



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

Optimización de Procesos de Manufactura con Arreglos de  
Tratamientos Factoriales y/o con Mezclas de Componentes  
(Formulaciones Industriales), utilizando la Metodología  
de Superficie de Respuesta

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

A C T U A R I O

P R E S E N T A:

Perseo Carlos Duarte Arreola



DIRECTOR DE TESIS:

M. en C. Inocencio Rafael Madrid Ríos

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2018



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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 esta 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.

1. Datos del alumno

Duarte

Arreola

Perseo Carlos

Tel. 55 19 44 16

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Actuaría

401047381

2. Datos del tutor

M. en C.

Madrid

Ríos

Inocencio Rafael

3. Datos del sinodal 1

Dra.

Alonso

Reyes

María del Pilar

4. Datos del sinodal 2

Mat.

Chávez

Cano

Margarita Elvira

5. Datos del sinodal 3

Act.

Sánchez

Villarreal

Francisco

6. Datos del sinodal 4

M. en E.

Romero

Mares

Patricia Isabel

7. Datos de la tesis

Optimización de Procesos de Manufactura con Arreglos de Tratamientos Factoriales y/o con Mezclas de Componentes (Formulaciones Industriales), utilizando la Metodología de Superficie de Respuesta

167 p.

2018

## Prefacio

La motivación para realizar este trabajo en el área de experimentación industrial surgió al pretender entender el siguiente texto que me pareció de gran interés.

“Cuando se habla de un proceso de producción en la industria, se tiene que hacer referencia a la manera en que se produjo dicho producto experimentalmente, de tal forma que sea el mejor posible para asegurar su competencia en el mercado. En el pasado el sector productivo no prestaba atención a las necesidades del consumidor en cuanto a las características del artículo producido, sino fue hasta la Segunda Guerra Mundial cuando surgió el concepto de calidad como un juicio sobre las características de los bienes que se producen. Es hasta la década de los 80s que el concepto de Control de Calidad llega a México como una metodología para mejorar los procesos de producción, no obstante son pocas las empresas mexicanas que actualmente han implementado programas de calidad haciendo uso de la Metodología de Superficie de Respuesta. Usualmente la metodología está fundamentada en gran parte en el estudio de la determinación del óptimo para procesos industriales con arreglos de tratamientos factoriales, no obstante cuando se investigan formulaciones industriales se usan los diseños o arreglos de tratamientos con mezclas de los componentes.”

Este trabajo surgió entonces para explicar y aplicar la metodología estadística de optimización de la(s) respuesta(s) conocida como Metodología de Superficie de Respuesta (MSR), tanto para diseños o arreglos de tratamientos sin mezclas o factoriales, como para diseños con mezclas; modelando estadísticamente las combinaciones de los factores (o componentes) que influyen en la respuesta para lograr la producción óptima, representándola tanto estadística como gráficamente con superficies y contornos.



## Prólogo

En este trabajo se realizará una revisión breve del Modelo de Regresión Lineal General o Múltiple, haciendo énfasis en una explicación de la estructura de la matriz de diseño  $X$  de la investigación de las variables explicativas  $X_s$  de la respuesta. Para el Modelo de Diseño de Experimentos, se comentarán los enfoques de análisis para la experimentación vinculados con el Modelo de Regresión. En particular se aplicarán técnicas de optimización en la industria mediante experimentación secuencial, considerando el enfoque de metodología de superficie de respuesta (para diseños de tratamientos sin mezclas).

En particular en los modelos de optimización se presentarán algunas aplicaciones donde el análisis del modelo se hará con software convencional utilizado en la industria, como es el paquete *StatGraphics Centurion*.

La Metodología de Superficie de Respuesta (MSR) en arreglos de tratamientos factoriales estudia la influencia de varias variables explicativas y la interacción entre ellas para explicar una o más variables de respuesta bajo estudio. La idea principal de la MSR es utilizar un procedimiento de experimentación secuencial para optimizar la respuesta. Para ello Box y Wilson sugieren modelos de Polinomios Ortogonales de primer o segundo orden, según se esté lejos o cerca de la región óptima respectivamente; estos modelos son una aproximación adecuada fácil de aplicarse.

El inicio de la MSR parte con la selección de los factores que potencialmente determinan el óptimo, para lograrlo se realiza lo que comúnmente se denomina un barrido, filtrado o diagnóstico de factores con el cual se determinan los factores potenciales para la optimización. A continuación se realiza una experimentación secuencial considerando dos niveles de cada uno de los factores, uno por arriba del nivel estándar del factor y otro abajo, a la misma distancia del valor estándar. El nivel estándar antes mencionado corresponde al valor utilizado en el proceso de producción cotidianamente. A este valor también se le llama Punto Central del experimento. Considerando repeticiones de este punto y la combinación de niveles altos y bajos de los factores (Arreglo Factorial con  $k$  factores y dos niveles cada uno), se emplean Polinomios Ortogonales de Primer Orden que se usan cuando no se sabe si se está cerca o lejos de la Región Óptima. Finalmente se determina el óptimo y se caracteriza la Región Óptima de la respuesta, que es representada con la Ecuación Canónica. Para ello se consideran otros puntos o tratamientos adicionales aparte de los puntos centrales de ser necesario, como lo son los Puntos Estrella o Axiales, con los cuales se consideran modelos de segundo orden para realizar comparaciones

válidas con los modelos de diseños de experimentos cuando se está cerca del punto óptimo.

La manera de estimar un modelo con polinomios ortogonales de primer orden contempla el uso de un Arreglo de Tratamientos Factorial con una repetición o bien un Factorial Fraccionado. Esto es suficiente para determinar qué variables explicativas tienen un impacto en la variable de respuesta de interés. Una vez que las variables explicativas significativas han sido determinadas, estas se incorporan en un modelo que permitirá utilizar un diseño más complicado al estar más cerca de la Región Óptima, tal como es el Diseño Compuesto Central que sirve para estimar un modelo polinomial ortogonal de segundo grado. El modelo de segundo grado se utilizará para optimizar la respuesta, bien sea para maximizarla o minimizarla, usando gráficas de superficie o contornos; para explicar los efectos de los factores bajo estudio y mediante la ecuación canónica, caracterizar la respuesta.

Para los arreglos de tratamientos con mezclas (la suma de los niveles de los factores que al formar un tratamiento deben sumar el 100%) se sigue un procedimiento más elaborado en la misma dirección que los arreglos de tratamientos factoriales que se comentarán en detalle posteriormente.

# Índice

Prefacio	i
Prólogo	iii
Lista de Tablas	viii
Lista de Figuras y Gráficas	xii
Capítulo 1. La Metodología de Superficie de Respuesta en la Optimización de la Producción Industrial para el Control Estadístico de la Calidad y en la Investigación Científica	1
1.1. El Desarrollo histórico del Control Estadístico de Calidad para la mejora óptima en la industria	1
1.1.1. La escalera de la calidad	2
1.2. Antecedentes Históricos sobre los Modelos de: Regresión Lineal, Diseño de Experimentos y de Optimización	5
1.2.1. El Modelo de Regresión Lineal para estudios observacionales	5
1.2.2. El Modelo de Diseño de Experimentos	8
1.2.3. El Modelo de Optimización Estadística	12
1.2.4. Relación entre el Modelo de Regresión Lineal y el Modelo de Diseño de Experimentos en el Modelo de Optimización Estadística	14
Capítulo 2. Modelo de Regresión Lineal Múltiple	17
2.1. Antecedentes: El Modelo de Regresión Lineal Simple	17
2.1.1. ¿Qué es el Análisis de Regresión?	17
2.2. El Modelo de Regresión Lineal Múltiple o el Análisis de Regresión Lineal General	18
2.2.1. Método de Estimación por Mínimos Cuadrados	19
2.2.2. Prueba para el Ajuste del Modelo Polinomial de Primer Orden para Estudios Observacionales	25
2.3. Prueba de Falta de Ajuste del Modelo Polinomial de Primer Orden	35
2.4. Diferencias entre los estudios Observacionales (Modelos de Regresión) y los estudios Experimentales (Modelo de Diseño de Experimentos) para el análisis de información	47
Capítulo 3. Modelo de Diseño de Experimentos	51
3.1. Introducción	51
3.2. Arreglo de tratamientos con efectos fijos, con un criterio de clasificación cuantitativo para condiciones homogéneas con repeticiones	53
3.3. Arreglo de tratamientos con efectos fijos, con un criterio de clasificación cuantitativo para condiciones heterogéneas	54
3.4. Modelo de diseño de experimentos considerando el criterio de clasificación como cuantitativo, con niveles equiespaciados, para condiciones homogéneas	56
3.4.1. Modelo de Polinomios Ortogonales para Estudios Experimentales	58
3.5. Para el arreglo de tratamientos factorial $2^2$ con factores cuantitativos para condiciones homogéneas con repeticiones	61



3.5.1. Modelo de diseño de experimentos considerando dos criterios de clasificación como cualitativos	61
3.6. Ortogonalidad en la Matriz de Diseños en los MDE	62
Capítulo 4. Diseños de Experimentos con Arreglo de Tratamientos Factorial: Modelos de Optimización Clásicos	65
4.1. Modelos de Optimización en la Industria	65
4.2. Inicio de la Experimentación Secuencial, Filtrado o Diagnóstico de Factores para optimizar la(s) respuesta(s) en consideración: factoriales fraccionados	66
4.2.1. Arreglo de tratamientos factorial fraccionado para condiciones homogéneas	66
4.2.2. Arreglo de tratamientos factorial fraccionado confundidos	68
4.2.3. Diseño de tratamientos en $2^2$ en $2^1$ bloques incompletos cada uno con $2^{2-1}$ tratamientos	69
4.3. Fases de la Optimización utilizando la Metodología de Superficie de Respuesta y el Camino de Ascenso o Descenso por la Pendiente Máxima	76
4.3.1. Fase 1: Inicio de la metodología de superficie de respuesta	76
4.3.2. Fase 2. Continuación de la Experimentación Secuencial con el primer polinomio ortogonal de primer orden para llegar a la Región Óptima cuando se está lejos de ella, en caso de estar cerca pasar a la Fase 4 de la Experimentación	85
4.3.3. Modelos de superficie de respuesta	87
4.3.4. Fase 3. Experimentación Secuencial en la dirección de la Región Óptima, cuando se esté lejos de ella considerando Polinomios de Primer Orden para cada región de exploración propuesta	92
4.3.5. Fase 4. Fin de la Experimentación Secuencial con polinomios de segundo orden para determinar el Óptimo	95
Capítulo 5. Arreglos de Tratamientos de Mezclas en Formulaciones Industriales	103
5.1. Fundamentos para el análisis de los Arreglos de Tratamientos de Mezclas o de Formulaciones Industriales	103
5.2. El Diseño de Arreglos de Tratamientos con Mezclas	104
5.3 Modelos Polinomiales para problemas de mezclas	107
5.3.1 Polinomios Canónicos	107
5.3.2 Polinomio de Scheffé	112
5.4. Mejora continua utilizando los Diseños Mezcla	122
Conclusiones	125
Apéndices	127
Apéndice I. Tipificación de grupos de Factores de Proceso de Manufactura o Producción	129
Apéndice II. Programa de cómputo	131
Apéndice III. Ejemplo de un Diseño Compuesto Central rotatable con tres factores y una respuesta	133

Apéndice IV. Retículo Simplex aumentado con tres componentes y una respuesta, en un ejemplo con dos respuestas	139
Apéndice V. Diseño Simplex con restricciones y el uso de pseudo componentes	145
Anexos	151
Anexo I. La clasificación de líneas de producción de procesos industriales	153
Anexo II. Diseño Robusto de Taguchi en la optimización de procesos industriales	159
Anexo III. El Poder Seis Sigma para la optimización de procesos administrativos	165
Bibliografía	167

## Lista de Tablas

Tabla 2.1. Diferentes modelos de regresión lineal, de acuerdo al grado del polinomio y su correspondiente matriz de Diseño X	21
Tabla 2.2. Tabla ANDVAI para el Modelo de Regresión Lineal Múltiple $Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$	28
Tabla 2.3. ANDVAII para el MRLM: $Y_i - \bar{Y}_{..} = \sum_{j=1}^k \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$	31
Tabla 2.4. Coeficientes para el MRLM: $Y_i - \bar{Y} = \sum_{j=1}^k \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$	33
Tabla 2.5. Algunos patrones de residuales comunes	35
Tabla 2.6. Tabla ANDVAIII para el MRLM para la prueba de falta de ajuste: $Y_{lr} - \bar{Y}_{..} = \sum_{j=1}^k \beta_j X_{jl} + \varepsilon(\varphi_l + \psi_r)_{lr}$	42
Tabla 2.7. Resultados del experimento para el estudio de duración de herramienta de corte	43
Tabla 2.8. ANDVAIII para el ejemplo de duración de herramienta de corte, con modelo ajustado $Y_i - \bar{Y} = \sum_{j=1}^2 \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$	45
Tabla 2.9. Prueba de hipótesis para los coeficientes del modelo polinomial de primer orden, para el ejemplo de duración de herramienta de corte	46
Tabla 2.10. Tabla ANDVAIII para probar falta de ajuste de la duración de herramienta de corte para el MRLM: $Y_{lr} - \bar{Y}_{..} = \sum_{j=1}^2 \beta_j X_{jl} + \varepsilon(\varphi_l + \psi_r)_{lr}$	47
Tabla 3.1. Tiempo de inmersión de 30 segundos para aguacates afectados por pudrición de pedúnculo	56
Tabla 3.2. Tabla ANDVA para estudio de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo	56
Tabla 3.3. Tabla de efectos para el ejemplo de los aguacates afectados por pudrición de pedúnculo	57
Tabla 3.4. Tabla ANDVA para el efecto del modelo polinomial de grado lineal, para el ejemplo de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo	60
Tabla 3.5. Tabla para los coeficientes del modelo polinomial de primer orden, para el ejemplo de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo	60
Tabla 4.1. Valores de respuesta de los tratamientos para la fracción principal del factorial $2^5$	72
Tabla 4.2. Grupos alias en el diseño factorial, para la fracción principal del diseño factorial $2^5$	73
Tabla 4.3. Tabla ANDVA para efectos significativos del factorial $2^5$ y su estimación, para la producción de semiconductores	75

Tabla 4.4. Características de los factores bajo estudio para el equipo de afilado	82
Tabla 4.5. Parte de la Matriz de Diseño para los factores bajo estudio y la vibración observada en el equipo de afilado	82
Tabla 4.6. Estructura alias del diseño $2^{7-4}$	83
Tabla 4.7. Estimación de los siete efectos principales para el estudio de la vibración en el equipo de afilado	83
Tabla 4.8. ANDVA para el estudio de los efectos de A, C y D del estudio de la vibración en el equipo de afilado	84
Tabla 4.9. ANDVA para un modelo de diseño de experimentos factorial $2^2$ sin repeticiones: $y_{ij} = \mu + \delta_i + \gamma_j + \delta\gamma_{ij} + \varepsilon_{ij}$	86
Tabla 4.10. Tabla ANDVA para un diseño factorial $2^k$ con k variables binarias para un Modelo Polinomial de Primer Orden $y_i = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon_i$	86
Tabla 4.11. Datos para el ajuste de un modelo lineal para la producción de una reacción química	90
Tabla 4.12. Tabla ANDVA para el modelo $y_{ij} = \mu + \delta_i + \gamma_j + \delta\gamma_{ij} + \varepsilon_{ij}$ de la producción de una reacción química	91
Tabla 4.13. Tabla de valores estimados de los parámetros del ejemplo de la producción de una reacción química	94
Tabla 4.14. Camino de acenso por la pendiente máxima, información tabular para la producción de una reacción química	94
Tabla 4.15. Datos originales y codificados para el ajuste de un modelo lineal para la producción de una reacción química, etapa 2	95
Tabla 4.16. Tabla ANDVA para la Fase 3 del ejemplo de la producción de una reacción química	95
Tabla 4.17. Valores codificados para los puntos axiales, el valor de $\lambda = \sqrt{2}$	97
Tabla 4.18. Datos originales y codificados de los puntos axiales y centrales considerados para que junto con los datos de la tabla 4.15 se realice un ajuste de un modelo cuadrático para la producción de una reacción química, etapa 3	97
Tabla 4.19. Tabla ANDVA para la fase final de la producción de una reacción química	98
Tabla 4.20. Tabla de coeficientes del modelo para la producción de una reacción química, fase final	98
Tabla 5.1. Número de puntos experimentales en mallas con retículo simplex (q, m) para $3 \leq q \leq 10$ , $1 \leq m \leq 4$ , donde el número de niveles para cada componente es $m+1$	106

Tabla 5.2. Número de términos en los polinomios canónicos para el número de componentes de 2 hasta $q$	110
Tabla 5.3. Nomenclatura de la respuesta de Scheffé para tres y cuatro componentes para la mezcla	114
Tabla 5.4. Valores de estiramiento observado, para la producción de hilo con fibra trenzada	117
Tabla 5.5. Tabla ANDVA de los posibles polinomios canónicos, para la producción de hilo con fibra trenzada	118
Tabla 5.6. Coeficientes de determinación, para posibles polinomios canónicos la producción de hilo con fibra trenzada	118
Tabla 5.7. Tabla ANDVA del polinomio canónico cuadrático la producción de hilo con fibra trenzada	118
Tabla 5.8. Estimación de los coeficientes del polinomio canónico cuadrático la producción de hilo con fibra trenzada	118
Tabla 5.9. Tasas de octano en el experimento de mezclas de gasolina	120
Tabla 5.10. Tabla ANDVA de los posibles polinomios canónicos para el experimento de mezclas de gasolina	121
Tabla 5.11. Tabla ANDVA falta de ajuste para el polinomio canónico lineal, para el experimento de mezclas de gasolina	121
Tabla 5.12. Parámetros para el polinomio canónico lineal para el experimento de mezclas de gasolina	122
Tabla AIII.1 Datos del diseño de experimentos central compuesto rotatable, con cinco puntos centrales, para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan	133
Tabla AIII.2. Tabla ANDVA para el estudio de los factores, sus interacciones y los efectos de segundo orden, así como el análisis de falta de ajuste para el modelo polinomial de segundo orden, para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan	134
Tabla AIII.3. Tabla de efectos para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan	135
Tabla AIII.4 Tabla de coeficientes para el modelo polinomial de segundo orden, para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan	136
Tabla AIV.1. Mezclas y resultados para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	139
Tabla AIV.2. Tabla ANDVA de los posibles modelos de polinomios canónicos para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	140
Tabla AIV.3. Coeficientes de determinación para posibles modelos de polinomios canónicos para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	140

Tabla AIV.4. Análisis del modelo polinómico canónico cuadrático para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	141
Tabla AIV.5. Estimación de los parámetros del modelo canónico cuadrático para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	141
Tabla AIV.6. Combinación de los niveles de los componentes que optimizan la respuesta para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	143
Tabla AV.1. Datos observados sobre la elasticidad ( $y_1$ ), la desviación estándar de la elasticidad ( $y_2$ ) y el índice de manufactura ( $y_3$ ), para la mezcla de combustible de Ignición	146
Tabla AV.2. Tabla ANDVA de los posibles modelos de polinomios canónicos para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición	147
Tabla AV.3. Coeficientes de determinación para posibles modelos de polinomios canónicos para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición	148
Tabla AV.4. Análisis del modelo polinómico canónico cúbico especial para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición	148
Tabla AV.5. Estimación de los parámetros del modelo canónico cúbico especial para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición	148

## Lista de Figuras y Gráficas

Figura 1.1. La Escalera de la Calidad de acuerdo a Métodos de Administración y herramientas de la Estadística Industrial	3
Gráfica. 1.2. Forma geométrica de la función de estimación por mínimos cuadrados para un solo parámetro estimado	6
Gráfica 1.3. Distribuciones de densidad $f_z(z)$ de la Normal y $f_T(t)$ de Student	9
Gráfica. 2.1. Diferentes variaciones en el Modelo de Regresión	36
Gráfica 3.1. Porcentaje de frutos afectados por pudrición de pedúnculo	57
Gráfica 3.2. Gráfica de medias con línea de tendencia para el ejemplo de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo	59
Gráfica 4.1. Gráfico de Daniel para los efectos de la fracción principal bajo estudio en la producción de semiconductores	74
Gráfica 4.2. Diagrama de Pareto, para los efectos de la fracción principal bajo estudio, en la producción de semiconductores	74
Figura 4.3. Esquema de los elementos de la Metodología de Superficie de Respuesta	78
Figura 4.4. Visión gráfica de la MSR para el ejemplo de la producción de una reacción química en el que se muestran diferentes fases de la experimentación	79
Gráfica 4.5. Reporte gráfico de la estimación de los siete efectos principales estandarizados para el estudio de la vibración en el equipo de afilado	84
Gráfica 4.6. Gráfica de perfiles para los efectos significativos del estudio de la vibración en el equipo de afilado	85
Figura 4.7. Superficies de Respuesta: a) descrita por un modelo de primer orden. b) c) y d) descritas por modelos de segundo orden	88
Gráfica 4.8. Gráfica de los efectos para tiempo y temperatura de la producción de una reacción química	92
Figura 4.9. Superficie ajustada para el ejemplo de la producción de una reacción química	99
Gráfica 5.1. Regiones experimentales para un diseño de experimentos de 2, 3 y 4 factores con sus componentes en un diseño factorial (línea continua) y para el diseño de mezclas (líneas punteadas)	105
Gráfica 5.2. Plano muestral de tres componentes bajo la restricción $\eta = \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3$	112
Gráfica 5.3. Promedios del valor de estiramiento para la producción de hilo con fibra trenzada, de una malla con retículo simplex (3,2), con repeticiones	117

Gráfica 5.4. Superficie de Respuesta estimada para la producción de hilo con fibra trenzada	119
Gráfica 5.5. Promedios de tasas de octano el experimento de mezclas de gasolina con una repetición, de una malla con retículo simplex (3,2), con centroide	121
Gráfica 5.6. Superficie de Respuesta estimada para el experimento de mezclas de gasolina	122
Gráfica AIII.1. Diseño de experimentos central compuesto rotatable con seis puntos centrales para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan	134
Gráfica AIII.2. Gráfico de Pareto para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan	135
Gráfica AIII.3. Superficie de Respuesta estimada para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan, con tres niveles de Polietileno	137
Gráfica AIV.1. Región del experimento de Mezclas y resultados de $y_1$ para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	140
Gráfica AIV.2. Superficie de Respuesta estimada para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	142
Gráfica AIV.3. Gráfica de Trazas para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales	143
Gráfica AV.1. Región experimental con los valores de Kurotori	146
Gráfica AV.2. Esquema gráfico del diseño mezcla con restricciones para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición	147
Gráfica AV.3. Superficie de Respuesta estimada para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición	149
Gráfica AV.4. De Trazas estimada para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición	149





# Capítulo 1. La Metodología de Superficie de Respuesta en la Optimización de la Producción Industrial para el Control Estadístico de la Calidad y en la Investigación Científica

## 1.1. El Desarrollo histórico del Control Estadístico de Calidad para la mejora óptima en la industria

Después de la Revolución Industrial, en cuanto los empresarios lograron la producción masiva y se tuvo un proceso de producción o proceso de artículos manufacturados -véase Anexo 1- se enfrentaron al problema de cumplir, no solo con la cantidad demandada de productos, sino también que estos deberían reunir y mantener ciertas características para su venta, es decir, tener cierta calidad. Para lograrlo se crearon herramientas matemáticas y estadísticas, así como filosofías enfocadas al mantenimiento y mejora de calidad, todo esto dio como resultado lo que se conoce como Control Estadístico de la Calidad (CEC).

Al principio se diseñaron herramientas que permitieran conocer si el proceso de producción se encontraba fuera de control o permanentemente estaba bajo control, un ejemplo de ellas son el Muestreo Secuencial de Aceptación (MSA) y las gráficas de control estadístico de la calidad o de control estadístico de procesos de producción (GCEC o GCEP).

En procesos que presentaban periodos grandes bajo control se pensó de manera idealista cómo mejorar el proceso, aún cuando esto fuera en la línea de producción (lugar donde de manera permanente se obtiene la producción). La pretensión anterior requería que se cumplieran dos aspectos de manera simultánea: primero, que la calidad y cantidad de la producción se mantuvieran para seguir abasteciendo a los clientes y, segundo, que con el procedimiento continuo se tuviera información relevante, o sobresaliente, para considerar qué cambios hacer en los factores de proceso de tal forma que el proceso mejorara. Este procedimiento fue desarrollado y aplicado por Box y Hunter, quienes le dieron el nombre de Operación Evolutiva de Procesos de Producción (OPEV), y consiste en llevar a cabo investigación experimental en la Línea de Producción.

Después de algunos casos exitosos de la aplicación de la OPEV (y de muchas experiencias no concluyentes, aún durante largos tiempos) se consideró como una limitante la realización de la experimentación en la Línea de Producción. Se comenzó a buscar una metodología que permitiera optimizar la(s) respuesta(s) de un proceso de manufactura fuera de la Línea de Producción y quienes la desarrollaron finalmente

fueron Box y Wilson, cuyo nombre técnico fue Metodología de Superficie de Respuesta (MSR).

La MSR requería hacer investigación de experimentación secuencial fuera de la Línea de Producción, la cual denominaron en la industria como planta piloto y, en la investigación científica, se denominó condiciones controladas de laboratorio o simplemente condiciones de laboratorio.

La aplicación de estas tres herramientas corresponde a la idea de hacer mejoras menores a procesos de producción o de manufactura con las GCEP, los cuales tienen como fundamento la realización de investigaciones observacionales; de manera mayor con OPEV, la cual tiene como fundamento la realización, tanto de investigaciones observacionales, como experimentales secuenciales; y de manera óptima con la MSR, la cual solo se refiere a estudios experimentales secuenciales en la planta piloto.

Desde la década de 1950, Taguchi había aconsejado el empleo de experimentos estadísticamente diseñados en la industria, para lograr procesos de producción robustos. Durante 30 años Taguchi se dedicó al desarrollo de un método detallado en ingeniería de la calidad, que incluía un modelo económico para la optimización de productos y procesos. Su método se basa en el diseño y análisis estadístico de experimentos, que aprendió con estadísticos occidentales y aplicó en la industria japonesa. El uso eficaz de las herramientas de la estadística industrial está relacionado con el ascenso de las organizaciones por la escalera de la calidad, la cual se muestra a continuación.

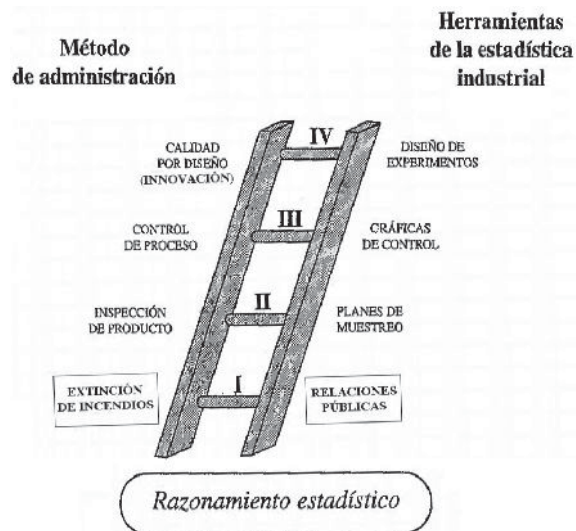
### 1.1.1. La escalera de la calidad

La escalera de la calidad, es una clasificación de los métodos estadísticos usados en el contexto de diversas técnicas administrativas y herramientas de la estadística industrial. Esas aplicaciones reciben gran influencia del estilo gerencial y la cultura organizacional, por ello es importante conocer diversos aspectos del entorno industrial que más adelante se comentarán.

La buena implementación de la estadística industrial depende de la técnica gerencial que se practique en la organización. Dicha escalera contesta la pregunta gerencial, ¿cómo maneja usted la incomodidad de las quejas por parte del cliente? De tal manera que se determina la posición de una organización en la escalera. Los cuatro estilos gerenciales que usualmente se identifican en la escalera son: (I) Extinción de Incendios, (II) Inspección y Supervisión Tradicional, (III) Control y

Mejoramiento de Procesos y (IV) Calidad por Diseño (Innovación, Optimización o Modernización).

Figura 1.1. La Escalera de la Calidad de acuerdo a Métodos de Administración y herramientas de la Estadística Industrial



La estructura de la escalera es la siguiente:

- Razonamiento estadístico. El lineamiento básico del razonamiento estadístico es darse cuenta que en todos los procesos laborales se presenta variabilidad y se debe reconocer que es esencial reducir esta para el mejoramiento de la calidad. Si no se reconoce el impacto de la aleatoriedad, es probable que se tomen decisiones innecesarias y peligrosas.

- Apagado o Extinción de Incendios (Relaciones públicas). La extinción de incendios es un estilo gerencial que se enfoca hacia los esfuerzos para resolver problemas y crisis. El combate de incendios se ha caracterizado por ser un método en el que nunca hay tiempo de hacer las cosas bien desde la primera vez, pero siempre hay el tiempo suficiente para volver a procesar y solucionar los problemas cuando se quejan los clientes. Como resultado, se suelen tomar decisiones sin conocer las causas de las fallas pues no se busca mejorar el producto sino solo mantener la calidad actual y por tanto no se hace uso de métodos estadísticos.

La administración de extinción de incendios, en muchos casos, es la responsable de costos innecesarios y remedios rápidos provisionales que tienen efectos negativos sobre el futuro de la empresa. El desafío real para el administrador es evitar que se presenten "incendios". Un método para evitarlo es confiar en la inspección, detallada y frecuente, y en la supervisión tradicional.

- Inspección de productos (Planes de muestreo). A finales del siglo XIX los fabricantes seguían confiando en las inspecciones de sus productos dentro de la planta, por parte de técnicos y mercaderes, pero finalmente los progresos tecnológicos introdujeron máquinas y procesos que aseguraron el mantenimiento de ciertas normas independientes de los inspectores y su sapiencia. A principios del siglo XX los investigadores de los Laboratorios Bell (en Nueva Jersey) desarrollaron métodos estadísticos de muestreo que permitían tener una alternativa eficaz a la inspección del 100% de los artículos. Sus técnicas, llamadas inspección de muestreo, condujeron finalmente al famoso sistema MIL-STD-105 de procedimientos de muestreo, el cual se usa en la defensa, la industria y otras áreas. Esas técnicas implementan pruebas estadísticas de hipótesis para determinar si un lote de producción o de manufactura cumple con los niveles de calidad aceptable.

Esas técnicas de muestreo se enfocan hacia el producto y no hacia el sistema de fabricación. Para enfocar el aseguramiento de la calidad al desempeño de los procesos en la organización se usa el control de procesos.

- Control de proceso (Gráficas de Control). En 1924, Walter Shewhart documentó un nuevo método de control estadístico de procesos en un memorando a su jefe. Este documento, con fecha del 16 de mayo, incluye un esquema de una técnica diseñada para seguir los niveles de calidad de un proceso a través del tiempo. Shewhart llamó a este esquema Gráfica de Control. La técnica fue desarrollada y Shewhart publicó su metodología dos años después. Se dio cuenta de que cualquier proceso de manufactura se puede controlar aplicando conceptos técnicos básicos. Las gráficas de control son una aplicación directa de los sistemas de retroalimentación en el control de los procesos de trabajo.

Una buena implementación de las gráficas de control requiere que la administración se concentre en el proceso, enfatizando el control y las mejoras del proceso. Cuando un proceso fabrica productos que cumplen con los requisitos del cliente, y a continuación se emplea un sistema de controles de proceso, ya no es necesaria la inspección del producto. La industria puede entregar sus productos sin la inspección, que es tardada y costosa. Estos son los requisitos de las entregas justo a tiempo, y aumentan la satisfacción del cliente. Si no hay inspección fuera de la línea de producción se pueden tener entregas más ágiles, menos pruebas y, en consecuencia, menores costos.

- Calidad por Diseño, Innovación, Optimización, Modernización (Diseño de Experimentos). La calidad por diseño es un método que se basa en el estilo gerencial proactivo. Consiste en detectar los problemas que hay para diseñar los productos y

los procesos con calidad "incorporada". El diseño de un producto manufacturado o un servicio comienza con una idea y continúa a través de una diversidad de fases de desarrollo y pruebas, hasta que inicia la fabricación y el producto se pone a disposición del cliente. El diseño del proceso implica la planeación y el diseño de las instalaciones físicas, así como los sistemas de información y control que se requieren para fabricar el artículo o efectuar el servicio.

El diseño del producto y el proceso asociado de manufactura determinan el desempeño y valor finales del producto. Las decisiones en el diseño influyen sobre la sensibilidad de un producto a variaciones en las materias primas y las condiciones de trabajo, y estas a su vez afectan los costos de manufactura.

En forma particular se estudiarán algunas herramientas de optimización de la escalera de la calidad. En el siguiente capítulo se verán los antecedentes históricos de las herramientas estadísticas de optimización de procesos.

## 1.2. Antecedentes Históricos sobre los Modelos de: Regresión Lineal, Diseño de Experimentos y de Optimización

Para poder ahondar en los métodos estadísticos de mejora estadística, será importante plantear un panorama histórico del nacimiento de la herramienta estadística conocida como Metodología de Superficie de Respuesta y su relación con los métodos de modelación lineal para el estudio de la asociación de variables aleatorias.

### 1.2.1. El Modelo de Regresión Lineal para estudios observacionales

La primera forma de regresión lineal documentada fue utilizando el método de estimación de mínimos cuadrados, publicado por el matemático francés Adrien-Marie Legendre en 1805 y por el matemático, astrónomo y físico alemán Johann Carl Friedrich Gauss en 1809. Dicho término provenía de la descripción realizada por Legendre en el apéndice "*Sur la Méthode des Moindres Quarrés*"<sup>1</sup> de su libro "*Nouvelles Méthodes Pour la Détermination des Orbites des Comètes*"<sup>2</sup> (1805). El método está basado en el ajuste de polinomios a un conjunto de datos, el cual

---

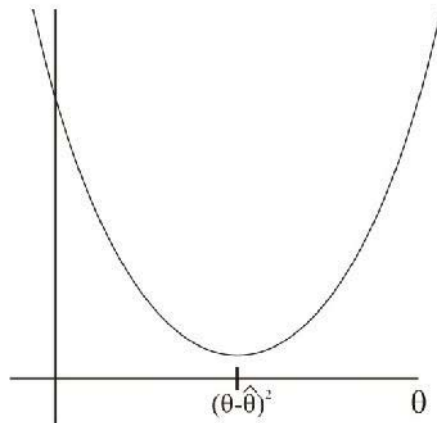
<sup>1</sup> Sobre el Método de Mínimos Cuadrados

<sup>2</sup> Nuevos Métodos para la Determinación de las Órbitas de los Cometas

consiste en generar una función llamada residual o “falta de ajuste por dato” a partir de la magnitud de la diferencia entre el valor observado de la variable de respuesta y el valor estimado de dicha respuesta. Esta diferencia depende de la función polinomial que se busca ajustar. Dichas diferencias, llamadas usualmente residuales, se toman elevadas al cuadrado dado que los valores del error se analizan sin considerar el signo de la diferencia.

La construcción de esta función de error asegura la existencia de un mínimo geométrico alrededor de la estimación del o los parámetros de la función ajustada (Gráfica. 1.2). Generalmente estos modelos se usaban para estudios observacionales. En sus inicios tanto Legendre como Gauss aplicaron el método para determinar, a partir de observaciones astronómicas, las órbitas de cuerpos alrededor del sol. Una vez que el método fue estudiado y desarrollado, en 1821 Gauss publicó un trabajo *“Theoria Combinationis Observationum Erroribus Minimis Obnoxiae”*<sup>3</sup> donde abordaba de manera más profunda el método de los mínimos cuadrados.

Gráfica. 1.2. Forma geométrica de la función de estimación por mínimos cuadrados para un solo parámetro estimado



En dicho libro aparecen postulados diez supuestos que deben obedecer las observaciones con la finalidad de que el estimador, obtenido por el método de mínimos cuadrados, cumpliera con ser insesgado y de mínima varianza uniforme. Estos supuestos se enuncian a continuación:

1. El modelo debe estar completamente especificado.
2. Los parámetros deben ser funciones lineales de la variable de respuesta.

---

<sup>3</sup> Teoría de la Combinación de las Observaciones Sujetas a los Errores Mínimos

3. El valor de la media de los errores es cero.
4. Hay homocedasticidad en las observaciones.
5. No existe correlación entre los errores.
6. La covarianza entre los residuales y los valores de las variables regresoras es cero.
7. El número de observaciones es mayor que el número de parámetros a estimar.
8. Existe variabilidad entre los valores de las variables explicativas.
9. No hay dependencia perfecta entre las variables regresoras.
10. Las variables regresoras son fijas en muestras repetidas.

El desarrollo de estos 10 puntos tuvo como resultado el teorema de Gauss-Márkov que establece que al cumplirse los supuestos anteriores, los estimadores de los parámetros de la función a ajustar son insesgados de varianza mínima uniforme.

Fue hasta 1889 que el estadístico Francis Galton en su libro "*Natural Inheritance*"<sup>4</sup> mencionó por vez primera el concepto de Regresión al estudiar la asociación entre la estatura de los padres y la estatura de los hijos. El concepto de Regresión se derivó del estudio de Galton pues este decía que la estatura de los hijos 'regresaba' a ser la estatura de los padres. En su escrito, apoyándose en las teorías de Legendre y de Gauss, Galton explicó el método de regresión para ajustar una línea recta a la media de las observaciones minimizando la magnitud de los errores de los ajustes, a través del método de estimación de mínimos cuadrados. En ese mismo libro se hace uso del nombre de Distribución Normal a la función de probabilidad conocida como campana de Gauss o distribución de Gauss, pues fue Galton quien descubrió la relación de dicha distribución y el análisis de regresión al modelar los errores de ajuste.

Mediante el uso de un Quincunx se percató que el comportamiento de los fenómenos obedecía una distribución Gaussiana, o en sus palabras una distribución "normal". El Quincunx consiste en un arreglo triangular de postes colocados en una superficie lisa vertical. Se sueltan bolas desde la parte superior y se dejan rebotar entre los postes hasta que llegan al fondo, donde son recolectadas en pequeños recipientes. Cada vez que una bola golpea un poste, esta puede rebotar a la

---

<sup>4</sup> Herencia Natural



izquierda o a la derecha con la misma probabilidad. La distribución de las bolas acumuladas en la parte inferior al final del experimento describe la conocida campana Gaussiana.

Galton también introduce el concepto de correlación para medir la magnitud de la asociación entre variables, siendo su amigo Karl Pearson quien desarrollará dicho concepto junto con Charles Edward Spearman.

En particular los modelos de regresión lineal para estudios observacionales con variables cuantitativas son los modelos más estudiados por la simpleza de la estimación de los parámetros del modelo, es decir, los estimadores de los parámetros del modelo o parámetros de regresión al ser combinaciones lineales de los valores de los datos pueden ser calculados por métodos más simples que los de otros modelos de regresión, como por ejemplo los modelos de regresión no lineal.

El modelo de regresión lineal describe la respuesta bajo estudio con las denominadas variables regresoras o variables explicativas cuantitativas, regularmente llamadas variables independientes. Cuando es una sola variable regresora se refiere al modelo de regresión lineal simple y cuando es más de una se refiere al modelo de regresión lineal múltiple (MRLM). En el caso del MRLM, entonces es necesario seleccionar las variables utilizando diversos procedimientos dentro de los cuales inicialmente las variables regresoras no son ortogonales, es decir, no son independientes entre sí. Esto tiene como resultado que el orden en que entran o salen del modelo influye en la proporción de información que explican de la respuesta. De tal forma que, en este caso, se requiere del manejo simultáneo y de manera sucesiva de los conceptos de correlación lineal simple y la correlación parcial.

Es importante notar el doble uso que se le da regularmente al término 'independencia'. Por un lado se denominan a las variables regresoras como variables independientes, toda vez que estas no se presentan como funciones de otras variables regresoras. Asimismo se maneja el concepto de independencia entre las variables regresoras, cuando el coeficiente de correlación entre ellas es cero. Dado que el doble significado del concepto independencia puede causar confusión, a partir de aquí y en adelante a la o las variables que explican a la variable de respuesta se les denominará variables explicativas.

### 1.2.2. El Modelo de Diseño de Experimentos

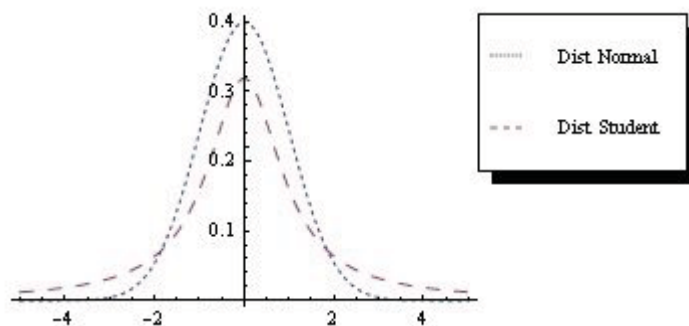
En experimentación el matemático Ronald Aylmer Fisher en 1919 a través de su experiencia laboral en el campo Experimental de Rothamsted en Inglaterra, incursionó en una nueva área de la estadística conocida como el Diseño de

Experimentos. Fisher basó sus estudios en los reportes de un hombre que se hacía llamar Student, quien determinó en 1908 que la estandarización de una variable aleatoria a través de los estimadores de los parámetros de la media  $\hat{\mu}$  y de la desviación estándar  $\hat{\sigma}$ , se podía modelar bajo una ley de probabilidad parecida a la Distribución Normal.

El Teorema del Límite Central postula que para cualquier variable aleatoria cuando se toma una muestra grande ( $n > 30$ ), si a esta se le resta el valor de la media poblacional (se dice que los datos se centran) y se divide entre la desviación estándar poblacional (se dice que los datos se cambian de escala), entonces la variable resultante se dice que está estandarizada. Esta nueva variable se consideraba que obedecería a una distribución bajo la Ley de Probabilidad Normal. William Sealy Gosset, estadístico mejor conocido por su sobrenombre Student, determinó que el proceso de estandarización utilizando el estimador del parámetro de la desviación estándar, no genera una variable aleatoria normal sino una variable aleatoria denominada T de Student, bautizada así por Ronald Fisher.

La razón se debe a que para realizar los cálculos de probabilidad es necesario ajustar la distribución debido al proceso mismo de estimación, es decir, se requiere compensar la variabilidad producto de la estimación y que esta no influya en la variabilidad de la muestra. Debido a esto, la distribución T de Student, siempre presenta una variabilidad mayor que la Distribución Normal(0,1) sin importar el valor del parámetro para los grados de libertad de la función T. Numéricamente la varianza de la T de Student, calculada como  $\frac{v}{v-2}$ , es un valor mayor que 1. En la Gráfica 1.3 se muestran ambas funciones.

Gráfica 1.3. Distribuciones de densidad  $f_z(z)$  de la Normal y  $f_T(t)$  de Student



Los escritos de Student (Gosset) presentaban una metodología para la comparación de dos medias cuando se tiene una población muestreada y una de

referencia, o bien dos poblaciones muestreadas, ya sea que sean independientes o no, dichas pruebas reciben el nombre de Pruebas T para la Comparación de Medias. Fisher por su parte, después de siete años de investigación, en 1935 publicó "*The Design of Experiments*"<sup>5</sup>, un libro en el que fundamentó el uso de los modelos de diseño de experimentos para estudiar, entre otras cosas, la suma de cuadrados del total ajustado por la media de los valores observados de la variable de respuesta ( $SC_{TA}$ ), a través de la suma de los cuadrados del arreglo de tratamientos ( $SC_{\tau}$ ) o dispersión entre el valor promedio de los tratamientos, los cuales siempre inicialmente se analizan como si fueran cualitativos, la suma de cuadrados de factores de confusión o suma de cuadrados de bloqueo ( $SC_B$ ), que corresponden al particular diseño experimental de Bloques al Azar, y la suma de cuadrados de la fluctuación aleatoria ( $SC_{\epsilon}$ ) o dispersión dentro de tratamientos; como una metodología generalizada para la comparación de las medias de  $P$  poblaciones, una extensión de las pruebas de Student.

$$SC_{TA} = SC_{\tau} + SC_B + SC_{\epsilon}$$

Estos modelos presentaron una nueva perspectiva del análisis de modelos lineales toda vez que por primera ocasión se hacía énfasis en lo que ahora se conoce como Matriz de Diseño. Esta matriz presenta un arreglo de los valores de las variables explicativas, que al ser en principio variables cualitativas se denominan factores, y tiene la propiedad de identificar de forma única al diseño utilizado. Fisher se percató que el diseño requería de las hipótesis usuales que son independencia entre observaciones, normalidad en las muestras y homocedasticidad entre poblaciones, así como de una nueva hipótesis que correspondía a la independencia entre muestras, característica conocida como ortogonalidad en la Matriz de Diseño.

