METODOLOGÍA DE SUPERFICIE DE RESPUESTA

Introducción

- La metodología de superficie de respuesta es un conjunto de técnicas matemáticas y estadísticas útiles para **modelar** y **analizar** problemas en los cuales la respuesta de interés $\mathbf{Y}$ está influenciada por varias variables y el **OBJETIVO** es **OPTIMIZAR** esta respuesta.
- Suponga que se tiene un proceso industrial cuyo **objetivo** es determinar los niveles de $\mathbf{X_1}$ (Temperatura) y $\mathbf{X_2}$ (presión) que **maximizan** el rendimiento ($\mathbf{Y}$):

$$\mathbf{Y} = \mathbf{f}(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}) + \varepsilon.$$

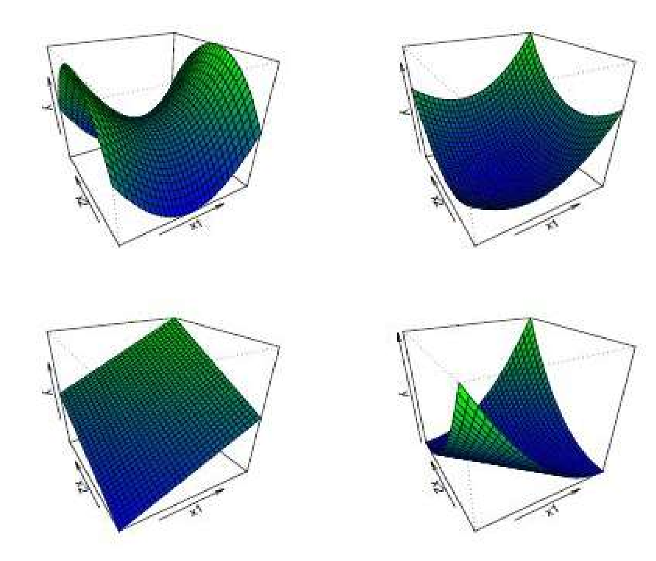
ε: es el ruido o error observado en la respuesta $\mathbf{Y}$.

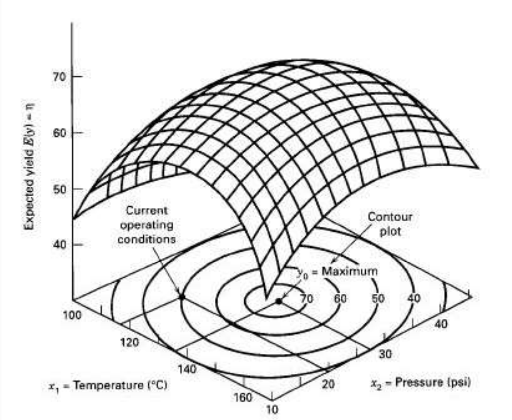
METODOLOGÍA DE SUPERFICIE DE RESPUESTA

Introducción

Si $\mathbf{E}[\mathbf{Y}] = \eta$, entonces la superficie está representada por:

$$\eta = \mathbf{f}(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}).$$





METODOLOGÍA DE SUPERFICIE DE RESPUESTA

ALGUNAS ANOTACIONES:

- La metodología de superficie de respuesta es **secuencial**.
- En general, la forma funcional entre la respuesta $\mathbf{Y}$ y las variables independientes es **desconocida**.
- El primer paso es: Determinar una **aproximación apropiada** de la relación funcional entre $\mathbf{Y}$ y las covariables $\mathbf{X}$´s.
- Se emplean polinomios de orden bajo sobre alguna región de las variables independientes.

Anotaciones - Continuación

- Primera aproximación:

$$\mathbf{Y} = \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_j\, x_j + \varepsilon$$

Si hay **curvatura** en el sistema entonces se tiene:

$$\mathbf{Y} = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i\, x_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii}\, x_{ii}^2 + \sum_{i<j}\sum \beta_{ij}\, x_i\, x_j + \varepsilon$$

Las aproximaciones anteriores funcionan bien en regiones **relativamente pequeñas** de las variables independientes.

MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN

a. En general la estimación inicial de las condiciones de operación óptimas para un sistema estará alejada del óptimo real.

b. En este caso, el objetivo del experimento es moverse rápidamente a la vecindad general del óptimo.

c. Se busca usar un procedimiento experimental simple y económicamente eficiente.

d. En la lejanía del óptimo, generalmente se supone que el modelo de primer orden es una aproximación adecuada a la superficie real en regiones pequeñas de las $\mathbf{X}$´s.

