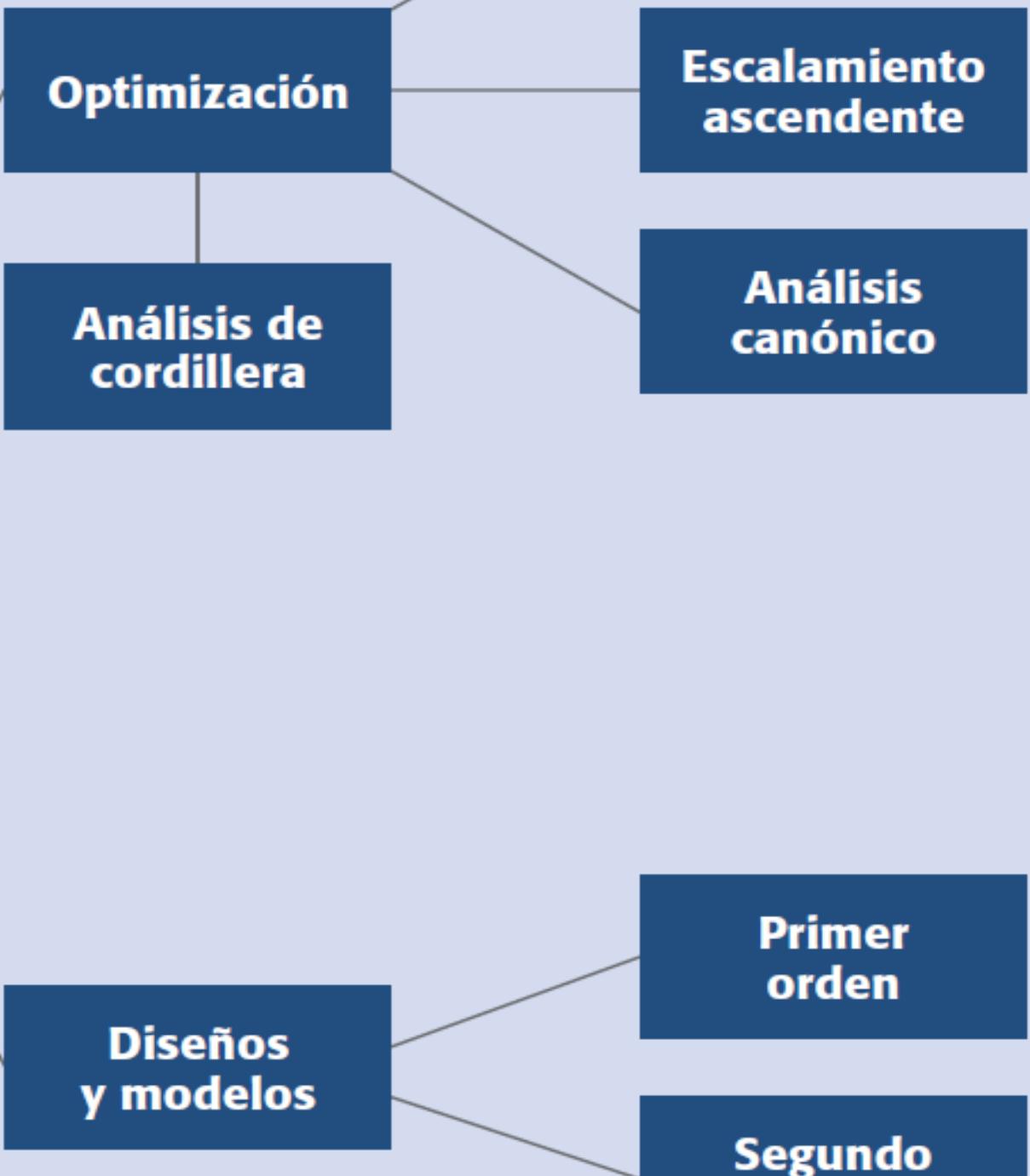


Superficie de respuesta

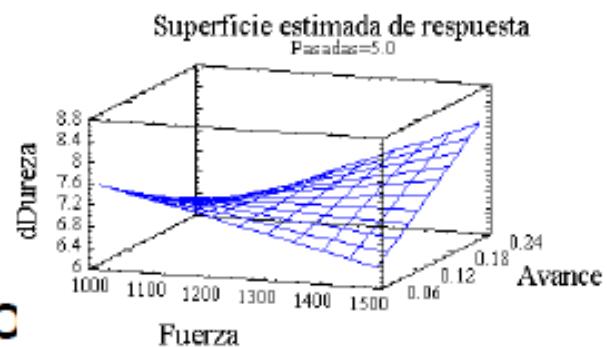
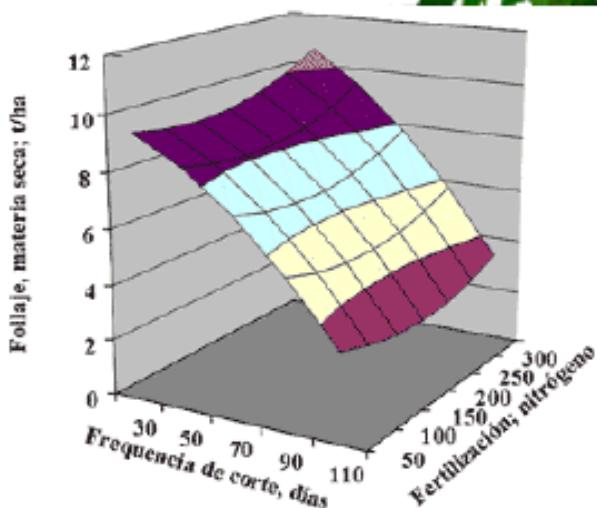


Metodología de Superficie de Respuesta (MSR)



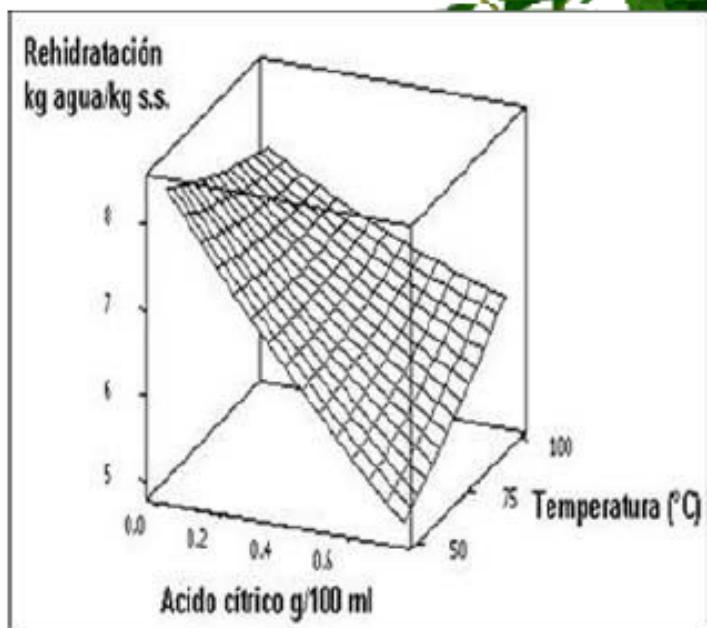
MSR

- Es una **estrategia experimental y de modelación** que permite encontrar condiciones de operación óptima de un proceso.
- Sus orígenes se remiten al trabajo de Box y Wilson (1951);
- La metodología ha tenido un desarrollo considerable debido a las computadoras.
- SR es la superficie que resulta de representar gráficamente el modelo ajustado, y describe el comportamiento de la respuesta promedio en cada punto de la región experimental.



- * La (**MSR**) es un conjunto de técnicas matemáticas utilizadas en el tratamiento de problemas en los que una **respuesta** de interés está influida por varios factores de carácter cuantitativo.

- * **Modelo en MSR**
 - Es la ecuación matemática que relaciona la variable de respuesta con los factores estudiados en el diseño.
 - Por lo general es un modelo de regresión múltiple.