A partir de este momento la Matriz de Diseño  $X$  cobra una mayor importancia debido a que a través de esta se puede ver también la estructura del modelo, es decir, se puede determinar el grado del polinomio ajustado mediante del modelo lineal; además de permitir identificar si se trata de un modelo de regresión, un modelo de diseño de experimentos o un modelo de optimización, entre otros.

Cuando se calculaba la  $SC_{\tau}$ , por construcción, si el diseño o arreglo de tratamientos tenía estructura factorial, es decir, dependía de los factores, los efectos

---

<sup>5</sup> El Diseño de Experimentos

de los factores resultaban ser ortogonales. Esta característica tiene como resultado que solo se requiere, para la determinación del modelo, la correlación simple de la(s) respuesta(s) con los factores y la anulación de las correlaciones parciales de la respuesta y los factores. Esto permitió evitar la selección sucesiva de variables simplificando el procedimiento para la determinación del modelo. Si una variable no es estadísticamente explicativa de la respuesta, es decir, no hay una correlación significativa, entonces se puede eliminar del modelo sin afectar la significancia de las demás variables explicativas.

Otro avance logrado por Fisher fue la introducción de la tabla de Análisis de Varianza (ANDVA) en la década de 1920, donde se realiza la comparación de las sumas de cuadrados para probar la hipótesis de igualdad de medias. Dichas comparaciones se realizan a través del cociente de las variabilidades estimadas para los efectos de tratamientos llamados cuadrados medios de tratamientos ( $CM_{\tau}$ ) y la variabilidad producto del error aleatorio, conocida como Cuadrados Medios del Error ( $CM_{\varepsilon}$ ), las cuales bajo el proceso de estimación propuesto corresponden a estadísticas independientes.

Para realizar esta prueba Fisher recurrió al uso de una distribución que permite la comparación de dos varianzas independientes, conocida como la Distribución de Snedecor, descubierta por George Waddel Snedecor. Esta distribución permitió realizar las comparaciones que Fisher había postulado en su tabla ANDVA, resultando que la distribución se bautizara como F de Fisher. El uso de las tablas ANDVA y de los conceptos de ortogonalidad llevó a los matemáticos y estadísticos de la época a heredar estos conceptos a las demás áreas del Análisis de Regresión y en forma particular a los Modelos de Regresión Lineal, dando como resultado que la tabla ANDVA se use para estudiar el ajuste en los diferentes modelos de Regresión.

Los Modelos de Diseño de Experimentos, que originalmente se propusieron para la comparación de  $P$  poblaciones a través de un solo factor, posteriormente recibieron un fuerte impulso al estudiar diversos factores con los diseños o arreglos de tratamientos estructurados o factoriales. Esto permitió estudiar tanto los efectos principales como el efecto conjunto de factores o de interacción; con diversas repeticiones, con solo una repetición y hasta con una fracción de las repeticiones (factoriales fraccionados). Se usan modelos con fracciones más chicas conforme el número de factores es mayor. Estos modelos dieron como resultado el nacimiento de la investigación estadística en las áreas de optimización, donde los modelos de Diseño de Experimentos son intensamente usados.

Estos nuevos conceptos al principio no tuvieron interés de los estadísticos de la época, siendo hasta algunos años después que el uso de la tabla de Análisis de Varianza y la Matriz de Diseño se extendería a otros modelos lineales, incluyendo el Análisis de Regresión, así como el uso del análisis de la falta de ajuste para determinar si un modelo es suficiente para explicar la respuesta bajo estudio.

El análisis de los Modelos de Diseño de Experimentos requería de herramientas estadísticas nuevas, por ello se desarrollaron formas matemáticas para aplicar las herramientas conocidas de Regresión Lineal. Mediante una transformación adecuada el modelo lineal de Diseño de Experimentos se puede expresar en términos de un modelo de Regresión Lineal, donde los parámetros siguen cumpliendo el teorema de Gauss-Márkov. Una vez transformado el modelo, o mejor dicho reparametrizado, este se puede analizar como un Modelo de Regresión Lineal. Los resultados obtenidos solo deben interpretarse con base en el modelo lineal original. Gracias a esta reparametrización no se requirió de diseñar una metodología nueva de análisis, sino aplicar la ya conocida de Regresión Lineal.

### 1.2.3. El Modelo de Optimización Estadística

A principio de la década de los 50s George Edward Pelham Box, yerno de Fisher, y K. B. Wilson introdujeron el concepto de optimización mediante el uso de modelos lineales. Los modelos de optimización surgieron al reconocer la posibilidad de disminuir el número de corridas experimentales, al pasar de experimentos en condiciones heterogéneas (donde se usan los diseños experimentales que requieren del uso del concepto de bloqueo cualitativo y cuantitativo para controlar los factores de confusión) a los experimentos en condiciones homogéneas, lo que incrementó el desarrollo de la experimentación secuencial. Esta situación llevó a los experimentadores en la industria a reflexionar acerca de cómo erradicar o eliminar el problema de diseñar experimentos en condiciones heterogéneas, ahorrando recursos mediante la planeación de los experimentos permitiendo estudiar mayor cantidad de factores y variantes. Por consiguiente se apoyaron experimentos que se llevan a cabo en condiciones de laboratorio, también llamadas condiciones controladas, que constituyen un sistema cerrado para la experimentación, que para la optimización de procesos de producción se refieren a las llamadas plantas piloto.

La incorporación de las condiciones de un sistema cerrado para la experimentación promovió una nueva manera de planear los experimentos. Al seguir un procedimiento de experimentación secuencial, donde la realización de un experimento implica considerar la información del experimento anterior para llegar

más rápido al óptimo de interés, se requiere del análisis de datos con un modelo de regresión, por lo general, con polinomios ortogonales. Esto puede representarse gráficamente mediante superficies de respuesta o con gráficas de contornos.

Por lo anterior es que el procedimiento de optimización se puede entender en dos fases, la planeación para determinar el procedimiento de experimentación con un predominio de Diseño de Experimentos y el segundo para el análisis tanto estadística como gráficamente donde hay un predominio del Modelo de Regresión.

El procedimiento de experimentación secuencial para la optimización de un proceso con diseño o arreglo de tratamientos sin mezcla o factorial que se sigue es el siguiente:

1. Se propone optimizar una respuesta o varias, para lo cual hay que hacer un barrido, filtrado o diagnóstico de factores potenciales que afectan la respuesta.
2. Del barrido se escoge al o los factores que se espera expliquen la variación del total ajustado y con ello se deben desarrollar procedimientos más precisos y económicos que permitan llegar al óptimo lo más pronto posible.
3. Pudiera ser que se estuviera cerca del valor óptimo de la respuesta, o bien que se estuviera retirado de él, entonces en este último caso el procedimiento es diseñar experimentos secuenciales para llegar cuanto antes al óptimo.
4. Ya cerca del valor óptimo se determina este y se caracteriza la región que lo contiene.

A partir de las necesidades de los investigadores se desarrollaron modelos que permitieran analizar diferentes situaciones, apareciendo así los Diseños Plackett-Burman, Diseños Compuestos Centrales, Diseños D-optimales, Diseños Box, etc., tanto para modelación en experimentos con arreglo de tratamientos con y sin mezcla, correspondientes a experimentos con y sin restricciones respectivamente.

Por otro lado, otro tipo de arreglos de tratamientos comúnmente usado en la industria son los diseños con mezcla de niveles de factores, en estos, los componentes de un experimento (tratamientos) forman una mezcla y por lo tanto la proporción en que aparece cada uno de los componentes debe ser un número mayor a 0% y menor a 100%, de tal forma que la suma de todas las partes dé el 100% de la mezcla. Por ejemplo, la fabricación de un medicamento o la elaboración del concreto para construcción, etc.

Finalmente los diseños con restricciones son experimentos en los cuales los factores están sujetos a reglas determinadas, que pueden ser funciones de costo; con el fin de limitar la presencia de uno o más factores, o bien forzar la aparición de estos

en el modelo. El uso de restricciones tiene como finalidad agregar condiciones al modelo para controlar los factores que intervienen en la respuesta de acuerdo a condiciones iniciales de la naturaleza del modelo. Por ejemplo, el uso de una substancia en laboratorio, pruebas en cultivos sanguíneos, etc.

#### 1.2.4. Relación entre el Modelo de Regresión Lineal y el Modelo de Diseño de Experimentos en el Modelo de Optimización Estadística

Como se mencionó antes históricamente el Modelo de Regresión apareció primero, seguido por el Modelo de Diseño de Experimentos y finalmente por el Modelo de Optimización. Por esta razón las herramientas estadísticas y matemáticas se encuentran desarrolladas de manera más profunda en los Modelos de Regresión.

Como se verá en el capítulo 3 los métodos de estimación del Modelo de Diseño de Experimentos se basan en los métodos de estimación para el Modelo de Regresión Lineal General. Por ello es necesario estudiar los métodos de estimación para el Modelo de Regresión Lineal General y posteriormente abordar el estudio y análisis del Modelo de Diseño de Experimentos.

El análisis se realiza considerando el modelo transformado a uno de Regresión. Una vez obtenidos los estimadores y los resultados de las pruebas estadísticas, se procede a realizar el cambio de variable en sentido opuesto para poder concluir los resultados obtenidos en términos del Modelo de Diseño de Experimentos original.

En el caso del Modelo de Optimización, el cual depende de las herramientas estadísticas de la regresión y del diseño de experimentos, la relación se observa principalmente en la estructura de la Matriz de Diseños, donde esta se compone de los valores reparametrizados de los factores que explican la respuesta. Estos valores corresponden a los valores de un diseño factorial, con una repetición o una fracción de ella (Diseño de Experimentos) y los elementos necesarios para que a través de un análisis de regresión se pueda encontrar un modelo lineal que describa la respuesta bajo estudio (Regresión Lineal). Esto se debe a que, por un lado, se busca ajustar una función lineal a la respuesta por medio de la regresión y por otro lado, se busca estimar y estudiar la variabilidad del error puro involucrada en el proceso a través del diseño experimental.

En cada uno de los tres tipos de modelos la Matriz de Diseño permite diferenciar uno de otro, pues su estructura es única:

1. La Matriz de Diseño del Modelo de Regresión está compuesta por los valores observados de las variables explicativas.

2. La Matriz de Diseño del Modelo de Diseño de Experimentos presenta como característica principal estar compuesta de valores reparametrizados de los niveles de los factores explicativos, que en esencia son variables categóricas.
3. La Matriz de Diseño del Modelo de Optimización presenta la característica de estar compuesta de la estructura de una Matriz de Diseño del Modelo de Diseño de Experimentos más los elementos reparametrizados necesarios para estudiar la variación pura involucrada en la respuesta.

Por otra parte, esta matriz no solo permite diferenciar entre el tipo de modelación usado (regresión, diseño de experimentos u optimización), sino que además permite determinar en el modelo ajustado y en el caso de ser un modelo polinomial, el grado de este. Así la Matriz de Diseño permite diferenciar el tipo de modelación y el tipo de polinomio, ya sea que el modelo corresponda a un polinomio lineal, cuadrático o de grado mayor. Es debido a esta importancia que en cada uno de los tres modelos mencionados se hará énfasis de la estructura de dicha matriz.

Así mismo se verá la aplicación de la tabla de Análisis de Varianza como una herramienta, originalmente diseñada para determinar las diferencias entre las medias de  $P$  poblaciones, como un método para probar estadísticamente el ajuste de los modelos lineales. Adicionalmente los elementos correspondientes para realizar la prueba de Falta de Ajuste permiten determinar si el modelo polinomial estimado es adecuado para describir la respuesta, o si se requieren de términos adicionales para la correcta modelación del fenómeno bajo estudio.

En el siguiente capítulo se analizará el método de estimación de mínimos cuadrados para el Modelo de Regresión Lineal General, donde se verán las técnicas estadísticas para el estudio del ajuste del modelo y el estudio de la Falta de Ajuste en modelos polinomiales no ortogonales.





## Capítulo 2. Modelo de Regresión Lineal Múltiple

### 2.1. Antecedentes: El Modelo de Regresión Lineal Simple

#### 2.1.1. ¿Qué es el Análisis de Regresión?

El análisis de regresión se refiere a las técnicas para modelar y analizar la relación entre variables. Lo anterior consiste en considerar una variable numérica llamada de respuesta bajo estudio y una o más variables llamadas variables regresoras o explicativas de la respuesta, también numéricas. La variable de respuesta en los Modelos de Regresión (MR) es una función de las variables explicativas con parámetros correspondientes a cada variable ( $\beta_i$ ) más un término constante o media ( $\mu$ ) general y un término extra para la falta de ajuste ( $\varepsilon_i$ ), el cual representa la variación no explicada por la variable regresora. Los parámetros son estimados de tal manera que presenten el mejor ajuste posible de la variable de respuesta. El MR es usado entre otras cosas para predecir, inferir, realizar pruebas de hipótesis y modelar la relación que hay entre las variables. Estos usos dependen de determinados supuestos que cumplan o no los datos.

La primera forma de estimación en regresión que se utiliza es el método de estimación de mínimos cuadrados, publicado por Legendre en 1805 y por Gauss en 1809. La idea original era aplicar un método para resolver el problema de determinar, a partir de observaciones astronómicas, las órbitas de los cuerpos celestes alrededor del sol, problema que Euler había trabajado en 1748 sin éxito. El nombre "Análisis de Regresión" fue dado por Francis Galton, primo de Charles Darwin, en el siglo diecinueve al describir un fenómeno biológico que consistía en relacionar la estatura de los padres con la estatura de los hijos. A partir de estos análisis, Yule y Pearson generalizaron la aplicación de los MR a un contexto estadístico, donde se puede estudiar de manera general la relación entre varias variables. En nuestro caso, veremos el uso de la regresión enfocado a la modelación estadística.

Una forma del Análisis de Regresión es la Regresión Lineal donde la relación entre una o más variables explicativas y la variable de respuesta se modela a través de una función de mínimos cuadrados llamada Modelo de Regresión Lineal (MRL). Los MRL exploran la influencia de variables explicativas cuantitativas llamadas variables regresoras con una variable bajo estudio conocida como variable de respuesta. Esta función es una combinación lineal de uno o más parámetros y las variables explicativas. Si la variable de respuesta está en función de una sola variable

explicativa lineal, el ajuste será en particular una línea recta y el modelo recibe el nombre de Modelo de Regresión Lineal Simple; si depende de dos variables explicativas lineales, el ajuste será un plano; de tres o más un Hiperplano, estos dos últimos reciben el nombre de Modelos de Regresión Lineal Múltiple.

El nombre Lineal se debe a que a través del método de mínimos cuadrados los estimadores de los parámetros del modelo resultan ser combinaciones lineales de la variable de respuesta, en caso contrario el modelo se llama No Lineal. Si las variables explicativas también están presentes de forma cuadrática, cúbica, etc., o en forma de interacción, entonces el modelo de Regresión Lineal Múltiple ajustado corresponderá a un polinomio de grado mayor a uno, sin embargo el método de estimación seguirá siendo el de Regresión Lineal.

Comenzaremos explicando el modelo de Regresión Múltiple como una generalización para el análisis de Modelos Lineales Linealmente Estimables. Esto debido a que los modelos para el estudio de Superficie de Respuesta, que se verán en el capítulo 4, se basan en la modelación de funciones que dependen de variables, en principio, cualitativas. Dichos modelos son analizados mediante herramientas de Regresión Lineal para generar la ecuación que representará a la superficie ajustada.

## 2.2. El Modelo de Regresión Lineal Múltiple o el Análisis de Regresión Lineal General

Los Modelos de Regresión Lineal Múltiple permiten el estudio de la asociación de varias variables explicativas cuantitativas respecto a la variable de respuesta también cuantitativa. Una herramienta para su estudio son las técnicas de Regresión Lineal General que involucran el Álgebra de Matrices. La información de cada variable, tanto explicativa como la de respuesta, se escriben en forma de matrices las cuales, mediante un procedimiento algebraico, permitirán obtener los estimadores de los parámetros del modelo de Regresión Lineal Múltiple, así como de la estimación de la variabilidad que el modelo presenta. La variabilidad estimada podrá ser comparada con la variabilidad producida por cambios aleatorios y determinar si los cambios que la variable de respuesta presenta se deben a la influencia de las variables explicativas o bien, al azar.

Al caso particular del Modelo de Regresión Lineal en el que la variable de respuesta está influenciada por una sola variable explicativa, se le conoce como Modelo de Regresión Lineal Simple. Sin embargo, dado que la metodología de Regresión Lineal General producirá estimadores consistentes con la teoría del

modelo de regresión lineal simple, en este capítulo solo se analizará el enfoque metodológico para el Modelo Lineal General.

### 2.2.1. Método de Estimación por Mínimos Cuadrados

Considere el siguiente modelo lineal con  $k$  variables  $X_1, X_2, \dots, X_k$  que corresponderán a las variables explicativas de la respuesta  $Y$ . Tanto las variables explicativas como la respuesta son, en principio, de tipo cuantitativo. La ecuación que muestra la dependencia de la variable de respuesta y las variables regresoras es la ecuación del modelo de regresión lineal general. Para ejemplificar el método de regresión lineal se supondrá que la ecuación lineal corresponde a un polinomio de grado uno, es decir, cada variable explicativa aparece de forma lineal, aunque se hace la aclaración que se puede ajustar modelos polinomiales de grado mayor usando la misma técnica, simplemente agregando los términos correspondientes al modelo.

El modelo de regresión lineal múltiple se representa con la siguiente ecuación:

$$Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$$

Donde:

$Y_i$ : La  $i$ -ésima observación de la variable de respuesta.  $i = 1, 2, \dots, n$ . Note que la respuesta solo depende del subíndice  $i$ .

$X_{ji}$ : La  $i$ -ésima observación de la  $j$ -ésima variable explicativa.  $j = 1, 2, \dots, k$

$\beta_j$ : El  $j$ -ésimo parámetro de regresión del modelo lineal.

$\varepsilon_i$ : El  $i$ -ésimo error, es decir, la falla de ajuste del modelo, que se estima como la diferencia entre el valor estimado y el valor observado de la respuesta  $Y_i$ .

Una vez definidos los términos del modelo de regresión lineal múltiple  $Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$ , se procede a definir el mismo modelo en términos de su representación matricial, toda vez que la teoría que se presentará más adelante está construida a partir de la definición matricial del modelo de regresión.

El modelo de regresión lineal general en términos matriciales es:

$$\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$$

Donde:

$\underline{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y_n \end{bmatrix}$  es una matriz columna de orden  $(n \times 1)$  que contiene las  $n$  observaciones

de la variable de respuesta, o variable bajo estudio donde  $n$  es el tamaño de muestra.

$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{kn} \end{bmatrix}$  es una matriz de orden  $(n \times (k+1))$  cuya primera columna

está compuesta en todas sus entradas por valores iguales a 1, la cual se usa para determinar la estimación del parámetro correspondiente al término constante  $\beta_0$ , y las siguientes  $k$  columnas a los valores de las  $k$  variables explicativas. Esta matriz tiene  $n$  renglones que corresponden a los valores de las variables regresoras. A esta matriz se le conoce con el nombre de Matriz de Diseño de la Regresión Lineal.

Dependiendo del grado polinomial de las variables explicativas, la Matriz de Diseño puede representar el Modelo Lineal para polinomios de diferente orden como se presenta en la Tabla 2.1. Cada uno de estos modelos se analiza a través del método de Regresión Lineal independientemente del grado del polinomio, es decir, se puede modelar la relación que hay entre la variable de respuesta y las variables explicativas a través de un Modelo de Regresión Lineal para un Polinomio de Grado Lineal, o bien, de ser necesario, si hay evidencia estadística que lo apoye, se puede ajustar un Modelo de Regresión Lineal para un Polinomio de Grado Cuadrático, o Cúbico, etc. Es por eso que tanto el Modelo de regresión ajustado como la Matriz de Diseño deben estar presentes en los reportes para evitar confusión en su interpretación.

$\underline{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}$  es una matriz columna de orden  $((k+1) \times 1)$  que corresponde, la primera

entrada al parámetro  $\beta_0$  y las siguientes  $k$  entradas a los coeficientes de regresión del modelo asociados a cada una de las variables regresoras.

Tabla 2.1. Diferentes modelos de regresión lineal, de acuerdo al grado del polinomio y su correspondiente matriz de Diseño X

Grado del Polinomio	Modelo de Regresión Lineal	Matriz de Diseño
Lineal	$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \varepsilon_i$	$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} \\ 1 & x_{12} & x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} \end{bmatrix}$
Cuadrático incompleto solo con efectos cuadráticos puros	$Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^2 \beta_j X_{ji} + \sum_{j=1}^2 \beta_{jj} X_{ji}^2 + \varepsilon_i$	$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{11}^2 & x_{21}^2 \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{12}^2 & x_{22}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & x_{1n}^2 & x_{2n}^2 \end{bmatrix}$
Cuadrático completo con efectos cuadráticos puros y de interacción	$Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^2 \beta_j X_{ji} + \sum_{j=1}^2 \sum_{k \geq j}^2 \beta_{jk} (X_j X_k)_i + \varepsilon_i$	$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{11}x_{21} & x_{11}^2 & x_{21}^2 \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{12}x_{22} & x_{12}^2 & x_{22}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & x_{1n}x_{2n} & x_{1n}^2 & x_{2n}^2 \end{bmatrix}$

$\underline{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$  es una matriz columna de orden  $(n \times 1)$  para los errores o falla en el ajuste.

Dichos errores, como supuesto del modelo lineal, deben ocurrir aleatoriamente y por consiguiente uno de los supuestos principales en los MRL es que  $\underline{\varepsilon}$  es una variable aleatoria para describir el comportamiento de los errores. Bajo la suposición de un comportamiento aleatorio, se dice entonces que cada  $\varepsilon_i$  se distribuye bajo una Ley de Probabilidad Normal y son independientes entre sí ( $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$ , con  $i \neq j$  e  $i, j = 1, 2, \dots, n$ ), con varianza constante entre ellos  $\sigma^2$ , es decir,  $\underline{\varepsilon}$  se distribuye Normal Multivariante  $\underline{\varepsilon} \sim NM(\underline{0}, \Sigma)$  donde  $\underline{0}$  es el vector de medias iguales a 0, y  $\Sigma$  la matriz de Varianzas y Covarianzas de tal forma que los errores se consideran Independientes e Idénticamente Distribuidos, dicha matriz se expresa de la siguiente manera:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma^2 \end{bmatrix} = \sigma^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} = \sigma^2 I.$$

Mediante el uso de álgebra de matrices se pueden operar los elementos anteriores para estimar el modelo lineal siguiente:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \dots + \beta_k X_{ki} + \varepsilon_i$$

Dado que la variable  $Y$  está en función de la variable aleatoria  $\underline{\varepsilon}$ , luego entonces  $Y$  es una variable aleatoria, también Normal Multivariante. Así se puede calcular la esperanza y varianza de  $Y$ .

1. Como los errores se suponen Normales Independientes e Idénticamente distribuidos se tiene entonces:

$$E[\underline{Y}] = E[\underline{X}\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}] = E[\underline{X}\underline{\beta}] + E[\underline{\varepsilon}] = \underline{X}\underline{\beta}$$

$$Var[\underline{Y}] = Var[\underline{X}\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}] = Var[\underline{\varepsilon}] = \Sigma$$

2.  $\underline{Y}$  se distribuye  $NM(\underline{X}\underline{\beta}, \Sigma)$

Si  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_k$  son los estimadores de los parámetros  $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$  respectivamente, entonces se puede definir la matriz de los parámetros estimados

$$\text{como: } \underline{\hat{\beta}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix}$$

El método de estimación por mínimos cuadrados permite encontrar estadísticas que cumplan con minimizar la suma de los cuadrados de las desviaciones de los valores reales de la respuesta  $y_i$  y los valores estimados  $\hat{y}_i$ . Estos últimos están en función de las variables regresoras como una combinación lineal de los valores de los parámetros estimados. Esta diferencia corresponde a la estimación de los valores residuales  $e_i$ , es decir, los valores estimados  $\hat{\varepsilon}_i = e_i = y_i - \hat{y}_i$ . Así mediante este método se busca minimizar la suma  $\sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ , donde  $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1i} + \hat{\beta}_2 x_{2i} + \dots + \hat{\beta}_k x_{ki}$ . En otras palabras se busca minimizar la suma de cuadrados:  $\sum_{i=1}^n (y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1i} + \hat{\beta}_2 x_{2i} + \dots + \hat{\beta}_k x_{ki}))^2$ .

Si  $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1i} + \hat{\beta}_2 x_{2i} + \dots + \hat{\beta}_k x_{ki}$  es el  $i$ -ésimo renglón de una matriz columna de orden  $(n \times 1)$  para los valores estimados de la respuesta, se puede expresar a dichos valores estimados con la siguiente notación matricial:

$$\underline{\hat{Y}} = \begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{bmatrix} = X \underline{\hat{\beta}}$$

Si se define a  $e_i$  como el  $i$ -ésimo renglón estimado de la Matriz de Residuales, entonces se tiene la matriz columna de residuales de la forma  $\underline{e} = \underline{Y} - \underline{\hat{Y}} = \underline{Y} - X \underline{\hat{\beta}}$ , la cual es una matriz de orden  $(n \times 1)$ . El producto de su transpuesta por sí misma  $(\underline{Y} - \underline{\hat{Y}})^t (\underline{Y} - \underline{\hat{Y}})$  es una matriz de orden  $(1 \times 1)$  que representa la suma de cuadrados de residuales.

De aquí se tiene que el estimador de mínimos cuadrados de  $\underline{\beta}$ , denotado por  $\underline{\hat{\beta}}$ , corresponderá al vector que minimiza el producto  $(\underline{Y} - X \underline{\hat{\beta}})^t (\underline{Y} - X \underline{\hat{\beta}})$ , el cual es llamado Suma de Cuadrados de los Residuales, conocido por sus siglas como  $SC_{res}$ . Al expandir la expresión anterior se obtiene que:

$$SC_{res} = \underline{Y}^t \underline{Y} - \underline{Y}^t X \underline{\hat{\beta}} - \underline{\hat{\beta}}^t X^t \underline{Y} + \underline{\hat{\beta}}^t X^t X \underline{\hat{\beta}}$$

Como  $\underline{Y}^t X \underline{\hat{\beta}}$  y  $\underline{\hat{\beta}}^t X^t \underline{Y}$  son matrices iguales de orden  $(1 \times 1)$  (el orden de la matriz  $\underline{Y}^t$  es  $(1 \times n)$ , el orden la matriz  $X$  es  $(n \times (k+1))$  y el de la matriz  $\underline{\hat{\beta}}$  es  $((k+1) \times 1)$ , por lo tanto al hacer el producto de los órdenes de las tres matrices se tiene que el orden de la matriz resultante es  $(1 \times n)(n \times (k+1))((k+1) \times 1) = (1 \times 1)$ ; así la suma de cuadrados de los residuales se expresa como  $SC_{res} = \underline{Y}^t \underline{Y} - 2 \underline{\hat{\beta}}^t X^t \underline{Y} + \underline{\hat{\beta}}^t X^t X \underline{\hat{\beta}}$ <sup>6</sup>.

Para minimizar la  $SC_{res}$  respecto a  $\underline{\hat{\beta}}$  se usa el método de estimación por mínimos cuadrados, esta suma se debe derivar con respecto a cada uno de los elementos de  $\underline{\hat{\beta}}$  e igualando a cero las ecuaciones resultantes.

Del procedimiento anterior se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones lineales simultáneas:

---

<sup>6</sup> La transpuesta del producto de matrices  $(AB)^t$ , es el producto de las matrices transpuestas conmutadas  $B^t A^t$



$$\frac{\partial}{\partial \underline{\hat{\beta}}} SC_{res} = -2X^t \underline{Y} + 2X^t X \underline{\hat{\beta}} = 0$$

La cual es equivalente a  $(X^t X) \underline{\hat{\beta}} = X^t \underline{Y}$ . Esta igualdad se conoce como las ecuaciones normales. La matriz  $(X^t X)$  es una matriz cuadrada de orden  $((k+1) \times (k+1))$  cuya matriz inversa se puede determinar siempre y cuando esta sea una matriz de rango completo, en caso de no serlo se puede utilizar una inversa generalizada. La solución de las ecuaciones normales se calcula multiplicando ambos términos por la izquierda por el factor  $(X^t X)^{-1}$ , es decir,  $(X^t X)^{-1} (X^t X) \underline{\hat{\beta}} = (X^t X)^{-1} X^t \underline{Y}$  lo cual implica que  $\underline{\hat{\beta}} = (X^t X)^{-1} (X^t \underline{Y})$  ó  $\underline{\hat{\beta}} = (X^t X)^{-1} (X^t \underline{Y})$ .

Así los valores que minimizan el producto  $(\underline{Y} - X \underline{\hat{\beta}})^t (\underline{Y} - X \underline{\hat{\beta}})$  corresponden a  $\underline{\hat{\beta}} = (X^t X)^{-1} (X^t \underline{Y})$ . Esta es una función lineal de las observaciones de la variable respuesta que define a los estimadores de mínimos cuadrados para todos los coeficientes del modelo de regresión simultáneamente.

Como se mencionó anteriormente la matriz  $\underline{\hat{\beta}}$  permite determinar el vector

$$\underline{\hat{Y}} = \begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{bmatrix} = X \underline{\hat{\beta}} \text{ de valores estimados de la respuesta. El método de estimación por}$$

mínimos cuadrados garantiza que las diferencias entre los valores de  $\underline{Y}$  y  $\underline{\hat{Y}}$  son mínimas. La forma de obtener  $\underline{\hat{Y}} = X \underline{\hat{\beta}}$  puede reescribirse usando la definición de  $\underline{\hat{\beta}}$  como  $\underline{\hat{Y}} = X (X^t X)^{-1} (X^t \underline{Y})$  la cual se puede reagrupar como  $\underline{\hat{Y}} = (X (X^t X)^{-1} X^t) \underline{Y} = H \underline{Y}$ .

En este caso el producto  $(X (X^t X)^{-1} X^t)$  se suele llamar matriz  $H$  por su nombre en inglés *Hat Matrix* o matriz sombrero, pues al multiplicar por  $\underline{Y}$  se obtiene  $\underline{Y}$  con sombrero:  $\underline{\hat{Y}}$ . La matriz  $H$  es de orden  $(n \times n)$ , debido a que  $X$  es de orden  $(n \times (k+1))$ ,  $(X^t X)^{-1}$  es de orden  $((k+1) \times (k+1))$  y  $X^t$  de orden  $((k+1) \times n)$ . La matriz  $H$  cumple con las siguientes propiedades:

1.  $H$  es ídempotente, es decir  $HH = H$
2.  $HX = X$

3.  $H^t = H$
4. La matriz  $(I-H)$  es ídempotente.

La matriz identidad para este caso es de orden  $(n \times n)$ . La diferencia de matrices  $(I-H)$  se deduce de la fórmula para el cálculo de los residuales  $(\underline{Y} - \hat{\underline{Y}})$ , sustituyendo el valor de la respuesta ajustada  $\hat{\underline{Y}} = H\underline{Y}$  se tiene que la matriz de errores estimados  $(\underline{Y} - \hat{\underline{Y}}) = (\underline{Y} - H\underline{Y})$ , por lo tanto simplificando se obtiene que dicha matriz se puede estimar como  $(\underline{Y} - \hat{\underline{Y}}) = (I-H)\underline{Y}$ .

### 2.2.2. Prueba para el Ajuste del Modelo Polinomial de Primer Orden para Estudios Observacionales

Para determinar si el modelo, que está en términos de las variables explicativas y de los parámetros estimados, se ajusta a los datos se recurre a pruebas estadísticas. Dichas pruebas permitirán determinar si el modelo describe adecuadamente o no a los datos. En los modelos estadísticos lineales, es común utilizar como un concentrado de información a las tablas de Análisis de Varianza (ANDVA). En particular para el MRLM se utiliza para poder contestar la pregunta ¿el modelo tiene sentido para explicar la relación entre las variables explicativas  $X_1, X_2, \dots, X_k$  sobre la respuesta  $Y$ ? o bien, ¿alguna de las variables de regresión explica a  $Y$ ?

La prueba general se puede deducir a través de la comparación de la variabilidad producida por el error aleatorio estimado a través de los residuales y la variabilidad producida por el modelo de regresión, es decir, la variabilidad total de las observaciones de la variable de respuesta se puede dividir para poder realizar una comparación entre ellas. La Suma de Cuadrados Total de las observaciones de  $Y$  se puede obtener de la siguiente manera:

$$SC_T = \underline{Y}^t \underline{Y}$$

Dicha variabilidad corresponde a la suma de las observaciones al cuadrado de la respuesta. Retomando el MRLM  $\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$  se puede ver que la variable de respuesta depende del modelo de regresión  $X\underline{\beta}$  y de la fluctuación aleatoria  $\underline{\varepsilon}$ . A continuación se presenta la justificación para poder realizar la división de la Suma de Cuadrados Total, en la Suma de Cuadrados para el Modelo de Regresión y la Suma de Cuadrados para los Residuales.

Se sabe que la Suma de Cuadrados de los Residuales  $SC_{res} = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ , corresponde a la variabilidad producida por la diferencia de los valores observados y los datos ajustados cuya forma matricial es  $(\underline{Y} - \hat{\underline{Y}})^t (\underline{Y} - \hat{\underline{Y}})$ . Para obtener la variabilidad en términos de una suma de cuadrados para el modelo de regresión se obtiene la diferencia:  $SC_T - SC_{res}$ .

$$\begin{aligned} SC_T - SC_{res} &= \underline{Y}^t \underline{Y} - (\underline{Y} - \hat{\underline{Y}})^t (\underline{Y} - \hat{\underline{Y}}) = \underline{Y}^t \underline{Y} - (\underline{Y}^t \underline{Y} - \underline{Y}^t \hat{\underline{Y}} - \hat{\underline{Y}}^t \underline{Y} + \hat{\underline{Y}}^t \hat{\underline{Y}}) \\ &= \underline{Y}^t \underline{Y} - \underline{Y}^t \underline{Y} + \underline{Y}^t \hat{\underline{Y}} + \hat{\underline{Y}}^t \underline{Y} - \hat{\underline{Y}}^t \hat{\underline{Y}} \\ &= \underline{Y}^t \hat{\underline{Y}} + \hat{\underline{Y}}^t \underline{Y} - \hat{\underline{Y}}^t \hat{\underline{Y}} \\ &= \hat{\underline{Y}}^t \underline{Y} + \underline{Y}^t \hat{\underline{Y}} - \hat{\underline{Y}}^t \hat{\underline{Y}} \end{aligned}$$

Sustituyendo  $\hat{\underline{Y}} = X\hat{\underline{\beta}}$  en el primer término y  $\hat{\underline{Y}} = H\underline{Y}$  en el segundo y tercer término.

$$\begin{aligned} \hat{\underline{Y}}^t \underline{Y} + \underline{Y}^t \hat{\underline{Y}} - \hat{\underline{Y}}^t \hat{\underline{Y}} &= (X\hat{\underline{\beta}})^t \underline{Y} + \underline{Y}^t H\underline{Y} - (H\underline{Y})^t (H\underline{Y}) \\ &= \hat{\underline{\beta}}^t X^t \underline{Y} + \underline{Y}^t H\underline{Y} - \underline{Y}^t H^t H\underline{Y} \\ &= \hat{\underline{\beta}}^t X^t \underline{Y} + \underline{Y}^t H\underline{Y} - \underline{Y}^t H H\underline{Y} \\ &= \hat{\underline{\beta}}^t X^t \underline{Y} + \underline{Y}^t H\underline{Y} - \underline{Y}^t H\underline{Y} = \hat{\underline{\beta}}^t X^t \underline{Y} = SC_{MR} \end{aligned}$$

Por lo tanto la suma de cuadrados producida por el modelo de regresión es  $SC_{MR} = \hat{\underline{\beta}}^t X^t \underline{Y}$ . Entonces la suma de cuadrados total se descompone como:

$$SC_T = SC_{MR} + SC_{res}$$

A partir de esta información se puede construir lo que se conoce como Tabla de Análisis de Varianza, la cual es un resumen de la variabilidad de los datos. Esta tabla se construye a partir de las sumas de cuadrados, sin embargo se necesita estimar las varianzas, tanto del error aleatorio como del modelo de regresión.

Para estimar las varianzas, es necesario definir el concepto de grados de libertad. Los grados de libertad corresponden al número de observaciones independientes con las cuales se obtiene la suma de cuadrados, en este caso como se tienen tres diferentes sumas de cuadrados se definen tres diferentes grados de libertad:

**Grados de libertad del total.** Corresponden al número de observaciones independientes con las cuales se obtiene el valor de  $SC_T$ . Como el valor de  $SC_T$

corresponde a una suma, se necesita de todas las observaciones de  $Y$ , por lo tanto el valor de los grados de libertad para el Total es  $n$ .

**Grados de libertad del modelo de regresión.** En este caso se requiere estimar los  $k+1$  parámetros del modelo de regresión,  $k$  coeficientes de regresión más  $\beta_0$ . Para cada parámetro del modelo se asigna un grado de libertad, por tanto los grados de libertad son  $k+1$ .

**Grados de libertad para el error aleatorio.** Se obtienen como la diferencia de los grados de libertad del total menos los grados de libertad del modelo de regresión (que corresponde al número de parámetros estimados), es decir,  $n-(k+1)=n-k-1$ .

La tabla ANDVA está compuesta por dos estimadores de varianzas, uno para el modelo de regresión y otro para el error aleatorio.

**Varianza de los errores.** La varianza de los errores por hipótesis es  $\sigma^2$ . Por lo tanto se debe tener un buen estimador para la varianza. Dicho estimador debe ser insesgado y eficiente. El estimador propuesto es  $SC_{res}/(n-k-1)$  debido a que esta estadística mide la variabilidad de las observaciones y los valores ajustados para cada uno de los  $(n-k-1)$  valores independientes. A esta medida se le denomina Cuadrado Medio de los Residuales o  $CM_{res}$ . Para mostrar que es un estimador insesgado se calcula la esperanza del estimador.

$$\begin{aligned} E[CM_{res}] &= E[SC_{res}]/(n-k-1) = E\left[\left(\underline{Y}-\hat{\underline{Y}}\right)^t\left(\underline{Y}-\hat{\underline{Y}}\right)\right]/(n-k-1) \\ &= E\left[\left((I-H)\underline{Y}\right)^t\left((I-H)\underline{Y}\right)\right]/(n-k-1) \\ &= E\left[\underline{Y}^t(I-H)^t(I-H)\underline{Y}\right]/(n-k-1) \\ &= E\left[\underline{Y}^t(I^t-H^t)(I-H)\underline{Y}\right]/(n-k-1) \\ &= E\left[\underline{Y}^t(I-H)(I-H)\underline{Y}\right]/(n-k-1) \\ &= E\left[\underline{Y}^t(I-H)\underline{Y}\right]/(n-k-1) \end{aligned}$$

**Teorema 1.** Sea  $V$  una matriz aleatoria de orden  $(n \times 1)$ , sea  $A$  una matriz simétrica de orden  $(n \times n)$ . Si  $E[V]=\theta$  y  $Var[V]=\Sigma$ , entonces  $E[V^tAV]=tr[A\Sigma]+\theta^tA\theta$ .

Si  $V=Y$  entonces se cumple que  $\theta=\underline{0}$  y por lo tanto:

$$\begin{aligned}
E[Y^t(I-H)Y] &= \text{tr}[(I-H)\Sigma] \Rightarrow \frac{E[Y^t(I-H)Y]}{(n-k-1)} = \frac{\text{tr}[(I-H)\Sigma]}{(n-k-1)} \\
&= \frac{\text{tr}[(I-H)I\sigma^2]}{(n-k-1)} = \frac{\text{tr}[(I-H)]\sigma^2}{(n-k-1)} = \frac{(\text{tr}[I]-\text{tr}[H])\sigma^2}{(n-k-1)} \\
&= \frac{(n-(k+1))\sigma^2}{(n-k-1)} \stackrel{7}{=} \sigma^2
\end{aligned}$$

**Varianza del Modelo de regresión.** La varianza del modelo de regresión se determina a través del cuadrado medio del modelo de regresión  $CM_{MR} = \frac{SC_{MR}}{(k+1)}$ .

La tabla de ANDVA permite probar las hipótesis siguientes.

$H_0$  : Los parámetros  $\beta$  del modelo son cero.  
 $: \beta_0 = \beta_1 = \dots = \beta_k = 0$

Vs.

$H_1$  : Al menos uno de los parámetros  $\beta$  del modelo no es cero.  
 $: \beta_j \neq 0$  para alguna  $j = 0, 1, 2, \dots, k$

La tabla ANDVA se construye de la siguiente forma:

Tabla 2.2. Tabla ANDVAI para el Modelo de Regresión Lineal

$$\text{Múltiple } Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$$

FV	GL	SC	CM	$F_c$	NSD
$\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$	$k+1$	$SC_{MR}$	$CM_{MR}$	$\frac{CM_{MR}}{CM_{res}}$	$P(F \geq F_c) = \alpha^*$
Res	$n-k-1$	$SC_{res}$	$CM_{res}$		
Total	$n$	$SC_T$			

Las siglas FV corresponden a Fuente de Variación, es decir, de donde provienen las varianzas. GL corresponde a los grados de libertad para cada fuente. SC a las Sumas de Cuadrados. CM a los Cuadrados Medios.  $F_c$  a la F calculada, conocida como estadística de Fisher y NSD al nivel de significancia descriptivo.

---

<sup>7</sup> Del resultado  $\text{tr}[H]=k+1$  se deriva que  $H$  es ídempotente y simétrica, pues en este caso al cumplir con esas dos propiedades  $H$  tiene  $k+1$  valores propios o bien vectores linealmente independientes, es decir,  $(X^t X)^{-1} X^t$  es una matriz inversa generalizada de  $X$  que produce una matriz de orden  $((k+1) \times (k+1))$ .

Para determinar la conclusión respecto a la prueba de hipótesis es necesario observar el comportamiento de la estadística  $F_c$ . Como los cuadrados medios son estadísticas para estimar la varianza, el cociente entre ellos, dado que son independientes por construcción, se distribuye bajo una Ley de probabilidad F de Fisher con parámetros  $k+1$  y  $n-k-1$ , valores de los grados de libertad del numerador y denominador respectivamente.

Si este cociente llamado  $F_c$  tiende a cero la comparación entre las varianzas revelará que la variabilidad producto de los residuales, es mayor que la variabilidad producida por el modelo de regresión y, por tanto, los cambios observados en la variable de respuesta se deberán al azar y no a la influencia del modelo.

Sin embargo si el cociente  $F_c$  tiende a crecer, la variabilidad producida por el modelo será más grande que la variabilidad de los residuales y, en consecuencia se rechazará la hipótesis de nulidad: La conclusión en este caso es que alguno de los componentes del modelo influye en el comportamiento de la respuesta.

En la Tabla 2.2 la columna final llamada NSD, que corresponde al Nivel de Significancia Descriptivo se calcula como  $P(F \geq F_c) = 1 - F_F(F_c)$ . Con  $F_F(f)$  la función de probabilidad acumulativa de  $F \sim F(k+1, n-k-1)$  valuada en  $f$ . Esta prueba de hipótesis corresponde a qué tan probable es que el modelo no influya en la variable de respuesta, o bien, que riesgo se corre al concluir que el modelo influye en la respuesta. El NSD es una medida de probabilidad y por lo tanto se encuentra definido entre 0 y 1. Si el NSD tiende a ser 1 entonces no se tendrá evidencia para el rechazo de  $H_0$ , sin embargo si el NSD tiende a ser 0 se supondrá que el riesgo es bajo al rechazar  $H_0$  a un nivel de significancia  $\alpha$  previamente definido. Es evidente que para que ocurra el rechazo de  $H_0$  el NSD tiene que ser menor que  $\alpha$ .

El inconveniente de la Tabla 2.2 es que el parámetro  $\beta_0$  no es independiente de los parámetros de regresión  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$  y por consiguiente la prueba de hipótesis mide el efecto de  $\beta_0$  implícito en cada parámetro de regresión. Por otro lado, el parámetro  $\beta_0$  al no estar acompañado de una variable explicativa, se considera que no es un parámetro de regresión. Por ello es necesario medir la variabilidad producida solo por la regresión correspondiente al modelo de regresión, eliminando así la influencia de  $\beta_0$ . El modelo a ajustar es el mismo, sin embargo se tiene la siguiente consideración:

$$Y_i - \bar{Y} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_k X_k - \bar{Y} + \varepsilon_i$$

Tanto los valores observados de la respuesta como los valores del modelo de regresión se centran respecto al valor medio de las observaciones de la respuesta con el objetivo de eliminar en la tabla ANDVA el efecto de  $\beta_0$ . Para ello se definen las sumas de cuadrados centrando los valores de la respuesta respecto a la media aritmética de la siguiente forma:

$$SC_{TA} = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})(Y_i - \bar{Y}) = \sum_{i=1}^n (Y_i^2) - n\bar{Y}^2 = \underline{Y}^t \underline{Y} - n\bar{Y}^2 = SC_T - n\bar{Y}^2. \quad \text{Esta}$$

suma de cuadrados corresponde a la variabilidad total ajustada por la media.

