utilizados son para 16 y 32 condiciones experimentales. Se prefieren para este mínimo de corridas, ya que entre menor sea ésta, la sensibilidad disminuye. El número de pruebas requeridas para efectuar un plan factorial 2^k completo se incrementa geométricamente conforme k aumenta en su valor.

Sin embargo, cuando k no es pequeña, la información puede obtenerse efectuando únicamente una "fracción" del diseño factorial completo.

Tomando como ejemplo un diseño factorial 2^4 , se necesitan 16 condiciones experimentales para determinar lo siguiente:

Promedio	Efectos Principales	2 Factores	3 Factores	4 Factores
1	4	6	4	1

Sin embargo, no todos estos resultados son de utilidad, ya que tiende a existir una jerarquía en términos de valores numéricos absolutos apreciables:

Efectos principales > Interacciones 2 factores > Interacciones 3 factores.

Además, como se mencionó anteriormente, cuando existen muchas variables, generalmente sólo unas cuantas son las que tienen efectos potenciales.

Para comprobar esto, se presenta a continuación una tabla de resultados de un experimento:

Prueba	Corrida	1	2	3	4	12	13	14	23	24	34	123	124	134	234	1234	y
1	2	-	-	-	+	+	+	+	+	-	-	-	-	-	-	+	0.38
2	6	+	-	-	-	-	-	-	+	+	+	+	+	+	-	-	0.40
3	12	-	+	-	-	+	+	-	-	+	+	+	+	+	-	-	0.27
4	4	+	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	-	+	+	+	0.30
5	1	-	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	+	+	0.58
6	7	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	+	+	0.56
7	14	-	+	+	-	-	+	+	-	-	-	-	+	+	-	+	0.30
8	3	+	+	+	-	+	+	-	+	-	-	+	-	-	-	-	0.32
9	8	-	-	-	+	+	-	+	-	-	-	-	+	+	+	-	0.59
10	10	+	-	-	+	-	+	+	-	-	+	-	+	-	+	+	0.62
11	15	-	+	-	+	+	-	-	+	-	-	+	-	+	-	-	0.53
12	11	+	+	-	+	+	-	+	-	+	-	-	+	-	-	-	0.50
13	16	-	-	+	+	-	-	-	-	+	+	+	-	-	-	+	0.79
14	9	+	-	+	+	-	+	+	-	+	-	-	-	+	-	-	0.75
15	5	-	+	+	+	-	-	+	+	+	-	-	-	-	+	-	0.53
16	13	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	0.54

Columna	Sum(+)	Sum (-)	Verificar	Diferencia	Efecto
1	3.99	4.07	8.06	- 0.08	- 0.01
2	3.39	4.67	8.06	- 1.28	- 0.16
3	4.37	3.69	8.06	0.68	0.085
4	4.85	3.21	8.06	1.64	0.21
12	4.00	4.06	8.06	- 0.60	- 0.008
13	4.04	4.02	8.06	0.02	0.003
14	4.04	4.02	8.06	0.02	0.003
23	3.68	4.38	8.06	- 0.70	- 0.087
24	4.02	4.04	8.06	- 0.02	- 0.003
34	4.06	4.00	8.06	0.06	0.008
123	4.15	3.91	8.06	0.24	0.03
124	4.05	4.01	8.06	- 0.04	- 0.005
134	3.99	4.07	8.06	- 0.08	- 0.01
234	4.09	3.97	8.06	0.12	0.015
1234	4.02	4.04	8.06	- 0.02	- 0.003

De los resultados de los efectos, se deduce que el promedio y los efectos más grandes son:

Promedio = 0.5038

Efectos de mayor influencia: 1 → - 0.21
4
1 → 0.16
2
1 → - 0.087
23
1 → 0.085
3

Sin embargo, el investigador sólo tiene recursos para experimentar ocho veces (la mitad de los experimentos necesarios para el diseño factorial completo) y tiene lo siguiente:

Prueba	Corrida	1	2	3	4	12	13	14	23	24	34	123	124	134	234	1234	y
1	1	-	-	-	+	+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	+	0.38
10	4	+	-	-	+	-	+	+	-	-	-	+	-	-	+	+	0.62
11	3	-	+	-	+	+	-	-	+	-	+	-	+	-	-	+	0.53
4	8	+	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	-	+	+	+	0.30
13	2	-	+	+	+	+	-	-	-	+	+	+	+	-	-	+	0.79
6	5	+	+	+	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	+	+	0.56
7	6	-	+	+	-	-	+	+	-	-	-	-	+	+	-	+	0.30
16	7	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	0.54

Columna	Sum(+)	Sum(-)	Verificar	Diferencia	Efecto
1	2.02	2.0	4.02	0.02	0.005
2	1.67	2.35	4.02	- 0.68	- 0.17
3	2.19	1.83	4.02	0.36	0.09
4	2.48	1.54	4.02	0.94	0.235
12	2.01	2.01	4.02	0.00	0.00
13	2.01	2.01	4.02	0.00	0.00
14	1.84	2.18	4.02	- 0.34	- 0.085
23	1.84	2.18	4.02	- 0.34	- 0.085
24	2.01	2.01	4.02	0.00	0.00
34	2.01	2.01	4.02	0.00	0.00
123	2.48	1.54	4.02	0.94	0.235
124	2.19	1.83	4.02	0.36	0.09
134	1.67	2.35	4.02	- 0.68	- 0.17
234	2.02	2.00	4.02	0.02	0.005
1234	4.02	0.00	4.02	4.02	0.5025

En esta tabla de signos se encuentran varias columnas iguales entre sí y que por lo tanto los valores de sus efectos son los mismos; se dice que se están "confundiendo". Cada efecto de interacción de dos variables está confundido con otra interacción del mismo orden. Todas las interacciones de dos variables son independientes de los efectos principales:

$$1=234 \quad 2=134 \quad 3=124 \quad 4=123 \quad 12=34 \quad 13=24 \quad 14=23$$

Los efectos se representan de la siguiente manera:

$$1 \rightarrow 0.5025 \text{ (promedio)}$$

1234

$$1 \rightarrow 1 + 234 = 0.005$$

1

$$1 \rightarrow 2 + 134 = -0.17$$

2

$$1 \rightarrow 3 + 124 = 0.09$$

3

$$1 \rightarrow 4 + 123 = 0.235$$

4

y así sucesivamente.

Como puede observarse, con la mitad de pruebas, se llegó a las mismas conclusiones:

- Las variables X4 y X2 son las que influyen potencialmente en el sistema; además, los valores de los efectos en ambos diseños son muy parecidos:

	Completo	Fraccionado
X4	0.205	0.235
X2	- 0.160	- 0.170

y los efectos siguientes en importancia:

	Completo	Fraccionado
X23	- 0.870	- 0.085
X3	0.085	0.090

sin embargo, estos últimos valores son aproximadamente sólo la mitad del segundo efecto más importante (X2), por lo que es prácticamente seguro que no deben tomarse en cuenta para etapas posteriores de experimentación.

Por otra parte, se mencionó ya anteriormente que el propósito de este tipo de diseños es detectar cuáles son las variables que se deben estudiar en experimentos más minuciosos y no las interacciones. En este caso, X2 y X4 son dichas variables. Además, es de hacerse notar que las interacciones de valores más altos, generalmente tienen involucradas estas variables mismas.

El diseño de ocho pruebas presentado es llamado "media fracción" y es obtenido como un diseño factorial fraccionado 2 (4-1), puesto que:

$$4 - 1 = 2 + 2 = 2$$

lo cual nos indica que el diseño incluye cuatro variables pero que únicamente 2³ = 8 pruebas serán efectuadas.

Las ocho pruebas se eligieron de la siguiente manera:

- 1) Se escribe la matriz para un diseño factorial completo 2³ con las variables 1, 2 y 3.
- 2) Se escribe la columna de signos de la interacción 123 y ésta define los niveles de la variable 4, es decir:

$$4 = 123$$

Por otra parte, los efectos confundidos pueden encontrarse fácilmente al tomar en cuenta que multiplicando los elementos de una columna por ellos mismos, se obtiene una columna de signos positivos designada como identidad I:

$$1 \times 1 = 1^2 = I \quad 2^2 = I \quad 3^2 = I \quad \dots \quad , \text{ etc.}$$

El diseño 2⁴(4-1) se construyó al fijar 4 = 123. Esta relación es llamada generador del diseño. Multiplicando ambos lados por 4:

$$4 \times 4 = 123 \times 4$$

$$4^2 = 1234$$

$$I = 1234$$

lo cual además nos indica que el diseño es de resolución IV, debido a que el generador involucra cuatro variables.

Con esta relación es posible encontrar los efectos confundidos, por ejemplo, multiplicando ambos lados del generador por I:

$$I \times I = I^2 234$$

$$I = 234$$

y de la misma manera:

$$2 = 134$$

$$3 = 124$$

$$4 = 123$$

$$12 = 34$$

y así sucesivamente.

La media fracción complementaria del diseño factorial, es encontrada si el generador se determina con $4 = -123$:

$$I = -1234$$

Prueba	1	2	3	4	\bar{y}
9	-	-	-	+	0.59
2	+	-	-	-	0.40
3	-	+	-	-	0.37
12	+	+	-	+	0.05
5	-	-	+	-	0.58
14	+	-	+	+	0.75
15	-	+	+	+	0.53
8	+	+	+	-	0.32

De aquí obtenemos:

$$1' \rightarrow 1 - 234 = -0.025$$

1

$$1' \rightarrow 2 - 134 = -0.150$$

2

$$1' \rightarrow 3 - 124 = 0.040$$

3

$$1' \rightarrow 4 - 123 = 0.175$$

4

$$1' \rightarrow 12 - 34 = -0.015$$

12

$$1 \xrightarrow{13} 13 - 24 = 0.01$$

13

$$1 \xrightarrow{14} 14 - 23 = 0.09$$

14

y nuevamente las conclusiones son las mismas: X2 y X4 son las variables importantes.

Si las dos fracciones se efectuaron, los resultados podrían combinarse para obtener los estimados de cada efecto confundido, por ejemplo:

1) Para encontrar el efecto de la variable 4:

$$1 \xrightarrow{4} 4 + 123 = 0.235$$

$$1 \xrightarrow{4} 4 - 123 = 0.175$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) = \frac{1}{2} (0.235 + 0.175) = 0.205$$

$$4 = 0.205$$

2) Para encontrar el efecto de interacción 23:

$$1 \xrightarrow{14} 14 + 23 = -0.85$$

14

$$1 \xrightarrow{14} 14 - 23 = 0.09$$

14

$$6: \quad -1 \xrightarrow{14} -14 + 23 = -0.09$$

14

$$\frac{1}{2} \left[\frac{1}{14} + \frac{(-1)'}{14} \right] = \frac{1}{2} [14 + 23 - 14 + 23] = \frac{1}{2} (-0.85 - 0.09) = -0.87$$

$$23 = -0.87$$

que son obviamente los mismos resultados obtenidos para el diseño factorial completo, pero sólo para este caso en específico, debido a que la fracción es una mitad del diseño original y al realizar la replicación por medio del cambio de signos, la otra mitad sumada a la primera da como resultado el mismo diseño factorial completo original. Sin embargo, cuando dichas fracciones son más pequeñas, es cuando se puede observar un claro beneficio de esto.

Los efectos principales se calculan al promediar los efectos correspondientes de ambas fracciones y este estimado no se ve afectado por las interacciones de dos factores.

El error del sistema es igual al valor absoluto de la diferencia entre los errores de cada diseño dividida entre dos. Este estimado se utiliza para obtener Sfe.

Un diseño factorial fraccionado que no confunde términos de primer orden entre sí, pero los confunde con interacciones de dos variables, se dice que es de resolución III y se simboliza como 2^{k-p} , donde k es el número de variables a estudiar en total y (k-p) es el exponente que nos dará la pauta para establecer el número de diferentes condiciones experimentales.

Todos los diseños Plackett-Burman son de resolución III. Los diseños que no confunden efectos principales con interacciones de segundo orden, pero sí con interacciones de tres variables o interacciones de dos variables entre sí, se dice que son de resolución IV.

3.4.1.1. Patrones de Diseño

A continuación se presentan tres grupos de casos comunes en la práctica, en los cuales este tipo de diseños es aplicado. El primer grupo (dos primeros casos) se utiliza cuando se desean efectuar 8 corridas experimentales; el segundo grupo lo conforman casos para 16 corridas experimentales (ver tablas del apéndice I) y el último para 32 corridas experimentales.

El procedimiento para aplicar este tipo de diseños es igual que para los factoriales completos: se identifican las variables independientes y dependientes, se estudia la información acerca del posible error experimental y se consideran la sensibilidad y tamaño del experimento. Aunque el objetivo es determinar efectos principales de factores, no debe descuidarse de ninguna manera los resultados de las interacciones, ya que algunas veces sucede el hecho de que una variable por sí sola no es importante, pero al combinarse con otra, la interacción formada entre ambas sí lo es.

Las tablas del apéndice I tienen asignaciones que pueden utilizarse para determinar los generadores (que se obtienen al asignarles las interacciones de mayor orden), en base al número de variables y al de corridas experimentales deseado.

Diseño para 8 corridas experimentales:

Este diseño es un ejemplo muy conveniente para explicar los diseños factoriales fraccionados, aunque en sí no es muy recomendable para uso en general, debido a su pequeña sensibilidad. Este patrón equivale al diseño factorial completo de dos niveles para 2^3 .

* Caso I: Diseño para 4 factores en 8 corridas experimentales

El cuarto efecto, X_4 , es asignado a la interacción $X_1X_2X_3$. Este diseño es conocido como 2^{4-1} o como media fracción del diseño 2^4 . Esto significa que algunos efectos e interacciones están totalmente confundidos y que por lo tanto, las columnas usadas para estimar dichos efectos son idénticas. Por ejemplo, la interacción X_1X_2 es igual a la existente entre X_3 y X_4 y que además a su vez son similares a X_4 ; el patrón de confusión es el siguiente:

$$X_1 - X_2X_3X_4$$

$$X_2 - X_1X_3X_4$$

$$X_3 - X_1X_2X_4$$

X1X2 - X3X4

X1X3 - X2X4

X2X3 - X1X4

X1X2X3 - X4

El diseño permite tres grados de libertad para estimar el error, siempre y cuando se asuma que tres interacciones de segundo orden son insignificantes (y que se utilizarán para determinar dicho error).

* Caso 2: Diseño para 7 factores en 8 corridas experimentales

El cuarto efecto, X4, es asignado a la interacción X1X2; X5 a X1X3, X6 a X2X3 y X7 a X1X2X3. Este diseño es conocido como 2^{7-4} o como un dieciséisavo del diseño factorial 2^7 , lo cual implica lo siguiente:

X1	-	X2X4	-	X3X5	-	X6X7
X2	-	X1X4	-	X3X6	-	X5X7
X3	-	X1X4	-	X2X6	-	X4X7
X1X2	-	X4	-	X5X6	-	X3X7
X1X3	-	X5	-	X4X6	-	X2X7
X2X3	-	X6	-	X4X5	-	X1X7
X1X2X3	-	X7	-	X1X6	-	X2X5 - X3X4

Cada efecto principal está confundido con tres interacciones de segundo orden, así como interacciones de mayor orden no mostradas. Los siete efectos principales saturan todos los grados de libertad, no dejando ninguno para estimar el error estándar.

Diseño para 16 corridas experimentales:

Este diseño es uno de los más utilizados. Su patrón es el mismo que el de un diseño factorial completo 2^4 y a su vez es el equivalente a la replicación del diseño factorial para ocho corridas experimentales.

* Caso 3: Diseño para 5 factores en 16 corridas experimentales

La variable X5 se asigna a la interacción X1X2X3X4. Este diseño es conocido como 2^{5-1} o media fracción del diseño 2^5 . A pesar de que esta asignación implica varias otras confusiones, ninguna de ellas involucra a un efecto principal o interacciones de dos variables. Este diseño está saturado, con cinco efectos principales y diez interacciones utilizando todos los grados de libertad, no dejando ninguno para estimar el error experimental. Este diseño puede ser utilizado como un sustituto del diseño factorial completo de cinco factores siempre y cuando la sensibilidad sea la adecuada y exista un estimado independiente del error experimental.

* Caso 4: Diseño para 15 factores en 16 corridas experimentales

Las variables comprendidas de X5 a X10 son asignadas a interacciones de segundo orden y de X11 a X15 a interacciones de tercer orden. El diseño es $2^{(15-11)}$ ó $(1 / 2048)$ del diseño 2^{15} factorial completo. Los efectos principales son independientes entre sí y están confundidos con interacciones de todos los órdenes existentes. Este diseño está totalmente saturado, porque cada columna se utiliza para estimar un efecto principal. Si las interacciones de dos variables se consideran negligibles, existen entonces ocho grados de libertad para estimar el error experimental. Si alguna de esas interacciones no es grande, puede ser excluida entonces de la ponderación.

Los efectos principales se obtienen a partir de dos promedios de sólo cuatro corridas experimentales cada uno, lo cual no es muy recomendable. Este tipo de diseño no es muy utilizado, pero es una buena ilustración de confusión de patrones.

Diseño para 32 corridas experimentales

* Caso 5: Diseño para 6 factores en 32 corridas experimentales

La variable X6 es asignada a la interacción $IIX2IX3X4X5$. Este diseño es llamado $2^{(6-1)}$ o media fracción del diseño 2^6 factorial completo. Todos los efectos principales e interacciones de segundo orden son independientes. Existen diez columnas sin asignación para estimar el error experimental. Este diseño generalmente se utiliza como sustituto del diseño factorial completo de 64 corridas en 6 factores.

* Caso 6: Diseño para 16 factores en 32 corridas experimentales

Las variables comprendidas entre X6 y X15 se asignan a interacciones de tres variables, de $IIX2IX3$ a $I3X4X5$ y X16 es asignada a la interacción de las cinco primeras variables. El diseño es llamado $2^{(16-11)}$ o $(1/2048)$ del diseño 2^{15} . Esto implica que muchas otras interacciones deben existir. Los efectos principales no se confunden entre sí ni con interacciones de dos variables; las interacciones de dos variables se consideran insignificantes, por lo que existen 15 grados de libertad para estimar el error experimental. Si alguna de estas interacciones tiene algún valor muy pequeño en relación a las demás, puede excluirse de la ponderación.

3.4.2. Diseños Plackett-Burman

Los diseños Plackett-Burman más utilizados son para 12 y 20 corridas experimentales. Estos diseños están dados en el apéndice I. Pueden ser utilizados para un número de factores superior a cuatro y menor que el número de corridas experimentales del diseño empleado.

Cada diseño Plackett-Burman está determinado por una columna de signos "+" (la primera, que representa la media) y un renglón (el último) de signos "-". A partir de la tercera columna, se sigue una regla que consiste en hacer un ciclo con la columna anterior, empezando por "subirla" un renglón. Por ejemplo, la columna generadora (la segunda) para un diseño de 12 corridas es:

+ + - + + + - - - + -

y para cuatro factores, el diseño queda así:

| | | | | | | | | | | | | | |
|-----------------------|------------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| M
E
D
I
A | \bar{Y} | + | + | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - |
| | + | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + |
| | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + | + |
| | + | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + |
| | + | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + | + | + |
| | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + | + | + | + |
| | + | - | - | + | - | + | + | - | + | + | + | + | - |
| | + | - | + | - | + | + | - | + | + | + | + | - | - |
| | + | + | - | + | + | - | + | + | + | - | - | - | - |
| | + | - | + | + | - | + | + | + | - | - | - | - | + |
| | | | | | | | | | | | | | |
| | SIGNOS (-) | | | | | | | | | | | | |

El diseño escogido debe tener un mínimo de cuatro corridas experimentales superior al número de variables a ser estudiadas.

El orden dado en las tablas de los diseños Plackett-Burman, no es necesariamente el mejor para realizar el experimento en sí. La randomización y separación de bloques también tiene las ventajas mencionadas en el capítulo 2.

La precisión de un diseño Plackett-Burman depende de la señal a ruido explicada en la sección 2.3. Generalmente en estos diseños no se utiliza una replicación directa, sino que es preferible basarse en un diseño más largo o en una "reflección" del mismo diseño:

* Al utilizar un diseño Plackett-Burman más largo, se tiene una replicación parcial del mismo. Por ejemplo, en caso de querer estudiar seis variables, es recomendable un diseño de 12 corridas experimentales. Con la media y 6 factores a ser estimados, se tienen 5 grados de libertad (el mínimo recomendado es 4, como se mencionó anteriormente), correspondientes a columnas de factores no asignados, que permitirán estimar la variabilidad de las respuestas.

* Una replicación total se logra por medio de la reflexión del diseño al cambiar cada signo "-" por "+" y viceversa en el diseño original (es el mismo caso presentado en la sección 3.4.1.)

SUPERFICIES DE RESPUESTAS

En el capítulo anterior, tratamos la manera de construir un modelo de primer orden y los procedimientos preliminares de la experimentación. En este capítulo hablaremos sobre la forma de pasar de un modelo de primer orden a uno de segundo y como, por medio de superficies de respuesta, llegar a un punto óptimo. A continuación se encuentra un breve resumen de la información que contiene este capítulo:

En la primera sección se estudiarán las generalidades de los modelos, en cuanto a la ecuación y la gráfica que los representa.

En la segunda sección se muestran las diferencias principales entre los modelos teóricos (reales) y los empíricos, que son los que nosotros construimos, a partir de nuestros datos experimentales, para representar el sistema. Se especifican también las precauciones que se deben tomar para usar estos modelos y las ventajas que éstos tienen.

En la tercera sección se retoman los pasos de la experimentación secuencial. Una vez construido el modelo de primer orden, se usan métodos como el de ascenso acelerado y el simplex para llegar a regiones experimentales donde se esté más cerca de la respuesta óptima y donde, si se necesita un modelo de mayor grado, se empieza a trabajar allí.

En la cuarta sección se da la metodología para verificar si el modelo de primer grado es adecuado, o si se va a requerir de más experimentación para construir uno de segundo grado que represente mejor nuestro sistema. Además se dan una serie de lineamientos para verificar que el modelo construido sea adecuado.

En la sección quinta, presentaremos diseños experimentales de segundo orden, que se puedan adaptar a las necesidades de nuestra experimentación.

En la sexta sección se dan criterios óptimos para la construcción de matrices de experiencias.

Posteriormente en la sección séptima explicaremos como obtener las condiciones de nuestro sistema que nos lleven al punto donde la respuesta sea óptima.

En la sección número ocho, se estudiará la interpretación tanto gráfica como analítica del modelo construido a base de experimentación, que nos explique la forma cómo funciona nuestro sistema.

Finalmente en la sección nueve, se verán consideraciones a tomar cuando se usa esta metodología.

4.1 GENERALIDADES.4.1.1 Usos de los Modelos de Superficies de Respuestas.

Es frecuente que nos encontramos en la situación de querer describir la respuesta de una ó más variables dependientes en función de variables independientes. Para expresar esta relación hay dos tipos de modelos, los teóricos y los empíricos. Para poder construir un modelo teórico, se necesita conocer el sistema que queremos representar ampliamente lo cual es en ocasiones bastante difícil. Es por esto que tenemos que recurrir a los modelos empíricos.

Los usos principales de estos modelos son:

- Mejor entendimiento del comportamiento de un sistema.
- Hacen posible predecir respuestas con combinaciones de variables que no se han experimentado (dentro de la región estudiada).
- Determinar el punto donde nuestro sistema opera óptimamente.
- Determinación de las condiciones donde el sistema opera con mejor estabilidad.
- Permiten el ajuste para control de procesos.

4.1.2 Función General para el Modelo Empírico y su Representación.

La función general en la cual estamos interesados es

$$\eta = f(X_i)$$

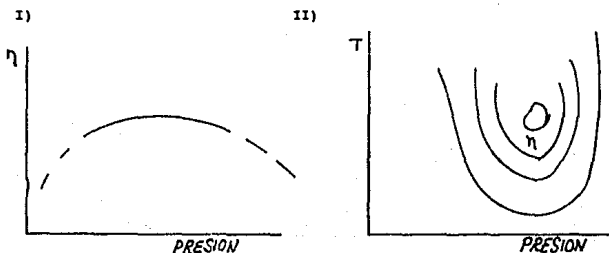
donde i es el número de variables independientes y η expresa la respuesta en función de dos variables.

Si X es un vector con elementos X_1, X_2, \dots, X_k , la función de respuesta es:

$$\eta = f(X)$$

Cuando solamente tenemos una variable X_1 , nuestra respuesta se puede representar gráficamente como en la fig. 4.1aI. Si tenemos dos variables X_1 y X_2 , se puede seguir usando un espacio bidimensional como en la figura 4.1aII o bien se puede usar un espacio tridimensional, pero cuando el número de variables es mayor a dos, entonces solamente será posible representar esta función en un espacio tridimensional aunque se sigue hablando de una superficie de respuesta de espacio dimensional $k + 1$.

Fig. 4.1a
REPRESENTACION GRAFICA DE UNA RESPUESTA EN FUNCION DE UNA Y DOS VARIABLES



En general es necesario repetir un experimento varias veces a las mismas condiciones X , ya que la respuesta η puede variar debido a errores experimentales, η es por lo tanto la respuesta media para un conjunto de condiciones dadas. Es decir, los valores de las respuestas η se les tiene que adicionar un término extra que se le conoce como error aleatorio. En la teoría de diseño de experimentos se presupone que tiene una media de los errores igual a 0 y una dispersión de σ^2 .

$$e \sim (0, \sigma^2)$$

La expresión que representa este error sería.

$$Y = f(X) + e$$

Donde y es la respuesta observada y e es el error experimental. También se le conoce como residuo. El error e también se puede definir como:

$$e = \eta - Y$$

4.1.3 Aproximaciones Polinomiales.

En general un polinomio con valores codificados de X_1, X_2, \dots, X_3 es una suma de términos de diferentes potencias y productos de las X 's. Se dice que un término del polinomio es de orden (o grado) j si contiene el producto de j de las X 's (que pueden estar repetidos). Por lo tanto, los términos que contienen X_1^3 , $X_1X_2X_3$ y $X_1X_2^2$ son de orden 3. Se dice que un polinomio es de grado d si el σ los término(s) de mayor grado presentes en él son de orden o grado d . En general el polinomio se puede escribir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} g(\alpha, \beta) = & \beta_0 + (\beta_{11}X_1 + \beta_{21}X_2) + (\beta_{111}X_1^2 + \beta_{22}X_2^2 + \beta_{12}X_1X_2) \\ & + (\beta_{1111}X_1^3 + \beta_{222}X_2^3 + \beta_{112}X_1^2X_2 + \beta_{122}X_1X_2^2) \\ & + (\beta_{11111}X_1^4) + \text{etc.} \quad (\text{ec. 4.1}) \end{aligned}$$

donde los términos del mismo orden se encuentran entre paréntesis. Nótese que los subscritos de las β 's permitan identificarlas fácilmente con sus correspondientes términos en X .

Los coeficientes β 's son parámetros empíricos que, en la práctica, se obtienen a partir de datos experimentales.

Como se puede observar en la tabla 4.1.3, el número de dichos parámetros aumenta conforme aumenta el número k de variables, y el grado d del polinomio.

Una expresión polinomial de grado d se puede ver como una expansión de serie de Taylor de la verdadera función teórica, $f(j)$, truncada después de los términos de orden d -ésimo.

Serie de Taylor

$$\sum_{k=0}^d \frac{f^{(k)}(X_0)}{k!} (j - X_0)^k$$

Se puede suponer lo siguiente:

1. Entre más alto sea el grado de aproximación de la función, más se acercará la serie de Taylor a la función real.
2. Entre menor sea la región R para la cual se hace la aproximación, mejor será la aproximación posible con un polinomio de un grado dado.

TABLA 4.1a
NUMERO DE EXPERIMENTOS (O DE PARAMETROS NECESARIOS)

| NUMERO DE
VARIABLES, K | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---------------------------|--------|------------|--------|----------|
| | PLANAR | CUADRATICO | CUBICO | CUARTICO |
| 2 | 3 | 6 | 10 | 15 |
| 3 | 4 | 10 | 20 | 35 |
| 4 | 5 | 15 | 35 | 70 |
| 5 | 6 | 21 | 56 | 126 |

En la práctica se puede suponer que un polinomio de primero o segundo grado puede representar adecuadamente la función real si la región experimental es limitada. A continuación se explica la representación gráfica de un modelo planar y cuadrático. Para ejemplificar la representación se tomará el caso de $k=2$ variables independientes, X_1 y X_2 .

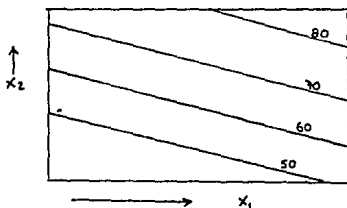
4.1.3.1 Aproximaciones de Primer Grado (o Primer Orden)

En la ecuación 4.1, la primera serie de parentésis contiene términos de primer orden. Si truncáramos la expresión en ese punto, tendríamos la aproximación polinomial de primer orden para $k = 2$ variables, X_1 y X_2 .

$$g(X, \beta) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$$

Esta función es capaz de representar un plano inclinado. La altura e inclinación del plano están determinados por los coeficientes β_0 , β_1 y β_2 . Específicamente (como en la figura 4.1b) β_0 es la intersección del plano con el eje g en el origen de X_1 y X_2 y β_1 y β_2 son las pendientes en las direcciones de X_1 y X_2 .

FIG. 4.1b
REPRESENTACION GRAFICA DE MODELO PLANAR, CON DOS VARIABLES INDEPENDIENTES

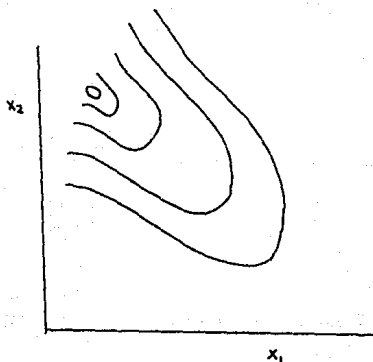


4.1.3.2 Aproximaciones de Segundo Grado (o Segundo Orden)

Si truncáramos la expresión 4.1 en la segunda serie de paréntesis, tendríamos una aproximación polinomial de segundo grado para $k = 2$ variables, x_1 y x_2 ,

$$g(x, \beta) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2$$

FIG. 4.1c
REPRESENTACIONES GRAFICAS PARA EL CASO CUADRATICO CON DOS VARIABLES



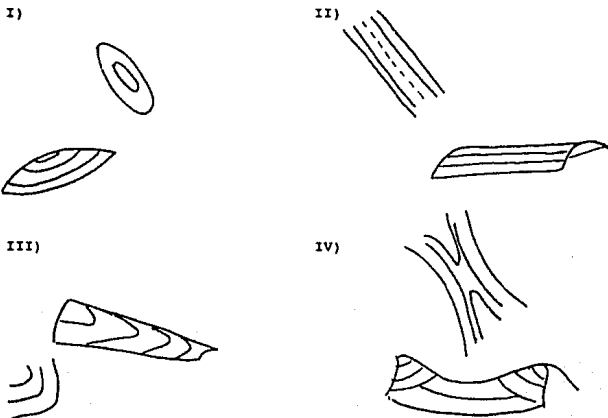
Esto define lo que se llama una superficie general de segundo orden (o cuadrática), en dos variables 1 y 2.

En la figura 4.1d se ilustra la variedad de formas que puede tomar una superficie de segundo grado con dos variables independientes, X_1 y X_2 .

Algunos ejemplos son el máximo simple que se ilustra en la figura 4.1dI, una cresta plana o estacionario en la 4.1dII. La figura 4.1dIII muestra una cresta elevada y la 4.1dIV muestra un mínimo tipo "silla de montar".

No se puede esperar que el modelo empírico cumpla igual que el modelo teórico en representar adecuadamente el sistema, sin embargo, dentro de un área determinada la aproximación es bastante buena (ver cap. 4.2).

FIG. 4.1d
SUPERFICIES DE RESPUESTAS CON DOS VARIABLES INDEPENDIENTES



*EMPIRICAL MODEL-BUILDING & RESPONSE SURFACES, Box & Draper, 1987.

4.1.4 Superficies de Respuestas vs. Método de una Variable-a-la-Vez

Vamos a ejemplificar las ventajas de usar el método de superficies de respuestas vs. la estrategia de una variable a la vez, que consiste en mantener fijas todas las variables menos una, a la cual se le asignan diferentes valores (niveles) (1).

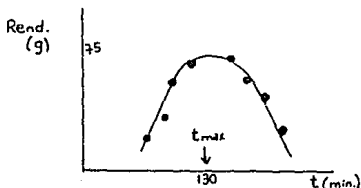
Supongamos que un químico quiere maximizar el rendimiento de una reacción variando la temperatura de reacción (T) y el tiempo de reacción (t).

Estrategia de Una-Variable-a-la-Vez

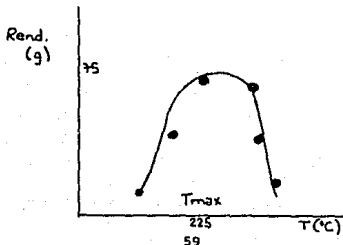
Si el químico empleara esta técnica, podría seguir el camino que se ilustra en la fig. 4.1.4. En la fig. 4.1.4a la temperatura se ajustó a $T = 225^{\circ}\text{C}$ y el tiempo de reacción se fue variando de 60 a 180 minutos. Esto llevó a la conclusión que a esta temperatura, el mejor tiempo de reacción es de 130 minutos, punto en el cual el rendimiento es de 75 gramos.

Fig. 4.1.4

a) Primera serie de experimentos: rendimiento versus tiempo de reacción, la temperatura se fijó a 225°C .



b) Segunda serie de experimentos: rendimiento versus temperatura, el tiempo de reacción se fijó a 130 minutos.



Siguiendo la estrategia de una-variable-a-la-vez, el químico fijó ahora el tiempo de reacción t , en su mejor valor de 130 minutos y varió la temperatura T , como se muestra en la figura 4.1.4b, dando como conclusión que el mejor valor de la temperatura es de 225°C; y por lo tanto, el rendimiento de 75 gramos es óptimo.

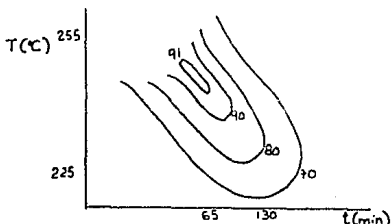
Podemos decir, que si tanto la temperatura como el tiempo de reacción se varían individualmente, va a dar como resultado que el rendimiento se vaya reduciendo. Esto se puede verificar en las gráficas presentadas, donde se ve que después del punto óptimo, el rendimiento va bajando.

Estrategia de Superficie de Respuesta

Vamos a establecer lo que sucedería si las variables o factores se movieran juntas, no individualmente. Para entender la naturaleza de la interacción que existe entre el tiempo de reacción y la temperatura, consideremos la fig. 4.1.4c. Como se puede ver, concuerda bien con la figura 4.1.4a y b, nada más que el máximo no es 75 gramos sino 91, y este rendimiento se obtiene a $t = 65$ min. y $T = 255$ °C, diferentes a las otras condiciones de $t = 130$ min. y $T = 225$ °C que se encontraron con el método de una-variable-a-la-vez.

FIG. 4.1.4

c)



La estrategia de una-variable-a-la-vez supone que el valor máximo de una variable es independiente del valor de la otra variable, lo que generalmente no es cierto.

(1) Este ejemplo está tomado de "Statistics for Experimenters" de Box, George y Hunter, William, Ed. John Wiley & Sons.

4.2 RELACION ENTRE LA APROXIMACION POLINOMIAL Y LA SUPERFICIE DE RESPUESTA VERDADERA.

En esta sección se presentarán las diferencias existentes entre un modelo teórico y uno empírico, y se dará la metodología que debe seguirse para construir/usar el modelo empírico (aproximación polinomial) de una manera adecuada.

Un modelo teórico surge a partir de un amplio conocimiento del sistema, lo cual no siempre es posible, por lo que tenemos que recurrir a los modelos empíricos.

Una aproximación polinomial que describa un sistema determinado se obtiene haciendo varios experimentos con diferentes valores (niveles) de las variables independientes (X 's) y observando los valores que toma la variable dependiente (Y). Los valores observados se utilizan después para obtener los valores de los coeficientes del polinomio empírico que va a describir el sistema. Esto se hace a partir del método de Mínimos Cuadrados (apéndice).

Un experimentador es parecido a una persona que trata de hacer un mapa de la superficie del mar mediante sondeos en un número limitado de lugares. Si existiera una teoría sobre la naturaleza de la superficie del mar en un área particular, a lo mejor basada en conocimientos geológicos y sobre corrientes y mareas, le permitiría al experimentador trabajar con un modelo teórico en donde las incertidumbres tan solo fuesen los valores de ciertos parámetros. La estrategia apropiada es bastante diferente si no existe toda la teoría. En este trabajo nos enfocaremos en las situaciones donde no existen teorías definidas sobre el problema y se debe seguir el procedimiento empírico.

Para ejemplificar las diferencias existentes entre los modelos teóricos y empíricos, además de las ya mencionadas, tomemos el siguiente modelo teórico exacto: *

$$Y = .71e^{-(1.4X_1)} + 2.6e^{-(3/X_2)}$$

La aproximación polinomial dentro de la región limitada, donde los valores de X 's están entre 1 y 3 es:

$$Y = 123 - 84.3X_1 - 19.1X_2 - .000002X_1X_2 + 24X_1^2 + 2.91X_2^2$$

Estos dos modelos representan el mismo proceso. El modelo empírico se desarrolló después de ajustar nueve valores obtenidos de Y con una matriz experimental de 3×3 con valores de X_1 y de X_2 . La matriz es una simplificación de los diseños experimentales que consideraremos posteriormente.

(*) Este ejemplo se obtuvo del curso "Experimental Design" de la compañía Dupont

En las figuras 4.2a y 4.2b, se encuentran las representaciones gráficas de los modelos teórico y empírico para los valores de X_1 y X_2 de 1 y 3. Dentro de esta región, se llevó a cabo la experimentación que nos llevó a la construcción del polinomio.