METODOLOGÍA DE SUPERFICIE DE RESPUESTA

Método de Máxima pendiente en Ascenso

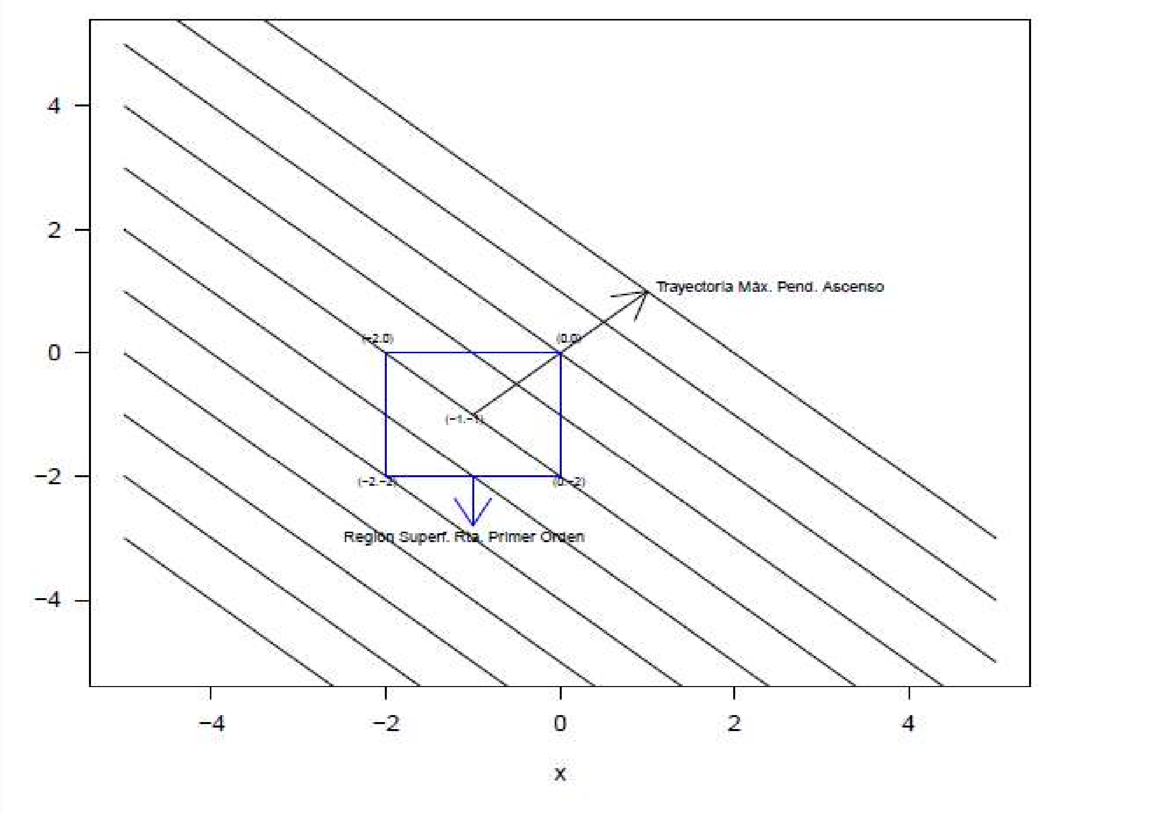
Es un procedimiento para recorrer secuencialmente a lo largo de la trayectoria de la máxima pendiente, es decir, en la dirección del máximo incremento de la respuesta.

Modelo Ajustado de Primer Orden y Anotaciones

$$\hat{\mathbf{Y}} = \hat{\beta}_{\mathbf{0}} + \sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{i}} \, \mathbf{x_i}$$

1. La superficie de respuesta, es decir, las curvas de nivel o los contornos de $\hat{\mathbf{Y}}$ constan de una varias rectas paralelas.
2. La dirección de **ascenso máximo** es aquella donde $\hat{\mathbf{Y}}$ aumenta más rápidamente. Esta dirección es paralela a la normal de la superficie asociada a la respuesta ajustada. Ver la gráfica siguiente.

Forma esquemática del método



Anotaciones Continuación

3. Por lo regular, la trayectoria de máxima pendiente en ascenso es la recta que atraviesa el centro de la región de interés y es NO normal a la superficie ajustada. Luego:
Los incrementos a lo largo de la trayectoria son proporcionales a los coeficientes de regresión $\hat{\beta}_{\mathbf{j}}$.

4. El tamaño del incremento lo determina el experimentador con base en su experiencia con el proceso u otras consideraciones prácticas.