$SC_{res} = (\underline{Y}^t \underline{Y} - n\bar{Y}^2) - (\hat{\underline{\beta}}^t \underline{X}^t \underline{Y} - n\bar{Y}^2) = \underline{Y}^t \underline{Y} - \hat{\underline{\beta}}^t \underline{X}^t \underline{Y}$ . Esto significa que la suma de cuadrados de los residuales no requiere ser centrada pues la esperanza de los errores es cero.

$SC_{reg} = SC_{TA} - SC_{res} = (\underline{Y}^t \underline{Y} - n\bar{Y}^2) - (\underline{Y}^t \underline{Y} - \hat{\underline{\beta}}^t \underline{X}^t \underline{Y}) = \hat{\underline{\beta}}^t \underline{X}^t \underline{Y} - n\bar{Y}^2 = SC_{MR} - n\bar{Y}^2$ . La suma de cuadrados de la regresión corresponde a la suma de cuadrados del modelo de regresión menos la variabilidad producida por  $\beta_0$ . Así se obtiene esta nueva igualdad llamada igualdad fundamental de la regresión:  $SC_{TA} = SC_{reg} + SC_{res}$ .

Para la construcción de la tabla ANDVAII es necesario redefinir los componentes. Para los grados de libertad se tiene lo siguiente:

Los grados de libertad del total ajustado. Como se está estimando la media aritmética de las observaciones para  $y_i$ , el valor de los grados de libertad disminuye en 1. Esto se debe a que para estimar la dispersión de  $n$  valores alrededor de la media aritmética solo se requiere de  $n-1$  de ellos. Por esta razón los grados de libertad son  $n-1$ .

Los grados de libertad de la regresión. Puesto que solo hay  $k$  variables regresoras, que son las que se busca estudiar, el valor de los grados de libertad es  $k$ .

Los grados de libertad de la suma de cuadrados de residuales se calculan de igual manera como la diferencia de los grados de libertad del total ajustado menos los grados de libertad de la regresión, así el valor de grados de libertad de los residuales es:  $(n-1) - k = n - k - 1$ . Valor que permanece constante.

Los valores de los cuadrados medios para cada fuente de variación en la tabla ANDVA se calculan de la misma forma: el cociente de la suma de cuadrados entre el valor de los respectivos grados de libertad.

A continuación se presenta la tabla ANDVAII para la información ajustada:

Tabla 2.3. ANDVAII para el MRLM:  $Y_i - \bar{Y}_{..} = \sum_{j=1}^k \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$

FV	GL	SC	CM	$F_c$	NSD
Reg	$k$	$SC_{reg}$	$CM_{reg}$	$\frac{CM_{MR}}{CM_{res}}$	$P(F \geq F_c) = \alpha^*$
Res	$n - k - 1$	$SC_{res}$	$CM_{res}$		
T. A.	$n - 1$	$SC_{TA}$			

Las nuevas hipótesis a contrastar son las siguientes.

$H_0$  : La variable de respuesta no depende de alguna variable explicativa.  
 : Ninguna variable explicativa describe la variable respuesta.  
 :  $\beta_1 = \dots = \beta_k = 0$   
 : No tiene sentido el modelo.

$H_1$  : La variable de respuesta depende de alguna variable explicativa.  
 Vs. : Alguna variable explicativa describe la variable respuesta  
 :  $\beta_j \neq 0$  para alguna  $j = 1, 2, \dots, k$   
 : Tiene sentido el modelo.

En este caso los criterios para determinar el rechazo o no de la hipótesis nula son similares. Los parámetros de la distribución F de Fisher son ahora  $k$  y  $n - k - 1$  para el numerador y denominador respectivamente.

La tabla ANDVAII es una herramienta adecuada para determinar si hay asociación entre las variables regresoras y la variable de respuesta, pero no refleja la cantidad de ajuste del modelo a los datos, por ello es necesario recurrir a otra medida que permita expresar qué tanto se ajusta el modelo a la variable de respuesta. La estadística  $R^2 = SC_{reg} / SC_{TA}$  corresponde al coeficiente de determinación del modelo. Su interpretación es la siguiente:  $R^2 \times 100\%$  es el porcentaje total de la variabilidad de las observaciones explicadas por las variables explicativas.

$R^2$  es una medida que oscila entre 0 y 1, si  $R^2$  tiende a cero eso significa que el porcentaje de la suma de cuadrados explicado por la regresión es poco y por lo tanto el modelo es un pésimo ajuste. Si  $R^2$  tiende a uno el modelo es adecuado y se ajusta en un porcentaje, dependiendo el valor de  $R^2$ . En el caso que  $R^2 = 1$ , se dirá que el ajuste es perfecto, pues no habrá presencia de error.

Los métodos estadísticos anteriores permiten determinar si las variables explicativas influyen en la respuesta, sin embargo no cuales. Por ello también es necesario calcular valores para investigar cuales de las variables explicativas son las que influyen en la respuesta a través de los parámetros de regresión, si un parámetro es cero será evidencia suficiente para concluir que la variable asociada a dicho



término no explica a la respuesta. Considere que los parámetros de  $\underline{\beta}$  dependen de la variable bajo estudio  $Y$ . Uno de los supuestos del modelo, como ya se mencionó, es que los errores de ajuste se comportan como variables aleatorias de tipo Normal, idénticamente distribuidas con media 0 y desviación estándar  $\sigma$  por lo que la variable  $Y$  también se distribuirá Normal. Si se calcula la esperanza de  $Y$  se obtiene lo siguiente:

$$E(\underline{Y}) = E(X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}) = X\underline{\beta} + E(\underline{\varepsilon}) = X\underline{\beta}$$

$$\text{Var}(\underline{Y}) = \text{Var}(X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}) = \text{Var}(\underline{\varepsilon}) = \Sigma = \sigma^2 I$$

También se puede observar que los estimadores de los coeficientes del modelo de regresión son combinaciones lineales de  $Y$ , por lo que los valores de la matriz  $\hat{\underline{\beta}}$  son variables aleatorias. Como estas variables aleatorias dependen de una combinación lineal de  $Y$ , entonces la distribución de  $\hat{\underline{\beta}}$  también es Normal. Para determinar la media y varianza de estas variables aleatorias, se calculan la esperanza y varianza de  $\hat{\underline{\beta}}$ , como a continuación se indica<sup>8</sup>:

$$E(\hat{\underline{\beta}}) = E\left((X^t X)^{-1} X^t \underline{Y}\right) = (X^t X)^{-1} X^t E(\underline{Y}) = \cancel{(X^t X)^{-1} (X^t X)} \underline{\beta} = \underline{\beta}$$

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\underline{\beta}}) &= \text{Var}\left((X^t X)^{-1} X^t \underline{Y}\right) = \left((X^t X)^{-1}\right)^t (X^t X)^{-1} (X^t X) \text{Var}(\underline{Y}) \\ &= (X^t X)^{-1} \Sigma = (X^t X)^{-1} \sigma^2 I = \sigma^2 (X^t X)^{-1} \end{aligned}$$

Por lo que  $\hat{\underline{\beta}} \sim NM(\underline{\beta}, D)$ , con  $D = \sigma^2 (X^t X)^{-1}$

De aquí se puede construir una estadística de prueba para cada valor del vector  $\underline{\beta}$  considerando que la esperanza de cada  $\hat{\beta}_j$  es igual a  $\beta_j$  y que la varianza de cada  $\beta_j$  es igual con  $D_{jj}$ , donde  $D_{jj}$  corresponde al  $j$ -ésimo elemento de la diagonal de la matriz de covarianzas  $D$ . La estadística de prueba para cada parámetro de regresión es:

---

<sup>8</sup> El resultado se puede obtener como consecuencia de los supuestos del modelo, en particular los supuestos que establecen para los errores media cero, incorrelación y homocedasticidad (Tusell p 19)

$$T_{c_j} = \frac{\beta_{0j} - \hat{\beta}_j}{S_{\hat{\beta}_j}} \sim Student(n-k-1)$$

Con  $S_{\hat{\beta}_j} = \hat{\sigma} \sqrt{(X^t X)^{-1}_{jj}} = \sqrt{CM_{\varepsilon} (X^t X)^{-1}_{jj}}$  y con  $\beta_{0j}$  el valor de  $\beta_j$  cierto bajo  $H_0$ .

Las hipótesis a contrastar se presentan a continuación:

$$H_0 : \beta_j = 0$$

: La contribución de la  $j$ -ésima variable no es significativa.

$$\text{Vs. } H_1 : \beta_j \neq 0 \text{ con } j = 1, 2, \dots, k$$

: La contribución de la  $j$ -ésima variable es significativa.

Bajo las hipótesis anteriores para probar si hay regresión o no, se puede construir una tabla, para probar cada uno de los coeficientes de regresión por separado, de la manera siguiente, en este caso  $\beta_{0j} = 0$  para toda  $j = 0, 1, 2, \dots, k$ .

Tabla 2.4. Coeficientes para el MRLM:  $Y_i - \bar{Y} = \sum_{j=1}^k \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$

Parámetro	T	NSD
$\beta_0$	$T_{c0} = \hat{\beta}_0 / S_{\hat{\beta}_0}$	$2P(T \geq  T_{c0} ) = \alpha^*$
$\beta_1$	$T_{c1} = \hat{\beta}_1 / S_{\hat{\beta}_1}$	$2P(T \geq  T_{c1} ) = \alpha^*$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\beta_k$	$T_{ck} = \hat{\beta}_k / S_{\hat{\beta}_k}$	$2P(T \geq  T_{ck} ) = \alpha^*$

La columna parámetro corresponde a cada elemento del modelo de regresión el cual se busca determinar si es o no significativo. T corresponde a la estadística de prueba de una distribución T de Student y NSD al nivel de significancia descriptivo. Note que en la tabla también se encuentra la prueba de hipótesis para el parámetro  $\beta_0$ .

Dado que el valor estimado de los parámetros puede ser positivo o negativo se recurre a la distribución T de Student de dos colas. Para obtener el NSD se calcula la probabilidad de obtener valores extremos respecto a la hipótesis nula, es decir, que los valores estimados estén lo suficientemente alejados de cero. Como los valores de las estadísticas de prueba dependen directamente de  $CM_{res} = \hat{\sigma}^2$ , los grados de libertad para la distribución T de Student, son los mismos que para el error aleatorio en la tabla ANDVA:  $n - k - 1$ .

En el caso que el valor absoluto de la estadística de prueba  $|T_{c_j}|$ , en cualquier caso tienda a ser cero, se concluirá que no hay evidencia para rechazar  $H_0$ , y por lo tanto el  $j$ -ésimo parámetro es cero y por consiguiente la  $j$ -ésima variable explicativa no es regresora de  $Y$ . En caso contrario si  $|T_{c_j}|$  es un valor muy grande, se tendrá evidencia suficiente para el rechazo de  $H_0$  y por tanto la  $j$ -ésima variable explicativa describirá significativamente la respuesta  $Y$ .

Al modelar con un polinomio de grado uno la respuesta, sería deseable poder evaluar también la precisión de un modelo cuadrático y determinar si este ajusta mejor a los datos. Si el modelo lineal presenta un valor de  $r^2$  alto, pero la magnitud de sus desviaciones es alta, entonces la alta variabilidad provocará que las predicciones sean inadecuadas.

Así mismo se puede recurrir al análisis de residuales. Esta técnica sirve para validar si el modelo de grado uno es adecuado para describir la respuesta, o bien si hay presencia de curvatura en la respuesta, observaciones aberrantes, desbalance y datos influyentes en la relación de dos variables, también puede ser usado para determinar el ajuste de un polinomio de cualquier orden, por ejemplo de grado dos y determinar si hay falta de ajuste de un modelo de grado tres.

Cuando se tiene una variable el análisis de residuales ayuda a decidir qué tipo de modelo ajustar (lineal o con la variable transformada). Cuando se trabaja en problemas de regresión múltiple no es recomendable construir este tipo de gráficas en cada combinación de variable explicativa contra de respuesta porque existe la posibilidad que todas las observaciones se encuentren contenidas en un plano. Al tratar de visualizarla a través de uno de los márgenes puede no ser efectivo, al grado de no detectarse. También es difícil identificar las observaciones aberrantes al utilizar gráficas de dispersión parciales.

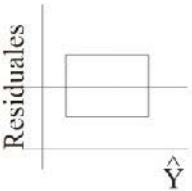
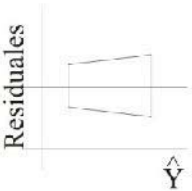
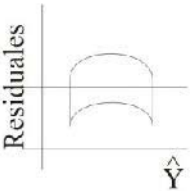
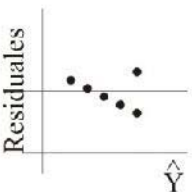
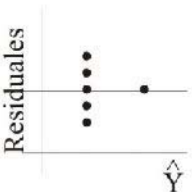
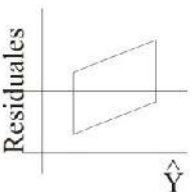
La elaboración de una gráfica de residuales contra valores estimados ( $Y - \hat{Y}$  contra  $\hat{Y}$ ) es una forma de analizar, simultáneamente, todas las gráficas (residual contra  $X_1, \dots$ , residual contra  $X_p$ ). La existencia de curvatura u observaciones aberrantes se puede verificar en esta gráfica, en lugar de examinarla con respecto a cada variable explicativa.

La gráfica de residuales con respecto a los valores estimados, se puede utilizar para corroborar la suposición de uniformidad de varianza de la variable de respuesta en cada una de las condiciones. Si la gráfica resultante tiene la apariencia de un "megáfono", surge la necesidad de usar una transformación logarítmica o raíz

cuadrada de la variable de respuesta. En la Tabla 2.5 se muestran algunos patrones comunes y su posible interpretación.

Sin embargo conforme se tengan más variables explicativas el uso de esta herramienta puede no ser adecuado, toda vez que se requiere la construcción de gráficas parciales, y de existir alguna correlación entre las variables se pueden presentar problemas al analizar estas gráficas de residuales.

Tabla 2.5. Algunos patrones de residuales comunes

 <p>Si los residuales no presentan comportamiento, quiere decir que no hay violación de supuestos.</p>	 <p>Evidencia de varianza no constante.</p>	 <p>Hay evidencia de una relación no lineal en el modelo.</p>
 <p>Se puede apreciar la influencia de un dato aberrante.</p>	 <p>Evidencia de un dato influyente.</p>	 <p>Una variable explicativa no fue incluida en el modelo de regresión.</p>

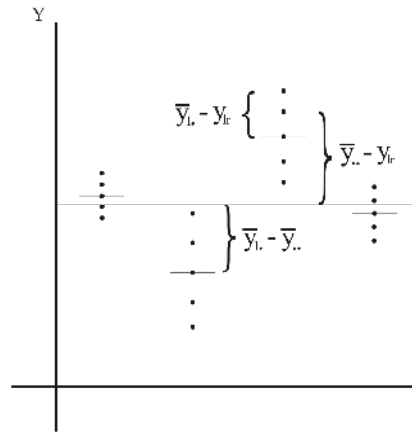
El primer patrón indica que el modelo usado es adecuado y no se violan los supuestos del modelo de regresión. Los demás patrones presentan problemas en el ajuste.

### 2.3. Prueba de Falta de Ajuste del Modelo Polinomial de Primer Orden

Esta prueba se desarrolló en el área de Diseño de Experimentos donde el objeto de estudio es el error puro, el cual es el verdadero error aleatorio. A diferencia de los estudios observacionales, los estudios experimentales son planeados de tal forma que es posible detectar este tipo de variación.

Cuando se ajusta un modelo polinomial a la variable de respuesta a través de un conjunto de variables explicativas, los valores de los residuales se encuentran influenciados por dos tipos de variación. La primera corresponde a la variabilidad producto de posibles variables explicativas no consideradas o de las mismas variables explicativas que debieran entrar al modelo a través de grados mayores o interacciones, es decir, si se ajusta una línea recta a un conjunto de datos que presentan un comportamiento cuadrático, entonces la  $SC_{res}$  será grande. La segunda variación corresponde a la variabilidad pura producto del azar inherente en el proceso, esta variación sin embargo, para poder ser estimada requiere de repeticiones alrededor de los valores observados de  $Y$  para cada conjunto de valores de las variables explicativas.

Gráfica. 2.1. Diferentes variaciones en el Modelo de Regresión



Sin embargo en la práctica esta última variabilidad generalmente no es estimada, no obstante esta variación corresponde a la verdadera fluctuación aleatoria llamada error puro. Ambas variabilidades se pueden estimar a través de Sumas de Cuadrados como se muestra a continuación:

$$SC_{res} = SC_{EP} + SC_{FA}$$

Donde:

$SC_{FA}$  Suma de Cuadrados de la Falta de Ajuste. Es la suma de cuadrados producida por las variables explicativas que no están presentes de forma cuadrática, cúbica o de un grado mayor; o variables que no están en el modelo de regresión; que influyen en la respuesta. Esta suma de cuadrados corresponde al error por falta de ajuste.

$SC_{EP}$  Suma de Cuadrados del Error Puro. Es la suma de cuadrados correspondiente a la variabilidad pura o error aleatorio. Esta suma de cuadrados es la que debe ser en realidad la suma de cuadrados del error.

Si  $SC_{FA} > SC_{EP}$  significativamente entonces  $SC_{FA}$  se debe explicar a través de un modelo polinomial de grado cuadrático o mayor; o bien por otras variables no consideradas, de tal forma que se debe tener una Suma de Cuadrados para una nueva regresión. Esta Suma de Cuadrados consiste en la suma de cuadrados de la regresión original y la suma de cuadrados anteriormente no explicada que estaba en la suma de cuadrados de los residuales  $SC_{n\_reg} = SC_{reg} + SC_{FA}$ , donde  $SC_{n\_reg}$  corresponde a la suma de cuadrados del nuevo modelo considerado.

Para determinar el error puro y por consiguiente saber si hay falta de ajuste por otras variables en el modelo se requieren  $n_l$  repeticiones en la  $l$ -ésima respuesta  $(y_{l1}, y_{l2}, \dots, y_{ln_l})$  para la  $l$ -ésima particular combinación lineal de las variables explicativas, es decir,  $y_{lr} = \beta_0 + \beta_1 x_{1l} + \beta_2 x_{2l} + \dots + \beta_k x_{kl} + \varepsilon_{lr}$  para alguna o algunas  $l=1, 2, \dots, m$ , con  $m$  el número de renglones en la matriz de diseño  $X$  que son diferentes entre si. Así las sumas de cuadrados para las otras variables no presentes en el modelo (falta de ajuste) y la suma de cuadrados del error aleatorio (error puro) se deben estimar por separado.

1. La suma de cuadrados del error puro, depende de la variabilidad entre las  $n_l$  repeticiones  $(y_{l1}, y_{l2}, \dots, y_{ln_l})$  y la media  $\bar{y}_l$  de estas, para las  $m$  combinaciones de las variables explicativas antes mencionadas.
2. La suma de cuadrados de la falta de ajuste corresponde a la variabilidad que hay entre el valor ajustado para la  $i$ -ésima combinación lineal  $\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1l} + \hat{\beta}_2 x_{2l} + \dots + \hat{\beta}_k x_{kl}$  y el promedio  $\bar{y}_l$  de las repeticiones.<sup>9</sup>

La idea de esta prueba es estudiar la varianza de cada componente a través de la suma de cuadrados de los residuales divididos en la suma de cuadrados del error puro y la suma de cuadrados de la falta de ajuste del modelo, que al ser independientes, se pueden comparar mediante una distribución F para determinar si existe igualdad o diferencia entre las varianzas de ambos conceptos. Si la variabilidad

---

<sup>9</sup> En el caso que no haya repeticiones, la prueba no puede realizarse debido a que no puede detectarse el error puro en los datos.

producto de la falta de ajuste es bastante grande, el modelo ajustado no es suficiente para describir los datos y es posible que se requiera el ajuste de un polinomio cuadrático o de grado mayor; o bien de la inclusión de variables no consideradas. Si la variabilidad producto de la falta de ajuste es poca, entonces la variabilidad no explicada por el modelo no será significativa teniendo como resultado que el modelo en cuestión es adecuado para describir la respuesta.

Así, para propósitos de esta prueba, el modelo se puede expresar como se muestra a continuación:

$$y_{lr} = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j X_{jl} + \varepsilon(\varphi_l + \psi_r)_{lr}$$

Con:

$y_{lr}$ : La r-ésima repetición de la l-ésima observación de la variable de respuesta.  
 $l = 1, 2, \dots, m$ ;  $r = 1, 2, \dots, n_l$

$X_{jl}$ : La l-ésima observación de la j-ésima variable explicativa.  $j = 1, 2, \dots, k$

$\beta_j$ : El j-ésimo parámetro del modelo de regresión lineal.

$\varepsilon(\varphi_l + \psi_r)_{lr}$ : El residual no ajustado por el modelo que puede separarse en los componentes,  $\varphi_l$  es el error por falta de ajuste que depende de la l-ésima combinación de las variables explicativas, y  $\psi_r$  el error puro de la repetición que depende de la r-ésima repetición de las observaciones  $y_{lr}$ .

Cuya representación matricial es la siguiente:

$$\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$$

$$\begin{bmatrix} y_{11} \\ \vdots \\ y_{1n_1} \\ y_{21} \\ \vdots \\ y_{2n_2} \\ \vdots \\ y_{m1} \\ \vdots \\ y_{mn_m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1m} & x_{2m} & \cdots & x_{km} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1m} & x_{2m} & \cdots & x_{km} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \vdots \\ \varepsilon_{1n_1} \\ \varepsilon_{21} \\ \vdots \\ \varepsilon_{2n_2} \\ \vdots \\ \varepsilon_{m1} \\ \vdots \\ \varepsilon_{mn_m} \end{bmatrix}$$

Con:

$\underline{Y}$ : La matriz columna<sup>10</sup> para la variable de respuesta de orden  $(n \times 1)$ .

$n$ : El tamaño de muestra. Este valor es tal que cumple que  $n = \sum_{l=1}^m n_l$ .

$n_l$ : El número de repeticiones producto de la  $i$ -ésima combinación lineal  $\beta_0 + \beta_1 x_{1l} + \beta_2 x_{2l} + \dots + \beta_k x_{kl} + \varepsilon_{lr}$ .

$m$ : El número de renglones de la matriz  $X$  que son diferentes entre sí. Este valor siempre cumple con  $m \leq n$ . Obsérvese que la igualdad se cumple si no hay repeticiones en la respuesta para algún renglón de la matriz de diseño, es decir, para toda  $l = 1, 2, \dots, m$   $n_l = 1$   $n = \sum_{l=1}^m n_l = \sum_{l=1}^m 1 = m \Rightarrow n = m$

$X$ : La matriz de diseño de orden  $(n \times (k+1))$ .

$\underline{\beta}$ : La matriz columna de parámetros de orden  $((k+1) \times 1)$ .

$\underline{\varepsilon}$ : La matriz columna de errores de ajuste de orden  $(n \times 1)$ .

Para determinar el error puro del modelo se debe estimar la suma de cuadrados para la diferencia de cada repetición  $y_{lr}$  respecto a la media  $\bar{y}_l$ . Por tanto la suma de cuadrados del error puro se estima como:

$$SC_{EP} = \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr} - \bar{y}_l)^2$$

La suma de cuadrados de falta de ajuste se calcula como la diferencia entre la  $SC_{res}$  y la  $SC_{EP}$ . De la expresión para la suma de cuadrados de los residuales  $SC_{res} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$  se puede reescribir en términos del modelo lineal con repeticiones de la siguiente forma:

$$SC_{res} = \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr} - \hat{y}_{lr})^2.$$

$$\begin{aligned} SC_{FA} &= SC_{res} - SC_{EP} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 - \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr} - \bar{y}_l)^2 \\ &= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr} - \hat{y}_{lr})^2 - \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr} - \bar{y}_l)^2 \end{aligned}$$

---

<sup>10</sup> Comúnmente se le llama vector columna, sin embargo matemáticamente es una matriz y por tanto este es el nombre con el cual se le denominará.



$$\begin{aligned}
&= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr}^2 - 2y_{lr}\hat{y}_{lr} + \hat{y}_{lr}^2) - \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr}^2 - 2y_{lr}\bar{y}_l + \bar{y}_l^2) \\
&= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \cancel{y_{lr}^2} - 2\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr}\hat{y}_{lr} + \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr}^2 \\
&\quad - \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \cancel{y_{lr}^2} + 2\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr}\bar{y}_l - \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \bar{y}_l^2 \\
&= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr}^2 - 2\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr}\hat{y}_{lr} + 2\sum_{l=1}^m \bar{y}_l \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr} - \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \bar{y}_l^2
\end{aligned}$$

Nótese que:  $\hat{y}_{lr} = \hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^k \hat{\beta}_j X_{jl} = \frac{(\hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^k \hat{\beta}_j X_{jl})n_l}{n_l} = \frac{(\hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^k \hat{\beta}_j X_{jl}) \sum_{r=1}^{n_l} 1}{n_l}$

$$= \frac{\sum_{r=1}^{n_l} \hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^k \hat{\beta}_j X_{jl}}{n_l} = \frac{\sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr}}{n_l} = \frac{\hat{y}_l}{n_l} = \hat{\bar{y}}_l$$

Luego entonces  $\hat{y}_{lr} = \hat{\bar{y}}_l$ , por lo tanto,

$$\begin{aligned}
SC_{FA} &= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr}^2 - 2\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr}\hat{\bar{y}}_l + 2\sum_{l=1}^m \bar{y}_l \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr} - \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \bar{y}_l^2 \\
&= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr}^2 - 2\sum_{l=1}^m \hat{\bar{y}}_l \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr} + 2\sum_{l=1}^m n_l \bar{y}_l \bar{y}_l - \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \bar{y}_l^2 \\
&= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr}^2 - 2\sum_{l=1}^m \hat{\bar{y}}_l \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr} + \cancel{2\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \bar{y}_l^2} - \cancel{\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \bar{y}_l^2}
\end{aligned}$$

Nótese que:  $\hat{\bar{y}}_l \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr} = \frac{\hat{y}_l}{n_l} \sum_{r=1}^{n_l} y_{lr} = \hat{y}_l \frac{\sum_{r=1}^{n_l} y_{lr}}{n_l} = \hat{y}_l \bar{y}_l$  de tal forma que:

$$\begin{aligned}
SC_{FA} &= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr}^2 - 2\sum_{l=1}^m \hat{y}_l \bar{y}_l + \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \bar{y}_l^2 \\
&= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr}^2 - 2\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \hat{y}_{lr} \bar{y}_l + \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} \bar{y}_l^2 \\
&= \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (\hat{y}_{lr}^2 - 2\hat{y}_{lr} \bar{y}_l + \bar{y}_l^2) = \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (\hat{y}_{lr} - \bar{y}_l)^2
\end{aligned}$$

Por lo tanto la suma de cuadrados de la falta de ajuste es:

$$SC_{FA} = \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (\hat{y}_{lr} - \bar{y}_l)^2$$

Con los valores anteriores se construye la estadística de prueba para determinar si hay evidencia estadística de falta de ajuste. Como se vio anteriormente las sumas de cuadrados no son suficientes para la prueba, es necesario definir los estimadores de la variabilidad para cada componente, así como los grados de libertad respectivos.

El estimador de la varianza producto de las repeticiones en cada una de las  $m$  combinaciones de las variables explicativas es  $\hat{\sigma}_l^2 = \sum_{r=1}^{n_l} \frac{(y_{lr} - \bar{y}_l)^2}{n_l - 1}$ . Con este

estimador se puede construir una variable aleatoria con distribución  $\chi^2$  como sigue:

$$\frac{\hat{\sigma}_l^2}{\sigma_0^2}(n_l - 1) \sim \chi_{(n_l - 1)}^2$$

De la misma forma se puede construir una estadística  $\chi^2$  para probar la Varianza del Error Puro  $\hat{\sigma}_{EP}^2$ , de tal forma que  $\sum_{l=1}^m \chi_{(n_l - 1)}^2 = \chi_{(\sum_{l=1}^m (n_l - 1))}^2 = \chi_{(n - m)}^2$ . Como la Variabilidad para cada repetición es independiente una de otra por hipótesis de independencia entre observaciones del modelo de regresión, entonces el estimador de la Varianza del error puro se puede calcular como la suma de las sumas de cuadrados para cada repetición entre el número tamaño total de muestra menos el número de combinaciones de las variables explicativas diferentes entre si:

$$\hat{\sigma}_{EP}^2 = \frac{SC_{EP}}{n - m} = \frac{\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr} - \bar{y}_l)^2}{n - m}$$

A este valor se le llama Cuadrados Medios del Error Puro.

Variabilidad de la falta de ajuste. Para determinar el estimador de la varianza de la falta de ajuste primero se determinan los grados de libertad de la falta de ajuste. Una vez que se determina el valor de los grados de libertad del error puro, los grados de libertad de la falta de ajuste se obtienen como la diferencia de los grados de libertad del error menos el valor de los anteriores, es decir,  $n - k - 1 - (n - m) = m - k - 1$ . De tal forma que la variabilidad del término de Falta de Ajuste es:

$$\hat{\sigma}_{FA}^2 = \frac{SC_{FA}}{m - k - 1} = \frac{\sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (\hat{y}_{lr} - \bar{y}_l)^2}{m - k - 1}$$

Este valor se llama Cuadrados Medios de la Falta de Ajuste.

Bajo la hipótesis de homocedasticidad el valor del cociente para probar la falta de ajuste, es:

$$F_C = \frac{SC_{FA} / (m - k - 1)}{SC_{EP} / (n - m)} \sim F_{m - k - 1, n - m}$$

En este caso las hipótesis a contrastar son:

$H_0$  : El polinomio de grado uno es suficiente para explicar la respuesta Vs.  $H_1$  : El polinomio de grado uno no es suficiente para explicar la respuesta

En este caso si el valor de  $F$  calculado es menor que el valor tabulado, significa que no hay falta de ajuste en el modelo. Los valores de la prueba de falta de ajuste se

pueden incorporar a la tabla ANDVA como una subdivisión de suma de cuadrados. La suma de cuadrados del total ajustado se divide primero en suma de cuadrados de la regresión y en suma de cuadrados de los residuales, esta última se subdivide en suma de cuadrados de la falta de ajuste y en suma de cuadrados del error puro.

En la tabla ANDVA 2.6 las pruebas estadísticas se realizan considerando a los Cuadrados Medios del Error Puro como el estimador de la Variabilidad Aleatoria

En esta tabla se encuentran contenidas, tanto la prueba de significancia global, cuyo criterio de rechazo es el mismo que en los casos anteriores, si el valor de  $F_{reg}$  es grande, se tendrá evidencia para el rechazo de  $H_0$  y por lo tanto se concluirá que alguna de las variables explicativas es significativa; y la prueba de Falta de Ajuste, donde un valor grande de  $F_{FA}$  será evidencia que el modelo no es suficiente para describir la respuesta. Por otra parte, la prueba estadística para la regresión ahora solo depende del error aleatorio, no está contaminada por el error de falta de ajuste, y debe ser reinterpretada en términos de este.

Tabla 2.6. Tabla ANDVAIII para el MRLM para la prueba de falta

de ajuste:  $Y_{lr} - \bar{Y}_{..} = \sum_{j=1}^k \beta_j X_{jl} + \varepsilon(\varphi_l + \psi_r)_{lr}$

FV	GL	SC	CM	$\frac{F_c}{F_c}$	NSD
Reg	$k$	$SC_{reg}$	$CM_{reg}$	$F_{reg} = \frac{CM_{reg}}{CM_{EP}}$	$P(F_1 \geq F_{reg}) = \alpha_r^*$
Res	$n - k - 1$	$SC_{res}$	$CM_{res}$		
F.A	$n - k - m$	$SC_{FA}$	$CM_{FA}$	$F_{FA} = \frac{CM_{FA}}{CM_{EP}}$	$P(F_2 \geq F_{FA}) = \alpha_f^*$
E.P.	$m - 1$	$SC_{EP}$	$CM_{EP}$		
T. A.	$n - 1$	$SC_{TA}$			

**Ejemplo 2.1.** Respuesta de la duración de herramientas a la velocidad del torno y la profundidad de corte

Una compañía usaría una nueva herramienta de corte que ofrece un proveedor, este asegura que la nueva herramienta reducirá los costos de producción porque durará más que el modelo anterior y el costo de reemplazo de la herramienta se reducirá. La vida de una herramienta de corte de metales depende de varias condiciones de operación como la velocidad del torno y la profundidad de corte.

Tabla 2.7. Resultados del experimento para el estudio de duración de herramienta de corte

Numero de Muestra	$X_1$ : Velocidad del torno	$X_2$ : Profundidad del corte	$Y$ : Vida de la herramienta
1	600	0.100	154
2	600	0.050	132
3	200	0.100	166
4	200	0.050	83
5	683	0.075	156
6	117	0.075	144
7	400	0.110	166
8	400	0.040	91
9	400	0.075	167
10	400	0.075	175
11	400	0.075	170
12	400	0.075	176
13	400	0.075	156
14	400	0.075	170

En este caso las variables explicativas son la profundidad de corte y la velocidad de corte. La variable de respuesta corresponde a duración de la herramienta. Con estos datos se desea ajustar el modelo polinomial de grado uno mediante la técnica de regresión lineal  $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \varepsilon_i$ .

Hipótesis a probar.

$H_0$  : La duración de la herramienta no depende de la velocidad ni de la profundidad de corte.

:  $\beta_1 = \beta_2 = 0$

: No hay regresión

$H_1$  : La duración de la herramienta depende de la velocidad y/o de la profundidad de corte.

:  $\beta_j \neq 0$  para alguna  $j = 1, 2$

: Hay regresión

Se presenta a continuación la construcción de la prueba de ajuste para el modelo  $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \varepsilon_i$  haciendo uso del álgebra de matrices.

A partir de los datos se construyen las matrices  $\underline{Y}$  y  $X$  respetando el número de muestra y la combinación de los valores de las variables explicativas y su respectiva respuesta, de la siguiente forma:

Matriz de la variable de respuesta. Una matriz columna de orden  $(14 \times 1)$  con las observaciones en el mismo orden en que fueron registradas, del uno al catorce.

$$Y = \begin{pmatrix} 154 \\ 132 \\ 166 \\ 83 \\ 156 \\ 144 \\ 166 \\ 91 \\ 167 \\ 175 \\ 170 \\ 176 \\ 156 \\ 170 \end{pmatrix}$$

Matriz de Diseño. Una matriz de orden  $(14 \times 3)$  cuya primera columna está compuesta de unos y las siguientes dos columnas de los valores de las variables explicativas con las observaciones, también en el mismo orden en que fueron registradas. Nótese que la segunda columna corresponde a los valores de la variable Velocidad de corte y la tercera columna corresponde a los valores de la variable Profundidad de corte.

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 600 & 0.100 \\ 1 & 600 & 0.05 \\ 1 & 200 & 0.100 \\ 1 & 200 & 0.050 \\ 1 & 683 & 0.075 \\ 1 & 117 & 0.075 \\ 1 & 400 & 0.110 \\ 1 & 400 & 0.040 \\ 1 & 400 & 0.075 \\ 1 & 400 & 0.075 \\ 1 & 400 & 0.075 \\ 1 & 400 & 0.075 \\ 1 & 400 & 0.075 \\ 1 & 400 & 0.075 \end{pmatrix}$$

Mediante el uso de estas matrices se pueden construir los estimadores de los parámetros del modelo de regresión  $\hat{\underline{\beta}} = (X^t X)^{-1} (X^t \underline{Y})$ , para ello se calculan los siguientes resultados parciales:

$$(X^t X) = \begin{pmatrix} 14 & 5600 & 1.05 \\ 5600 & 0.000 & 420 \\ 1.05 & 420 & 0.0837 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$(X^t X)^{-1} = \begin{pmatrix} 1.7075 & -0.0012 & -15.1515 \\ -0.0012 & 3.1232 \times 10^{-6} & -2.7755 \times 10^{17} \\ -15.1515 & -2.7755 \times 10^{17} & 202.02 \end{pmatrix}$$

$$(X^t Y) = \begin{pmatrix} 2106 \\ 853196 \\ 163.2 \end{pmatrix}; Y^t Y = (328120) \text{ y } \bar{Y} = 150.429$$

De tal forma que los estimadores de los parámetros del modelo de regresión son:

$$\hat{\underline{\beta}} = (X^t X)^{-1} X^t Y = \begin{pmatrix} 57.3956 \\ 0.03371 \\ 1060.61 \end{pmatrix}$$

Con el resultado anterior se procede a la construcción de la Tabla ANDVAII (Tabla 2.8) para un modelo polinomial de primer orden.

Tabla 2.8. ANDVAII para el ejemplo de duración de herramienta

de corte, con modelo ajustado  $Y_i - \bar{Y} = \sum_{j=1}^2 \beta_j X_{ji} + \varepsilon_i$

Fuente de Variación	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Cuadrados Medios	F	NSD
Regresión	5932.21	2	2966.11	6.06	0.017
Residual	5385.22	11	489.57		
Total Aj	11317.43	13			

Se puede observar que el NSD es menor a 0.05 por lo que la hipótesis nula se rechaza, concluyendo así que la velocidad de corte o la profundidad de corte expliquen a la variable de respuesta.

En la tabla anterior se puede observar que el Nivel de Significancia Descriptivo es igual con 0.017 aproximadamente, el cual es un valor menor al 0.05. Por lo tanto se dice que hay evidencia significativa para el rechazo de  $H_0$ , concluyendo así que la duración de corte dependa de la velocidad o de la profundidad de corte.

Las estimaciones de los coeficientes se presentan en la Tabla 2.9:

Tabla 2.9. Prueba de hipótesis para los coeficientes del modelo polinomial de primer orden, para el ejemplo de duración de herramienta de corte

	$\beta$	$\sigma_{\beta}$	Tc	NSD
Constante	57.396	28.913	1.985	0.0726
VT	0.034	0.039	0.862	0.4069
PC	1060.610	314.487	3.373	0.0062

Con base en los resultados de esta tabla se puede observar que la variable que explica la duración de herramienta es la profundidad de corte, pues esta es significativa al 0.62%.

Obsérvese que las últimas seis observaciones del ejemplo 2.1 corresponden a repeticiones (Tabla 2.7). A continuación se presenta la Tabla ANDVA para probar la influencia significativa lineal de las variables y la falta de ajuste del polinomio lineal  $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \varepsilon_i$ , su construcción requiere las estimaciones de las sumas de cuadrados siguientes:

$$SC_{reg} = \hat{\beta}^t X^t Y - n\bar{Y}^2 = 5932.21$$

$$SC_{res} = Y^t Y - \hat{\beta}^t X^t Y = 5385.22$$

$$SC_{FA} = \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (\hat{y}_{lr} - \bar{y}_{l.})^2 = 5125.22$$

$$SC_{EP} = \sum_{l=1}^m \sum_{r=1}^{n_l} (y_{lr} - \bar{y}_{l.})^2 = 260$$

$$SC_{TA} = Y^t Y - n\bar{Y}^2 = 11317.43$$

Con estas sumas de cuadrados se pueden contrastar las siguientes hipótesis:

$H_{01}$  : El polinomio de grado uno es significativo

$H_{02}$  : El polinomio de grado uno es suficiente para explicar la respuesta

Vs.  $H_{11}$  : El polinomio de grado uno no es significativo

Vs.  $H_{12}$  : El polinomio de grado uno lineal no es suficiente para explicar la respuesta

La tabla de ANDVA es la siguiente:

Tabla 2.10. Tabla ANDVAIII para probar falta de ajuste de la duración de herramienta de corte para el MRLM:

$$Y_{lr} - \bar{Y}_{..} = \sum_{j=1}^2 \beta_j X_{jl} + \varepsilon(\varphi_l + \psi_r)_{lr}$$

Fuente de Variación	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Cuadrados Medios	F	NSD
Regresión	5932.21	2	2966.11	6.06	0.017
Residual	5385.22	11	489.57		
FA	5125.22	6	854.20	16.43	0.004
EP	260.00	5	52.00		
Total Aj	11317.43	13			

Se puede observar que los valores NSD en ambos casos son valores muy pequeños. Por lo tanto en el caso de la falta de ajuste se rechaza la hipótesis nula y se dice que el modelo lineal no es suficiente para ajustar la respuesta.

De la tabla anterior se obtiene que para la prueba de significancia del modelo se rechaza  $H_0$  toda vez que la prueba resultó ser altamente significativa. Esto significa que al menos una variable describe la respuesta, por ello, tiene sentido el modelo. Lo anterior ocurrió porque los cuadrados medios del error puro son más pequeños que los cuadrados medios de los residuales y ello hace más sensible la prueba de detección de la regresión. Por otro lado en el caso de la prueba de falta de ajuste se puede observar que el NSD es también altamente significativo, por lo tanto se concluye que el modelo polinomial de grado uno no es suficiente para describir la respuesta, luego entonces es necesario o ajustar un polinomio de grado dos o mayor, o determinar si existen otras variables que describen la respuesta.

## 2.4. Diferencias entre los estudios Observacionales (Modelos de Regresión) y los estudios Experimentales (Modelo de Diseño de Experimentos) para el análisis de información

**Estudios Observacionales.** Determinan descriptivamente la situación bajo estudio y cuando se trata de comparar poblaciones lo hace sin tener rigor científico, pues no lo hace a través de mediciones realizadas sobre las poblaciones por comparar de manera o forma experimental.



**Estudios Comparativos o de Diseño de Experimentos.** Para su estudio, los estudios comparativos requieren rigor científico para ello, por lo cual se llevan a cabo experimentos y estos se realizan utilizando el término tratamiento o población bajo estudio, donde al menos cada tratamiento debe tener una repetición experimental o las necesarias (para tener una experimentación concluyente: determinando el número de repeticiones de los tratamientos para concluir si al menos dos tratamientos son diferentes o bien si son iguales) lo que permitirá valorar la comparación entre los tratamientos. Como pudo observarse para poder apoyar la comparación, lo cual se hace repitiendo el procedimiento de comparación o repetición experimentalmente.

**Los estudios Experimentales de Poblaciones o Tratamientos:** Se determinan por el propósito que tiene estos estudios, en diferenciar a las poblaciones o tratamientos, el cual es de utilidad en la vida diaria para diferenciar o comparar realmente efectos entre tratamientos en muchas disciplinas de conocimiento como en Medicina, Psicología, entre otras, así como en la determinación de la Producción Industrial que también se lleva a cabo de manera controlada para optimizar los procesos de producción.

Como se puede constatar en diversas áreas de conocimiento, hay diferentes características por las cuales se pueden diferenciar o comparar las poblaciones o tratamientos bajo estudio.

Con la idea de darle generalidad al término tratamiento del que estamos tratando, le llamaremos población.

Los estudios comparativos, se diferencian de acuerdo a la definición del grado generalidad bajo estudio en diversos aspectos o características de las poblaciones, para un particular tipo de investigación por realizar tomando en cuenta:

- a. El tiempo de referencia en que ocurre la investigación.
- b. La extensión geográfica por ejemplo que abarca la investigación.
- c. Las características del material experimental bajo el cual ocurre el resultado deseado del estudio.
- d. Las condiciones de experimentación del material bajo estudio.
- e. Tamaño de la unidad experimental bajo estudio.

Cuando solo hay un factor de los cinco antes definidos, que es de interés para saber si hay efecto de factor bajo estudio, se dice que las poblaciones o tratamientos son homogéneos para su comparación y por lo tanto las poblaciones o tratamientos

son comparables, pues la diferencia puede ser ocasionada por la diferencia de los niveles del único factor bajo estudio que pudiera ocasionarlo. El modelo que se usa en este caso se denomina Completamente al azar cuando las poblaciones o tratamientos son homogéneos o sin uso de tipos de Bloques o Covariables.

Cuando las poblaciones o tratamientos no son homogéneos sino heterogéneos, ello se debe a que pudiera haber uno o más factores que se pudieran confundir o pudieran encubrir el efecto verdadero de los tratamientos o poblaciones bajo estudio, por lo cual las condiciones de comparación no son homogéneas sino heterogéneas por lo cual habría que llevar un experimento que controle los factores de confusión presentes encubridor del efecto verdadero.

Para ellos se propone utilizar el concepto de bloqueo una o varias veces cuando las variables de confusión son cualitativas o bien si las variables de confusión son cuantitativas, entonces se utiliza una o más covariables para controlar los efectos de confusión cuantitativos.