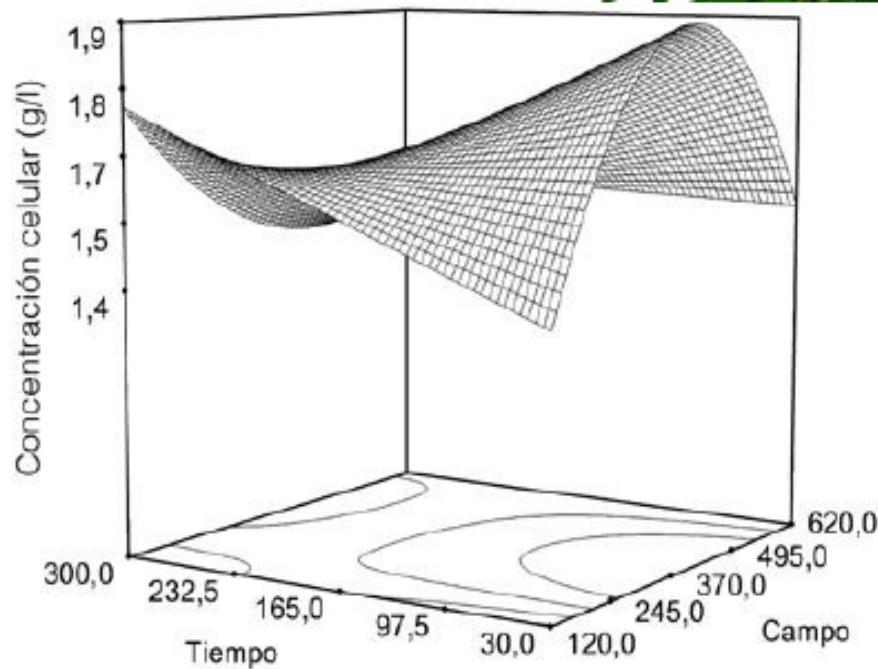


- * Cribado

Etapa inicial de la optimización de un proceso en la que se tienen muchos factores que pueden influir en la variable de interés.

- * Optimización

- Técnica matemática que sirve para extraer la información sobre el punto óptimo que tiene el modelo ajustado



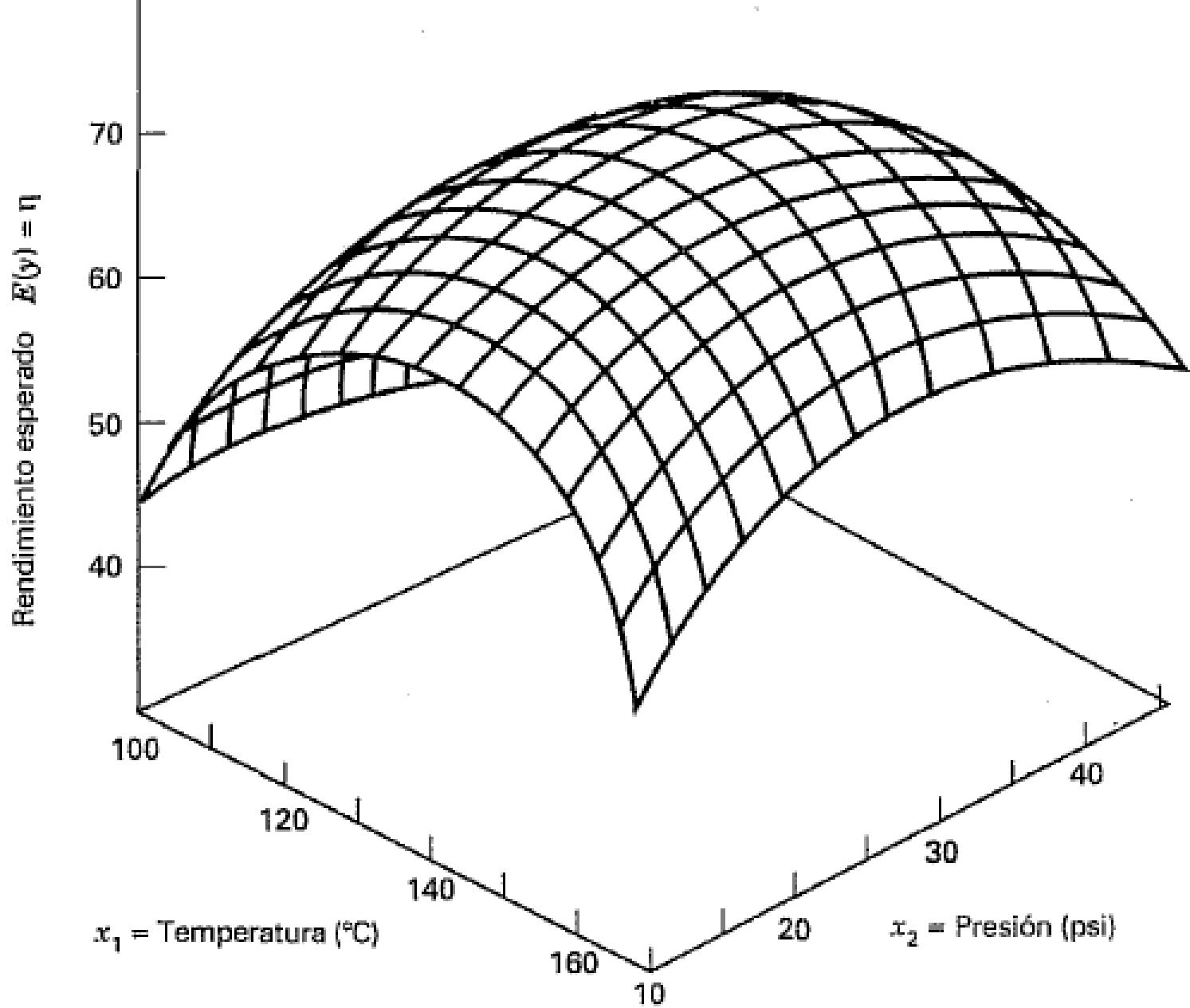


Figura 11-1 Superficie de respuesta tridimensional donde se indica el rendimiento esperado (η) como una función de la temperatura (x_1) y la presión (x_2).

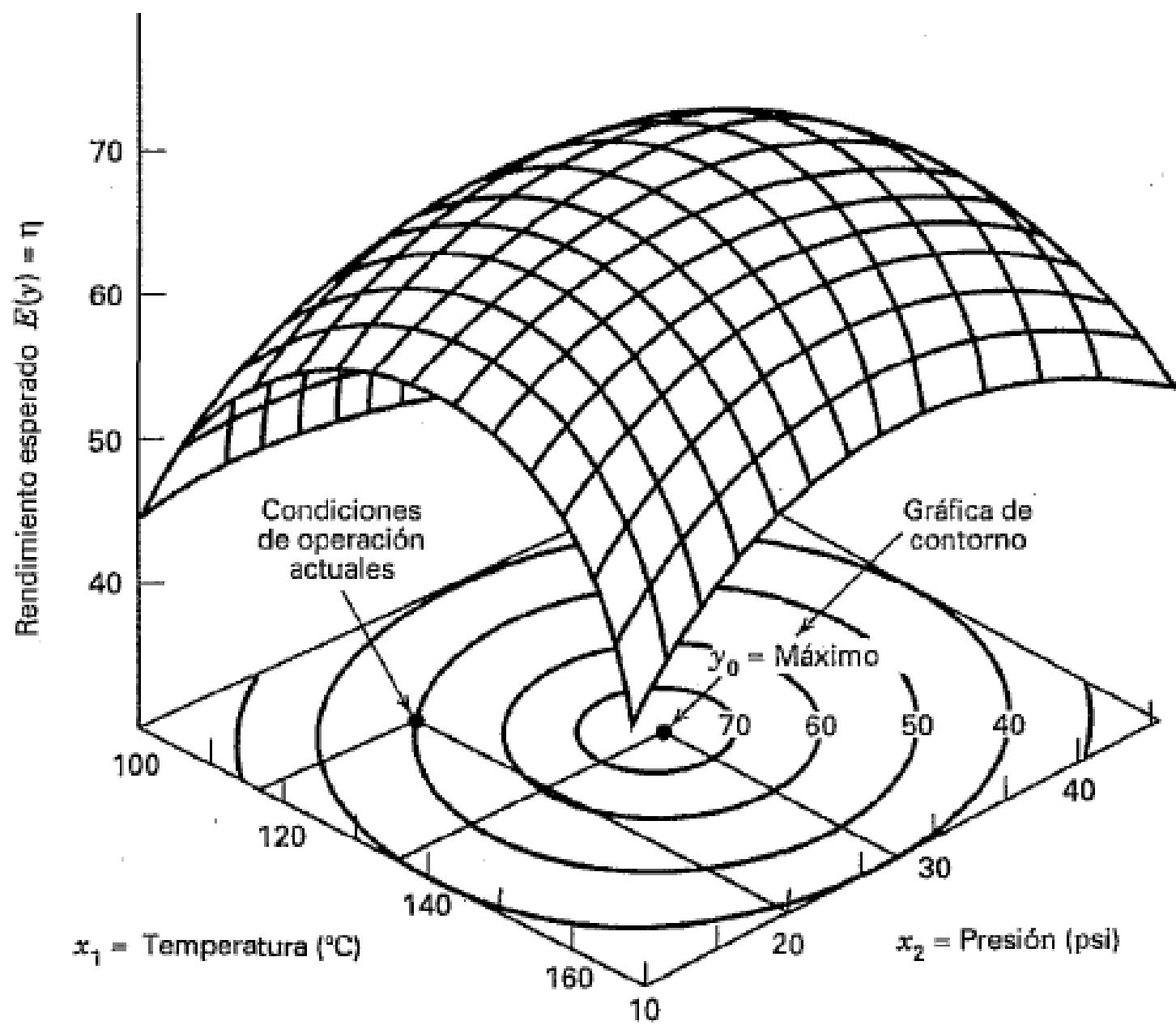


Figura 11-2 Gráfica de contorno de una superficie de respuesta.