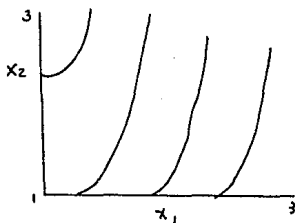
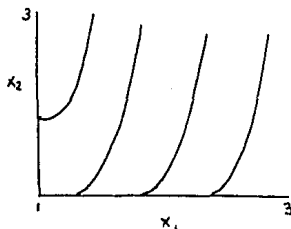
Las líneas representan los valores que toma la respuesta Y . Por medio de este ejemplo podemos comprobar que la aproximación polinomial describe bastante bien el sistema dentro del rango de X 's por medio del cual se construyó el polinomio.

FIG. 4.2.

Representación gráfica de los modelos teórico y empírico con valores de variables independientes entre 1 y 3.

a) MODELO TEORICO

b) MODELO EMPIRICO



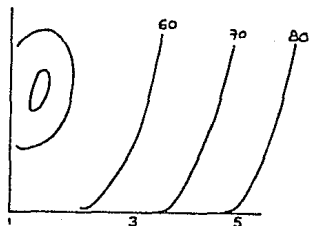
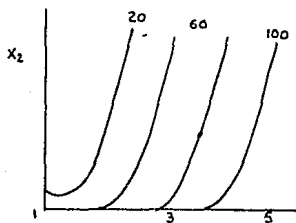
En las figuras 4.2c y 4.2d, se han graficado ambos modelos dentro de un rango más amplio, de 1 a 5 para los dos factores. Nótese que la predicción del modelo polinomial es sumamente pobre fuera del rango de donde se sacó el polinomio. El modelo exacto toma valores tan altos como 300 y muestra un comportamiento asintótico para valores bajos de X_1 y altos de X_2 . Por otro lado el modelo polinomial tiene comportamiento cuadrático fuera del rango de donde se tomaron los datos.

FIG. 4.2

Representación gráfica de los modelos teórico y empírico, ahora en el rango de X's de 1 a 5.

c) MODELO TEORICO

d) MODELO EMPIRICO



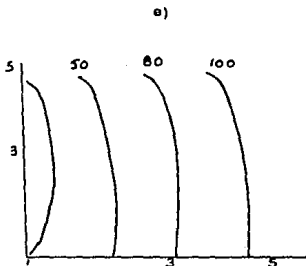
Con esto podemos concluir que si tenemos interés en conocer el comportamiento del sistema dentro del rango de 1 a 5 para los valores de X₁ y X₂, entonces se debe obtener el modelo experimentando con esos valores. A continuación se presenta el nuevo modelo al cual se obtuvo mediante una matriz de 3*3 para los valores de X₁ y X₂ entre 1 y 5.

$$Y = 329 - 231X_1 - 44X_2 - .000002X_1X_2 + 85.8X_1^2 + 5.35X_2^2$$

La nueva gráfica es

FIG. 4.2

Representación del nuevo modelo polinomial formado a partir de experimentación con valores de las variables independientes entre 1 y 5.



Dos atributos de la nueva gráfica son:

1. Dentro del rango de 1 a 5, el nuevo modelo polinomial se aproxima al modelo exacto mejor que el primer modelo polinomial.
2. La exactitud del segundo modelo polinomial dentro del rango de 1 a 5 no es tan buena como la exactitud del primer modelo polinomial dentro del rango de 1 a 3.

Resumiendo:

Los modelos teóricos, como las leyes físicas, pueden usarse para predecir el comportamiento de un sistema en una región alejada de la zona en donde se calcularon los parámetros. Esto no es así para los modelos empíricos. Un modelo polinomial sencillo es útil generalmente para una interpolación, aunque el grado de confiabilidad es mejor dentro de la región experimental. La extrapolación es generalmente bastante mala. Entre más se aparte de la región de donde se obtuvieron los datos, las predicciones son más pobres, hasta llegar al grado de no tener sentido. Por lo tanto, los datos deben cubrir totalmente la región donde se harán las predicciones.

El uso de un modelo polinomial se restringe a la región en la cual se efectuó el estudio, mientras que el teórico es de uso mas amplio y permite extrapolaciones.

En el capítulo ocho se ejemplifica la obtención de un modelo empírico a través de datos técnicos. El modelo empírico predice la conversión de óxido de propileno a partir de propilén clorhidrín.

4.3 USO DEL METODO DE ASCENSO ACELERADO Y EL METODO SIMPLEX

Esta sección pretende presentar una técnica que nos lleve, a partir del polinomio de primer orden previamente construido, a una región óptima para el sistema en estudio. Frecuentemente se encuentra que en esa región, un modelo de segundo grado nos proporciona una adecuada representación.

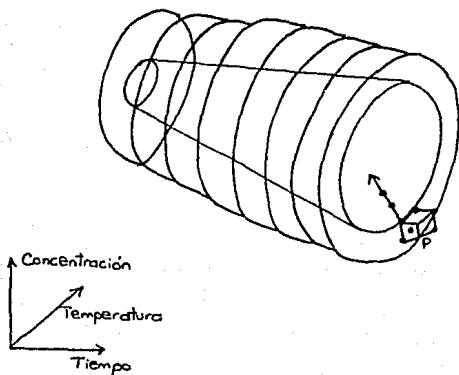
Si intentáramos ajustar una función empírica como un polinomio dentro de toda la región de operación, o sea, donde el sistema puede operar, la función que se requeriría involucraría un número de experimentos excesivo. Pero en general, no es el objetivo conocer toda la región de operación, sino únicamente ciertas subáreas o regiones que nos sean de interés, las cuales pueden ir variando mientras avanza la investigación.

Como habíamos hablado en la sección 4.2, lejos de la región de diseño, los contornos de la superficie que representa el polinomio generalmente no se asemejan a los contornos de la superficie real. Por lo tanto, podemos esperar que nuestra aproximación sea útil sólo en las vecindades más próximas o inmediatas de la región experimental.

Si, por ejemplo, estuviéramos cercanos a un máximo, podríamos representar aproximadamente sus contornos ajustando un polinomio de segundo grado a una serie de experimentos localizados de una manera adecuada. Pero si estuviéramos estudiando por primera vez el sistema, entonces nuestras condiciones experimentales no estarían tan cercanas a tal máximo. Es por esto, que el experimentador necesita de un proceso adecuado que le lleve a esas condiciones donde le pueda sacar el mejor provecho a su ecuación de segundo grado. El método de "una-variable-a-la-vez" es uno de los procedimientos preliminares tales. Otras alternativas, en nuestra opinión, más económicas y efectivas, son el método de ascenso acelerado y el método Simplex. El método de ascenso acelerado y el método Simplex son procedimientos preliminares.

FIG. 4.3

Representación de una etapa del procedimiento de ascenso acelerado con detalles del diseño de primer orden y la dirección de ascenso acelerado.



4.3.1 Qué hace el Método de Ascenso Acelerado

Supongamos que apenas estamos iniciando la investigación y que queremos saber si hay oportunidad de mejoría. Podemos esperar que los contornos planares que representan la ecuación de primer grado nos puedan aproximar a un punto como P (fig. 4.3.1) el cual está bastante lejano al óptimo. La dirección de ascenso acelerado sería la que nos llevara a una región de rendimiento mas alto. (Se habla de descenso acelerado si nuestro objetivo es reducir una respuesta y así optimizarla, como podría ser el nivel de impureza). Para obtener la ecuación de primer grado que nos aproxime al punto P, se necesitaría llevar a cabo un diseño de primer grado como el que se encuentra en la figura 4.3.1.

Al ir experimentando a lo largo del camino de ascenso acelerado, vamos a ir llegando a regiones donde el rendimiento sea mayor. El punto que se vaya encontrando, o ya sea que lo obtengamos por medio de una interpolación, el cual nos vaya dando el rendimiento mas alto, va a ser la base para la construcción de un nuevo diseño de primer orden y posteriormente a uno de segundo, en caso de ser necesario.

Para un proceso ya operando y al cual se le quiere optimizar, estas técnicas no son de interés, pues para haber llegado a las condiciones actuales, seguramente ya se usaron y un proceso así no presenta ya ningún efecto de primer grado.

4.3.2 Ejemplo

Vamos a retomar el ejemplo que usamos en la sección 4.1.4. El objeto de este experimento era encontrar las condiciones de temperatura de reacción y tiempo de reacción que nos llevarán a un rendimiento máximo. Hasta ahora se tiene el siguiente modelo de primer orden.

$$Y = 61.8 + 2.35X_1 + 4.5X_2$$

El camino de ascenso acelerado se puede calcular de la siguiente manera. Empezando en el centro de la región experimental se sigue el camino moviendo $X_2 = 4.5$ unidades en X_2 por cada $X_1 = 2.34$ unidades de X_1 , o dicho de otra manera $4.5/2.35 = 1.91$ unidades de X_2 por cada unidad de X_1 .

TABLA 4.3

| | condiciones
codificadas | | tiempo
(min)
t | temperatura
(°C)
T | respuesta
observada
(%) |
|-----------------------------|----------------------------|----------------|----------------------|--------------------------|-------------------------------|
| | X ₁ | X ₂ | | | |
| condiciones
en el centro | 0 | 0 | 75 | 130.0 | 62.3
(promedio) |
| ascenso | 1 | 1.91 | 80 | 134.5 | 73.3 |
| acelerado | 2 | 3.83 | 85 | 139.6 | |
| | 3 | 5.74 | 90 | 144.4 | 10 |
| | 4 | 7.66 | 95 | 149.1 | |
| | 5 | 9.57 | 100 | 153.9 | 9 |
| | | | | | 58.2 |

Las corridas que se hicieron en los puntos 8, 9 y 10 dieron los rendimientos indicados. La corrida 8 (y = 73.3) animó al experimentador a dar un gran salto para la corrida 9. Sin embargo, el rendimiento en la corrida 9 bajó. En la corrida número 10 el rendimiento se mejoró. Por medio de este método se concluyó que los siguientes experimentos se debían hacer en puntos cercanos a la corrida 10. Alrededor del punto 10 se pueda construir un modelo de primero y después complementar con uno de segundo grado.

Mientras se va uno acercando hacia la región de rendimiento óptimo, los efectos de primer orden se van haciendo pequeños, y aumenta la posibilidad de que necesite una aproximación de segundo grado.

4.3.3 Comentarios Generales sobre el Método de Ascenso Acelerado

¿Ascenso o Descenso Acelerado?

En este caso, el objetivo de la función era incrementar el rendimiento, pero en otros ejemplos, podría ser disminuir el costo o el nivel de impureza. Esto requeriría un camino de descenso acelerado que se trabajaría cambiando el signo de la función objetivo y trabajando el problema igual como si fuera ascenso acelerado.

¿Cuándo funcionan estos métodos?

Cuando estamos buscando encontrar un rendimiento mas alto, como en el ejemplo, sería pérdida de tiempo el estar trabajando en regiones de rendimientos bajos. Con los efectos de primer orden que representan los contornos de estas regiones de rendimiento bajo, nos podemos dirigir, por medio de ascenso acelerado hacia regiones de rendimiento mas alto. Conforme vamos avanzando hacia la región de rendimiento mayor, los efectos de primer orden se van haciendo pequeños comparados con los de segundo orden, con el error o con los dos. Es entonces cuando se detecta la necesidad de pasar a una aproximación de segundo grado.

Para detectar la necesidad de una aproximación de segundo orden se toma en cuenta el contraste que hay entre los efectos de primer orden y los efectos de interacción. Además se verifica la existencia de curvatura (de esto se hablará en la siguiente sección).

4.3.4 El Diseño de Primer Orden como Piedra Angular

Supongamos, que después de previas aplicaciones del método de ascenso acelerado, se ha formado un nuevo diseño de primer orden. Después de hacer las verificaciones apropiadas, se ve que ya no se puede seguir avanzando por medio de este método y que se requiere en vez una exploración de segundo grado. En estos casos es posible incorporar el diseño de primer orden acabado de construir como piedra angular del diseño de segundo orden que ahora se requiere.

El método de ascenso acelerado casi nunca es un paso final. Su valor principal es el ser un procedimiento preliminar para movernos a la región de interés y las vicinidades de una respuesta mejor, la cual merezca una investigación más profunda.

4.4 METODO SIMPLEX

El concepto original Simplex surgió de Box y Wilson que combinaron la metodología de superficies de respuestas y técnicas de ascenso para producir un algoritmo capaz de variar muchos factores de manera simultánea y de llegar al nivel óptimo de una respuesta.

El método secuencial Simplex utiliza como base una serie de $k+1$ puntos dentro de un espacio de k dimensiones.

Dentro de un espacio de dos dimensiones, un simplex regular es un triángulo equilátero, de tres dimensiones es un tetraedro regular y de n dimensiones es un hiperpoliedro. Una figura Simplex es una figura geométrica que tiene uno o más vértices que el número de factores.

Los experimentos se efectúan dentro de las condiciones experimentales correspondientes a las vértices de los puntos dentro del diseño Simplex. Para cada punto se asocia una respuesta Y_i .

BASE - Consiste en eliminar el punto en el cual la respuesta es la menos buena y se reemplaza por otro punto situado al lado opuesto de esta sobre el eje que pasa por el centro de gravedad de los otros vértices.

El método funciona mediante cambios sucesivos de dirección. Cada nueva medida se incorpora a las anteriores después de eliminar la más mala. Las reglas a seguir son las siguientes:

REGLA 1 - A partir del Simplex de inicio, el punto con el cual la respuesta es la menos buena se abandona y se sustituye por su simétrico en relación al centro de gravedad de los $(k - 1)$ puntos restantes, conservando así la regularidad del nuevo Simplex. A esta transformación se le llamará reflexión.

REGLA 2 - Si la aplicación de dos veces consecutivas de la regla 1, conduce a encontrar el punto anteriormente abandonado, esta misma regla 1 debe ser aplicada al segundo punto más malo del Simplex anterior.

REGLA 3 - Si después de $k+1$ reflexiones se conserva una arista en los Simplex sucesivos, la experiencia correspondiente a este punto se debe repetir.

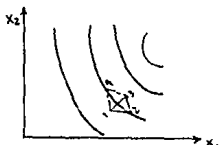
REGLA 4 - Hay que aplicar otro nuevo tratamiento en el caso de que una arista del simplex se utilice después de M iteraciones. M se define mediante la siguiente relación empírica:

$$M = 1.65k + 0.05k^2$$

donde k es el número de factores

A continuación se presentan varios diseños Simplex para iniciar el método.

SIMPLEX 1



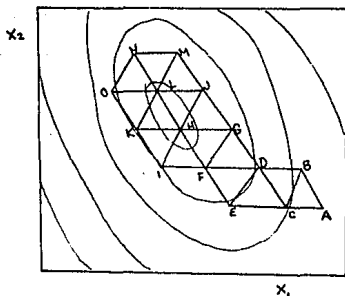
para $k = 2$

Su correspondiente matriz de experiencias para $k + 1$ puntos es

| | FACTOR | | | | | |
|-------|--------|-----|-----|-----|-------|-----|
| punto | 1 | 2 | 3 | ... | $k+1$ | k |
| 1 | 0 | 0 | 0 | ... | 0 | 0 |
| 2 | p | q | q | ... | q | q |
| 3 | q | p | q | ... | q | q |
| ⋮ | | | | | | |
| ⋮ | | | | | | |
| k | q | q | q | ... | p | q |
| $k+1$ | q | q | q | ... | q | p |

Este caso de Simplex se utiliza cuando sospechamos que la respuesta inicial menos buena no es el punto donde intersectan el eje de X_1 y de X_2 .

SIMPLEX 2



Progreso de un Simplex
superimpuesto de
una superficie
de respuestas
hipotética

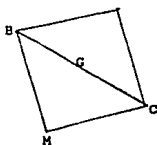
4.4.1 Fórmula de Cálculo de Coordenadas

Para dos dimensiones:

$x_{2m'}$

M'

x_2



G esta en medio de MM' y BC

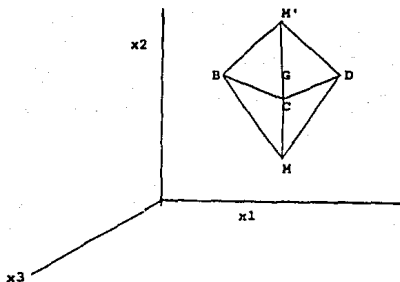
$$x_1 G = \frac{x_{1m} + x_{1m'}}{2} = \frac{x_{1B} + x_{1C}}{2}$$

$$x_{1M'} = \frac{2(x_{1B} + x_{1C})}{2} - x_{1M}$$

x_{2m}

x_{1m} x_1 $x_{1m'}$

Para tres dimensiones:



$$(x_iG - x_iB) + (x_iG - x_iC) + (x_iG - x_iD) = 0$$

$$x_iG = (x_iB + x_iC + x_iD)/3$$

$$x_iM = (x_iM + x_iM')/2$$

$$x_iM' = \frac{2(x_iB + x_iC + x_iD)}{3} - x_iM$$

$$x_iM' = (2/k \sum_{1 \leq z \leq k+1} x_{iz}) - x_iM$$

donde k son parámetros o dimensiones

4.4.2 Simplex de Tamaño Fijo

En este caso, existen tres limitaciones aparentes:

- 1- El óptimo no se localiza con precisión, excepto por casualidad y que no sea el buscado.
- 2- Se puede localizar un óptimo local.
- 3- El progreso hacia el óptimo puede solamente proceder a un paso constante.

Ninguna de estas limitaciones es grave, y puede, sin embargo, ser benéfica. Para localizar con precisión un óptimo, se puede iniciar un Simplex de menor tamaño dentro del óptimo localizado mediante el Simplex de mayor tamaño. Por otro lado, si el Simplex tan solo nos va a llevar a la región donde vayamos a construir un modelo de segundo orden, entonces, es enteramente adecuado el Simplex de tamaño fijo.

Y por último, el localizar un óptimo local en vez del global, no es un problema del método en particular, sino de todos. Empezar la búsqueda desde otro punto del espacio factorial establecerá si el óptimo es local o no.

4.4.3 Simplex de Tamaño Variable

El variar el tamaño del Simplex tiene por objeto acelerar el proceso de alcanzar la región óptima y la localización del óptimo preciso. Esto se hace por medio de la expansión y contracción de las operaciones del método.

El movimiento del Simplex está gobernado por las mismas reglas básicas del Simplex de tamaño ajustado.

El método Simplex nos sirve al igual que el método de ascenso acelerado, para llegar a regiones donde se encuentra la respuesta óptima y podemos seguir trabajando nuestro modelo de segundo orden. A diferencia del método de ascenso acelerado donde se parte de una función, el método simplex parte de un punto experimental de interés y alrededor de él se construye el simplex que va llevándonos a valores deseados. Este método es empírico y puede dar soluciones muy rápidas.

4.4.4 Obtención del Simplex para Variables Codificadas

| | | | |
|-------|---|---|---|
| PUNTO | 1 | 2 | 3 |
| 1 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | P | Q | Q |
| 3 | Q | P | Q |
| 4 | Q | Q | P |

P = .923
Q = .235

| | | | |
|--|------|------|------|
| | X1 | X2 | X3 |
| | 0 | 0 | 0 |
| | .923 | .235 | .235 |
| | .235 | .923 | .235 |
| | .235 | .235 | .923 |

4.4 AJUSTE DE MODELOS DE SEGUNDO ORDEN

En la sección anterior estudiamos la manera de pasar, por medio del modelo de primer orden ya construido, a una región donde la respuesta sea óptima, por medio de los métodos de ascenso acelerado y el método simplex. En esta sección veremos técnicas que nos ayudarán a determinar si es necesario construir un modelo de segundo grado para representar el sistema, el cual requiere hacer más experimentación. Esto se hará mediante análisis de varianza y verificaciones de curvatura e interacción. Se presentarán además maneras que nos indicarán cómo verificar si un modelo empírico es correcto, mediante el análisis de residuales. En caso que el modelo no fuera apropiado, es decir, que no representara adecuadamente la región de interés, se enseñarán opciones para corregirlo.

4.4.1 Verificaciones de Curvatura e Interacción

La manera más sencilla de comprobar la necesidad de construir un polinomio de segundo grado es mediante las verificaciones de curvatura y de interacción. Supongamos la siguiente tabla de datos, con la cual seguiremos trabajando el mismo ejemplo que se usó para el método de ascenso acelerado.

| número
de corrida | variables sin
codificar | | variables
codificadas | | rendimiento | |
|---------------------------------------------------------------|----------------------------------|------------------------------------|----------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|----------------------------------------------|
| | x1 | x2 | X1 | x2 | | |
| segundo
diseño
de
primer
orden | 11
12
13
14
15
16 | 80
100
80
100
90
90 | 140
140
150
150
145
145 | -1
1
-1
1
0
0 | -1
-1
1
1
0
0 | 78.8
84.5
91.2
77.4
89.7
86.8 |
| corridas
añadidas
para
formar
diseño
compuesto | 17
18
19
20
21
22 | 76
104
90
90
90
90 | 145
145
138
152
145
145 | -√2
√2
0
0
0
0 | 0
0
-√2
√2
0
0 | 83.3
81.2
81.2
79.5
87.0
86.0 |

Suma de cuadrados

$$\sigma^2 y^2 = 84\ 649.24$$

El orden de las corridas fue aleatorio

- Interacción - El modelo planar supone que los efectos de las variables es aditivo y que no existen efectos de interacción entre las variables. La interacción entre las variables se mediría mediante el coeficiente β_{12} y este numero nos indicará la magnitud del efecto de interacción.

$$\beta_{12} = -1/4(1*78.8 - 1*84.5 - 1*91.2 + 1*77.4) = 4.875$$

- Curvatura - Otra verificación de planaridad local, se hace comparando el promedio de los cuatro puntos del diseño factorial 2^2 , \bar{y}_f , con el promedio en el centro del diseño, y_c . Si pensamos que el diseño está como sentado en el centro de un plato sopero, se puede ver que $\bar{y}_f - y_c$ es una medida de la curvatura global de la superficie. Se puede ver también que si β_{11} y β_{22} son los coeficientes de x_1^2 y de x_2^2 , esta curvatura sería $\beta_{11} + \beta_{22}$. Por lo tanto para calcular la curvatura global

$$\begin{aligned} \bar{y}_f - y_c &= \beta_{11} + \beta_{22} = 1/4(78.8 + 84.5 + 91.2 + 77.4) - 1/2(89.7 + 86.8) \\ &= -5.275 \end{aligned}$$

Dada la magnitud de estos valores y estableciendo un nivel de confianza en la región donde estamos trabajando el polinomio de primer grado es inadecuado

4.4.2 Análisis de Varianza de los Datos

Otra técnica útil para darnos cuenta si existe la necesidad de un polinomio de segundo grado, y por lo tanto, de la elaboración de más experimentación, es el análisis de varianza de los datos. Para determinar si el modelo de primer grado es adecuado, supondremos que el de segundo grado representa de manera adecuada el sistema. Esto se hace experimentando con unos cuantos puntos, sin replicar, para poder construir un modelo de segundo orden. En caso de que se viera la necesidad de un modelo de segundo orden, se harían estos mismos puntos, pero ahora sí con replicación. El análisis de varianza se hace de la siguiente manera:

Tabla 4.4a

Polinomios de cero, primer, y segundo grado ajustado a los datos

Polinomio de Grado cero

Función de respuesta esperada $Y' = Y = 83.88$
 Regresión de la suma de cuadrados $S_0 = (\sum y)^2/n = 84\ 436.96$
 (1gl)

Polinomio de Primer Grado

Función de respuesta esperada $Y' = 84.73 - 2.2025X_1 + 1.325X_2$
 Regresión de la suma de cuadrados $S_1 = 86\ 196.92$ (3 gl)

Polinomio de Segundo Grado

Función de respuesta esperada $= 87.36 - 1.39X_1 - 0.37X_2$
 $- 2.15X_1^2 - 3.12X_2^2 - 4.88X_1X_2$

Regresión de la suma de cuadrados $S_2 = 84\ 552.79$ (6 gl)

Tabla 4.4b
Análisis de varianza

| Fuente | Suma de cuadrados | gl | Media cuadrática | F |
|----------------------------------------|-------------------|----|------------------|----------|
| Media
(polinomio de
grado cero) | 84 436.96 | 1 | | |
| Añadiendo términos
de primer orden | 1759.96 | 2 | 879.98 | 879.9/16 |
| Añadiendo términos
de segundo orden | 1644.13 | 3 | 548.04 | 34.09 |
| Residuos | 96.45 | 6 | 16.075 | |
| Total | 84 649.24 | 12 | | |

Podemos ver en los datos que tenemos en la tablas 4.4 que se corrió un diseño de experimentos a 5 niveles, o sea, con 5 valores para cada variable (-sqr2, -1, 0, 1, sqr2). Esto se hizo para poder construir un modelo de segundo orden. La construcción de estos modelos se verá en la sección 4.5.

En la tabla 4.4a se muestra la suma de cuadrados de las respuestas obtenidas aplicando cada polinomio (de cero, de primer y de segundo grado). En la tabla 4.4b se encuentran los análisis de varianza que son la resta de la suma de cuadrados de las respuestas obtenidas aplicando cada polinomio menos la suma de cuadrados de las respuestas del polinomio de grado inmediato menor. El residual es la suma de cuadrados de los datos menos la suma de cuadrados del polinomio de segundo grado, del cual habíamos supuesto que representaba adecuadamente a la función de respuesta. La MS o media cuadrática es la división de SS (suma de cuadrados) entre los grados de libertad.

El cociente F

$$\frac{\text{media cuadrática para los términos de segundo grado añadidos} = -548.04}{\text{media cuadrática para el residuo} = 16.075} = 34.09$$

nos indica que el polinomio de primer grado no es adecuado ya que el valor máximo que puede tener F es de 3.29 (valor crítico). Este se encuentra en la tabla que se muestra al final del capítulo donde están los valores de F a 95% de nivel de confianza. El valor F (cociente de varianza Fisher) representa el valor calculado del cociente de varianza, con gld grados de libertad asociados con el denominador y gln grados de libertad asociados con el numerador. Esta prueba F no se limita a preguntar si las dos varianzas son diferentes sino que busca la respuesta a la pregunta: ¿Es la varianza debida a la falta de ajuste significativamente mayor a la varianza debida solamente a la incertidumbre experimental? En este caso se puede rechazar la hipótesis de que el polinomio de primer grado es adecuado, con 95% de confianza.

4.4.3 Verificaciones para el uso de Mínimos Cuadrados

Para el uso de el método de mínimos cuadrados se han hecho varios supuestos acerca de los residuales, g_i , los cuales se debe verificar si son ciertos, y en el caso que no lo sean, se deben corregir.

Los residuales, g_i , son las diferencias entre lo que se observa, y lo que la ecuación de regresión predice, es decir, qué cantidad no es capaz de explicar la ecuación empírica. Podemos también decir que g_i son los errores observados si la ecuación es correcta. Los supuestos que generalmente se hacen son que los errores son independientes, tienen de media cero, varianza constante y siguen una distribución normal. Después de analizar los residuales se podrá concluir lo siguiente:

1. Los supuestos parecen haber sido violados (de una manera específica).
2. Los supuestos no parecen haber sido violados (lo cual no quiere decir que se pueda concluir que los supuestos son correctos).

La manera principal para analizar los residuales es graficándolos. Esta manera es bastante sencilla y confiable y las principales formas de hacerlo son:

- a. De una manera total, es decir, en el absoluto.
- b. En orden secuencial, es decir, en el tiempo en que se hicieron.
- c. Contra los valores obtenidos de Y mediante la aplicación de la ecuación.
- d. Contra las variables independientes X.
- e. Cualquier manera que sea sensible para el problema en particular que se esté estudiando.

1. Gráficas totales o absolutas.

Quando los residuales se grafican en absoluto, y el modelo es correcto los residuales deben aparecer como una distribución normal con media cero. Si la gráfica parece ligeramente anormal, podemos usar estándares para juzgar gráficas, los cuales han sido publicados por Rand Corporation. Para juzgar este tipo de gráficas, se requiere algo de práctica para saber que tan anormal se debe ver una gráfica para poder decir que contradice los supuestos de normalidad.

2. Gráficas en Secuencia de Tiempo

Vamos a asumir que unos residuales al graficarlos vs. la secuencia en la que se hizo el experimento, nos dan como resultado una banda horizontal como en la figura 4.4.1a. Esto nos estaría diciendo que el efecto del tiempo no afecta los datos a largo plazo. Sin embargo, si son como los de las figuras 4.4.1b, 4.4.1c, 4.4.1d, podemos concluir que el tiempo es una variable que no se ha tomado en cuenta.

4.4.1b - La varianza no es constante e incrementa con el tiempo, implicando que se debe hacer un análisis de mínimos cuadrados ponderados.

4.4.1c - Se debió incluir un término lineal en el tiempo.

4.4.1d - Se debieron incluir términos lineales y cuadráticos en el tiempo.

4.4.1a



4.4.1b



4.4.1c



4.4.1d



3. Gráfica contra Y

Al igual que en el caso anterior, la gráfica que representara una "banda horizontal," querría decir que la gráfica no muestra ninguna anormalidad. La anormalidad se indicaría por medio de las otras gráficas.

4.4.1b Varianza no constante, como se había supuesto. Se necesitan mínimos cuadrados ponderados o una transformación de las observaciones Y_i .

4.4.1c Existe error en el análisis. La desviación de la ecuación es sistemática. Este efecto también se puede deber a la omisión del término Y_0 en el modelo.

4.4.1d El modelo es inadecuado. Se necesitan términos extra (de interacción y cuadráticos) o una transformación de la observación Y_i antes de hacer el análisis.

ESTE TEXTO NO DEBE
SALIR DE LA DEBUTERA

4. Gráfica contra X

Otra vez, la banda horizontal se considera satisfactoria. Las anomalías indican:

1. Varianza no constante, se necesitan mínimos cuadrados ponderados o una transformación de las Y's.
2. Error en los cálculos; no se ha perdido el efecto lineal de X.
3. Se necesitan términos extra, por ejemplo, un término cuadrático en X, o una transformación en las Y's.

5. Otros tipos de Gráficas

Cuando se tiene conocimiento del problema en estudio, se pueden elaborar otros tipos de gráficas. Supongamos, por ejemplo que tenemos 11 observaciones, que nos dan como resultado 11 residuales. Supongamos que estas observaciones provienen de experimentación con 3 tipos de máquinas, y que las gráficas nos dan resultados como los de las figuras.

Máquina A



Máquina B



Máquina C



Estas gráficas nos sugieren que existe una diferencia básica en el nivel de la respuesta Y de la máquina C comparado con las máquinas A y B. Esta diferencia se podría incorporar al modelo mediante la introducción de una variable "de mentiras".

En general, los residuales se deben graficar de cualquier forma razonable que se le ocurra al experimentador, basado en un conocimiento especializado del problema bajo estudio.

4.4.4 Puntos Disparados ("outlier")

Cuando el valor del residuo de un punto es mayor a 3 o 4 veces la desviación media, se le conoce como un punto "disparado" (outlier). El punto disparado indica un punto que es totalmente atípico. Se debe estudiar con mucho cuidado para ver si la razón de su peculiaridad se puede determinar.

Lo que se sugiere hacer en casos donde estén presentes puntos disparados, es eliminar las observaciones que los producen para poder ver cual es su efecto. Puede suceder que sean estos puntos los que estén dando pendiente a la gráfica de nuestro modelo, o que la estén inflando, y que en realidad no exista ninguna relación entre nuestra variable independiente y la respuesta observada.

De ningún modo se deben eliminar sin antes analizarlos a fondo ya que nos pueden estar proporcionando información que el resto de los datos no pueden darnos, pues éstos pueden provenir de circunstancias extremas. Si después de analizarlos nos damos cuenta que se deben a errores experimentales o en la observación, se pueden eliminar.

4.4.5 Transformación de las Variables

Como se mencionó anteriormente, para poder utilizar el método de mínimos cuadrados es necesario que el modelo sea lineal en las variables. Para poder lograr esto, es necesario a veces, que el análisis se lleve a cabo en variables transformadas. Esta necesidad surge ya que en ocasiones las variables originales o el modelo en términos de las variables originales, no cumple con los supuestos estándares. Las razones por las que se puede necesitar de una transformación pueden ser:

1. Exámen de residuales. No existen razones teóricas para sospechar que se necesita una transformación. La evidencia viene del exámen de residuales. Las transformaciones se hacen, ya sea transformando logarítmicamente la respuesta, las variables o ambas cosas.
2. Existencia de relación no lineal. Consideraciones teóricas nos pueden decir que la relación entre dos variables no es lineal. Una transformación adecuada de las variables puede volverla lineal. Por ejemplo,

$$T = ab^i$$

La relación entre T e i no es lineal, pero si sacamos logaritmos de ambos lados, podremos directamente aplicar las técnicas de regresión.

$$\log T = \log a + (i) \log b$$

3. Varianza no constante. La variable dependiente que se está analizando puede tener una distribución de probabilidad cuya varianza está relacionada con la media. Si la media está relacionada al valor de la variable independiente X, entonces la varianza de y va a cambiar con X, y no será constante. La distribución de y tampoco será normal generalmente, lo cual invalida los supuestos estándares para usar el método de mínimos cuadrados. Los valores que obtuviéramos de este modelo no serían muy precisos, por lo que en estas circunstancias es mejor transformar los datos para asegurar normalidad y constancia en la varianza del error.

4.5 MODELOS DE SEGUNDO ORDEN

Una vez construido el modelo de primer orden, a través de un diseño factorial, y después de que nos haya llevado a las regiones de respuesta óptima por medio del método de ascenso acelerado o simplex, se procederá a la construcción de un modelo de segundo orden si es que se determinó su necesidad.

Los diseños experimentales que nos llevan a la construcción de un modelo de segundo orden, se estudiarán en esta sección. Su propósito es ayudarnos a llevar a cabo la mejor experimentación con la cual podamos construir el modelo que mejor describa el sistema dentro de la región de interés.

En el capítulo anterior hablamos sobre los diseños de primer orden, como son los diseños factoriales. Ahora trataremos los diseños de segundo orden, ya que los de primer orden solamente nos sirven para calcular efectos de primer orden y de interacción, pero no nos sirven para calcular otro tipo de efectos como la curvatura, dada por los términos $\beta_{11}X_1^2$ y $\beta_{22}X_2^2$ del modelo

$$Y_{ii} = \beta_0 + \beta_1X_{1i} + \beta_2X_{2i} + \beta_{11}X_{1i}^2 + \beta_{22}X_{2i}^2 + r_{ii} \dots (4.5)$$

Como se tienen que calcular efectos de curvatura, los diseños experimentales de segundo orden deben tener al menos tres niveles para cada variable independiente.

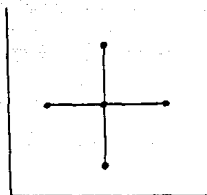
4.5.1 Diseños de Box-Wilson (Estrella)

Este tipo de diseños nos permite obtener la información que se puede usar para obtener un modelo como el que acabamos de presentar (ec. 4.5). Estos modelos, contienen $2k + 1$ parámetros, donde k es el número de factores o variables del modelo.

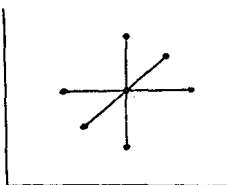
Los diseños de estrella están formados por un punto central de donde se van a formar diferentes combinaciones de factores moviéndose negativa o positivamente de dicho punto. Los diseños de estrella generan $2k + 1$ combinaciones de factores y $2k + 1$ parámetros del modelo como el que acabamos de presentar. En la figura 4.5.1a y 4.5.1b se muestran diseños de estrella bi y tridimensionales.

FIG. 4.5.1

a. diseño bidimensional



b. diseño tridimensional



En la siguiente tabla tenemos un ejemplo donde se presentan los valores que puede tomar un diseño de estrella bidimensional. Estos valores después pueden ser ajustados a un modelo como el que se mostró anteriormente, mediante mínimos cuadrados.

| i | x _{1i} | x _{2i} | y _{1i} |
|---|-----------------|-----------------|-----------------|
| 1 | 2 | 5 | 3.53 |
| 2 | 5 | 2 | 5.75 |
| 3 | 5 | 5 | 8.00 |
| 4 | 5 | 8 | 5.75 |
| 5 | 8 | 5 | 3.50 |

Codificando los valores tendríamos la siguiente matriz

$$\begin{array}{r}
 \begin{array}{cccccc}
 & x_1 & x_2 & x_1^2 & x_2^2 & \\
 X = & 1 & -1 & 0 & 1 & 0 \\
 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 \\
 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\
 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0
 \end{array}
 \end{array}$$

De estos datos se pueden obtener $2k + 1$ parámetros a $2k + 1$ combinaciones de los factores, por lo que no tenemos grados de libertad para calcular el error o falta de ajuste. Como hemos venido mencionando, si no hay replicación, como en este ejemplo, el modelo obtenido debe dar un ajuste perfecto.

Hay otros modelos que no se pueden ajustar a los datos que se obtengan de un diseño de estrella, como lo son los modelos que poseen interacción entre factores.

4.5.2 Diseños Compuestos

Entre los modelos que mejor aproximan una región dentro de una superficie de respuesta, está el modelo polinomial de segundo orden. Para dos factores es el que se presenta a continuación.

$$Y_{11} = \beta_0 + \beta_1 X_{11} + \beta_2 X_{21} + \beta_{11} X_{11}^2 + \beta_{22} X_{21}^2 + \beta_{12} X_{11} X_{21} + r_{11}$$

Podemos decir en general, que si k es el número de variables que se va a investigar, el diseño de segundo orden completo tendría $1/2(k+1)(k+2)$ parámetros. Si decidimos usar un modelo polinomial de segundo orden completo, entonces el diseño experimental debe ser el adecuado para calcular los $1/2(k+1)(k+2)$ parámetros que el modelo requiere.

Los modelos que podríamos usar son el factorial a dos niveles, con el cual podríamos calcular β_0 , β_1 , β_2 y β_{12} , pero no nos permite calcular los parámetros de segundo orden como β_{11} y β_{22} y para las situaciones donde están involucrados más de cuatro factores, hay muy pocas combinaciones de factores para calcular los $1/2(k+1)(k+2)$ parámetros que el modelo requiere.

Es posible también usar un diseño factorial completo a tres niveles, 3^k , el cual nos proporcionaría los estimados ortogonales de los efectos lineales, cuadráticos y de interacción. La desventaja es que requieren demasiado número de experimentos cuando el número de variables aumenta.