Algunos ejemplos sobre tipo de bloques y de covariables se presentan a continuación:

Tipos de variables o factores de confusión cualitativos o Bloques:

1. Modelo con un tipo de Bloque, para un factor de confusión
2. Modelo con dos tipos de Bloque, Cuadro Latino

Tipos de variables o factores de confusión cuantitativos o Covariables:

1. Modelo con una covariable.
2. Modelos con dos covariables.

Si bien es cierto que, los propósitos del MR y del MDE inicialmente son distintos, pues mientras en el Modelo de Regresión es de interés solo una descripción, en el Modelo de Diseño de Experimentos es de interés que realmente se pueda hacer una comparación entre las poblaciones bajo estudio.

Sin embargo, conforme se avanza en el procedimiento para la obtención de la optimización, las diferencias en las características de dichos modelos van desapareciendo y el fin de ambos es que realmente se tenga una buena comparación con dichos modelos para poder optimizar el proceso de producción.

Lo anterior es consecuencia de tener los medios adecuados para poder llevar a cabo las comparaciones de las poblaciones bajo estudio, en particular al contar con condiciones controladas homogéneas, bien sea en un laboratorio de investigación o bien en una planta piloto para escalar los resultados obtenidos en la investigación de

carácter industrial, lo cual permita evitar tener presentes posibles factores de confusión como variables categóricas que para su control requieran del control del efecto de bloques, si son cualitativos, o bien si las variables de confusión son cuantitativas evitar utilizar entonces covariables para el control de estas variables de confusión facilitando la modelación para la optimización.

Por lo anterior, bajo la ausencia del control de factores de confusión, solo es necesario definir por completo la matriz de diseño  $X$  para poder realizar adecuadamente todas las comparaciones necesarias en la experimentación, considerando los correspondientes puntos centrales y puntos axiales o estrellas. De manera que se pueda llevar a cabo el proceso de optimización convenientemente mediante el ajuste de polinomios de primer grado, cuando durante la experimentación secuencial se esté alejado del punto óptimo, y con polinomios de segundo grado cuando el proceso esté próximo a la región óptima.

## Capítulo 3. Modelo de Diseño de Experimentos

### 3.1. Introducción

En el área de estadística el concepto de población hace referencia al conjunto de mediciones que se efectúan sobre una(s) característica(s) bajo estudio en un grupo de individuos u objetos, los cuales tiene al menos un factor en común, lo cual define el grado de generalidad o aplicabilidad de la investigación. Cada elemento de la población corresponde a una medición sobre alguna unidad elemental denominada unidad experimental, al considerar algunas de ellas se puede(n) analizar una(s) respuesta(s) para poder inferir hacia la población. La medición realizada a estas unidades elementales es determinada para analizar los datos y verificar si se cumplen los objetivos de la investigación considerando la meta final del investigador.

En el proceso de experimentación se busca estudiar la comparación de diversas poblaciones objetivo a través de un análisis estadístico de una parte de las poblaciones, llamadas muestras. Estas muestras deben ser representativas de las poblaciones objetivo, para ello se seleccionan mediante un procedimiento aleatorio. Dichas muestras obtenidas de manera aleatoria, nos permitirán realizar aseveraciones sobre la comparación de las poblaciones mediante el estudio de estimadores de las muestras. Para ello se requieren definir las características o factores comunes de las poblaciones objetivo, con lo cual se define el grado de aplicabilidad de los resultados de la investigación estadística. Si el grado de aplicabilidad (o de generalidad) es bajo, es consecuencia de que el número de factores comunes de las poblaciones bajo estudio son muchos y los resultados obtenidos solo servirán para poder realizar inferencias con baja cobertura. Por el contrario si el grado de generalidad es alto, es consecuencia de que el número de factores comunes de las poblaciones son pocos, significa que los resultados del análisis estadístico permitirán realizar inferencias que tendrán una mayor cobertura de aplicación sobre las poblaciones. Cuando el propósito de inferir hacia las poblaciones en realidad se cumple, se dice que la selección de la muestra del diseño tiene validez externa, es decir, la inferencia puede hacerse hacia la comparación de las poblaciones bajo estudio.

Las condiciones o factores que se investigan, en los diseños de tratamientos, se deben entender como las condiciones causales que afectan a las poblaciones bajo estudio. Dichos factores o condiciones comunes entre grupos pueden favorecer la respuesta que se estudia considerando características tanto del material experimental así como de las condiciones de experimentación. Estos factores se pueden clasificar en dos grupos, factores favorables y factores no favorables para obtener los valores

de la respuesta deseada. Los factores favorables son aquellos que dependen del grado de generalidad de la población bajo estudio, el diseño de los factores clasificados como tratamientos que suponemos afectan la respuesta y son de interés estudiarlos, y del diseño experimental que puede corresponder a condiciones homogéneas que son consecuencia de no tener la presencia de factores que puedan confundir la(s) respuestas bajo estudio. O bien que el diseño experimental corresponda a condiciones heterogéneas consecuencia de posibles factores de confusión que distorsionan la(s) respuesta(s), y que no son de interés para el estudio, porque deben ser controlados. Los factores no favorables son definidos como fluctuación aleatoria, los cuales se consideran como factores que no influyen en la respuesta producto del azar, o bien factores que afectan la respuesta no obstante que es imposible controlarlos.

Las variaciones en la respuesta producidas por los factores comunes y no comunes serán de interés para detectar diferencias en el promedio de la muestra que se pueden derivar por efecto de los tratamientos bajo estudio o por efecto de la fluctuación aleatoria de los factores no favorables. Ambos tipos de factores se encuentran presentes en el medio ambiente y pueden ser clasificados como factores comunes, factores bajo estudio y factores de confusión, estos últimos deben ser controlados, dependen del nivel de influencia que tienen para modificar la respuesta, sin que se pierda el grado de generalidad en los resultados obtenidos. Aquellos factores que no son parte del medio ambiente se denominarán como factores no comunes y pasarán a formar parte de la fluctuación aleatoria.

La asociación más simple entre la variable de respuesta y los factores que influyen en ella, comunes y no comunes, se puede modelar de la siguiente manera:

$$y_i = \mu(A,B,C,D) + \varepsilon_i(E,F,\dots)$$

Donde:

$y_i$  es la  $i$ -ésima observación de la respuesta bajo estudio o bien variable de respuesta.

$\mu(A,B,C,D)$  se refiere a la media de los factores comunes A, B, C, D.

$\varepsilon_i(E,F,\dots)$  la fluctuación aleatoria que depende de los valores del  $i$ -ésimo valor de la variable de respuesta para los factores no comunes E, F,... También representa la variabilidad de  $y_i$ .

La fluctuación aleatoria es imprevisible, sin embargo tiende a ocurrir con cierta regularidad. Si un fenómeno se estudia un número grande de veces se puede

observar que el comportamiento de la fluctuación se comporta como una variable aleatoria normal. Observándose como una generalidad que estos valores con frecuencia serán cercanos a 0 y por el mismo proceso de la toma de información, estos se comportarán de manera independiente, pues la toma de la información debe ser aleatoria. En resumen el comportamiento de los valores  $\varepsilon_i$  corresponderá a variables aleatorias  $Normal(0, \sigma^2)$  independientes e idénticamente distribuidos.

El modelo de manera económica se puede expresar como:

$$\begin{aligned} y_i &= \mu + \varepsilon_i \\ i &= 1, 2, \dots, n \\ \varepsilon_i &\sim Normal(0, \sigma^2) \end{aligned}$$

Dicho modelo se conoce con el nombre del Modelo Lineal más Simple.

### 3.2. Arreglo de tratamientos con efectos fijos, con un criterio de clasificación cuantitativo para condiciones homogéneas con repeticiones

Si los cambios producidos por un factor son de interés estudiarlos, de tal forma que aunque genere cambios en la respuesta, no altere el grado de generalidad de la misma, se puede suponer que la variabilidad entre las poblaciones diferentes generadas por efecto de este factor son las mismas, o bien homogéneas. Entonces solo bastará comparar los parámetros de tendencia central de las poblaciones.

Esta situación se puede modelar agregando el término correspondiente de dicho factor de interés al modelo anterior, separándolo de la media de los factores comunes en el término  $\mu$  y agregándolo como un criterio de clasificación que represente los cambios de las medias por grupo o tratamiento respecto a la media general de los factores comunes, obteniendo así el siguiente modelo con un criterio de clasificación:

$$\begin{aligned} y_{ij} &= \mu(A, B, C, D^i) + \varepsilon_{ij}(E, F, \dots) \\ y_{ij} &= \mu(A, B, C) + \tau(D^i) + \varepsilon_{ij}(E, F, \dots) \\ y_{ij} &= \mu + \tau_i + \varepsilon_{ij} \\ y_{ij} &= \mu_i + \varepsilon_{ij}, \text{ con } \mu_i = \mu + \tau_i, \text{ entonces } \tau_i = \mu_i - \mu \end{aligned}$$

Con  $\sum_{i=1}^t \tau_i = 0$ ,  $i = 1, 2, \dots, t$  con  $t$  tratamientos;  $i, j = 1, 2, \dots, n_i$  con  $n_i$  repeticiones para el tratamiento  $i$ ,  $\varepsilon_{ij} \sim NIID(0, \sigma^2)$ .

Donde:

Si  $n_i = k > 1$  para todo tratamiento, se dice que el arreglo de tratamientos es balanceado de orden  $k$ .

$\mu$ : Es la media general ignorando el efecto del factor D.

$\mu_i$ : Es la media general del  $i$ -ésimo nivel del factor D.

$\tau_i = \mu_i - \mu$ : El efecto de tratamiento del  $i$ -ésimo nivel del factor D.

$\varepsilon_{ij}$ : La  $j$ -ésima repetición de la Fluctuación aleatoria del  $i$ -ésimo tratamiento

El modelo que representa esta situación recibe el nombre de Modelo de Diseño de Experimentos Completamente al Azar con un Criterio de Clasificación con efecto de tratamientos fijos. Se dice que los tratamientos son fijos cuando todos los niveles de interés del factor son estudiados en dichos valores para inferir sobre ellos.

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \varepsilon_{ij}$$

Con  $i = 1, 2, \dots, t; j = 1, 2, \dots, n_i, \varepsilon_{ij} \sim NIID(0, \sigma^2)$

Además el término  $\tau_i$  puede depender de uno o más factores bajo estudio. En cualquier situación de las comentadas, si solo se trata de un factor, los tratamientos son los niveles del mismo factor. En cambio, si se trata de más de un factor, los tratamientos son las combinaciones de los niveles de los distintos factores. Como solo se estudian los tratamientos sin importar que haya varios factores, se dice que el diseño experimental tiene un criterio de clasificación, tratamientos, y se pretende entonces estudiar el efecto fijo de los tratamientos.

### 3.3. Arreglo de tratamientos con efectos fijos, con un criterio de clasificación cuantitativo para condiciones heterogéneas

En el caso que las condiciones bajo estudio no sean homogéneas, es decir que exista la presencia de un factor que afecta o contamina la respuesta bajo estudio, sin embargo este no puede ser controlado ni se pretende estudiar, se dice que las condiciones de experimentación son heterogéneas, por lo tanto se deberá agregar al diseño experimental el término del modelo que permite controlar ese factor o contaminación experimental y reducir su influencia en la variable de respuesta. El modelo se representa de la siguiente manera:

$$y_i = \mu(A, B, C, D^i) + \varepsilon_i(E^k, F, \dots)$$

$$y_{ij} = \mu(A, B, C) + \tau(D^i) + \gamma(E^k) + \varepsilon_{ij}(F, \dots)$$

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \gamma_k + \varepsilon_{ij}$$

Con  $i = 1, 2, \dots, t; j = 1, 2, \dots, n_i, \varepsilon_{ij} \sim NIID(0, \sigma^2)$

Donde

$\mu$ : Es la media general ignorando el efecto del factor D.

$\mu_i$ : Es la media general del i-ésimo nivel del factor D.

$\tau_i = \mu_i - \mu$ : El efecto de tratamiento del i-ésimo nivel del factor D.

$\gamma_k$ : Es el factor de confusión que debe ser eliminado o controlado para evitar la contaminación en la respuesta.

$\varepsilon_{ij}$ : La j-ésima repetición de la fluctuación aleatoria del i-ésimo tratamiento

En general los tratamientos se determinan con el diseño o arreglo de tratamientos y la forma de realizar una competencia justa entre los tratamientos se llama diseño experimental. En el presente escrito se abordará el estudio de diseños experimentales bajo condiciones homogéneas, es decir, las condiciones de experimentación se dan bajo condiciones controladas en la planta piloto y la asignación de los tratamientos es de forma aleatoria, luego entonces el efecto de los factores de confusión no se encuentra presente pues el procedimiento de experimentación se llevará bajo condiciones controladas y los factores de confusión se encontrarán ausentes.

Como el experimento se diseña con condiciones controladas se dice que no hay fuentes identificables de variación entre las unidades experimentales de los tratamientos en la experimentación o bien no hay factores de confusión identificables, por lo tanto el término correspondiente al diseño experimental  $\gamma(E^k)$  pasa a ser parte de la fluctuación aleatoria  $\varepsilon_{ij}(E^k, F, \dots)$ . De esta manera el modelo experimental con un criterio de clasificación se expresa de la siguiente manera:

Modelo de Diseño de Experimentos Completamente al Azar con un Criterio de Clasificación con efecto de tratamientos fijos.

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \varepsilon_{ij}$$



$$l=1,2,\dots,t$$

$$j=1,2,\dots,n_l$$

$$\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)$$

### 3.4. Modelo de diseño de experimentos considerando el criterio de clasificación como cuantitativo, con niveles equiespaciados, para condiciones homogéneas

**Ejemplo 3.1.** Porcentaje de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo de la variedad Hass, de acuerdo a tres temperaturas de hidrocalentamiento, considerando 30 segundos de tiempo de inmersión

A continuación se presentan los datos, la prueba de hipótesis y los intervalos de confianza.

Tabla 3.1. Tiempo de inmersión de 30 segundos para aguacates afectados por pudrición de pedúnculo

Repeticiones		R1	R2	R3
Temperatura de Hidrocalentamiento	50 °C	55.0	83.6	67.3
	52 °C	54.4	54.6	46.0
	54 °C	34.0	45.0	41.1

En la siguiente tabla se tiene la prueba de significancia para el porcentaje de aguacates afectados por pudrición en el pedúnculo. Como se puede ver la prueba es significativa al 2.6%, lo cual implica que al menos una de las temperaturas de inmersión tiene un efecto medio diferente al de las demás.

Tabla 3.2. Tabla ANDVA para estudio de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
Intra grupos	1241.	2	620.6	7.13	0.0260
Inter grupos	522.0	6	87.01		
Total (Corr.)	1763.	8			

En la siguiente tabla se presentan los tiempos medios de afectación por temperatura. Como el porcentaje medio total de afectación es de 53.44% y los

intervalos de confianza para 50 y 54 grados no contienen este valor, entonces se concluye que estos dos tiempos tienen un efecto significativo. Por otra parte, los intervalos de estas dos temperaturas son diferentes, de tal forma que estadísticamente, puede haber diferencia significativa entre ellas, véase Gráfica 3.1.

Tabla 3.3. Tabla de efectos para el ejemplo de los aguacates afectados por pudrición de pedúnculo

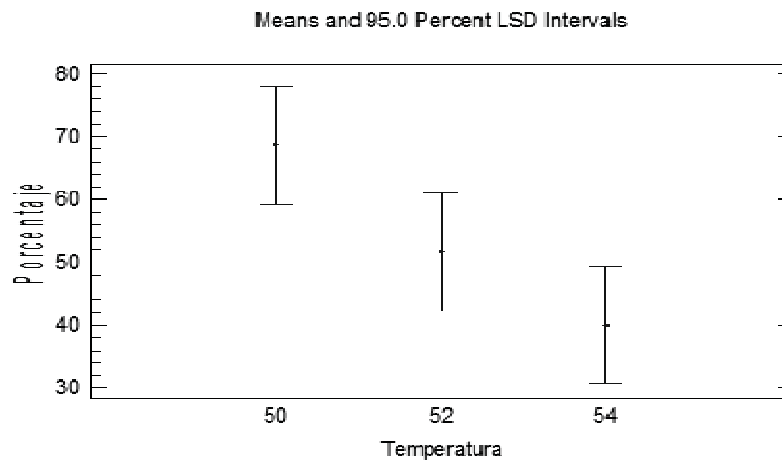
<i>Temperatura</i>	<i>Conteo</i>	<i>Media</i>	<i>Error estándar</i>	<i>Límite inferior</i>	<i>Límite superior</i>
50	3	68.63	5.385	59.32	77.95
52	3	51.67	5.385	42.35	60.98
54	3	40.03	5.385	30.72	49.35
Total	9	53.44			

Modelo de diseño de experimentos:

$$\hat{y}_i = \hat{\mu} + \hat{\tau}_i = \hat{\mu}_i; \hat{\tau}_i = \hat{\mu}_i - \hat{\mu}$$

Con:  $\hat{\mu} = 53.44$ ;  $\hat{\tau}_1 = 14.89$ ,  $\hat{\tau}_2 = -1.83$  y  $\hat{\tau}_3 = -13.41$

Gráfica 3.1. Porcentaje de frutos afectados por pudrición de pedúnculo



De la gráfica anterior se observa que en la medida que la temperatura sea mayor, menor es el porcentaje de daño por pudrición de pedúnculo.

### 3.4.1. Modelo de Polinomios Ortogonales para Estudios Experimentales

Cuando se lleva a cabo un experimento que previamente se planeó, como el ejemplo anterior, donde se considera bajo estudio un factor cuantitativo, se tiene la posibilidad de estudiar la tendencia de la respuesta de la manera más sencilla posible al cambiar los niveles de interés para su estudio de manera equiespaciada, esto es que la diferencia numérica de los niveles contiguos del factor sea la misma siempre. Lo anterior puede hacerse con mayor facilidad para su análisis, si se considera el uso de Polinomios que sean Ortogonales, para ello solo basta considerar que los niveles de los factores bajo estudio sean equiespaciados, lo cual propiciará que las variables que representan los grados de los polinomios sean independientes u ortogonales.

El ajuste de polinomios ortogonales permitirá estudiar cada factor bajo estudio del modelo de forma independiente, es decir, el análisis estadístico de cada término no influenciará a los demás, teniendo como consecuencia que cada término solo presenta correlación con la variable de respuesta. Este proceso elimina los posibles ajustes sucesivos de los términos del modelo, pues aquellos términos no significativos simplemente se pueden retirar del modelo, sin afectar estos a los demás términos que sí fueron significativos.

El estudio de estos modelos polinomiales ortogonales a través del diseño experimental, al mismo tiempo presenta una ventaja sobre los modelos polinomiales no ortogonales del modelo de regresión, toda vez que por la forma en que se lleva a cabo el muestreo, se seleccionan niveles fijos de los factores bajo estudio y se asegura tener la estimación de la fluctuación aleatoria del error puro. La estimación del error aleatorio solo estará compuesta por la variabilidad pura por efecto de los tratamientos y no por la falta de ajuste de otras variables, pues en principio en el modelo están considerados todos los posibles factores que afectan la respuesta. Por lo tanto el término llamado error de ajuste, en el modelo de regresión compuesto por la variabilidad de falta de ajuste y por la variabilidad del error puro, en el modelo de diseño de experimentos solo estará compuesto por la variabilidad del error puro.

Como se mencionó en el capítulo 2, este modelo requiere de nuevas herramientas para su análisis, ya que se trata de una nueva metodología de modelación estadística, no obstante Fisher describió un método análogo para estudiar estos modelos a través de una reparametrización. El proceso de reparametrizar consiste en transformar el modelo de diseño de experimentos, donde las herramientas estadísticas no están desarrolladas, a un modelo de regresión, en el cual los métodos de estimación ya se habían desarrollado.

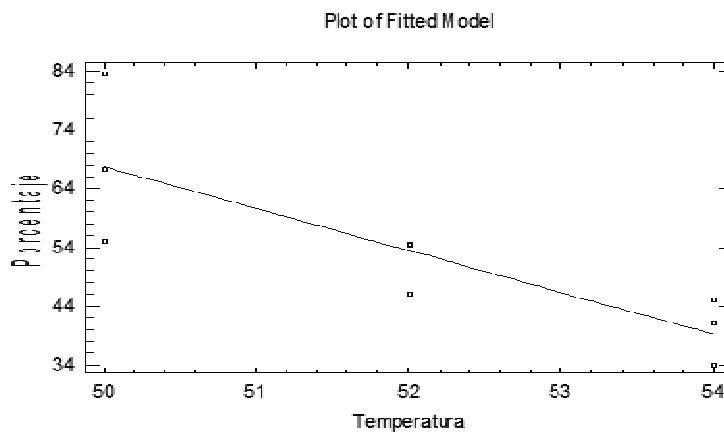
Sin embargo una vez que se determine que la variable de respuesta depende del factor de clasificación cuantitativo, se procederá a realizar un ajuste de una función polinomial de grado  $t-1$ .

De esta forma el modelo de diseño de experimentos  $y_{ij} = \mu + \tau_i + \varepsilon_{ij}$  puede estudiarse con mayor precisión a través de la división de la variabilidad.

**Ejemplo 3.2.** Continuación del Ejemplo 3.1: Calidad de ajuste, pronósticos obtenidos con el modelo de polinomios ortogonales

De acuerdo con la tabla de ANDVA se sabe que al menos uno de los tratamientos tiene media diferente al resto. Dado que el factor temperatura es un factor cuantitativo se recurre a una técnica para subdividir la suma de cuadrados de tratamientos en la suma de cuadrados para contrastes de tendencia o polinomios ortogonales.

Gráfica 3.2. Gráfica de medias con línea de tendencia para el ejemplo de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo



La técnica de contrastes de tendencia permite estudiar el patrón de cambios que siguen las medias de las poblaciones generadas al modificar los niveles de un factor que debe ser cuantitativo y equiespaciado en sus niveles. Este patrón puede ser lineal, cuadrático o de grado polinomial mayor.

Los contrastes se refieren también a hipótesis con las cuales se pretende probar si los efectos asociados a algún grado del polinomio son significativos. La hipótesis nula se plantea en términos de la significancia del grado del polinomio.

La Suma de Cuadrados se calcula en el ANDVA para probar las hipótesis de qué términos son significativos en el modelo polinomial.

El modelo se puede estimar utilizando el enfoque de regresión lineal si al factor cuantitativo se le aplica un cambio de variable. Este cambio de variable transforma los valores cuantitativos del modelo original en variables cualitativas para el modelo de regresión. Una vez estimada la ecuación de regresión se procede en dirección contraria del cambio de variable para obtener el modelo del diseño experimental para obtener el modelo polinomial en términos del Diseño Experimental original.

Respecto al ejemplo de los aguacates, la diferencia que hay entre los efectos de las temperaturas 50 y 54, puede detectarse con un estudio de tendencia. De haber diferencia significativa entre los efectos de dichas temperaturas, el polinomio ajustado también será significativo.

Usando StatGraphics podemos calcular el polinomio.

Tabla 3.4. Tabla ANDVA para el efecto del modelo polinomial de grado lineal, para el ejemplo de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo

<i>Fuente</i>	<i>Suma de Cuadrados</i>	<i>GL</i>	<i>Cuadrados Medios</i>	<i>Fc</i>	<i>NSD</i>
Modelo	1227.	1	1227.	16.02	0.0052
Residual	536.3	7	76.61		
Total (Corr.)	1763.	8			

Tabla 3.5. Tabla para los coeficientes del modelo polinomial de primer orden, para el ejemplo de aguacates afectados por pudrición de pedúnculo

<i>Parámetro</i>	<i>Estimado</i>	<i>Error estándar</i>	<i>Límite inferior</i>	<i>Límite superior</i>	<i>F.I.V.</i>
Constante	425.2	92.95	205.5	645.0	
Temperatura	-7.15	1.787	-11.37	-2.925	1.0

De las tablas 3.4 y 3.5 se tiene tanto que el modelo ajustado es significativo, como los parámetros del modelo ajustado. El modelo polinomial es el siguiente:

$$\text{Porcentaje} = 425.2 - 7.15 * \text{Temperatura}$$

Cuando el tiempo de hidrocaldentamiento es de 30 segundos, el coeficiente de correlación lineal es negativo, es decir, es inverso. A medida que la temperatura es mayor, menor es el porcentaje de aguacates dañados por pudrición en el pedúnculo.

Como puede observarse el análisis con el modelo de polinomios ortogonales es numéricamente mejor, pues especifica en cuánto es mejor la influencia del factor temperatura.

Para el caso de más factores cuantitativos, es necesario no solo estudiar la tendencia de cada factor, sino también el efecto de la interacción de los factores.

### 3.5. Para el arreglo de tratamientos factorial $2^2$ con factores cuantitativos para condiciones homogéneas con repeticiones

#### 3.5.1. Modelo de diseño de experimentos considerando dos criterios de clasificación como cualitativos

El Diseño de Tratamientos Factorial Completo y Balanceado es un Diseño de Tratamientos Estructurado o factorial, donde hay  $k$  factores y cada uno tiene dos niveles, donde todas las combinaciones de los niveles de los tratamientos ocurren y aparecen el mismo número de veces, al menos dos veces, y se utilizan para estimar todos los efectos principales y de interacción. El número igual de repeticiones en estos diseños factoriales se refiere a que el diseño está balanceado.

Estos arreglos de tratamientos permiten estudiar la estructura de los tratamientos, considerando el efecto por separado de los factores bajo estudio (efectos principales) en la respuesta y es el único tipo de diseño de tratamientos, que permite estudiar el efecto de interacción o efecto conjunto de los factores también en la respuesta.

Si el material experimental y las condiciones de experimentación son homogéneas y la asignación de los tratamientos se realiza de forma completamente aleatoria, entonces no hay efecto de factores que confundan la respuesta, es decir, no hay factores potenciales de confusión identificables, por lo tanto el término del modelo correspondiente al diseño experimental pasa a ser parte de la fluctuación aleatoria, por lo que no aparece explícitamente en el modelo. Así el modelo con dos criterios de clasificación estructurados con  $r$  repeticiones se expresa como el modelo con diseño experimental completamente al azar siguiente:

$$y_{ijm} = \mu(A_i, B_j, C, D) + \varepsilon_{ij}(E, F, \dots)$$

$$y_{ijm} = \mu(C, D) + \delta(A_i) + \gamma(B_j) + \delta\gamma(A_i B_j) + \varepsilon_{ij}(E, F, \dots)$$

$$y_{ijm} = \mu + \delta_i + \gamma_j + (\delta\gamma)_{ij} + \varepsilon_{ijm} \quad i = j = 0, 1; \quad m = 1, 2, \dots, r$$

Para analizar el modelo puede construirse el ANDVA, para ello se pueden utilizar varios procedimientos, los que con frecuencia se utilizan, son considerando los coeficientes para contrastes ortogonales o bien calculando los efectos del grado del polinomio y las sumas de cuadrados de estos, a partir de la teoría de grupos.

En este escrito se privilegiará el segundo enfoque pues con esto se pueden analizar los arreglos factoriales fraccionales.

### 3.6. Ortogonalidad en la Matriz de Diseños en los MDE

El concepto de colinealidad entre dos variables explicativas, se refiere a una situación en la que se presenta una correlación alta entre dos variables para explicar la respuesta continua de un modelo. En los estudios observacionales donde las condiciones de experimentación no son controladas, la correlación puede ser alta, ya que en este tipo de estudios muy frecuentemente existirá correlación entre dos variables explicativas en un modelo. La no correlación de dos variables explicativas es una propiedad deseable para determinar la contribución de cada una de estas para explicar a la respuesta bajo estudio. En los estudios observacionales, la correlación que existe entre las variables explicativas influye en la interpretación de las variables explicativas en la variable de respuesta. Cuando hay correlación entre las variables explicativas es necesario estudiar su influencia en la variable de respuesta conforme estas ingresan al modelo lineal, si la correlación es baja este orden carecerá de importancia, sin embargo, si la correlación es alta el orden será significativo y la presencia de colinealidad estará presente.

Como una metodología para determinar qué modelo se ajusta mejor a los datos aparece el procedimiento del ajuste del modelo de manera secuencial. Este procedimiento se basa en el ajuste sucesivo de las variables de respuesta al modelo. Dichos ajustes obedecen reglas específicas con la finalidad de lograr un "mejor modelo". Los métodos para estos ajustes principalmente son tres, hacia delante, hacia atrás y paso a paso.

En los modelos estadísticos lineales el procedimiento de ajuste secuencial se basa en analizar cada variable, una por una, agregando la nueva información al modelo sin perder la información analizada de la o las variables que ya fueron estudiadas. Cuando las variables regresoras en un modelo de regresión múltiple presentan correlación, la secuencia en que se estudia la influencia en la variable de respuesta cambia, es decir, dependiendo del orden en que las variables fueron ingresadas al

modelo lineal, estas podrán explicar un porcentaje diferente de la respuesta. Por ello es importante analizar no solo el orden en que estas deben entrar al modelo, sino también el nivel de asociación que existe entre ellas, puesto que si la asociación es muy alta, entonces las variables altamente dependientes podrían ser omitidas y ser analizadas a través de la variable correlacionada que ya está en el modelo. La relación entre las variables se estudia a través de las correlaciones parciales de orden  $j = 1, \dots, k-1$ .

Es por ello que es importante elegir una matriz de diseño adecuada, o bien parsimoniosa, toda vez que en esta matriz se establece y define la estructura de la investigación y permite entre otras cosas:

1. Determinar la contribución a la variabilidad total para cada uno de los componentes del modelo, bien pudieran ser variables cuantitativas o cualitativas.
2. Determinar la estructura de relación entre las variables explicativas y permite entender el cálculo de las diferencias de las contribuciones o de los residuales, tanto para el modelo completo como para el reducido, para llevar a cabo las pruebas de hipótesis, con ello se establecen los procedimientos con el enfoque de contribuciones secuenciales (condicionales o ajustes sucesivos). O bien se consideran las contribuciones con ajustes no sucesivos utilizando polinomios ortogonales (que requieren la presencia de variables que sean ortogonales o no correlacionadas) para evitar los ajustes sucesivos y realizar entonces un ajuste con contribuciones aditivas.

Las investigaciones que se requieren estudiar de manera experimental, necesitan ser planeadas previamente, lo cual permite que sea posible obtener los resultados de la manera más sencilla. Así entonces Ronald Fisher en su estancia en el Centro de Investigación de Rothamsted en Inglaterra, desarrolló los Modelos de Diseños de Experimentos. En este tipo de modelos, se pretende estudiar entre otras cosas los efectos de los factores cuantitativos bajo estudio (que se refiere a las variables en el modelo de regresión) en la respuesta de interés. Para evitar la correlación entre los factores se estudió cómo producir factores que fueran ortogonales, para ello se propuso que los niveles de los factores fueran igualmente espaciados y contarán con una estructura de tratamientos denominados factorial, los cuales permitían que las variables de efectos principales e interacciones de diversos ordenes (según la dimensión del factorial) pudieran modelarse en el Modelo de Diseño de Experimentos de manera aditiva. Por lo anteriormente mencionado, el estudio de los



modelos aditivos requiere que los factores o variables satisfagan el concepto de ortogonalidad, principio que se mantiene inmerso en los modelos de Diseño de Experimentos

La ortogonalidad de la matriz de diseños  $X$  garantiza que la variable de respuesta sea explicada de manera independiente, es decir, esto ocurre cuando entre pares de variables explicativas la correlación es cero. Por tanto la influencia de cada variable no se verá influida por otras variables, asegurando que si una variable es significativa, esta característica no dependerá para su cálculo de la presencia de otra variable. En el siguiente Capítulo se hará hincapié en la importancia de la ortogonalidad en la Matriz de Diseño en los modelos de Diseño de Experimentos.

## Capítulo 4. Diseños de Experimentos con Arreglo de Tratamientos Factorial: Modelos de Optimización Clásicos

### 4.1. Modelos de Optimización en la Industria

En el tópico de optimización, dado que las condiciones de experimentación en la planta piloto se realizan de manera controlada (esto es homogénea), los experimentos no requieren considerar el control de factores de confusión cualitativos mediante los diversos diseños experimentales usando el concepto de bloque o el de covarianza si hay al menos un factor de confusión cuantitativo, sino únicamente se utiliza el diseño experimental completamente al azar, pues las condiciones de experimentación son homogéneas. Por otro lado como la experimentación en la optimización en la industria tiene como propósito satisfacer los objetivos del proceso productivo en cuestión, el grado de generalidad del estudio se refiere a cumplir dichos objetivos del proceso. Por lo comentado, es que, a los diseños de experimentos en optimización se les puede referir solamente con el nombre de los arreglos de los tratamientos.

Por lo anteriormente mencionado, solo se referirá a los arreglos de tratamientos factoriales como el diseño de experimentos con factoriales (DECF), asimismo a los arreglos de tratamientos con mezclas se referirá como diseño de experimentos con mezclas (DECM).

Los diseños de experimentos para optimización, en particular, consideran a los niveles de los factores bajo estudio como componentes fijos.

Por otra parte, para abordar el tema de optimización en la industria se cuenta con la herramienta para estudios experimentales, en este caso, referentes a los arreglos de tratamientos estructurados o factoriales, tanto completos como fraccionales. Los niveles de los factores que se estudiarán corresponderán solo a dos en las diversas regiones experimentales tanto para puntos centrales como puntos estrella o axiales pues aún cuando los factores que se propongan como potenciales para optimizar la(s) respuesta(s) sean pocos, los tratamientos, aún así, son muchos y detendrían la metodología por emplear

En caso de que los factores que se propongan como potenciales para optimizar la(s) respuesta(s) sean muchos, se preferirá el manejo de factoriales fraccionados, pues con ello será posible disminuir la cantidad de tratamientos por estudiar en la optimización.

La Metodología de Superficie de Respuesta (MSR) es una técnica que se refiere a una experimentación que hace uso de los arreglos de tratamientos factoriales de manera secuencial. Para ello se consideran las condiciones en que opera el proceso para obtener la calidad ofrecida a los consumidores, las cuales se conocen como las condiciones estándar del proceso de producción que por brevedad técnica se llamará punto central, y se considera de manera reiterada para la obtención de los tratamientos o corridas experimentales de la manera siguiente:

1. Se consideran las condiciones estándar o punto central del proceso.

2. A partir del punto central del proceso se determinan los niveles de cada uno de los factores bajo estudio del proceso, considerando un nivel por arriba y otro por abajo del punto central, igualmente espaciados del punto central, de acuerdo a la bibliografía de área de aplicación:

3. A partir de lo anterior se obtiene el diseño de experimentos factoriales ortogonales, para los cuales es necesario determinar el error estándar o fluctuación aleatoria y se debe considerar la repetición del punto central o también puntos axiales o estrella con el objeto de realizar un correcto análisis estadístico. Vale la pena comentar que los puntos centrales y los estrella están próximos a la región experimental del factorial en consideración, como a continuación se muestra.

Diseños experimentales para optimización con factoriales:

$2^2$  con punto central

$2^2$  con puntos centrales y axiales o estrella

$2^3$  puntos centrales y axiales o estrella

## 4.2. Inicio de la Experimentación Secuencial, Filtrado o Diagnóstico de Factores para optimizar la(s) respuesta(s) en consideración: factoriales fraccionados

### 4.2.1. Arreglo de tratamientos factorial fraccionado para condiciones homogéneas

Los Diseños de Tratamientos Estructurados con menos de una repetición o fraccionados, también se conocen como factoriales incompletos.

Los factoriales fraccionados permiten estudiar la estructura de los tratamientos aproximadamente, tanto de los efectos por separado de los factores bajo estudio, así como el efecto de interacción (efecto conjunto de dos factores también de manera aproximada). El hecho de tener una aproximación en la estimación no confiable en

estos, se debe al hecho de que no se tienen todos los tratamientos del factorial completo y tampoco hay repeticiones de los tratamientos. Por lo anterior es que el procedimiento de estimación se fundamenta en tener conocimientos sobre qué posibles factores o interacciones de factores pueden ser nulas, para que a partir de dicho conocimiento sea posible seleccionar la fracción adecuada, para que el experimento, no considere como nulos a los efectos que sí son de interés estimarlos. Así entonces cuando los supuestos de efectos nulos es satisfactorio las estimaciones pueden considerarse aceptables.

Algunos comentarios sobre los factoriales fraccionados:

Algunos tamaños de las fracciones, considerando que  $2^k$  es el número total de tratamientos en el factorial completo con  $k$  factores:

$$\frac{2^k}{2} = 2^{k-1} \text{ La mitad o 50\% del factorial completo.}$$

$$\frac{2^k}{4} = \frac{2^k}{2^2} = 2^{k-2} \text{ La cuarta parte o el 25 \% del factorial completo.}$$

$$\frac{2^k}{8} = \frac{2^k}{2^3} = 2^{k-3} \text{ Una octava parte del factorial o el 12.5 \% del factorial completo.}$$

$$\frac{2^k}{2^p} = 2^{k-p} \quad k > p \text{ Una dos-p-ésima parte del factorial completo.}$$

Las fracciones por su diferente tamaño, tienen cierto grado de resolución, el cual determina qué efectos pueden ser o no estimados adecuadamente.

Existen factoriales fraccionales especiales como los de Plackett-Burman. Estos diseños determinan el número mínimo de tratamientos como una función del número de factores para determinar todos los efectos principales limpiamente, al considerar que todas las interacciones son iguales a cero.

¿Sería importante tener la máxima resolución posible? ¿Qué significa estimar adecuadamente los efectos de interés para el estudio?

La resolución de un diseño factorial fraccional se refiere a la característica del fraccional fraccionado, que indica qué tan bien pueden estudiarse los efectos potencialmente importantes mediante tal diseño.

Considérense las siguientes resoluciones:

Diseño de Resolución III. Es cuando los efectos principales no son alias entre ellos, pero existen efectos principales que son, alias de interacciones de dos factores.

Diseño de Resolución IV. Es cuando los efectos principales no son alias entre ellos, ni con las interacciones de dos factores. Pero algunas interacciones de dos factores son alias entre ellas.

Diseño de Resolución V. Es cuando los efectos principales y las interacciones dobles son alias con interacciones triples o de mayor orden.

La definición de resolución es la siguiente: Un diseño factorial fraccionado es de resolución R si los efectos formados por interacciones de P factores, no son alias de efectos de interacción que tengan R-P factores.

#### 4.2.2. Arreglo de tratamientos factorial fraccionado confundidos

Cuando se lleva a cabo un experimento empleando el diseño experimental de Bloques Completos al Azar (llamado comúnmente de bloques al azar) considerando un arreglo de tratamientos factorial, surgen muchas situaciones o imposibilidades prácticas para que una repetición de los tratamientos pueda llevarse a cabo en un bloque completo.

Así, en particular, al estudiar varios factores al mismo tiempo, el número de tratamientos llega a ser tan grande que es difícil obtener bloques de unidades experimentales (homogéneos) de tal tamaño, siendo en la práctica solamente posible tener grupos homogéneos de unidades experimentales menores o bloques incompletos que los requeridos para tener todos los tratamientos de una repetición en un bloque completo.

Sin embargo, aún en estas situaciones, es de interés conservar la riqueza de la estructura inferencial del arreglo de tratamientos factorial para cuando se analicen los datos.

En estos casos, cuando se planea un diseño experimental de bloques completos al azar con arreglo de tratamientos factorial, donde la variación entre unidades experimentales es tal que se considera que los bloques completos violan la suposición de constancia de efecto de bloques, resulta de gran utilidad recurrir al concepto de confusión de efectos.

En la aplicación del concepto de confusión se tendrán bloques incompletos (BI) de los tratamientos (que son de menos tratamientos que los bloques originales o completos), cuyo efecto será similar al efecto de los tratamientos que se confundió o está confundiendo (generalmente se consideran los efectos confundidos inexistentes que se refieren a interacciones de alto orden con los bloques incompletos). El no poder dar conclusiones sobre el efecto confundido (confusión total) o darlas con una

menor precisión (confusión parcial) es el precio que se paga por la pérdida de información.

Diseño  $2^K$  (K factores bajo estudio) en  $2^P$  (considerando P factores confundidos) bloques incompletos con  $2^{k-p}$  tratamientos ( $p < k$ )

(Para  $k=2$ ,  $p=1$  un efecto confundido por ejemplo la interacción)

Para este modelo se tienen los efectos A y B que aparecen en el cálculo con la misma frecuencia y con signos opuestos; a diferencia del efecto AB donde el efecto de los bloques incompletos BI1 y BI2 no se cancelan pues no aparecen con signos opuestos.

(Interacción de alto orden) con  $B_s I_s$

De lo anterior se dice que:

- El efecto de A con  $BI^s$  es independiente (u ortogonal) por lo tanto A puede estimarse.
- El efecto B con  $BI^s$  es independiente (u ortogonal) por lo tanto B puede estimarse
- El efecto de AB con  $BI^s$  es dependiente (o no ortogonal)

Esto significa que el efecto de AB y BI están confundidos, ya que el efecto de AB no puede estimarse, pues su estimación depende del efecto de  $BI^s$ , pero el efecto de bloque realmente no nos interesa estudiarlo.

Un efecto de un factor está confundido con el efecto de bloques incompletos si los tratamientos que integran cada total, con los que se evalúa su efecto o suma de cuadrados, están en el mismo bloque incompleto de modo que el efecto de bloques incompletos no se cancela y por lo tanto corresponde al efecto del factor confundido.

En el ejemplo mencionado, como interesa conocer los efectos principales (A y B), entonces la asignación de los tratamientos a los  $BI^s$ , es correcta, dado que el confundir AB con  $BI^s$  permite que el efecto A y el B sean ortogonales a los  $BI^s$  y puedan estimarse sin confusión.

#### 4.2.3. Diseño de tratamientos en $2^2$ en $2^1$ bloques incompletos cada uno con $2^{2-1}$ tratamientos

En esta situación el número total de tratamientos es 4 ( $2^2$ ) y los bloques incompletos 2 ( $2^1$ ) y contendrá solo 2 tratamientos ( $2^{2-1}$ ) cada bloque incompleto.

Problema. Llevar a cabo un experimento válido para un arreglo factorial  $2^2$  en dos bloques incompletos de solo 2 tratamientos, de modo que los efectos que nos interesan puedan estimarse.

¿Qué tratamientos deben incluirse en cada bloque incompleto, si los efectos que nos interesan estudiar son A y B? Suponga que se propone el siguiente diseño donde se confunde AB.

$(AB)_0$	$(AB)_1$								
<table style="border-collapse: collapse; margin: auto;"> <tr><td style="padding: 5px 15px;">0</td><td style="padding: 5px 15px;">0</td></tr> <tr><td style="padding: 5px 15px;">1</td><td style="padding: 5px 15px;">1</td></tr> </table>	0	0	1	1	<table style="border-collapse: collapse; margin: auto;"> <tr><td style="padding: 5px 15px;">1</td><td style="padding: 5px 15px;">0</td></tr> <tr><td style="padding: 5px 15px;">0</td><td style="padding: 5px 15px;">1</td></tr> </table>	1	0	0	1
0	0								
1	1								
1	0								
0	1								
$Bl_1$	$Bl_2$								

Y al calcular los efectos se tiene que:

$$A = \frac{1}{2^{1 \times 1}} [(A)_1 - (A)_0] = \frac{1}{2} [(10+11) - (00+01)]$$

$$B = \frac{1}{2} [(B)_1 - (B)_0] = \frac{1}{2} [(01+11) - (00+10)]$$

$$AB = \frac{1}{2} [(AB)_0 - (AB)_1] = \frac{1}{2} [(00+11) - (10+01)]$$

Donde puede observarse que solo para los efectos A o B el efecto de bloques  $Bl_1$  y  $Bl_2$  se cancela puesto que cada elemento de un  $Bl_1$  o  $Bl_2$  se cancela con otro, luego entonces el efecto de A y B con  $Bl_s$  no están confundidos y pueden estimarse.

Generalización del diseño factorial  $2^k$  confundido en  $2^p$  bloques incompletos de tamaño  $2^{k-p}$ .

Notación:

$2^k$  = número de tratamientos en una repetición o bloque completo.

$2^p$  = número de bloques incompletos por repetición.

$\frac{1}{2^p}$  = fracción de tratamientos que contiene un bloque incompleto.

$2^{k-p}$  = número de tratamientos en un bloque incompleto = tamaño de un bloque incompleto  $2^p 2^{k-p} = 2^k$ .

$k$  = número de factores en el diseño factorial.

$p$  = número de efectos de tratamientos que se confunden, que no son efectos de interacción generalizada.

Para obtener un diseño factorial  $2^k$  confundido en  $2^p$  bloques incompletos de tamaño  $2^{k-p}$  se requiere seleccionar  $p$  efectos independientes para ser confundidos, donde independientes significa que ninguno de los efectos es elegido como la interacción generalizada de los otros. Los bloques incompletos se generan considerando los  $p$  efectos  $( )_1, ( )_2, \dots, ( )_p$  para construir el subgrupo intrabloque y a partir de este grupo se construyen los demás.