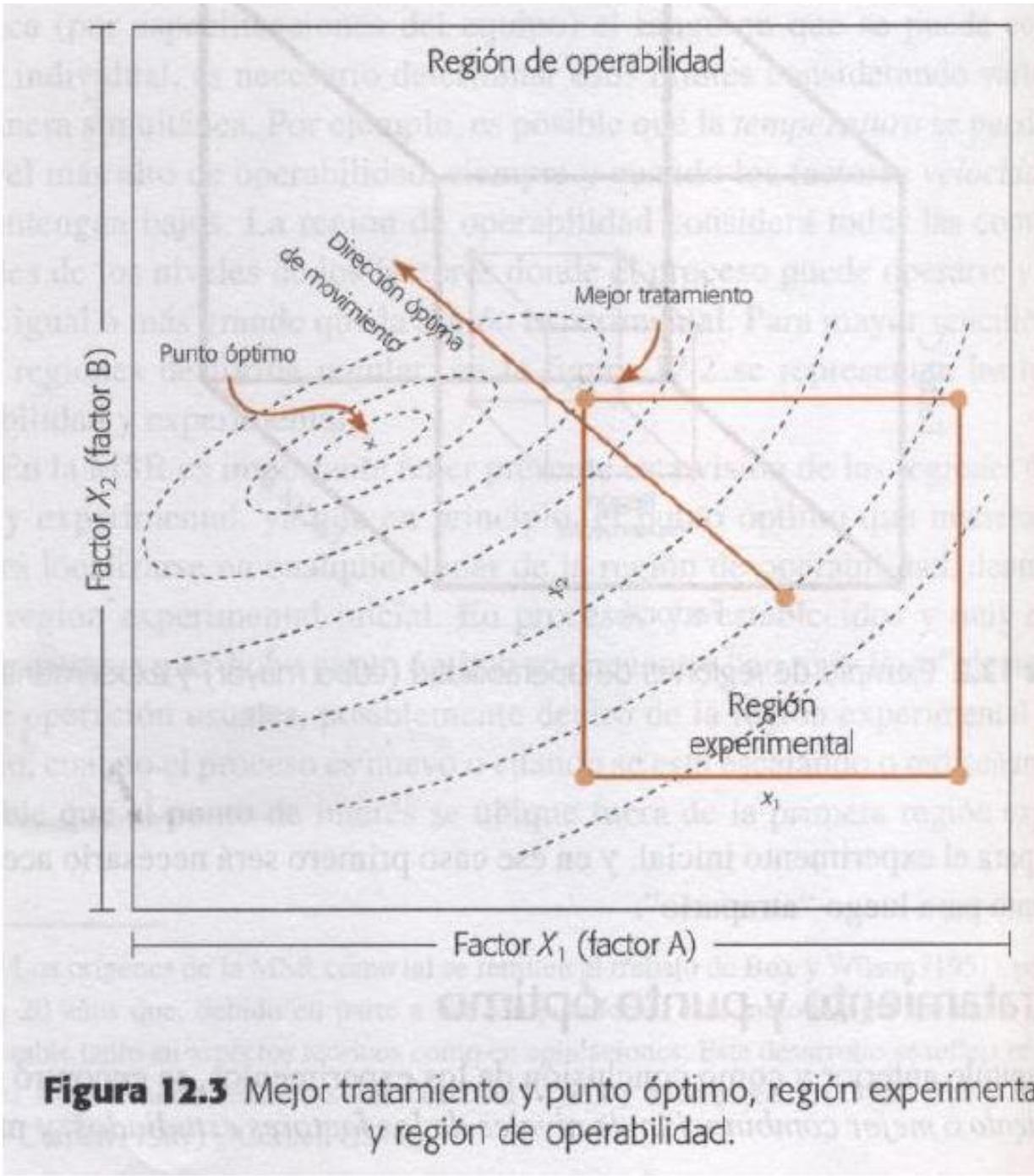


Figura 12.3 Mejor tratamiento y punto óptimo, región experimental y región de operabilidad.

Fuente: Gutiérrez Pulido (2008).

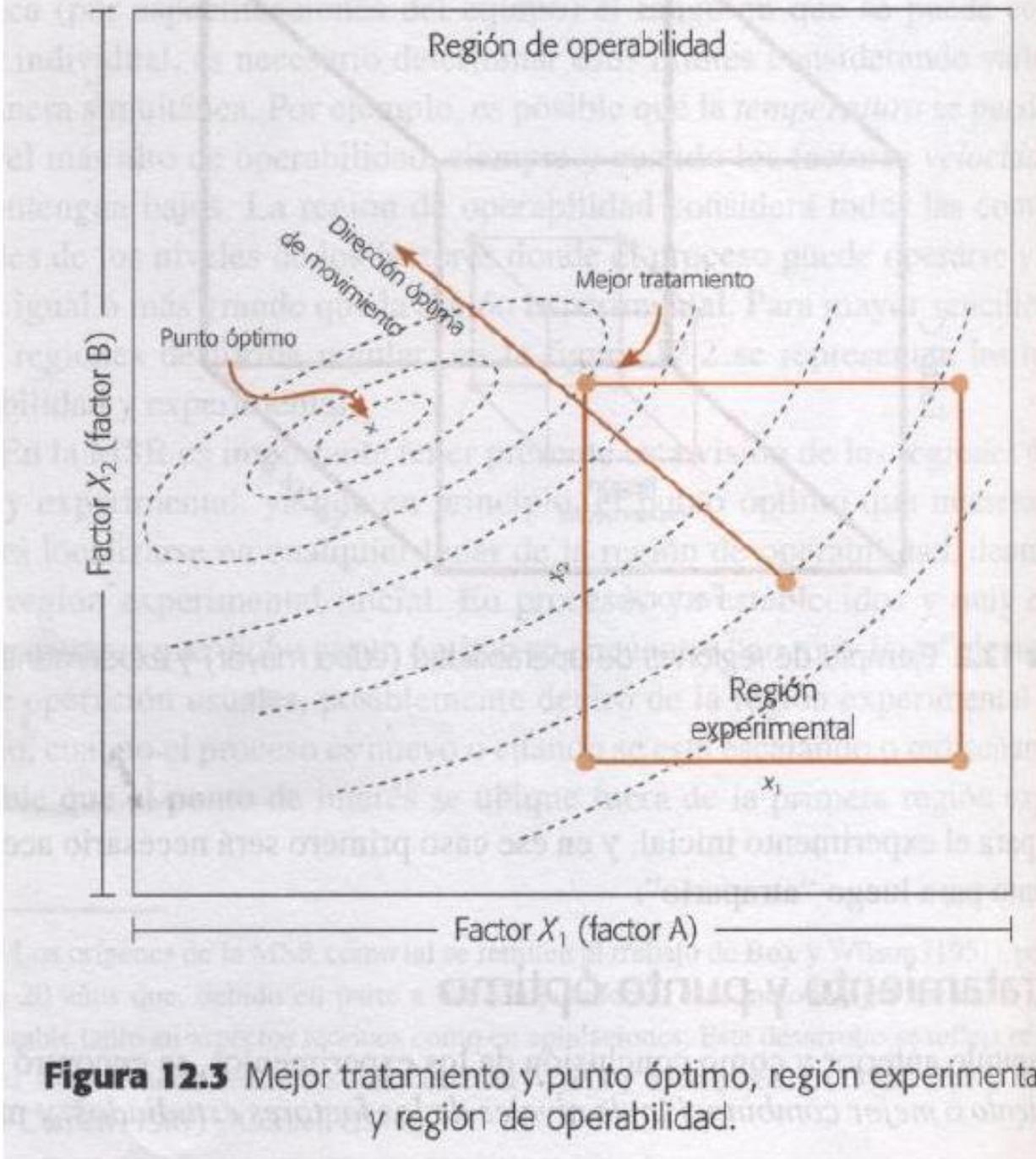


Figura 12.3 Mejor tratamiento y punto óptimo, región experimental y región de operabilidad.