Otra posibilidad son los diseños de estrella, que permiten el cálculo de β_{11} y β_{22} junto con β_0 , β_1 y β_2 , desafortunadamente no nos permiten calcular el parámetro de interacción β_{12} , y para las situaciones donde están involucradas más de una variable, hay muy pocas combinaciones de factores ($2k+1$) para calcular todos los parámetros del modelo polinomial de segundo orden completo.

A continuación se presenta una tabla en donde se encuentran los números de pruebas que se necesitarían para cada tipo de diseño:

TAMAÑO DEL DISEÑO DE SUPERFICIE DE RESPUESTA

| <u>NUMERO DE FACTORES</u> | <u>NUMERO DE COEFICIENTES</u> | <u>PRUEBAS EN DISEÑO TRES NIVELES</u> | <u>PRUEBAS EN CUBO DE CARA CENTRADA</u> | <u>PRUEBAS EN BOX-BEHNKEN</u> |
|---------------------------|-------------------------------|---------------------------------------|-----------------------------------------|-------------------------------|
| | <u>MODELO CUAD.</u> | | | |
| 2 | 6 | 9 | 11 | 11 |
| 3 | 10 | 27 | 17 | 15 |
| 4 | 15 | 81 | 27 | 27 |
| 5 | 21 | 243 | 29 | 46 |
| 6 | 28 | 729 | 47 | 54 |
| 7 | 36 | 2187 | 81 | 62 |

Si juntamos un diseño factorial a dos niveles con un diseño de estrella, tendremos lo que se conoce por un diseño compuesto, que se puede usar para calcular todos los parámetros del diseño de segundo orden completo. Si el centro de dos diseños experimentales coincide, se dice del diseño resultante que es un diseño central compuesto. Si los centros no coinciden, el resultado es un diseño no-central compuesto.

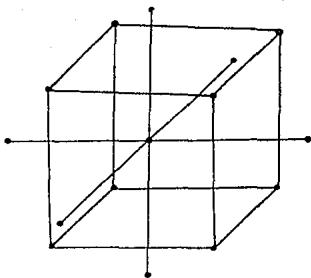
Los diseños compuestos son diseños factoriales de primer orden a los que se les aumentan puntos adicionales que permitan calcular los coeficientes de una superficie de segundo orden.

Los diseños centrales compuestos son diseños factoriales o factoriales fraccionarios 2^k a los que se les aumenta los puntos de estrella como sigue:

| | x_1 | x_2 | x_3 | ... | x_k |
|-----|-------|-------|-------|-----|-------|
| -a | 0 | 0 | ... | 0 | 0 |
| a | 0 | 0 | ... | 0 | 0 |
| 0 | -a | 0 | ... | 0 | 0 |
| 0 | a | 0 | ... | 0 | 0 |
| 0 | 0 | -a | ... | 0 | 0 |
| 0 | 0 | a | ... | 0 | 0 |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| 0 | 0 | 0 | ... | -a | a |
| 0 | 0 | 0 | ... | a | a |

El valor de a lo selecciona el experimentador. Para esto se pueden usar varios criterios. Para el caso de tres variables independientes la matriz esta dada por

$$D = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 \\ \begin{matrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ -a \\ a \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ a \\ -a \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ a \end{matrix} \end{matrix}$$



Es recomendable que el experimentador incluya más de un punto central para poder encontrar otras propiedades del diseño.

Los primeros ocho puntos del diseño son los puntos factoriales para ajustar un modelo de primer orden. El noveno punto es el punto central del diseño, y los seis restantes son los puntos axiales del cubo. En la figura 4.5.2 se da la ilustración geométrica del diseño central compuesto con tres variables.

Si $a = 1$, el diseño también se llama Cubo de Cara Centrada, y cada variable se mide a tres niveles. Si no es igual a uno, cada variable se mide a cinco niveles. El número de puntos experimentales que se necesita para este diseño es suficiente para ajustar una superficie de segundo orden. Para $k > 2$, el número de puntos experimentales es considerablemente menor que el que se requiere en un diseño factorial 3^k . Otra ventaja del diseño central compuesto es que se presta para ser usado en experimentación secuencial bastante bien. Por ejemplo, supongamos que el experimentador empieza su estudio de superficie de respuesta con un diseño factorial 2^k , sigue con el método de ascenso acelerado y después descubre por análisis de varianzas (que se estudiará en la siguiente sección) que hay falta de ajuste con el modelo de primer orden. Lo único que ahora necesitaría sería agregar a sus 2^k observaciones, puntos adicionales que representen los puntos axiales y el centro del diseño, con lo que podrá calcular la superficie de respuesta de segundo orden.

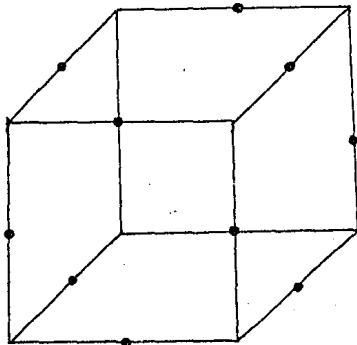
4.5.3 Diseños de Box-Behnken

Los diseños de Box-Behnken excluyen las esquinas, donde todas las variables se encuentran en sus puntos extremos. Con frecuencia, a estas combinaciones extremas no se puede experimentar, ya sea por seguridad, o porque la respuesta que se obtiene no es significativa. Evitando estos extremos, el diseño Box-Behnken permite selección de rangos más amplios. El diseño Box-Behnken es un poco más conservador que los otros mencionados.

El diseño de Box-Behnken rellena una región esférica. En el apéndice se presentan los valores que toman las variables codificadas de este tipo de diseños para dos, tres y cuatro factores.

FIG. 4.5.3

Diseño de Box-Behnken a Tres Niveles



4.6 PROPIEDADES DE LAS MATRICES DE EXPERIENCIAS

En esta sección se presentarán procedimientos que permitirán evaluar una matriz de experiencias conforme a las restricciones y peculiaridades de nuestro experimento, y así elegir la más apropiada antes de que se haya realizado ninguna experiencia. Si el lector no está completamente familiarizado con la terminología y operaciones con matrices se recomienda leer el apéndice de Matrices antes de iniciar esta sección.

Debido a la diversidad de objetivos y problemas que los experimentadores afrontan, se han establecido criterios que nos ayudan a evaluar a una matriz de experiencias y qué tan adecuada es para nuestro experimento en particular.

Los principales criterios utilizados para clasificar las matrices son:

1. - Propiedades intrínsecas - Las cuales incluyen el Criterio Económico, la Secuencialidad, la Partición o Fraccionamiento y la Robustez.
2. - Calidad de los Estimadores
3. - Calidad Previsional del Modelo Matemático

Estas propiedades son herramientas que dependen exclusivamente de la estructura de la matriz de experiencias seleccionada y nos permitirán conocer las características de la matriz antes de realizar ninguna experiencia. En caso de no que estas no sean satisfactorias, se modificará o se construirá otra matriz con las propiedades deseadas (en algunos casos, no se podrán obtener todas las propiedades deseadas, por lo que se necesita priorizar las que se consideren más importantes).

Un experimento exitoso no se extrae de un catálogo o de un libro de texto. Para evaluar un diseño de experimentos es necesario especificar:

- Los objetivos del experimento
- Proposición de un diseño experimental
- Modelo estadístico
- Un estimado del error experimental

4.6.1 Propiedades intrínsecas

- I. Criterio Económico - El costo y el tiempo van a ser restricciones que siempre estar presentes al elegir una matriz, la cual va a requerir un número de experiencias determinado. La característica deseada en este caso es que el número de experiencias sea mínimo, pero que sin embargo nos permita obtener una respuesta confiable a las preguntas planteadas en el objetivo. Para medir la eficiencia promedio de cada experiencia se utiliza la relación R, y se define de la siguiente forma:

$$R = (P/N) * 100$$

donde:

- P = Parámetros estimados del modelo matemático
- N = Número de experiencias

- II. Secuencialidad - La secuencialidad es cuando es posible reutilizar lo mejor posible los resultados de una parte o de todas las experiencias realizadas anteriormente.

A veces, nos damos cuenta que los resultados iniciales que nos dio el modelo propuesto son insuficientes para representar de manera adecuada el fenómeno estudiado dentro de la región de interés. Hay ocasiones donde se puede prever un cambio en la región experimental, introducir nuevos factores o modificar el modelo matemático (por ejemplo, aumentar el grado del polinomio) reutilizando los datos obtenidos en la primera fase de la experimentación.

- III. Partición o Fraccionamiento - Una vez que se establece la matriz de experiencias, el experimentador puede llegar a enfrentarse a ciertos problemas prácticos al llevar a cabo las experiencias. Es por esto que se tiene que desarrollar un programa experimental en un corto período de tiempo con el fin de evitar la presencia de algunos factores no controlables (temperatura ambiente, envejecimiento de un reactivo, etc.).

La técnica más común para evitar el sesgo cuando se presentan este tipo de problemas es la partición en grupos homogéneos de la matriz de experiencias que proporcionarán una información equivalente y en donde los factores no controlados se pueden considerar constantes. Algunas matrices de experiencias poseen esta propiedad y otras no.

- IV. Robustez - Cuando se presentan errores pequeños en la experimentación y esto provoca grandes variaciones en los valores de los coeficientes, se dice que no es una matriz robusta.

Actualmente se maneja como concepto de robustez cuando al comportamiento de un sistema (respuestas) no lo afectan los factores ambientales, es decir, las condiciones que el experimentador o fabricante no puede controlar (condiciones ambientales, características de las materias primas, condiciones de proceso del producto, etc.).

4.6.2 Calidad de los Coeficientes

Antes de describir los criterios de calidad de los coeficientes, se hablará sobre el dominio o región en donde se encuentran los valores de los coeficientes. Uno de los puntos básicos sobre los que se basa la teoría del diseño de experimentos es sobre la hipótesis de que el error experimental se comporta siguiendo una distribución normal, con media igual a cero y varianzas σ^2 , y que se representa como $N(0, \sigma^2)$. Con lo anterior algunos autores han determinado los límites de los coeficientes (β) que cumplen con la siguiente relación:

$$(b - \beta)(X' X)(b - \beta) = p \sigma^2 F \quad \alpha (P, \eta)$$

- b = Vector de los estimadores de los coeficientes obtenido por mínimos cuadrados (Vector b)
- p = Número de parámetros del modelo matemático.
- σ^2 = Estimación de la varianza experimental
- F = Valores de la prueba estadística
- = Número de grados de libertad asociados con σ^2
- α = Nivel de confianza seleccionado

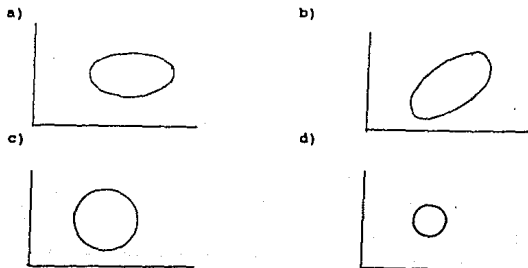
Este dominio es una hiperelipse en el espacio de coeficientes, centrado sobre β . Se puede decir que los verdaderos valores de los coeficientes se encuentran dentro de la elipse con un riesgo α . Como el volumen de la elipse es inversamente proporcional al determinante $|X'X|$ en un diseño de experimentos adecuado, el valor de $|X'X|$ se puede maximizar minimizando la región de confianza y aumentando la precisión de β . Los criterios de calidad están relacionados directamente a las características de esta elipse. Las características tales como volumen, forma y orientación dependerán únicamente de la matriz de experiencias. Así tenemos que:

Volumen - El volumen está relacionado a la precisión global de los coeficientes a un determinado nivel de riesgo. Cuanto más pequeño es el dominio de confianza, mayor es la precisión global. Se buscará la matriz de experiencias que minimice el volumen de la elipse (d).

Forma - Nos describe la dispersión de la elipse. Una forma alargada se traduce por una gran disparidad en la precisión de los coeficientes (a,b). Por el contrario, en un dominio de confianza esférico, todos los coeficientes tienen la misma precisión (c). Cabe hacer notar que no siempre se busca esta igualdad puesto que hay veces que se desea que algunos coeficientes tengan una precisión más grande que otros.

Orientación - La orientación de la elipse representa la independencia entre los coeficientes. Se busca una elipse que tenga sus ejes principales paralelos a los ejes de los coeficientes. En este caso, el valor calculado para un coeficiente es independiente de los valores de los otros coeficientes (a,b).

A continuación se pueden ver algunas proyecciones de las matrices con dos coeficientes, bi y bj:



4.6.3 Calidad Previsional del Modelo Matemático

a) Criterio D

De un conjunto de matrices de experiencias discretas de N puntos posibles en un espacio x, se dice que una matriz es óptima D si posee un determinante mínimo $|(X'X)^{-1}|$

$$|(X''X)| = \min (|(X'X)^{-1}|)$$

Una matriz óptima-D conduce a obtener buenos estimados de la intersección y pendiente del modelo de primer orden.

$$y = \beta_0 x + \beta_1$$

Se obtiene el valor más preciso de β_0 cuando los dos experimentos están localizados de tal forma que el centro del diseño sea en $x_1 = 0$. Cualquier otro arreglo de experimentos produce mayor incertidumbre en el estimado de β_0 .

El estimado más preciso de β_1 se obtendrá cuando los dos experimentos se localicen tan lejos el uno del otro como sea posible. Si los dos experimentos se pudieran localizar a $-\infty$ y $+\infty$, no existiría ninguna incertidumbre en la pendiente. En la mayoría de los casos reales, existen límites por lo que no es posible obtener un diseño experimental de cero incertidumbre en la pendiente. Sin embargo, la mínima incertidumbre en la pendiente se obtendrá cuando los experimentos estén localizados lo más lejos posible uno del otro como sea práctico.

b) Criterio A

En el conjunto de matrices de experiencias discretas de N puntos posibles en un espacio x, una matriz de experiencias se dice que es óptima-A si la traza de $(X'X)^{-1}$ es mínima (suma de los elementos de la diagonal de $(X'X)^{-1}$).

$$\text{tr}(X''X)^{-1} = \min \text{tr} (X'X)^{-1}$$

La minimización de la traza $(X'X)$ es otro criterio para elegir entre diseños experimentales. Este criterio lleva a la minimización del promedio (o total) de las varianzas (i.e., cuadrado de errores estándares) de los estimados β_i 's. Cada una de las varianzas individuales debe ser pequeña para que la suma de éstas sea pequeña.

La traza $(X'X)^{-1}$ está relacionada con la elipse de confianza de los coeficientes en donde la diagonal de $(X'X)^{-1}$ representa la varianza de los estimadores de los coeficientes.

c) Criterio E (Eigen values)

Se dice que una matriz de experiencias es óptima-E si conduce a que al valor propio máximo de $(X'X)^{-1}$ sea el más pequeño posible. Esto impone a la elipse a tener la longitud del eje más grande la más pequeña.

$$\max |(X''X)^{-1}| = \min \lambda \max |(X'X)^{-1}|$$

Si las variables en el diseño de experimentos son completamente ortogonales, $X'X$ es una matriz diagonal con elementos diagonales positivos. Sin embargo, los resultados de álgebra lineal muestran que, aunque el diseño no sea ortogonal, existe una rotación de los ejes en el espacio factorial tal que la matriz $X'X$ se transforma en una matriz diagonal con elementos diagonales positivos. La matriz transformada X corresponde a la matriz de diseño del modelo transformado. Los términos en el modelo transformado son combinaciones de los términos originales (valores característicos) en el modelo y son mutuamente ortogonales. Los eigenvectores de la matriz $X'X$ son los vectores de los pesos que relacionan las variables viejas con las nuevas. Cada eigenvalor de la matriz $X'X$ mide la dispersión en cada una de las variables transformadas.

Varianza de los Valores Propios

La importancia del alargamiento de la elipse de confianza se puede medir también por la varianza de los valores propios de $(X'X)^{-1}$. Una forma esférica implica valores propios homogéneos y en consecuencia una varianza pequeña. Por otro lado, una forma alargada significa una gran dispersión de los valores propios.

Ortogonalidad

Una matriz es ortogonal si la matriz $(X'X)^{-1}$ es diagonal. Los ejes principales de la elipse son paralelos a los ejes de los coeficientes y estos son independientes. Esto se lleva a que la matriz este equilibrada.

La completa ortogonalidad de un diseño ocurre cuando todas las correlaciones entre pares de términos en un modelo son iguales a cero. En ese caso, el determinante R es la matriz identidad I, $|R| = |I| = 1$, y la traza (R^{-1}) es igual al número de términos en el modelo supuesto (excepto el término de intersección β_0). Si el diseño es completamente ortogonal, los estimados de las B_i 's del análisis de datos, tienen la deseada propiedad de no estar correlacionados. En un diseño ortogonal $|R|$ es menor a 1 y la traza excede el número de términos del modelo supuesto.

4.6.4 Propiedades de la Respuesta Calculada

Al construir un modelo empírico, el único requisito que se pide a este es que prediga bien la respuesta dentro de la región experimental.

Los valores de los coeficientes no se conocen perfectamente ya que han sido calculados a partir de los resultados experimentales. Asimismo, dos estimados de las respuestas llevan consigo la incertidumbre del error experimental.

Una forma de medir la precisión de la estimación es mediante el cálculo de la función de varianza mencionado anteriormente. Es por esto que dicha función involucra muchos criterios de calidad sobre la previsión o estimación. A continuación se describen algunos de los criterios mas usados.

Isovariancia por Rotación

Una matriz de experiencias discreta posee esta propiedad si la función de varianza de la respuesta sólo depende de la distancia hacia el centro de la región experimental. Es así como ninguna dirección es privilegiada y la respuesta se calcula con la misma precisión en cada punto de una esfera con base en el centro de la región experimental.

Precisión Uniforme

Una matriz de experiencias discreta posee la propiedad de precisión uniforme si la función de varianza es constante al interior de una esfera de radio igual a la raíz cuadrada del momento de orden 2. Esta propiedad asegura que la respuesta calculada es conocida más o menos con la misma precisión al interior de la región experimental.

4.7 EXPLORACION DE MAXIMOS CON MODELOS DE SEGUNDO ORDEN

Hasta ahora, hemos marcado los pasos de una experimentación secuencial para llegar a la elaboración del polinomio de segundo orden. En esta sección explicaremos la manera de encontrar el máximo del polinomio construido.

4.7.1 Ejemplo

Tomaremos como ejemplo el mismo sistema que hemos venido considerando. Recordemos que en la sección 4.3 encontramos el area óptima donde experimentar mediante el método de ascenso acelerado. A partir de la información obtenida mediante este método, se prosiguió a contruir un segundo diseño, al que después se le agregaron unos puntos de estrella para formar un diseño factorial de segundo orden compuesto. En esta sección encontraremos el punto donde nuestra respuesta sea máxima

Las variables se codificaron así:

$$X_1 = (\text{tiempo} - 90 \text{ min})/10 \text{ min}, \quad X_2 = (\text{Temp.} - 145\text{C})/5\text{C}$$

Tabla 4.7a

| corrida* | variables sin
codificar | | variables
codificadas | | respuesta: | |
|------------------|----------------------------|--------------|--------------------------|-------------|-------------------------|------|
| | tiempo
(min) | Temp
(°C) | 1 | 2 | rendimiento
(gramos) | |
| 11 | 80 | 140 | -1 | -1 | 78.8 | |
| 12 | 100 | 140 | +1 | -1 | 84.5 | |
| Primera
serie | 13 | 80 | 150 | -1 | +1 | 91.2 |
| 14 | 100 | 150 | +1 | +1 | 77.4 | |
| 15 | 90 | 145 | 0 | 0 | 89.7 | |
| 16 | 90 | 145 | 0 | 0 | 86.8 | |
| 17 | 76 | 145 | $-\sqrt{2}$ | 0 | 83.3 | |
| Segunda
serie | 18 | 104 | 145 | $\sqrt{2}$ | 0 | 81.2 |
| 19 | 90 | 138 | 0 | $-\sqrt{2}$ | 81.2 | |
| 20 | 90 | 152 | 0 | $\sqrt{2}$ | 79.5 | |
| 21 | 90 | 145 | 0 | 0 | 87.0 | |
| 22 | 90 | 145 | 0 | 0 | 86.0 | |

*El orden de las corridas fue aleatorio. Primero se corrió el primer bloque (11-16) y después el segundo (17-22).

El polinomio de primer orden que se obtuvo a partir de la primera serie de datos es:

$$Y = 82.975 - 2.025X_1 + 1.325X_2 - 4.875X_1X_2$$

Si quisiéramos ajustar un polinomio de segundo grado a la primera serie de datos, no podríamos calcular los efectos cuadráticos por separado, ya que el diseño no contiene más que dos niveles de cada variable. Y considerando la siguiente tabla

Tabla 4.7b

| COEFICIENTES OBTENIDOS | VALOR ESPERADO ASUMIENDO QUE EL MODELO VERDADERO ES UN POLINOMIO SEGUNDO ORDEN |
|------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|
| bo = 82.975 | $\beta_0 + \beta_{11} + \beta_{22}$ |
| b1 = -2.025 | β_1 |
| b2 = 1.325 | β_2 |
| b12 = -4.875 | β_{12} |

vemos que los efectos cuadráticos aparecen unidos al término constante. También podemos ver que el coeficiente de segundo orden, b12, es bastante grande comparado con los de primer orden. Todo esto nos indica que estamos dentro de una región donde el modelo de primer orden no nos da la aproximación que se necesita y por lo tanto tendremos que experimentar más para poder calcular los efectos de segundo orden (cuadráticos y de interacción).

4.7.1.2 Segunda Serie de Experimentos

Se añadieron a este cubo los puntos que le dan forma de estrella y dos puntos centrales. En la tabla 4.7a también se muestran los resultados de este segundo grupo de experimentos.

El polinomio obtenido llevando a cabo los cálculos es

$$Y = 87.36 - 1.39X_1 - 0.37X_2 - 2.15X_1^2 - 3.12X_2^2 - 4.88X_1X_2$$

4.7.2 Localización del Máximo en la Superficie Calculada

El máximo de la superficie se puede obtener derivando el polinomio de segundo grado con respecto a cada variable e igualando esta derivada a cero. Por ejemplo, para $k = 2$ variables, la derivada con respecto a x_1, x_2 de

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2$$

da como resultado las ecuaciones:

$$2b_{11}x_1 + b_{12}x_2 = -b_1$$

$$b_{12}x_1 + 2b_{22}x_2 = -b_2$$

Los coeficientes de la diagonal principal son el doble de los coeficientes de los efectos cuadráticos puros, mientras que los que están fuera de la diagonal son los coeficientes de interacción.

Aplicando los valores del ejemplo que estamos utilizando tenemos

$$-4.30x_1 - 4.88x_2 = 1.39$$

$$-4.88x_1 - 6.24x_2 = -0.37$$

Resolviendo estas ecuaciones tenemos

$$x_1 = -3.4727$$

y

$$x_2 = 2.7751$$

que en términos decodificados se traduce a

$$\text{tiempo} = 55.27 \text{ minutos}$$

y

$$\text{Temp} = 158.88^\circ\text{C}$$

También podemos ver que para el ejemplo, el valor de y en el punto máximo es

$$y = 90.28 \text{ gramos}$$

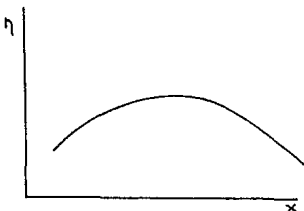
4.8 ANALISIS DE SUPERFICIES DE RESPUESTA

En esta sección hablaremos sobre técnicas para poder interpretar el comportamiento de un sistema mediante el polinomio previamente construido.

4.8.1 Aplicación de la Superficie de Respuestas

En ocasiones nuestra respuesta depende solamente de una variable, mediante una relación que nosotros desconocemos, pero que vamos a suponer tiene un máximo. Esto se puede representar de la siguiente manera:

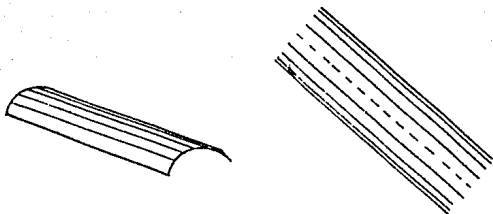
FIG. 4.8a



Ahora vamos a suponer el mucho más común caso, en el cual la respuesta depende de dos variables, X_1 y X_2 . Sucede con frecuencia que en un sistema dado existe dependencia entre las variables. Esto quiere decir que la función de respuesta de una variable no es independiente del nivel de la otra variable. La investigación de la dependencia entre variables tiene gran importancia y aplicación dentro del estudio de superficie de respuestas debido a las siguientes razones:

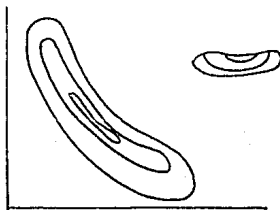
1. Alternativa óptima. Cuando el caso es como el que se representa en la figura 4.8b, podemos ver que tenemos una gran variedad de alternativas para alcanzar el nivel óptimo de la respuesta. Esto es de gran utilidad pues nos permite elegir las condiciones mas convenientes o al menor costo para operar el sistema. Se dice que las variables del sistema se compensan, ya que si nos movemos del máximo para cambiar el nivel de una variable, podemos regresar cambiando el nivel de la otra.

FIG. 4.8b
CRESTA ESTACIONARIA



2. Regiones insensibles. Si la respuesta es como la de la figura 4.8c, podemos aprovechar y trabajar en el punto óptimo donde si nos movemos de este, las pérdidas en respuesta van a ser pequeñas.

FIG. 4.8c
MAXIMO TENUE



3. Mejora en respuesta mediante cambios simultáneos de varias variables. Si lo que se detecta es una cresta ascendente como la de la figura 4.8d, vamos a tener en cuenta que no va a existir mejora en el proceso si cambiamos el nivel de una variable a la vez, sino solamente si las movemos simultáneamente, en dirección del eje de la cresta.

FIG. 4.8d
CRESTA ESTACIONARIA



4. Existencia de una ley natural. Para ejemplificar esto, definiremos primero la diferencia entre dos tipos de variables.

- Las variables naturales como son, la temperatura, tiempo, presión, concentración, tienen en común que son cantidades que nosotros manipulamos y medimos a nuestra conveniencia.

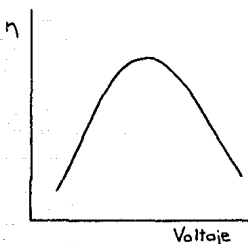
- Las variables fundamentales no son controladas ni medidas a nuestro antojo, sino más bien se miden en función de las variables naturales. Un ejemplo de variable fundamental sería la colisión molecular, que se mide en función de la temperatura y presión del sistema.

Por lo dicho anteriormente, podemos darnos cuenta entonces, que a veces, distintas combinaciones de los valores de las variables naturales nos van a dar como resultado el valor óptimo de la variable fundamental. Esta lógica también puede aplicarse a muchos sistemas que tienen un máximo. Tomemos como ejemplo a un investigador que está midiendo la contracción muscular de la pata de una rana (respuesta) en función del paso de corriente a través de ella. Vamos a suponer que la respuesta está dada solamente en función del voltaje aplicado. Esta función tiene un máximo, es decir, entre mayor sea el voltaje aplicado, mayor contracción tendrá la pata de la rana.

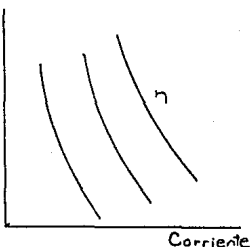
La curva va decreciendo después de cierto nivel de voltaje, pues el músculo de la rana se va paralizando después de cierto nivel de voltaje. Este sistema se puede representar como se muestra en la figura 4.8e.

FIG. 4.8e
SUPERFICIE DE RESPUESTA PARA EL EJEMPLO DE LA RANA

I)



II)



Vamos a recordar la lógica que planteábamos con respecto a las variables fundamentales y las naturales pues este caso es similar. El investigador en primer lugar, no conoce la relación de voltaje y contracción muscular de la rana, además que él no está midiendo el voltaje directamente, ya que su aparato mide solamente corriente y resistencia (X_1 y X_2). En este caso, la variable fundamental sería el voltaje, y las naturales serían la intensidad y la corriente. Por si fuera poco, el investigador desconoce la ley de Ohm, que nos dice que el voltaje es igual al producto de la resistencia por la intensidad. Si hubiera llevado a cabo la experimentación variando separadamente la corriente y la resistencia, hubiera construido una superficie de respuesta como la que se muestra en la figura 4.8eII.

Decimos de casos como este, que existe "redundancia" de una variable, o que el máximo "posee un grado de libertad". Esto se refiere a que es un sistema que aparentemente tiene dos variables, pero que de hecho se puede expresar mediante una sola (el voltaje). Este tipo de casos es muy común en ciencias como la biología y la física, donde dentro determinados rangos de valores de las variables, existe relación entre ellas.

El darse cuenta de que existe dependencia entre variables, junto con los conocimientos del investigador, va a llevarnos a un mejor entendimiento del sistema. Si la superficie de respuestas resultara como la 4.8e11, podemos sospechar que existe alguna variable fundamental. En nuestro ejemplo de la rana, el investigador pudo hasta haber descubierto la ley de Ohm.

5. Optimización de una segunda respuesta. Si superpusiéramos la representación gráfica de una segunda respuesta sobre nuestra respuesta original (esto si los contornos de los dos sistemas no son exactamente paralelos), podríamos elegir para el proceso óptimo, un punto cercano a la cresta de nuestra respuesta principal que además nos diera el mejor valor para la respuesta secundaria.

4.8.2 Sistemas con más de Dos variables

Hasta ahora solamente hemos considerado los sistemas donde existen únicamente dos variables X_1 y X_2 . Mientras va aumentando el número de variables, también va a aumentar la complejidad de nuestra situación.

Vamos ahora a tomar como ejemplo algo tan simple como hacer un pastel. El objetivo de nuestra investigación va a ser obtener la mejor textura del pastel, la cual va a ser nuestra respuesta que suponemos se puede medir numéricamente en algún tipo de unidades. Tenemos k variables que denotamos como X_1, X_2, \dots, X_k , las cuales pueden ser, levadura (X_1), harina (X_2), clara de huevo (X_3) y ácido cítrico (X_4).

Vamos a suponer que sabemos que la textura depende solamente de dos variables fundamentales, la consistencia de la masa w_1 y su acidez w_2 , y que la textura óptima se alcanza cuando éstas se encuentran en su nivel óptimo w_{10} y w_{20} . También supongamos que w_1 y w_2 se pueden representar por medio de una aproximación polinomial en función de las cantidades de los ingredientes

$$\text{consistencia} \quad w_1 = a_1 + b_1X_1 + c_1X_2 + d_1X_3 + \dots + p_1X_k$$

$$\text{acidez} \quad w_2 = a_2 + b_2X_1 + c_2X_2 + d_2X_3 + \dots + p_2X_k$$

Cada coeficiente de la primera ecuación mide el cambio de consistencia al añadir una unidad del ingrediente correspondiente. En este caso sería positivo si lo que estuviéramos añadiendo fuera sólido y negativo si fuera líquido, ya que el ingrediente sólido hace que la consistencia sea más dura y el líquido la aguada.

Se podría obtener la consistencia óptima en el espacio k -dimensional y sería $w = w_{10}$, tal que

$$a1 + b1x1 + c1x2 + d1x3 + \dots + p1xk = w10$$

De la misma manera para la ecuación de acidez, cada coeficiente mide el cambio de acidez por la adición de una unidad del ingrediente correspondiente, y sería positivo si la sustancia es ácida y negativo si es básica. La acidez óptima se obtendría en el espacio k-dimensional y sería $w2 = w20$.

$$a2 + b2x1 + c2x2 + d2x3 + \dots + p2xk = w20$$

La intersección entre los dos planos nos daría los valores óptimos de textura a partir de los mejores valores para la acidez y la consistencia. La textura óptima estaría dentro de un subespacio de $k - 2$ dimensiones. Esto quiere decir, que existirían $k - 2$ direcciones en ángulos rectos sobre las cuales nos podríamos mover para obtener la textura óptima del pastel. El sistema de k variables se puede expresar en términos de dos variables fundamentales $w1$ y $w2$, aunque existe redundancia de $k - 2$ variables que corresponde a las $k - 2$ dimensiones a las que está sujeto el máximo. Podemos decir que el máximo "tenía 2 gl".

La superficie que representaría este ejemplo sería como la de la figura 4.8.2, que es una cresta estacionaria.

4.8.3 Análisis Gráfico de la Superficie Obtenida

Vamos a tomar como ejemplo la siguiente ecuación de segundo grado, que obtuvimos en la sección 4.7.

$$Y = 87.36 - 1.39x1 + 0.37x2 - 2.15x1^2 - 3.12x2^2 - 4.88x1x2$$

Así como está la ecuación, no nos dice demasiado acerca del comportamiento del sistema. Una manera de determinar esto, es graficándola. Esto se hace de la siguiente manera:

Al hacer la experimentación, nos dimos cuenta alrededor de donde giraban los valores de \bar{X} (la cual representa rendimiento en gramos). En este caso son de 90%, 80%, 75%, más o menos.

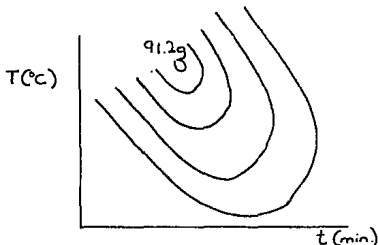
- Primero graficaremos la curva de 80%. Se sustituye el 80 en el lugar donde se representa la respuesta, o sea del lado de la Y.
- Se le da algún valor a $x1$, de los valores que usamos para la experimentación y de ahí nos queda una ecuación con una sola incógnita, $x2$.

- Después se resuelve la ecuación, la cual es una cuadrática, por lo que nuestra x_2 va a tomar dos valores. Se grafican los dos puntos.

- Se van dando valores a x_1 , hasta por el mismo proceso completar la curva de 80% de rendimiento. Después se construye la curva de 75% de la misma manera, hasta completar nuestra superficie, con una cantidad de valores de respuesta tan amplia como nosotros necesitemos.

La ecuación de nuestro ejemplo se ilustra mediante la siguiente figura.

FIG. 4.8f
Contornos de la superficie obtenida



Podemos observar que la expresión que obtuvimos tiene un verdadero máximo a la izquierda. Los ejes del sistema están inclinados en un determinado ángulo con respecto a los ejes de las variables y la figura está algo elongada en el eje de X_1 . Todas estas observaciones, debemos recordar, están sujetas al error experimental que hayamos podido tener y por lo tanto no tienen que ser totalmente válidas. Se debe confirmar la exactitud de la gráfica agregando a la figura los puntos experimentales.

Para ecuaciones donde existen más de dos variables, también es posible obtener alguna representación geométrica. Un ejemplo sería algún modelo de tercera dimensión hecho con alambres. El procedimiento es muy similar al que describimos anteriormente.

Este resulta bastante laborioso.

Cuando existen más de tres variables, la representación gráfica es imposible, por lo que para analizar la ecuación de segundo grado se siguen otros procedimientos. Estos también se pueden usar para los otros casos donde existen menos de tres variables, dada la labor que requiere el graficar. La ecuación de segundo grado se puede reducir a una forma estándar (Forma Canónica), la cual hace posible el conocimiento rápido de la naturaleza de la ecuación de segundo grado.

4.8.4 Análisis de Superficies mediante las Formas Canónicas.*

Vamos a considerar la misma ecuación con la que hemos venido trabajando. Supongamos que en vez de medir el origen en el punto Q , lo hacemos en el centro del sistema, en el punto S , y que en vez de medir las variables en las direcciones de x_1 y x_2 , las medimos en las direcciones de los ejes principales X_1^* y X_2^* . Con estas nuevas coordenadas la ecuación de la superficie toma la siguiente forma:

$$Y - Y_s = \beta_{11}X_1^{*2} + \beta_{22}X_2^{*2}$$

donde Y_s es el rendimiento en el punto estacionario S . Para nuestro ejemplo esto sería

$$Y - 90.28 = - 5.12X_1^{*2} - 0.147X_2^{*2}$$

ec. 4.8.4

donde el centro del sistema es en $x_1 = -3.47$ y $x_2 = 2.775$

Esta ecuación se puede interpretar de la siguiente manera. El cambio en rendimiento al movernos del centro del sistema S a algún punto cuyas coordenadas sean X_1^* y X_2^* , está dado por el lado derecho de la ecuación. Los coeficientes β_{11} y β_{22} son negativos los dos, por lo que siempre existirá pérdida en el rendimiento en cualquier dirección que se tome de S ; β_{11} representa la pérdida en dirección de X_1^* y β_{22} en la dirección de X_2^* . Para este ejemplo S es el verdadero máximo de la superficie. En las gráficas de la figura 4.8.4 se representan ejemplos de las formas que puede tomar una ecuación de segundo grado.

Fig. 4.8.4a



Fig 4.8.4b



* EMPIRICAL MODEL-BUILDING & RESPONSE SURFACES, Box & Draper, 1987

Fig. 4.8.4c

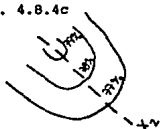
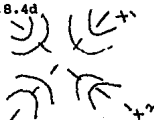


Fig 4.8.4d



El tipo (a), es del que hablábamos anteriormente. β_{11} y β_{22} son negativos y la forma que toma la superficie es de una elipse. Cuando el valor absoluto de β_{22} es menor que el de β_{11} , la elipse estará elongada a lo largo del eje de las X_2^* 's, como en el dibujo.

El tipo (d) muestra el sistema que se obtiene cuando β_{11} es negativa y β_{22} es positiva. La superficie toma la forma de una hipérbola. Como hablábamos en el caso anterior, la magnitud relativa de los coeficientes muestran el grado de elongación de la representación. En el ejemplo que se ilustra, β_{22} sería menor que β_{11} en valores absolutos.

El tipo (b) se obtiene cuando β_{11} es negativa y β_{22} es cero, y se puede decir que es el límite de el tipo (a) o del tipo (d) cuando la elongación en la dirección del eje de las X_2^* 's es infinita. Matemáticamente representa, la etapa de transición entre el tipo (a) y el (d). No existe un punto central sino una línea de centros sobre el eje de las X_2^* 's. La ecuación es de la forma

$$Y - Y_s = \beta_{11} X_1^{*2}$$

donde Y_s es la respuesta en cualquier punto del eje de las X_2^* 's.