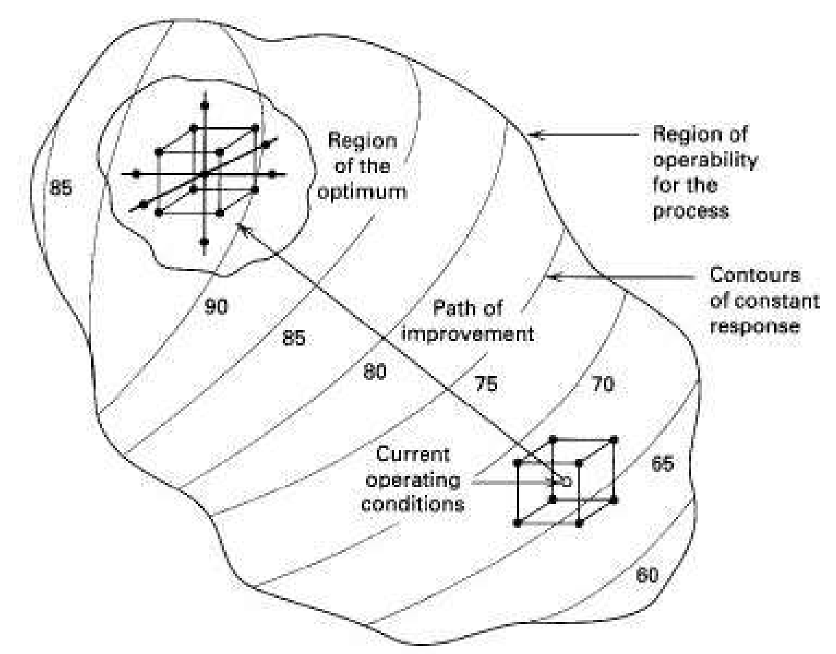
Anotaciones Continuación

5. Los experimentos se llevan a cabo a lo largo de la trayectoria de máximo ascenso hasta dejar de observar un incremento adicional en la respuesta. Entonces se ajusta un nuevo modelo de primer orden, se determina la trayectoria de máximo ascenso y se continúa.

6. Por último, el experimentador llegará a una cercanía del óptimo, lo cual sucede cuando ocurre falta de ajuste del modelo de primer orden.

Ver la siguiente figura.

METODOLOGÍA DE SUPERFICIE DE RESPUESTA



EJEMPLO

1. OBJETIVO:

   Determinar las **condiciones de operación** que **maximicen** el rendimiento de un proceso.

2. Se controlan **DOS** variables que influyen en el rendimiento del proceso: El Tiempo de reacción y la Temperatura de reacción.

   Condiciones actuales de Operación: Tiempo: 35 minutos, Temperatura: 155 ℉.

   Bajo esta condiciones se obtiene un rendimiento cerca del $\mathbf{40}\,\%$.

   Se decide ajustar un modelo de primer orden, con el fin de obtener la región del óptimo.

3. Región de Exploración: **Tiempo** en $(\mathbf{30},\ \mathbf{40})$ minutos, **Temperatura** en: $(\mathbf{150},\ \mathbf{160})$ ℉.

Para simplificar cálculos, las variables independientes (o Factores) se codifican en el intervalo: $(-1,1)$:
Luego, si ξ_1 : Denota tiempo en escala original y ξ_2 : denota la temperatura en escala original, entonces la variables codificadas son:

$$x_1 = \frac{\xi_1 - \text{Promedio}(30,40)}{\text{Longitud Media del Intervalo}} = \frac{\xi_1 - 35}{5}$$

$$x_2 = \frac{\xi_2 - \text{Promedio}(150,160)}{\text{Longitud Media del Intervalo}} = \frac{\xi_2 - 155}{5}$$

Se obtiene el siguiente diseño experimental, tanto en la escala original como en la escala transformada

ξ_1	ξ_2	x_1	x_2	Y
30	150	-1	-1	39,3
30	160	-1	1	40,0
40	150	1	-1	40.9
40	160	1	1	41.5
35	155	0	0	40.3
35	155	0	0	40.5
35	155	0	0	40.7
35	155	0	0	40.2
35	155	0	0	40.6

Anotaciones

1. El diseño usado para obtener los datos anteriores, es un 2^2 con **cinco puntos centrales** usados para:
   a) La estimación del error experimental y
   b) La realización de una prueba de adecuación del modelo de primer orden.
2. El diseño se centra alrededor de las condiciones actuales de operación del proceso.
3. Se decide ajustar un modelo de primer orden, con el fin de obtener la región del óptimo (esto se puede hacer usando mínimos cuadrados).

Modelo Ajustado

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{40.44 + 0.775x_1 + 0.325x_2}$$

Antes de continuar con la exploración a lo largo de la trayectoria de máximo ascenso, se debe verificar la idoneidad del modelo de primer orden. Para ello, el diseño $\mathbf{2^2}$ con los puntos centrales permite hacer los siguiente:

- Obtener una estimación de la varianza del error.
- Verificar la existencia de interacciones o términos de productos cruzados del modelo.
- Verificar la existencia de curvatura, es decir, efectos cuadráticos.