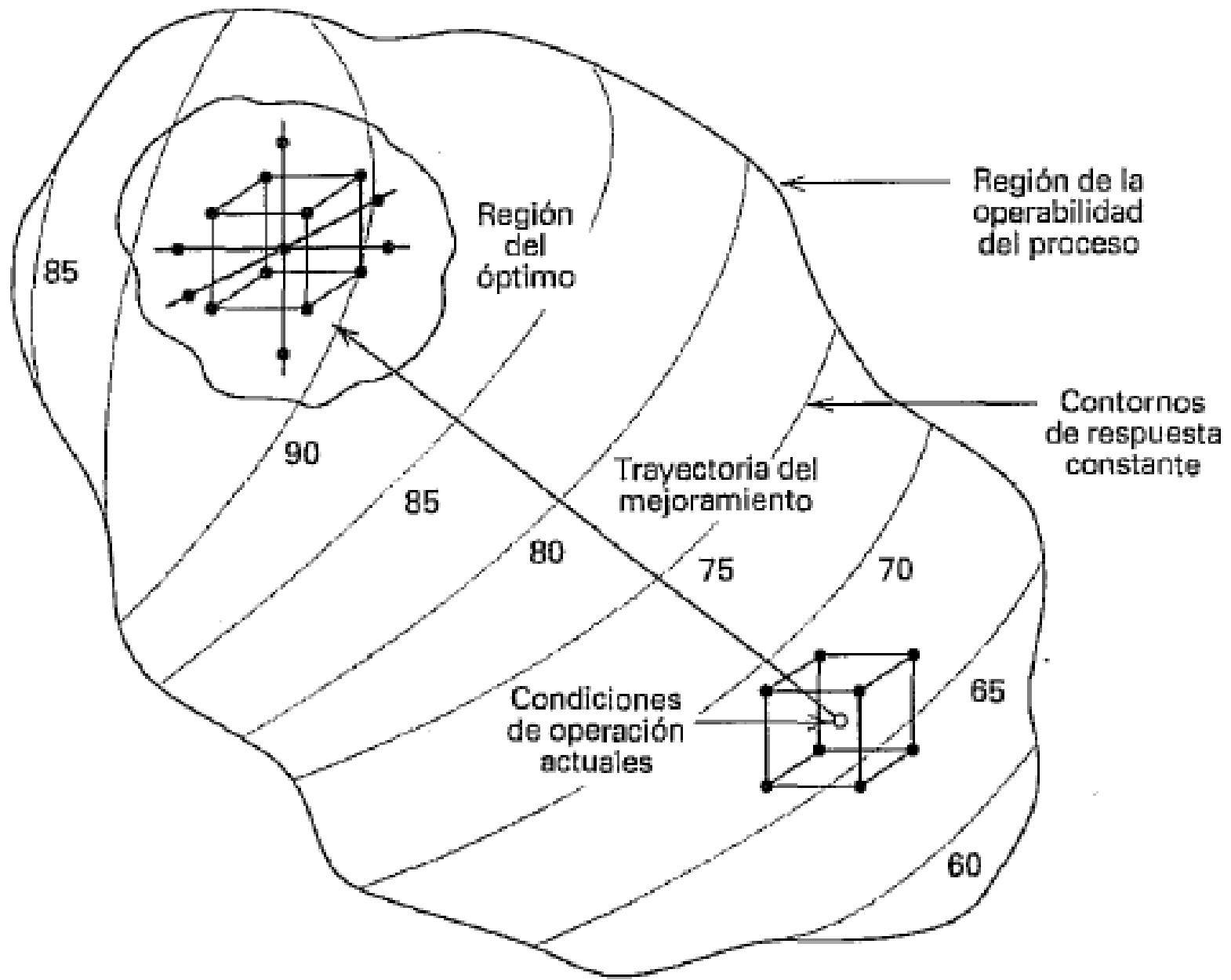


Figura 11-3 El carácter secuencial de la MSR.

a) Gráfica de superficie

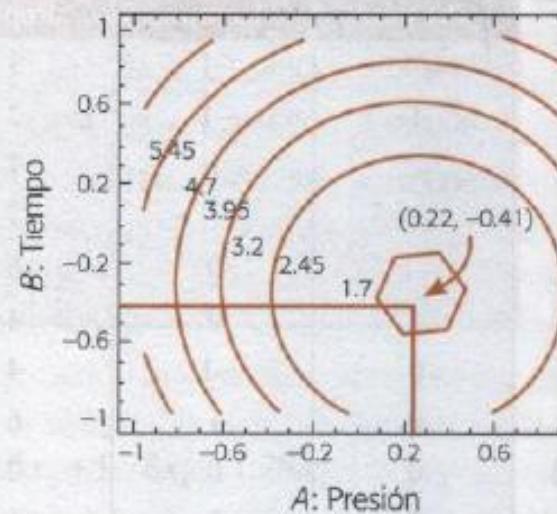
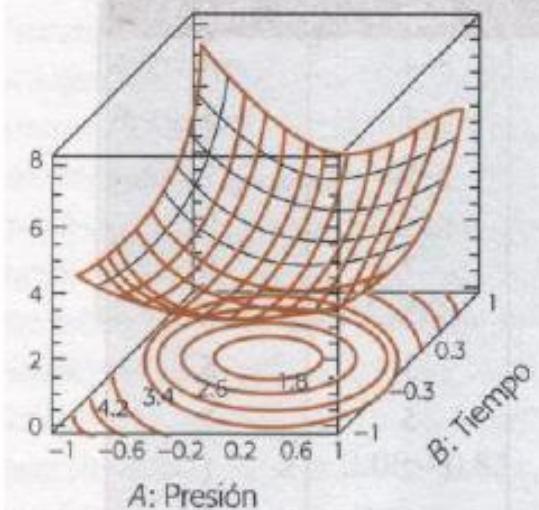


Figura 12.9 Gráficas de superficie y de contornos para modelo de (12.6).

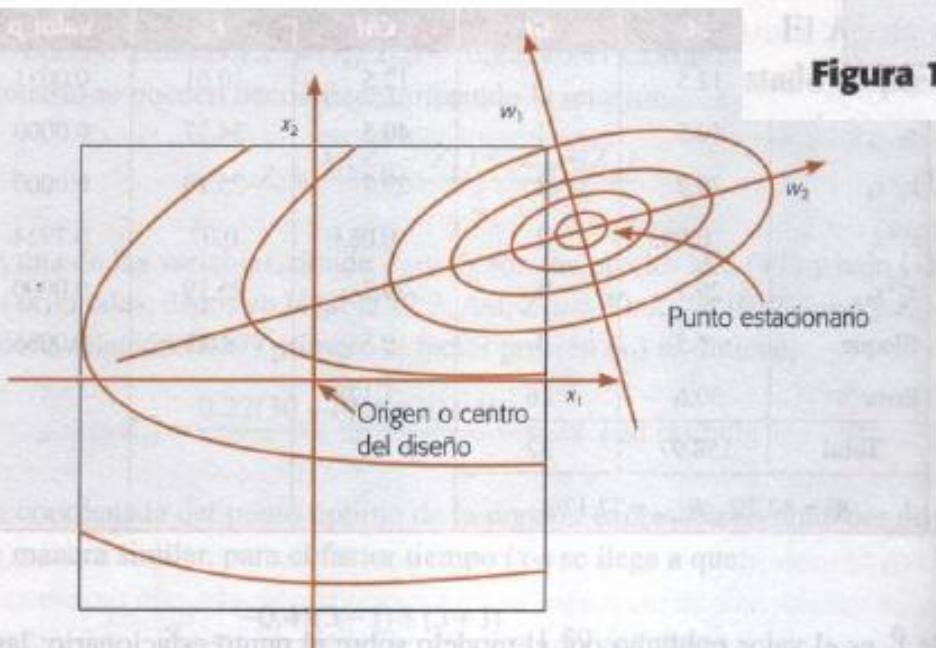


Figura 12.10 Significado gráfico de la ecuación canónica para dos factores.



Fuente: Gutiérrez Pulido (2008).