El tipo (c) muestra un sistema cuando el centro en el eje de las X_2^* 's es infinito y β_{11} es negativa, esto es, una parábola. Si tomamos como origen algún punto conveniente en el eje de X_2^* , la ecuación toma la forma

$$Y - Y_s = \beta_{11} X_1^{*2} + \beta_{22} X_2^*$$

El coeficiente β_2 mide la razón de incremento en rendimiento, es decir, la pendiente en el eje de X_2^* . Se puede decir que este tipo es el caso límite entre el tipo (a) y el tipo (d), donde el centro está en el infinito.

En la realidad, va a ser raro que encontremos una ecuación reducida del tipo (b) o (c). Es decir que en lugar de que β_2 valga cero, va a tomar algún valor bastante chiquito, ya sea positivo o negativo. Esto va a resultar en los tipos (a) y (d) que están elongados en el eje de las X_2 's. Se van a ver en estos casos, que localmente la superficie si es del tipo (b) pero ligeramente curvada. De la misma manera, no vamos a tener exactamente el tipo (c); en vez de tener el centro del sistema en el infinito, más bien va a ser del tipo (a) o (d) elongada en el eje de X_2 con el centro lejos del área de diseño. Debemos hacer notar, que la existencia de una cresta, ya sea del tipo (b) o del (c), se indica cuando uno de los coeficientes β_{11} o β_{22} tiene un valor pequeño.

Recordemos que la superficie que nosotros construimos en base a la experimentación, nos proporciona una aproximación adecuada solamente en el área de diseño, y que además de no sernos de interés fuera de esta área, resulta totalmente inadecuada en esas regiones. Por ejemplo, es bastante común encontrar en el análisis de una ecuación de segundo grado, que existe un máximo lejano de la región de diseño. Esto no indica que la experimentación previa nos haya llevado a un máximo sino a una cresta creciente. Sobre esto, no se debe hacer ninguna conclusión, sino que solamente nos debemos enfocar sobre la cresta local.

Cuando los ejes de la superficie están inclinados con respecto a los ejes originales y la superficie se encuentra elongada a lo largo de alguno de sus ejes, esto quiere decir que existe alguna dependencia entre las variables; o sea, el punto en el cual se obtiene un máximo cuando se cambia el valor de x_1 no es independiente del valor de x_2 . Cuando el efecto de interacción b_{12} es igual a cero, X_1 y X_2 se encontraran en la misma dirección que x_1 y x_2 y por lo tanto el efecto de dependencia será nulo. El hecho que b_{12} tenga un valor diferente de cero, indica que existe cierta dependencia entre las variables, aunque no nos dice que tan grande es esta dependencia. Para darnos cuenta de esto, es necesario calcular b_{11} y b_{22} y reducirlos a sus formas canónicas.

APENDICE

Cálculo de las Formas Canónicas

Una vez demostrado la utilidad de estos análisis para la interpretación de las superficies, vamos a proceder a explicar el procedimiento a detalle. Este procedimiento consiste en calcular

- La posición de S, el centro del sistema y el valor que toma la respuesta en ese punto (Y_s).
- Los valores de B_{11} y B_{22} .
- Las direcciones de los ejes X_1^* y X_2^* .

a. El primer paso era encontrar S, que es el punto donde la respuesta es estacionaria, es decir donde dY/dx_1 y dY/dx_2 es cero en ambos casos. Poniendo como ejemplo otra vez nuestra ecuación de segundo grado, derivándola con respecto a x_1 y a x_2 e igualando ambas ecuaciones a cero, tendríamos.

$$-4.30x_1 - 4.88x_2 = 1.39$$

$$-4.88x_1 - 6.24x_2 = -0.37$$

La solución a este sistema es

$$x_{1s} = -3.47$$

$$x_{2s} = 2.775$$

Las cuales son las coordenadas de S. Sustituyendo estos valores en la ecuación original vemos que el valor de $Y_s = 90.28$.

b. El segundo paso era encontrar los valores de los coeficientes B_{11} y B_{22} . Considérese el determinante

$$\begin{vmatrix} b_{11}-B & 1/2b_{12} \\ 1/2b_{12} & b_{22}-B \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -2.15-B & -2.44 \\ -2.44 & -3.12-B \end{vmatrix}$$

Los términos de la diagonal b_{11} y b_{22} son los términos cuadráticos y B es una cantidad desconocida. Estos términos se llaman términos no diagonales. Los términos diagonales son la mitad de los efectos cuadráticos. Si obtenemos el determinante de esta matriz, lo igualamos a cero y sacamos las raíces de la ecuación tenemos:

$$B_1 = - 5.1227$$

$$B_2 = - 0.1473$$

Los cuales representan los valores de B_{11} y B_{22} por lo que la ecuación canónica toma la forma

$$Y - 90.28 = - 5.1227x_1^2 - 0.1473x_2^2$$

Hasta ahora está claro el signo y la magnitud de B_{11} y B_{22} y la forma y posición de S , con lo cual sabemos el tipo de superficie que estamos tratando. Sólo nos queda determinar las direcciones de los ejes X_1^* y X_2^* .

c. Para determinar la dirección de los ejes X_1^* y X_2^* vamos a suponer que el cambio de variables está dado por las ecuaciones

$$X_1^* = m_{11}(x_1 - x_{1s}) + m_{12}(x_2 - x_{2s})$$

$$X_2^* = m_{21}(x_1 - x_{1s}) + m_{22}(x_2 - x_{2s})$$

de las cuales nosotros vamos a obtener los valores de las m 's. La transformación que vamos a hacer es ortogonal, es decir, se van a rotar los ejes pero se van a mantener el ángulo recto entre ellos. Arreglando los coeficientes tenemos

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$$

Podemos ver que para que la transformación sea ortogonal la suma de cuadrados de las m 's en cualquier columna o renglón debe ser igual a uno y la suma de productos de las m 's en las columnas o renglones debe ser igual a cero para el arreglo anterior.

Sustituyendo los valores que obtuvimos de B 's en el paso anterior tenemos

$$2.97m_{11} - 2.44m_{12} = 0$$

$$-2.44m_{11} + 2.00m_{12} = 0$$

usando el valor de -5.1227 , y usando el valor de $B22$ de -0.1473 nuestras ecuaciones son

$$-2.00m_{21} - 2.44m_{22} = 0$$

$$-2.44m_{21} + 2.00m_{22} = 0$$

Para obtener los coeficientes de estas ecuaciones sustituimos los valores de $B11$ por B y después $B22$ por B en las ecuaciones que obtuvimos a partir de nuestro polinomio de segundo orden inicial, estas son

$$\begin{vmatrix} -2.15 & -5.1227 & -2.44 \\ -2.44 & & -3.12-B \end{vmatrix}$$

Las ecuaciones que obtuvimos, no nos permiten calcular las m 's explícitamente, pero podemos encontrar números a los que sean proporcionales. En la primera ecuación, si $m_{11} = 1$ entonces $m_{12} = 1.2183$ y en la segunda si $m_{11} = 1$, $m_{12} = 1.2184$. Esto puede ser también una prueba para calcular la exactitud de los valores de las B 's que calculamos. Entonces m_{11} y m_{12} son proporcionales a 1 y 1.21835 respectivamente. Su valor absoluto se calcula del hecho que para que se cumpla la ortogonalidad $m_{11}^2 + m_{12}^2 = 1$. Para estar seguros de esto

$$m_{11} = 1/\text{sqr}(1^2 + 1.218^2) = 0.6345$$

$$m_{12} = 1.218/\text{sqr}(1^2 + 1.218^2) = 0.773$$

De la misma manera, encontramos que $m_{21} = 0.773$ y $m_{22} = 0.634$

Por lo tanto el cambio de variables reduciendo el polinomio a su forma canónica está dado por

$$X1^* = 0.634(x_1 - 3.47) + 0.773(x_2 + 2.775)$$

$$X2^* = 0.773(x_1 - 3.47) + 0.634(x_2 + 2.775)$$

En el eje $X1^*$, $X2^*$ es cero, por lo tanto

$$0.773(x_1 - 3.47) + 0.634(x_2 + 2.775) = 0$$

de la misma manera pero viceversa

$$0.634(x_1 - 3.47) + 0.773(x_2 + 2.775) = 0$$

es para la ecuación del eje $X2^*$. Como ya hemos señalado, estas ecuaciones serían de particular importancia cuando el análisis indicara que tenemos una cresta en la superficie. La ecuación del eje correspondiente a la B pequeña sería la ecuación de la cresta.

4.9 CONSIDERACIONES PRACTICAS

Existen puntos importantes que se deben considerar para usar con precisión los métodos de superficies de respuestas.

Estos puntos son:

1. En ocasiones es impráctica la preselección de los niveles de las variables independientes. A veces estos son puntos poco económicos o que en ocasiones nos llevan a condiciones peligrosas del proceso. Mas aún, el ajuste de una variable puede desajustar otras.
2. La aleatorización también puede ser impráctica pues la selección de los puntos de operación no siempre puede llevarse a cabo en orden aleatorio. La falta de aleatorización nos impedirá eliminar la posibilidad de confundir el efecto de una variable independiente incontrolada con el efecto observado de una variable controlada.
3. Otro tipo de problemas con los métodos de superficie de respuesta son los que se refieren a las técnicas de regresión lineal. Un supuesto de la regresión lineal es que todos los errores que se pueden observar ocurren con la variable dependiente Y, y ninguno ocurre en la variable independiente X. Frecuentemente, existiran errores en la variable X.

Box* demostró que se justifica el análisis estadístico estándar incluso si los niveles experimentales están en error, siempre y cuando la respuesta sea lineal en X. Sin embargo, cada caso se debe considerar por separado ya que la magnitud del error depende de la pendiente de la superficie de respuesta en el punto de diseño. Los diseños factoriales a dos niveles parecen ser bastante robustos en lo que respecta a los errores en las X's.

4. Otro supuesto básico de la técnica de regresión es que las respuestas experimentales no están correlacionadas. Bien se sabe que los datos que se obtienen de un proceso continuo están sujetos a tendencias y a correlaciones en tiempo o series.

Finalmente, se debe mencionar que los diseños descritos en este capítulo son solamente unos cuantos entre los muchos casos de diseños útiles. Existe vasta literatura que trata otros diseños experimentales (ver bibliografía al final de la tesis).

* G. E. P. Box, Technometrics 5, 247, 1963.

CAPITULO 5

DISEÑO DE EXPERIMENTOS CON MEZCLAS

Muchos de los productos que se fabrican son el resultado de la mezcla de dos ó más componentes. Ejemplos de esto son mezclas de gasolinas, pinturas, pastelas, concreto, combustibles para cohetes, fibras textiles, etc. En este capítulo se mostrarán técnicas para resolver el problema de encontrar el nivel de cada componente que nos dé el mejor balance entre las propiedades del producto y el costo de manufactura.

La estrategia comúnmente empleada para experimentar con mezclas consiste en preparar una serie de mezclas de composición establecida hasta encontrar la combinación que nos brinde los mejores resultados. En la práctica, este proceso es frecuentemente subjetivo e ineficiente.

En este capítulo se expondrán algunas de las técnicas más eficientes para el diseño y el análisis de experimentos con mezclas. En lo que respecta al análisis de las mezclas, se estudiará el conjunto de procedimientos que con las respuestas obtenidas se usan para determinar la composición óptima del producto que se está estudiando.

5.1 GENERALIDADES

La interpretación de experimentos con mezclas, al igual que en los experimentos que no involucran mezclas vistos anteriormente, depende de las ideas desarrolladas por Box y Wilson sobre superficies de respuestas. Esta metodología consta de cuatro puntos básicos.

1. Los datos se generan usando un diseño experimental planeado con anterioridad.
2. Se ajusta un modelo matemático (generalmente polinomial) a los datos mediante técnicas estadísticas de ajuste de curvas.
3. Se analiza la superficie de respuestas para determinar las regiones donde probablemente se puedan obtener las mejores respuestas.
4. Se hacen mezclas adicionales en algunas regiones seleccionadas para verificar experimentalmente las predicciones del modelo.

Para elaborar los diseños de experimentos con mezclas vamos a hacer notar las restricciones a las cuales están sujetos, que hacen a los experimentos con mezclas diferentes a los experimentos que no involucran mezclas. Estas son:

- a) La respuesta obtenida de una mezcla depende de la proporción de los componentes en ella y no de la cantidad total de la mezcla.
- b) La proporción de cualquier componente en nuestra mezcla debe ser entre 0 y 1.
- c) La suma de las proporciones de cada componente debe ser igual a 1.

$$x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1 \qquad 0 < x_i < 1$$

Mediante la relación anterior, la composición de un componente puede estimarse a partir de los $q-1$ componentes, o sea:

$$x_q = 1 - (x_1 + x_2 + \dots + x_{(q-1)})$$

Estas restricciones son importantes para diseñar los experimentos de optimización con mezclas, ya que el método factorial y los diseños de superficie de respuestas no se pueden usar para estudiar un sistema con tantas restricciones. Esto quiere decir que las variable-componentes no son independientes unas de otras.

Algunas características adicionales que los componentes de las mezclas pueden tener son:

- Componentes inertes - A veces se utilizan componentes inertes como vehículo pero no afectan la propiedad que se está midiendo.

- Componentes en bajas concentraciones - En algunos sistemas de mezclas, uno de los componentes se puede encontrar en menor proporción que el resto (<=5%). El efecto de la presencia de dichos componentes puede estudiarse con diseños factoriales clásicos o diseños de superficie de respuestas. En estos diseños, los componentes se varían en forma independiente y el nivel del componente mayor se ajusta para alcanzar la suma de composiciones igual a uno. En el caso de estudiar formulaciones en las cuales dos o más compuestos ocupan las mayores proporciones y algunos están en bajas concentraciones, se deben usar los diseños de mezclas para estudiar las respuestas de éstos.

- Restricciones en composición - En experimentos con mezclas, el valor de los componentes puede estar entre 0 y 1, pero hay ocasiones en que nuestro espacio factorial está restringido, debido a características particulares de la mezcla que se estudia o por algún motivo económico. En estos casos no es posible estudiar todo el rango para todos los componentes. Dichas formulaciones están condicionadas a un límite inferior a_i y un límite superior b_i .

$$0 \leq a_i \leq x_i \leq b_i \leq 1$$

El diseño experimental dependerá de la naturaleza de la restricción del componente, como se verá posteriormente.

5.1.1 Modelos de Mezclas

Los modelos empíricos usados en mezclas, son semejantes a los usados para representar superficies de respuestas en los experimentos que no involucran mezclas, vistos en el capítulo anterior. Estos modelos empíricos usados en mezclas, difieren en que carecen del término B_0 , (esto se deducirá a continuación). Igual que lo hacíamos antes, de forma a priori se supone que la respuesta o propiedad de interés (n) es una función de las variables independientes (x_i).

$$n = f(x_1, x_2, \dots, x_q)$$

Recordemos que, cuando experimentamos nunca se observa n , en cambio, se observa la respuesta y que es n más algún error aleatorio e :

$$y = n + e$$

Como también se vio en el capítulo anterior, por medio de la experiencia se ha determinado que n se puede aproximar bastante bien dentro del rango experimental mediante un polinomio derivado de una serie de Taylor de segundo orden. Para dos variables, x_1 y x_2 , el modelo sería:

$$n - E(y) = B_0 + B_1x_1 + B_2x_2 + B_{12}x_1x_2 + B_{11}x_1^2 + B_{22}x_2^2$$

Recordemos, que en problemas de mezclas, la suma de proporciones x_i de los componentes debe ser 1, por lo que para el caso de dos componentes:

$$x_1^2 = x_1x_1 = x_1(1 - x_2) = x_1 - x_1x_2$$

$$x_2^2 = x_2x_2 = x_2(1 - x_1) = x_2 - x_1x_2$$

y así:

$$\begin{aligned} E(y) &= B_0(x_1 + x_2) + B_1x_1 + B_2x_2 + B_{12}x_1x_2 + B_{11}(x_1 - x_1x_2) \\ &\quad + B_{22}(x_2 - x_1x_2) \\ &= B_1x_1 + B_2x_2 + B_{12}x_1x_2 \end{aligned}$$

donde

$$B_1 = B_0 + B_1 + B_1$$

$$B_2 = B_0 + B_2 + B_2$$

$$B_{12} = B_{12} - B_{11} - B_{22}$$

Como se dedujo, el modelo de mezclas no tiene el término constante (B_0). En general Scheffé sugirió la siguiente forma canónica (omitendo los asteriscos) para los modelos de mezclas:

Lineal

$$E(y) = \sum_{i=1}^q B_i x_i$$

Cuadrático

$$E(y) = \sum_{i=1}^q B_i x_i + \sum_{i<j}^q B_{ij} x_i x_j$$

Cúbico especial

$$E(y) = \sum_{i=1}^q B_i x_i + \sum_{1<i<j}^q B_{ij} x_i x_j + \sum_{1<i<j<k}^q B_{ijk} x_i x_j x_k$$

Cúbico completo

$$E(y) = \sum_{i=1}^q B_i x_i + \sum_{1<i<j}^q B_{ij} x_i x_j + \sum_{1<i<j<k}^q B_{ijx} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{1<i<j<k}^q B_{ijk} x_i x_j x_k$$

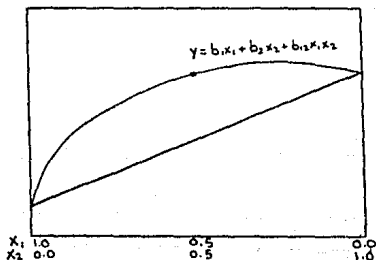
La experiencia ha demostrado que los modelos lineales y cuadráticos son los más útiles; en algunas ocasiones el cúbico especial se necesita para obtener una representación adecuada de los datos. El cúbico completo y los modelos de orden más alto se usan raramente.

5.1.2 Interpretación de los Coeficientes

Cuando se analizan experimentos con mezclas, es útil entender lo que cada coeficiente del modelo representa.

Los coeficientes lineales (B_i) son el promedio de las respuestas de los componentes puros ($x_i = 1, x_j = 0, i \neq j$). Si solamente se usan los coeficientes lineales, los componentes actúan de forma aditiva, es decir, la superficie de respuestas es un plano. Los términos cúbicos y de orden más alto describen las desviaciones de la superficie de respuestas de la aproximación de primer y de segundo grado. Una interpretación gráfica del modelo cuadrático de dos componentes ($q = 2$) se muestra en la figura 5.1a.

FIG. 5.1a
INTERPRETACION GRAFICA DEL MODELO CUADRATICO
DE DOS COMPONENTES



Es común el comparar los coeficientes entre ellos mismos para determinar cual es el más importante. La importancia de un coeficiente depende en gran parte del orden del término al cual está asociado. La tabla siguiente ilustra este concepto.

| <u>TERMINO</u> | <u>MAXIMO VALOR DE LA VARIABLE</u> | <u>MAXIMO VALOR ASOCIADO</u> |
|----------------|------------------------------------|------------------------------|
| bixi | xi = 1 | 1bi |
| bijxixj | xixj = (1/2)(1/2) = 1/4 | 1/4bij |
| bijkxixjxk | xixjxk = (1/3)(1/3)(1/3) = 1/27 | 1/27bijk |

Por lo anteriormente visto, valores grandes de coeficientes cuadráticos y cúbicos no implican necesariamente grandes efectos. Por ejemplo, un coeficiente cúbico tendría que ser 27/4 veces más grande que un coeficiente cuadrático para describir un efecto de igual magnitud.

Nótese que los términos cuadráticos y cúbicos para el caso de mezclas (xixj y xixjxk) no se pueden interpretar como interacciones sino como relaciones no lineales de mezclas. Esto es un resultado de la restricción

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1,$$

lo cual hace imposible variar los componentes de manera independiente entre ellos. Cuando la mezcla no es lineal y Bij es positivo el efecto se llama sinergismo y cuando es negativo, antagonismo.

5.1.3 Relación entre el Espacio Factorial sin Restricciones y el Restringido

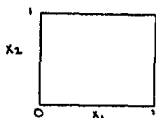
Cuando hablamos de diseño de experimentos con mezclas, es útil comparar al espacio factorial sin restricciones con el que tiene restricciones. Con la figura 5.1.3 demostraremos como los diseños factoriales a dos niveles son inútiles para obtener los coeficientes de un espacio factorial restringido (mezclas). Esto se demuestra por medio del espacio factorial de dos y tres variables para variables independientes y de mezclas. Para el ejemplo de dos variables, los cuatro puntos extremos (0,0), (1,0), (1,1) en un arreglo factorial 2² nos permitirían calcular los coeficientes del modelo:

$$E(y) = B_0 + B_1x_1 + B_2x_2 + B_{12}x_1x_2.$$

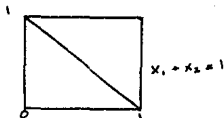
FIG. 5.1b
 ESPACIO FACTORIAL

Das variables

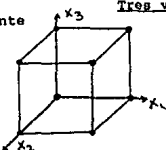
Independiente



Mezcla

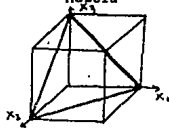


Independiente



Tres variables

Mezcla



Sin embargo, en el espacio factorial donde $x_1 + x_2 = 1$, solamente se permiten dos puntos extremos $(1,0)$ y $(0,1)$. Con estos dos puntos se podría construir un modelo de la forma:

$$E(y) = B_1x_1 + B_2x_2.$$

En el caso de tres variables, con los ocho puntos en un diseño factorial 2^3 se construiría el modelo:

$$E(y) = B_0 + B_1x_1 + B_2x_2 + B_3x_3 + B_{12}x_1x_2 + B_{13}x_1x_3 + B_{23}x_2x_3 + B_{123}x_1x_2x_3$$

Cuando se introduce la restricción $x_1 + x_2 + x_3 = 1$, solamente se permiten tres puntos extremos $(1,0,0)$, $(0,1,0)$ y $(0,0,1)$. Estos tres puntos solamente nos permiten calcular los coeficientes del modelo lineal;

$$E(y) = B_1x_1 + B_2x_2 + B_3x_3$$

De la figura 5.1b, se concluye que los diseños factoriales no son adecuados para estudiar de una manera apropiada las respuestas de un sistema de mezclas.

En experimentación con mezclas, es importante que el diseño experimental provea:

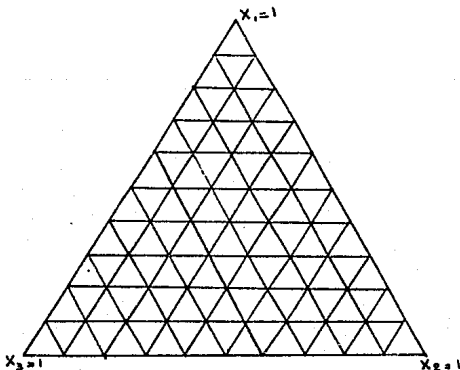
1. Buenos estimados (con pequeña varianza) de los coeficientes (B's) en el modelo postulado.
2. Un estimado adecuado del error experimental.
3. Una medida de la bondad de ajuste del modelo.
4. Los puntos experimentales (mezclas) deben estar uniformemente distribuidos en toda la región experimental.

5.2 DISEÑOS SIMPLEX

NOTA: Antes de empezar a describir los diseños de mezclas, daremos con el diagrama 5.2 un breve recordatorio acerca de la manera de interpretar y construir un diagrama triangular que representará las proporciones de tres componentes.

1. Cada vértice representa al componente puro.
2. A lo largo de cada uno de los lados, se encuentran representadas las proporciones donde está ausente el componente que no forma parte de la línea.
3. En cualquier punto que no forma parte del perímetro del triángulo, se encuentran involucrados los tres componentes en la mezcla.

FIG. 5.2
DIAGRAMA DE MEZCLAS PARA TRES COMPONENTES



Los diseños de experimentos Simplex para mezclas fueron diseñado por Scheffé. Estos métodos tienen las siguientes características:

- I. Permiten calcular las propiedades de un sistema con un número limitado de observaciones.
- II. Son muy útiles para cualquier sistema multicomponente donde se relacionan las propiedades intensivas de alguna mezcla con su composición, y donde el comportamiento errático no es tan errático como para no poder representarse mediante un polinomio de orden bajo.

Los diseños Simplex para mezclas cumplen ampliamente las propiedades mencionadas en la sección anterior. Su estructura depende mucho de la forma del modelo de respuesta. Por lo tanto, el espacio factorial es un simplex regular - para tres componentes, un triángulo; para cuatro un tetraedro. El espacio factorial se explora mediante puntos que forman una red ordenada.

5.2.1 Método Lattice o de Arreglo de Red

El método de arreglo de red es aplicable a propiedades intensivas como densidad, que no depende de la cantidad de material.

El método de red es una herramienta útil para investigar las propiedades de mezclas dentro de rangos amplios de composición y es de particular importancia cuando existen varias propiedades de interés para medir.

El método tiene dos características principales:

1. Las propiedades o respuestas se miden en los puntos de la red de composición.
2. Las ecuaciones polinomiales que tienen una correspondencia especial a los puntos de red se usan para representar la respuesta.

Localización de los Puntos de Red

Si nos interesa la respuesta dentro de un rango amplio de composiciones, una selección posible de puntos de composición es la que nos da una distribución uniforme de los puntos de todas las combinaciones posibles para las mezclas de los componentes. Esta distribución sería una red cuadrática, cúbica o cuártica, dependiendo del número de puntos. Además de estas redes, se elabora una red modificada añadiendo puntos centrales a la cara o caras bidimensionales de la red cuadrática. Esta red modificada se llama cúbica especial.

El número de puntos k , que requiere cualquier red excepto la cúbica especial que requiere de más puntos, se puede calcular mediante la siguiente fórmula:

$$k = \frac{(m + q - 1)!}{(q - 1)! m!}$$

donde

- q es el número de componentes a considerar
- m es un entero que está relacionado al espaciamiento de los puntos, y por lo tanto al número de mezclas o corridas.

Las proporciones de cualquier componente son

$$0, 1/m, 2/m, \dots, 1$$

lo cual da un total de $(m + 1)$ puntos igualmente espaciados. Estos puntos son todas las posibles mezclas con esas proporciones. Para la red cuadrática las proporciones son 0, $1/2$ y 1, por lo que $m = 2$. De la misma manera, $m = 3$ para la red cúbica y $m = 4$ para la red cuártica.

Para la red cúbica especial $m = 2$ pero se añaden todas las posibles mezclas con $1/3, 1/3, 1/3$. El número de puntos para la red cúbica especial es:

$$k = \frac{q(q+1)}{2} + \frac{q(q-1)(q-2)}{6}$$

En la siguiente tabla se resumen el número de puntos y el de coeficientes para un arreglo (q, m) .

| <u>MODELOS</u> | | | | |
|----------------|------------|--------|-----------------|----------|
| | Cuadrático | Cúbico | Cúbico Especial | Cuártico |
| q/m | 2 | 3 | 3 | 4 |
| 3 | 5 | 7 | 10 | 15 |
| 4 | 10 | 14 | 20 | 35 |
| 5 | 15 | 25 | 35 | 70 |
| 6 | 21 | 41 | 56 | 128 |
| 8 | 36 | 92 | 120 | 330 |
| 10 | 55 | 172 | 220 | 715 |

Nomenclatura

Sheffé (1958) definió la siguiente nomenclatura:

Los valores de respuestas obtenidas se denotarán con la letra "y" y los subíndices indicarán la composición de la mezcla efectuada.

1. El número de subíndices es igual al denominador en las fracciones usadas para las mezclas. (Ejemplo: dos subíndices y_{ij} corresponde a una fracción de un medio).
2. El número distinto de subíndices indica cuántos componentes están presentes en la mezcla con valores diferentes a cero.
3. El número de veces de una letra o número indica la proporción relativa asignada a un componente dentro de la mezcla.

Un ejemplo de los valores de y mencionados anteriormente, se representa para el caso de un diseño Simplex con tres componentes en la siguiente tabla. Los primeros siete puntos representados en ese diseño se usan para estimar los coeficientes de un modelo cúbico especial. Los restantes tres puntos son usados para verificar la exactitud de la predicción del modelo.

DISEÑO SIMPLEX DE TRES COMPONENTES

| Mezclas | Componentes | | | Respuestas |
|---------|-------------|-----|-----|------------|
| | X1 | X2 | X3 | Y |
| 1 | 1 | 0 | 0 | Y1 |
| 2 | 0 | 1 | 0 | Y2 |
| 3 | 0 | 0 | 1 | Y3 |
| 4 | 1/2 | 1/2 | 0 | Y12 |
| 5 | 1/2 | 0 | 1/2 | Y13 |
| 6 | 0 | 1/2 | 1/2 | Y23 |
| 7 | 1/3 | 1/3 | 1/3 | Y123 |
| 8* | 2/3 | 1/6 | 1/6 | Y1223 |
| 9* | 1/6 | 2/3 | 1/6 | Y1223 |
| 10* | 1/6 | 1/6 | 2/3 | Y1223 |

* puntos de prueba

5.2.2 Resolución de Modelos

Tenemos dos métodos de resolución:

A. Método de Resolución Directa

Si N = número de experiencias efectuadas

$$\begin{aligned}y_1 &= b_{1x11} + b_{2x12} + b_{3x12} + e_1 \\y_2 &= b_{1x21} + b_{2x22} + b_{3x23} + e_2 \\&\vdots \\&\vdots \\y_n &= b_{1xn1} + b_{2xn2} + b_{3xn3} + e_n\end{aligned}$$

donde

y_i = valor de la respuesta experimental en la i ésima experiencia
 e_i = valor del error experimental

El conjunto de ecuaciones anteriores se puede representar en la forma matricial siguiente:

$$Y = XB + e$$

Si la matriz X se puede invertir (cuadrada y no singular), el cálculo de los coeficientes se resume a

$$\bar{B} = (X^{-1})Y$$

donde \bar{B} es el vector de coeficientes b estimados.

B. Método de mínimos cuadrados

Cuando la matriz X no se puede invertir ($N > k$) se estima los coeficientes por el método de mínimos cuadrados.

$$\bar{B} = (X'X)^{-1} X'Y$$

donde X' = matriz transpuesta.

Para el caso de tres componentes, a continuación se encuentran resumidas las fórmulas para calcularlos.

$$\begin{aligned}B_1 &= y_1 \\B_2 &= y_2 \\B_3 &= y_3 \\B_{12} &= 4y_{12} - 2(y_1+y_2) \\B_{13} &= 4y_{13} - 2(y_1+y_3) \\B_{23} &= 4y_{23} - 2(y_2+y_3) \\b_{123} &= 27y_{123} - 12(y_1+y_{13}+y_{23}) + 3(y_1-y_2+y_3)\end{aligned}$$

Y para demostrar la validez del modelo, se compara el valor que se obtenga con ésta con la respuesta obtenida en el punto dado.

5.2.3 Bondad de Ajuste

El término de bondad de ajuste indica qué tanto se parecen los resultados obtenidos mediante el modelo construido y los que la experimentación nos da.

La bondad de ajuste se determina comparando la variación entre la respuesta observada y la respuesta que el modelo predice, con el error (varianza). La varianza de la bondad de ajuste está dada por:

$$S(LF)^2 = 1/r \sum_{i=1}^r (y_{oi} - y_i)^2$$

donde y_{oi} y y_i son la respuesta observada y predicha en el punto i , y r es el número de puntos.

La varianza error es la variación entre las observaciones replicadas hechas en cada una de las corridas y está dada por:

$$S(\text{error})^2 = 1/(N-K) \sum_{i=1}^k (n_i - 1) S_i^2$$

donde

k es el número de corridas en el diseño

N es el número total de observaciones

S_i^2 es la varianza de las n_i observaciones replicadas en la corrida i .

La varianza para la bondad de ajuste se compara con la varianza error (grados de libertad, $v = N - k$) usando el cociente F

$$F = S(LF)^2 / S(\text{error})^2.$$

Suponemos que el modelo nos da una descripción adecuada de la superficie de respuesta si el cociente F no excede el valor crítico de F , tabulado para r con v grados de libertad, al nivel de confianza deseado.

5.3 COMENTARIOS GENERALES

Los Diseños estadísticos de Mezclas son particularmente útiles para el Ingeniero Químico en las áreas de Investigación y Desarrollo, principalmente. Estos modelos de mezclas son útiles y efectivos cuando el experimentador no conoce todos los fundamentos teóricos de la mezcla en cuestión. Es por esto que existe la necesidad de desarrollar métodos alternos, que son básicamente los siguientes:

- 1) Se pueden simplificar supuestos en donde se aplique la teoría disponible para hacer los cálculos e interpretaciones. Desgraciadamente, en esos casos se necesita hacer tantas aproximaciones que la relación con la teoría original se empieza a volver pobre.
- 2) Se puede hacer una interpretación empírica del comportamiento macroscópico del sistema, lo cual genera ecuaciones empíricas que correlacionaran satisfactoriamente con los datos experimentales.

En varios artículos de revistas (Chemtec, Journal of Food and Science) se pudo apreciar la validez y utilidad de las interpretaciones empíricas elaboradas a partir de datos experimentales aplicadas en 1) mezclas de gasolinas, 2) mezclas de insecticidas, 3) productos comestibles, 4) formulaciones farmacéuticas, etc.

Un artículo de revista (1) describe la formulación de un ponche de frutas hecho a base de jugo de sandía, piña, naranja y uva. Este artículo es de particular interés ya que prueba que estos métodos son útiles también cuando la respuesta es cualitativa o semicuantitativa. En este caso la aceptación del ponche la midió un panel a través de un estudio de mercado en pequeña escala. El ponche se calificó por medio de una escala hedónica de cuatro puntos.

Propiedades como el punto de fusión para un sistema ternario se describe en un artículo publicado por la Universidad de Melbourne, Australia (2). En este artículo se experimentó con bifenil-bibencil-naftaleno y se construyó un modelo de segundo orden que dio un ajuste perfecto.

Cabe hacer notar que a pesar de que los métodos estadísticos ayudan a generar datos y a tamizar variables, no son de ninguna manera sustitutos del conocimiento de la Ingeniería Química o del sistema con el cual se trabaja. En todos estos ejemplos se creaba una ecuación empírica solamente después de haber identificado los componentes de la formulación para lo cual es necesario un conocimiento del sistema.

El objetivo principal de los métodos estadísticos es predecir el comportamiento de una población, dentro del espacio experimental, basado en las observaciones de muestras. Una ventaja muy grande de estos métodos es que permite que este presentes dentro del programa de desarrollo la planeación. A pesar de que la intuición es un elemento importante en las etapas iniciales del desarrollo, en las partes subsecuentes puede ser incluso perjudicial. Quizá nada causa más daño en el desarrollo de formulaciones que el mezclar ingredientes sin planear para obtener la mezcla deseada, que en ocasiones ni siquiera se logra obtener. Un plan experimental pobre, que desgraciadamente es muy común, es el ya mencionado Una-variable-a-la-vez. Esto se puede evitar implementando un diseño experimental estadístico que tiene, además, la habilidad de generar un mapa de superficie de respuesta. Otra ventaja es que se pueden estudiar mezclas complejas de muchos componentes.

(1) Formulation and Sensory Evaluation of a Fruit Punch containing Watermelon Juice, S. S. Huor, E. M. Ahmed, P. V. Rao, Journal of Food and Science, Vol. 45.

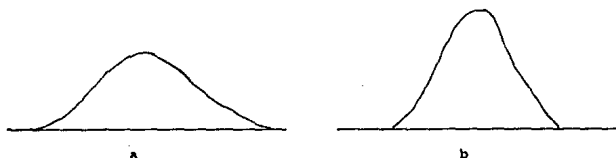
(2) Models for the Response of a Mixture, N. G. Becker, May 1967

"CONTROL DE CALIDAD"6.1 INTRODUCCION

Al tratar de definir conceptualmente el significado de la palabra calidad, lo primero que se presenta en la mente es costo elevado. Sin embargo, no es así; el hecho de que una empresa trabaje con calidad traerá como consecuencia una mayor eficiencia en sus operaciones, productividad y por lo tanto, utilidades a favor.

Cuando un consumidor adquiere algún producto determinado, él espera algo a cambio; la mayoría de las personas se guían por la historia que tiene dicho producto y decide pagar una cantidad determinada de dinero siempre y cuando se le garantice lo que él está esperando por su compra.

Al suponer dos casos distintos de marcas diferentes, tenemos lo siguiente:



En ambos casos se presenta la distribución de una característica determinada de un producto; es claro que la variabilidad es muy amplia en el caso "a" y que los consumidores adquirirán el producto en un rango muy extenso de calidad. En el caso "b" la variabilidad es muy pequeña y la mayoría de la producción está cercana a la media, por lo que el consumidor estará seguro de adquirir un bien de óptima calidad. En pocas palabras, ambas marcas pueden dar una buena calidad, pero sólo la segunda opción garantizará que es la mejor calidad y que además es constante.

Cuando una empresa ofrece el mejor producto del mercado de una manera constante (caso b), la única opción que tiene es la de trabajar dentro de un margen que le permita producir con alta calidad y bajo costo; de lo contrario, para poder tener esa mínima variabilidad de sus productos, tendrá que efectuar muestreos exhaustivos y en los cuáles una gran parte de la producción estará rechazada por no cumplir con lo requerido.

Si, por otro lado, una empresa decide trabajar en el caso "a", lo más probable es que pierda participación en el mercado, ya que los consumidores cada vez son más exigentes en cuanto a calidad y precio se refiere, situación que su competencia no dudará en aprovechar.

El trabajar en una empresa con calidad, no significa que únicamente tenga que realizar muestreos de su producción y permitir la salida a la venta de los productos que cumplen con los estándares establecidos. Trabajar con calidad total significa que todos los miembros que laboran en

la empresa, trabajen dentro de un "círculo de calidad" continuo que permita a todos dar y recibir, dentro de la misma compañía, lo que se requiere para poder ser eficientes al producir.

Esta filosofía involucra varios temas:

- El trabajo es un proceso en el cual todos son clientes y proveedores unos de otros; es decir, no sólo entre clientes-fabricantes existe la relación cliente-proveedor, sino que dentro de la misma compañía fabricante, todos los departamentos son clientes y proveedores unos de otros.