El número de interacciones generalizadas que se tienen con estos  $p$  efectos se calculan con la expresión  $2^p - p - 1$ . Es conveniente ejercitarse en la selección de los efectos que se confundirán, ya que la información de los efectos que sean de interés potencial no deben sacrificarse, esto es no deben confundirse totalmente.

En general, si un arreglo factorial  $2^k$  se va a confundir en  $2^p$  bloques incompletos de  $2^{k-p}$  u. e. cada uno, se deberán confundir  $p$  efectos con bloques, de modo que ninguno de estos efectos sea interacción generalizada de los otros  $p-1$  efectos utilizados para definir el esquema de confusión. Además se confundirán  $2^p - p - 1$  efectos que son interacciones generalizadas de los  $p$  efectos que definen la confusión.

Total de efectos confundidos = efectos confundidos que no son interacciones generalizadas + efectos confundidos que son interacciones generalizadas =  $p + \overbrace{2^p - p - 1} = 2^p - 1$ .

En la práctica un resultado de gran utilidad se refiere al teorema de confusión mínima para factoriales  $2^k$ , su aplicación nos permite saber si al confundir interacciones de alto orden se confunden o no efectos principales e interacciones de primer orden. Dicho teorema fue probado por Fisher en 1942.

**Teorema de confusión mínima para factoriales  $2^k$ .** Un arreglo de tratamientos factorial  $2^k$  se puede disponer en  $2^p$  bloques de  $2^{k-p}$  unidades experimentales cada uno, sin confundir efectos principales ni interacciones de dos factores, si  $k < 2^{k-p}$ , es



decir, si el número de factores en estudio es menor que el número de tratamientos por bloque incompleto.

Nota: A medida que el número de tratamientos por bloque incompleto sea mayor (menor número de bloques incompletos, menor número de efectos confundidos), más posibilidades hay de que el esquema de confusión cumpla con el teorema de confusión mínima de Fisher.

**Ejemplo 4.1.** Estudio de producción de semiconductores, considerando factoriales fraccionados

En una planta donde se fabrican semiconductores se quiere mejorar el rendimiento del proceso a través de experimentos. De acuerdo con la experiencia del grupo de mejora, los factores que podrían tener influencia sobre la variable de respuesta (rendimiento), así como los niveles de prueba utilizados son los siguientes:

A= nivel de abertura (pequeña, grande).

B= Tiempo de exposición (20% abajo, 20% arriba).

C=Tiempo de revelado (30 seg, 45 seg).

D= Dimensión de la máscara (pequeña, grande).

E= Tiempo de grabado (14.5 min, 15.5min)

Se consideró una fracción del 50% del factorial  $2^5$  (es decir  $2^{5-1} = \frac{2^5}{2}$ ) pues se suponía que el efecto ABCDE es un efecto nulo, entonces se decidió confundirlo con bloques incompletos, para ello se consideró la fracción principal obtenida considerando el generador I= ABCDE que se presenta en la Tabla 4.1

Tabla 4.1. Valores de respuesta de los tratamientos para la fracción principal del factorial  $2^5$

Tratamientos y Respuestas			
$(-1,-1,-1,-1, 1) = e$	$= 8$	$(-1,-1,-1, 1,-1) = d$	$= 8$
$( 1,-1,-1,-1,-1) = a$	$= 9$	$( 1,-1,-1, 1, 1) = ade$	$= 10$
$(-1, 1,-1,-1,-1) = b$	$= 34$	$(-1, 1,-1, 1, 1) = bde$	$= 30$
$( 1, 1,-1,-1, 1) = abe$	$= 52$	$( 1, 1,-1, 1,-1) = abd$	$= 50$
$(-1,-1, 1,-1,-1) = c$	$= 16$	$(-1,-1, 1, 1, 1) = cde$	$= 15$
$( 1,-1, 1,-1, 1) = ace$	$= 22$	$( 1,-1, 1, 1,-1) = acd$	$= 21$
$( 1, 1, 1,-1,-1) = abc$	$= 60$	$(-1,-1,-1,-1, 1) = bcd$	$= 44$
$( 1, 1, 1, 1, 1) = abcde$	$= 7$	$(-1, 1, 1,-1, 1) = bce$	$= 45$

En este caso, al tener muchas interacciones a probar, y debido a que no se cuenta con los grados de libertad necesarios para estudiar la significancia de las interacciones, se recurre al Gráfico de Daniel<sup>11</sup>. Esta gráfica nos permite determinar a través de una prueba de normalidad a los efectos bajo estudio.

Tabla 4.2. Grupos alias en el diseño factorial, para la fracción principal del diseño factorial  $2^5$

<i>Contraste</i>	<i>Estimados</i>
1	A
2	B
3	C
4	D
5	E
6	AB+CDE
7	AC+BDE
8	AD+BCE
9	AE+BCD
10	BC+ADE
11	BD+ACE
12	BE+ACD
13	CD+ABE
14	CE+ABD
15	DE+ABC

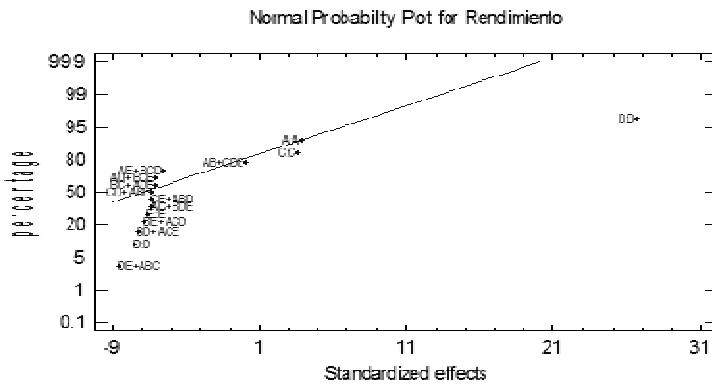
Como puede observarse en la Graficas 4.1, 4.2 y Tabla 4.3 respectivamente, los efectos difieren de la recta normal al azar si no son significativos, no obstante estas variabilidades se pueden calcular como  $\sigma^2 / N$ . Esto implica que los efectos se deben mover a lo largo de la recta Normal. Los efectos que no lo hacen son aquellos que serán significativos en el estudio, y por ende, deben ser estudiados.

En el Gráfico de Daniel anterior se aprecia que los efectos de A,B,C y AB difieren de la tendencia del resto de los efectos. En el diagrama de Pareto pasa análogamente lo mismo que en la gráfica de Daniel. En el ANOVA se observa que los efectos antes mencionados son altamente significativos, además se muestran sus estimaciones.

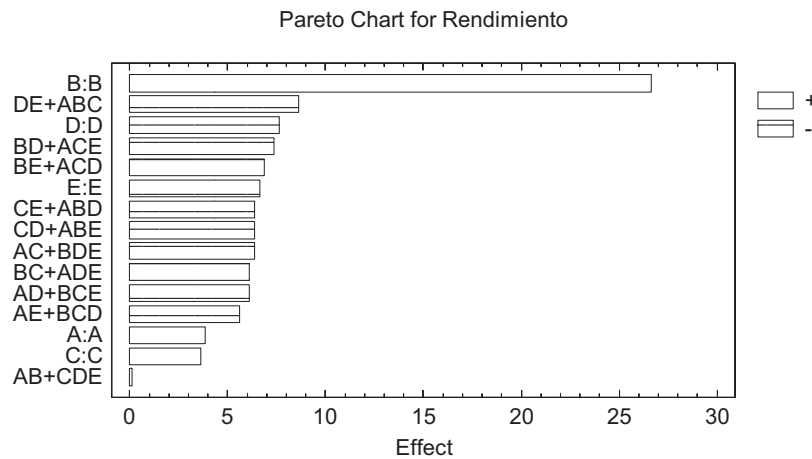
---

<sup>11</sup> Cuthbert Daniel, 1959

Gráfica 4.1. Gráfico de Daniel para los efectos de la fracción principal bajo estudio en la producción de semiconductores



Gráfica 4.2. Diagrama de Pareto, para los efectos de la fracción principal bajo estudio, en la producción de semiconductores



De acuerdo a lo observado con anterioridad, los efectos A, B, C y el de interacción AB, son los que en la gráfica de Daniel no siguen con la tendencia de los demás efectos. Se debe tener en consideración que los efectos restantes pasarán a formar parte del error en la siguiente tabla ANDVA.

Tabla 4.3. Tabla ANDVA para efectos significativos del factorial  $2^5$  y su estimación, para la producción de semiconductores

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
A:A	60.06	1	60.06	0.33	0.5795
B:B	2836.	1	2836.	15.39	0.0024
C:C	52.56	1	52.56	0.29	0.6039
AB	0.0625	1	0.0625	0.00	0.9856
Error total	2027.	11	184.2		
Total (corr.)	4975.	15			

En esta tabla se tiene que el único efecto significativo es el del Factor B que corresponde al Tiempo de Exposición.

Para este ejemplo, pudiera ser que llevar a cabo un estudio con 16 tratamientos no fuera económico, además de que bloques para 16 unidades experimentales no se pueden tener, sin embargo con determinados esfuerzos sí se pueden tener bloques para alojar solo a 8 tratamientos, pero también se requeriría tener otro efecto que se pudiera confundir, supongamos que fuese ABC, lo cual requeriría además de la confusión de los dos efectos confundidos, que recibe el nombre de interacción generalizada( $ABCDE*ABC=DE$ ), por lo cual ahora nos preguntamos si ABCDE, ABC y DE al confundirse son nulos.

Siguiendo con el ejemplo, en la referencia mencionada, se tiene que con 8 tratamientos es posible nuevamente estimar de manera equivalente los parámetros de interés. Ahora el costo de la estimación de los parámetros de interés son una cuarta parte de lo que correspondía a un factorial completo.

Como pudo observarse los factoriales fraccionales, permiten en algunas ocasiones, estimar los efectos de interés de la manera más económica posible, siempre y cuando se encuentren el número de efectos confundidos necesarios y el tamaño de bloque correspondiente.

### 4.3. Fases de la Optimización utilizando la Metodología de Superficie de Respuesta y el Camino de Ascenso o Descenso por la Pendiente Máxima

#### 4.3.1. Fase 1: Inicio de la metodología de superficie de respuesta

La etapa preliminar de la experimentación secuencial en la que se desea identificar los factores más importantes se conoce como etapa de diagnóstico. En esta fase, es práctica común experimentar con el mayor número de posible de factores.

La Metodología de Superficie de Respuesta (MSR) explora la influencia de varias variables explicativas (factores) y la interacción entre ellas para explicar una variable bajo estudio (respuesta). La idea principal de la MSR es utilizar un procedimiento de experimentación secuencial para optimizar la respuesta. Box y Wilson sugieren modelos con polinomios de primer o segundo orden para hacer esto, según se esté lejos o cerca de la región óptima respectivamente.

El inicio de la MSR se refiere a la selección o diagnóstico de los factores que potencialmente determinan el óptimo, para ello se realiza lo que comúnmente se denomina un barrido de factores con el cual se determinan los factores potenciales para la optimización. Después se realiza una experimentación secuencial considerando dos niveles para cada uno de los factores, uno por arriba del nivel estándar del factor (nivel utilizado en el proceso bajo estudio cotidianamente) y otro por abajo a la misma distancia o espaciamiento del valor estándar. Al tratamiento con los niveles estándar para todos los factores se denomina **Punto Central**. Así entonces considerando cada uno de los factores se emplea un diseño factorial con una repetición o bien solamente una fracción, incluyendo al menos dos Puntos Centrales. Posteriormente se analizan los datos, para esto se proponen inicialmente modelos de primer orden (esto es bajo el supuesto de que la región óptima no está próxima). Si al analizar los datos con el modelo de primer orden el ajuste es satisfactorio, entonces se diseña un nuevo experimento que tienda o se encamine a la región óptima, para esto se utiliza el método del camino de ascenso por la pendiente máxima (CAPP) para determinar los niveles siguientes de los factores en la experimentación. En la medida que los diseños de primer orden sean satisfactorios (no haya falta de ajuste) se continúan realizando experimentos para modelos de primer orden y utilizando el CAPP, si el ajuste es bueno (la falta de ajuste no es significativa), sin embargo cuando el ajuste de los datos con el modelo de primer orden no sea bueno, es decir, el ajuste resulta significativo, ello indica, entre otras cosas, que en el polinomio utilizado deben aparecer términos de segundo grado, si este es el caso, a partir de

este momento se considerarán modelos de segundo orden para hacer ajustes eficaces y eficientes para estimar la respuesta óptima y caracterizar la superficie que la representa.

Por lo anteriormente mencionado, es que la manera de estimar los efectos adecuadamente con los modelos con polinomios de primer o segundo orden, entre otros conceptos, el uso de un Diseño Factorial con una repetición o bien un Diseño Factorial Fraccionado, según la cantidad de factores bajo estudio, así mismo la inclusión según el caso de puntos centrales, "axiales" y "estrella", dependerá de la construcción del diseño mismo y en qué lugar de la región experimental nos encontremos.

Para el polinomio de primer orden solo se consideran Puntos Centrales, al menos 2. Para el polinomio de segundo orden, aparte de los dos puntos centrales, se requieren los puntos "axiales" o los puntos "estrella", además de la inclusión del plan experimental anterior de primer orden.

Así entonces la MSR en algunos casos estudia los planes experimentales específicos para realizar inferencias convenientemente para modelos de primer y de segundo orden.

**Modelos de primer orden.** Factoriales con repetición, Factoriales con una repetición adicionando puntos centrales, simples, Factoriales Fraccionados adicionando puntos.

**Modelos de segundo orden.** Compuestos Centrales, Diseños Rotables, Diseños Látice, etc.

### **Metodología de Superficie de Respuesta**

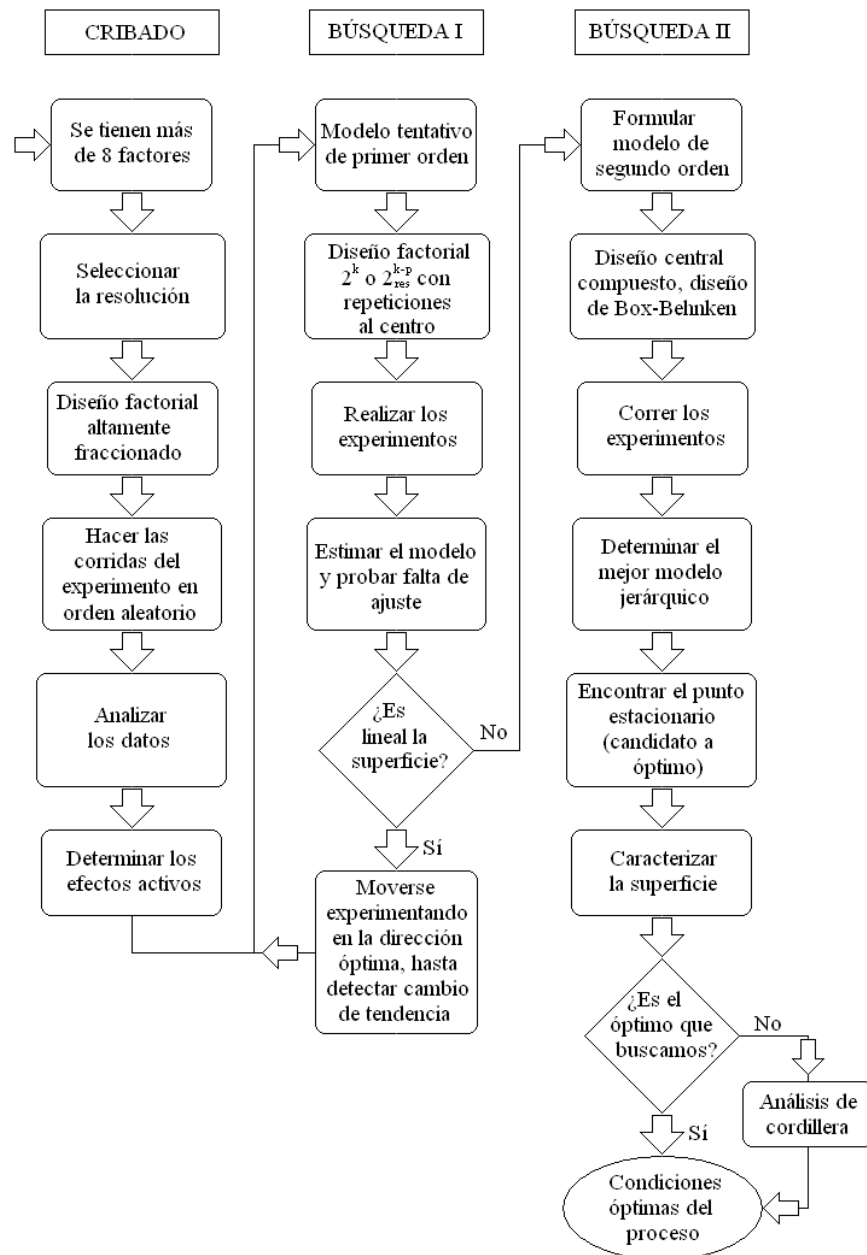
En la figura 4.3 se presenta la MSR en su contexto amplio, donde se distinguen tres etapas en la búsqueda del punto óptimo, que son: cribado o barrido de factores, búsqueda I o de polinomios de primer orden y búsqueda II o polinomios de segundo orden.

1.- Cribado o barrido de factores. Es el comienzo de la optimización de un proceso que tiene muchos factores (más de 8) que pueden influir la característica de calidad de interés. En esta etapa se debe correr un experimento para identificar los factores que tienen mayor influencia.

2.- Búsqueda I o de polinomios de primer orden. Después de identificar los factores ( $k \leq 5$  es el ideal pero se puede trabajar hasta con 8 factores) que tienen una influencia efectiva en la variable de respuesta, se hace un estudio en el que se incluyen las interacciones y la detección de curvatura. Esta etapa se trabaja con un

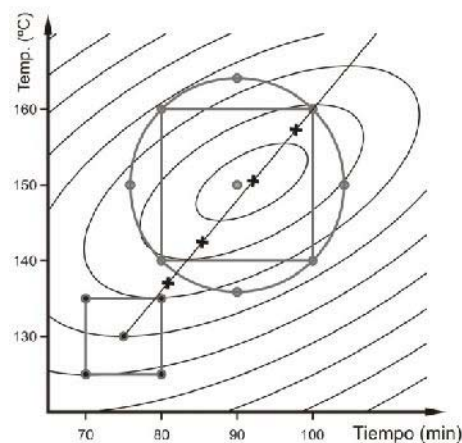
modelo y un diseño de primer orden que permita detectar la presencia de curvatura. Para esto se utiliza un diseño factorial completo o fraccionado con repeticiones al centro. Mientras no se detecte curvatura, se continúa la búsqueda con un modelo y diseño de primer orden para acercarse al punto óptimo. La presencia de curvatura puede ser un síntoma de que el punto óptimo o puntos óptimos de operación se encuentran cerca y entonces se deberá pasar a la etapa de búsqueda II.

Figura 4.3. Esquema de los elementos de la Metodología de Superficie de Respuesta



3.- Búsqueda II o de polinomios de segundo orden. En el momento que se detecta la presencia de curvatura, las repeticiones al centro no son suficientes para saber cuáles factores causan la curvatura, y es necesario aumentar el experimento o correr uno nuevo, para poder estimar las causas de la curvatura (efectos cuadráticos: puros  $A^2$ ,  $B^2$ ,... y no puros o de interacción  $AB$ ,...) e incluir los términos correspondientes en el modelo ajustado. Con este modelo se determinan las condiciones óptimas de operación en el proceso. Aquí es importante no solo incluir puntos centrales sino además puntos "axiales" y "estrella".

Figura 4.4. Visión gráfica de la MSR para el ejemplo de la producción de una reacción química en el que se muestran diferentes fases de la experimentación



Cada proceso que se realiza es diferente uno del otro, por lo que no es necesario en cada uno de ellos llevar a cabo todas las etapas de la metodología. El número de experimentos y de etapas que se requieren dependerá del grado de conocimientos que se tengan de la proximidad o no de la región óptima al comenzar la investigación. La eficacia en la aplicación de la MSR depende del conocimiento que se tenga sobre el proceso, en relación a cómo pueden influir los factores que en él intervienen. A mayor conocimiento se llega al punto óptimo con un gasto mínimo de recursos. En la Figura 4.4 se representan diferentes etapas de búsqueda considerando solo dos variables de proceso. La primera fase corresponde al cuadrado en la parte inferior del esquema donde se puede observar que se está alejado del punto óptimo, el cual se encuentra hacia el centro de las elipses concéntricas. A través del CAPPM se realizan nuevos experimentos de forma secuencial hasta acercarnos al punto óptimo (puntos marcados por un signo +). Una vez que mediante un nuevo proceso de experimentación y una prueba de falta de ajuste se verifica que el punto óptimo se encuentra cerca se procede a ajustar un nuevo modelo de segundo orden, representado por el cuadrado concéntrico en la parte superior derecha. En la práctica se desconoce a priori donde se encuentra el



punto óptimo dado que la realidad se desconoce, pero para eso se usa la MSR, con la cual se puede acercarse mucho a él.

En el primer diseño se está muy lejos del punto óptimo y el comportamiento de la verdadera superficie en esa región se modela bien con un plano (modelo solo con efectos principales); por tanto, el punto al centro no detecta curvatura. A partir del diseño central se marca un rumbo óptimo de movimiento, después de encontrar puntos en esa dirección para probarlos en el proceso se experimenta en ellos hasta que el proceso sale de la tendencia marcada por el plano. En la gráfica el último punto donde el proceso mantuvo la tendencia fue el diseño 2 (diseño con punto central).

En el diseño 2 vuelve a ser suficiente un modelo de primer orden para describir el comportamiento de la respuesta. Se determina la dirección óptima de movimiento, se experimenta en esa dirección hasta detectar que ya no conviene seguirla. Se cambia el rumbo sin experimentar, al observar de donde se partió. Se determinan puntos en esta dirección para probar el proceso, hasta detectar un cambio en la tendencia. Entonces se plantea un tercer diseño, cuyo punto al centro detecta la presencia de curvatura. Así se procede a aumentar el diseño a un diseño cuadrático y se estima el modelo de segundo orden completo. Como el punto óptimo se encuentra dentro de la región experimental, se pueden determinar sus coordenadas. Se realizan corridas confirmatorias por un tiempo suficiente que permita analizar el desempeño del proceso y verificar que no haya efectos colaterales negativos, una vez que los resultados son favorables se implementa el tratamiento óptimo.

En la práctica no siempre se usan las 3 etapas, algunas veces los procesos industriales ya trabajan en condiciones cercanas al óptimo y en ocasiones desde el primer experimento se detecta curvatura y se requiere un diseño y modelo de segundo orden. Para experimentar en el proceso, en laboratorio o con prototipos se debe hacer teniendo cuidado en la elección de los factores y niveles, para eso se utiliza una estrategia experimental llamada Operación Evolutiva, la cual se aplica durante la producción y usa intervalos (niveles) pequeños de búsqueda para los factores y en forma secuencial encuentra mejores condiciones de operación, todo esto para adaptar resultados a nivel real y experimental.

Como se recordará en el Capítulo 3 de MDE, se revisó el concepto de Diseño de Tratamientos con un Criterio de Clasificación, Factorial Completo, Factorial Completo con Repeticiones y Factorial Fraccionado.

Tanto los factoriales con dos niveles completos y los factoriales fraccionados con diversas resoluciones ya se han comentado, así como el Diseño de Tratamientos

Factorial Fraccional particular denominado Diseño de Plackett-Burman, el cual permite seleccionar, diagnosticar o realizar una búsqueda de factores influyentes que se proponen para optimizar la respuesta del proceso de producción bajo estudio. Esta búsqueda o selección también es común referirla como: barrido, filtrado, tamizado de factores o en inglés como *factor screening*. Los diseños de diagnóstico se refieren a particulares factoriales fraccionados.

Para estimar los efectos principales (de primer orden o interacción de orden cero) o de interacción de cualquier orden, se deben elegir fracciones de determinado tamaño, las cuales permitan estimar efectos que se suponen no son nulos, ello queda contemplado en la resolución del diseño, que equivale a saber qué efectos de qué orden se suponen nulos y de qué efectos son alias, por ejemplo  $2^k$  ( 2,3,4,5,...).

En el capítulo anterior se presentaron factoriales con dos niveles, los cuales son bastante eficientes, ya que permiten calcular los efectos de factores, así como sus interacciones. A pesar de ello, si el número de factores que se están analizando es grande, es factible que el número total de experimentos  $2^k$  requeridos sea grande excesivamente, lo cual no es deseable.

#### **Ejemplo 4.2.** Optimización de Equipo para afilado debido a un exceso de vibración

En una compañía se compró un equipo de afilado, y después de una semana se dieron cuenta de que el exceso de vibración en el proceso era un problema serio. Un equipo de mejora decide tratar de reducir la vibración aplicando diseño de experimentos. Identificaron siete factores, todos asociados con la herramienta de afilado, que puede tener algo que ver en la cantidad de vibración: diámetro, longitud, tamaño del grano del material, velocidad de alimentación revoluciones por minuto, estructura del material y peso de la precarga. Se eligieron dos niveles para cada factor, con los cuales se lleva a cabo la experimentación. Como la puesta en marcha del robot y el tiempo de corrida tienen un alto costo, el equipo decide utilizar un experimento de ocho tratamientos, tanto los factores como posibles niveles utilizados en unidades originales se registran en la Tabla 4.4.

Tabla 4.4. Características de los factores bajo estudio para el equipo de afilado

Factor	Descripción	Niveles
A: grano	tamaño de grano ( /pulgada)	80, 120
B: longitud	longitud (pulgadas)	1, 2
C: Diámetro	diámetro(pulgadas)	1.0 , 1.5
D: rpm	RPM(x1000)	15, 20
E: pesoprec	Peso de precarga (libras)	0.1, 0.4
F: estrucmat	Estructura del material (onza)	1 , 4
G: velalim	velocidad de alimentación (pul/min)	2 , 4

Bajo el supuesto de que los efectos de interacción se pueden considerar despreciables, se decide correr un diseño altamente fraccionado (saturado) como lo es el factorial fraccionado  $2_{III}^{7-4}$ , que se muestra en la tabla 4.5 junto con los resultados obtenidos.

Tabla 4.5. Parte de la Matriz de Diseño para los factores bajo estudio y la vibración observada en el equipo de afilado

A	B	C	D	E	F	G	vibración
-1	-1	-1	1	1	1	-1	77.4
1	-1	-1	-1	-1	1	1	68.3
-1	1	-1	-1	1	-1	1	81.9
1	1	-1	1	-1	-1	-1	66.2
-1	-1	1	1	-1	-1	1	42.1
1	-1	1	-1	1	-1	-1	78.3
-1	1	1	-1	-1	1	-1	39.0
1	1	1	1	1	1	1	68.4

El diseño tiene resolución III, lo cual implica que hay efectos principales confundidos con interacciones dobles, de primer orden o de dos factores. La estructura de alias reducida se muestra en la tabla 4.6.

Tabla 4.6. Estructura alias del diseño  $2^{7-4}$

resolución III (fracción principal)
A+BD +CE+FG
B+AD+CF+EG
C+AE+BF+DG
D+AB+CG+EF
E+AC+BG+DF
F+AG+BC+DE
G+AF+BE+CD

### Análisis del Experimento

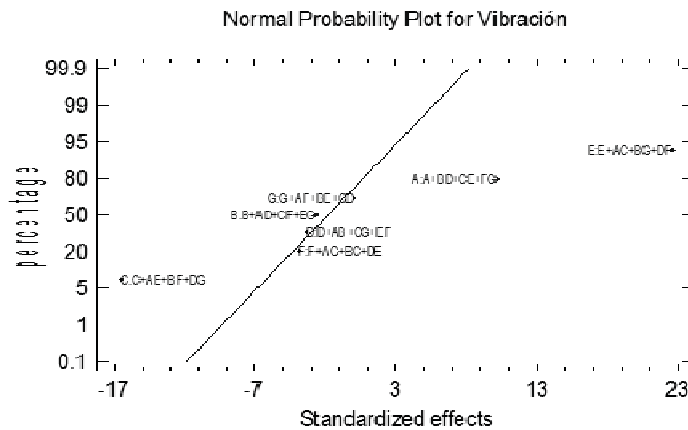
Estimación de Efectos Principales ¿Cuáles son de magnitud considerable?

Tabla 4.7. Estimación de los siete efectos principales para el estudio de la vibración en el equipo de afilado

<i>Efecto</i>	<i>Estimado</i>	<i>Error estándar</i>	<i>F.I.V.</i>
Promedio	65.2		
A:A+BD+CE+FG	10.2		
B:B+AD+CF+EG	-2.65		
C:C+AE+BF+DG	-16.5		
D:D+AB+CG+EF	-3.35		
E:E+AC+BG+DF	22.6		
F:F+AG+BC+DE	-3.85		
G:G+AF+BE+CD	-0.05		

De la Tabla 4.7 se puede observar que los efectos de los factores A, C, E presentan una magnitud mayor. A continuación se presenta la gráfica para el estudio de los efectos.

Gráfica 4.5. Reporte gráfico de la estimación de los siete efectos principales estandarizados para el estudio de la vibración en el equipo de afilado



En la gráfica 4.5 se puede observar que los tres efectos mencionados arriba se alejan de la recta de probabilidad normal, sin embargo el programa no permite determinar de forma directa a quien corresponden dichos efectos, sin embargo de la Tabla 4.7 se puede saber la magnitud de los efectos estandarizados. Los valores más alejados corresponden a los valores 22.6, 10.2 y -16.5 que corresponden a los efectos de E, A y C respectivamente.

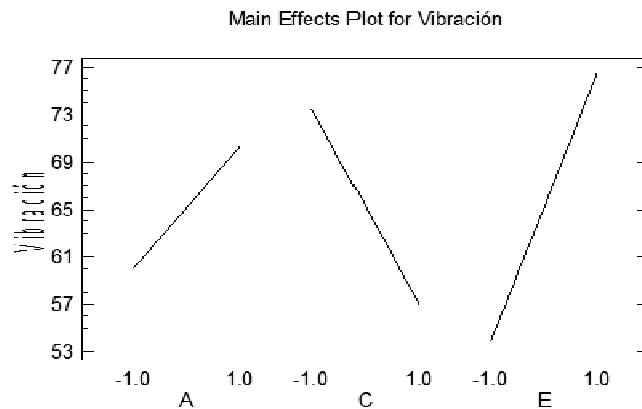
Tomando en consideración estos resultados se construye la tabla ANDVA para determinar si estos efectos (A, C, y E) son significativos o no.

Tabla 4.8. ANDVA para el estudio de los efectos de A, C y D del estudio de la vibración en el equipo de afilado

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
A:A	208.1	1	208.1	12.58	0.0239
C:C	544.5	1	544.5	32.93	0.0046
E:E	1022.	1	1022.	61.78	0.0014
Error total	66.14	4	16.53		
Total (corr.)	1840.	7			

Al observar el ANDVA se verifica que los tres factores antes mencionados son significativos; siendo C y E altamente significativos y A significativa al 3% aproximadamente.

Gráfica 4.6. Gráfica de perfiles para los efectos significativos del estudio de la vibración en el equipo de afilado



#### 4.3.2. Fase 2. Continuación de la Experimentación Secuencial con el primer polinomio ortogonal de primer orden para llegar a la Región Óptima cuando se está lejos de ella, en caso de estar cerca pasar a la Fase 4 de la Experimentación

Como ya se había comentado en este capítulo, para los modelos de optimización se hicieron algunas consideraciones sobre los arreglos factoriales, los cuales se referían por un lado a los niveles de los factores bajo estudio y por otro lado a los experimentos repetidos que en este caso serían los puntos centrales repetidos. En este momento vale la pena comentar que los modelos con polinomios de interés son los lineales o de primer orden y de segundo orden o cuadráticos.

Para lo anterior considerando que la experimentación por llevar a cabo requiere de la mejora de las condiciones estándar o también llamado punto central del proceso de producción, dicho punto considerado en el experimento, agregará un nivel más a los factores bajo estudio, por ejemplo si el factorial es  $2^2$ , el número de niveles por factor serían tres, y estaríamos en la condición de modelar los polinomios de orden uno y dos.

Debieran considerarse además una cantidad de puntos centrales  $n_c$  suficientes para estimar adecuadamente la fluctuación aleatoria o error puro tanto en los modelos de orden uno o dos. Así mismo dependiendo del tipo de modelo, por ejemplo para estimar adecuadamente el modelo de primer orden, se requiere cierta cantidad de puntos centrales, pero para los modelos de segundo orden para estimar

adecuadamente la curvatura se requieren no tan solo los puntos centrales repetidos, sino otros puntos en la región experimental, en particular, se requieren los puntos axiales o estrella que posteriormente se comentarán y servirán para estimar adecuadamente la curvatura de la superficie de respuesta y tener entonces una buena modelación con polinomios de segundo orden.

Tabla 4.9. ANDVA para un modelo de diseño de experimentos factorial  $2^2$  sin repeticiones:  $y_{ij} = \mu + \delta_i + \gamma_j + \delta\gamma_{ij} + \varepsilon_{ij}$

FV	GL	SC	CM	Fc	NSD
Efectos	$n_f - 1$	$SC_{efectos} = SC_{\delta} + SC_{\gamma} + SC_{\delta\gamma}$	$CM_{efectos}$	$\frac{CM_{efectos}}{CM_{ET}}$	$\alpha$
Error Total	$n_c$	$SC_{ET}$	$CM_{ET}$		
Total Aj.	$n_f + n_c - 1$	$SC_{TA}$			

La tabla considera el estudio de un modelo de diseño de experimentos factorial  $2^2(n_f)$  sin repeticiones:  $y_{ij} = \mu + \delta_i + \gamma_j + \delta\gamma_{ij} + \varepsilon_{ij}$  con  $i=j=-1, 0, 1$ ; con puntos centrales (factoriales) y  $n_c(n_f)$  puntos experimentales elementales, con los niveles de los factores como cualitativos.

Tabla 4.10. Tabla ANDVA para un diseño factorial  $2^k$  con k variables binarias para un Modelo Polinomial de Primer Orden

$$y_i = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon_i$$

FV	GL	SC	CM	Fc	NSD
Reg	$k-1$	$SC_{Reg}$	$CM_{Reg}$	$\frac{CM_{Reg}}{CM_{ET}}$	$\alpha_{Reg}$
Error total	$(n_f + n_c) - k - 1$	$SC_{ET}$	$CM_{ET}$		
Error puro	$(n_f + n_c) - k - \binom{k}{2}$	$SC_{EP}$	$CM_{EP}$		
Falla de ajuste	$\binom{k}{2} + 1$	$SC_{FA}$	$CM_{FA}$	$\frac{CM_{FA}}{CM_{EP}}$	$\alpha_{FA}$
ef_int	$\binom{k}{2}$	$SC_{ef\_int}$			
ef_cp	1	$SC_{ef\_cp}$			
TA	$(n_f + n_c) - 1$	$SC_{TA}$			

Aunado a esta tabla se puede calcular la prueba de falta de ajuste para estimar si el modelo es suficiente para determinar si hay ajuste completo o es necesario agregar los términos cuadráticos necesarios. En la tabla 4.10 se observa el cálculo correspondiente a la ANDVA del modelo y la subdivisión de suma de cuadrados para la prueba de Falta de Ajuste, considerando que  $x_i = -1, 0, 1$  para  $i=1, 2, \dots, k$  factores cuantitativos y  $l=1, 2, \dots, (n_f+n_c)$  con  $n_f(n_c)$  puntos experimentales número de puntos del factorial  $2^k$  y centrales respectivamente.

### 4.3.3. Modelos de superficie de respuesta

Cuando se mide el valor de la respuesta de interés en cualquier experimento es improbable que se observe el "verdadero valor" de la respuesta que se denota con la letra  $\eta$ . Se supone que la verdadera respuesta  $\eta$  existe y existe también una "verdadera función"  $\varphi$  de los factores controlados que la describe de manera exacta:  $\eta = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_k)$ .

Si se conociera  $\varphi$  se tendría un modelo determinista en el cual solamente se necesita evaluar el tratamiento  $(x_1, x_2, \dots, x_k)$  para obtener  $\eta$ , solo que, aún cuando se conociera la ley que gobierna el proceso, al obtener datos experimentales, no se ajustan exactamente al modelo, debido a la existencia de variabilidad. Sea  $Y_i$  la  $i$ -ésima medición hecha en el experimento, entonces se cumple que  $Y_i = \eta_i + \varepsilon_i$ , donde el término  $\varepsilon_i$  representa al error aleatorio asociado al valor  $Y_i$ , y  $\eta_i$  representa a la verdadera función de respuesta que se supone conocida, evaluada en el mismo punto.

El problema es que se desconoce la ley física que gobierna el comportamiento de la variable de interés como función de los factores controlados y debe estimarse un modelo a partir de los datos del experimento, por ello, el término  $\eta_i$  en el modelo se sustituye por una función propuesta por el experimentador. Muchas variables de respuesta se pueden modelar bien con polinomios de primer o segundo orden. Sustituyendo  $\eta_i$  por estos polinomios:

$$\text{Modelo de primer orden: } Y_i = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon_i$$

$$\text{Modelo de segundo orden: } Y_{ij} = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon_{ij}$$

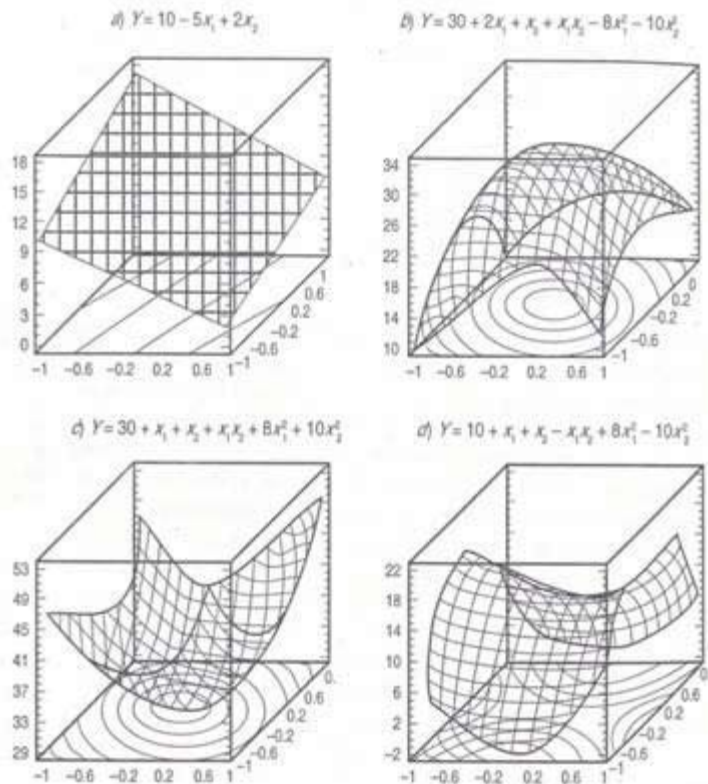


Donde  $\beta_0$  representa a la escala y es el corte de la superficie con el eje Y en el origen;  $\beta_i$  representa el efecto principal o individual del factor  $x_i$ ;  $\beta_{ii}$  representa al efecto de la curvatura pura de la variable  $x_i$ ;  $\beta_{ij}$  mide el efecto de interacción  $x_i x_j$  y  $\varepsilon_{ij}$  representa el error experimental (aleatorio). Los parámetros  $\beta_0, \beta_i, \beta_{ii}$  y  $\beta_{ij}$  se estiman a partir de los datos. En general, se puede aplicar el método de mínimos cuadrados para estimar los parámetros del modelo para cualquier diseño. El estimador esta dado por:

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_{k-1,k} \end{bmatrix} = (X'X)^{-1}X'Y$$

Donde X es la matriz de diseño aumentada con una primera columna de unos, además de una columna por cada interacción o término cuadrático puro incluidos en el modelo, generadas a partir de multiplicar las originales, y Y es el vector de los datos observados de la variable de respuesta.

Figura 4.7. Superficies de Respuesta: a) descrita por un modelo de primer orden. b) c) y d) descritas por modelos de segundo orden



Gráficamente, al considerar las dos variables de proceso  $X_1$  y  $X_2$ , y diferentes valores de los parámetros, se podrá ver el comportamiento de las superficies de respuesta. Para el modelo de primer orden la superficie es un plano pues no tiene términos de interacción ni términos cuadráticos. Para los modelos de segundo orden la superficie dependerá de los signos y magnitudes de los coeficientes en el modelo. Hay tres formas básicas en este modelo: superficie con máximo (montaña), superficie con mínimo (valle) y superficie con punto silla (minimax) ver Figura 4.7.

Para más de dos factores ( $k > 2$ ) las superficies de respuesta no se pueden graficar completas de una sola vez pues el modelo de primer orden representa un hiperplano y el de segundo orden un hiperelipsoide o hiperboloide. Para  $k=3$  factores puede graficarse la superficie haciendo tres gráficas con dos factores cada vez, haciendo el tercero constante. Para 4 o más factores es mejor basarse en técnicas analíticas.

**Ejemplo 4.3.** Maximizar la Producción en gramos de una Reacción Química variando el tiempo de reacción y la temperatura del reactor

Un químico desea maximizar la producción en gramos de una reacción química, variando el tiempo de reacción ( $t$ ) y la temperatura del reactor ( $T$ ). Los procedimientos que pueden seguirse son variando una variable cada vez o bien considerando un diseño de tratamientos factorial, donde los niveles de los factores al combinarse se obtienen cuatro tratamientos por experimentar.

La variable de respuesta es la producción en gramos. Al iniciar el experimento se determinó mediante un barrido de factores que el proceso solo se ve afectado por los factores tiempo y temperatura. Se propone como diseño tomar un nivel bajo y un nivel alto alrededor de los niveles estándar para cada factor, de tal forma que se ajuste un modelo de primer orden. Estos niveles estándar se consideran a partir de la información proporcionada por el personal encargado de este proceso, a partir de las observaciones que han realizado. Se determina que los niveles considerados como estándar son un tiempo de 75min a una temperatura de 130° C. Es importante contar con información del área para poder tener un punto de partida para así evitar comenzar a experimentar "a ciegas".

En muchos de los casos el tener información *a priori* del experimento permitirá estar cerca de la región óptima. Para probar si se debe ajustar o no un modelo de segundo orden se recurrirá a la prueba de falta de ajuste, para lo cual se agregan 3 repeticiones de los valores estándar de cada factor. Se cuida que cada una de las siete corridas sea en igualdad de circunstancias bajo un proceso de aleatorización para obtener condiciones homogéneas y eliminar posibles factores de confusión.

Una vez determinados los niveles a muestrear se procede a experimentar. Los resultados de la experimentación se encuentran contenidos en la tabla 4.11.

Tabla 4.11. Datos para el ajuste de un modelo lineal para la producción de una reacción química

Y Producción (gramo)	F <sub>1</sub> Tiempo (min)	F <sub>2</sub> Temperatura (°C)
54.3	70	127.5
60.3	70	132.5
64.6	80	127.5
68.0	80	132.5
60.3	75	130
64.3	75	130
62.3	75	130

Con esta información se procede al ajuste de un polinomio de primer orden, que es aquel que solo considera los efectos principales de cada factor, pues se supone que la región óptima no está cerca del rango de exploración de los factores incluidos en el experimento. El modelo es representado en un plano cuando hay dos factores y en un hiperplano en el caso de más de dos factores. Dado que se busca un punto que optimice la respuesta, máximo cuando la respuesta mayor es mejor o mínimo cuando la respuesta menor es mejor, se puede recurrir al análisis conocido como el camino de ascenso o descenso por la pendiente máxima (CAoDPPM) para poder determinar los valores para las combinaciones de los factores para nuevos tratamientos formulados, de tal forma que siguiendo una trayectoria recta en el espacio, rápidamente, nos podemos acercar a la región experimental donde se encuentra el punto óptimo.

Aplicando el CAPPm los nuevos tratamientos se consideran a lo largo de una línea recta realizando nuevos experimentos. Si la respuesta es a mayor es mejor, la experimentación a lo largo del CAPPm presentará un incremento en la respuesta, una vez que la línea se acerque a la región óptima los valores de la respuesta en lugar de presentar un incremento, comenzarán a decrecer, en tal caso se propone un nuevo modelo de primer orden (si la respuesta es a menor es mejor, se busca el lugar en el cual la respuesta comienza a crecer después de haber decrecido) En caso de ser

significativo el modelo de primer orden se sigue aplicando la metodología de CAPPm hasta que la región experimental se encuentre cerca del punto óptimo.

En el caso de la figura 4.7 el segundo diseño representa un modelo cuadrático, el cual requiere para su representación un modelo de segundo orden. Si el modelo de segundo orden ajusta bien a los datos de la muestra se procederá a realizar una transformación canónica para establecer si se trata de un máximo único o diverso (representado por una cordillera) y además se podrá caracterizar la respuesta de acuerdo a los factores bajo estudio.