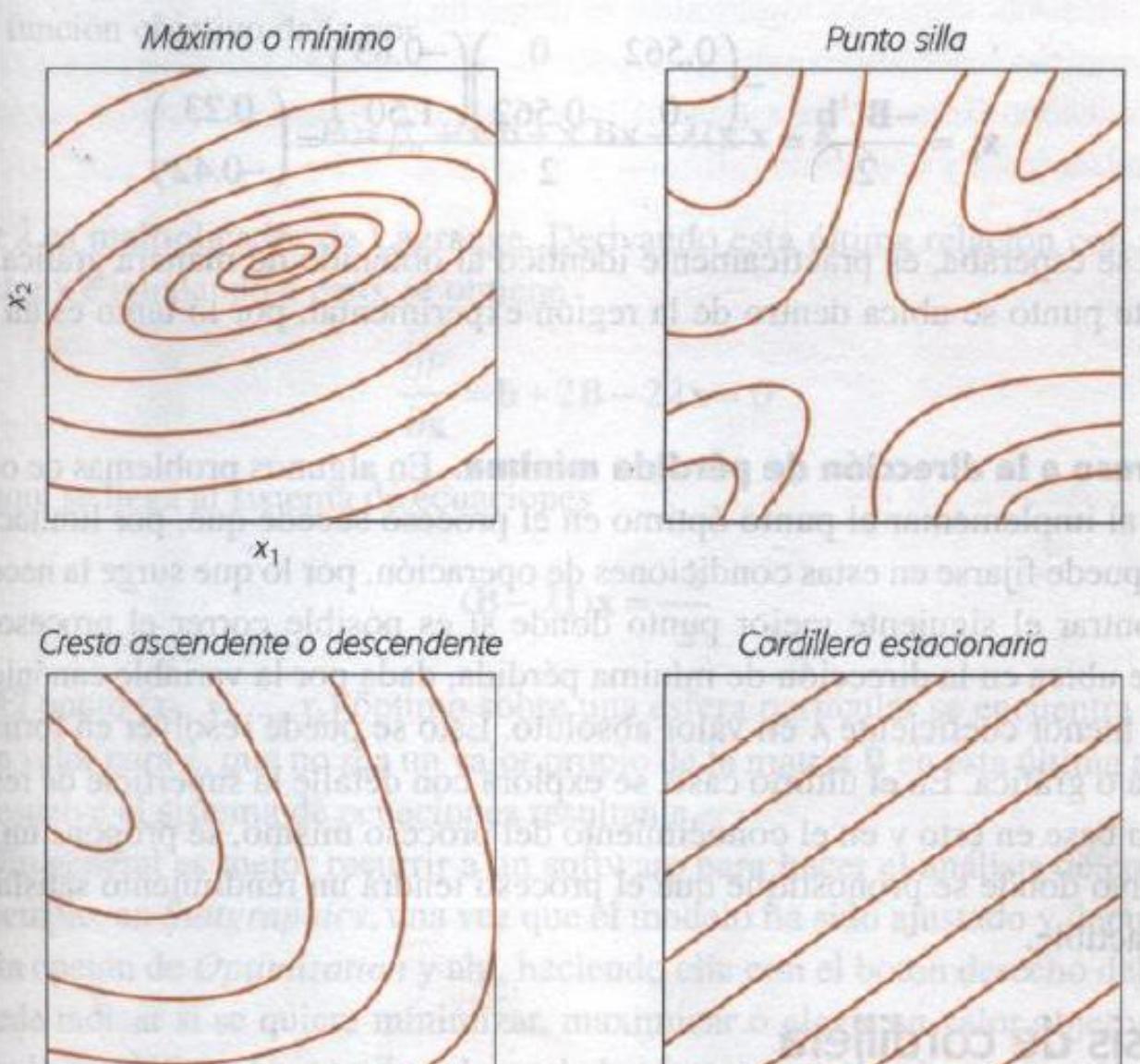
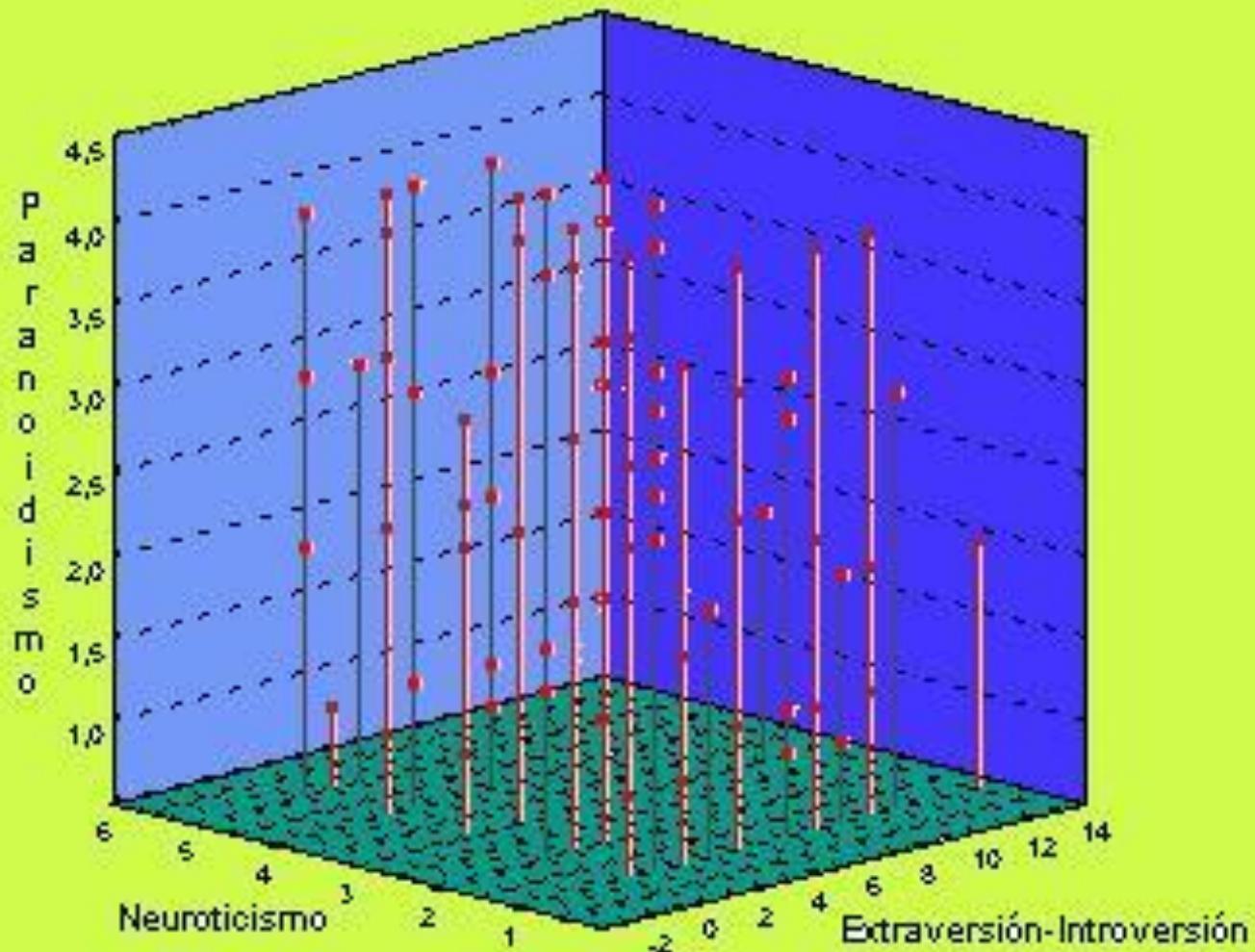
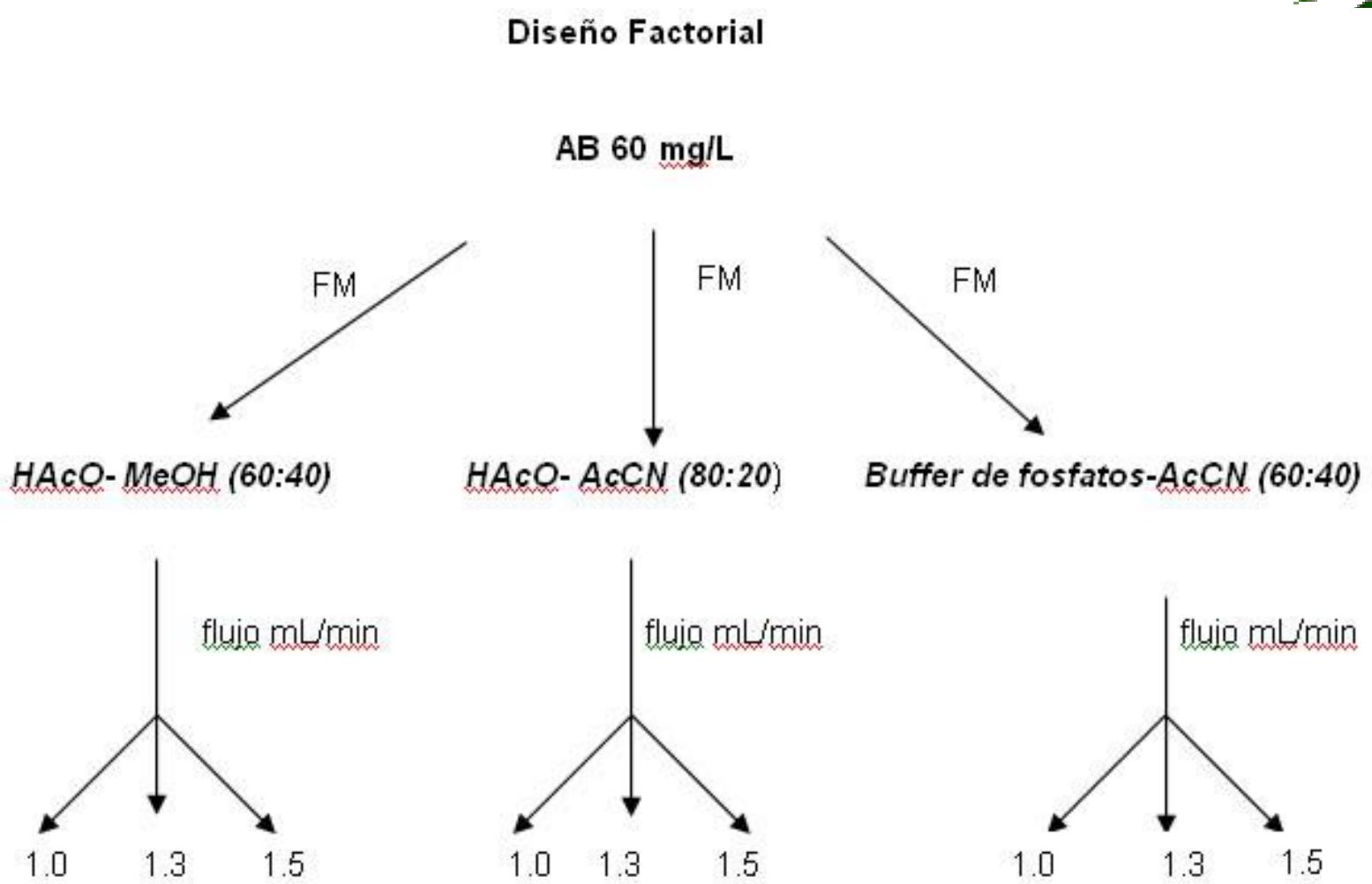