- Hacer las cosas debidas, gracias a la existencia de una alineación entre las necesidades del cliente y las capacidades del proveedor. Todo lo que se haga, es en función de dicha alineación.

- Hacer las cosas bien (las debidas, obviamente), gracias a la recopilación y análisis adecuados de la información.

- Mejora continua, ya que la alineación y ejecución se combinan para mejorar el sistema de trabajo de la compañía y por lo tanto se cumplen día a día los tres párrafos anteriores.

La alineación cliente-proveedor merece de una mención especial, ya que es la base para que esta filosofía pueda ser aplicada.

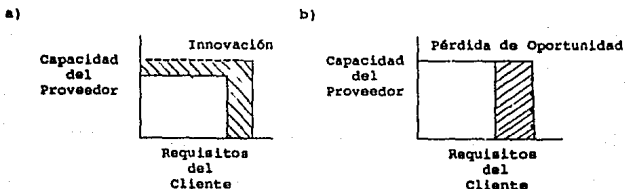
Esta alineación puede analizarse gráficamente en las tres figuras 6.1.1.

En el inciso a) el caso presentado se refiere a la situación en la cual los requisitos del cliente son mayores que la capacidad del proveedor, por lo que se crea una zona de "reprocesamiento o innovación". Aquí es necesario que los proveedores aumenten sus capacidades para satisfacer los requisitos del cliente, dando como resultado la eliminación o reducción del reprocesamiento y el aliciente a la innovación.

En el inciso b) se presenta el caso contrario, es decir, las capacidades del proveedor exceden los requisitos del cliente, lo cual conduce a una zona de "pérdida de oportunidad" por parte del cliente. Aquí es necesario hacer un estudio que analice cuál es la situación deseada a futuro, mantener la calidad actual (lo cual en un futuro sí sea lo exigido por clientes cada vez más exigentes) o aprovechar los recursos disponibles en otras áreas, disminuyendo la calidad hasta lo que el cliente requiere.

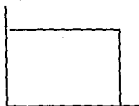
El inciso c) presenta una clase de alineación que ocurre durante la fase de ejecución para mejorar la calidad. En este caso, la alineación asegura que se proporcione retroalimentación de/y hacia ambas partes sobre cómo se está avanzando en el proceso de trabajo y de que se continúe trabajando juntos para lograr mejoras continuas.

Fig. 6.1.1



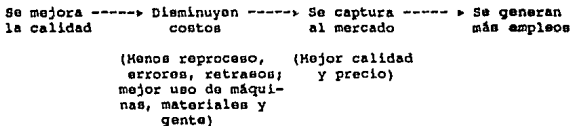
c)

Capacidad
del
Proveedor



Requisitos
del
Cliente

Deming, el creador de las ideas sobre calidad total en Japón, resume en una "reacción en cadena", todos los beneficios al trabajar con esta filosofía:



6.2 METODOS DE CONTROL DE CALIDAD EN LINEA

6.2.1 Recolección de Datos

En una fábrica puede recolectarse una gran cantidad de datos, sin embargo, sólo hay que tener registro de aquéllos que servirán para algo que será utilizado en un futuro (comprensión de la situación actual, nuevo método de trabajo o producto, control de calidad, etc.).

La información es obtenida gracias al uso de métodos estadísticos de tal manera que al recolectar y organizar los datos, permita un fácil y rápido análisis posterior.

Los datos son necesarios para determinar el grado de dispersión y promedio del proceso estudiado. Si después de diez muestras consecutivas se encuentran valores idénticos (por ejemplo de peso) es prácticamente seguro que el instrumento de medición tenga alguna falla, ya que es imposible que no se tenga una variabilidad (por muy pequeña que ésta sea) en cualquier situación real.

En el capítulo 2 se presentaron dos herramientas para trabajar en las etapas de análisis de resultados o inicio de un experimento: diagrama de hueso de pescado (o de causa-efecto) y diagrama de Pareto (ordenación decreciente de influencia de causas). A continuación se presentan otras herramientas de gran utilidad para el control de la calidad.

6.2.1.1 Histogramas

En base a las especificaciones inferior y superior del producto o material en cuestión (las cuales se fijaron si hubo una alineación cliente-proveedor), son graficados los datos obtenidos; en la siguiente tabla se presentan 40 datos que representan el diámetro en milímetros de tornillos producidos en una hora, siendo las especificaciones de 5.7 a 6.7:

| | | | | | | | | | | | |
|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| | 6.0 | 6.6 | 6.3 | 6.3 | 6.5 | 6.5 | 6.1 | 6.3 | 6.4 | 6.3 | |
| | 6.2 | 6.3 | 6.2 | 6.5 | 6.6 | 6.4 | 6.3 | 6.5 | 6.4 | 6.2 | |
| | 6.4 | 6.4 | 6.1 | 6.3 | 6.0 | 6.7 | 6.4 | 6.2 | 6.4 | 6.5 | |
| | 6.3 | 6.4 | 6.2 | 6.6 | 6.1 | 6.7 | 6.2 | 6.3 | 5.9 | 6.3 | |
| | 6.1 | 6.6 | 6.5 | 6.3 | 6.4 | 6.5 | 6.2 | 6.2 | 6.4 | 6.6 | |
| yL | 6.0 | 6.3 | 6.1 | 6.3 | 6.0 | 6.4 | 6.1 | 6.2 | 5.9 | 6.2 | 5.9 |
| yS | 6.4 | 6.6 | 6.5 | 6.6 | 6.6 | 6.7 | 6.4 | 6.5 | 6.4 | 6.6 | 6.7 |

Para construir el histograma, se debe tomar en cuenta los siguientes puntos:

- * $N = 50$ (número de datos totales).
- * De cada subgrupo, señalar el dato más alto y el más bajo (yS y yL, respectivamente).
- * De los datos yS y yL, obtener el dato más alto y el más bajo, respectivamente.
- * Con ayuda de la tabla 6.2.1 obtener el número de divisiones para el histograma y el intervalo entre éstas (h). Para este caso, $k = 5$, por lo que:

$$h = \frac{yS - yL}{k} = \frac{0.8}{8} = 0.1$$

(en este caso el valor de "h" se obtuvo en base al número de datos registrados, pero también es correcto tomando en cuenta los límites superior e inferior de especificaciones, haciendo éstos yS y yL, respectivamente).

- * Los datos se colocan en base a su frecuencia.

TABLA 6.2.1

TABLA DE DIVISIONES DE HISTOGRAMAS

| N = Número de Datos | k = Número de divisiones |
|---------------------|--------------------------|
| 50 ó menos | 5 - 8 |
| 50 - 100 | 6 - 10 |
| 100 - 250 | 7 - 12 |
| 250 o más | 10 - 20 |

HISTOGRAMA

Límite de Especificación Superior

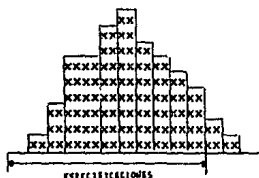
| | |
|-----|-----------------------|
| 6.7 | X X |
| 6.6 | X X X X X |
| 6.5 | X X X X X X |
| 6.4 | X X X X X X X X X |
| 6.3 | X X X X X X X X X X X |
| 6.2 | X X X X X X X X |
| 6.1 | X X X X |
| 6.0 | X X |
| 5.9 | X |
| 5.8 | |
| 5.7 | |

Límite de Especificación Inferior

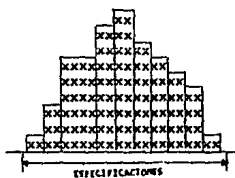
Una vez obtenido el histograma, es posible obtener de él un análisis sobre el centrado de la distribución y para observar si se están cumpliendo las especificaciones, o bien, si es necesario hacer un estudio sobre la capacidad del proceso para determinar si con las condiciones actuales es factible cumplir dichas especificaciones o si es necesario hacer modificaciones para lograrlo.

A continuación se presentan algunos casos que relacionan las especificaciones con la capacidad del proceso. En las figuras a) y b) la capacidad del proceso cumple con las especificaciones pero la media debe ser cambiada; en la figura c), la capacidad del proceso es más amplia que las especificaciones y en la figura d) la capacidad del proceso cumple con las especificaciones.

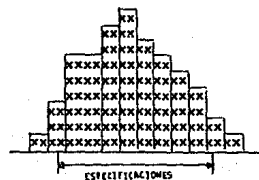
a)



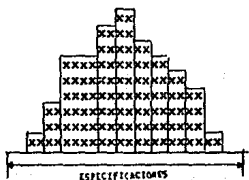
b)



c)



d)



Especificaciones: Son los requerimientos de calidad que debe tener un producto o material. Sus límites inferior y superior se denominan con LEI y LES, respectivamente. Para calcular que porcentaje de la producción está fuera de dichas especificaciones:

$$P_i = \frac{LEI - \bar{y}}{\sigma} \quad P_s = \frac{LES - \bar{y}}{\sigma} \quad \text{DISTRIBUCION NORMAL}$$

y estos valores se buscan en la tabla correspondiente del apéndice I, obteniéndose los porcentajes fuera de los límites inferior y superior. La suma de ambos proporciona el porcentaje total fuera de especificaciones.

Capacidad del Proceso: Es la habilidad inherente del sistema de repetirse por sí mismo. Esta definición no es difícil de comprender, pero la forma de medirlo tiene antecedentes matemáticos, utilizando las tablas de distribución normal como herramienta:

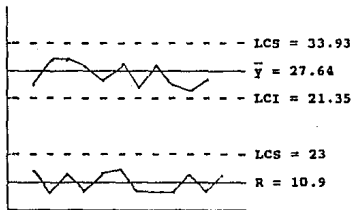
- 1) Obtener " \bar{y} " y σ del sistema bajo estudio.
- 2) Obtener los límites inferior y superior de la capacidad del proceso ($LCPI = \bar{y} + 3\sigma$ y $LCPS = \bar{y} - 3\sigma$, respectivamente).
- 3) Comparar dichos límites con los de las especificaciones.

6.2.1.2 Gráficas de Control

Un histograma proporciona la historia pasada del proceso y se utiliza principalmente para tomar acciones después del análisis del mismo; se puede decir que un histograma sirve para hacer correcciones o acciones a futuro, pero en el momento de producir, los operadores deben saber cómo y cuando tomar acciones correctivas-preventivas para evitar defectos; con este propósito se utilizan las gráficas de control estadístico.

Control Estadístico: Se dice que un proceso está bajo control estadístico cuando su patrón de variabilidad es constante. El hecho de tener dicho control, permitirá tener un proceso predecible y con una capacidad definible.

Las gráficas de control son la historia del proceso al paso del tiempo, es decir, los datos se van colocando conforme se van obteniendo, por ejemplo:



En la gráfica anterior, se pueden percibir tres líneas de control: el límite superior de control (LCS), el límite inferior de control (LCI) y la línea central (LC), de las que posteriormente se explicará su obtención.

Existen tres categorías de datos, para los cuales se utiliza una determinada gráfica de control. El primer grupo de gráficas son las $\bar{y} - R$, (medio-rango), utilizadas para datos de tipo indiscreto (longitud, peso, energía consumida, etc.); los otros grupos de gráficas son las Pn - P (número de defectos - fracción defectuosa) y las U - Uc (defectos por área contable - fracción de defectos por área contable).

Las gráficas $\bar{y} - R$ son las más utilizadas. La gráfica \bar{y} ayuda a determinar si la media del proceso es estable, mientras que la gráfica R ayuda a determinar si el desarrollo del proceso es estable.

Gracias a los histogramas realizados previamente, los límites de control del proceso son conocidos y dentro de ellos se grafican los resultados en el momento mismo de su ocurrencia. Para obtener dichos límites sólo es necesario tener un mínimo de cien datos en total y clasificados en cinco subgrupos por lo menos, que pueden ser obtenidos bajo las mismas condiciones técnicas como tiempo, fecha, lote, turno, etc. El número de muestras de cada subgrupo determina el tamaño del mismo y se representa por n, mientras que el número de subgrupos se representa por k. En la siguiente tabla se presentan unos datos como ejemplo:

| Número Subgrupo | HORA | | | | | \bar{y} | \bar{R} |
|-----------------|------|-------|-------|-------|-------|-----------|-----------|
| | 6:00 | 10:00 | 14:00 | 18:00 | 20:00 | | |
| 1 | 14.0 | 12.6 | 13.2 | 13.1 | 12.1 | 13.0 | 1.9 |
| 2 | 13.2 | 13.3 | 12.7 | 13.4 | 12.1 | 12.94 | 1.3 |
| 3 | 13.5 | 12.8 | 13.0 | 12.8 | 12.4 | 12.90 | 1.1 |
| 4 | 13.9 | 12.4 | 13.3 | 13.1 | 13.2 | 13.18 | 1.5 |
| 5 | 13.0 | 13.0 | 12.1 | 12.2 | 13.3 | 12.72 | 1.2 |
| 6 | 13.7 | 12.0 | 12.5 | 12.4 | 12.4 | 12.60 | 1.7 |
| 7 | 13.9 | 12.1 | 12.7 | 13.4 | 13.0 | 13.02 | 1.8 |
| 8 | 13.4 | 13.6 | 13.0 | 12.4 | 13.5 | 13.18 | 1.2 |
| 9 | 14.4 | 12.4 | 12.2 | 12.4 | 12.5 | 12.78 | 2.2 |
| 10 | 13.3 | 12.4 | 12.6 | 12.9 | 12.8 | 12.80 | 0.9 |
| 11 | 13.3 | 12.8 | 13.0 | 13.0 | 13.1 | 13.04 | 0.5 |
| 12 | 13.6 | 12.5 | 13.3 | 13.5 | 12.8 | 13.14 | 1.1 |
| 13 | 13.4 | 13.3 | 12.0 | 13.0 | 13.1 | 12.96 | 1.4 |
| 14 | 13.9 | 13.1 | 13.5 | 12.6 | 12.8 | 13.18 | 1.3 |
| 15 | 14.2 | 12.7 | 12.9 | 12.9 | 12.5 | 13.04 | 1.7 |
| 16 | 13.6 | 12.6 | 12.4 | 12.5 | 12.2 | 12.66 | 1.4 |
| 17 | 14.0 | 13.2 | 12.4 | 13.0 | 13.0 | 13.12 | 1.6 |
| 18 | 13.1 | 12.9 | 13.5 | 12.3 | 12.8 | 12.92 | 1.2 |
| 19 | 14.6 | 13.7 | 13.4 | 12.2 | 12.5 | 13.28 | 2.4 |
| 20 | 13.9 | 13.0 | 13.0 | 13.2 | 12.6 | 13.14 | 1.3 |
| 21 | 13.3 | 12.7 | 12.6 | 12.8 | 12.7 | 12.82 | 0.7 |
| 22 | 13.9 | 12.4 | 12.7 | 12.4 | 12.8 | 12.84 | 1.5 |
| 23 | 13.2 | 12.3 | 12.6 | 13.1 | 12.7 | 12.78 | 0.9 |
| 24 | 13.2 | 12.8 | 12.8 | 12.3 | 12.6 | 12.74 | 0.9 |
| 25 | 13.3 | 12.8 | 12.0 | 12.3 | 12.2 | 12.72 | 1.1 |

$\bar{E}\bar{y}=323.5$ $ER=33.8$

$\bar{V}=12.94$ $\bar{R}=1.35$

En la tabla se tiene $n=5$ y $k=25$. Se encuentra el valor de la media total \bar{y} , que es el promedio de las medias de cada subgrupo (\bar{y}). Para el subgrupo 1, $\bar{y} = (14+12.6+13.2+13.1+12.1) / 5 = 13$. La suma de las 25 \bar{y} de las muestras es 323.5, por lo que $\bar{\bar{y}} = (323.5 / 5) = 12.94$.

El rango R se obtiene de la misma manera, es decir, al promediar los 25 valores de R (obtenido de la diferencia entre el dato más alto y más bajo de cada subgrupo). Para el subgrupo 1, $R = 14-12.1 = 1.9$, por ejemplo

2) Los límites de control se obtienen de la siguiente manera:

| | Tabla \bar{y} | Tabla R |
|----------------------------------|-------------------------|---------------|
| Línea Central = LC | \bar{y} | R |
| Límite Superior de Control = LCS | $\bar{y} + A_2 \cdot R$ | $D_4 \cdot R$ |
| Límite Inferior de Control = LCI | $\bar{y} - A_2 \cdot R$ | $D_3 \cdot R$ |

Los coeficientes se obtienen a partir de la siguiente tabla:

TABLA 6.2.2

COEFICIENTES PARA OBTENER LÍMITES DE CONTROL

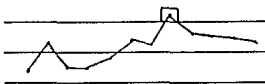
| n | A2 | D4 | D3 |
|---|-------|-------|--------------|
| 2 | 1.88 | 3.267 | NO
APLICA |
| 3 | 1.023 | 2.575 | |
| 4 | 0.729 | 2.282 | |
| 5 | 0.577 | 2.115 | |
| 6 | 0.483 | 2.004 | |
| 7 | 0.419 | 1.924 | |
| | | 0.076 | |

Así, para los datos del ejemplo:

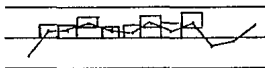
| | Tabla \bar{y} | Tabla \bar{R} |
|-----|--------------------------------|---------------------------|
| LC | 12.94 | 1.35 |
| LSC | $12.94 + (0.577+1.35) = 13.72$ | $2.115 \cdot 1.35 = 2.86$ |
| LCI | $12.94 - (0.577+1.35) = 12.16$ | - |

3) Estas gráficas sirven para evitar un defecto en el producto que se está elaborado, por lo que deben tomarse ciertas acciones cuando el proceso no está dentro de control estadístico, situación que se presenta al ocurrir cualquiera de los siguientes casos:

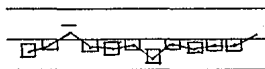
* Uno o más puntos están fuera de los límites de control:



* Siete o más puntos consecutivos caen dentro del mismo lado de la línea central:



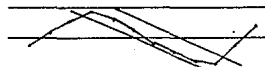
* Diez de once puntos consecutivos caen dentro del mismo lado de la línea central:



* Tres o más puntos consecutivos caen del mismo lado de la línea central y están localizados muy cerca de los límites de control:



* Siete o más puntos consecutivos llevan la misma tendencia hacia cualquiera de los límites:



En el caso de las gráficas P - Pn se estudian datos de atributos (sí/no, encendido/apagado, etc.) y determinan si el porcentaje de la frecuencia con que ocurre el atributo en sí está dentro de control estadístico. Las gráficas Pn se utilizan en vez de las P cuando el tamaño de la muestra "n" en el grupo es constante. Para obtener los límites de control, nuevamente es necesario auxiliarse de datos previamente obtenidos y en base a estos, graficar conforme pasa el tiempo:

1) El subgrupo se conforma por el número de piezas inspeccionado "n" (que debe ser mayor a 50) y por el número de piezas defectuosas (Pn). La fracción de defectos para cada subgrupo es:

$$P = \frac{Pn}{n}$$

2) Obtener el promedio de defectos:

$$\bar{P} = \frac{\sum Pn}{\sum n}$$

3) Obtener los límites de control:

$$LC = \bar{P} = 10.3$$

$$LSC = \bar{P} + 3 \sqrt{\frac{\bar{P}(1-\bar{P})}{n}}$$

$$LIC = \bar{P} - 3 \sqrt{\frac{\bar{P}(1-\bar{P})}{n}}$$

Debido a que en el caso de las gráficas "P", el valor de "n" varía, cada subgrupo tiene distintos límites de control, para efectos prácticos, se toma el número promedio global de "n" y así los límites de control no tendrán que ser distintos para cada punto.

Por último, se tienen las gráficas \bar{U} - U_c , en donde los puntos anteriores se traducen a lo siguiente:

$$1) \quad \bar{U} = \frac{\text{No. de defectos por subgrupo } (\sum u)}{\text{No. de unidades por subgrupo } (\sum n)}$$

$$2) \quad LC = \frac{\sum U}{\sum n}$$

$$3) \quad LSC = \bar{U} + 3 \sqrt{\frac{\bar{U}}{n}}$$

$$LIC = \bar{U} - 3 \sqrt{\frac{\bar{U}}{n}}$$

Las gráficas de control estadístico se basan en promedios debido a que los promedios de una población no normal en sus datos puntuales, tienden a seguir una curva normal, por lo que es necesario más de un punto para determinar R y σ ; además de que los promedios son más sensitivos al cambio que los datos individuales:



Cuando se tiene algún problema o se requiere de algún estudio de datos individuales, es necesario determinar los límites de capacidad del proceso (LCP, LCPS, LCPI), que determinan el rango dentro del cual operará un proceso estable o bajo control. Los límites de capacidad del proceso son válidos únicamente cuando el proceso es estable ($\bar{y} \pm 3\sigma$) y cuando el promedio de la población sigue una distribución normal.

Nótese además, que un proceso estable puede ser no aceptable, es decir, si por ejemplo, las especificaciones (LE, LES, LEI) son muy estrictas, el proceso no tendrá la capacidad de poderlas cumplir y al tratar de hacerlo, quizá caerá en un descontrol del mismo por realizar sobreajustes que de cualquier manera no harán que el proceso cumpla por sí mismo las especificaciones.

Ahora, si existe una relación alineada entre cliente-proveedor, la capacidad del proceso debe ser muy similar a las especificaciones (es decir, sus límites son los mismos) y las gráficas de control son realizadas con cualquiera de los dos límites o con ambos; la situación ideal se considera aquélla en la cual el rango comprendido entre los límites de las especificaciones es el 75% del rango de los límites de capacidad del proceso.

Es importante hacer notar la diferencia entre los tres conceptos mencionados en la sección:

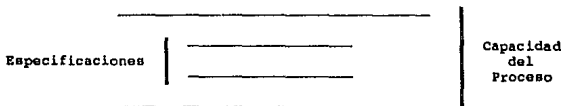
1) Control del Proceso (LC, LSC, LIC): Determina si el proceso es estable o no.

2) Capacidad del Proceso (LCP, LCPS, LCPI): Informa acerca de lo que el proceso está haciendo.

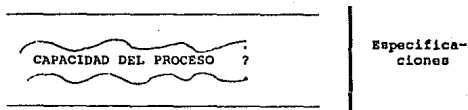
3) Especificaciones (LEC, LES, LEI): Son los requerimientos deseados que debe hacer el proceso.

A continuación se presentan algunas ilustraciones de estos conceptos:

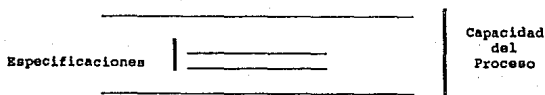
- Bajo control, pero fuera de especificaciones:



- Dentro de especificaciones, pero fuera de control:



- Especificaciones muy estrechas:



- Especificaciones muy amplias:

Capacidad
del Proceso

\$

Especificaciones

- Situación Ideal:

Especificaciones

75%

Capacidad
del
Proceso

6.3 METODO TAGUCHI

6.3.1 Introducción

Los métodos de control de calidad fuera de línea son actividades de control de calidad y de costos realizadas en las etapas de desarrollo del producto y diseño de proceso para obtener un producto factible de manufacturar y costeable, así como para reducir el desarrollo del mismo (ya produciéndose) y el costo por la duración de vida del mismo.

Los diseños de parámetros son un método de control de calidad fuera de línea. En la etapa de diseño del producto el objetivo es identificar las características que harán al producto menos sensible a los efectos de variaciones en las condiciones ambientales, deterioro y variación de la producción. Debido a que este diseño reduce la curva de variación al reducir la influencia de las causas de variación en lugar de tratar de controlarlas, es una técnica más efectiva en cuanto a costo se refiere para obtener la calidad del producto.

La curva de variación de un producto durante su tiempo de vida es un aspecto importante de calidad del producto. Los métodos de control de calidad fuera de línea reducen esta curva de variación y reducen también los costos de producto debido a su tiempo de vida. Una medida cuantitativa de la curva de variación es el valor esperado de pérdidas monetarias durante el período de duración del producto debido a esta variación. Los diseños de parámetros de experimentos identifican aquellas características del producto que minimizan dicha pérdida.

Taguchi recomienda el uso de diseños ortogonales para el diseño de parámetros. Los diseños de experimentos de parámetros pueden utilizarse también para identificar las variables del proceso que pueden minimizar las variaciones en el proceso mismo.

6.3.2 Control de Calidad Fuera de Línea

Las características de desempeño son las características finales de un producto que determinan el desempeño del mismo producto y que satisfarán ciertas necesidades del usuario. El estado o valor de estas características debe ser el que dé el punto de vista del cliente. El estado ideal se llama target.

La variación del desempeño de un producto se determina por tres aspectos de calidad: calidad de diseño, calidad de complacencia (del cliente) y rentabilidad.

Las causas básicas de variación de desempeño de un producto son: variables ambientales, deterioro del producto e imperfecciones de manufactura. Un ciclo de desarrollo de producto debe hacerse en tres etapas: diseño de producto, diseño del proceso y manufactura.

En la tabla 6.3.1 se muestran las clases de variación en estas etapas del ciclo.

TABLA 6.3.1

| Etapas del Desarrollo del Producto | Causas de Variación | | |
|------------------------------------|-----------------------|------------------------|-----------------------|
| | Variables Ambientales | Deterioro del Producto | Variables del Proceso |
| Diseño del Producto | o | o | o |
| Diseño del Proceso | x | x | o |
| Manufactura | x | x | o |

o = Es posible un conteo medible

x = No es posible un conteo medible

Los conceptos de calidad tradicional (diagramas de causa-efecto, Pareto, estudios de capacidad de proceso) se concentran casi solamente en la etapa de manufactura. Estos métodos se llaman de control de calidad en línea.

Los métodos de control de calidad fuera de línea son actividades de calidad y costos en las etapas de diseño del producto y diseño del proceso en el ciclo de desarrollo de dicho producto. El objetivo de estas actividades es crear un producto factible de procesarse y de manera rentable. Ejemplos de estos métodos son las revisiones de diseño, análisis de sensibilidad a ciertas condiciones ambientales, etc.

Estos métodos, sin embargo, no han sido desarrollados y promocionados como los de control de calidad en línea, pero la industria requiere de métodos científicos para identificar las especificaciones de un producto y su proceso que reduzca al máximo la variación de las características de desempeño del producto y el costo de manufactura.

Así como las características de desempeño, todas las especificaciones del producto y del proceso, deben estar establecidas en términos de valores ideales nominales y tolerancias alrededor de esos valores.

Taguchi sugiere tres etapas para asignar los valores nominales y tolerancias a un diseño de producto y proceso; diseño de sistema, diseño del parámetro y diseño de tolerancia. El diseño del sistema es el proceso de aplicación del conocimiento de ingeniería y científico para producir un diseño prototipo funcional básico. El modelo prototipo define las características iniciales de diseño.

El diseño de parámetro es una investigación conducida a identificar aquellas parámetros (variables) que minimizen la variación del desempeño de un producto. Un producto o un proceso puede basar su desempeño en función de varias de estas características; sin embargo, la variación en las características de desempeño pueden cambiar a diferentes condiciones de dichos parámetros. Esta variación incrementa los costos de manufactura y de duración de vida. El término diseño de parámetro viene de una tradición de ingeniería que se refiere a la característica de un producto como los parámetros del producto mismo. El ejercicio para identificar las condiciones óptimas de los parámetros se llama diseño de parámetros.

El diseño de tolerancia es un método para determinar tolerancias que minimizen la suma de los costos de manufactura y de tiempo de vida. La etapa final en especificar el diseño del producto y proceso es para determinar las tolerancias alrededor de los valores nominales identificados de los parámetros. Tolerancias demasiado pequeñas incrementan costos y tolerancias demasiado amplias incrementan la variación del desempeño y por lo tanto el costo por duración de vida de los productos.

6.3.3. Diseño de Parámetros

Identificar los valores óptimos de parámetros requiere de especificar un criterio que debe ser optimizado. Un criterio es el de pérdida esperada que es una medida del grado de variación del desempeño. Este concepto hace concreto el problema de variación (lo hace medible).

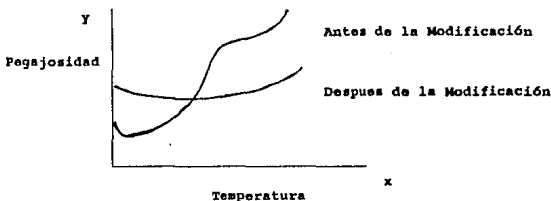
El diseño de parámetros es una investigación enfocada a identificar grupos de características del diseño del producto que minimice la pérdida esperada. La mayoría de las aplicaciones del diseño de parámetros requiere alguna clase de experimentación. Estos experimentos pueden ser físicos o simulados por computadora.

El diseño de parámetros se basa en clasificar las variables que afectan el desempeño de un producto en dos categorías: Parámetros de diseño y fuerzas de ruido. Los parámetros de diseño son las características del diseño del producto cuyos valores nominales pueden ser especificados por el diseñador del producto. Los valores actuales de los parámetros de diseño en un producto manufacturado pueden desviarse de los valores nominales. Fuerzas de ruido son aquellos parámetros que causan variación del desempeño durante el tiempo de vida del producto y a través de las diferentes unidades (ver sección 2.1.3).

A continuación se presentan dos ejemplos de diseño de parámetros:

1) El producto es un caramelo cuya calidad es función de la pegajosidad que presenta; el caramelo es muy sensible a los cambios de temperatura (clima) que afectan esa característica.

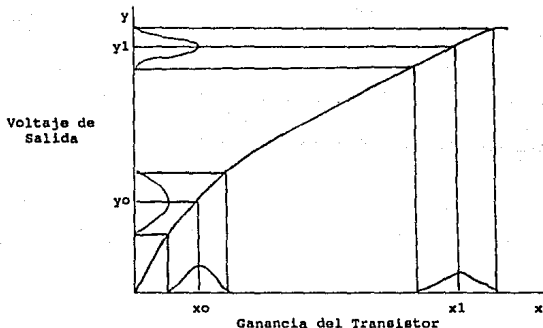
Un parámetro del diseño de experimento fue llevar a la compañía a desarrollar una formulación que hiciera menos sensible al caramelo respecto a las variaciones de temperatura. Esto fue posible gracias a que el efecto del factor externo de ruido, temperatura (medible, no controlable), en la pegajosidad del caramelo cambió al modificarse la formulación.



2) Este ejemplo es acerca de un circuito eléctrico. La característica de desempeño de interés es el voltaje de salida del circuito cuyo valor medio es y_0 . Se asume que el voltaje de salida del circuito es mayor conforme la ganancia del transistor "x" en el circuito aumenta y el diseñador del circuito está en la libertad de escoger el valor nominal de este transistor.

Para obtener un voltaje de salida y_0 (Fig. 6.3.1), el diseñador puede seleccionar el valor nominal de la ganancia del transistor que equivale a x_0 . Si la ganancia del transistor actual se desvía del valor nominal x_0 , el voltaje de salida también se desviará de y_0 . La ganancia del transistor puede desviarse de x_0 debido a imperfecciones en el transistor, deterioro durante su tiempo de vida y por las condiciones ambientales. La variación actual de la ganancia del transistor alrededor de su valor nominal es un factor de ruido interno en el circuito (no es medible y/o controlable). El voltaje de salida tendrá un valor medio igual a y_0 , pero con una variación grande. Si el diseñador del circuito selecciona el valor nominal de la ganancia del transistor x_1 , el voltaje de salida tendrá una variación mucho más pequeña, pero el valor y_1 asociado con x_1 está muy lejos del valor central y_0 . Ahora, existe otro componente en el circuito que tiene un efecto lineal en el voltaje de salida y el diseñador está en la libertad de escoger un valor nominal de este componente. El diseñador puede ajustar el valor de dicho componente hasta conseguir el valor medio del voltaje de salida y_0 . El ajuste del valor de la media de la característica de desempeño respecto a su valor central es generalmente un problema de ingeniería y no se soluciona, en cambio, tratando de reducir la variación de la característica de desempeño.

Fig. 6.3.1



Un diseño de experimentos de parámetros consta de dos partes: matriz de diseño y matriz de ruido. Las columnas de la matriz de diseño representan los parámetros de diseño; dentro de esas columnas están representados los grupos de características a evaluar (desempeño) y cada renglón de la matriz representa un diseño del producto. Las columnas de la matriz de ruido representan factores de ruido y los renglones representan las diferentes combinaciones de los niveles de los factores de ruido. Un diseño de experimentos de parámetros completo consiste en la combinación de las matrices de diseño y de ruido (Fig. 6.3.2). Si la matriz de diseño tiene "m" renglones y la de ruido "n" renglones, el número total de renglones en el diseño de parámetro combinado será $m \times n$. Por cada uno de los "m" renglones en la matriz de diseño, los "n" renglones de la matriz de ruido darán "n" o más observaciones de la característica de desempeño. Los niveles de los factores de ruido y la matriz de ruido son escogidos, por lo que estas observaciones repetidas son representativas de los efectos de todos los niveles posibles de los factores de ruido. Las observaciones repetidas de la característica de desempeño para cada condición en la matriz de diseño es entonces utilizada para formar un criterio llamado estadística de desempeño.

Los "m" valores de la estadística de desempeño asociados con las "m" condiciones experimentales en la matriz de diseño, se utilizan para predecir valores de parámetros de diseño que minimizen la pérdida esperada.

La estadística de desempeño estima el efecto de los factores de ruido en las características de desempeño del producto o servicio. Una estadística de desempeño eficiente toma ventaja del conocimiento básico de ingeniería acerca del producto, la función de pérdida y de la distribución de esa característica. Al hacer los parámetros de diseño $x=(x_1, x_2, \dots, x_k)$ los representantes de los parámetros de diseño y $w=(w_1, w_2, \dots, w_j)$, representa los factores de ruido incluidos en el diseño de experimentos de parámetros. Asumiendo que "y" (las características de desempeño) es función de x y w , $y=f(x, w)$, los parámetros de diseño x son los parámetros de distribución de y , y para un x dado, los factores de ruido generan la distribución:

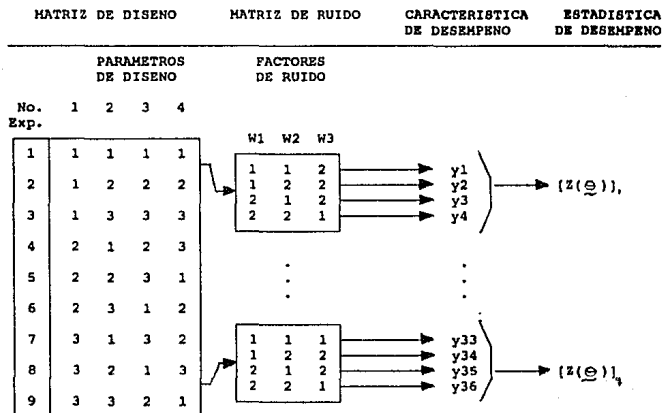
$$(x) = \epsilon \{y\}$$

$$\sigma^2(x) = \epsilon \{(y - (x))\}^2$$

que representan la media y la varianza de "y", respectivamente. Con este modelo las pérdidas esperadas son función de "x".

Fig. 6.3.2

EJEMPLO DE UN PLAN DE DISEÑO DE EXPERIMENTOS DE PARAMETROS



Una medida del desempeño es función de la "x" escogida, por lo que la maximización de esta medida en conjunto con los ajustes de ingeniería podrá minimizar la pérdida esperada. La medida de desempeño se usa entonces como criterio de comparación entre las diferentes probables combinaciones de los parámetros de diseño. Una medida eficiente de desempeño toma ventaja de los conocimientos de ingeniería y de la función de pérdida. La pérdida esperada es por sí misma una medida de desempeño, sin embargo, a veces es más complicado que necesario, ya que no toma ventaja del conocimiento de ingeniería. Diseños distintos de ingeniería pueden impactar en diferentes medidas de desempeño.

Taguchi ha definido más de 60 radios de señal/ruido (estadística de desempeño como estimados de las medidas de desempeño para aplicaciones de ingeniería en diseños de parámetros. Mientras que una medida de desempeño es función de x , en general la función se desconoce. Debe, entonces, ser estimado ya es este estimado el que se usa como criterio para ser optimizado.

6.3.4. Ejemplo

En esta sección se presenta el método de Genishi Taguchi para el control de la calidad através de un ejemplo sencillo.

Se presenta el caso de un fabricante de cristales para ventanas de todo tipo. Tanto el cristal como la bisagra de la ventana, tienen ciertas dimensiones y tolerancias especificadas. Si se considera que las dimensiones de las bisagras son nominales (fijas) y que el valor que se tomará en cuenta es el LD50 (el espesor del cristal que el 50% de los clientes comprará), mientras que el objetivo es determinar las tolerancias para las dimensiones del cristal, las cuales son susceptibles de variar. Si esas tolerancias son muy grandes o muy pequeñas, seguramente no habrán bisagras a las que puedan colocarse los cristales, ya que se caerán o no cabrán, respectivamente. Haciendo m_1 y m_2 las dimensiones pequeña y grande del cristal que el consumidor está dispuesto a utilizar, se tiene lo siguiente:

$$m = \frac{1}{2} (m_1 + m_2)$$

$$T_0 = \frac{1}{2} (m_2 - m_1)$$

El rango de tolerancia del consumidor para el espesor del cristal es:

$$m \pm T_0$$

que no es la tolerancia de especificaciones por parte del fabricante. Esto es porque al colocar un cristal, a veces es necesario hacer cortes adicionales por no quedar bien, por ejemplo; esta pérdida incluye el costo por transporte.