Para ajustar el modelo se procede al uso de StatGraphics. El programa considera el uso de las técnicas previamente vistas. El análisis se puede corroborar usando un cambio de variable a un Modelo de Regresión Múltiple.

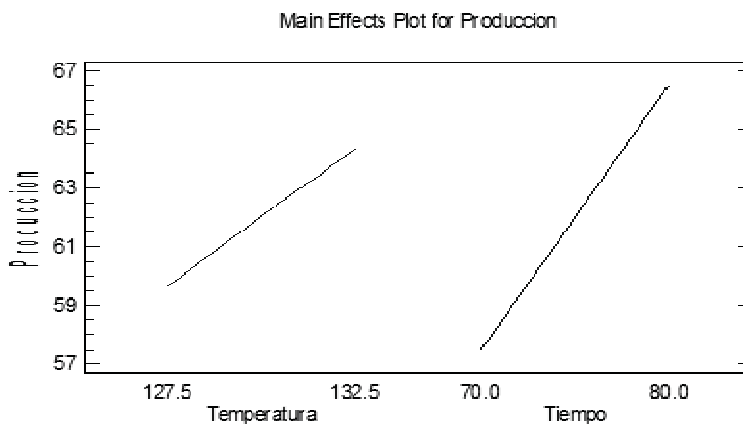
En la Tabla 4.12 se muestra la tabla ANDVA para el análisis del modelo.

Tabla 4.12. Tabla ANDVA para el modelo  $y_{ij} = \mu + \delta_i + \gamma_j + \delta\gamma_{ij} + \varepsilon_{ij}$  de la producción de una reacción química

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
A:Temperatura	22.09	1	22.09	5.52	0.1432
B:Tiempo	81.0	1	81.0	20.25	0.0460
AB	1.69	1	1.69	0.42	0.5824
Falta de ajuste	0.4286	1	0.4286	0.11	0.7745
Error Puro	8.0	2	4.0		
Total (corr.)	113.2	6			

La tabla de análisis de varianza anterior, como puede observarse, presenta información para probar tanto la hipótesis de regresión, así como información correspondiente de la prueba de falta de ajuste. Se concluye que el modelo ajustado de primer orden es suficiente para el análisis. Un ajuste polinomial de segundo grado no se requiere.

Gráfica 4.8. Gráfica de los efectos para tiempo y temperatura de la producción de una reacción química



De la Tabla 4.12 se observa que el nivel de significancia descriptivo para el factor B es menor a 0.05 por lo que se concluye que hay evidencia estadística para rechazar la hipótesis nula, es decir, se concluye que en dirección de cambiar el tiempo de reacción se obtendrá un cambio significativo en la producción. Esta conclusión se verifica con la gráfica de perfiles (Gráfica 4.8).

#### 4.3.4. Fase 3. Experimentación Secuencial en la dirección de la Región Óptima, cuando se esté lejos de ella considerando Polinomios de Primer Orden para cada región de exploración propuesta

Como el modelo de primer orden ajusta a los datos, recurrimos al procedimiento del camino de pendiente máxima. Como se busca en este caso maximizar la respuesta, se ascenderá por la pendiente máxima.

La función ajustada de primer orden en el primer experimento para los niveles de factores codificados, es  $\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i$  obtenida con un diseño factorial. Si se considera que el origen se encuentra en los valores promedio de los niveles de cada factor, esto es el punto  $\{0,0,\dots,0\}$  para los valores codificados, para obtener el CAPPM se deberá maximizar la función estimada sujeta a la restricción  $\sum_{i=1}^k x_i^2 = r^2$ , una hiperesfera de radio  $r$ . Para diferentes valores de  $r$  se pueden estimar nuevos valores para las  $x_i$  que definen la dirección en la que hay que desplazarse para los niveles de los factores para plantear nuevos experimentos. Para encontrar el máximo considerando la restricción mencionada se recurre al método de los multiplicadores de Lagrange.

$$\text{Sea } Q(x_1, x_2, \dots, x_k) = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i - \mu \left( \sum_{i=1}^k x_i^2 - r^2 \right)$$

Se calcula la primera derivada respecto a cada variable  $x_i$  y se iguala con 0.

$$\frac{\partial Q}{\partial x_i} = \hat{\beta}_i - 2\mu x_i = 0$$

$$\hat{\beta}_i = 2\mu x_i \Rightarrow x_i = \frac{\hat{\beta}_i}{2\mu}$$

De esta expresión se determina el valor para  $\mu$  para poder determinar un incremento fijo de todas las variables.

Una forma de resolver esta ecuación es calcular el valor de  $\mu$  a partir de  $x_1$  por ejemplo:

$$\mu = \frac{\hat{\beta}_1}{2x_1} \text{ de tal forma que se defina un incremento en la variable } x_1 \text{ en una unidad.}$$

$$\mu = \frac{\hat{\beta}_1}{2(1)} = \hat{\beta}_1 \frac{1}{2}$$

De aquí solo se tiene que sustituir el valor de  $\mu$  en las  $x_i$  para calcular los nuevos valores de estas.

$$x_i = \frac{\hat{\beta}_i}{2(\mu)} = \frac{\hat{\beta}_i}{2\left(\hat{\beta}_1 \frac{1}{2}\right)} = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\beta}_1}$$

Con esta relación (proporcional a  $\hat{\beta}_1$ ) se determina el vector de nuevos valores para las  $x_i$ , el cual se denotará como  $\Delta$ .

$$\text{Sea } \Delta = \frac{1}{\hat{\beta}_1} \{ \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_k \}.$$

Los valores codificados para las nuevas unidades experimentales, que definen el camino de ascenso o descenso por la pendiente máxima, estarán en función de  $i\Delta$ , con

$j = 1, 2, \dots$ . Se realizan nuevos experimentos con valores codificados  $i\Delta$  hasta que se detecte un cambio en la dirección del incremento o decremento de la respuesta según sea la optimización. Una vez detectado dicho cambio se genera un nuevo diseño de primer orden alrededor del valor adecuado para  $i\Delta$  y se prueba el modelo

lineal, de ser significativo el ajuste se procede a realizar nuevamente el CAPP. Cuando el ajuste del modelo de primer orden no sea significativo se plantea un modelo de segundo orden.

**Ejemplo 4.4.** Continuación del Ejemplo 4.3, en su fase segunda

Tabla 4.13. Tabla de valores estimados de los parámetros del ejemplo de la producción de una reacción química

<i>Coeficiente</i>	<i>Estimado</i>
constante	-634.7
A:Temperatura	4.84
B:Tiempo	7.66
AB	-0.052

Con lo cual se puede construir una tabla con los nuevos valores tanto codificados, como originales, de los factores que definen el camino a seguir. Como la respuesta es mayor es mejor, se busca maximizar la respuesta y por lo tanto se sigue el camino hacia donde el rendimiento incrementa.

Tabla 4.14. Camino de ascenso por la pendiente máxima, información tabular para la producción de una reacción química

<i>Temperatura</i>	<i>Tiempo</i>	<i>Producción pronosticada</i>
130.0	75.0	62.01
131.0	79.2	66.52
132.0	84.94	71.8
133.0	102.9	85.59
134.0	94.51	79.27

Tras realizar las experimentaciones correspondientes se tiene que se llegó a un punto donde la respuesta después en lugar de subir vuelve a bajar. Esto podría indicar que el punto óptimo se encuentra cerca. En la tabla 4.15 se muestra un nuevo diseño para el ejemplo de la reacción. Con esta nueva información se procederá a realizar el análisis de ajuste del modelo y la prueba de falta de ajuste.

Se presenta la tabla 4.15 con valores originales y valores codificados y se deja a libertad del lector realizar el ajuste mediante un modelo de regresión. De nueva cuenta se presenta en este escrito el ajuste utilizando StatGraphics para las variables originales.

Tabla 4.15. Datos originales y codificados para el ajuste de un modelo lineal para la producción de una reacción química, etapa 2

Variable de Respuesta	Variable original		Variable codificada	
	F <sub>1</sub> Tiempo (min)	F <sub>2</sub> Temperatura (°C)	F <sub>1</sub> Tiempo (min)	F <sub>2</sub> Temperatura (°C)
Y (gramo)				
78.8	80	140	-1	-1
84.5	80	150	-1	1
91.2	100	140	1	-1
77.4	100	150	1	1
86.8	90	145	0	0
89.7	90	145	0	0

La siguiente tabla muestra la prueba para el ajuste del modelo de primer orden, así como la prueba de falta de ajuste.

Tabla 4.16. Tabla ANDVA para la Fase 3 del ejemplo de la producción de una reacción química

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
A:Temperatura	16.4	1	16.4	3.90	0.2984
B:Tiempo	7.022	1	7.022	1.67	0.4193
Falta de ajuste	132.2	2	66.08	15.72	0.1732
Error puro	4.205	1	4.205		
Total (corr.)	159.8	5			

De la tabla anterior se desprende que ningún efecto principal explica el modelo. La prueba de falta de ajuste resulta no ser significativa. Es decir, aunque pareciera que es suficiente ajustar con un modelo polinomial de primer orden, los efectos no explican la respuesta.

#### 4.3.5. Fase 4. Fin de la Experimentación Secuencial con polinomios de segundo orden para determinar el Óptimo

Los Diseños Compuestos Centrales son diseños experimentales útiles para el desarrollo de la MSR para construir un segundo modelo (cuadrático) que describa la



variable de respuesta sin necesidad de recurrir al Diseño Factorial de tres niveles. Una vez construido el diseño y haber realizado los experimentos, se analizará el modelo tratándolo como un MRL. Las variables estandarizadas son de uso frecuente en este diseño.

**Matriz del diseño:** La matriz de diseño  $D$  se puede construir para un experimento de  $k$  factores considerando las siguientes tres matrices:

1. La matriz de diseño para un experimento Factorial  $2k$  (experimento factorial de  $k$  factores), que se llamará matriz  $P$ .
2. Una matriz con  $2k$  renglones donde para cada factor el valor de su columna es  $\pm\lambda$  y en el resto de las columnas se escribe cero. El valor  $\lambda$  es determinado por el diseñador y puede tomar cualquier valor dependiendo de las propiedades que se quieran que el modelo tenga, por ejemplo rotabilidad u ortogonalidad. Esta será la matriz  $E$ .

$$E = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\lambda & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda \end{bmatrix}$$

3. El centro del sistema de interés, denotado en variables cifradas como  $(0, 0, 0, \dots, 0)$ , donde hay  $k$  ceros. Este punto se repite para poder estudiar la curvatura de la superficie ajustada. Esta parte será denotada como  $C$ .

Por tanto la matriz de diseño  $D$  queda integrada de la siguiente manera:  $\begin{bmatrix} P \\ E \\ C \end{bmatrix}$

El valor designado a  $\lambda$  determina la geometría de la región del diseño. Mientras el valor de  $\lambda$  cambie, el diseño puede adquirir otras propiedades.

- Si  $\lambda$  es igual con 1 se define un diseño cuadrático de dos variables (un cúbico para tres variables, un hipercubo para cuatro variables, etc.).
- Si se define a  $\lambda = \sqrt[4]{\frac{QF}{4}}$ , con  $Q = (\sqrt{F+G} - \sqrt{F})^2$ , donde  $F$  es el número de los puntos debido al diseño factorial,  $G = 2k + n$ , el número de puntos adicionales y  $n$

el número de puntos centrales en el diseño, entonces el diseño se convierte en un diseño ortogonal (Myers, 1971).

- Si se define a  $\lambda = \sqrt[4]{F}$ , el diseño se convierte en un diseño rotatable (Montgomery, 1984).

Tabla 4.17. Valores codificados para los puntos axiales, el valor de  $\lambda = \sqrt{2}$

Nombre	Coordenadas
Punto Central	(0, 0)
Puntos Axiales	(- $\lambda$ , 0)
	( $\lambda$ , 0)
	(0, - $\lambda$ )
	(0, $\lambda$ )

En la tabla 4.17 se presentan los niveles intermedios que se considerarán para el Diseño Compuesto Central del ejemplo 4.3.

#### Ejemplo 4.5. Continuación del Ejemplo 4.3 en su fase final

Tabla 4.18. Datos originales y codificados de los puntos axiales y centrales considerados para que junto con los datos de la tabla 4.15 se realice un ajuste de un modelo cuadrático para la producción de una reacción química, etapa 3

Variable de Respuesta	Variable original		Variable codificada	
	F <sub>1</sub> Tiempo (min)	F <sub>2</sub> Temperatura (°C)	Y (gramo)	F <sub>1</sub> Tiempo (min)
83.3	75.858	145	$-\sqrt{2}$	0
81.2	104.14	145	$\sqrt{2}$	0
81.2	90	137.93	0	$-\sqrt{2}$
79.5	90	152.07	0	$\sqrt{2}$
87.0	90	145	0	0
86.0	90	145	0	0

El modelo de segundo orden propuesto corresponde a un diseño compuesto central rotatable. El diseño compuesto central rotatable contempla, además de los puntos para el diseño factorial y los dos puntos centrales, los cuatro puntos estrella y dos repeticiones más para el punto central para la prueba de ajuste del modelo de segundo grado. Contemplando los 12 tratamientos anteriores se vuelve a realizar un análisis de varianza para el modelo de segundo orden completo.

Mediante la tabla de análisis de varianza se determinará si el modelo de segundo orden es el adecuado para el ajuste de los nuevos datos. El análisis de varianza es el siguiente.

Tabla 4.19. Tabla ANDVA para la fase final de la producción de una reacción química

<i>Fuente</i>	<i>Suma de Cuadrados</i>	<i>GL</i>	<i>Cuadrados Medios</i>	<i>Fc</i>	<i>NSD</i>
A:Tiempo	0.7047	1	0.7047	0.27	0.6379
B:Temperatura	13.56	1	13.56	5.24	0.1061
AA	29.46	1	29.46	11.38	0.0433
AB	95.06	1	95.06	36.72	0.0090
BB	61.35	1	61.35	23.69	0.0166
Falta de ajuste	18.19	3	6.063	2.34	0.2515
Error puro	7.768	3	2.589		
Total (corr.)	212.3	11			

De la tabla anterior se observa que los efectos cuadráticos de cada factor, así como la interacción de primer orden son significativas al 5%. La prueba de falta de ajuste resulta ser no significativa. La conclusión es que se requiere de un modelo de segundo orden para el ajuste, y ese es el grado polinomial adecuado para el ajuste.

Tabla 4.20. Tabla de coeficientes del modelo para la producción de una reacción química, fase final

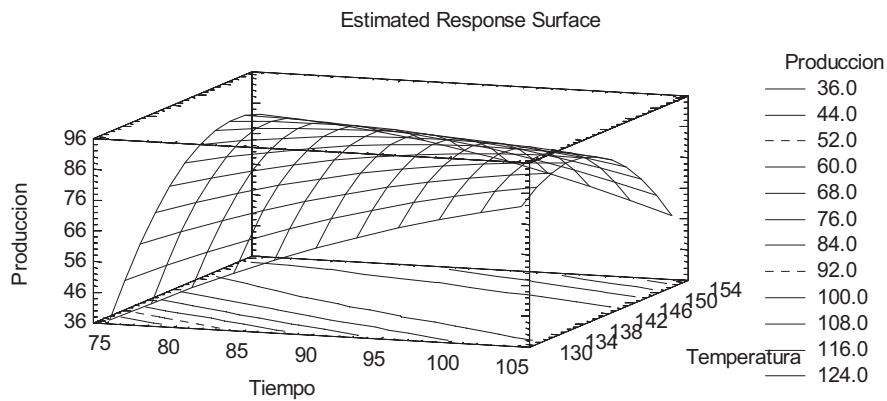
<i>Coeficiente</i>	<i>Estimado</i>
constante	-3911.
A:Tiempo	18.04
B:Temperatura	44.2
AA	-0.02152
AB	-0.0975
BB	-0.1231

En la tabla anterior se puede ver que con un riesgo del 5% los términos del modelo cuadrático son significativos salvo por los efectos principales de ambos factores. Por tanto el modelo ajustado es:

$$\text{Producción} = -3911. - 0.02152 \cdot \text{Tiempo}^2 - 0.0975 \cdot \text{Tiempo} \cdot \text{Temperatura} - 0.1231 \cdot \text{Temperatura}^2$$

En este caso el modelo de segundo grado ajusta a nuestra respuesta por que el punto óptimo se encuentra cerca del área del diseño.

Figura 4.9. Superficie ajustada para el ejemplo de la producción de una reacción química



El uso de MSR es la alternativa más adecuada en experimentos cuyo objetivo es establecer la relación entre factores y la variable de respuesta, dentro de la región experimental. Después de haber ajustado la ecuación cuadrática a los datos experimentales, en un estudio de superficie de respuesta, esta se utiliza para investigar la relación entre sus variables. El objeto de tal análisis es encontrar el máximo (o mínimo) de la respuesta y presentar los resultados en forma gráfica.

Vale la pena comentar en este momento, que las aplicaciones para MSR con factoriales son abundantes, por ello es que en los Apéndices I, II, y III se presentan tres ejemplos donde entre otros temas se trata el de optimización con multirespuesta.

#### Resumen del ejemplo de reacción química

Previamente al análisis de datos se realizó la búsqueda de factores potenciales en la etapa de Cribado, figura 4.3, se determinó que el tiempo y la temperatura son los factores que permitirían obtener el óptimo para la respuesta, siendo el valor obtenido para el tratamiento estándar o punto central de 75 minutos y 130 G\_C cuya respuesta fue de 63%.

Posteriormente mediante un estudio para la Fase 1, se trató de determinar si con el primer experimento de un factorial  $2^2$  con un punto central (definido anteriormente) repetido tres veces, al analizar los datos para los tratamientos del 1 al 7, donde del 1 al 4 corresponde al factorial y los otros son puntos centrales, con el análisis del primer MPPO se puede saber si la zona de experimentación se encuentra lejos o cerca de la región óptima, resultando que se estaba lejos de la región óptima, pues en el ANDVA para el modelo en consideración, los efectos de primer orden al menos uno era significativo, además de que la falla de ajuste no fue significativa, los cuales indicaban un buen ajuste con el primer MPPO.

Como se concluyó que se estaba retirado de la región óptima, entonces se buscó acercarse ella de la manera más rápida posible mediante un estudio para la Fase 2, utilizando el CAPP. Del estudio resultó que la estimación en la dirección del CAPP correspondió a los siguientes tratamientos con sus respectivos rendimientos: 8 con 73.3%, 9 con 58.2% y 10 con 86.8%. Del procedimiento anterior fue posible acercarse rápidamente a la Región considerando como nuevo punto central el que correspondía al tratamiento 10 con 86.8 % de rendimiento (al considerar 90 minutos y 145 G\_C).

Tomando como punto central el tratamiento 10 para el nuevo punto central en un nuevo experimento, un nuevo arreglo de tratamientos factorial  $2^2$  (tratamientos 11,12,13,14) con dos puntos centrales que serán 15 y 16 (con una disminución y un aumento de tiempo de 10 minutos y con una disminución y un aumento de la temperatura de 5 G\_C) con el cual se ajustó el segundo MPPO, el cual indicó que los términos de primer orden no eran significativos y que la falta de ajuste era significativa al 17.6%.

Para la Fase 4, considerando que en la Fase 3, con un riesgo de 17.6%, se rechazaba que el ajuste con modelos primer orden se rechazaba, ello indicaba que se requerían de términos de mayor orden en el modelo, en particular uno de segundo. Fue por ello que se pensó en proponer un diseño de experimentos basado en un arreglo de tratamientos que proporcionara una mejor estimación de los términos de segundo orden.

Como ya se había comentado, la falla de ajuste de MPPO se puede pensar como ausencia de términos de primer orden o de segundo orden, sin embargo en nuestro caso los de primer orden no pueden ser porque al inicio se comentó que se hizo un estudio de diagnóstico o filtrado de factores y los dos bajo estudio fueron los relevantes, por lo cual la falla de ajuste en este caso se debe a la ausencia de

términos de segundo orden, aunque hubiese sido deseable que el riesgo del rechazo fuera del 5%

Por lo antes explicado, se planteó tener un nuevo arreglo de tratamientos, y este fue agregar a los tratamientos que ya se tenían (11,12,..,16) los necesarios correspondientes a puntos axiales o estrella (17, 18, 19, 20) y dos puntos centrales más (21 y 22), tratamientos con los cuales se tenía la estructura de diseño de experimentos o arreglo de tratamientos central compuesto rotatable, para estimar la curvatura adecuadamente con un MPSO.



## Capítulo 5. Arreglos de Tratamientos de Mezclas en Formulaciones Industriales

### 5.1. Fundamentos para el análisis de los Arreglos de Tratamientos de Mezclas o de Formulaciones Industriales

A lo largo de la historia, el problema de la formulación de mezclas ha sido tradicionalmente abordado por el método de ensayo y error, que consiste en formular mezclas donde las proporciones de los materiales utilizados se establecen de manera arbitraria y se selecciona aquella mezcla que mejora las propiedades de interés, sin ser necesariamente la óptima.

En la vida real, incluyendo la industria, es común encontrar productos alimenticios (jugos de frutas de naranja, piña, manzana con agua), materiales para construcción (concreto formado con agua, arena y cemento), textiles (telas con mezcla de fibras de algodón y de poliéster), explosivos, pinturas, polímeros, cerámica y formulaciones de fertilizantes (con nitrógeno, fósforo y potasio) entre otros.

Los productos en la antigüedad se fabricaban utilizando secuencias de ensayo y error, o incluso como resultado de accidentes. En particular la porcelana fue de los primeros productos que se elaboraron con esta metodología. Sin embargo con la introducción de la porcelana, traída de China por parte de Marco Polo, se dejó de crear estas "recetas" para dar paso a los productos terminados.

Habrían de pasar diez siglos, hasta el siglo XVII, para que en Europa se reinventara el proceso de estudiar mezclas. Aún cuando los componentes debían de tener una cierta calidad, se determinó que estudiar la proporción y cantidad de material a usar en la fabricación de mezclas también era de suma importancia en la elaboración de productos.

Actualmente, tras haber realizado una búsqueda incansable de reducir costos, así como enfrentar problemas de escasez de materiales, las compañías han alcanzado una condición en la que es necesario modificar las fórmulas de mezclas para aprovechar las características fisicoquímicas de las materias primas a usar. Las mezclas actualmente se obtienen mediante experimentos basados en los estudios de Scheffé de 1958, para optimizar la obtención de productos diversos como son los alimentos, pinturas, materiales de construcción, entre otros, con excelentes resultados.



En términos de la MSR, en el capítulo anterior, se abordó el tema donde en los experimentos para arreglos de tratamientos factoriales, los factores son los niveles de los componentes a usar, estos componentes deben ser en principio independientes para su estudio. Sin embargo en los experimentos con mezclas los niveles por factor no son independientes, por lo tanto tampoco son independientes los niveles de cada componente con otro componente. En consecuencia los diseños de experimentos que se explicaron, para diseños factoriales, no se aplican en experimentos con mezclas.

En este capítulo se abordarán los aspectos fundamentales del diseño y el análisis de experimentos con arreglos de tratamientos con mezclas.

## 5.2. El Diseño de Arreglos de Tratamientos con Mezclas

Se puede afirmar que si la proporción del  $i$ -ésimo componente es  $X_i$  y existen  $q$  componentes en la mezcla, las proporciones deben satisfacer las siguientes restricciones:

1.  $0 \leq X_i \leq 1$  para cada componente  $i$ .

2.  $\sum_{i=1}^q X_i = 1$

Por ejemplo en una mezcla de dos componentes se tiene que  $0 \leq X_1 \leq 1$ ,  $0 \leq X_2 \leq 1$  y  $X_1 + X_2 = 1$ . Este tipo de restricciones limita el empleo de los arreglos de tratamientos discutidos hasta este momento, para estudiar la relación entre la calidad del producto y la mezcla de los ingredientes.

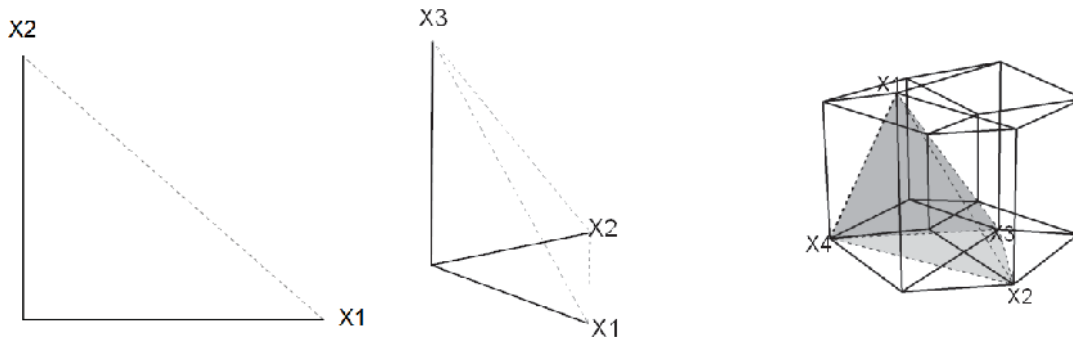
Vale la pena anotar que el diseño factorial  $2^2$  incluye todas las esquinas del cuadrado, pero únicamente dos de ellos son admisibles al analizar el problema de mezclas. La región experimental en un diseño factorial es el área simplex dentro del cuadrado. De tal forma que el diseño de mezclas de dos componentes consiste en los puntos de la recta  $X_1 = 1 - X_2$ . En el caso comentado el diseño de mezclas es unidimensional.

En una mezcla con tres tipos de componentes, la región experimental es la superficie bidimensional correspondiente al plano triangular que cruza el diseño factorial tridimensional correspondiente a un cubo. Para cuatro componentes, la región experimental de un arreglo de tratamiento mezcla es el volumen de un

tetraedro que cruza el diseño factorial en un tesseracto. La Gráfica 5.1 presenta tres ejemplos, para dos, tres y cuatro factores.

En este sentido el diseño de mezclas corresponde a una dimensión menos que el diseño factorial original.

Gráfica 5.1. Regiones experimentales para un diseño de experimentos de 2, 3 y 4 factores con sus componentes en un diseño factorial (línea continua) y para el diseño de mezclas (líneas punteadas)



La modelación de un diseño de experimentos, requiere entre otras cosas, por un lado de la cantidad de puntos experimentales bajo estudio y por otro lado, la región experimental a la que se puede inferir los resultados pertinentemente.

Los diseños de arreglos de tratamientos para mezclas, denominados Símplex - Lattice, ajustan una ecuación polinomial para representar la superficie sobre la región entera del diseño, es decir, la región sobre la cual se distribuyen los puntos experimentales en el espacio total de los componentes del diseño. El arreglo ordenado con distribución uniformemente espaciada de puntos, es conocido como arreglo de puntos o Lattice. El nombre Lattice es usado para hacer referencia a un arreglo o distribución de puntos en el espacio y en el escrito se llamará diseño mezcla de Malla con Retículo Simplex (Símplex - Lattice).

Una malla con retículo simplex tiene una correspondencia especial con la ecuación de un polinomio  $(q, m)$ . Por ejemplo para modelar con un polinomio de grado  $m$  con  $q$  componentes, una malla con retículo simplex, se referirá como una malla con retículo simplex  $(q, m)$ , la cual consiste de puntos cuyas coordenadas están definidas por la siguiente combinación de las proporciones de los componentes: las proporciones para cada componente tomará cada uno de los  $m+1$  valores igualmente espaciados entre 0 y 1.

$$X_i = 0, 1/m, 2/m, \dots, 1 \quad (5.1)$$

La malla con retículo simplex  $(q, m)$  será todas las posibles combinaciones o mezclas de las componentes donde las proporciones para cada componente son usadas. La lista de combinaciones específicas de componentes que consideran las mallas con retículo simplex  $(q, m)$  es ilustrado como sigue.

Para efectos de ejemplificar la técnica considere  $q=3$  componentes.

El espacio de los componentes de todas las mezclas es un triángulo equilátero. Cada componente supone las proporciones  $X_i=0,1/2,\dots,1$  para  $i=1, 2, 3$ . Considerando  $m=2$  para las proporciones en el vector 5.1 se está pensando en usar un modelo de segundo grado para representar la superficie sobre el triángulo.

El arreglo de tratamientos de una malla con retículo simplex  $(3,2)$  consiste de 6 puntos sobre la frontera del triángulo:

$$(X_1, X_2, X_3) = (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2)$$

Los tres primeros puntos experimentales representan mezclas de un solo componente o mezcla pura, y se refieren a los vértices del triángulo. Los siguientes tres puntos representan mezclas binarias o de dos componentes, para los cuales los componentes diferentes a cero son iguales. Las mezclas binarias son localizadas en los puntos medios de las aristas del triángulo.

Existen tabuladas, diversas mallas con retículo simplex  $(q, m)$ , para diversos diseños de experimentos mezcla, como los que se presenta en la Tabla 5.1.

Tabla 5.1. Número de puntos experimentales en mallas con retículo simplex  $(q, m)$  para  $3 \leq q \leq 10$ ,  $1 \leq m \leq 4$ , donde el número de niveles para cada componente es  $m+1$

Grado del Modelo	Número de Componentes								
	3	4	5	6	7	8	9	10	q
1	3	4	5	6	7	8	9	10	
2	6	10	15	21	28	36	45	55	
3	10	20	35	56	84	120	165	220	
4	15	35	70	126	210	330	495	715	
m	$\binom{q-1+m}{m}$								

## 5.3 Modelos Polinomiales para problemas de mezclas

### 5.3.1 Polinomios Canónicos

La forma general de la función de regresión, en este caso un polinomio, que puede ser ajustada a los datos colectados de una malla con retículo simplex  $(q, m)$ , es obtenida usando el siguiente procedimiento. Primero la ecuación de un polinomio de grado  $m$  es escrita como:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i \leq j}^q \sum_{i \leq j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i \leq j \leq k}^q \sum_{i \leq j \leq k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots \quad (5.2)$$

Donde los términos hasta el grado  $m$  son incluidos. El número de términos en la ecuación (5.2) es  $\binom{q+m}{m}$ , pero como los términos en la ecuación tienen un significado particular al considerar que están sujetos a la restricción  $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$ , los parámetros  $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ijk}, \dots$  asociados con los términos no son únicos. Sin embargo, se puede sustituir la ecuación:

$$x_i = 1 - \sum_{i=1}^{q-1} x_i \quad (5.3)$$

En la ecuación (5.2) se puede remover la dependencia entre los términos  $x_i$  y esto no afecta el grado del polinomio. El efecto de sustituir la ecuación (5.3) en (5.2) es que  $\eta$  es un polinomio de grado  $m$  con componentes  $x_1, x_2, \dots, x_{q-1}$  con  $\binom{q-1+m}{m}$  términos y aunque el resultado de la fórmula después de la sustitución es simple en forma, pues contiene menos componentes y pocos términos, el efecto del componente desaparece por la sustitución, toda vez el componente  $x_p$  no es incluido en la ecuación. Entonces para no sacrificar la información del componente que no se usa la ecuación (5.3), se hace otra aproximación derivando otra ecuación alternativa de (5.2) para representar la superficie con una ecuación.

Para un polinomio de grado  $m$  con  $q$  componentes, sujeta a la restricción sobre las  $x_i$  en la ecuación (5.3), se deriva multiplicando algunos de los términos en la ecuación (5.2) por la identidad  $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$  y simplificándola. La ecuación resultante es llamada polinomio canónico o forma canónica para el polinomio  $(q, m)$ . (El nombre dado al polinomio  $(q, m)$  fue dado a esas ecuaciones por algunos autores,

donde esta forma del polinomio es usado después conjuntamente con las mallas con retículo simplex( $q, m$ ).

El número de términos en el polinomio es  $\binom{q-1+m}{m}$  y este número es igual al número de puntos experimentales para tener una asociación con los puntos de 1 y  $k$ -mallas con retículo simplex ( $q, m$ ).

Por ejemplo, para  $m=1$  y de la ecuación 5.2.

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i$$

Y al multiplicar  $\beta_0$  por  $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$  la ecuación resultante es:

$$\eta = \beta_0 \left( \sum_{i=1}^q x_i \right) + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i \quad (5.4)$$

Donde  $\beta_i^* = \beta_0 + \beta_i$  para toda  $i=1, 2, \dots, q$ . El número de términos en la ecuación (5.4) es  $q$ , el cual es el número de puntos de la malla con retículo simplex ( $q, m$ ).

Los parámetros  $\beta_i^*$ ,  $i=1,2,\dots,q$  tienen un significado simple y claro en términos que permiten describir la superficie de respuesta sobre la región simple.

El polinomio general de segundo orden con  $q$  variables es:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i<j}^q \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j \quad (5.5)$$

$$x_i^2 = x_i \left( 1 - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^q x_j \right) \quad (5.6)$$

Entonces para  $m=2$ ,

$$\begin{aligned} \eta &= \beta_0 \left( \sum_{i=1}^q x_i \right) + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i \left( 1 - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^q x_j \right) + \sum_{i<j}^q \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j \\ &= \sum_{i=1}^q (\beta_0 + \beta_i + \beta_{ii}) x_i - \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^q x_j + \sum_{i<j}^q \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j \\ &= \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum_{i<j}^q \sum_{i<j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j \end{aligned} \quad (5.7)$$

El número de términos en la ecuación (5.7) es  $q+q(q-1)/2=q(q+1)/2$ . Una comparación entre las ecuaciones (5.5) y (5.6) revela que los parámetros de la ecuación (5.7) son funciones simples de los parámetros en la ecuación (5.5), esto es  $\beta_i^* = \beta_0 + \beta_i + \beta_{ii}$  y  $\beta_{ij}^* = \beta_{ij} - \beta_{ii} - \beta_{js}$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, q, i < j$ . Además, la ecuación (5.6) puede ser escrita en forma homogénea como:

$$\eta = \sum_{i=1}^q \delta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j}^q \delta_{ij} x_i x_j = \sum_{i < j}^q \delta_{ij} x_i x_j \quad (5.8)$$

Esto resultó de multiplicar  $\sum_{j=1}^q \beta_j^* x_j$  en la ecuación (5.7) por la identidad  $(x_1 + x_2 + \dots + x_j) = 1$  y después simplificando los términos. Los dos modelos en las ecuaciones (5.7) y (5.8) son equivalentes en el sentido de que uno fue derivado del otro, la ecuación (5.8) de la (5.7), sin cambiar el grado del polinomio o reduciendo el número de términos. Considerando la restricción  $x_1 + x_2 + \dots + x_j = 1$  sobre las proporciones de los componentes, un número infinito de coeficientes de regresión pueden ser derivados de la ecuación (5.5), y esas ecuaciones son equivalentes a las ecuaciones (5.7) y (5.8) cuando todas las proporciones de los componentes son incluidos. Esto se puede realizar para todas las funciones  $\phi$ , las ecuaciones lineales

$$\beta_0 - \phi + \sum_{i=1}^q (\beta_i + \phi) x_i \text{ y son equivalentes cuando } \sum_{i=1}^q x_i = 1.$$

La fórmula del polinomio de tercer grado puede ser derivada multiplicando por la identidad  $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$  así como aplicar las restricciones en la ecuación (5.6) para los términos generales del polinomio de tercer orden en la ecuación (5.2) y entonces simplificar los términos como lo que fue hecho para el polinomio  $(q, 2)$ . El modelo cúbico o polinomio  $(q, 3)$  es:

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum_{i < j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j + \sum_{i < j}^q \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i < j < k}^q \beta_{ijk}^* x_i x_j x_k \quad (5.9)$$

Una fórmula simple para el caso especial del polinomio cúbico donde los términos  $\delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$  no son considerados, es el polinomio cúbico especial:

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum_{i < j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j + \sum_{i < j < k}^q \beta_{ijk}^* x_i x_j x_k \quad (5.10)$$

Se puede introducir el modelo cuártico especial para  $q=3$ , el cual es la ecuación (5.7), para ajustar los datos tomados de una malla con retículo simplex con centroide  $(3, 2)$  para tres componentes.

Por facilidad en notación se removerán en los polinomios canónicos el asterisco de  $\beta_i^*$ ,  $\beta_{ij}^*$  y  $\beta_{ijk}^*$  y se usarán  $\beta_i$ ,  $\beta_{ij}$ ,  $\beta_{ijk}$  en todos los polinomios  $(q, m)$ . Los asteriscos fueron asignados solamente para conservar los parámetros en el polinomio general ecuación (5.2) separado de los parámetros en los polinomios derivados  $(q, m)$  los tres componentes, los modelos de ecuaciones (5.4), (5.7), (5.9) y (5.10) respectivamente aparecerán como:

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3$$

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \beta_{123} x_1 x_2 x_3$$

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3$$

El número de términos en el polinomio  $(q, m)$  es una función de  $m$ , el grado de la ecuación, así como del número de componentes  $q$ . El número de términos para algunos valores de  $q$  son listados en la tabla 5.2.

Tabla 5.2. Número de términos en los polinomios canónicos para el número de componentes de 2 hasta  $q$

Número de Componentes $q$	Lineal	Cuadrático	Cúbico Especial	Cúbico Completo
2	2	3	-	-
3	3	6	7	10
4	4	10	14	20
5	5	15	25	35
6	6	21	41	56
7	7	28	63	84
8	8	36	92	120
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$q$	$q$	$q(q+1)/2$	$q(q^2+5)/6$	$q(q+1)(q+2)/6$

Los términos  $\beta_i x_i$  y  $\beta_{ij} x_i x_j$  en las ecuaciones polinomiales  $(q, 1)$  y  $(q, 2)$  tienen una simple interpretación. En el vértice correspondiente al componente puro  $i$ , por ejemplo, si con cualquiera de los modelos, ecuación (5.4) y ecuación (5.7), se considera  $x_i = 1$ , lo cual fuerza que  $x_j = 0$  para todo  $j \neq i$   $\eta = \beta_i$ . El parámetro  $\beta_i$  representa la respuesta esperada para la mezcla pura  $i$  y, gráficamente,  $\beta_i$  es la altura de la superficie por arriba del vértice del símplex donde  $x_i = 1$  para  $i=1, 2, \dots, q$  (como altura, las  $\beta_i$  son usadas usualmente en cantidades no negativas, y representan la altura extrapolada sobre una superficie considerada en lugar del cálculo discutido en el capítulo 4, o al menos que algunas condiciones sean impuestas sobre los valores de los  $i^s$ )

En el caso que se tenga una mezcla entre los componentes estrictamente lineal o aditiva entonces la superficie es desplazada por un plano sobre el símplex. Un ejemplo es presentado en la Gráfica 5.2 cuando el efecto del mezclado se considera inicial.

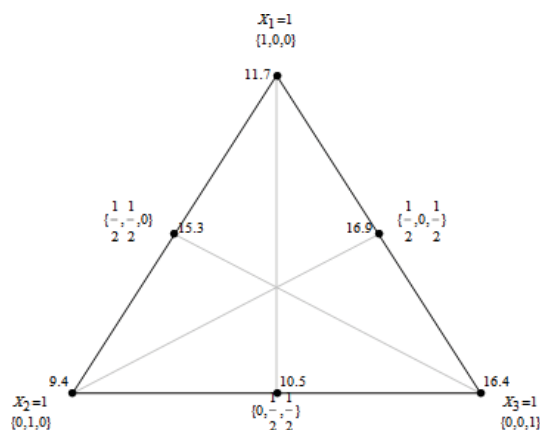
La respuesta a la mezcla binaria de componentes  $i$  y  $j$  en las proporciones  $x_i$  y  $x_j$ , dada por la ecuación (5.4), sería  $\eta = \beta_i x_i + \beta_j x_j$ , entonces los otros valores serán cero. Si por otro lado la respuesta verdadera de una mezcla binaria de componentes  $i$  y  $j$  es mejor representada por la ecuación (5.7) en la cual  $\eta = \beta_i x_i + \beta_j x_j + \beta_{ij} x_i x_j$ . Entonces una diferencia o exceso existe, se refiere a  $\beta_{ij} x_i x_j$  encontrado tomando la diferencia de los modelos (5.7) y (5.4).

Si los valores positivos de las tres respuestas son deseables y la cantidad  $\beta_{ij}$  es el término cuadrático o coeficiente de segundo orden del sinergismo binario, el opuesto (esto es cuando  $\beta_{ij}$  es negativo) es llamado antagonismo de la mezcla binaria. Si la fórmula cúbica (5.9) es la verdadera representación de la superficie, el exceso o sinergismo de la mezcla binaria incluye el término adicional  $\delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$  donde  $\delta_{ij}$  es el coeficiente cúbico del sinergismo binario.

Actualmente a lo largo de la recta  $(x_i - x_j)$  donde  $\delta_{ij}$  es el coeficiente cúbico, si  $\delta_{ij} \neq 0$  el término  $\delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$  toma tanto valores positivos como negativos, para detectar ambos efectos de mezcla sinérgico o antagónico entre los componentes  $i$  y  $j$ .



Gráfica 5.2. Plano muestral de tres componentes bajo la restricción  $\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$



El término  $\beta_{ij}^* x_i x_j x_k$  en la ecuación representa las mezclas ternarias ente los componentes  $i, j, k$  en el interior del triángulo. Otra forma de entender los términos separados de los modelos de primero y segundo orden en las ecuaciones (5.4) y (5.7) es considerar cómo los términos individuales contribuyen a la descripción de la superficie de la mezcla.

El término  $\beta_i x_i$  contribuye al modelo solamente cuando los valores de  $x_i > 0$  y entonces  $\beta_i$  representa la altura de la superficie por arriba del vértice  $x_i = 1$ , el término  $\beta_i x_i$  (es decir, el valor de  $\beta_i x_i = \beta_i$  es mayor cuando en  $x_i = 1$ ). El término  $\beta_{ij} x_i x_j$  en la ecuación (5.7) contribuye al modelo en cualquier caso cuando  $x_i > 0$  o  $x_j > 0$  sobre la recta que une los vértices correspondientes a  $i$  y  $j$ . El valor de los términos  $\beta_{ij} x_i x_j$  es máximo cuando  $\beta_{ij} > 0$ , en  $x_i = x_j = \frac{1}{2}$  donde ocurre que

$$\beta_{ij} x_i x_j = \beta_{ij} \frac{1}{4} \text{ (con el modelo cúbico especial note que el término } \beta_{123} x_1 x_2 x_3, \beta_{123} \left(\frac{1}{27}\right)$$

al modelo, el cuál es máximo en el centroide  $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_q) = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0, \dots, 0\right)$  o las caras de dos dimensiones del símplex que conecta los vértices:  $x_i = 1, x_j = 0, x_2 = 1, x_j = 0, x_1 = 1, x_j = 0$ ).

### 5.3.2 Polinomio de Scheffé

Los polinomios de Scheffé tienen una relación especial entre los diseños de malla con retículo simplex  $(q, m)$  y la ecuación polinomial  $(q, m)$ . Esta relación es una

correspondencia uno a uno entre el número de puntos en el diseño de experimento mezcla y el número de términos en el polinomio. Como un resultado de esta relación, los parámetros en el polinomio pueden ser expresados como funciones simples de las respuestas esperadas en los puntos de la malla con retículo simple  $(q, m)$ .

Para mostrar lo anterior, se considera la nomenclatura de la respuesta, que primero fue propuesta por Scheffé en su documento de 1958 sobre diseños mezcla.

El componente de la respuesta pura para  $i$  es denotada por  $\eta_i$ ; la respuesta binaria de mezclas con igual proporción (50%, 50%) de los componentes  $i$  y  $j$  es denotada por  $\eta_{ij}$ .

Los subíndices en una respuesta del diseño tienen las tres características siguientes:

1. El número de subíndices igual con denominador en la fracción usada en la mezcla (los dos subíndices en  $\eta_{ij}$  implican la respuesta para una mezcla donde las proporciones son  $\frac{1}{2}$ , esto es, donde  $x_i = \frac{1}{2}$  y  $x_j = \frac{1}{2}$ ).
2. El número distinto de números o letras indica cuántos componentes están presentes con proporciones diferentes de cero en la mezcla.
3. El número de veces de un número o letra que aparecen, indica la proporción relativa supuesta por la correspondiente composición en la mezcla.

Como un ejemplo, la respuesta  $\eta_{112}$  tiene tres subíndices, implica la composición en la cual  $\eta_{112}$  es una medida, consistente de fracciones de componentes de tamaño  $\frac{1}{3}$ . Los dos distintos números, 1 y 2 indican dos componentes separados que están presentes en proporciones distintas de cero. Entonces los subíndices consisten de unos y dos, las proporciones son  $\frac{2}{3}$  para la composición 1 y  $\frac{1}{3}$  para la composición 2.