Figura 12.11 Ejemplos de los tipos de superficie de respuesta.

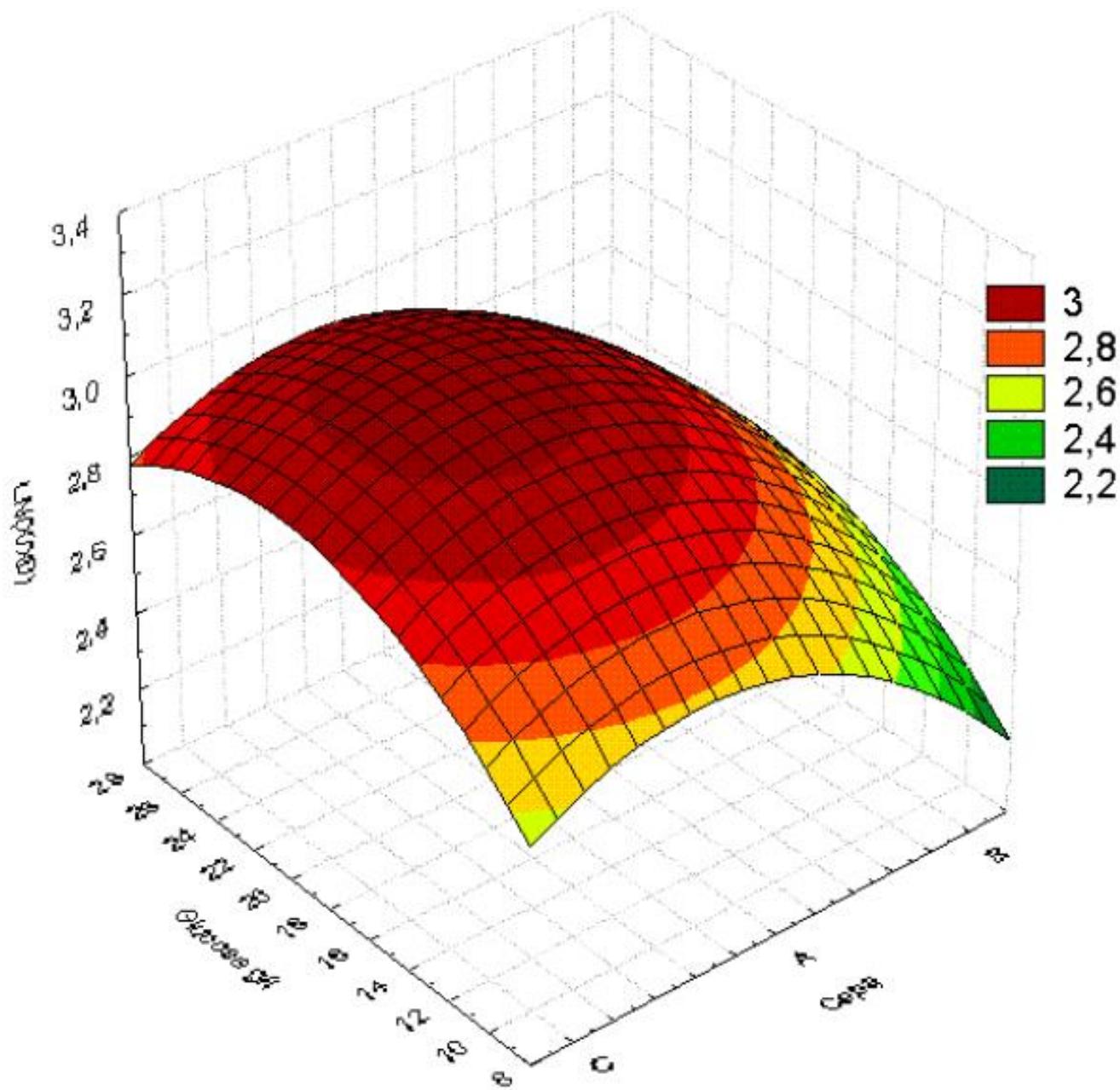
Modelo de Personalidad



ARREGLO FACTORIAL VS SUPERFICIE DE RESPUESTA

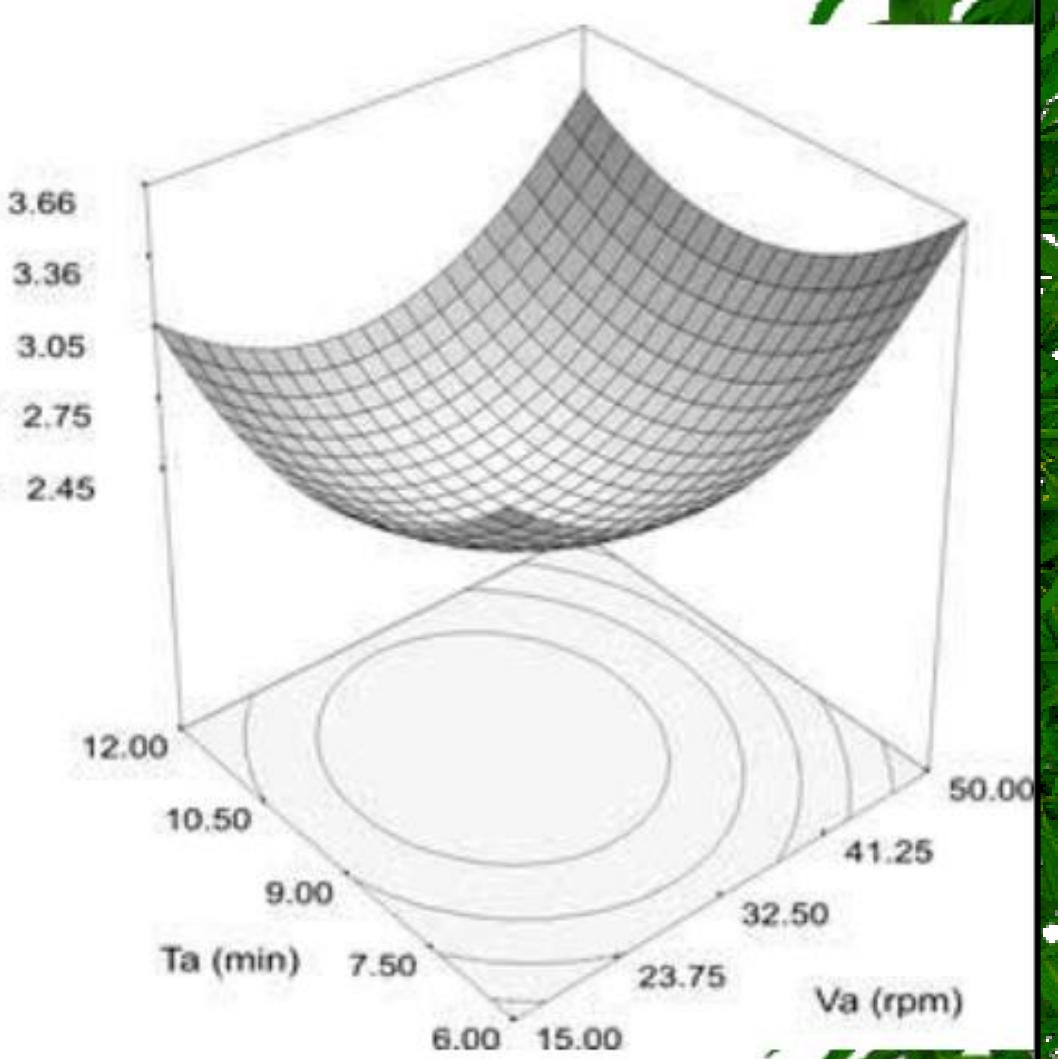
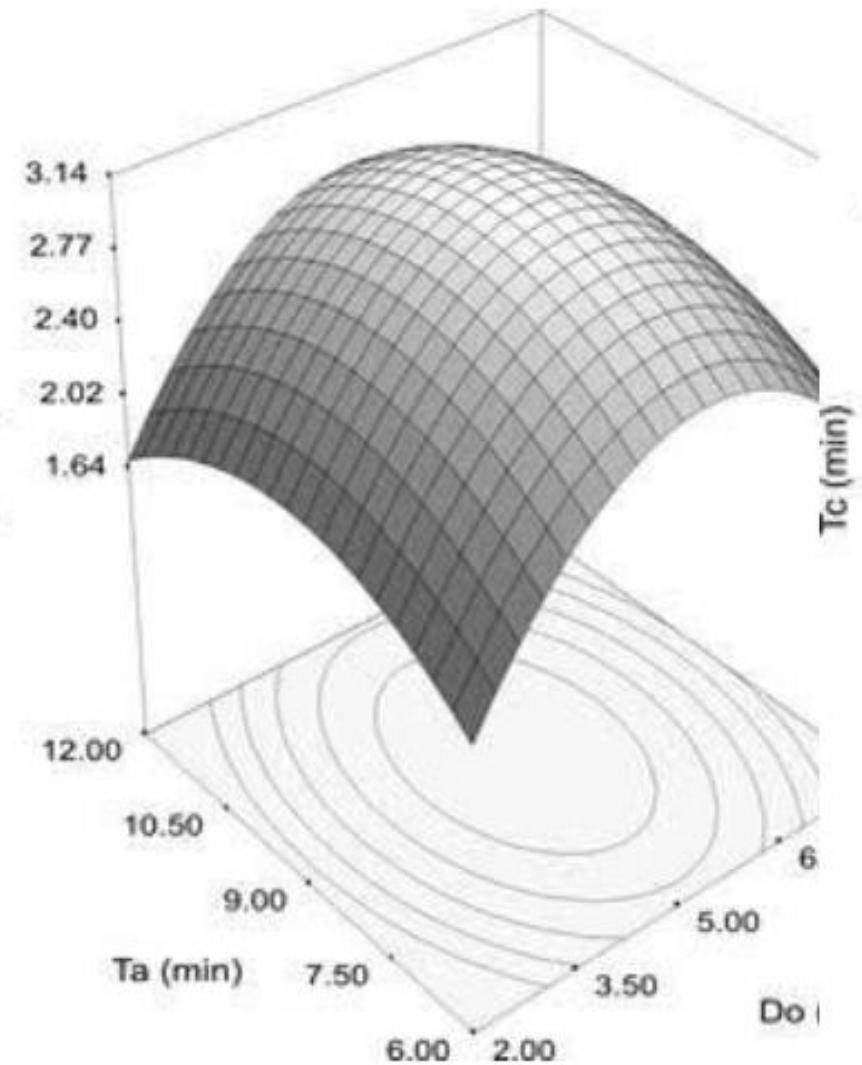


$$\ln(X/X_0) = -2032,069 + 40,0398 \cdot x + 0,0476 \cdot y - 0,197 \cdot x^2 + 0,0005 \cdot x \cdot y - 0,0024 \cdot y^2$$