Haciendo "y" es espesor del cristal y $L(y)$ la función de pérdida expresada en una serie de Taylor alrededor del valor de la media "m" (valor deseable):

$$L(y) = L(m+y-m)$$

$$L(y) = L(m) + \frac{L'(m)}{1!} (y-m) + \frac{L''(m)}{2!} (y-m)^2 + \dots$$

Cuando el espesor tiene el valor ideal, "m", la pérdida $L(m)$ es cero y el primer término derivativo $L'(m)$ debe tender también a cero, por lo que estas series empiezan a partir del tercer término:

$$L(y) = k (y-m)^2$$

Para conocer el coeficiente "k", es necesario tener información acerca de las pérdidas ocasionadas por exceder las tolerancias grande y pequeña del espesor, representada por A_0 y que ocurrirá cuando $(y-m) = T_0$:

$$k = \frac{A_0}{\Gamma_0}$$

La tolerancia Γ (por parte del fabricante) del espesor del cristal puede determinarse si se conoce la pérdida A del fabricante por producir, colocar y transportar el cristal. La pérdida es:

$$L = \frac{A_0}{\Gamma_0^2} (y-m)^2$$

donde $\Gamma = (y-m)$ y $A = L$:

$$A = \frac{A_0}{\Gamma_0^2} \times \Gamma^2$$

$$\Gamma = \sqrt{\frac{A}{A_0}} \times \Gamma_0$$

Suponiendo que A_0 es la pérdida que se tiene al reinstalar un cristal por no estar exactas sus dimensiones y es \$1500, mientras que el rango de tolerancia del consumidor (o dimensiones nominales de la bisagra) es 3mm y que la pérdida máxima que puede sufrir el fabricante (A) es \$300, tenemos que la tolerancia final que debe dar el fabricante está dada por:

$$\Gamma = \sqrt{\frac{300}{1500}} \times 3 = 1.34 \text{ mm}$$

por lo que el rango de especificaciones del fabricante será de $m \pm 1.34$ mm.

Por otra parte, en este caso la tolerancia del consumidor es ± 3 mm, por lo que el fabricante tiene la capacidad de satisfacerlo, dado que sus especificaciones son menores a dicha tolerancia. Sin embargo, el fabricante (se puede pensar en ello) podría extenderse hasta los 3mm de tolerancia del consumidor, pero eso le acarreará más pérdidas de las presupuestadas, además de que no tendrá ningún espacio para moverse en caso de que tenga problemas en su proceso, es decir, cualquier variación se transformará en cristales no factibles de vender.

Si se diera el caso contrario, en donde el fabricante tuviera unas especificaciones menores a las del consumidor, tendrá que detectar en donde tiene que mejorar su proceso de operación para poder vender su producto, es decir, tendrá que estudiar el control y capacidad de su proceso actual para determinar áreas de mejora.

En el caso presentado anteriormente, se asumió que en el rango de tolerancia, los valores de las dimensiones pequeña y grande variaban alrededor del valor medio, m , de igual manera, gracias a que se concentraron en el valor de Γ_0 . Pero en el caso en donde dichas tolerancias son diferentes y por lo tanto también lo son las pérdidas, tenemos que:

$$k_1 = \frac{A_1}{\Gamma_1^2} \quad \text{Si } y > m$$

$$k_2 = \frac{A_2}{\Gamma_2^2} \quad \text{Si } y < m$$

donde los subíndices 1 y 2 se refieren a las tolerancias pequeña y grande, respectivamente. La función de pérdida estará dada por:

$$L(y) = \begin{cases} k_1 (y - m') & \text{Si } y > m' \\ k_2 (y - m') & \text{Si } y < m' \end{cases}$$

El valor de m' se obtiene de la siguiente manera: por ejemplo, si el espesor de una bisagra es 2.6 cm. y los cristales existentes cercanos a dicha dimensión tienen 2.4 y 2.7 cm. de espesor, el cliente tendrá que decidirse por alguna de estas dos opciones y escogerá en base a su preferencia (tal vez no le agrade que quede un poco flojo porque le molesta el ruido ocasionado por la vibración de su auto, o tal vez no quiere realizar mucho esfuerzo al colocarlo), por lo que:

$$L(y) = \begin{cases} k_1 (0.2) = T_1 \\ k_2 (0.1) = T_2 \end{cases}$$

donde T_1 y T_2 representan la pérdida que le ocasionará al cliente elegir cualquiera de las dos diferentes opciones. Para que ambas pérdidas sean iguales debe calcularse el valor de $(y - m')$ que esté en un punto medio y así conocer cual es el espesor entre 2.4 y 2.7 cm. que cumplirá ese requerimiento; digamos que sustituyendo valores, el resultado es 2.55 y el valor de la pérdida L está dado por:

$$L = k_1 \int_{2.40}^{2.55} (x - 2.4)^2 dx + k_2 \int_{2.55}^{2.70} (x - 2.7)^2 dx$$

La pérdida debida al hecho de fabricar y vender un espesor que no represente diferencia alguna entre las pérdidas mencionadas, debe ser igual a la diferencia entre el valor de T y el valor de la pérdida ocasionada por fabricar un intervalo de espesores distintos. Si dicho intervalo resulta ser de 2 en lugar de 3 mm. (2.7 - 2.4 cm.), tenemos:

$$L' = k_1 \int_{2.40}^{(2.70-2.55)} \frac{(x-2.4)^2 dx}{2} + k_2 \int_{(2.70-2.55)}^{2.60} \frac{(x-2.7)^2 dx}{2}$$

Si $L' = T$, el intervalo de 2mm. es demasiado costo o pérdida para el fabricante. El intervalo ideal será aquél en donde la pérdida del consumidor (T) sea igual a la del fabricante (L') y se convertirá en 0.

5.3.4.1. Función de Pérdida

Continuando con el ejemplo acerca de la producción de cristales, tenemos los siguientes valores de espesores que se desvían del valor central " m ":

| | | | | | | | | | |
|-----|-----|------|------|------|------|-----|-----|------|-----|
| 0.3 | 0.6 | -0.5 | -0.2 | 0.0 | 1.0 | 1.2 | 0.8 | -0.6 | 0.9 |
| 0.0 | 0.2 | 0.8 | 1.1 | -0.5 | -0.2 | 0.0 | 0.3 | 0.8 | 1.3 |

Para encontrar la pérdida debida a la variabilidad, es necesario obtener la varianza y sustituirla en la función de pérdida:

$$\sigma^2 = \frac{1}{20} (0.3^2 + 0.6^2 + \dots + 1.3^2)$$

$$\sigma^2 = 0.479$$

$$L = \frac{100}{F_0^2} \times (y - m)^2$$

donde $(y - m)^2$ es la varianza, es decir:

$$L = \frac{1500}{3^2} \times 0.479$$

$$L = 79.9$$

El valor promedio para este grupo de espesores es 0.365, es decir, está ligeramente arriba de la media deseada 0.3 mm. Esta situación puede analizarse mediante la construcción de una tabla de análisis de varianzas:

$$St = 0.32 + 0.62 + \dots + 1.32 = 9.59 \quad (f=20)$$

$$Sm = \frac{(0.3 + 0.6 + \dots + 1.3)^2}{20} = \frac{7.30^2}{20} = 2.66 \quad (f=1)$$

$$Se = St - Sm = 6.93 \quad (f=19)$$

| Fuente | f | S | V | Fo | S' | p(%) |
|--------|----|------|-------|------|-------|-------|
| m | 1 | 2.66 | 2.66 | 7.29 | 2.295 | 23.9 |
| e | 19 | 6.93 | 0.365 | | 7.295 | 76.1 |
| T | 20 | 9.59 | 0.479 | | 9.59 | 100.0 |

La tabla anterior indica que el valor de la media es demasiado grande en comparación al valor de la media del intervalo de tolerancia, lo cual se traduce en un incremento de varianza y pérdida debida a la alta variabilidad. Si esto es así, a la varianza σ^2 debe tratarse de convertir en un valor igual a V_e de la tabla. El valor de la función de pérdida debería ser entonces:

$$L = 166.7 \times 0.365 = 60.8$$

En comparación con el número 79.9 obtenido anteriormente, se tiene por lo tanto una mejora por de cristal de:

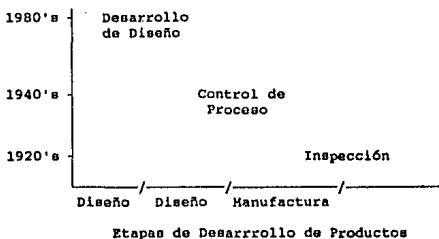
$$79.9 - 60.8 = 19.1$$

Si se producen 100,000 cristales por mes, el ahorro debido a la mejora de la calidad será 1.91 millones.

El esfuerzo realizado para ajustar el valor de la media al valor deseado no requiere de alguna herramienta especial, Únicamente hay que considerar que se requieren tomar varios grupos de muestras y en base a los distintos resultados obtenidos en tablas de análisis como la anterior, se debe decidir cuál es el valor óptimo con el que deberá trabajarse y cada cuándo será necesario hacer un estudio como éstos, ya que, como se mencionó en esta sección, todo fabricante de algún producto o servicio, debe estar trabajando en una mejora continua, para poder mantenerse y/o ganar un sitio honroso en el mercado.

6.4 CONCLUSIONES

Siguiendo la historia de este siglo en cuanto al desarrollo de métodos estadísticos, tenemos que está dividida en tres generaciones: inspección, control de proceso de manufactura y desarrollo del diseño del proceso y producto:



La inspección creó productos que no satisfacían al cliente en su totalidad y en base a quejas por parte del mismo (corrección, no prevención), se retroalimentaba al departamento de manufactura. A pesar de que el control del proceso reduce las inspecciones de un producto, el costo por llevar este control y basarse en él para producir puede resultar demasiado caro.

Los métodos del desarrollo de diseño de proceso y el diseño de parámetros pueden reducir las imperfecciones sin incrementar el costo. Las imperfecciones de manufactura son sólo un aspecto de la calidad del producto. Una ventaja de los métodos de desarrollo total de diseño es hacer al mismo insensible a variables ambientales, deterioro del producto e imperfecciones de manufactura. El desarrollo de diseño de un producto y proceso reduce los costos de manufactura y los costos debido al tiempo de vida de un producto.

Los métodos estadísticos para el control de inspección y de manufactura han existido desde hace más de 60 años (control de calidad en línea, desarrollado principalmente por Ishikawa); sin embargo, el desarrollo de los métodos estadísticos de diseño del producto es reciente; Taguchi ha sido el principal promotor de éstos y ha marcado el punto inicial para motivar la investigación-ejecución de métodos estadísticos en desarrollo de diseños, así como un la estimulación para aplicar los ya existentes.

CAPITULO 7

OPERACIONES EVOLUTIVAS

El objetivo de este capítulo es mostrar que las técnicas de diseño de experimentos de Box y Hunter pueden también ser aplicadas en la optimización de procesos de planta. Consideramos que el material que se presenta en este capítulo puede ser de gran provecho para cualquier Ingeniero Químico que se desarrolle en el campo de la producción. Se recomienda al lector haber leído por lo menos los cuatro primeros capítulos antes de adentrarse en esta sección.

Además se comprobará que en la producción rutinaria se pueden usar técnicas de análisis y diseños estadísticos simples (llevada a cabo por los supervisores del proceso) y así se puede llegar a la optimización de un proceso que reditúe en una producción eficiente. Esta comprobación se hará mediante los conceptos antes vistos desarrollados por Box y Hunter aplicados en la optimización de procesos, el método es Operaciones Evolutivas o EVOP (por sus siglas en inglés).

Lo que hace a este método diferente es que la experimentación se lleva a cabo en el proceso mismo y no requiere más que de leves variaciones de las condiciones del proceso (que no afectan al producto final), y del registro de estos datos para conocer ampliamente cómo afecta cada una de las variables del proceso a los resultados finales.

En el proceso EVOP dos o tres factores pueden variarse al mismo tiempo, y sólo pequeños cambios en los niveles son permitidos. El EVOP es un híbrido de las técnicas en proceso (on-line) y fuera de proceso (off-line) para la mejora de calidad del producto.

A pesar de su simplicidad, este método ha probado ser de gran utilidad en la industria.

7.1 IDEAS BASICAS

Un proceso industrial típico pasa por muchas etapas de desarrollo.

Lo primero es la idea de fabricar algún producto por alguna ruta que sea factible. Después, sigue el largo y tedioso trabajo de laboratorio para explorar esta ruta y que finalmente nos puede llevar a construir una planta piloto, la cual sería un intermediario entre el laboratorio y el proceso a gran escala. El diseño de la planta es el paso final.

Suponiendo que se construye la planta, ésta idealmente incorporará el mejor diseño que permitan los conocimientos y los recursos disponibles. Sin embargo, siempre existe una amplia gama de condiciones de operación disponibles.

El trabajo en la planta piloto (pequeña escala) nos habrá dado unas condiciones que son bastante buenas y que generalmente representaran los valores iniciales en un proceso continuo de iteración. Esto se reconoce dada la atención especial que siempre se presta al arranque, en donde se asigna a un equipo técnico especial que debe realizar ajustes al proceso antes de que este empiece a operar razonablemente bien.

Casi es inevitable que aún cuando la fase de arranque haya terminado, se esté fabricando un producto a menor velocidad, menor rendimiento y menor calidad que lo que la planta es capaz de producir.

Todavía queda por realizar el proceso de "ajusta". No es nada poco común encontrar un proceso químico que después de 10 años de producción, llegue a producir dos o tres veces más de lo que originalmente se pensó posible, con mejor rendimiento y calidad.

En este capítulo se discutirá este proceso de ajuste y optimización. El propósito es describir una técnica simple pero poderosa, que se ha usado con gran éxito en la industria química, pero que puede también tener mucho valor en otro tipo de procesos. Se llama Operaciones Evolutivas o EVOP (Evolutionary Operations), debido a su semejanza con el proceso biológico de evolución, o la selección natural (más adelante se entenderá el porqué).

Las Operaciones Evolutivas se aplican en los procesos de planta (a gran escala) día con día. No requiere personal especial y lo pueden manejar los encargados de la planta después de un breve entrenamiento. El método de Operaciones Evolutivas no pretende substituir la investigación fundamental. Esta investigación siempre debe de ir a un lado del EVOP.

Su filosofía básica dice que es muy ineficiente correr un proceso donde lo único que se obtenga sea el producto que se fabrica, sino que un proceso se debe operar de tal manera que también se obtenga información de como mejorar dicho producto.

7.2 INVESTIGACION EN PEQUEÑA Y EN GRAN ESCALA

Las razones por las cuales usamos la planta a gran escala para el proceso de ajuste y no la planta piloto en el laboratorio son las siguientes:

1. Porque el efecto de pasar de la planta piloto a gran escala puede hacer a los ajustes obsoletos.
2. Porque las corridas hechas en la planta piloto y el laboratorio requieren esfuerzos adicionales de personal e instalaciones.

Como hemos dicho, la experimentación en pequeña escala nos da una información muy importante en el diseño del proceso. Sin embargo, las características de flujo, transferencia de calor, y mezcla cambiarán cuando se cambia la escala de operación.

Esto no quiere decir que vayamos a encontrar características completamente diferentes entre la planta piloto y la planta de producción, ya que al pasar el proceso de pequeña a gran escala se mantiene básicamente el mismo comportamiento, pero existen diferencias en los detalles que son muy importantes económicamente.

La figura 7.2 ejemplifica en dos dimensiones este problema ya que muestra los contornos de la superficie de respuestas donde se mide el rendimiento de una misma reacción química conducida en pequeña y gran escala (EJEMPLO TOMADO DE BOX Y DRAPER)*.

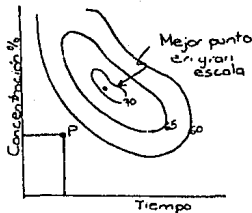
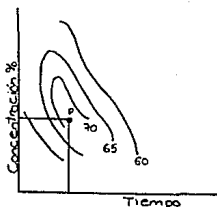
Se puede ver en esta figura que debido a los efectos de escalas, se distorsiona el rendimiento en la superficie de respuestas de la planta de producción comparada con la de la planta piloto. Debido a esto, la mejor combinación de tiempo y concentración para la planta piloto (punto P) dará un rendimiento inferior (diferente) en la planta de producción. Es por esto que se requiere de esfuerzos adicionales.

* EVOLUTIONARY OPERATION, Box & Draper, 1987.

FIG. 7.2

A. PEQUEÑA ESCALA

B. GRAN ESCALA



7.3 OPERACIONES EVOLUTIVAS Y ESTATICAS

La producción rutinaria se conduce normalmente a condiciones rígidamente definidas, llamadas "proceso de trabajo". Este proceso de trabajo consta de las mejores condiciones de operaciones conocidas en ese momento. El operador de la planta tiene como objetivo reproducir siempre estas mismas condiciones, y a este proceso de manufactura se le conoce como el método de "Operaciones Estáticas".

El método de Operaciones Estáticas no permite ningún desarrollo pero es esencial para la producción exitosa, ya que no solamente nos interesa la productividad del proceso sino también las características físicas del producto que estamos fabricando. Por lo que nuestro nuevo método debe de ser seguro y no permitir el riesgo de producir grandes cantidades de un producto fuera de especificaciones.

Con el método EVOP se inicia un ciclo planeado cuidadosamente con variaciones muy pequeñas en el proceso de trabajo. La rutina de la operación de la planta consiste en efectuar algunas modificaciones a cada una de las variantes con las que se este trabajando y repetir el ciclo continuamente.

El ciclo de variantes sigue un patrón muy simple; la repetición persistente de condiciones de trabajo que se encuentren en las vecindades del proceso de trabajo y que permiten que se acumule información con respecto al rendimiento y las propiedades físicas del producto.

Toda esta información se puede anotar en un tablero para que todos tengan acceso a ella y la puedan poner al corriente además de así permitir al supervisor del proceso ver a cualquier hora la evidencia que permita cambiar el centro del esquema de variables a un punto nuevo. Es decir, qué tipo de cambios fueron indeseables desde el punto de vista de calidad del producto y costos.

La Operaciones Evolutivas son un proceso continuo y permanente para efectuar el proceso la planta, por lo que solamente se permiten pequeños cambios en los niveles de las variables, cuyos efectos son prácticamente indetectables si se analizan las corridas individualmente, pero que nos proveen de información útil para mejorar el proceso al realizar un número de ciclos determinados.

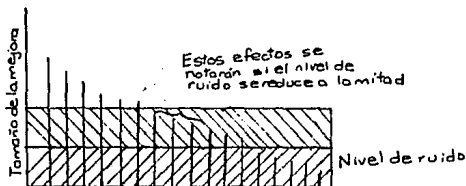
7.4 AJUSTE DEL PROCESO

Vamos a suponer que se acaba de construir una planta. En la figura 7.4 nos imaginamos las mejoras que pudieron surgir de ajustes apropiados al nuevo proceso, medidos en términos de costos y formados en orden descendiente. Después del arranque, se detectarán efectos muy grandes. Se buscarán las causas y resultará en la mejora y ajuste del proceso.

La razón por la cual estos efectos se pueden detectar y por lo tanto explotar es porque producen una señal grande comparado con el nivel de variación del proceso, también conocido como el nivel de ruido.

FIG. 7.4

EFFECTOS DEL NIVEL DE RUIDO



El ruido surge por una variedad de causas como la variabilidad de la materia prima, la incapacidad de mantener las variables de operación en rangos definidos, y por error instrumental y de medición. La variación final es una mezcla de todas estas (y se mediría por medio de la desviación estándar).

Un múltiplo específico de la desviación estándar sería el nivel de ruido. Una manera de ver el nivel de ruido es como un pasto. Si un cambio en el nivel de una variable de entrada produce un efecto o señal en la respuesta que excede el nivel de ruido, "sale del nivel del pasto" y se detecta con facilidad. Sin embargo, si la señal es mucho más pequeña que el nivel de ruido, no será fácil detectarlo y no se podrá explotar. Es decir, si hay un pasto más corto dentro del resto del pasto, será bastante difícil encontrarlo.

Para descubrir los efectos enterrados en el pasto debemos ya sea disminuir el nivel de ruido o incrementar la señal, con lo que se incrementa la relación señal/ruido (término muy usado en electrónica). Con EVOP se hacen ambas cosas. La señal se incrementa deliberadamente introduciendo cambios a las variables de un tipo cuidadosamente definido. El nivel efectivo de ruido se reduce repitiendo estos cambios y promediando los resultados.

7.5 EJEMPLO

Para ejemplificar el método EVOP trataremos un ejemplo ficticio (ESTE EJEMPLO FUE TOMADO DE BOX Y DRAPER)*.

7.5.1 Variables bajo Estudio

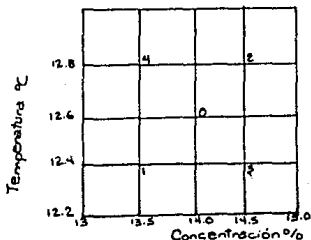
En una etapa particular del desarrollo de cierto proceso por lotes, se encontraban bajo estudio dos de las variables de proceso, el porcentaje de concentración y la temperatura a la cual se conducía la reacción.

7.5.2 Patrón de Variantes o Diseño

El esquema de variantes se encuentra en la figura 7.5a. El proceso de trabajo actual está marcado como 0 y las cuatro variantes son 1, 2, 3 y 4. Un lote de producto se hace a un grupo dado de condiciones, las cuales se efectuaron en el orden 0, 1, 2, 3, 4; 0, 1, 2, 3, 4; y así sucesivamente.

FIG. 7.5a

CICLO DE VARIANTES DEL PROCESO DE TRABAJO



7.5.3 Respuestas de Interés

Tres tipos de respuestas se registraron:

1. Costo de fabricación una unidad de producto generada.
2. Porcentaje de cierta impureza (no debe ser mayor de 0.5)
3. Medida de la fluidez del producto (se debe encontrar entre 55 y 80)

*EVOLUTIONARY OPERATION, Box & Draper, 1987.

7.5.4 Tablero de Información

La información se registró escribiéndola en un tablero, como se muestra a continuación:

FIG. 7.5b

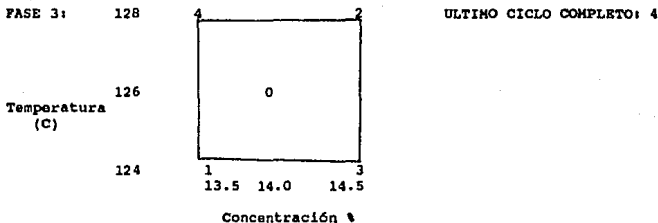


FIG. 7.5c

| Requisitos | Costo | | Impureza, % | | Fluidez | |
|-------------------------------|--------|------|--------------|------|---------------|------|
| | Mínimo | | Menos de 0.5 | | Entre 50 y 80 | |
| | 32.6 | 33.9 | 0.29 | 0.35 | 73.2 | 76.2 |
| Promedio de corridas | 32.8 | | 0.27 | | 71.3 | |
| | 32.3 | 33.4 | 0.17 | 0.19 | 60.2 | 67.6 |
| Dos límites de error estándar | ±0.7 | | ±0.03 | | ±1.1 | |

El número de fase que se encuentra a mano izquierda de la figura 7.5b, indica que ya se han corrido dos fases previas de EVOP. Con el objeto de que los resultados se puedan considerar en relación correcta con los obtenidos previamente, el promedio final también debe estar disponible en el tablero (por ejemplo, mediante de hojas pegadas al tablero). El número de ciclo a mano derecha indica que ya se terminaron cuatro ciclos de la tercera fase de operación.

En la tabla se resumen los últimos resultados. Primero se tienen los requisitos que se deben satisfacer. Después le siguen los promedios de varias condiciones de manufactura puestos de manera tal que se pueda seguir el plan. Este arreglo permite apreciar lo que los resultados implican.

7.5.5 Límites de error

Una medida de la confiabilidad de los promedios de las corridas lo dan los dos límites de error estándar (2 LEE).

En cualquier punto de la investigación, estos límites indican un rango donde casi seguramente (95% de confianza) se encontrarán los valores reales. Así, por ejemplo, el promedio de medidas de fluidez hechas a una concentración de 14.5% y a una temperatura de 128 C, es 76.2. Este valor está sujeto al error experimental, pero conocemos de los LEE que el valor de fluidez verdadero a estas condiciones está casi con seguridad incluido en el rango de 76.2 +/- 1.1. Conforme se va completando cada ciclo, el error límite calculado se va haciendo cada vez más pequeño, reflejando el hecho de que las corridas promedio se van haciendo cada vez más confiables. El tamaño de estos límites de error en cada etapa informan al supervisor del grado en que las diferencias aparentes en las corridas son más bien fluctuaciones al azar o representan efectos reales.

Para obtener la expresión que calcula el error estándar dada una cantidad de interés, y así obtener los 2 LEE, se puede proceder de la manera siguiente:

Por ejemplo, vamos a suponer que necesitamos el error estándar de la diferencia entre dos promedios de alguna muestra, $y_2 - y_1$, cada una basada en n observaciones independientes, y vamos a suponer que tenemos un estimado s de la desviación estándar σ .

$$\sigma^2(y_2 - y_1) = V(y_2 - y_1) = \sigma^2/n + \sigma^2/n = 2\sigma^2/n,$$

$$\sigma(y_2 - y_1) = 1.4142\sigma/\sqrt{n}$$

El error estándar de $y_2 - y_1$ es por lo tanto $1.4142/\sqrt{n}$ y los 2 LEE son

$$\underline{y_2 - y_1 \pm 2 \cdot 1.4142\sigma/\sqrt{n}}$$

Para mayor información ver referencias*

7.6 ANALISIS DEL TABLERO DE INFORMACION

Después de estudiar cuidadosamente el tablero de información y conjugarlo con las necesidades de producción y el conocimiento del proceso, el supervisor puede tomar una de las siguientes decisiones básicas:

1. Dejar que el esquema siga igual o esperar la información adicional del siguiente ciclo.
2. Modificar la operación de tal manera, y empezar otra fase del esquema EVOP.

*TECHNOMETRICS, Box & Hunter, Feb. 1959, p. 77.

Bajo la alternativa 2, existen varias posibilidades como:

- a. Adoptar alguna de las variantes como el nuevo "proceso de trabajo" y recomenzar el ciclo en este nuevo punto central.
- b. Explorar una dirección favorable de avance y recomenzar el ciclo en las mejores condiciones que se hayan encontrado. (Esta exploración se puede hacer, por ejemplo, haciendo una serie de avances tentativos en la dirección indicada, en cada etapa corriendo alternadas las condiciones nuevas y las mejores de las anteriores).
- c. Substituir nuevas variables por una o más de las viejas variables. Generalmente existirá una larga lista de variables esperando a ser probadas mediante EVOP.
- d. Modificar el patrón de variantes de cualquier manera que parezca deseable con la información que se tenga hasta el momento. Es decir, si después de varios ciclos no se ven efectos apreciables, se puede decidir variar las mismas variables otra vez pero en rangos más amplios.

En el ejemplo anterior, se pudo ver que una reducción en concentración reduce aparentemente el costo, el nivel de impureza y la fluidez. Si la temperatura decrece, el efecto en el costo es pequeño pero favorable y el nivel de impureza se reduce notablemente. Sin embargo, una reducción en la temperatura parece que también va acompañada de una reducción mayor en fluidez. Parece que el límite inferior se alcanza rápidamente al reducir la temperatura, pero se podría hacer una reducción moderada de concentración antes de llegar a este límite. Aunque se podría alcanzar una reducción considerable en nivel de impureza disminuyendo la temperatura y resultaría bastante favorable, no es esencial para cumplir con las especificaciones. Por todas estas razones se decidió reducir solamente la concentración. En la fase número 4 los tres grupos de condiciones (concentración-temperatura) - (13%, 126), (13.5%, 126) y (14%, 126) - se compararon corriendo varios ciclos en estos puntos. El primer punto aumentó el costo 32.1, el nivel de impureza a 0.25 y la fluidez a 60.7. El punto (13%, 126) se seleccionó para usarse como punto inicial, o "proceso de trabajo" para los siguientes ciclos de procesos evolutivos.

En el proceso de EVOP es muy importante el criterio humano, como en cualquier tipo de investigación. Un EVOP bien usado, asegura que el supervisor se alimenta continuamente con información clara del proceso y que va a tomar la decisión apropiada. Y aunque existen reglas del juego, el juicio debe evaluar el éxito o fracaso de cada acto en cada etapa.

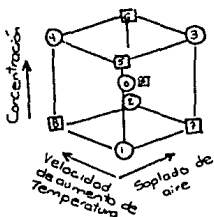
7.7 ESQUEMA CON TRES VARIABLES

En esta sección se describirá un esquema típico con tres variables. Como lo hemos hecho a lo largo de este trabajo, una figura nos ayudará a entender la situación. La figura 7.7 muestra un ciclo de variantes que se usaron para examinar el efecto de tres variables:

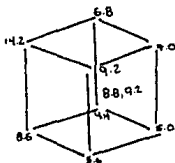
1. Velocidad de aumento de temperatura.
2. Soplado de aire.
3. Tratamiento con carbono.

FIG. 7.7

A. CICLO DE VARIANTES



B. RESULTADOS DE LA MEDIDA DE TEXTURA DESPUES DE CINCO CICLOS



El punto central duplicado (corridas 0 y e) era el proceso de trabajo estándar. Las variantes 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, fueron ocho variantes obtenidas combinando el punto alto y bajo de cada variable, en todas las maneras posibles. La figura 7.7b, muestra el promedio de textura observada después de cinco ciclos del esquema. El objetivo era reducir hasta el valor más pequeño posible esta medida de textura.

Hasta ahora hemos considerado esquemas donde se estudian simultáneamente dos o tres variables. Aunque se pueden estudiar más a la vez, esto no es muy recomendable ya que resulta impráctico para la persona que lo va a hacer de manera rutinaria en el proceso a gran escala. Es por esto que es mejor llevar a cabo este método de una manera modesta y que resulte práctica, a hacerlo más complicado y que esto se convierta en una razón para descontinuarlo.

7.8 EL EQUIPO EVOP

Para hacer el proceso de EVOP verdaderamente eficiente, se debe de crear una atmósfera donde fluyan ideas continuamente. Esto se puede hacer, juntando a un grupo de gente con antecedentes técnicos diferentes. Además del personal de la planta, candidatos obvios serían un investigador con conocimientos de química y un ingeniero químico con conocimiento de la planta en cuestión.

Esta gente debe formar el núcleo de un pequeño comité, que se reunirá más o menos una vez al mes.

Como seguramente surgirán también preguntas acerca de la modificación de las propiedades físicas del producto fabricado, un representante del departamento de control de calidad también debe estar presente en el comité. Si se cuenta con un especialista en estadística, se podrá sacar mayor provecho a los resultados y se podrán también usar técnicas más ambiciosas (si es necesario).

7.8.1 Retroalimentación

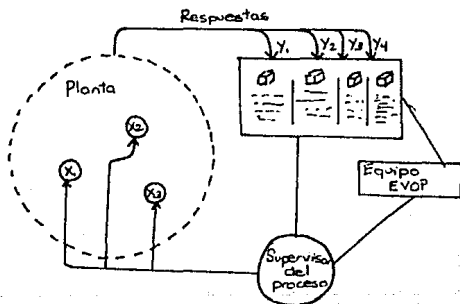
Como hemos dicho, la retroalimentación es lo máspreciado que se genera con este método.

En intervalos regulares, la gente encargada examina los datos y discute el proceso. Sin este estímulo constante, la gente involucrada en EVOP se puede ir desanimando y el método desapareciendo.

Mediante el establecimiento del grupo EVOP, los requisitos para una producción eficiente y evolutiva se satisfacen y se cierra el ciclo que se ilustra en la figura 7.8

FIG. 7.8

REPRESENTACION DEL "CICLO CERRADO" PROPORCIONADO POR EVOP



7.9 CUANDO NO PARAR

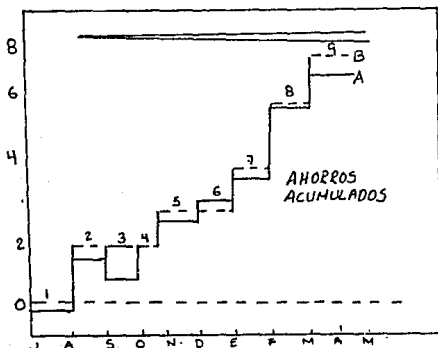
Cuando existe un buen equipo que forme el comité EVOP, siempre surgen nuevas ideas y el método se convierte en una manera permanente de operar.

Solamente se justifica la operación estática si parece que más se pierde que gana con siguiendo el método de EVOP. En la práctica casi siempre se encuentra que pequeñas ganancias justifican la continuación del método.

Esto se puede apreciar en el diagrama de la figura 7.9. La línea A en el diagrama muestra las ganancias en pesos/kg que se han alcanzado en las distintas fases de operación. La línea punteada B muestra las ganancias que se hubieran alcanzado si se hubiera seguido la operación estática.

FIG. 7.9

EJEMPLO DE AHORROS PROPORCIONADOS POR EVOP



El área sombreada es proporcional a las ganancias acumuladas, y las áreas rectangulares entre la línea y la línea punteada muestran los "gastos" acumulados por efectuar las modificaciones del esquema durante la fase. El área oscura en la fase 1 representa los gastos acumulados durante esta fase y se le van a restar a las ganancias acumuladas en la fase 2.

Se debe de tomar en cuenta por supuesto, que los gastos asociados con el método EVOP duran un período limitado, y las mejoras resultantes durarán por siempre.

Vamos a suponer que las mejoras del proceso provocarán ganancias por p años después de que se descubran y que el correr el proceso añade c pesos/kg al costo del producto. Entonces la pregunta es si se debe continuar EVOP se puede contestar comparando la velocidad de mejora r , que se espera que produzca (medida en pesos/kg-año), con la velocidad crítica de mejora, r_c dada por $r_c = c/p$. Se debe esperar que el EVOP se tenga que correr por t años para producir una mejora al final de ese periodo de rt pesos/kg, y si se producen k kilogramos de producto por año, entonces las ganancias totales durante p años en los que se use el descubrimiento serán de $rtkp$ pesos. Durante ese tiempo, se producirán kt kilogramos de producto y las pérdidas debidas a correr EVOP serán de ckt pesos. Entonces el EVOP pagará si $rtkp$ es mayor que ckt , es decir, si r es mayor que $r_c = c/p$.

Para ejemplificar consideremos la situación de la figura 7.9. ¿Se debe continuar o no el sistema? Vamos a suponer (conservadoramente) que las mejoras hechas a este proceso se esperan que sigan ganando dinero después de tres años ($p = 3$). Vamos también a suponer que c sea el promedio de los valores que se han experimentado en las 9 fases anteriores ($c = 0.3$ \$/kg). Entonces encontramos que la velocidad crítica de mejora es $r_c = 0.3/3 = 0.1$ \$/kg-año. Por tanto, mientras se espere que la velocidad de mejora debida al EVOP sea por lo menos de 0.1 \$/kg-año, el EVOP se debe continuar. Esta velocidad crítica se muestra en el diagrama en la parte superior de la figura 7.9. Se verá que la velocidad de mejora real que se había experimentado en el año anterior era de 6 \$/kg-año (60 veces mayor a la velocidad crítica), por lo que no existe duda alguna de que se debe continuar con EVOP.

Experiencia documentada en revistas acerca de los beneficios proporcionados por este método ha confirmado que el ejemplo planteado es sumamente típico y que el EVOP se debe considerar como una manera permanente de operación.

Y como se ha insistido a lo largo de este capítulo, nunca se debe hablar de EVOP como "manufactura experimental" ni decir que es "experimentación". Un experimento es un programa especial llevado a cabo durante un periodo limitado. EVOP es parte de la rutina normal de la planta.

Nota: Este ejemplo se trato en dólares por ser moneda mas estable que el peso.

Como la reacción de hidrólisis disminuye el rendimiento, el óxido de propileno se debe remover tan pronto como sea posible de la reacción.

En este experimento se optimizará el la temperatura de reacción y el tiempo en el cual se parará la reacción (neutralizando el medio), tiempo en el cual se espera obtener la mejor conversión del reactivo.

8.1.4 Desarrollo del Experimento

METODO: A partir de los datos cinéticos proporcionados para los compuestos en cuestión (1) se obtuvo la ecuación teórica que predice el comportamiento del sistema. La resolución de esta ecuación involucra métodos de integración por partes (Runge-Kutta) por lo que el rendimiento obtenido por medio del modelo teórico se resolvió en una computadora. A partir de datos obtenidos teóricamente se construyó la ecuación empírica de primer grado que predice el sistema. Esta ecuación empírica posteriormente se optimizó por medio del método de ascenso acelerado. (El modelo teórico y su deducción se encuentran al final del experimento)

RESULTADOS: Se manejaron dos variables independientes:

1. Temperatura
2. Tiempo de reacción

Las concentraciones de $(OH)^-$ y de propilén clorhidrín (PC) se dejaron constantes a 0.01 mol/l y 0.23 mol/l respectivamente.

El experimento se llevó a cabo de la siguiente manera:

Se fijaron límites de las variables para la construcción del primer diseño factorial. Estos límites se consideraron apropiados ya que a estas condiciones se tienen datos experimentales que proporciona la literatura, y así se podía comprobar los resultados obtenidos por medio de la ecuación teórica con datos reales. Estos límites son:

Temperatura (T) => 300 - 332°K

Tiempo (t) => 5 - 30 min.

Se construyó un diseño de factorial a dos niveles que dio los siguientes resultados:

*Los números entre parentésis se refieren a las variables codificadas.

PRIMER DISEÑO FACTORIAL

| | Temperatura
(°K) | Tiempo
(min.) | Conversión
(%) |
|----|---------------------|------------------|-------------------|
| 1. | 332/(+1) | 30/(+1) | 11.01 |
| 2. | 300/(-1) | 30/(+1) | 1.229 |
| 3. | 332/(+1) | 5/(-1) | 2.53 |
| 4. | 300/(-1) | 5/(-1) | 0.21 |

Una vez tenidos estos datos, se prosiguió a la construcción del siguiente modelo. El diseño es ortogonal.

$$y = 3.74 + 12.10T + 9.499q + 7.46Tq$$

Posteriormente se siguieron los pasos del método de ascenso acelerado para llegar a la región óptima donde el sistema opera. Se derivó la ecuación con respecto a T y a q y el resultado nos dictó que cada vez que aumenta la temperatura una unidad, el tiempo debe de aumentar en 0.784 unidades (en variables codificadas). Estos aumentos corresponderían al ascenso acelerado.

METODO DE ASCENSO ACELERADO

| | <u>Temperatura</u>
(°K) | <u>Tiempo</u>
(min.) | <u>Conversión</u>
(%) |
|-----|----------------------------|-------------------------|--------------------------|
| 5. | 332 (1) | 27 (0.78) | 40.04 |
| 6. | 348 (2) | 36 (1.53) | 72.8 |
| 7. | 364 (3) | 47 (2.29) | 88.0 |
| 8. | 380 (4) | 56 (3.07) | 91.7 |
| 9. | 396 (5) | 65 (3.83) | 91.86 |
| 10. | 412 (6) | 75 (4.70) | 91.72 |
| 11. | 428 (7) | 85 (5.50) | 91.68 |

El resultado del experimento numero 9 fue el más alto. Después de este punto el rendimiento comenzó a disminuir. Por lo tanto alrededor del punto 9 fue donde se construyó otro diseño factorial.