Las ecuaciones para expresar los parámetros en los modelos de los polinomiales de Scheffé en términos de  $\eta_i$ ,  $\eta_{ij}$  y  $\eta_{ijk}$  están dados por la solución de  $\binom{q-1+m}{m}$  ecuaciones simultáneamente. Este número corresponde no solo al número de parámetros en la ecuación del polinomio  $(q, m)$  sino también al número de puntos del Lattice y además del número de respuestas esperadas  $\eta_i$  y  $\eta_{ij}$  medidas en los puntos del Lattice simple.

Tabla 5.3. Nomenclatura de la respuesta de Scheffé para tres y cuatro componentes para la mezcla

Respuesta	Composición de la mezcla						
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$
$\eta_1$	1	0	0	1	0	0	0
$\eta_2$	0	1	0	0	1	0	0
$\eta_{12}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
$\eta_{23}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
$\eta_{123}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0
$\eta_{112}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	0
$\eta_{233}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0
$\eta_{1112}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	0	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	0	0
$\eta_{1223}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	0
$\eta_{1144}$				$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{2}$
$\eta_{2344}$				0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$
$\eta_{1234}$				$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$

Se tiene

Si sustituimos

$\eta_i$

En  $x_i = 1, x_j = 0 \quad i, j = 1, 2, 3 \quad j \neq i$

$\eta_{ij}$

En  $x_i = \frac{1}{2}, x_j = \frac{1}{2} \quad i < j; k \neq i, j$

Las siguientes  $\binom{3-1+2}{2} = 6$  ecuaciones resultan:

$$\eta_1 = \beta_1; \eta_2 = \beta_2; \eta_3 = \beta_3$$

$$\eta_{12} = \beta_1 \left( \frac{1}{2} \right) + \beta_2 \left( \frac{1}{2} \right) + \beta_{12} \left( \frac{1}{4} \right)$$

$$\eta_{13} = \beta_1 \left( \frac{1}{2} \right) + \beta_3 \left( \frac{1}{2} \right) + \beta_{13} \left( \frac{1}{4} \right)$$

$$\eta_{23} = \beta_2 \left( \frac{1}{2} \right) + \beta_3 \left( \frac{1}{2} \right) + \beta_{23} \left( \frac{1}{4} \right)$$

Resolviendo las 6 ecuaciones simultáneamente, y si esto es posible, entonces el número de ecuaciones es igual al número de parámetros desconocidos, se encuentra que las fórmulas para los parámetros  $\beta_i$  y  $\beta_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2, 3, i < j$  son

$$\beta_1 = \eta_1, \beta_{12} = 4\eta_{12} - 2\eta_1 - 2\eta_2$$

$$\beta_2 = \eta_2, \beta_{13} = 4\eta_{13} - 2\eta_1 - 2\eta_3$$

$$\beta_3 = \eta_3, \beta_{23} = 4\eta_{23} - 2\eta_2 - 2\eta_3$$

El parámetro  $\beta_i$  representa la respuesta para el componente puro  $i$  y  $\beta_{ij}$  es un contraste que compara la respuesta en el punto medio de la recta que conecta los vértices de los componentes  $i$  y  $j$  con las respuestas en los vértices de los componentes  $i$  y  $j$ . De este modo el sexto término del polinomio de la ecuación 5.2, la suma  $\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$  representa el componente lineal, mientras los términos extras  $\beta_{ij} x_i x_j$ ,  $i < j$ , se dice representan medidas de las desviaciones del plano de la superficie de segundo orden resultando de las mezclas no aditivas de los componentes.

Las ecuaciones 5.3 son derivadas usando solamente tres componentes por razones de conveniencia. Es fácil desplegar las respuestas esperadas en los puntos del simplex(3,2).

Las proporciones planares y no planares de una superficie exhibiendo curvatura a lo largo con los términos en las tres componentes de un modelo cuadrático que describe esas proporciones de las superficies necesarias para obtener las fórmulas para  $\beta_i$  y  $\beta_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2$  y  $3, i < j$ . para el caso general de  $q$  componentes donde el modelo

de segundo orden de contiene  $\left(\frac{q(q+1)}{2}\right)$  términos y las respuestas esperadas están posicionadas a los puntos del diseño Lattice Simplex (q,2) las fórmulas para expresar los parámetros  $\beta_i$  y  $\beta_{ij}$  en términos de  $\eta_i$  y  $\eta_{ij}$  son idénticos a las ecuaciones 5.3. En otras palabras, para el caso general q, donde  $\eta_{ij} = 1, 2, \dots, q ; i < j$ .

$$\beta_i = \eta_i, \beta_{ij} = 4\eta_{ij} - 2(\eta_i + \eta_j)$$

El caso para mayor grado  $m > 2$ , las fórmulas pueden ser derivadas de manera similar al modelo de segundo orden.

La estimación de los parámetros en los polinomios (q, m) son expresables como una función simple de las respuestas esperadas en los puntos de la malla con retículo simplex (q, m) (MSR (q, m)).

Hasta este momento se han revisado experimentos mezcla para explorar la región simplex completamente. Se introdujeron los diseños Lattice Simplex y Lattice Simplex con centroide que permitan ajustar superficies a modelos en esas regiones. Pero en muchos experimentos mezcla hay restricciones sobre las proporciones de los componentes que limitan explorar la región simplex totalmente.

Frecuentemente esas restricciones toman la forma de restricciones acotadas por la izquierda (proporciones próximas a cero por abajo) o acotados por la derecha (proporciones próximas a 1 o por arriba) sobre las proporciones de los componentes.

Un paso especial de restricción es cuando la suma de las proporciones es menor que 1 o mayor de 1, esto es, la suma de las proporciones de los componentes debe ser diferente de uno. En el Apéndice V se presenta el análisis de un diseño mezcla con restricciones, donde la suma de proporciones es inferior a 1.

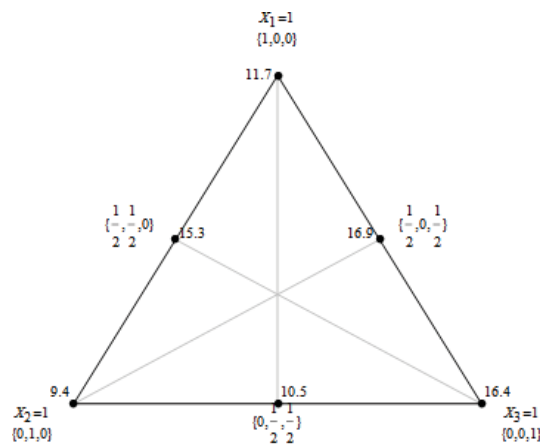
**Ejemplo 5.1.** Diseño de experimento mezcla, con tres componentes, para la producción de hilo con fibra trenzada

Tres componentes  $x_1$ (A:polietileno),  $x_2$ (B:poliestireno) y  $x_3$ (C:polipropileno) fueron mezclados resultando un hilo con material de fibra trenzada, el cual se utiliza para colgar artículos, para tapizar y para vestir (bisutería). El hilo de interés es aquel que se obtenía con mezclas unitarias (o puras) o con mezclas binarias de los tres componentes. La respuesta de interés es el estiramiento del hilo por kilogramos de fuerza aplicada. Se utilizó, un diseño de experimento para una malla de retículo simplex(3,2), con repeticiones para estudiar el estiramiento del hilo con un polinomio de grado dos. El diseño y las respuestas observadas se muestran en la Tabla 5.4 y en la Gráfica 5.3 se presenta la gráfica del diseño de experimento empleado.

Tabla 5.4. Valores de estiramiento observado, para la producción de hilo con fibra trenzada

Punto del diseño	% de los componentes			valores de estiramiento	
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	observado	promedio
1	1	0	0	11.0, 12.4	11.7
2	0.5	0.5	0	15.0, 14.8, 16.5	15.3
3	0	1	0	8.8, 10.0	9.4
4	0	0.5	0.5	10.0, 9.7, 11.8	10.5
5	0	0	1	16.8, 16.0	16.4
6	0.5	0	0.5	17.7, 16.4, 16.6	16.9

Gráfica 5.3. Promedios del valor de estiramiento para la producción de hilo con fibra trenzada, de una malla con retículo simple (3,2), con repeticiones



Note que las repeticiones de los puntos del diseño son una para las mezclas puras y dos para las mezclas binarias. La desviación estándar del error puede ser estimada considerando las observaciones repetidas para poder realizar la prueba sobre la falta de ajuste para un polinomio canónico de grado uno.

En el ANDVA de la Tabla 5.5 se puede apreciar que el polinomio cuadrático es quien mejor ajusta los datos pues contribuye mayoritariamente como puede verse, además de acuerdo con la Tabla 5.6, que indica de acuerdo al coeficiente de determinación, que la contribución en la suma cuadrados para la descripción de la respuesta de los términos cuadráticos es más del 50%.

Tabla 5.5. Tabla ANDVA de los posibles polinomios canónicos, para la producción de hilo con fibra trenzada

<i>Fuente</i>	<i>Suma de Cuadrados</i>	<i>GL</i>	<i>Cuadrados Medios</i>	<i>Fc</i>	<i>NSD</i>
Media	2761.	1	2761.		
Lineal	56.74	2	28.37	4.24	0.0405
Cuadrático	73.01	3	24.34	29.98	0.0001<
Error	7.307	9	0.8119		
Total	2898.	15			

Tabla 5.6. Coeficientes de determinación, para posibles polinomios canónicos la producción de hilo con fibra trenzada

<i>Modelo</i>	<i>Error</i>	<i>R Cuadrático</i>	<i>R Cuadrático Ajustado</i>
Lineal	2.587	41.40	31.63
Cuadrático	0.901	94.67	91.71

En la Tabla 5.6 queda establecida que la contribución del polinomio canónico cuadrático es de más del 90%.

Tabla 5.7. Tabla ANDVA del polinomio canónico cuadrático la producción de hilo con fibra trenzada

<i>Fuente</i>	<i>Suma de Cuadrados</i>	<i>GL</i>	<i>Cuadrados Medios</i>	<i>Fc</i>	<i>NSD</i>
Modelo Cuadrático	129.7	5	25.95	31.96	0.0000
Error total	7.307	9	0.8119		
Total (corr.)	137.1	14			

En la Tabla 5.7 con la estimación de los coeficientes del polinomio canónico cuadrático permite estimar la ecuación del modelo ajustado donde los valores de los componentes son especificados en pseudo componentes.

$$\text{Estiramiento} = 11.7 \cdot A + 9.4 \cdot B + 16.4 \cdot C + 19.53 \cdot A \cdot B + 11.4 \cdot A \cdot C - 9.6 \cdot B \cdot C$$

Tabla 5.8. Estimación de los coeficientes del polinomio canónico cuadrático la producción de hilo con fibra trenzada

<i>Parámetro</i>	<i>Estimado</i>	<i>Error estándar</i>	<i>Tc</i>	<i>NSD</i>
A:A	11.7	0.6371		
B:B	9.4	0.6371		
C:C	16.4	0.6371		
AB	19.53	2.753	7.096	0.0001
AC	11.4	2.753	4.141	0.0025
BC	-9.6	2.753	-3.488	0.0069

Como  $b_3 > b_1 > b_2$ , se puede concluir que el polipropileno es quien produce hilo con mayor alargamiento. Por otro lado como  $b_{12}$  y  $b_{13}$  son positivos, las mezclas con componentes 1 y 2 o componentes 1 y 3 producen valores mayores de alargamiento, uno más grande que el otro, para la respuesta, que los que pueden ser esperados en promedio en las mezclas puras. Esto es un ejemplo de efecto de sinergismo en la mezclas. Por otro lado los componentes 2 y 3 tienen un efecto antagónico en las mezclas porque  $b_{23}$  es negativo, es decir, mientras uno aumenta la respuesta disminuye y cuando el otro aumenta la respuesta aumenta.

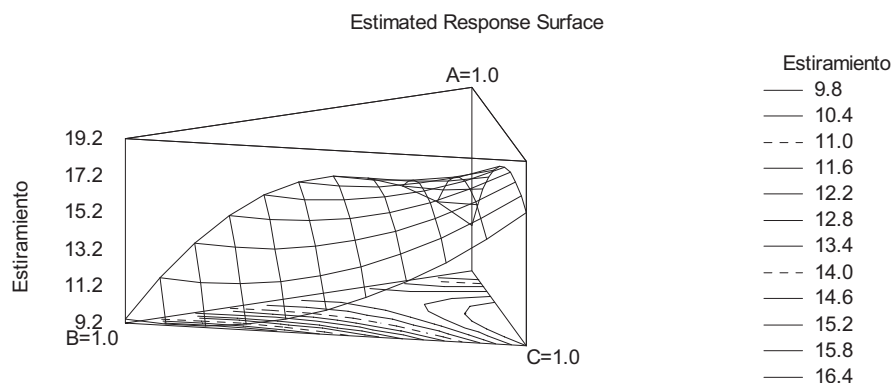
Lo que a continuación sigue, es evaluar la función tanto de manera gráfica como numérica con el siguiente polinomio canónico cuadrático al considerar la Tabla 5.8.

$$\hat{y} = 11.7 * x_1 + 9.4 * x_2 + 16.4 * x_3 + 19 * x_1 * x_2 + 11.4 * x_1 * x_3 - 9.6 * x_2 * x_3$$

La Gráfica 5.4 de superficie estimada con contornos de superficie estimada son de gran utilidad para interpretar los resultados, por ejemplo en la de contornos, la máxima elasticidad se obtiene para la mezcla del componente 1 y 3, con 80% para el componente 3 y 20% para el componente 1.

En cuanto a los resultados de interés, se consideran los distintos estiramientos o alargamientos que puedan requerirse de acuerdo al artículo en consideración, para los cuales se les deben estimar las proporciones de los componentes que los producen. Debe considerarse que este diseño de experimento en la industria se llevó a cabo, aunque es efectivo se considera demasiado caro.

Gráfica 5.4. Superficie de Respuesta estimada para la producción de hilo con fibra trenzada





### Ejemplo 5.2. Experimento de mezclas para la obtención de gasolina

El octanaje de la gasolina determina su calidad, la cual depende de la proporción de varios componentes de petróleo mezclados para producir dicho combustible. El objetivo de la mayor parte de los estudios de mezclas de gasolina, es desarrollar un modelo de mezclas lineal para determinar la mezcla de componentes de gasolina que sea la más redituable. Los coeficientes en el modelo lineal de mezclas, conocidos como valores de fusión, describen el comportamiento del mezclado de componentes del combustible dado. Sin embargo, la composición de la mezcla depende, entre otros factores de la calidad de los componentes. Así es que hay que estar atentos para saber si la linealidad de los componentes de la mezcla se pierde, para ello deben considerarse modelos de interacción de dos componentes, como un modelo cuadrático.

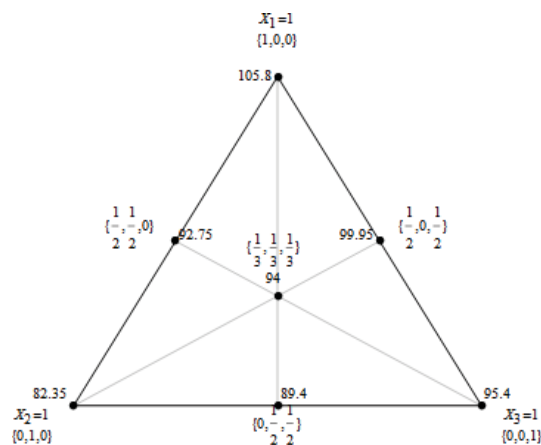
Tabla 5.9. Tasas de octano en el experimento de mezclas de gasolina

Componentes			Observaciones	promedios
$x_1$	$x_2$	$x_3$	$y_{ij}$	$\bar{y}_i$
1	0	0	106.6, 105.0	105.8
0	1	0	83.3, 83.4	82.35
0	0	1	99.4, 91.4	95.40
½	½	0	94.1, 91.4	92.75
½	0	½	101.9, 98.0	99.95
0	½	½	92.3, 86.5	89.40
1/3	1/3	1/3	96.3, 91.7	94.00

El análisis de un experimento de mezclas, en este caso, se explica considerando mezclas para obtener gasolina.

Para estudiar un modelo de interacción de dos componentes, se diseñó un experimento para estimar un polinomio cuadrático canónico, para evaluar el efecto de tres componentes sobre la tasa de octano de la gasolina, los componentes son: alquilate (A,  $x_1$ ), corrida ligera (B,  $x_2$ ) y reformado (C,  $x_3$ ). Se usó una malla con retículo simplex[3,2] con centroide de siete mezclas y en cada una se determinó la tasa de octano considerando una repetición. Las tasas de octano se muestran en la Tabla 5.9 y en la Gráfica 5.5 se muestra el diseño de experimento.

Gráfica 5.5. Promedios de tasas de octano el experimento de mezclas de gasolina con una repetición, de una malla con retículo simplex (3,2), con centroide



En la Tabla 5.10 se observa que la tasa de octano para las mezclas se puede ajustar como un polinomio canónico de grado uno, pues como se observa en la Tabla 5.11 la falta de ajuste para este modelo no es significativa.

Tabla 5.10. Tabla ANDVA de los posibles polinomios canónicos para el experimento de mezclas de gasolina

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
Media	1.247E5	1	1.247E5		
Lineal	618.3	2	309.2	44.12	0.0000
Cuadrático	5.072	3	1.691	0.19	0.9017
Cúbico especial	0.06928	1	0.06928	0.01	0.9369
Error	71.94	7	10.28		
Total	1.254E5	14			

Al realizar el análisis sobre el polinomio canónico lineal se obtiene que este es quien mejor ajusta la tasa de octano.

Tabla 5.11. Tabla ANDVA falta de ajuste para el polinomio canónico lineal, para el experimento de mezclas de gasolina

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
Modelo lineal	618.4	2	309.2	30.09	0.0004
Falta de ajuste	5.126	4	1.281	0.12	0.9689
Error puro	71.93	7	10.28		
Total (corr.)	695.4	13			

Para el octanaje de gasolina se tiene el siguiente modelo ajustado a partir de la Tabla 5.12:

$$\text{Tasas} = 105.0 \cdot A + 82.81 \cdot B + 95.33 \cdot C$$

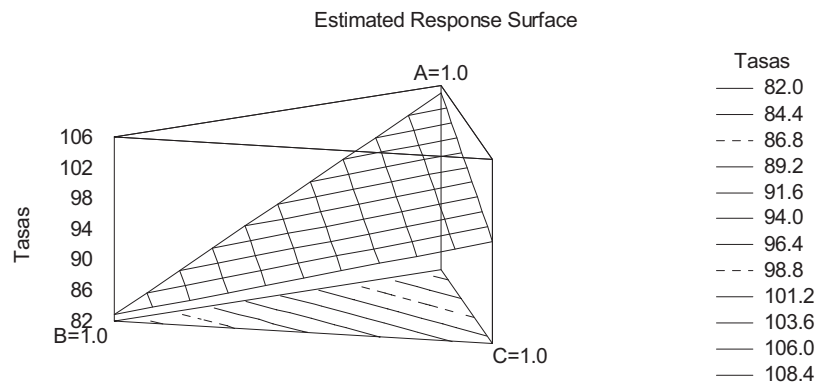
Tabla 5.12. Parámetros para el polinomio canónico lineal para el experimento de mezclas de gasolina

Parámetro	Estimado	Error estándar	Tc	NSD
A:A	105.0	1.539		
B:B	82.81	1.539		
C:C	95.33	1.539		

Con este modelo se obtienen la gráfica de superficie de respuesta con contornos, Gráfica 5.6 donde se optimiza la respuesta.

En la Gráfica 5.6 se observa que las respuestas mayores de la tasa de octano se obtienen con las mezclas puras, siendo la mayor de 105.0 con alquilate, de 95.33 con reformada y finalmente 82.81 con la corrida ligera.

Gráfica 5.6. Superficie de Respuesta estimada para el experimento de mezclas de gasolina



En los Apéndices IV y V se puede encontrar el análisis de dos modelos, un Diseño Mezcla con retículo simplex aumentado y un Diseño Mezcla con restricciones.

## 5.4. Mejora continua utilizando los Diseños Mezcla

Como se mencionó al inicio del capítulo, las industrias están implementando estrategias de mejora continua. Algunas de estas estrategias se basan en el Ciclo de Deming, originalmente ideado por Walter Shewhart. El ciclo conocido como PDCA es una metodología de gestión ideado en cuatro etapas:

**Plan (Planear).**- En esta etapa se planifica los cambios y lo que se pretende alcanzar. Se establece una estrategia, se procede a valorar los pasos a seguir y culmina con la planificación de lo que se debe utilizar para conseguir los fines que se estipulan en este punto.

**Do (Hacer).**- Siguiendo lo estipulado en el punto anterior, se procede a seguir los pasos indicados en el mismo orden y proporción en el que se encuentran indicados en la fase de planificación.

**Check (Verificar):** En este paso se debe verificar que se ha actuado de acuerdo a lo planeado, así como que los efectos del plan son los correctos y se corresponden a lo que inicialmente se diseñó.

**Act (Actuar):** A partir de los resultados conseguidos en la fase anterior se procede a recopilar lo aprendido y a ponerlo en marcha. También suelen aparecer recomendaciones y observaciones que suelen servir para volver al paso inicial de Planificar y así el círculo nunca dejará de fluir.

Uno de los errores que sucedían en el pasado, y que se deben evitar a toda costa, tiene que ver al momento de reproducir un determinado producto. Las industrias repiten la elaboración de la mezcla siguiendo las instrucciones de la receta al pie de la letra, sin embargo al no integrar las características de los elementos que conforman la mezcla a la misma, se tiende a obtener a la larga resultados pobres en cuanto a la calidad del producto.

Al aplicar metodologías de mejora continua que implican controlar, medir, verificar y estudiar con detenimiento los componentes, se puede reducir costos, tanto en términos monetarios como en energía de producción, humana y maquinaria.

Un ejemplo de esto es la fabricación de vidrio. El proceso involucra la fundición de diferentes tipos de arena. La fundición de estos elementos requiere alcanzar temperaturas cercanas o superiores a los 2300°C. Sin embargo al estudiar las propiedades físicas de otros materiales, se llegó a la conclusión de agregar Carbonato Sódico a la mezcla antes de fundir, reduciendo así la temperatura de fundición a 1700°C.

Por lo tanto si el diseño de experimentos con mezclas es visto como un proceso, entonces la elaboración de modelos, así como la integración al diseño de las características propias de los materiales a usar en la mezcla, puede abordarse siguiendo el ciclo PDCA.



## Conclusiones

1. Como se mencionó los Modelos de Optimización de Superficie de Respuesta son ampliamente utilizados en las áreas de la industria, así como en laboratorios de Investigación Científica.
2. La experimentación secuencial en la MSR se popularizó cuando se desarrollaron los sistemas cerrados, controlados o con condiciones de laboratorio para facilitar la optimización, así como el uso frecuente del concepto de ortogonalidad y el uso de diseño de factoriales con una repetición y fraccionales, para poder obtener estimaciones precisas de los coeficientes de regresión de una manera económica, haciendo uso de otros conceptos tales como puntos centrales o basales así como puntos axiales o estrella.
3. En los Diseños Experimentales con arreglo de tratamientos Mezcla, a diferencia de los Diseños Experimentales con arreglo de tratamientos Factorial en MSR, la metodología de experimentación secuencial no se usa totalmente.
4. La MSR es posible realizarla considerando restricciones en las cantidades de las condiciones de proceso que pueden ser: primarias, de proceso, de aplicación y de escalamiento. Véase ejemplo "con restricciones".
5. Los óptimos económicos con la MSR, se refieren a la minimización del costo del punto óptimo del proceso, mediante las Funciones de Producción. Este procedimiento ha sido de gran uso al considerar los métodos de operación evolutiva (OPEV) en los procesos de producción, cuando el proceso se realiza en la línea de producción.
6. Una temática muy utilizada en el ámbito de optimización es lo que ha recibido el nombre de Funciones de Producción. La función objetivo desconocida, que se aproxima con polinomios ortogonales de primer y segundo orden se determina con la MSR y entonces el proceso de optimización es más o menos estándar dentro del área de programación lineal. En OPEV se utilizan también las técnicas de programación Lineal y No Lineal para optimizar los procesos, donde las restricciones son regularmente de tipo económico, es decir, se involucran los costos de cambiar los niveles de los factores de estudio.

7. Cuando se planean investigaciones experimentales con el enfoque secuencial, la sensación que se tiene es que corresponde al tópico de Diseño de Experimentos. Por otro lado si se está en el análisis de la información se tiene la sensación de que el tópico en cuestión se refiere al de Modelos de Regresión, sin embargo los dos tópicos son de fundamental importancia en cada momento y se encuentran trabajando simultáneamente en el proceso de optimización.
8. Diseño de Experimentos Mixto. En algunos problemas de mezclas además del problema de estudiar el efecto de los componentes de la mezcla es de interés investigar las variables de proceso que no corresponden a proporciones de los componentes de las mezclas. A un experimento como el anterior se le llama Mixto y permite estudiar los efectos combinados de variables. Por ejemplo, si se tienen tres componentes de mezcla y dos variables de proceso de un Diseño Simplex con Centroide, en cada una de las cuatro condiciones de proceso de un Factorial  $2^2$ , entonces se tendrían 28 tratamientos que se corren en orden aleatorio. En este caso se podrían probar las siete mezclas de proceso y componentes de una mezcla sobre una determinada respuesta. Los Diseños Experimentales Mixtos comúnmente se utilizan para probar los diferentes tratamientos de un Diseño Mezcla en cada una de las combinaciones de los factores del proceso. Al lector interesado en este tema se le recomienda consultar el libro de Cornell (2002).
9. El Método de optimización de Taguchi es actualmente muy utilizado en experimentación secuencial, para obtener procesos robustos en Ingeniería, siendo dicho método una aportación reciente a los métodos de optimización.

# Apéndices





## Apéndice I. Tipificación de grupos de Factores de Proceso de Manufactura o Producción

Lo que se ha llamado variable independiente, en un Modelo de Regresión, ahora se llamará variable o condición de proceso o factor predictor. Esto se refiere a condiciones que están en posibilidades de ajustarse a los valores o niveles que deseamos probar.

En contraste se tienen las variables dependientes, que corresponden, por ejemplo, al rendimiento de un proceso productivo de manufactura como el del problema planteado en el Capítulo 3. Como sinónimo se usará respuesta bajo estudio y se refiere a aquellos resultados, por medio de los cuales, se juzga el efecto de las variables de proceso.

Los factores predictores o condiciones de proceso pueden ser de 5 tipos:

- I. **Factores primarios:** Son las propiedades y condiciones de las materias primas que entran en reacción. Por ejemplo: la pureza de un reactivo.
- II. **Factores de receta:** Son las cantidades de las materias primas que entran en reacción. Por ejemplo: la concentración del reactivo.
- III. **Factores de proceso:** Son las condiciones termodinámicas y de equipos en que las materias primas entrarán en reacción. Incluye estados atmosféricos, operadores, fechas, etc. Por ejemplo: la temperatura y el tiempo de reacción, en el problema del Capítulo 5.
- IV. **Factores de aplicación:** Son los estados de los equipos terminadores del producto. Por ejemplo: condiciones de extrusión de un cierto plástico.
- V. **Factores de escalación:** Son aquellas condiciones capaces de afectar la respuesta en función del tamaño del lote. Por ejemplo: en ciertos problemas de polimerización, la distribución de peso molecular del producto se ve afectada según la geometría del reactor. Este tipo de factores hasta hoy ha recibido poca atención en el diseño de experimentos.



## Apéndice II. Programa de cómputo

En este apartado se comentará la cobertura o aplicabilidad que tiene cada uno de los tres software o programas de cómputo estadístico, la forma de procesamiento, así como su rapidez y buena presentación.

### **1. Paquete estadístico StatGraphics Centurion XV.**

#### **1.1 Cobertura o aplicabilidad.**

Para la optimización de procesos, las metodologías por procesar están documentadas y se tienen los procedimientos específicos para llevarlos a cabo de manera automática con la computadora. Vale la pena comentar que este paquete tiene aplicación sobre múltiples metodologías en estadística, no solo para la optimización de la(s) respuestas, pues la cobertura es amplia para procesar métodos estadísticos.

#### **1.2 Forma de procesamiento.**

El procedimiento requiere del conocimiento de ciertas rutinas para realizar los análisis en cuestión, el manejo es mediante el uso de ventanas donde se llena la información solicitada de acuerdo al procedimiento en uso. Cada ventana o conjunto de estas, corresponde a los procedimientos estadísticos que se expresan en módulos para obtener los resultados que se presentan en tablas y gráficas. Características sobresalientes: La ayuda contiene diversos documentos sobre el área de aplicación de interés, donde se analizan ejemplos y se encuentran referencias bibliográficas.

El módulo que se usa para optimización es *improve*, el cual tiene como apartados la realización del Análisis de Varianza considerando el estudio de observaciones por un lado y por otro los modelos de Diseños de Experimentos y aquí el uso de otras rutinas como gráficas, así como un reporte tabular donde se refiere al punto óptimo de la(s) respuesta(s) y las coordenadas donde se obtiene.

1. De acuerdo al plan del Diseño de Experimento dando la estructura de datos del experimento (en solo un paso de acuerdo al diseño).

2. Cuando no es explícita y/o se reconoce la información del diseño de experimento, se realiza en dos pasos. Cuando no se da explícitamente la estructura del diseño, sino solo el archivo de datos, en un archivo se dan los datos y luego se convierten los datos en datos experimentales de acuerdo a la estructura mediante el comando creación de archivo de diseño de experimentos.

### **1.3 Buena presentación.**

En el caso de la buena obtención de reportes, requiere de destreza ya que la realización de calidad y destreza es directa.

## Apéndice III. Ejemplo de un Diseño Compuesto Central rotatable con tres factores y una respuesta

### Ejemplo AIII.1. Maximización de la resistencia de bolsas para envoltura de pan

Se quería encontrar la mejor combinación de temperatura de sellado X1, temperatura de barra de enfriamiento X2 y porcentaje de polietileno agregado X3, para alcanzar la máxima resistencia en gramos por pulgada. Para ello se utilizó el Diseño Central compuesto rotatable, con seis puntos centrales.

Tabla AIII.1 Datos del diseño de experimentos central compuesto rotatable, con cinco puntos centrales, para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan

Factor 1	Factor 2	Factor 3	Response 1
A:Temp d sellado	B:Temp d enfriado	C:Polietileno	Resistencia
			%grms/pul
225	46	0.5	6.6
285	46	0.5	6.9
225	64	0.5	7.9
285	64	0.5	6.1
225	46	1.7	9.2
285	46	1.7	6.8
225	64	1.7	10.4
285	64	1.7	7.3
204.5	55	1.1	9.8
305.5	55	1.1	5
255	39.9	1.1	6.9
255	70.1	1.1	6.3
255	55	0.09	4
255	55	2.11	8.6
255	55	1.1	10.1
255	55	1.1	9.9
255	55	1.1	12.2
255	55	1.1	9.7
255	55	1.1	9.7
255	55	1.1	9.6

El análisis se realiza de forma automática en StatGraphics. Para lograrlo es necesario crear el diseño en la rutina de Creación de Diseño que el programa trae. Durante la creación del diseño es importante seleccionar en el programa las opciones

adecuadas para dar de alta un Diseño Compuesto Central Rotable con 6 repeticiones al centro. A continuación se presenta el esquema del modelo Diseño Compuesto Central que se usará para el análisis de los datos en StatGraphics.

Gráfica AIII.1. Diseño de experimentos central compuesto rotatable con seis puntos centrales para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan

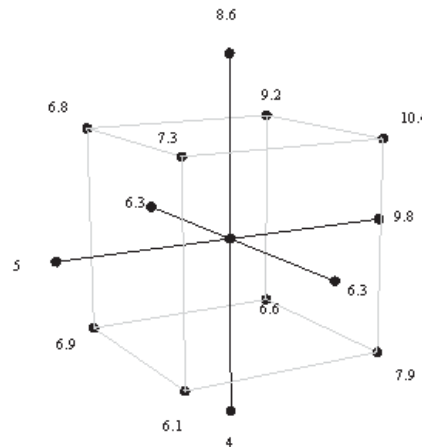


Tabla AIII.2. Tabla ANDVA para el estudio de los factores, sus interacciones y los efectos de segundo orden, así como el análisis de falta de ajuste para el modelo polinomial de segundo orden, para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
A:Temperatura de Sellado	16.64	1	16.64	14.02	0.0038
B:Temperatura de Enfriado	0.1045	1	0.1045	0.09	0.7728
C:Polietileno	14.23	1	14.23	11.99	0.0061
AA	8.311	1	8.311	7.00	0.0245
AB	0.98	1	0.98	0.83	0.3849
AC	2.0	1	2.0	1.69	0.2234
BB	15.65	1	15.65	13.19	0.0046
BC	0.18	1	0.18	0.15	0.7051
CC	19.0	1	19.0	16.01	0.0025
Error total	11.87	10	1.187		
Total (corr.)	82.17	19			

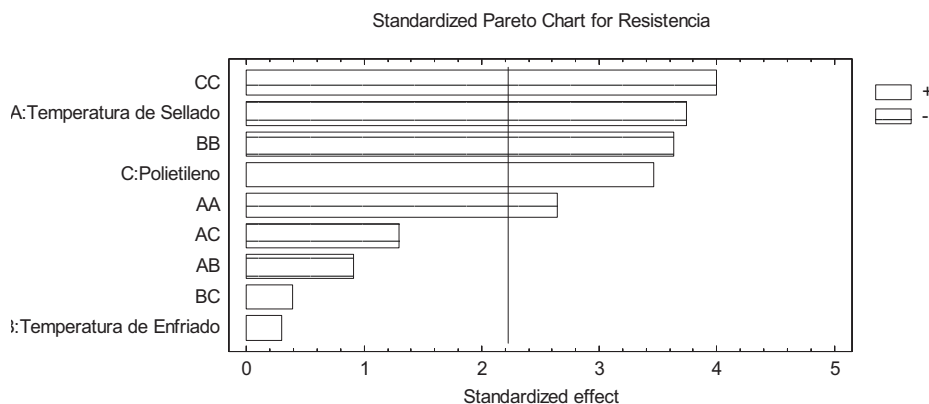
La tabla siguiente contempla los efectos de cada elemento, su estimación, desviación estándar y factor de inflación de varianza. Los efectos se presentan en la Gráfica III.2 en un gráfico de Pareto para su análisis.

Tabla AIII.3. Tabla de efectos para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan

Efecto	Estimado	Error estándar	F.I.V.
promedio	10.16	0.4443	
A:Temperatura de Sellado	-2.207	0.5894	1.0
B:Temperatura de Enfriado	0.1751	0.5902	1.0
C:Polietileno	2.04	0.5894	1.0
AA	-1.517	0.5731	1.018
AB	-0.7	0.7703	1.0
AC	-1.0	0.7703	1.0
BB	-2.092	0.5761	1.018
BC	0.3	0.7703	1.0
CC	-2.293	0.5731	1.018

Gráfico de Pareto. El gráfico muestra los efectos que podrían ser significativos. Por omisión StatGraphics usa un  $\alpha$  del 5%. Las barras que sobrepasan la línea vertical son significativas. En este caso, son los efectos de BB, CC, A, C y AA. En la Tabla III.1 se puede consultar las significancia de estos términos.

Gráfica AIII.2. Gráfico de Pareto para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan



El Modelo Ajustado corresponde a los coeficientes estimados de la siguiente tabla. Por la Tabla ANDVA III.1 se sabe que solo los efectos BB, CC, A, C y AA son significativos. No obstante dado que la hipótesis estadística implica que los efectos cuya valor hipotético nulo no se rechaza, no deberían generar cambios significativos en la respuesta. De tal forma que la ecuación ajustada se puede crear considerando todos los coeficientes que se presentan en la tabla III.2



Tabla AIII.4 Tabla de coeficientes para el modelo polinomial de segundo orden, para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan

<i>Coeficiente</i>	<i>Estimado</i>
constante	-104.9
A:Temperatura de Sellado	0.4948
B:Temperatura de Enfriado	1.73
C:Polietileno	14.26
AA	-0.0008425
AB	-0.001296
AC	-0.02778
BB	-0.01291
BC	0.02778
CC	-3.185

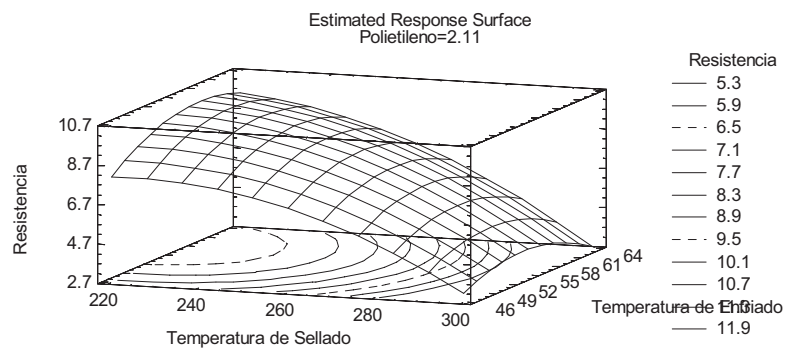
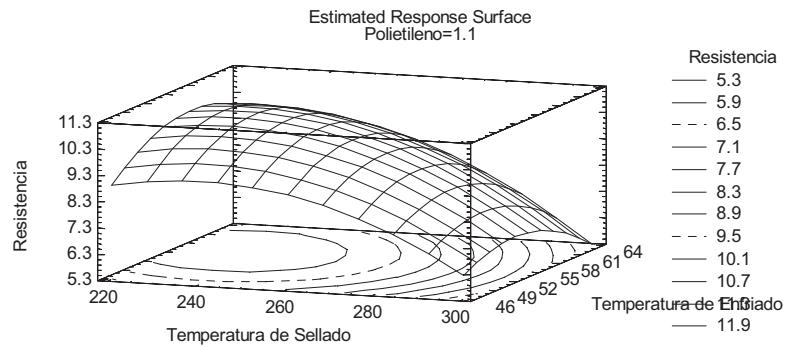
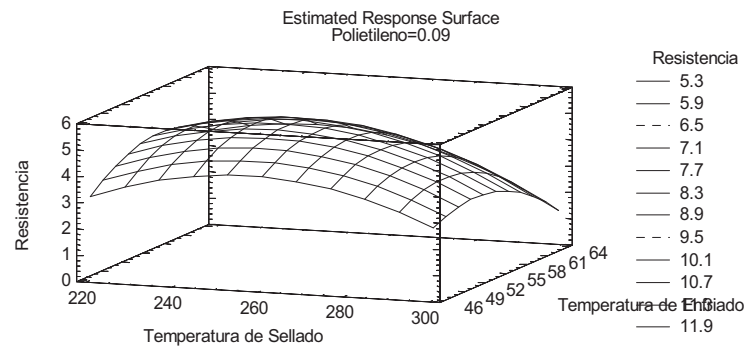
El modelo ajustado es el siguiente:

$$\text{Resistencia} = -104.9 + 0.4948 \cdot \text{Temperatura de Sellado} + 1.73 \cdot \text{Temperatura de Enfriado} + 14.26 \cdot \text{Polietileno} - 0.0008425 \cdot \text{Temperatura de Sellado}^2 - 0.001296 \cdot \text{Temperatura de Sellado} \cdot \text{Temperatura de Enfriado} - 0.02778 \cdot \text{Temperatura de Sellado} \cdot \text{Polietileno} - 0.01291 \cdot \text{Temperatura de Enfriado}^2 + 0.02778 \cdot \text{Temperatura de Enfriado} \cdot \text{Polietileno} - 3.185 \cdot \text{Polietileno}^2$$

Con este modelo se obtiene la siguiente gráfica de superficie de respuesta, gráfica AIII.3

En la gráfica se puede ver el resultado final del análisis cuando se grafica los factores de temperatura. Se puede observar que hay un punto máximo en la gráfica. Los contornos de la base de la gráfica son de ayuda para ubicar el máximo visualmente. Se presentan tres gráficas para diferentes valores de polietileno debido a las complicaciones de graficar cuatro variables.

Gráfica All.3. Superficie de Respuesta estimada para maximizar la resistencia de bolsas para envoltura de pan, con tres niveles de Polietileno



Para encontrar el punto optimo, basta con encontrar el máximo de la función.

Función a derivar:

$$F = -104.9 + 0.4948x - 0.0008x^2 + 1.73y - 0.0129y^2 + 14.26z - 3.185z^2 - 0.0012xy - 0.02778xz + 0.02778yz$$

Dónde

X: Temperatura de Sellado

Y: Temperatura de Enfriado

Z: Polietileno

Calculamos las derivadas parciales de la función:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 0.4948 - 0.00168x - 0.001296y - 0.02778z = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = 1.73 - 0.001296x - 0.02582y + 0.02778z = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} = 14.26 - 0.02778x + 0.02778y - 6.37z = 0$$

Así tenemos un sistema de ecuaciones a resolver. No es necesario calcular el Hessiano del sistema, pues visualmente ya sabemos que el valor a buscar es un máximo en esta función.

$$\begin{cases} 0.4948 - 0.00168x - 0.001296y - 0.02778z = 0 \\ 1.73 - 0.001296x - 0.02582y + 0.02778z = 0 \\ 14.26 - 0.02778x + 0.02778y - 6.37z = 0 \end{cases}$$

La solución del sistema corresponde a los valores de Temperatura de Sellado igual a 224.663, la Temperatura de Enfriado igual a 57.3492 y el Polietileno igual a 1.50895. Al evaluar la función en estos valores se obtiene que el valor máximo alcanzado es igual a 11.0474 g/in<sup>2</sup>.

## Apéndice IV. Retículo Simplex aumentado con tres componentes y una respuesta, en un ejemplo con dos respuestas

**Ejemplo AIV.1.** Producción para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales

En la producción de queso utilizando grasas vegetales, cada tratamiento consistió en elaborar tres kilos de análogo de queso, donde la porción de grasa contribuye con 765.2 g. La fracción grasa que es objeto de investigación, estuvo integrada por distintas proporciones: grasa butírica ( $x_1$ ), grasa de soya ( $x_2$ ) y aceite de soya ( $x_3$ ). Se midieron diversas variables de respuesta, entre ellas dureza ( $y_1$ , kg) y elasticidad ( $y_2$ , cm). En particular el diseño de experimento mezcla fue una malla con retículo simplex[3,2] aumentado, los resultados promedio con dos repeticiones se muestran en la Tabla AIV.1.

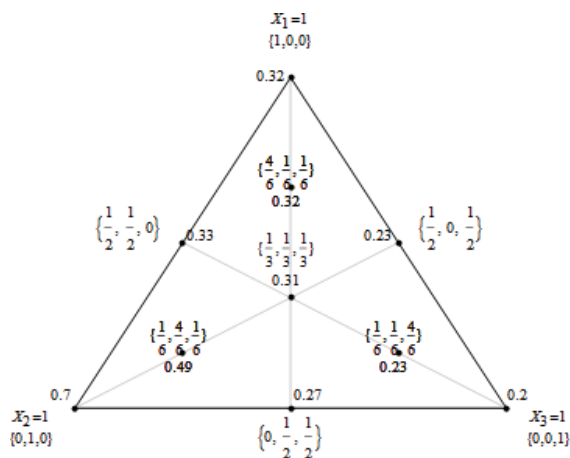
Un diseño del experimento para una malla con retículo simplex (3,2), aumentado fue usado para estudiar el producto. El diseño y las respuestas observadas se muestran en la Tabla AIV.1.

Tabla AIV.1. Mezclas y resultados para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$y_1$	$y_2$
1	0	0	0.32	0.97
0	1	0	0.70	0.83
0	0	1	0.20	0.87
0.5	0.5	0	0.33	0.70
0.5	0	0.5	0.23	0.82
0	0.5	0.5	0.27	0.74
0.333	0.333	0.333	0.31	0.78
0.667	0.167	0.167	0.32	0.76
0.167	0.667	0.167	0.49	0.73
0.167	0.167	0.667	0.23	0.82

El objetivo del experimento, era cuantificar la influencia que tienen los diferentes tipos de grasas sobre las respuestas, tanto en forma individual como en acción conjunta. Se trata de modelar las respuestas para predecirlas en cualquier formulación posible, y utilizar los modelos con el propósito de encontrar la composición de la mezcla que proporcione los mejores resultados o resultados óptimos.

Gráfica AIV.1. Región del experimento de Mezclas y resultados de  $y_1$  para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales



El análisis estadístico se realizó en dos partes, primero se ajustó y seleccionó el modelo adecuado, para después estudiar gráfica y numéricamente la influencia que tienen los diferentes tipos de grasas sobre las respuestas, tanto en forma individual como en acción conjunta. Para la primera parte, para determinar el mejor modelo que ajusten los datos obtenidos en el experimento con mezclas, se consideran las seis siguientes Tablas.