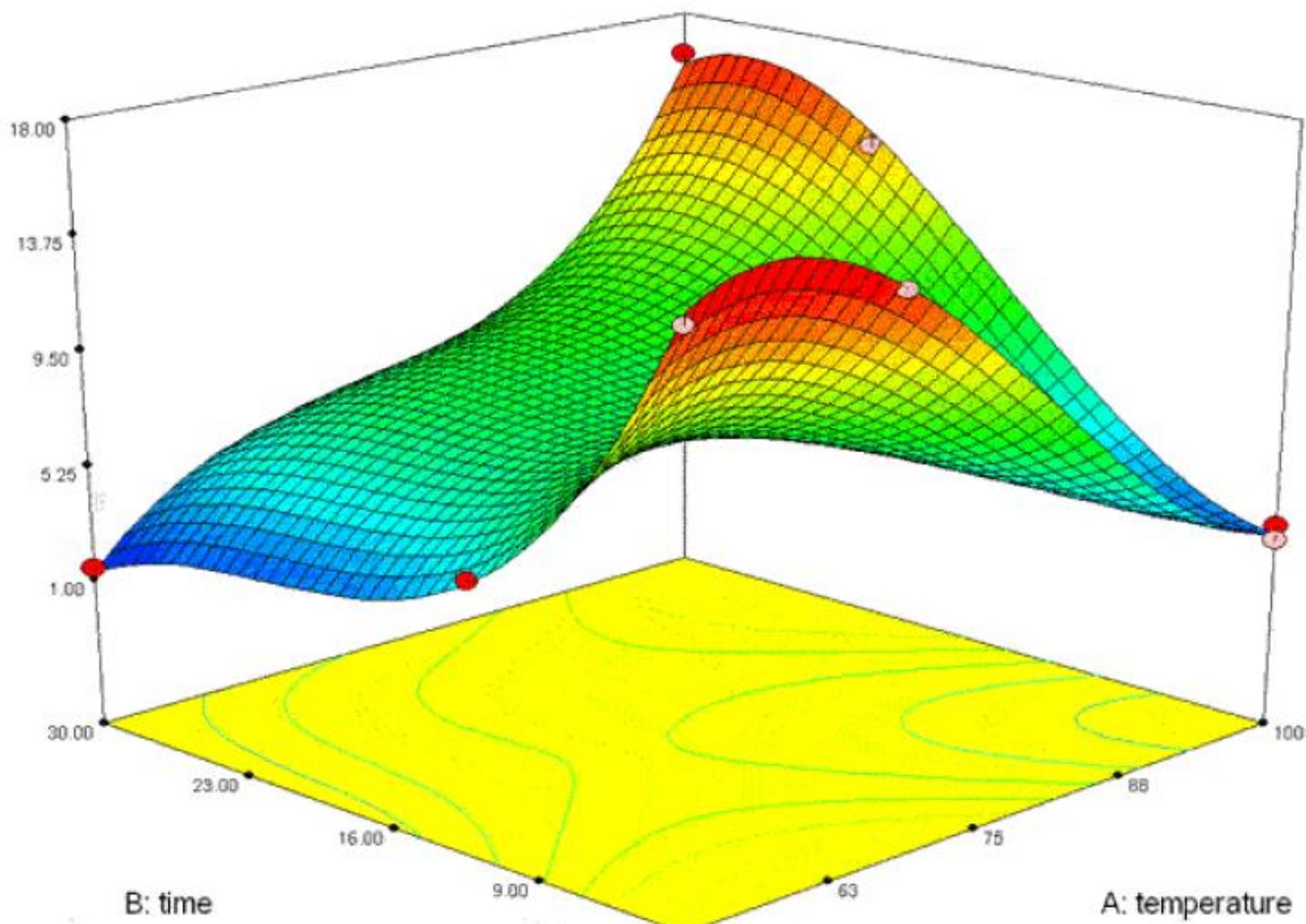


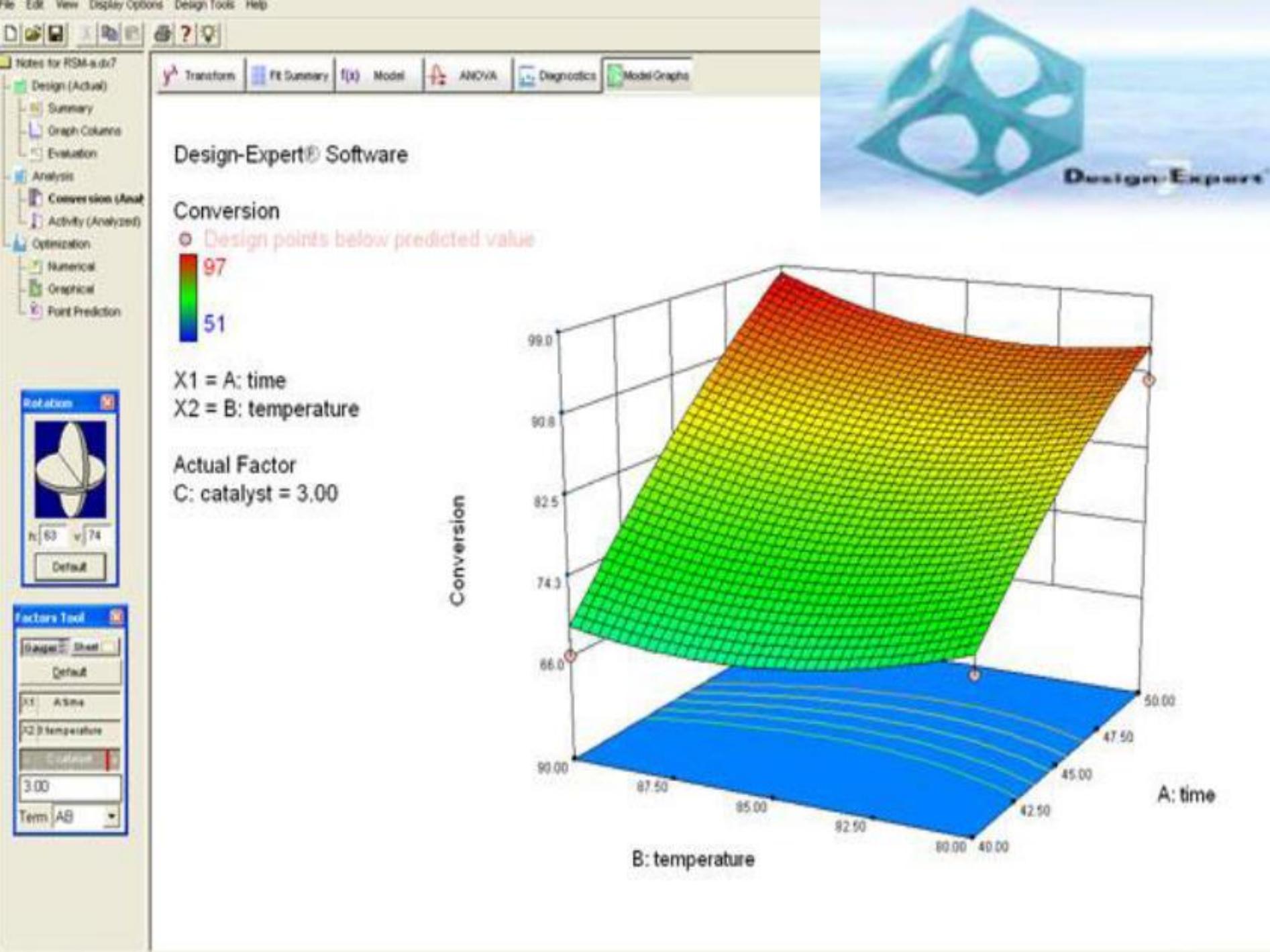
Máximo

Mínimo



Crispness





STATISTICA



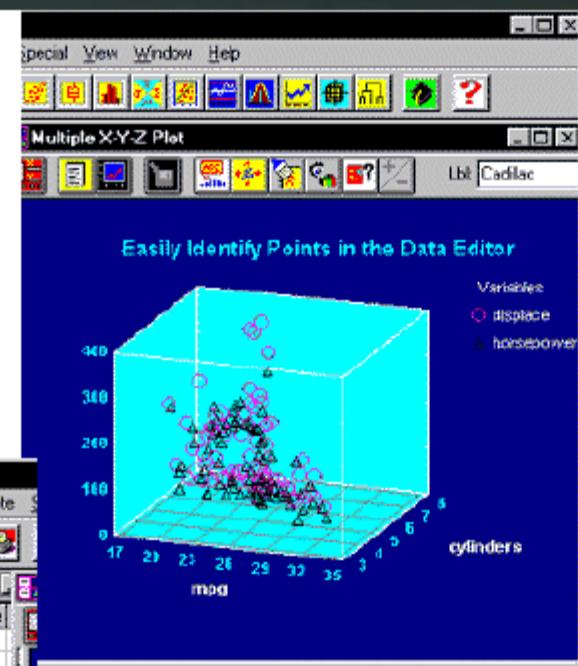
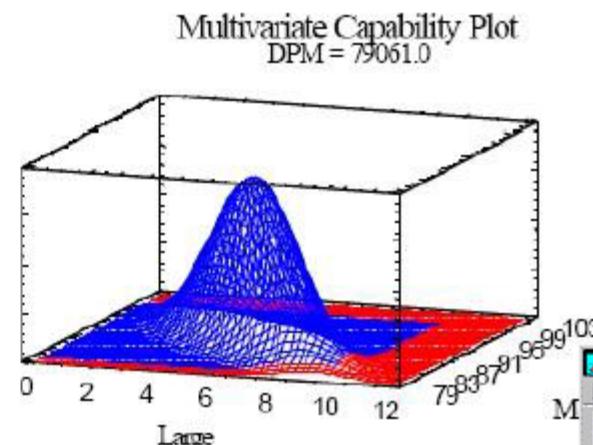
STATISTICA
Release 8

StatSoft®

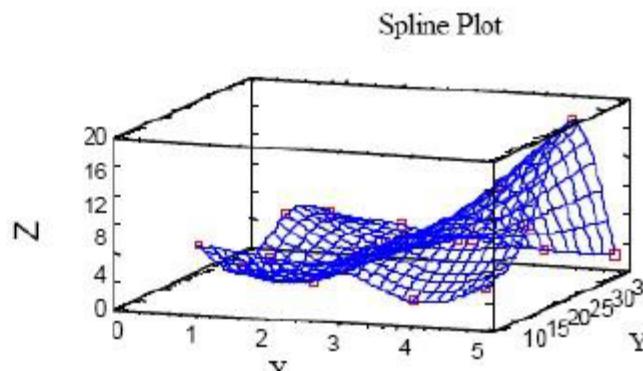


STATGRAPHICS PLUS 5.1

New multivariate capability analysis procedure



New spline plots



Find the reference button to select options





Modelos

Como se explicó antes, las superficies de respuesta se caracterizan ajustando un modelo a los datos experimentales. Los modelos que se utilizan en MSR son básicamente polinomios. De esta manera, si se tienen k factores, el *modelo de primer orden* está dado por:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon \quad (12.1)$$

y el *modelo de segundo orden* es:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1 < j=1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (12.2)$$



Response surface methodology

RSM characteristics

Models are simple polynomials

Include terms for interaction and curvature

Coefficients are usually established by regression analysis with a computer program