SEGUNDO DISEÑO FACTORIAL

(reales/codificadas)

| | <u>Temperatura</u>
(°K) | <u>Tiempo</u>
(min.) | <u>Conversión</u>
(%) |
|-----|----------------------------|-------------------------|--------------------------|
| 12. | 412/(+1) | 75/(+ 1) | 91.72 |
| 13. | 380/(-1) | 75/(+ 1) | 91.77 |
| 14. | 412/(+1) | 56/(- 1) | 91.90 |
| 15. | 380/(-1) | 56/(- 1) | 91.77 |

La ecuación construida en base del segundo diseño factorial es la siguiente:

$$y = 91.79 + 0.081T - 0.181q - 0.18Tq$$

Para comprobar que no es necesaria la construcción de un modelo de segundo orden, se hicieron las siguientes verificaciones.

INTERACCION

$$b_{12} = -\frac{1}{4}(91.72 - 91.77 - 91.90 + 91.77) = 0.045$$

CURVATURA

$$b_{11} + b_{22} = \frac{1}{4}(91.72 + 91.77 + 91.9 + 91.77) - 91.86 = 91.79 - 91.86 = 0.07$$

Como los efectos de curvatura e interacción son despreciables, se considera el modelo de primer grado adecuado para representar al sistema dentro del área de trabajo.

Para verificar la validez de este modelo, se comprobaron los datos obtenidos mediante el modelo empírico con los que se obtuvieron con el modelo teórico. Las variaciones fueron muy pequeñas.

A continuación se encuentra una tabla comparativa de resultados obtenidos mediante el modelo teórico y mediante la ecuación empírica.

| DATOS | | MODELO TEORICO | MODELO EMPIRICO | % DE DIFERENCIA |
|----------|-----------|----------------|-----------------|-----------------|
| T | t | | | |
| 412(+1) | 75 (+1) | 91.72 | 91.51 | -0.23% |
| 380(-1) | 75 (+1) | 91.77 | 91.71 | -0.07% |
| 412(+1) | 56 (-1) | 91.90 | 92.23 | 0.36% |
| 380(-1) | 56 (-1) | 91.77 | 91.71 | -0.07% |
| 396(0) | 65.5(0) | 91.87 | 91.79 | -0.08% |
| 404(+.5) | 60.8(-.5) | 91.82 | 91.97 | 0.17% |
| 388(-.5) | 60.8(-.5) | 91.90 | 91.80 | -0.11% |
| 404(+.5) | 70.3(+.5) | 91.82 | 91.70 | -0.13% |
| 388(-.5) | 70.3(+.5) | 91.91 | 91.70 | -0.22% |

Esto no se pudo verificar con datos experimentales debido a que no existían reportados en la literatura a estas condiciones.

8.2.5 Conclusiones:

Es muy buena la aproximación del modelo empírico al modelo teórico. El diseño factorial fue una excelente herramienta para optimizar la conversión a óxido de propileno en las concentraciones dadas y para obtener un modelo que en esa región nos prediga conversiones.

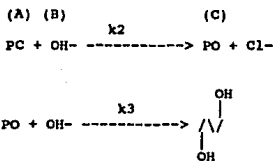
Al comparar los datos teóricos con los experimentales reportados en el artículo se puede ver lo siguiente.

| | Modelo Teórico | Datos Experimentales |
|-------|----------------|----------------------|
| T=300 | | |
| t=30 | 3.261 | 1.229 |
| T=332 | | |
| t=5 | 4.134 | 2.530 |

Esto da un error aproximado al 50% que es grande. Se puede decir, sin embargo, que el modelo teórico es bastante bueno, ya que estas diferencias se pueden deber a la región en la que se está trabajando. Es decir, en estas condiciones de operación es tan pequeña la conversión que cualquier diferencia entre los resultados que da el modelo teórico y los datos experimentales se traduce en altos porcentajes de error.

No se pudieron hacer más comparaciones debido a falta de datos experimentales reportados.

DESARROLLO DEL MODELO TEORICO



$$r_a = -k_2 C_a C_b = dC_a/dt$$

$$r_b = -k_2 C_a C_b - k_3 C_c C_b = dC_b/dt$$

$$r_c = k_2 C_a C_b - k_3 C_c C_b = dC_c/dt$$

$$r_c/r_a = dC_c/dC_a = -1 + (k_3/k_2 C_a) \cdot C_c$$

$$dC_c/dC_a - (k_3/k_2 C_a) \cdot C_c$$

$$dC_c/dC_a - (k_3/k_2 C_a) \cdot C_c = -1$$

$$h = \int -dC_a \frac{k_3}{k_2 C_a} = -\frac{k_3}{k_2} \ln C_a$$

$$\frac{h}{e} = \frac{-\frac{k_3}{k_2} \ln C_a}{e} = \frac{-\frac{k_3}{k_2}}{C_a}$$

$$\frac{-h}{e} = \frac{-\frac{k_3}{k_2} \ln C_a}{e} = \frac{k_3/k_2}{C_a}$$

$$C_c = e^{-h} \left[- \int_0^h dC_a + c \right]$$

$$C_c = C_a^{\frac{k_3/k_2}{e}} \left[- \int C_a^{-\frac{k_3/k_2}{e}} dC_a + c \right]$$

$$C_c = C_a^{\frac{k_3/k_2}{e}} \left[-C_a^{\frac{(1-k_3/k_2)}{e}} / \left(\frac{1-k_3/k_2}{e} \right) + c \right]$$

$$C_c = -C_a / (1-k_3/k_2) + c C_a^{\frac{k_3/k_2}{e}}$$

$$\text{si } C_a = C_{a0} \text{ y } C_c = C_{c0}$$

$$c = (C_{co} + C_{ao}/(1-k_3/k_2)) * 1/(C_{ao})^{k_3/k_2}$$

$$C_c = -C_a/(1-k_3/k_2) + (C_{co} + C_{ao}/(1-k_3/k_2))(C_a/C_{ao})^{k_3/k_2}$$

$$C_{ao} - C_a = C_c - C_{co} + C_d - C_{do}$$

$$C_{bo} - C_b = C_{ao} - C_a + C_d - C_{do}$$

$$C_{ao} - C_a - (C_c - C_{co}) = C_{bo} - C_b - (C_{ao} - C_a)$$

$$2(C_{ao} - C_a) = C_{bo} - C_b + C_c - C_{co}$$

$$C_b = C_{bo} - C_{co} - 2C_{ao} + 2C_a + C_c$$

$$C_b = C_{bo} - C_{co} - 2C_{ao} + 2C_a + (C_{co} + C_{ao}/(1-k_3/k_2))(C_a/C_{ao})^{k_3/k_2} - C_a/(1-k_3/k_2)$$

$$dC_a/dt = -k_2 C_a [C_{bo} - C_{co} - 2C_{ao} + 2C_a + (C_{co} + C_{ao}/(1-k_3/k_2))(C_a/C_{ao})^{k_3/k_2} - C_a/(1-k_3/k_2)]$$

FACTORIZANDO LA ECUACION:

$$dC_a/dt = -k_2 \{ C_a^2 (2 - 1/(1-k_3/k_2)) + C_a (C_{bo} - C_{co} - 2C_{ao} + (1+k_3/k_2) C_a / C_{ao}^{k_3/k_2} (C_{co} + C_{ao}/(1-k_3/k_2))) \}$$

$$a = 2 - 1/(1-k_3/k_2)$$

$$b = C_{bo} - C_{co} - 2C_{ao}$$

$$w = 1/C_{ao}^{k_3/k_2} (C_{co} + C_{ao}/(1-k_3/k_2))$$

$$dC_a/dt = -k_2 (a C_a^2 + b C_a + w C_a^{(1+k_3/k_2)})$$

$$\int_{C_{ao}}^{C_a} \frac{dC_a}{C_a (a C_a + b + w C_a^{k_3/k_2})} = \int_0^t -k_2 dt$$

Esta fue la ecuación que se integró por el método de Runge-Kutta para la obtención de la conversión a partir de temperatura, tiempo de reacción y concentración de OH- y de PC.

8.3 CASO PRACTICO II: EFECTO DE CINCO VARIABLES EN EL PH Y VISCOSIDAD DE UN YOGURTH TIPO COMERCIAL

8.3.1 Objetivo

Determinación del efecto en el pH y viscosidad de cinco variables (tipo de leche, concentración de la leche, temperatura de inoculación, concentración del inóculo y temperatura de incubación) en la elaboración de yoghurt tipo comercial. La ejecución de los experimentos fue desarrollado por gente especializada en el tema (*), mientras que el desarrollo de la planeación experimental por las que suscriben. Para la realización de este experimento se utilizó el programa de computación "Design Ease", en donde se selecciona el diseño y se alimentan los resultados para cada grupo de condiciones, obteniéndose el modelo matemático de grado correspondiente al diseño, el coeficiente de correlación, el nivel de confianza y las gráficas de los efectos. Este paquete de computación contiene el desarrollo de un experimento tal y como se ha mostrado a lo largo de esta tesis (resumido en la figura 2.1.1 del capítulo 2), además de tener en su memoria las tablas de consulta de los apéndices referentes a distribuciones y de los diseños (factoriales completos, Plackett-Burman, etc.).

8.3.2 Antecedentes

Las leches fermentadas resultan del desarrollo de ciertos gérmenes (cultivos) que modifican los componentes normales de la leche. Esta se transforma parcialmente en ácido láctico. El yoghurt es una leche cultivada por bacterias lácticas.

El comprador aprecia este producto por su aspecto, sabor, contenido de grasas, aroma, consistencia y por último, como le sienta. El sabor y aroma dependen, en parte, de la calidad de la leche y sobre todo, de la calidad de los cultivos y como es natural, de la manera de elaborarlos. La consistencia y la acidez también dependen de estas circunstancias. La elaboración del yoghurt se presenta en la figura 8.3.1.

8.3.3 Desarrollo del Experimento

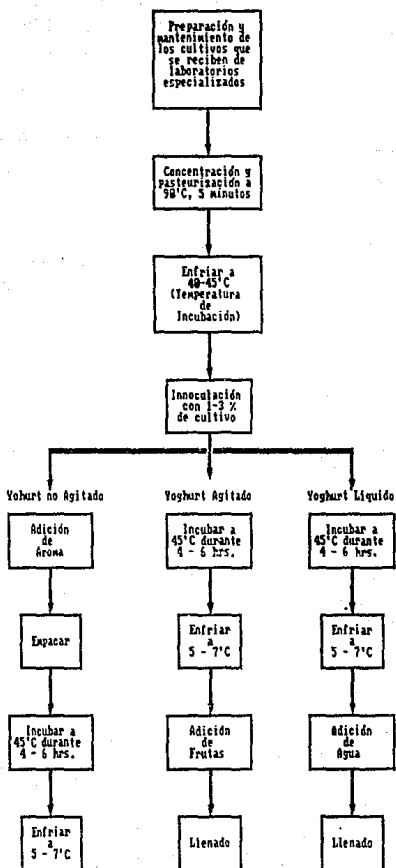
Las variables, sus niveles y una breve descripción de las que cuyo efecto pretende determinarse, se presenta a continuación:

- A) Tipo de Leche: Descremada y Entera.
Los porcentajes de grasa, sólidos no grasos y humedad son los que hacen la diferencia entre ambos tipos de leche.
- B) Concentración de la Leche: 2 y 3%.
Se refiere a la concentración de leche en agua. Se logra evaporando la leche hasta disminuir su volumen 1/2 a 1/3.
- C) Temperatura de Inoculación: 38 y 46°C.
La inoculación consiste en agregar la bacteria apropiada (*Streptococcus thermophilus* y *Lactobacillus bulgaricus* en el caso del yoghurt) para favorecer la acidez preferida del consumidor.

(*) Q.F.B. Margarita Martínez. Celanese Mexicana / UTA.

Fig. 8.3.1

ELABORACION DEL YOGHURT



D) Concentración del Inóculo: 2 y 4%
Se refiere al porcentaje de bacteria agregada en relación a la leche.

E) Temperatura de Incubación: 38 y 44°C.

Esta temperatura es la de reposo una vez terminada la fase de inoculación y da la pauta para la acidez. El ácido láctico es el principal producto de fermentación.

Se decide efectuar un tamizado de los factores en estudio para encontrar aquéllos que tienen una mayor influencia en por medio de un diseño Plackett-Burman:

$$\frac{k}{2} = \frac{3}{2} = 8 \text{ pruebas}$$

k = Número de variables totales = 5

p = Número de variables fijas = 2

Cada prueba se hace por duplicado.

Al alimentar esta información al programa de computación, éste nos presenta la siguiente hoja para llenado:

| DESING-EASE ANALYSIS | | | | | | | | | |
|----------------------|----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | Run Order | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| | Block | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | Standard Order | 1 | 5 | 6 | 8 | 4 | 7 | 2 | 3 |
| A: Tipo de Leche | | ENTE | DESC | ENTE | DESC | ENTE | ENTE | DESC | DESC |
| B: Concen. Leche % | | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 3 | 3 | 2 |
| C: Temp. Inocul. C | | 46 | 38 | 46 | 38 | 38 | 38 | 46 | 46 |
| D: Conc. Inoculo % | | 2 | 2 | 2 | 2 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| E: Temp. Incuba. C | | 44 | 44 | 38 | 38 | 44 | 38 | 38 | 44 |
| 1.- pH | | <u>4.60</u> | <u>4.30</u> | <u>4.35</u> | <u>4.50</u> | <u>4.50</u> | <u>4.55</u> | <u>4.25</u> | <u>4.30</u> |
| | | <u>4.35</u> | <u>4.25</u> | <u>4.20</u> | <u>4.30</u> | <u>4.30</u> | <u>4.30</u> | <u>4.15</u> | <u>4.20</u> |
| 2.- Viscosidad cps. | | <u>1100</u> | <u>500</u> | <u>610</u> | <u>850</u> | <u>700</u> | <u>400</u> | <u>430</u> | <u>700</u> |
| | | <u>1450</u> | <u>1120</u> | <u>780</u> | <u>1300</u> | <u>1200</u> | <u>900</u> | <u>500</u> | <u>480</u> |

Una vez obtenidos estos resultados, se alimentan también al programa que ofrece la información mostrada en las figuras 8.3.2 y 8.3.3.

Fig. 8.3.2

R E S P O N S E S

| Blk | Run
Ord | R1
PH | R2
VISCOSIDAD
CPS | Std
Ord | Blk |
|-----|------------|----------|-------------------------|------------|-----|
| 1 | 3 | 4.35 | 610 | 1 | 1 |
| 1 | 5 | 4.50 | 700 | 2 | 1 |
| 1 | 8 | 4.30 | 700 | 3 | 1 |
| 1 | 7 | 4.25 | 430 | 4 | 1 |
| 1 | 2 | 4.30 | 500 | 5 | 1 |
| 1 | 6 | 4.55 | 400 | 6 | 1 |
| 1 | 4 | 4.50 | 850 | 7 | 1 |
| 1 | 1 | 4.60 | 1100 | 8 | 1 |

R E S P O N S E S

| Blk | Run
Ord | R1
PH | R2
VISCOSIDAD
CPS | Std
Ord | Blk |
|-----|------------|----------|-------------------------|------------|-----|
| 1 | 3 | 4.20 | 780 | 1 | 1 |
| 1 | 5 | 4.30 | 1200 | 2 | 1 |
| 1 | 8 | 4.20 | 480 | 3 | 1 |
| 1 | 7 | 4.15 | 500 | 4 | 1 |
| 1 | 2 | 4.25 | 1130 | 5 | 1 |
| 1 | 6 | 4.30 | 900 | 6 | 1 |
| 1 | 4 | 4.30 | 1500 | 7 | 1 |
| 1 | 1 | 4.35 | 1650 | 8 | 1 |

Fig. 8.3.3

CURRENT DATA FILE = YOGHURT on 06/03/90 at 18:28:15

Dep Variable: PH in

DESIGN EASE ANALYSIS

| VARIABLE | COEFFICIENT | EFFECT | SUM OF SQUARES |
|----------|------------------|-----------|----------------|
| mean | <u>4.418750</u> | 4.418750 | |
| A | <u>-0.006250</u> | -0.012500 | 0.000312 |
| B | <u>-0.006250</u> | -0.012500 | 0.000312 |
| C | <u>0.006250</u> | 0.012500 | 0.000312 |
| D | <u>-0.031250</u> | -0.062500 | 0.007812 |
| E | <u>-0.118750</u> | -0.237500 | 0.112813 |
| F | <u>-0.018750</u> | -0.037500 | 0.002813 |
| G | <u>-0.006250</u> | -0.012500 | 0.000313 |

ANOVA for Selected Model

| SOURCE | SUM OF SQUARES | DF | MEAN SQUARE | F VALUE | PROB > F |
|-----------|----------------|----|---------------|---------------|---------------|
| MODEL | 0.121562 | 5 | 0.0243125 | 15.56 | <u>0.0615</u> |
| ERROR | 0.003125 | 2 | 0.0015625 | | |
| COR TOTAL | 0.124687 | 7 | | | |
| ROOT MSE | 0.039528 | | R-SQUARED | <u>0.9749</u> | |
| DEP MEAN | 4.418750 | | ADJ R-SQUARED | 0.9123 | |
| C.V. | 0.89 % | | | | |

CURRENT DATA FILE = YOGHURT on 06/03/90 at 18:28:15

Dep Variable: VISCOSIDAD in CPS

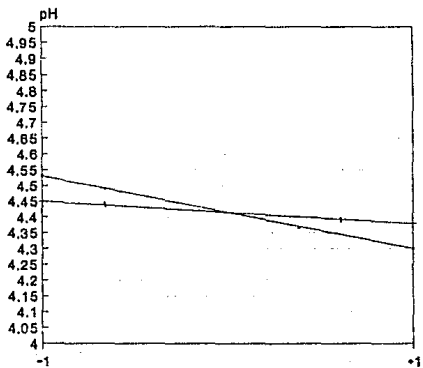
DESIGN EASE ANALYSIS

| VARIABLE | COEFFICIENT | EFFECT | SUM OF SQUARES |
|----------|--------------------|-------------|----------------|
| mean | <u>661.250000</u> | 661.250000 | |
| A | <u>-88.750000</u> | -177.500000 | 63012.500000 |
| B | <u>3.750000</u> | 7.500000 | 112.500000 |
| C | <u>-58.750000</u> | -117.500000 | 27612.500000 |
| D | <u>8.750000</u> | 17.500000 | 612.500000 |
| E | <u>-101.250000</u> | -202.500000 | 82012.500000 |
| F | <u>-153.750000</u> | -307.500000 | 189112.500000 |
| G | <u>-48.750000</u> | -97.500000 | 19012.499999 |

ANOVA for Selected Model

| SOURCE | SUM OF SQUARES | DF | MEAN SQUARE | F VALUE | PROB > F |
|----------|----------------|----|----------------|---------------|---------------|
| MODEL | 173362.5000000 | 5 | 34672.5000000 | 0.333 | <u>0.8608</u> |
| ERROR | 208125.0000000 | 2 | 104062.5000000 | | |
| COR TOT. | 381487.5000000 | 7 | | | |
| ROOT MSE | 332.587198 | | R-SQUARED | <u>0.4544</u> | |
| DEP MEAN | 661.250000 | | ADJ R-SQUARED | -0.9095 | |
| C.V. | 48.78 % | | | | |

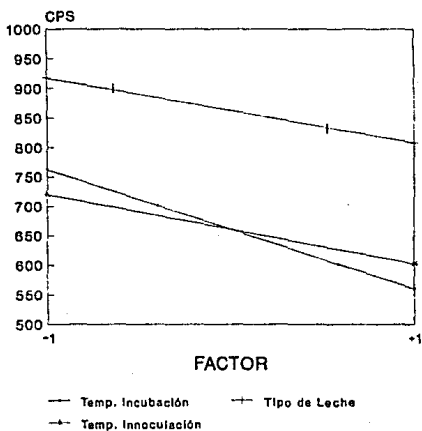
DESIGN-EASE Analysis pH



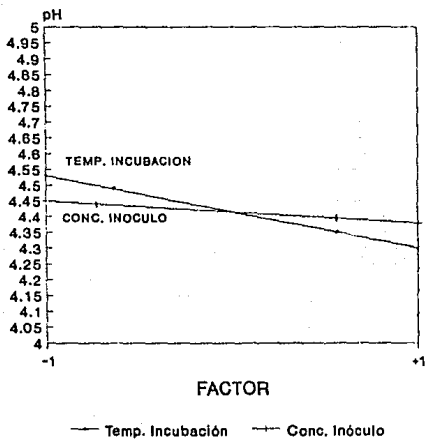
— Temp. Incubación + Conc. Inóculo

DESIGN-EASE Analysis

Viscosidad



DESIGN-EASE Analysis pH



De los datos de la figura 8.3.3., se tiene lo siguiente (se subrayaron aquéllos datos que se utilizan para poder realizar las conclusiones y se dejaron tres decimales):

$$pH = 4.419 - 0.006A - 0.006B + 0.006C - .031D - 0.118E$$

$$Visc = 661.25 - 88.75A + 3.75B - 58.75C + 8.75D - 101.25E$$

con límites para todas las variables de -1 a +1.

Los efectos importantes de las diferentes variables en las respuestas bajo estudio son (se presentan en orden decreciente):

pH:

- * Variable E (Temperatura de Incubación)
- * Variable D (Concentración del Inóculo)

Viscosidad:

- * Variable E (Temperatura de Incubación)
- * Variable A (Tipo de Leche)
- * Variable C (Temperatura de Inoculación)

Los resultados del análisis de varianza ANOVA son:

pH: Buen ajuste en un modelo lineal debido a:

- * 97.49% de coeficiente de correlación
- * 94% $((1-0.0615) \times 100)$ de nivel de confianza

Viscosidad: El modelo lineal no se ajustó a los resultados debido a:

- * 45.44% de coeficiente de correlación
- * 13% $((1-0.8608) \times 100)$ de nivel de confianza

8.3.4 Conclusiones

El comportamiento de los efectos en la respuesta al cambiar su nivel de un valor a otro se presenta a continuación en forma de gráficas. Con ayuda de este tipo de gráficas, puede determinarse el valor óptimo de las variables que afectan algún resultado dado en función del valor requerido de ese resultado; en este caso, por ejemplo, un pH aceptado por el consumidor debe estar entre 4.3 y 4.6, por lo que ahora las variables que lo afectan, deben controlarse para caer dentro de ese rango y de ser posible manejarlas de una forma que resulte más económica. Aquí, la temperatura del inóculo puede tenerse en un valor que sea fácilmente manejado (Seguridad del personal) y económico (que se requiera un tiempo mínimo para alcanzar dicha temperatura), mientras que la concentración del inóculo debe mantenerse en un valor mínimo que permita un mejor aprovechamiento (costo bajo).

A pesar de que el modelo lineal no aplicó para viscosidad, al menos sí se pudieron detectar las variables de las cuales depende su valor y por lo tanto deben estudiarse más a fondo para determinar la ecuación que represente su comportamiento. Además, con esta información y también tomando en cuenta las otras características del producto (pH), puede determinarse el valor óptimo de las variables que no afectan el resultado de viscosidad.

CONCLUSIONES

Como se hizo mención en la conclusión, el objetivo de esta tesis es demostrar que el Diseño de Experimentos proporciona al Ingeniero Químico una herramienta útil en tres de sus principales áreas de desempeño: Control de Procesos, desarrollo de Nuevos Productos y Control de Calidad.

Además se presentaron las bases teóricas del método, el desarrollo de éste y consideramos de que con las bases ofrecidas en esta tesis, el lector puede también aplicar estas técnicas en otras áreas de su interés.

Los ejemplos presentados en la parte final de este trabajo son una clara demostración de que los conocimientos teóricos adquiridos en los primeros capítulos representan una herramienta indispensable para el trabajo cotidiano del Ingeniero Químico. Respecto a las preguntas planteadas en la introducción, estamos seguras de que la respuesta favorece al diseño estadístico de experimentos en relación a la ejecución tradicional de éstos (una variable a la vez).

Es importante remarcar que siendo el propósito de estas técnicas el hacer más eficiente la labor del investigador, éste debe buscar la manera de hacerlas flexibles, es decir, saberlas adaptar de una manera más efectiva a su trabajo. Por lo tanto, no deben ser tomadas como instrucciones precisas.

Lo más sustancial de este trabajo fue demostrar que para un programa experimental dado, puede estudiarse un número elevado de variables con un mínimo número de experimentos, seleccionar las variables que afectan la respuesta de interés, optimizar éstas y por lo tanto llevar a una mejor utilización los recursos disponibles.

Como conclusión general, podemos decir que nos encontramos satisfechas de haber cumplido el objetivo de la tesis, cuyo tema está siendo de gran provecho para el desarrollo de nuestro desempeño profesional. Esperamos que también lo sea para todo aquél que este dispuesto a modificar su manera tradicional de trabajo por una más eficiente en cuanto a desarrollo de algún experimento y en cuanto a resultados finales también.

**GLOSARIO
DE
TERMINOS**

GLOSARIO DE TERMINOS

μ = Media de la población

y = Respuesta (variable de salida) de una sola observación del experimento (\bar{y} = promedio o media)

σ^2 = Varianza de la población

s^2 = Varianza de una muestra de la población

σ = Desviación estándar de la población

s = Desviación estándar de una muestra de la población

sp^2 = Varianza ponderada

N, n = Número de observaciones de un experimento

IC = Intervalo de confianza

LIC, SIC = Límite inferior y superior, respectivamente, de un intervalo de confianza

x = Factor o variable de entrada con valor real

X = Factor o variable de entrada con valor codificado

Y = Representación matemática (función) de una respuesta (variable de salida) de un experimento completo

L = Número de niveles de una variable de entrada

k = Número de factores de un experimento

f, l = Efecto en una respuesta de las variables de entrada

q = Número de efectos no asignados

Sfe = Error estándar de efectos no asignados

Ufe = Efectos de factores o interacciones no asignados

ANOVA = Tabla de análisis de varianza

gl = Grados de Libertad

q = Número de puntos de red (diseños con mezclas)

m = Número entero relacionado al espaciamiento de los puntos de una red (diseños con mezclas)

LEI, LES = Límites inferior y superior, respectivamente, de especificaciones de un producto

LCPI, LCPS = Límites inferior y superior, respectivamente, de capacidad de un proceso

LCI, LCS = Límites inferior y superior, respectivamente, de control de un proceso

$Y - \bar{y}$ = Gráficas de control de respuestas (variable de salida, característica) de un producto

$P - Pn$ = Gráficas de control de atributos (sí-no, encendido-apagado) de un producto

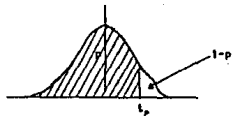
$U - Uc$ = Gráficas de control de defectos por unidad

GLOSARIO DE TERMINOS

- L (y) = Función de pérdida
- Γ = Tolerancia de especificaciones de un producto
- L* = Pérdida del fabricante (Método Taguchi)
- T = Pérdida del consumidor (Método Taguchi)
- M = Matriz
- p = Número de columnas de una matriz
- q = Número de renglones de una matriz
- M* = Matriz transpuesta
- M⁻¹ = Inverso de una matriz
- I = Matriz Identidad

APENDICE I
"TABLAS"

Percentilas (t_p)
de la
distribución t de Student
con v grados de libertad



| v | $t_{.95}$ | $t_{.90}$ | $t_{.75}$ | $t_{.50}$ | $t_{.25}$ | $t_{.10}$ | $t_{.05}$ | $t_{.025}$ | $t_{.01}$ | $t_{.005}$ |
|-----|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|-----------|------------|
| 1 | .158 | .325 | .727 | 1.000 | 1.376 | 3.08 | 6.31 | 12.71 | 31.82 | 63.66 |
| 2 | .142 | .289 | .617 | .816 | 1.061 | 1.89 | 2.92 | 4.30 | 6.96 | 9.92 |
| 3 | .137 | .277 | .584 | .765 | .978 | 1.64 | 2.35 | 3.18 | 4.54 | 5.84 |
| 4 | .134 | .271 | .569 | .741 | .941 | 1.53 | 2.13 | 2.78 | 3.75 | 4.60 |
| 5 | .132 | .267 | .559 | .727 | .920 | 1.48 | 2.02 | 2.57 | 3.36 | 4.03 |
| 6 | .131 | .265 | .553 | .718 | .906 | 1.44 | 1.94 | 2.45 | 3.14 | 3.71 |
| 7 | .130 | .263 | .549 | .711 | .896 | 1.42 | 1.90 | 2.36 | 3.00 | 3.50 |
| 8 | .130 | .262 | .546 | .706 | .889 | 1.40 | 1.86 | 2.31 | 2.90 | 3.36 |
| 9 | .129 | .261 | .543 | .703 | .883 | 1.38 | 1.83 | 2.26 | 2.82 | 3.25 |
| 10 | .129 | .260 | .542 | .700 | .879 | 1.37 | 1.81 | 2.23 | 2.76 | 3.17 |
| 11 | .129 | .260 | .540 | .697 | .876 | 1.36 | 1.80 | 2.20 | 2.72 | 3.11 |
| 12 | .128 | .259 | .539 | .695 | .873 | 1.36 | 1.78 | 2.18 | 2.68 | 3.06 |
| 13 | .128 | .259 | .538 | .694 | .870 | 1.35 | 1.77 | 2.16 | 2.65 | 3.01 |
| 14 | .128 | .258 | .537 | .692 | .868 | 1.34 | 1.75 | 2.13 | 2.60 | 2.95 |
| 15 | .128 | .258 | .536 | .691 | .866 | 1.34 | 1.75 | 2.13 | 2.58 | 2.92 |
| 16 | .128 | .258 | .535 | .690 | .865 | 1.34 | 1.75 | 2.12 | 2.58 | 2.92 |
| 17 | .128 | .257 | .534 | .689 | .863 | 1.33 | 1.74 | 2.11 | 2.57 | 2.88 |
| 18 | .127 | .257 | .534 | .688 | .862 | 1.33 | 1.73 | 2.10 | 2.55 | 2.88 |
| 19 | .127 | .257 | .533 | .688 | .861 | 1.33 | 1.73 | 2.07 | 2.54 | 2.86 |
| 20 | .127 | .257 | .533 | .687 | .860 | 1.32 | 1.72 | 2.09 | 2.53 | 2.84 |
| 21 | .127 | .257 | .532 | .686 | .859 | 1.32 | 1.72 | 2.08 | 2.52 | 2.83 |
| 22 | .127 | .256 | .532 | .686 | .858 | 1.32 | 1.72 | 2.07 | 2.51 | 2.82 |
| 23 | .127 | .256 | .532 | .685 | .858 | 1.32 | 1.71 | 2.07 | 2.50 | 2.81 |
| 24 | .127 | .256 | .531 | .685 | .857 | 1.32 | 1.71 | 2.06 | 2.49 | 2.80 |
| 25 | .127 | .256 | .531 | .684 | .856 | 1.32 | 1.71 | 2.06 | 2.48 | 2.79 |
| 26 | .127 | .256 | .531 | .684 | .856 | 1.32 | 1.71 | 2.06 | 2.48 | 2.78 |
| 27 | .127 | .256 | .531 | .684 | .855 | 1.31 | 1.70 | 2.05 | 2.47 | 2.76 |
| 28 | .127 | .256 | .530 | .683 | .855 | 1.31 | 1.70 | 2.05 | 2.47 | 2.76 |
| 29 | .127 | .256 | .530 | .683 | .854 | 1.31 | 1.70 | 2.04 | 2.47 | 2.76 |
| 30 | .127 | .256 | .530 | .683 | .854 | 1.31 | 1.70 | 2.04 | 2.47 | 2.75 |
| 40 | .126 | .255 | .529 | .681 | .851 | 1.30 | 1.68 | 2.02 | 2.42 | 2.70 |
| 60 | .126 | .254 | .527 | .679 | .848 | 1.30 | 1.67 | 2.00 | 2.39 | 2.66 |
| 120 | .126 | .254 | .526 | .677 | .845 | 1.29 | 1.66 | 1.98 | 2.36 | 2.62 |
| | .126 | .253 | .524 | .674 | .842 | 1.28 | 1.645 | 1.96 | 2.33 | 2.58 |

DISEÑO FACTORIAL COMPLETO
3 FACTORES, 2 NIVELES
(CON BLOQUES INDICADOS)

| Prueba | X1 | X2 | X3 | Bloque |
|--------|----|----|----|--------|
| 1 | - | - | - | 2 |
| 2 | + | - | - | 1 |
| 3 | - | + | - | 1 |
| 4 | + | + | - | 2 |
| 5 | - | - | + | 1 |
| 6 | + | - | + | 2 |
| 7 | - | + | + | 2 |
| 8 | + | + | + | 1 |

DISEÑO FACTORIAL COMPLETO
4 FACTORES, 2 NIVELES
(CON BLOQUES INDICADOS)

| Prueba | X1 | X2 | X3 | X4 | Bloque |
|--------|----|----|----|----|--------|
| 1 | - | - | - | - | 2 |
| 2 | + | - | - | - | 1 |
| 3 | - | + | - | - | 1 |
| 4 | + | + | - | - | 2 |
| 5 | - | - | + | - | 1 |
| 6 | + | - | + | - | 2 |
| 7 | - | + | + | - | 2 |
| 8 | + | + | + | - | 1 |
| 9 | - | - | - | + | 1 |
| 10 | + | - | - | + | 2 |
| 11 | - | + | - | + | 2 |
| 12 | + | + | - | + | 1 |
| 13 | - | - | + | + | 2 |
| 14 | + | - | + | + | 1 |
| 15 | - | + | + | + | 1 |
| 16 | + | + | + | + | 2 |

**DISEÑO FACTORIAL COMPLETO
5 FACTORES, 2 NIVELES
(CON BLOQUES INDICADOS)**

| Prueba | X1 | X2 | X3 | X4 | X5 | Bloque |
|--------|----|----|----|----|----|--------|
| 1 | - | - | - | - | - | 2 |
| 2 | + | - | - | - | - | 1 |
| 3 | - | + | - | - | - | 1 |
| 4 | + | + | - | - | - | 2 |
| 5 | - | - | + | - | - | 1 |
| 6 | + | - | + | - | - | 2 |
| 7 | - | + | + | - | - | 2 |
| 8 | + | + | + | - | - | 1 |
| 9 | - | - | - | + | - | 1 |
| 10 | + | - | - | + | - | 2 |
| 11 | - | + | - | + | - | 2 |
| 12 | + | + | - | + | - | 1 |
| 13 | - | - | + | + | - | 2 |
| 14 | + | - | + | + | - | 1 |
| 15 | - | + | + | + | - | 1 |
| 16 | + | + | + | + | - | 2 |
| 17 | - | - | - | - | + | 1 |
| 18 | + | - | - | - | + | 2 |
| 19 | - | + | - | - | + | 2 |
| 20 | + | + | - | - | + | 1 |
| 21 | - | - | + | - | + | 2 |
| 22 | + | - | + | - | + | 1 |
| 23 | - | + | + | - | + | 1 |
| 24 | + | + | + | - | + | 2 |
| 25 | - | - | - | + | + | 2 |
| 26 | + | - | - | + | + | 1 |
| 27 | - | + | - | + | + | 1 |
| 28 | + | + | - | + | + | 2 |
| 29 | - | - | + | + | + | 1 |
| 30 | + | - | + | + | + | 2 |
| 31 | - | + | + | + | + | 2 |
| 32 | + | + | + | + | + | 1 |

DISEÑO FACTORIAL COMPLETO
6 FACTORES, 2 NIVELES
(SIN BLOQUES)

| Prueba | X1 | X2 | X3 | X4 | X5 | X6 |
|--------|----|----|----|----|----|----|
| 1 | - | - | - | - | - | - |
| 2 | + | - | - | - | - | - |
| 3 | - | + | - | - | - | - |
| 4 | + | + | - | - | - | - |
| 5 | - | - | + | - | - | - |
| 6 | + | - | + | - | - | - |
| 7 | - | + | + | - | - | - |
| 8 | + | + | + | - | - | - |
| 9 | - | - | - | + | - | - |
| 10 | + | - | - | + | - | - |
| 11 | - | + | - | + | - | - |
| 12 | + | + | - | + | - | - |
| 13 | - | - | + | + | - | - |
| 14 | + | - | + | + | - | - |
| 15 | - | + | + | + | - | - |
| 16 | + | + | + | + | - | - |
| 17 | - | - | - | - | + | + |
| 18 | + | - | - | - | + | + |
| 19 | - | + | - | - | + | + |
| 20 | + | + | - | - | + | + |
| 21 | - | - | + | - | + | + |
| 22 | + | - | + | - | + | + |
| 23 | - | + | + | - | + | + |
| 24 | + | + | + | - | + | + |
| 25 | - | - | - | + | + | + |
| 26 | + | - | - | + | + | + |
| 27 | - | + | - | + | + | + |
| 28 | + | + | - | + | + | + |
| 29 | - | - | + | + | + | + |
| 30 | + | - | + | + | + | + |
| 31 | - | + | + | + | + | + |
| 32 | + | + | + | + | + | + |