Tabla AIV.2. Tabla ANOVA de los posibles modelos de polinomios canónicos para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
Media	1.156	1	1.156		
Lineal	0.1635	2	0.08174	14.63	0.0032
Cuadrático	0.02962	3	0.009875	4.16	0.1011
Cúbico especial	0.006432	1	0.006432	6.30	0.0870
Error	0.003065	3	0.001022		
Total	1.359	10			

Tabla AIV.3. Coeficientes de determinación para posibles modelos de polinomios canónicos para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales

Modelo	Error estándar	R cuadrática	R cuadrática ajustada
Lineal	0.07476	80.69	75.17
Cuadrático	0.04873	95.31	89.45
Cúbico Especial	0.03197	98.49	95.46

En la Tabla AIV.2 se presentan los posibles modelos que pudieran ajustar los datos, de acuerdo al experimento de mezclas referida a una malla con retículo simplex (3,2), aumentado utilizado. Se puede observar que las posibles elecciones pueden ser el modelo que solo contiene la media cuando no hay influencia de ninguno de los componentes, y cuando sí hay influencia, esta pudiera solo ser lineal sobre  $x_i$ , cuadrática que incluye la influencia de interacciones  $x_i * x_j$  y el cúbico especial que agrega la influencia de las interacciones  $x_1 * x_2 * x_3$ .

Al considerar un nivel de significancia de 5% solo el modelo lineal es significativo, pero los otros dos modelos son significativos al 10% condicionalmente al modelo que arriba le antecede. Para determinar la elección del modelo se considera la Tabla AIV.3, donde se considera el coeficiente de determinación de los modelos, porcentaje de la variación de la dureza, que es explicada por los correspondientes modelos. Los modelos cuadráticos y cúbico especial podrían ser términos alternativos para el análisis, los términos cuadráticos parecen ser lo mejor pues aumentan el coeficiente de determinación en aproximadamente 15% en relación al modelo lineal, mientras los términos del cúbico especial solo lo aumenta en 3% aproximadamente en relación al modelo cuadrático. Dado que el polinomio canónico cuadrático ajusta bien el modelo entonces se hace el ANDVA solo para dicho polinomio y los resultados se presentan en la Tabla AIV.4

Tabla AIV.4. Análisis del modelo polinómico canónico cuadrático para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales

<i>Fuente</i>	<i>Suma de Cuadrados</i>	<i>GL</i>	<i>Cuadrados Medios</i>	<i>Fc</i>	<i>NSD</i>
Modelo cuadrático	0.1931	5	0.03862	16.27	0.0092
Error total	0.009498	4	0.002374		
Total (corr.)	0.2026	9			

Tabla AIV.5. Estimación de los parámetros del modelo canónico cuadrático para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales

<i>Parámetro</i>	<i>Estimado</i>	<i>Error estándar</i>	<i>Tc</i>	<i>NSD</i>
A:X1	0.3175	0.047		
B:X2	0.7057	0.047		
C:X3	0.1893	0.047		
AB	-0.5336	0.2166	-2.464	0.0694
AC	0.03364	0.2166	0.1553	0.8841
BC	-0.55	0.2166	-2.539	0.0640

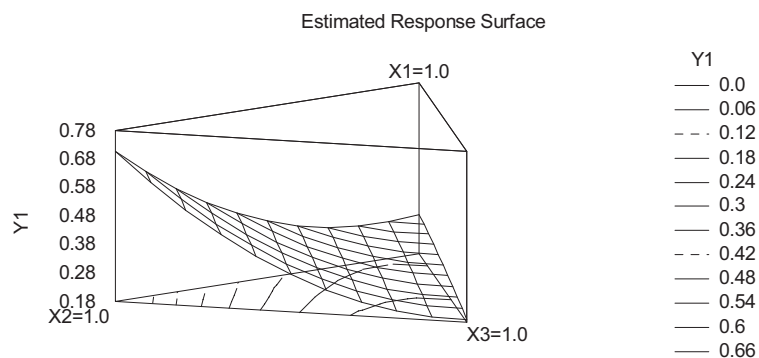
En la Tabla AIV.4 el ANDVA para el modelo cuadrático, la significancia del modelo es de menos de 1% con un coeficiente de determinación ajustado de 89.4522%, en este caso la significancia corresponde tanto a los términos lineales como a los cuadráticos.

$$Y_1 = 0.3175 \cdot X_1 + 0.7057 \cdot X_2 + 0.1893 \cdot X_3 - 0.5336 \cdot X_1 \cdot X_2 + 0.03364 \cdot X_1 \cdot X_3 - 0.55 \cdot X_2 \cdot X_3$$

Para la segunda parte del análisis, para estudiar los efectos de los componentes se tienen las tres siguientes gráficas de superficie de respuesta y de contornos (Gráfica AIV.2).

En los diseños de mezclas no es posible interpretar al coeficiente lineal del modelo ajustado como el efecto individual del componente correspondiente debido a las restricciones de que la suma de las proporciones siempre es igual a la unidad. El efecto de un ingrediente en un diseño de mezclas es diferente al efecto de un factor en un experimento factorial donde se puede mover el factor manteniendo fijos los demás. En un experimento con mezclas, el coeficiente lineal  $\beta_i$  no mide el efecto global del ingrediente  $x_i$ , sino solo estima el valor de la respuesta en este vértice del simplex.

Gráfica AIV.2. Superficie de Respuesta estimada para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales



Pero si  $\beta_{ij}=0$  sí provee información acerca del efecto combinado de los componentes  $x_i$  y  $x_j$ . El efecto del ingrediente  $x_i$  se define como el cambio en la respuesta a lo largo del eje que une este vértice con el centro del lado opuesto del simplex. A lo largo de este eje la proporción con la que participa el ingrediente de  $x_i$  cambia de 1 a 0, mientras que el resto de los ingredientes se mantienen en

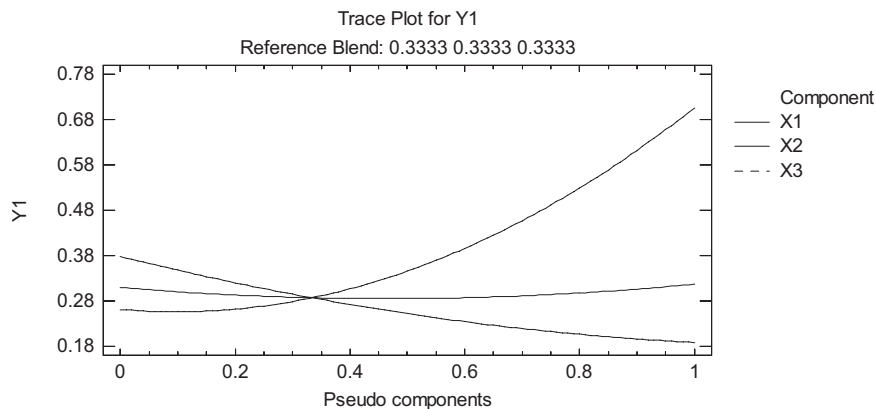
proporciones iguales, cuyas sumas cambian de 0 a 1. También puede observarse que la dureza máxima del queso se obtiene con la mezcla pura de grasa de soya como se presenta en Tabla AIV.6.

Tabla AIV.6. Combinación de los niveles de los componentes que optimizan la respuesta para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales

<i>Factor</i>	<i>Bajo</i>	<i>Alto</i>	<i>Óptimo</i>
grasa butirica	0.0	1.0	0.0
grasa de soya	0.0	1.0	1.0
aceite de soya	0.0	1.0	0.0

Gráfica de Trazas. Permite evaluar la importancia de los distintos componentes de una mezcla, para su interpretación se inicia con una mezcla de referencia (usualmente con el centroide de la región experimental), y se muestra la manera en que la respuesta ( $y_1$ , dureza) se modifica conforme uno de los componentes aumenta o disminuye su participación en la mezcla. Cuando uno de los componentes cambia, el resto se incrementa o disminuye en forma proporcional. De esta manera, la forma del gráfico de trazas muestra la importancia relativa de los componentes.

Gráfica AIV.3. Gráfica de Trazas para análogos de queso utilizando mezclas de grasas vegetales



Usando el modelo ajustado dado en la ecuación 1 se observa en la Gráfica AIV.2 que el componente con mayor efecto es  $x_2$ , ya que cuando este es modificado se logran los mayores cambios en  $y_1$ . Enseguida se ubicaría el componente  $x_3$  y con menor efecto  $x_1$ . Observe que, de acuerdo a este Gráfico, aún cuando el coeficiente  $x_3$  es menor que el coeficiente  $x_1$  en la ecuación,  $x_3$  tiene un efecto mayor que  $x_1$ .



También se puede ver que el valor máximo de la dureza de queso se alcanza con la mezcla pura  $x_2=1$ , mientras que el valor mínimo se logra en la mezcla pura  $x_3=1$ .

## Apéndice V. Diseño Simplex con restricciones y el uso de pseudo componentes

**Ejemplo AV.1.** Obtención de combustible de ignición que se usa en cohetes espaciales, estudio de la elasticidad de la mezcla

En algunos diseños de mezclas no es posible obtener el producto con solo uno de sus componentes al 100 por ciento, ni con la suma de dos o más componentes ya que en dicho diseño puede haber presencia de uno o más componentes inertes, por ejemplo, supóngase que el componente inerte equivale aún 10 por ciento de la mezcla, por lo cual la suma de los porcentajes de los componentes solo es de 0.9 y no 1. Por otro lado, también hay productos que requieren de la presencia de al menos ciertos porcentajes mínimos de los componentes para la elaboración de dichos productos, a estos diseños se les llama diseños con restricciones inferiores o acotados por abajo, para proporciones próximas a cero de los componentes.

Así, por ejemplo, el combustible de Ignición que se usa en cohetes espaciales, el cual es valorado entre otras cosas por la elasticidad de la mezcla, es elaborado considerando un fijador ( $x_3$ ), un oxidante ( $x_2$ ) y un combustible común ( $x_1$ ). En este caso, al tener un 90 por ciento del fijador o de cualquiera de los otros dos componentes solamente, o de igual manera tener la suma de dos o tres componentes, será difícil obtener la mezcla adecuada. La proporción de los tres elementos puede variar, dado que este combustible está acotado o restringido en sus porcentajes, por abajo por un lado, debe ser mayor o igual que  $L_1=30$  por ciento para  $X_1$  y, mayor o igual que  $L_2, L_3=20$  por ciento tanto para  $X_2$  como para  $X_3$ , pero por otro lado los porcentajes de los componentes se deben mantener dentro de cierto rango, considerando en nuestro caso que debe cumplirse que:

$$0.3 \leq X_1 \leq U_1, 0.2 \leq X_2 \leq U_2 \text{ y } 0.2 \leq X_3 \leq U_3, \text{ con la restricción } \sum_{i=1}^3 X_i = 0.9$$

Faltando entonces por determinar el acotamiento superior de los porcentajes  $U_1$ ,  $U_2$  y  $U_3$  para validar en que rangos es donde el combustible funciona. En este problema, la región experimental no es el triangulo que se obtuvo con tres componentes no restringidos, sino solo parte del plano. Kurotori (2) describe cómo obtener los rangos bajo estudio para las proporciones de los componentes, determinando los pseudocomponentes de modo que  $U_1= 0.5$ ,  $U_2= U_3= 0.4$  y entonces los rangos correspondientes son:

$$0.3 \leq X_1 \leq 0.5, 0.2 \leq X_2 \leq 0.4 \text{ y } 0.2 \leq X_3 < 0.4, \text{ con la restricción } \sum_{i=1}^3 X_i = 0.9$$

Kurotori describió un ejemplo donde las proporciones del fijador deben ser al menos de 20%, la del oxidante de al menos 20% y la de combustible común al menos de 30%. Con estos valores, la región es el área sombreada que se muestra en la siguiente Gráfica.

Gráfica AV.1. Región experimental con los valores de Kurotori

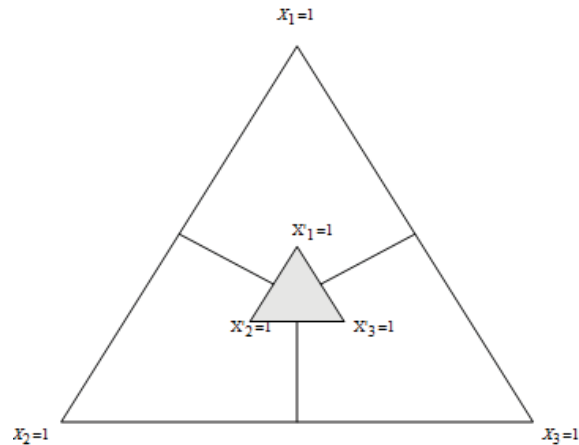


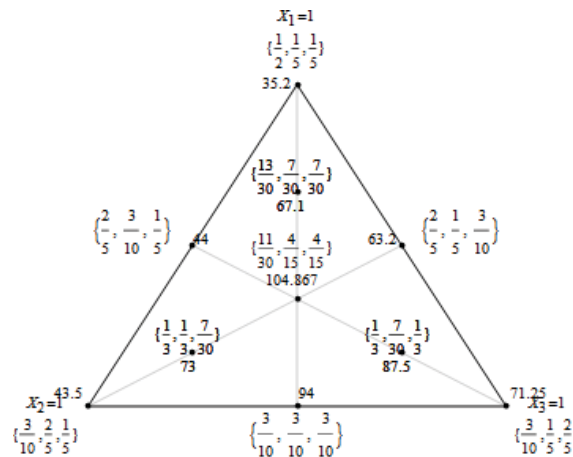
Tabla AV.1. Datos observados sobre la elasticidad ( $y_1$ ), la desviación estándar de la elasticidad ( $y_2$ ) y el índice de manufactura ( $y_3$ ), para la mezcla de combustible de Ignición

Obs	Pseudo componentes			Componentes originales			Respuestas		
	$x'_1$	$x'_2$	$x'_3$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$y_1$	$y_2$	$y_3$
1	1.0	0.0	0.0	0.5	0.2	0.2	32.5	4.1	32
2	1.0	0.0	0.0	0.5	0.2	0.2	37.9	3.7	25
3	0.5	0.5	0.0	0.4	0.3	0.2	44.0	6.8	20
4	0.5	0.0	0.5	0.4	0.2	0.3	63.2	4.7	18
5	0.0	1.0	0.0	0.3	0.4	0.2	54.5	8.9	18
6	0.0	1.0	0.0	0.3	0.4	0.2	32.5	9.2	21
7	0.0	0.5	0.5	0.3	0.3	0.3	94.0	4.5	17
8	0.0	0.0	0.1	0.3	0.2	0.4	64.0	14.0	14
9	0.0	0.0	0.1	0.3	0.2	0.4	78.5	13.0	16
10	0.666	0.166	0.166	0.433	0.233	0.233	67.1	3.5	20
11	0.166	0.666	0.166	0.333	0.333	0.233	73.0	5.2	22
12	0.166	0.166	0.666	0.333	0.233	0.333	87.5	7.0	17
13	0.333	0.333	0.333	0.366	0.266	0.266	112.5	4.6	19
14	0.333	0.333	0.333	0.366	0.266	0.266	98.5	3.5	20
15	0.333	0.333	0.333	0.366	0.266	0.266	103.6	3.0	18

En este diseño experimental es obvio que la aplicación de un diseño simplex es inapropiado ya que todos los puntos del diseño, excepto el punto central, no se encuentran en la región experimental.

La Tabla AV.1 y la Gráfica AV.2 presentan los datos del diseño de experimento y el esquema del mismo. Este análisis contempla el cálculo de los Pseudo componentes, sin embargo, StatGraphics realiza el cambio de variable de forma automática y devuelve los estimadores para las variables originales.

Gráfica AV.2. Esquema gráfico del diseño mezcla con restricciones para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición



En las Tablas AV.2 y AV.3 se observa que el modelo cúbico especial ajusta adecuadamente los datos tanto significativamente como por su contribución a la suma de contribuciones de las sumas de cuadrados referidas a los coeficientes de determinación por cada grado del polinomio.

Tabla AV.2. Tabla ANDVA de los posibles modelos de polinomios canónicos para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición

Fuente	Suma de Cuadrados	GL	Cuadrados Medios	Fc	NSD
Media	7.256E4	1	7.256E4		
Lineal	2396.	2	1198.	2.01	0.1771
Cuadrático	5487.	3	1829.	9.83	0.0034
Cúbico especial	1064.	1	1064.	13.93	0.0058
Cúbico	148.9	3	49.65	0.54	0.6770
Error	462.1	5	92.42		
Total	8.212E4	15			

Tabla AV.3. Coeficientes de determinación para posibles modelos de polinomios canónicos para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición

<i>Modelo</i>	<i>Error estándar</i>	<i>R cuadrática</i>	<i>R cuadrática ajustada</i>
Lineal	24.43	25.06	12.57
Cuadrático	13.64	82.47	72.74
Cúbico especial	8.74	93.61	88.81
Cúbico	9.614	95.17	86.46

En la Tabla AV.4 resumen del buen ajuste del modelo cúbico especial con un coeficiente de determinación del 93 por ciento aproximadamente.

Tabla AV.4. Análisis del modelo polinómico canónico cúbico especial para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición

<i>Fuente</i>	<i>Suma de Cuadrados</i>	<i>GL</i>	<i>Cuadrados Medios</i>	<i>Fc</i>	<i>NSD</i>
Modelo cúbico especial	8947.	6	1491.	16.13	0.0039
Falta de ajuste	148.9	3	49.62	0.54	0.6772
Error puro	462.1	5	92.42		
Total (corr.)	9558.	14			

Con la Tabla AV.5 es posible determinar el polinomio que permita un análisis gráfico y numérico.

Tabla AV.5. Estimación de los parámetros del modelo canónico cúbico especial para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición

<i>Parámetro</i>	<i>Estimado</i>	<i>Error estándar</i>	<i>Tc</i>	<i>NSD</i>
A:X1	35.53	6.069		
B:X2	42.77	6.07		
C:X3	70.35	6.07		
AB	16.18	38.29	0.4225	0.6838
AC	36.48	38.27	0.9532	0.3684
BC	136.7	38.28	3.572	0.0073
ABC	855.2	229.1	3.733	0.0058

Para dicho análisis, con el siguiente modelo se determinan las siguientes tres gráficas y una tabla también.

$$Y1 = 35.53 \cdot X1 + 42.77 \cdot X2 + 70.35 \cdot X3 + 16.18 \cdot X1 \cdot X2 + 36.48 \cdot X1 \cdot X3 + 136.7 \cdot X2 \cdot X3 + 855.2 \cdot X1 \cdot X2 \cdot X3$$

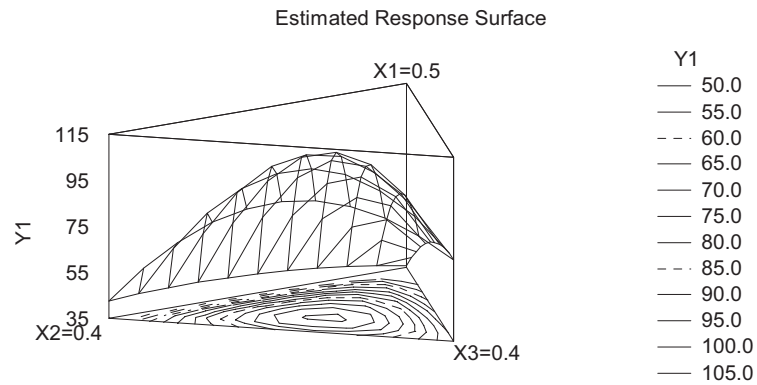
Donde

X1: Combustible común.

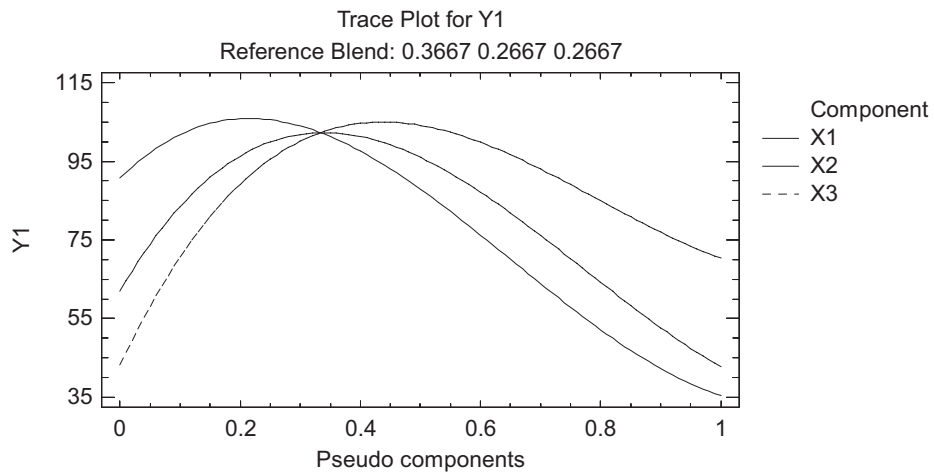
X2: Oxidante

X3: Fijador

Gráfica AV.3. Superficie de Respuesta estimada para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición



Gráfica AV.4. De Trazas estimada para la elasticidad de mezcla de combustible de ignición





## Anexos





## Anexo I. La clasificación de líneas de producción de procesos industriales

En general, todas las organizaciones industriales tienen departamentos especializados como:

- Mercadotecnia: Determina los requisitos y niveles de satisfacción del cliente, mediante encuestas y grupos de enfoque.
- Ventas: Responsable de proporcionar pronósticos a los departamentos de compras y manufactura.
- Compras: Analizan las tendencias mundiales en la calidad y los precios de las materias primas, para establecer un criterio entre quienes desarrollan los productos.
- Finanzas: Prepara los presupuestos con base en pronósticos que se validan periódicamente.
- Contabilidad: Se basan en métodos de auditoría y muestreo para determinar los niveles de inventario y la integridad de las bases de datos.
- Recursos humanos: Mantiene datos sobre ausentismo, rotación, tiempo extra y necesidades de capacitación.
- Calidad: efectúan auditorías y pruebas especiales para determinar la calidad y la confiabilidad del producto. Dentro de este existen técnicos de investigación y desarrollo, los cuales llevan a cabo experimentos para resolver problemas y mejorar los productos y los procesos.
- Manufactura: Desarrolla y mantiene controles de procesos de las operaciones de producción, mediante gráficas de control.

Estos departamentos permiten el buen funcionamiento corporativo y deben trabajar juntos para poder llevar a cabo la producción en forma adecuada. Anteriormente los sistemas de producción se clasificaban en tres tipos:

1. Producción en flujo continuo: Las industrias de flujo continuo son intensivas de capital y muy dependientes de la calidad de las materias primas compradas. Es casi imposible una adaptación rápida de los productos en un proceso de flujo continuo y es difícil introducir nuevos productos. Ejemplos de este tipo son la fabricación de papel y las transformaciones químicas, para producirlos se necesita equipo costoso, de tamaño muy grande, que se

mantiene trabajando día y noche y requiere etapas de fabricación muy rígidas.

2. Operaciones de taller: Son muy intensivas en mano de obra y permiten fabricar productos a la medida del cliente. En estos talleres se acostumbra usar maquinaria de propósito general, que con frecuencia puede estar ociosa. Ejemplos de este tipo son la fabricación de partes metálicas y el moldeo de componentes de plástico por inyección.
3. Producción en masa, en unidades discretas: Pueden parecerse a la producción en flujo continuo si se fabrica un producto en grandes cantidades. Se logra la manufactura flexible cuando el sistema puede pasar de producción en masa a operación de taller. Las posibilidades de componentes y programas en la actualidad pueden hacer de una instalación manufacturera de taller una instalación de producción en flujo continuo.

Debido al desarrollo tecnológico con el que se cuenta actualmente, esta clasificación ha evolucionado y actualmente diferencia 8 tipos de sistemas de producción:

1. Producción por Proyecto. Producción generalmente de productos únicos de cierta complejidad que requieren gran cantidad de *inputs*. Estos deben fabricarse en un lugar definido debido a que es difícil o casi imposible transportarlos una vez terminados. Como resultado, y a diferencia de cualquier otro proceso productivo, los recursos que comprende deben trasladarse al lugar de operación, ya que aquí no existe flujo del objeto de trabajo, sino que son los recursos técnicos y humanos quienes acuden al lugar de trabajo. Las actividades y recursos se gestionan como un todo. Su coordinación adquiere carácter crítico. Existe un connotado interés por el control de los costos y las fechas de terminación.
2. Producción de Taller (Job-shop). El sistema de producción Job-Shop fabrica muchos productos diferentes en volúmenes que varían entre la unidad y pocas unidades de cada producto. Consiste en una fabricación no en serie, de lotes pequeños, para pedidos únicos o de pequeñas cantidades. Por lo regular implica productos adaptados, diseñados a la medida del cliente y de naturaleza muy poco repetitiva. Se requieren operaciones poco especializadas, las cuales son realizadas por un mismo obrero o por un grupo pequeño de ellos, los cuales tienen la responsabilidad de terminar todo o casi todo el producto. Como se fabrican productos muy diferentes, los recursos son flexibles y versátiles. El flujo de material es irregular,

aleatorio y varía considerablemente de un pedido al siguiente. Se requiere que el fabricante interprete el diseño y las especificaciones del trabajo, así como que aplique capacidades del alto nivel en el proceso de conversión. En la producción Job-Shop lo que se trata es de obtener un "producto a medida" del cliente.

3. Producción por Lotes. El sistema de flujo en lotes produce menos variedad de producto en volúmenes más elevados que el caso anterior. El mayor volumen se debe a un aumento de la repetitividad en ciertos artículos que se hacen dominantes. Estos productos se fabrican en lotes, que representan unos pocos meses de requerimientos de clientes. En este caso se requieren más operaciones, y estas son más especializadas, por lo que difícilmente un mismo operario pueda dominarlas todas con una eficiencia aceptable. En tal sentido, el trabajo se divide en diferentes etapas tecnológicas, en las cuales los lotes sufren distintas operaciones. Así la instalación se suele dividir en secciones o talleres, en los cuales se agrupan los equipos con funciones similares. Se suele emplear una combinación de *layouts* celulares y funcionales. Los *layouts* celulares se utilizan cuando es efectivo, en cuanto a costos, disponer el equipo en células, para producir familias de productos. Como hay muchos productos, el equipo y utillaje son mayormente flexibles, de propósito general. El flujo material es desconectado aunque regular, variable de un pedido a otro, aunque existen pautas de flujo para familias de productos y para grandes lotes. Es el sistema más utilizado.
4. Producción en Línea Acompasada por el Equipo (LAE). El equipo y procesos están organizados en una línea o líneas especializadas para producir un pequeño número de productos diferentes o familias de productos. Estos sistemas se usan solo cuando el diseño del producto es estable y el volumen es lo suficientemente elevado para hacer un uso eficiente de una línea especializada con capacidades dedicadas. Se fabrica a una tasa constante, con un flujo automatizado e intensivo en capital. Los operarios realizan tareas relativamente simples a un ritmo determinado por la velocidad de la línea. El control del ciclo productivo está automatizado, existe alta estandarización y una elevada eficiencia en todo el proceso.
5. Producción en Línea Acompasada por Operarios (LAO). Se utiliza cuando el número de productos diferentes es demasiado elevado y los volúmenes de producción demasiado variables para el sistema en línea con flujo acompasado por el equipo. En este sistema, la línea es más flexible que en el caso anterior, y puede funcionar con una variedad de velocidades. La tasa

de producción depende del producto particular que se fabrique, del número de operarios asignados a la línea y de la eficacia del trabajo en equipo de los operarios. Aunque los productos sean algo diferentes, son técnicamente homogéneos, usando la misma instalación, personal y la misma secuencia de estaciones de trabajo, aunque alguno de ellos pueda no pasar por alguna que no le es necesaria. El ciclo de productivo está controlado por los operarios a diferencia de la LAE donde dicho control está automatizado, esto hace que sea más flexible y versátil que el anterior.

6. Producción de Flujo Continuo. Este sistema es similar al de línea en flujo acompasado por el equipo. Sin embargo, es más automatizado, más intensivo en capital y menos flexible. Cada máquina y equipo están diseñados para realizar siempre la misma operación y preparados para aceptar de forma automática el trabajo suministrado por la máquina precedente. Está diseñado para fabricar un producto o una familia limitada de productos en volúmenes muy elevados. El diseño del producto es muy estable, a menudo es un producto genérico o «commodity». El flujo material es continuo, sincronizado, integrado a través de toda la instalación como si fuera un gran proceso tecnológico. Este rígido sistema, se basa en un proceso muy automatizado, costoso y especializado en la obtención de un producto estándar, donde la homogeneidad es total y absoluta, funcionando continuamente con mínima intervención del personal de línea. Generalmente precisa laborar las 24 horas para procurar ser un sistema costeable y eficiente.
7. Sistema de Producción JIT. Es importante distinguir entre el sistema de producción JIT y las técnicas JIT. Las técnicas denominadas JIT incluyen el control estadístico de la calidad, reducción de los tiempos de cambio de útiles (SMED), polivalencia de los trabajadores, versatilidad de los equipos, estandarización de operaciones, el enfoque de la producción mediante «arrastre» (Kanban), layout celular, mantenimiento autónomo, implicación de todo el personal en las decisiones gerenciales, resolución continua de problemas, control automático de defectos, etc. Estas técnicas se usan en el sistema de producción JIT, pero también se usan en otros sistemas. El sistema de producción JIT es mucho más que un agregado de técnicas JIT. Surgido en Toyota Motor Co., es un sistema de flujo lineal (virtual o físico) que fabrica muchos productos en volúmenes bajos a medios. Por su diseño, el sistema JIT fuerza la eliminación de todos los innecesarios ("desperdicios"), y a partir de aquí, impone la mejora continua. Esto conduce

naturalmente a costos inferiores, mejoras en la calidad y entregas más rápidas. El sistema JIT es el más difícil de diseñar, implantar y gestionar de todos, y pueden existir diferentes niveles de implantación del mismo.

8. Sistema Flexible de Fabricación (FMS). El sistema FMS consiste en un grupo de máquinas controladas por computadoras y sistemas automáticos de manejo, carga y descarga de material, todo ello controlado por un computador supervisor. Un FMS puede funcionar sin atención de personal durante largos periodos. Las máquinas, el sistema de manipulación de materiales y las computadoras son muy flexibles, versátiles, lo que permite a un sistema FMS fabricar muchos productos diferentes en bajos volúmenes. Por ser sumamente costoso, se emplea comúnmente en situaciones en las que no pueden utilizarse sistemas de producción en línea de flujo más simples y baratos. Por lo general, se desarrolla en un entorno CIM (manufactura integrada por computador).



## Anexo II. Diseño Robusto de Taguchi en la optimización de procesos industriales

Los ingenieros de seguridad de Ford Motor Company estuvieron trabajando con un proveedor para entender mejor el funcionamiento de los cinturones de seguridad de asientos traseros en autos. En cualquier sistema convencional de cinturones de seguridad con bandas para hombros y para cintura, si la parte de la cintura del cinturón se corre hacia arriba, el pasajero puede deslizarse bajo ella y potencialmente sufrir una lesión abdominal. Este fenómeno llamado "inmersión", está relacionado con un gran número de factores entre los que se incluye la naturaleza de la colisión, el diseño del vehículo, las propiedades de los asientos y cinturones de seguridad, así como otras condiciones. Con base en experimentación, simulación y análisis, los ingenieros de Ford esperaban determinar los factores más críticos para la seguridad del pasajero y para evitar la "inmersión".

Se verá a continuación un método para diseñar y realizar experimentos que mejoren el desempeño de productos, incluso en presencia de variaciones incontrolables. Este método se conoce como diseño robusto.

### **¿Qué es el diseño robusto?**

Definimos un producto (o proceso) *robusto* como aquel que funciona como se desea aún bajo condiciones no ideales como son variaciones del proceso de manufactura o una variedad de situaciones de operación. Usamos el término *ruido* para describir variaciones no controladas que pueden afectar el funcionamiento y decimos que un producto de calidad debe ser robusto ante factores de ruido.

Un *diseño robusto* es la actividad de desarrollo de un producto para mejorar el desempeño deseado del producto al mismo tiempo que se minimizan los efectos de ruido. En el diseño robusto empleamos experimentos y análisis de datos para identificar puntos de referencia robustos para los parámetros de diseño que podemos controlar.

Un *punto de referencia robusto* es una combinación de valores de parámetro de diseño para los cuales el desempeño del producto es como se desea bajo una amplia variedad de condiciones de operación y variaciones de manufactura.

Conceptualmente, el diseño robusto es fácil de entender. Para un objetivo determinado de desempeño (restringir con seguridad el movimiento de pasajeros de asientos traseros, por ejemplo), puede haber muchas combinaciones de valores de parámetro que darán el resultado deseado. No obstante, algunas de estas



combinaciones son más sensibles a una variación incontrolable que otras. Como es probable que el producto opere en presencia de varios factores de ruido, nos gustaría seleccionar la combinación de valores de parámetro que sea menos sensible a una variación incontrolable. El proceso de diseño robusto usa un método experimental para hallar estos puntos de referencia robustos.

Para entender el concepto de punto de referencia robusto, considere dos factores hipotéticos que afectan en alguna medida la operación de un cinturón de seguridad. Suponga que el factor A tiene un efecto lineal,  $f_A$ , sobre el funcionamiento y el factor B tiene un efecto no lineal,  $f_B$ . Además, considere que podemos escoger puntos de referencia para cada uno de los factores: A1 o A2 para el factor A, y B1 o B2 para el factor B. Suponiendo que los efectos de  $f_A$  y  $f_B$  sean aditivos, una combinación de A1 y A2 dará aproximadamente el mismo nivel de desempeño general que una combinación de A2 y B1

Las variaciones de manufactura estarán presentes en cualquier punto de referencia seleccionado, de modo que el valor real puede no ser exactamente como se especifica. Se escoge el valor de B1 para el factor B, donde la sensibilidad de la respuesta al factor B es relativamente pequeña en el desempeño general del producto, por lo tanto, la selección de B1 y B2 es una combinación más robusta de puntos de referencia que la combinación B2 y B1.

El proceso de diseño robusto se puede usar en varias etapas del proceso de desarrollo de un producto. Al igual que con casi todos los problemas de desarrollo de un producto, cuanto más pronto se pueda considerar la robustez en el proceso de desarrollo de un producto, serán mejores los resultados de la robustez. Se pueden usar experimentos de diseño robusto dentro de la fase de desarrollo del concepto para refinar las especificaciones y establecer objetivos realistas de operación.

Si bien es benéfico considerar la robustez de un producto desde la etapa del concepto, los experimentos de diseño robusto se usan con más frecuencia durante la fase de diseño de detalles para asegurar el desempeño deseado del producto bajo una variedad de condiciones. En diseño de detalles, la actividad del diseño robusto también se conoce como *diseño de parámetros*, porque es cuestión de escoger los puntos de referencia correctos para los parámetros de diseño bajo nuestro control. Éstos incluyen los materiales del producto, dimensiones, tolerancias, procesos de manufactura e instrucciones de operación.

Para muchos problemas de diseño de ingeniería, de las ecuaciones basadas en principios físicos fundamentales, se pueden despejar selecciones de un parámetro

robusto. No obstante, algunos ingenieros generalmente no pueden modelar por completo las clases de incertidumbre, variaciones y factores de ruido que aparecen bajo condiciones reales. Además, la capacidad para desarrollar modelos matemáticos precisos es limitada para muchos problemas de ingeniería. Por ejemplo, considere la dificultad de modelar con precisión el problema de “inmersión” del cinturón de seguridad bajo una gran variedad de condiciones. En esta situación, es necesaria la investigación empírica por medio de experimentos diseñados, que se pueden usar para apoyar de manera directa la toma de decisiones y también para mejorar la precisión de modelos matemáticos.

En el caso del problema de diseños de cinturones de seguridad, los ingenieros de Ford deseaban probar diversos parámetros de diseño del cinturón de seguridad en condiciones de colisión, pero como la prueba en choques es muy costosa, la Ford trabajó con su proveedor de cinturones de seguridad para desarrollar un modelo de simulación que se calibró usando datos de choques experimentales. Considerando los cientos de posibles combinaciones de parámetros de diseño, condiciones de colisión y otros factores de interés, los ingenieros escogieron explorar el modelo de simulación usando un experimento cuidadosamente planteado. Aún cuando la simulación requiere de una gran cantidad de trabajo en computadora, el modelo de simulación permitió a ingenieros de Ford ejecutar docenas de experimentos bajo una amplia variedad de condiciones, que no hubieran sido posibles con pruebas físicas de choque.

Para el equipo de diseño de cinturones de seguridad de Ford, las metas de este experimento diseñado fueron aprender:

1. Qué combinación de asiento, cinturón de seguridad y parámetros de fijación minimiza la “inmersión” de pasajeros en asientos traseros durante un choque.
2. En qué forma la “inmersión” es afectada por condiciones no controlables. ¿Qué combinación de parámetros de diseño es más robusta para esos factores de ruido?

#### Diseño de experimentos

El método de diseño robusto presentado en este capítulo está basado en un método llamado *diseño de experimentos* (DOE). En este método, el equipo identifica los parámetros que se pueden controlar y los factores de ruido que desea investigar. El equipo entonces diseña, ejecuta y analiza experimentos para ayudar a determinar los puntos de referencia de parámetros para alcanzar el desempeño robusto.

En Japón, durante las décadas de 1950 y 1960, el doctor Genichi Taguchi desarrolló técnicas para aplicar el DOE en la mejora de la calidad de productos y procesos de manufactura. Comenzando con el movimiento de calidad de la década de 1980, el método del Dr Taguchi, para el diseño experimental, empezó a tener impacto en la práctica de ingeniería en Estados Unidos, en particular en Ford Motor Company, Xerox Corporation, AT&T Bell Laboratories, y hasta en el American Supplier Institute (que fue creado por Ford).

Taguchi recibe crédito por promover varias ideas clave del diseño experimental para el desarrollo de productos y procesos robustos. Estas aportaciones incluyen la introducción de factores de ruido en experimentos para observar estos efectos y el uso de una métrica de relación de señal a ruido, que incluye el desempeño deseado (señal) y los efectos no deseados (ruido). Si bien durante décadas los expertos en estadística habían estado mostrando a ingenieros como ejecutar experimentos, no fue sino hasta que los Métodos de Taguchi explicaron ampliamente a la industria manufacturera en Estados Unidos, durante la década de 1990, que los experimentos se utilizaron comúnmente para alcanzar un diseño robusto.

El diseño de experimentos (DOE) no es sustituto del conocimiento técnico del sistema bajo investigación. En realidad, el equipo debe usar su conocimiento del producto y forma de operación para escoger los parámetros correctos para investigar por experimento. Los resultados experimentales se pueden usar en coordinación con conocimientos técnicos del sistema para hacer las mejores selecciones de puntos de referencia de parámetros. Además, los resultados experimentales se pueden emplear para construir mejores modelos matemáticos de la función del producto. En esta forma la experimentación complementa al conocimiento técnico. Por ejemplo, los ingenieros de Ford tienen modelos matemáticos básicos del desempeño de cinturones de seguridad como una función de las dimensiones de un pasajero y tipos de colisión. Estos modelos permiten a la Ford dar dimensiones a elementos mecánicos y determinar la geometría del aditamento del cinturón. Con base en datos empíricos y simulación, los modelos analíticos y las directrices de diseños del diseño de cinturones de seguridad de Ford ganan precisión con el tiempo, y se reducen la necesidad de estudios empíricos y de simulación que llevan mucho tiempo. Eventualmente este conocimiento técnico puede mejorar hasta el punto de que solo se requieran pruebas de confirmación de nuevas configuraciones de cinturones de seguridad.

El diseño y análisis experimental básico para el desarrollo de un producto pueden ser planeados y ejecutados con éxito por el equipo de desarrollo. No obstante, el

campo de diseño de experimentos (DOE) tiene muchos métodos avanzados para resolver varios factores complicados y dar resultados más útiles.

Los equipo de desarrollo, así, se pueden beneficiar de consultar a un experto en estadística o un experto en DOE que puede ayudar a diseñar experimentos y escoger el mejor método analítico.

El Proceso de Diseño Robusto.

Para desarrollar un producto robusto por medio del diseño de experimentos (DOE), se sugiere este proceso de siete pasos:

1. Identificar los factores de control, factores de ruido y métricas de desempeño.
2. Formular una función objetivo.
3. Desarrollar el plan experimental.
4. Ejecutar el experimento.
5. Realizar el análisis.
6. Seleccionar o confirmar puntos de referencia del factor.
7. Meditar y repetir.



## Anexo III. El Poder Seis Sigma para la optimización de procesos administrativos

**Propósito.** Reducir los errores y las pérdidas de todo tipo para aumentar la satisfacción del cliente e incrementar los beneficios de la empresa.

**Mecanismo.** No basta con mejorar el control de la calidad, es preciso retroceder unos pasos, definir el problema de base (del negocio, del proceso o la operación) y eliminarlo.

Medir o valorar la posición en que se encuentra la empresa y el punto al que se desea llegar, analizar la información, mejorar la situación, y controlar la actividad realizando un seguimiento posterior para evitar errores de última hora.

**¿Cómo se hace todo esto?** Es preciso que todos los miembros del equipo tengan una función específica y reciban una recompensa por sus logros: reconocimientos, ascensos, dinero. El cinturón negro ha de disponer de todos los recursos necesarios para que pueda centrar su atención en llevar a buen puerto el proyecto.

Si el poder ejecutivo de una empresa ha de adoptar la filosofía de Seis Sigma, debe transmitir entusiasmo al resto del equipo desde el primer día. Un buen director general ha de encargar a uno de sus ejecutivos, **el campeón ejecutivo**, la supervisión y dirección del proyecto. De ese modo, hace saber a toda la empresa que se trata de algo importante.

**Campeón ejecutivo.** Capitán del equipo, elige a su equipo con mucho cuidado, elige a los empleados más valiosos de la empresa para campeones de despliegue y campeones de proyecto.

**Campeones de despliegue.** Deben liderar y motivar al equipo y trabajan para introducir el programa Seis Sigma en el ámbito de la empresa que les corresponde.

**Campeón del proyecto.** Supervisar a los cinturones negros, apoyar y financiar los proyectos Seis Sigma y buscar al personal necesario para llevarlos a cabo. De este modo el equipo puede centrarse por completo en el proyecto.

**Maestro de cinturones negros.** Es el encargado de crear cambios esenciales y duraderos en el funcionamiento de toda la empresa.

**Los cinturones negros.** Son quienes realmente llevan a cabo el trabajo. Son clave para el conjunto del proyecto, los verdaderos líderes del programa Seis Sigma.

**Cinturones verdes.** Proporcionan la ayuda que requieren los cinturones negros para llevar a cabo el proyecto.

1. Se define el problema
2. Se valora y mide el punto en que se encuentra la empresa.
3. Se estudia la raíz del problema. ¿A qué se deben los errores y como se pueden evitar? ¿De todos los problemas cuál causa más conflictos, cuál cuesta más dinero o incomoda más a los clientes? ¿Qué problema vale más la pena resolver?
4. Se mejora la situación.
5. Se controla el nuevo procedimiento para asegurar un buen resultado.

Un trabajo más eficaz, menos devoluciones y clientes más satisfechos. El poder principal de Seis Sigma es lograr que toda la empresa hable el mismo lenguaje, el de Seis Sigma.

## Bibliografía

1. BOX P.E. George, Connor R. Lewis, Cousins R. Wilfred, Davies L. Owen, Himsforth R. Francis and Sillitto P. George, The Design and Analysis of Industrial Experiments, Imperial Chemiscal, Industried Limited by Oliver and Boyd London and Edinburg Hafner Publishing Company New York, 1956.
2. BOX, George; HUNTER, William; HUNTER, Stuart. Estadística para Investigadores: Introducción al Diseño de Experimentos, Análisis de Datos y Construcción de Modelos. Reverté Ediciones. México. 1999.
3. GUTIÉRREZ PULIDO, Humberto y DE LA VARA SALAZAR, Román. Análisis y Diseño de Experimentos. McGraw Hill. 2ª Ed. México. 2008.
4. HEADY O., Early and Dillon L., John, Agricultural Production Functions, Iowa State University Press, Ames, Iowa, 1960.
5. KUHEL, Robert O. Diseño de Experimentos. Thomson Editores. 2ª Ed. México. 2001.
6. LAWSON, John; MADRIGAL, José L; ERJAVEC, John. Estrategias Experimentales para Mejoramiento de la Calidad en la Industria. Iberoamérica. México. 1992.
7. MONTGOMERY, Douglas, Control Estadístico de la Calidad, Limusa Wiley, 2004.
8. MYERS, Raymond y MONTGOMERY, Douglas. Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments. Wiley-Interscience Publication. United States of America. 1995
9. TUSELL, Fernando, Análisis de Regresión. Introducción Teórica y Práctica basada en R, Bilbao, Octubre 2011.
10. ULRICH T., Karl y Eppinger D. Steven, Diseño y desarrollo de productos, McGraw Hill, 2009.