Las réplicas en el centro se pueden usar para calcular una estimación de la varianza del error, de la siguiente manera:

$$\hat{\sigma}^2 = \mathbf{MSE} = \mathbf{SSE}/(\mathbf{n_c} - 1) = \frac{\sum_{\substack{i=1 \\ y_i \in \text{centro}}}^{n_c} (y_i - \bar{y})^2}{n_c - 1}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n_c} y_i^2 - n\bar{y}^2}{n_c - 1} = \frac{\sum_{i=1}^{n_c} y_i^2 - \frac{y_{\cdot\cdot\cdot}^2}{n}}{n_c - 1}$$

$$= \frac{(40.3)^2 + (40.5)^2 + (40.7)^2 + (40.2)^2 + (40.6)^2 - \frac{(202.3)^2}{5}}{4}$$

$$\hat{\sigma}^2 = 0.0430$$

Agregando las interacciones

Las interacciones: Se tienen en cuenta al agregar al modelo el término: $\beta_{12}\, x_1\, x_2$. La estimación de mínimos cuadrados del coeficiente β_{12} se obtiene como la mitad del efecto de la interacción entre los dos factores:

$$\begin{aligned}
\hat{\beta}_{12} &= \frac{\text{Contraste}}{4} \\
&= \frac{1}{4}[1 \times 39.3 + 1 \times 41.5 - 1 \times 40.0 - 1 \times 40.9] \\
&= \frac{1}{4}(-0.1) \\
\hat{\beta}_{12} &= -0.025
\end{aligned}$$

La suma de cuadrados de la interacción (con **1**-grado de libertad) es:

$$\mathbf{SS}_{\text{Interacción}} = \frac{\text{Contraste}^{\mathbf{2}}}{\mathbf{4}} = \frac{(-\mathbf{0.1})^{\mathbf{2}}}{\mathbf{4}} = \mathbf{0.0025}$$

La prueba para determinar si la interacción es significativa:

El estadístico $\mathbf{F}$ es:

$$\mathbf{F} = \frac{\mathbf{MS}_{\text{Interacción}}}{\mathbf{MS_E}} = \frac{\mathbf{SS}_{\text{Interacción}}}{\hat{\sigma}^{\mathbf{2}}} = \frac{\mathbf{0.0025}}{\mathbf{0.0430}} = \mathbf{0.058}$$

y como $\mathbf{F}_{\alpha;\,\mathbf{1},\,\mathbf{4}} = \mathbf{F}_{\mathbf{0,05};\,\mathbf{1},\,\mathbf{4}} = \mathbf{7,708647}$. Claramente no se rechaza $\mathbf{H_0} : \beta_{\mathbf{12}} = \mathbf{0}$, es decir, se concluye que la interacción **NO** es significativa.

Existencia de curvatura

Ahora se pasa a evaluar la existencia de curvatura (ie. efectos cuadráticos).

Para esto, se compara la respuesta promedio en los 4-puntos de la porción factorial del diseño, ie.

$$\bar{\mathbf{y}}_{\mathbf{F}} = \mathbf{40.425},$$

con la respuesta promedio en el centro del diseño, ie.

$$\bar{\mathbf{y}}_{\mathbf{C}} = \mathbf{40.46}.$$

Si existe curvatura cuadrática en la verdadera función de la respuesta, entonces la cantidad

$$\bar{\mathbf{y}}_{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{y}}_{\mathbf{C}}$$

es una medida de dicha curvatura.

Si β_{11} y β_{22}-son los coeficientes de los términos cuadráticos puros de x_1^2 y x_2^2, entonces $\bar{y}_F - \bar{y}_C$- es una estimación de $\beta_{11}+\beta_{22}$, en el ejemplo bajo estudio, una estimación de $\beta_{11}+\beta_{22}$ es:

$$\hat{\beta}_{11}+\hat{\beta}_{22} = \bar{y}_F - \bar{y}_C = -0.035.$$

La suma de cuadrados (con 1-grado de libertad) asociado a la hipótesis: $H_0 \ : \ \beta_{11}+\beta_{22} = 0$ es:

$$SS_{\text{Curvatura}} = \frac{n_F n_C (\bar{y}_F - \bar{y}_C)^2}{n_F + n_C} = \frac{4(5)(-0.035)^2}{9} = 0.0027$$

El estadístico de prueba es:

$$\mathbf{F} = \frac{\mathbf{MS}_{\text{Curvatura}}}{\mathbf{MS}_{\mathbf{E}}} = \frac{\mathbf{SS}_{\text{Curvatura}}}{\hat{\sigma}^2} = \frac{\mathbf{0.0027}}{\mathbf{0.0430}} = \mathbf{0.063}$$

Luego, como este $\mathbf{F}$ es muy **pequeño**, no se rechaza $\mathbf{H_0} \ : \ \beta_{11} + \beta_{22} = \mathbf{0}$, es decir, se concluye que **NO** hay indicación de un efecto cuadrático puro a un nivel de significancia del 5 %.