GUIA DE ORDEN ALEATORIO
ARA EXPERIMENTACION

| SERIES | 16 PRUEBAS | | | | | 16 PRUEBAS | | | | |
|--------|------------|----|----|----|----|------------|----|----|----|----|
| | 3 | 9 | 11 | 10 | 3 | 21 | 12 | 22 | 12 | 28 |
| 1 | 3 | 9 | 11 | 10 | 3 | 21 | 12 | 22 | 12 | 28 |
| 2 | 1 | 15 | 1 | 7 | 5 | 18 | 20 | 5 | 24 | 10 |
| 3 | 11 | 16 | 12 | 11 | 10 | 3 | 2 | 29 | 13 | 31 |
| 4 | 5 | 12 | 4 | 5 | 1 | 11 | 16 | 18 | 4 | 1 |
| 5 | 8 | 10 | 14 | 8 | 14 | 26 | 7 | 11 | 15 | 3 |
| 6 | 4 | 5 | 3 | 4 | 16 | 17 | 32 | 17 | 25 | 5 |
| 7 | 12 | 13 | 15 | 15 | 8 | 31 | 3 | 8 | 14 | 8 |
| 8 | 15 | 1 | 10 | 14 | 13 | 1 | 5 | 23 | 28 | 15 |
| 9 | 10 | 11 | 13 | 3 | 9 | 13 | 15 | 15 | 26 | 11 |
| 10 | 2 | 4 | 6 | 2 | 11 | 23 | 22 | 14 | 22 | 26 |
| 11 | 7 | 6 | 8 | 13 | 12 | 7 | 25 | 10 | 16 | 23 |
| 12 | 9 | 8 | 7 | 1 | 6 | 20 | 9 | 16 | 27 | 19 |
| 13 | 6 | 14 | 5 | 9 | 7 | 12 | 24 | 13 | 20 | 12 |
| 14 | 14 | 3 | 2 | 12 | 4 | 16 | 31 | 30 | 5 | 27 |
| 15 | 16 | 7 | 9 | 16 | 2 | 8 | 26 | 3 | 7 | 14 |
| 16 | 13 | 2 | 16 | 6 | 15 | 25 | 30 | 32 | 6 | 17 |
| 17 | | | | | | 6 | 10 | 25 | 23 | 2 |
| 18 | | | | | | 14 | 17 | 7 | 21 | 7 |
| 19 | | | | | | 4 | 13 | 4 | 11 | 13 |
| 20 | | | | | | 19 | 18 | 27 | 17 | 29 |
| 21 | | | | | | 32 | 4 | 9 | 18 | 9 |
| 22 | | | | | | 5 | 8 | 12 | 10 | 32 |
| 23 | | | | | | 30 | 29 | 28 | 2 | 16 |
| 24 | | | | | | 15 | 19 | 19 | 31 | 18 |
| 25 | | | | | | 10 | 1 | 20 | 3 | 21 |
| 26 | | | | | | 24 | 6 | 31 | 29 | 24 |
| 27 | | | | | | 27 | 14 | 6 | 1 | 6 |
| 28 | | | | | | 2 | 11 | 1 | 19 | 22 |
| 29 | | | | | | 29 | 21 | 21 | 32 | 20 |
| 30 | | | | | | 9 | 28 | 26 | 8 | 4 |
| 31 | | | | | | 28 | 23 | 2 | 9 | 25 |
| 32 | | | | | | 22 | 27 | 24 | 30 | 30 |

**DISEÑO PLACKETT-BURMAN
12 CORRIDAS EXPERIMENTALES**

| No.EXP. | PRUEBA | MEDIA | X1 | X2 | X3 | X4 | X5 | X6 | X7 | X8 | X9 | X10 | X11 |
|---------|--------|-------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|
| 1 | 9 | + | - | + | - | + | + | - | + | + | + | - | - |
| 2 | 3 | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + |
| 3 | 8 | + | - | - | + | - | + | + | - | + | + | + | - |
| 4 | 4 | + | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + | - |
| 5 | 2 | + | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - | + |
| 6 | 5 | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + |
| 7 | 1 | + | + | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - |
| 8 | 11 | + | - | + | + | - | + | + | + | - | - | - | + |
| 9 | 7 | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + | + | + |
| 10 | 10 | + | + | - | + | + | - | + | + | + | - | - | - |
| 11 | 12 | + | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 12 | 6 | + | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + | + |

DISEÑO PLACKETT -BURMAN
20 CORRIDAS EXPERIMENTALES

| No.EXP. | PRUEBA | MEDIA | X1 | X2 | X3 | X4 | X5 | X6 | X7 | X8 | X9 | X10 | X11 | X12 | X13 | X14 | X15 | X16 | X17 | X18 | X19 |
|---------|--------|-------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 1 | 15 | + | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - |
| 2 | 8 | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + |
| 3 | 13 | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + |
| 4 | 3 | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + |
| 5 | 4 | + | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - |
| 6 | 19 | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | + | - | + | + |
| 7 | 16 | + | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | - | + | - | - | + | - | - | + |
| 8 | 7 | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + |
| 9 | 12 | + | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - |
| 10 | 18 | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + |
| 11 | 10 | + | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - |
| 12 | 9 | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + |
| 13 | 5 | + | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - |
| 14 | 1 | + | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - |
| 15 | 2 | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + |
| 16 | 6 | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + |
| 17 | 14 | + | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - |
| 18 | 20 | + | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 19 | 11 | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + |
| 20 | 17 | + | + | + | - | + | + | - | - | + | + | + | + | - | + | - | + | - | - | - | - |

DISEÑO PLACKETT - BURMAN
24 CORRIDAS EXPERIMENTALES

| No.EXP. | PRUEBA | MEDIA | X1 | X2 | X3 | X4 | X5 | X6 | X7 | X8 | X9 | X10 | X11 | X12 | X13 | X14 | X15 | X16 | X17 | X18 | X19 | X20 | X21 | X22 | X23 |
|---------|--------|-------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 1 | 19 | + | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - |
| 2 | 2 | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + |
| 3 | 18 | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + |
| 4 | 10 | + | + | - | - | + | + | - | + | - | + | - | + | - | - | + | + | + | + | + | + | - | + | - | + |
| 5 | 20 | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | + | - | + | - | + |
| 6 | 6 | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + |
| 7 | 1 | + | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - |
| 8 | 15 | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + |
| 9 | 16 | + | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - |
| 10 | 14 | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + |
| 11 | 13 | + | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - |
| 12 | 23 | + | - | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - |
| 13 | 9 | + | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - |
| 14 | 11 | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + |
| 15 | 21 | + | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | + | + | - | + | - | + | - | + | - |
| 16 | 3 | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | - | - | - | - | + | + |
| 17 | 24 | + | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 18 | 22 | + | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - |
| 19 | 7 | + | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | - | + | + | - |
| 20 | 4 | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + |
| 21 | 8 | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | + | - | - | + | + | + | - | + | - | - |
| 22 | 12 | + | - | + | + | - | - | + | - | - | + | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - |
| 23 | 5 | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | - |
| 24 | 17 | + | + | - | + | - | - | - | - | + | + | + | + | + | - | + | - | + | + | - | - | + | + | - | - |

DISEÑO DE "TRASLAPÉ" PLACKETT - BURMAN
24 CORRIDAS EXPERIMENTALES

| No.EXP. | PRUEBA | MEDIA | | | | | | | | | | | | BLOQUE | |
|---------|--------|-------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|--------|---|
| | | | X1 | X2 | X3 | X4 | X5 | X6 | X7 | X8 | X9 | X10 | X11 | X12 | |
| 1 | 12 | + | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 1 |
| 2 | 7 | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + | + | + | + | 1 |
| 3 | 8 | + | - | - | + | - | - | + | - | + | + | + | - | - | 1 |
| 4 | 5 | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + | + | 1 |
| 5 | 6 | + | + | - | - | - | + | - | + | + | - | + | + | + | 1 |
| 6 | 10 | + | + | - | + | + | - | + | + | + | - | - | - | - | 1 |
| 7 | 2 | + | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + | 1 |
| 8 | 1 | + | + | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - | - | 1 |
| 9 | 3 | + | - | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + | + | 1 |
| 10 | 4 | + | + | + | + | - | - | - | + | - | + | + | - | - | 1 |
| 11 | 11 | + | - | + | + | - | + | + | + | - | - | - | + | + | 1 |
| 12 | 9 | + | - | + | - | + | + | - | + | + | + | - | - | - | 1 |
| 13 | 13 | + | - | - | + | - | - | - | + | + | + | - | + | + | 2 |
| 14 | 17 | + | - | - | + | + | + | - | + | - | - | + | - | - | 2 |
| 15 | 24 | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | 2 |
| 16 | 21 | + | + | + | + | - | - | + | - | - | - | + | + | + | 2 |
| 17 | 16 | + | - | - | - | + | + | + | - | + | - | - | + | + | 2 |
| 18 | 23 | + | + | + | - | + | - | - | - | + | + | + | - | - | 2 |
| 19 | 22 | + | - | - | - | - | + | - | - | - | + | + | + | + | 2 |
| 20 | 20 | + | + | + | - | + | - | - | + | - | - | - | + | + | 2 |
| 21 | 15 | + | + | + | - | - | + | + | + | - | + | - | - | - | 2 |
| 22 | 18 | + | - | - | + | + | - | + | - | - | + | - | - | - | 2 |
| 23 | 14 | + | - | - | - | - | - | + | + | + | - | + | - | - | 2 |
| 24 | 19 | + | + | + | + | - | + | - | - | + | - | - | - | - | 2 |

**DISEÑO FACTORIAL FRACCIONADO
PARA 8 CORRIDAS EXPERIMENTALES**

| FACTORES | X1 | X2 | X3 | X1X2 | X1X3 | X2X3 | X1X2X3 |
|-----------------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------|
| 3 | | | | | | | |
| 4 | X2X3X4 | X1X3X4 | X1X2X4 | X3X4 | X2X4 | X1X4 | X4 |
| 7 | | | | X4 | X5 | X6 | X7 |
| PRUEBA | | | | | | | |
| 1 | - | - | - | + | + | + | - |
| 2 | + | - | - | - | - | + | + |
| 3 | - | + | - | - | + | - | + |
| 4 | + | + | - | + | - | - | - |
| 5 | - | - | + | + | - | - | + |
| 6 | + | - | + | - | + | - | - |
| 7 | - | + | + | - | - | + | - |
| 8 | + | + | + | + | + | + | + |

FACTORIAL COMPLETO

REPLICACION MEDIA

REPLICACION 1/16

MATRICES DE EXPERIENCIAS PARA MODELOS DE SEGUNDO ORDEN

I. MODELOS DE BOX-WILSON (ESTRELLA)

DOS VARIABLES

| X1 | X2 |
|----|----|
| 1 | 0 |
| -1 | 0 |
| 0 | 1 |
| 0 | -1 |
| 0 | 0 |

TRES VARIABLES

| X1 | X2 | X3 |
|----|----|----|
| 1 | 0 | 0 |
| -1 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | 0 |
| 0 | -1 | 0 |
| 0 | 0 | 1 |
| 0 | 0 | -1 |
| 0 | 0 | 0 |

CUATRO VARIABLES

| X1 | X2 | X3 | X4 |
|----|----|----|----|
| 1 | 0 | 0 | 0 |
| -1 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 |
| 0 | -1 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 |
| 0 | 0 | -1 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 1 |
| 0 | 0 | 0 | -1 |
| 0 | 0 | 0 | 0 |

II. MODELO DE CURO DE CARA CENTRADA

DOS VARIABLES

| X1 | X2 |
|----|----|
| -1 | -1 |
| -1 | 1 |
| 1 | -1 |
| 1 | 1 |
| 0 | 0 |
| -a | 0 |
| a | 0 |

TRES VARIABLES

| X1 | X2 | X3 |
|----|----|----|
| -1 | -1 | -1 |
| -1 | -1 | 1 |
| -1 | 1 | -1 |
| -1 | 1 | 1 |
| 1 | -1 | -1 |
| 1 | -1 | 1 |
| 1 | 1 | -1 |
| 1 | 1 | 1 |
| -a | 0 | 0 |
| a | 0 | 0 |
| 0 | -a | 0 |
| 0 | a | 0 |
| 0 | 0 | -a |
| 0 | 0 | a |

CUATRO VARIABLES

| X1 | X2 | X3 | X4 |
|----|----|----|----|
| -1 | -1 | -1 | -1 |
| -1 | -1 | -1 | 1 |
| -1 | -1 | 1 | -1 |
| -1 | -1 | 1 | 1 |
| -1 | 1 | -1 | -1 |
| -1 | 1 | -1 | 1 |
| -1 | 1 | 1 | -1 |
| -1 | 1 | 1 | 1 |
| 1 | -1 | -1 | -1 |
| 1 | -1 | -1 | 1 |
| 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 |
| -a | 0 | 0 | 0 |
| a | 0 | 0 | 0 |
| 0 | -a | 0 | 0 |
| 0 | a | 0 | 0 |
| 0 | 0 | -a | 0 |
| 0 | 0 | a | 0 |
| 0 | 0 | 0 | -a |
| 0 | 0 | 0 | a |

III. MODELOS DE BOX-BEHNKEN

DOS VARIABLES

| X1 | X2 |
|----|----|
| -1 | -1 |
| 1 | -1 |
| -1 | 1 |
| 1 | 1 |
| -1 | 0 |
| 1 | 0 |
| 0 | -1 |
| 0 | 1 |
| 0 | 0 |

TRES VARIABLES

| X1 | X2 | X3 |
|----|----|----|
| -1 | -1 | 0 |
| 1 | -1 | 0 |
| -1 | 1 | 0 |
| 1 | 1 | 0 |
| -1 | 0 | -1 |
| 1 | 0 | -1 |
| -1 | 0 | 1 |
| 1 | 0 | 1 |
| 0 | -1 | -1 |
| 0 | 1 | -1 |
| 0 | -1 | 1 |
| 0 | 1 | 1 |
| 0 | 0 | 0 |

CUATRO VARIABLES

| X1 | X2 | X3 | X4 |
|----|----|----|----|
| -1 | -1 | -1 | 0 |
| 1 | -1 | -1 | 0 |
| -1 | 1 | -1 | 0 |
| 1 | 1 | -1 | 0 |
| -1 | -1 | 1 | 0 |
| 1 | -1 | 1 | 0 |
| -1 | 1 | 1 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 0 |
| -1 | -1 | 0 | -1 |
| 1 | -1 | 0 | -1 |
| -1 | 1 | 0 | -1 |
| 1 | 1 | 0 | -1 |
| -1 | -1 | 0 | 1 |
| 1 | -1 | 0 | 1 |
| -1 | 1 | 0 | 1 |
| 1 | 0 | -1 | -1 |
| -1 | 0 | -1 | -1 |
| 1 | 0 | 1 | -1 |
| -1 | 0 | 1 | -1 |
| 1 | 0 | 1 | 1 |
| -1 | 0 | 1 | 1 |
| 1 | 0 | 1 | 1 |
| 0 | -1 | -1 | -1 |
| 0 | 1 | -1 | -1 |
| 0 | -1 | 1 | -1 |
| 0 | 1 | 1 | -1 |
| 0 | -1 | -1 | 1 |
| 0 | 1 | -1 | 1 |
| 0 | -1 | 1 | 1 |
| 0 | 1 | 1 | 1 |
| 0 | 0 | 0 | 0 |

APENDICE II
"ALGEBRA MATRICIAL"

APENDICE II

ALGEBRA MATRICIAL

Matrices, Vectores y Escalares

Una matriz M de $p \times q$ es un arreglo rectangular de números que contiene p renglones y q columnas escrita de la siguiente forma:

$$M = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1q} \\ m_{21} & m_{22} & \dots & m_{2q} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ m_{p1} & m_{p2} & \dots & m_{pq} \end{bmatrix}$$

Por ejemplo,

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 3 & 7 \\ -1 & 0 & 2 & 2 \\ 6 & 5 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

es una matriz de 3×4 . Una matriz que tiene un solo renglón se llama vector de renglón y una matriz con una sola columna se llama vector de columna.

Por ejemplo

$$a = \{1, 6, 3, 2, 1\} \quad b = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Un vector de 1×1 se le llama un escalar.

Igualdad

Dos matrices son iguales si y sólo si sus dimensiones son idénticas y tienen los mismos números en las mismas posiciones. Por lo tanto, la igualdad de matrices implica tantas igualdades individuales como términos tenga la matriz.

Suma y Diferencia

La suma (o diferencia) de dos matrices es la matriz cuyos elementos son la suma (o diferencia) de los elementos correspondientes de las matrices sumadas (o restadas). Por ejemplo:

$$\begin{bmatrix} 7 & 6 & 9 \\ 4 & 2 & 1 \\ 6 & 5 & 3 \\ 2 & 1 & 4 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ -1 & 3 & -2 \\ 6 & 2 & 1 \\ 7 & 0 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & 5 \\ 5 & -1 & 3 \\ 0 & 3 & 2 \\ -5 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Las matrices deben ser exactamente de las mismas dimensiones para que se puedan sumar o restar.

Trasposición

La traspuesta de una matriz M es una matriz M' cuyos renglones son las columnas de M y cuyas columnas son los renglones de M en el mismo orden original. Por lo tanto, para M y A definidas previamente

$$M' = \begin{pmatrix} m11 & m21 & \dots & mp1 \\ m12 & m22 & \dots & mp2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ m1q & m2q & \dots & mpq \end{pmatrix}$$

$$A' = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 6 \\ 0 & 5 & 1 \\ 2 & -2 & 3 \\ 7 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Nota: Los paréntesis de una matriz o vector pueden ser curvos o cuadrados. Con frecuencia se usan mayúsculas para denotar matrices y minúsculas para los vectores

Simetría

Una matriz M se dice que es simétrica si $M' = M$.

Multiplicación

Suponer que tenemos dos matrices, A , que es $p \times q$, y B , que es $r \times s$. Son conformables por el producto $C = AB$ sólo si $q = r$. El producto resultante es una matriz $p \times s$, el procedimiento de multiplicación es el siguiente:

$$A = \begin{pmatrix} a11 & a12 & \dots & a1q \\ a21 & a22 & \dots & a2q \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ ap1 & ap2 & \dots & apq \end{pmatrix} \quad p \times q$$

$$B = \begin{pmatrix} b11 & b12 & \dots & b1s \\ b21 & b22 & \dots & b2s \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ bq1 & bq2 & \dots & bq_s \end{pmatrix} \quad q \times s$$

y el producto es

$$AB = C = \begin{pmatrix} c11 & c12 & \dots & c1s \\ c21 & c22 & \dots & c2s \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ cp1 & cp2 & \dots & cps \end{pmatrix} \quad p \times s$$

$$c_{ij} = \sum_k a_{ik} b_{kj}$$

Es decir que el número en el renglón i y la columna j de C es el producto del renglón i de A con la columna j de B .

Por ejemplo,

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 0 & -1 \\ -2 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

2 x 3 3 x 3

$$= \begin{bmatrix} 1(1) + 2(4) + 1(-2) & 1(2) + 2(0) + 1(1) & 1(3) + 2(-1) + 1(3) \\ -1(1) + 3(4) + 0(2) & -1(2) + 3(0) + 0(1) & -1(3) + 3(-1) + 0(3) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 7 & 3 & 4 \\ 11 & -2 & -6 \end{bmatrix}$$

2 x 3

Nótese que en general, AB y BA , aún cuando los dos productos son permisibles, no llevan a los mismos resultados. En la multiplicación de matrices, el orden en que las matrices estén arregladas es crucial, mientras el orden de los números en un producto escalar es irrelevante.

Cuando varias matrices y/o vectores se multiplican juntos, el producto se debe llevar a cabo de manera que lleve el menor trabajo. Por ejemplo, el producto

$$\begin{matrix} W & Z & Y \\ p \times p & p \times n & n \times 1 \end{matrix}$$

se puede llevar a cabo como $(WZ)Y$, o como $W(ZY)$ donde el producto entre paréntesis se evalúa primero. En el primer caso tendríamos que multiplicar primero pn de p tamaño y p de n tamaño; en el segundo caso p de p tamaño y p de n tamaño claramente ahorran esfuerzo.

Matrices y Vectores Especiales

Definimos

$$I_n = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ & & & \dots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

una matriz cuadrada de $n \times n$ con 1's en la diagonal y 0's en todos los demás lugares como una matriz unitaria o una matriz identidad. Esto cumple con el mismo papel que el número 1 en aritmética ordinaria. Si el tamaño de I_n es claro desde el contexto, el subscrito n se omite con frecuencia.

Se usa Q para denotar un vector

$$0^n = (0, 0, \dots, 0)$$

o una matriz cuyos valores son todos ceros; el tamaño real de Q es generalmente claro desde el contexto.

También definimos

$$j = (1, 1, \dots, 1)$$

un vector de puros 1's; el tamaño de j o bien es especificado o claro desde el contexto.

Ortogonalidad

Un vector $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ se dice que es ortogonal a un vector $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ si la suma de productos de sus elementos es cero, es decir, si

$$a \cdot b = a' b = b' a = 0$$

Matriz Inversa

El inverso M^{-1} de una matriz cuadrada M es la matriz única tal que

$$M^{-1}M = I = MM^{-1}$$

Las columnas m_1, m_2, \dots, m_n de una matriz $n \times n$ son linealmente dependientes si existen constante $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, no todas ceros tal que

$$\lambda_1 m_1 + \lambda_2 m_2 + \dots + \lambda_n m_n = 0$$

y similarmente para los renglones. Una matriz cuadrada que tiene algunas columnas (o renglones) que son linealmente dependientes se dice que es singular y que no posee una inversa. Una matriz cuadrada que no es singular puede ser invertida. Si M es simétrica, también lo es M^{-1} .

Obtención de Inversos

El proceso de inversión de matrices es algo complicado, y por eso lo explicaremos por medio de un ejemplo. Suponer que queremos obtener el inverso M^{-1} de la matriz

$$M = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 5 \\ 1 & 2 & 6 \\ 7 & 1 & 9 \end{bmatrix}$$

Sea

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$$

Y tenemos que encontrar (a, b, c, \dots, h, k) tal que

$$\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 4 & 5 \\ 1 & 2 & 6 \\ 7 & 1 & 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

esto es,

$$\begin{array}{lcl} 3a + b + 7c = 1, & 3d + e + 7f = 0, & 3g + h + 7k = 0 \\ 4a + 2b + c = 0, & 4d + 2e + f = 1, & 4g + 2h + k = 0 \\ 5a + 6b + 9c = 0, & 5d + 6e + 9f = 0, & 5g + 6h + 9k = 1. \end{array}$$

Resolviendo estas tres series de tres ecuaciones lineales simultáneas tenemos

$$M^{-1} \begin{bmatrix} 12/103 & 31/103 & 14/103 \\ 33/103 & -8/103 & -13/103 \\ -13/103 & 25/103 & 2/103 \end{bmatrix} = \frac{1}{103} \begin{bmatrix} 12 & -31 & 14 \\ 33 & -8 & -13 \\ -13 & 25 & 2 \end{bmatrix}$$

En general para una matriz $n \times n$ habrá n series de n ecuaciones lineales simultáneas.

Determinantes

Una cantidad importantes asociada con una matriz cuadrada es su determinante. Los determinantes ocurren en la solución de ecuaciones lineales simultáneas y en la inversión de matrices. Para una matriz 2×2

$$M = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

$$\det M = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

Para una matriz 3 x 3

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix}$$

es

$$a \begin{vmatrix} e & f \\ h & k \end{vmatrix} - b \begin{vmatrix} d & f \\ g & k \end{vmatrix} + c \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix} = aek - afh - bdk + bfg + cdh + ceg$$

Nótese que expandemos por el primer renglón multiplicando a por el determinante de la matriz que queda cuando eliminamos el renglón y la columna que contienen a , multiplicando b por el determinante de la matriz que queda cuando eliminamos la columna y renglón que contienen a b , multiplicando c por el determinante que queda cuando eliminamos a la columna y renglón que contienen a c . Se usan signos alternados +, -, +... para estos tres términos.

De hecho, el determinante se puede escribir como la expansión de cualquier renglón o columna por la misma técnica. Los signos se usan + - + -, desde la esquina de arriba e izquierda alternando ya sea por columna o por renglón. En otras palabras

$$\begin{matrix} + & - & + \\ + & - & + \\ + & - & + \end{matrix}$$

Se usa el mismo principio para obtener el determinante de cualquier matriz. Cualquier renglón o columna se usa para la expansión y multiplicamos cada elemento de la columna o fila por:

1. Su signo apropiado.
2. El determinante de la submatriz obtenido mediante la eliminación de la columna o renglón donde se encuentra el elemento de la matriz original.

Los determinantes surgen en la inversión de matrices de la siguiente manera. El inverso M^{-1} puede obtenerse reemplazando cada elemento m_{ij} de la matriz original M por un elemento que se calcula así:

1. Encuentre el determinante de la submatriz obtenido mediante la eliminación de la columna y renglón de M donde mij se encuentra.
2. Asígneles el signo + - + - como se explicó anteriormente.
3. Divida el determinante entre M.k

Quando todos los elementos de M hayan sido reemplazados, transponga la matriz resultante. La traspuesta será M^{-1} .

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} d/D & b/D \\ c/D & d/D \end{bmatrix}$$

donde $D = ad - bc$ es el determinante de M; y donde

$$Q^{-1} d = \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A & B & C \\ D & E & F \\ G & H & I \end{bmatrix}$$

donde

$$A = (ae - fh)/Z, \quad B = -(bk - ch)/Z, \quad C = (bf - ce)/Z,$$

$$D = -(dk - fg)/Z, \quad E = (ak - cg)/Z, \quad F = -(af - cd)/Z,$$

$$G = (dh - eg)/Z, \quad H = -(ah - bg)/Z, \quad K = (ae - bd)/Z,$$

y donde

$$Z = aek + bfg + cdh - afh - bdk - ceg$$

es el determinante de Q. Nótese que, si M es simétrica ($b = c$), M^{-1} también es simétrica. También que si Q es simétrica ($b=d$, $c=g$, $f=h$), entonces Q^{-1} también es simétrica porque $B = D$, $C = G$ y $F = H$.

Factores Comunes

Si cada elemento de una matriz tiene un factor común, se puede sacar fuera de la matriz. Si una matriz se multiplica por una constante \underline{g} , cada elemento de la matriz se multiplica por \underline{g} . Por ejemplo,

$$\begin{bmatrix} 4 & 6 & -2 \\ 8 & 6 & 2 \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 4 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

Si una matriz es cuadrada y de tamaño $p \times p$, y si \underline{c} es un factor común, entonces el determinante de la matriz tiene un factor \underline{c}^p no solamente \underline{c} . Por ejemplo,

$$\begin{bmatrix} 4 & 6 \\ 8 & 6 \end{bmatrix} = 2 \cdot 2 \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 3 \end{bmatrix} = 2 \cdot 2(6 - 12) = -24$$

APENDICE III

**"MINIMOS CUADRADOS PARA
SUPERFICIES DE RESPUESTAS"**

APENDICE III

MINIMOS CUADRADOS PARA SUPERFICIE DE RESPUESTAS

En este apéndice se enfatizarán algunos conceptos sobre el método de mínimos cuadrados que sirve para encontrar los valores de los parámetros del polinomio que describe determinado sistema. Esto se hace a partir de datos experimentales.

Generalidades

Antes de empezar, quisiéramos aclarar el concepto de modelo lineal. Es común encontrar la asociación del término "modelo lineal" con la relación de línea recta de la forma $y_i = B_0 + B_1x_i$ donde y_i es la variable dependiente, x_i es la variable independiente, y B_0 y B_1 los parámetros del modelo (pendiente y ordenada al origen respectivamente). Es cierto que ese modelo es lineal, pero no porque al graficarlo obtengamos una línea recta, sino porque esta formado por términos aditivos, cada uno de los cuales contiene uno y solamente un parámetro multiplicando a la variable independiente. Es decir, es un modelo lineal en sus parámetros. La definición de primer orden incluye sin embargo modelos que no son de primer orden en las variables independientes. El modelo

$$y_i = B_0 + B_1x_i + B_2x_i^2 + B_3\log(x_i) + B_4x_i^2$$

es un modelo lineal de acuerdo a la definición anterior. El modelo

$$y_i = B_1(\exp(-B_2x_i))$$

es un modelo no lineal porque contiene más de un parámetro en un mismo término. Es posible linealizar algunos modelos como éste. Sacando el logaritmo natural de cada lado de la ecuación, nos daría un modelo lineal en los parámetros B_1 y B_2 : $\ln(y_i) = B_1' - B_2x_i$, donde $B_1' = \ln(B_1)$. Nosotros nos vamos a limitar a hablar sobre los modelos que son lineales en los parámetros.

Existen varios tipos de modelos entre los que se encuentran:

1- Modelos Determinísticos

$$y_i = B_0$$

que no toman en cuenta la posibilidad de incertidumbre.

2- Modelos Probabilísticos

$$y_{11} = r_{11}$$

donde r_{11} es el residual o la desviación que existe de la respuesta observada y la que el modelo predice. No es la diferencia entre la respuesta observada y el promedio de respuestas. r_{11} no es un parámetro sino un valor cualquiera que sale de una muestra de desviaciones posibles.

3- Modelos Proporcionales, que son modelos determinísticos que indican una relación proporcional entre la respuesta y la variable.

$$y_{11} = B_1 x_{11}$$

Donde B_1 es un parámetro que expresa el efecto del factor x_1 y la respuesta y_1 .

4- Modelos Multiparamétricos, como podrían ser:

$$y_{11} = B_0 + r_{11} \quad \dots 1$$

$$y_{11} = B_1 x_{11} + r_{11} \quad \dots 2$$

$$y_{11} = B_0 + B_1 x_{11} \quad \dots 3$$

$$y_{11} = B_0 + B_1 x_{11} + r_{11} \quad \dots 4$$

Con una sola observación de respuesta no es posible asignarles valores únicos a los parámetros. Para los modelos 1 y 2, podemos restringir los grados de libertad poniendo como condición que el residual sea lo más pequeño posible (cero). Esto no es así para los otros modelos, para los que es necesaria más de una observación.

Sin embargo, debemos notar que si no tenemos más conocimiento sobre el sistema no podemos atribuir una respuesta a un efecto constante, a la incertidumbre, a un efecto proporcional o a una mezcla de éstos. Un sólo experimento no nos da la información necesaria del efecto de la variable x en el sistema.

Mínimos Cuadrados Matriciales

Para deducir la fórmula usada para el método de mínimos cuadrados vamos a considerar el modelo probabilístico

$$y_{11} = B_0 + r_{11}$$

Como se puede observar, la respuesta no es función de ningún factor. Para un modelo como éste, el cálculo que obtenemos como B_0 , (al cual le damos el símbolo b_0), es la media de las dos respuestas, y_{11} y y_{12} .

La matriz R, multiplicada por su traspuesta

$$R' = (r11 \ r12)$$

da la suma de cuadrados de los residuales (SSr)

$$SSr = R'R = (r11 \ r12) \begin{bmatrix} r11 \\ r12 \end{bmatrix} = (r11^2 + r12^2)$$

Aunque la demostración de lo siguiente va más allá del propósito de este trabajo, se puede mostrar que la derivada parcial de la suma de cuadrados de los residuales con respecto a la matriz B nos da, en expresión matricial

$$\begin{aligned} R'R &= (Y - XB)'(Y - XB) \\ d(R'R)/dB &= d((Y - XB))/dB \\ &= X'(Y - XB) \\ &= X'Y - X'XB \end{aligned}$$

Si igualamos a cero esta derivada parcial (punto en el cual, la suma de cuadrados será mínima) obtenemos la ecuación matricial

$$X'XB = X'Y$$

Si pasamos dividiendo $X'X$ para despejar B tenemos

$$B = (X'X)^{-1}(X'Y)$$

Esta es la solución matricial general para obtener el grupo de b's el cual nos da la mínima suma de cuadrados. Repetimos que esta solución es solamente válida para los modelos que son lineales en los parámetros.

Ejemplo

Vamos a ejemplificar el uso del método con la siguiente investigación de laboratorio (1):

El objeto de esta investigación es encontrar los valores de tiempo (t) y temperatura (T) que produzcan un rendimiento máximo. Las mejores condiciones hasta ahora conocidas son de $t = 75$ minutos y $T = 130^{\circ}\text{C}$.

Empezando con los valores de condiciones conocidos, el investigador varió el tiempo de 70 a 80 minutos y la temperatura de 127.5 a 132.5 $^{\circ}\text{C}$ de acuerdo al diseño de la tabla 4.3.3. El diseño empleado es un diseño factorial 2² de primer grado, pues solamente sirve para ajustar un polinomio de primer grado.

$$y = R_0 + B_1x_1 + B_2x_2 + e$$

Se escogió este diseño, ya que en esta etapa el investigador sabía que no estaba muy cerca del máximo, ya que estaba en las etapas iniciales. En estas circunstancias, era posible que las características predominantes de la superficie se pudieran representar mediante un modelo planar que tuviera pendiente B1 en la dirección x1 y pendiente B2 en la dirección x2.

Tabla

| corrida | variables en sus valores originales | | variables codificadas | | respuesta: |
|---------|-------------------------------------|------------|-----------------------|----------|------------------------|
| | tiempo (min) | Temp. (°C) | tiempo x1 | Temp. x2 | rendimiento (gramos) y |
| 1 | 70 | 127.5 | -1 | -1 | 54.3 |
| 2 | 80 | 127.5 | +1 | -1 | 60.3 |
| 3 | 70 | 132.5 | -1 | +1 | 64.6 |
| 4 | 80 | 132.5 | +1 | +1 | 68.0 |

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

$$X'Y = \begin{bmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 54.3 \\ 60.3 \\ 64.6 \\ 68.6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 247.2 \\ -9.4 \\ -18 \end{bmatrix}$$

$$(X'X)^{-1}(X'Y) = B = \begin{bmatrix} 61.80 \\ 2.35 \\ 4.50 \end{bmatrix}$$

y el modelo que predice el sistema sería:

$$y = 61.8 + 2.35x_1 + 4.5x_2$$

(1) Este ejemplo es el mismo que se usó en la sección primera de este capítulo. Proviene del libro "Statistics for Experimenters" de George E. P. Box.

BIBLIOGRAFIA

LIBROS

- Martínez Garza A.
"Diseño Experimental. Métodos y Elementos de Teoría"
Ed. Trillas, 1988
- Myers Raymond H.
"Response Surface Methodology"
1976
- Box George E. P., Draper Norman R.
"Evolutionary Operations"
Ed. John Wiley & Sons, 1987
- Du Pont Co. Course
"Strategy of Experimentation"
1987
- Box George E. P., Hunter William G., Hunter Stuart J.
"Statistics for Experimenters. An Introduction to Design, Data Analysis and Model Building"
Ed. John Wiley & Sons, 1978
- Deming Stanley N., Morgan Stephen L.
"Experimental Design: A Chemometric Approach"
Ed. Elsevier, 1987
- Ishikawa Kaoru
"Guide to Quality Control"
Asian Productivity Organization, Tokio, 1982
- Taguchi Genichi
"Introduction to Quality Engineer. Design Quality into Products and Processes"
Asian Productivity Organization, Tokio, 1986
- Becker G. H.
"Models for the Response of a Mixture"
1967
- Spiegel R.
"Probabilidad y Estadística"
Ed. Mc Graw Hill, 1989

LIBROS

- Obregon Sanin
"Teoría de la Probabilidad"
Ed. Limusa, 1984
- INIQ, Curso
"Diseño de Experimentos Aplicado en Mezclas"
1989
- Grant & Leavanworth
"Control de Calidad Estadístico"
1978
- Deming W. Edward
"Quality Productivity and Competitive Position"
1989
- Anderson & McLean
"Design of Experiments, a Realistic Approach"
Marcel Dekker, N.Y. 1976
- Robinson R. K.
"Dairy Microbiology" (Vol. 2)
Applied Science Publishers
- Rosell
"Métodos Analíticos de Laboratorio Lactobiológico"
Cd. Labor, S.A., 1952
- Pederson Carl S.
"Microbiology of Food Fermentation"
The Avi Publishing Co. Inc. 1971
- Lloyd J., Henderson
"The Fluid Milk Industry"
The Avi Publishing Co. Inc. 1971

- Hunter W. G. and Hoff W. E.
"Planning Experiments to Increase Research Efficiency"
Industrial and Engineering Chemistry
Vol. 59, March 1967

- Sater Vernon E. and Stevenson Dee F.
"Use of Statistical Experimental Design in a Kinetics Study"
Industrial Engineer Chemical Process Development
Vol. 11, Nu. 3, 1970

- Williams K. R.
"Comparing Screening Designs"
Industrial and Engineering Chemistry
Vol. 55, June 1966

- Leggett J. D.
"Instrumental Simplex Optimization"
September 1983

- Snee, R.D., Marquardt
"Extreme Vertices Designs for Linear Mixture Models"
Technometrics
Vol. 16, Nu. 3, August 1974

- Gorman J. W. and Herman E. J.
"Simplex Lattice Designs for Multicomponent Systems"
Technometrics
Vol. 4, Nu. 4, November 1962

- Smith H. and Rose A.
"Subjective Responses in Process Investigation"
Industrial and Engineering Chemistry
Vol. 55, July 1963

- Cuthber Daniel
"Efficient Screening of Process Investigation"
Industrial and Engineering Chemistry
Vol. 58, February 1960

ARTICULOS DE REVISTAS

- Hahn Gerald J., Wecker William O., Feeder Paul I.
"The Evaluation and Comparison of Experimental Designs for Fitting Regression Relationships"
Journal of Quality Technology
Vol. 8, Nu. 3, July 1976

- Atkinson Anthony C.
"Statistical Designs for a Pilot Plant and Laboratory Experiments Part I"
Chemical Engineering
May, 1966

- Atkinson Anthony C.
"Statistical Designs for a Pilot Plant and Laboratory Experiments Part II"
Chemical Engineering
June, 1966

- Wooderjee Pradip K.
"Formulating with Computers"
Chemtech
October 1985

- Kurotori I. S.
"Experiments with Mixtures of Components having lower Bounds"
Industrial Quality Control

- Koons George F., Heasley Robert H.
"Response Surface Contour Plots for Mixture Problems"
Journal of Quality Technology
Vol. 13, Nu. 3, July 1981

- Snee R. D.
"Experimenting with Mixtures"
Chemtech
November 1979

- Hunter Stuart
"In Plant Experimentation"
Chemical Engineering
March 28, 1966

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

ARTICULOS DE REVISTAS

- Snee & Marquardt
"Screening Concepts & Designs for Experiments with Mixtures"
Technometrics
Vol. 18, Nu. 1, February 1976
- Kackar Raghu N.
"Off-Line Quality Control, Parameter Design and the Taguchi Method"
Journal of Quality Technology
Vol. 17, Nu. 4, October 1985
- Lind Elmer E., Hickman John B., Goldin J.
"Fitting Yield and Cost Response Surfaces"
Chemical Engineering Progress
Vol. 56, Nu. 11, 1960