Insignificant terms are discarded

Model equation for 2 factors

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_1^2 + \beta_4 X_2^2 + \beta_5 X_1 X_2 + \epsilon$$

constant
main effects
curvature
interaction
error

Higher order interaction terms
are not included

Model equation for 3 factors

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 + \epsilon$$

constant
main effects
curvature
interactions
error

Diseño Box- Behnken



Diseño de Box-Behnken

- Es un **diseño esférico**, con todos los puntos localizados en una esfera de radio $2^{1/2}$.
- Asimismo, el diseño de Box-Behnken **no contiene ningún punto en los vértices** de la región cúbica creada por los límites superior e inferior de cada variable.
- Esto podría ser **una ventaja** cuando los puntos de los vértices del cubo representan combinaciones de los niveles de los factores cuya **prueba es prohibitivamente costosa** o imposible debido a restricciones físicas del proceso.



Tabla 11-8 Diseño de Box-Behnken
para tres variables

Corrida	x_1	x_2	x_3
1	-1	-1	0
2	-1	1	0
3	1	-1	0
4	1	1	0
5	-1	0	-1
6	-1	0	1
7	1	0	-1
8	1	0	1
9	0	-1	-1
10	0	-1	1
11	0	1	-1
12	0	1	1
13	0	0	0
14	0	0	0
15	0	0	0



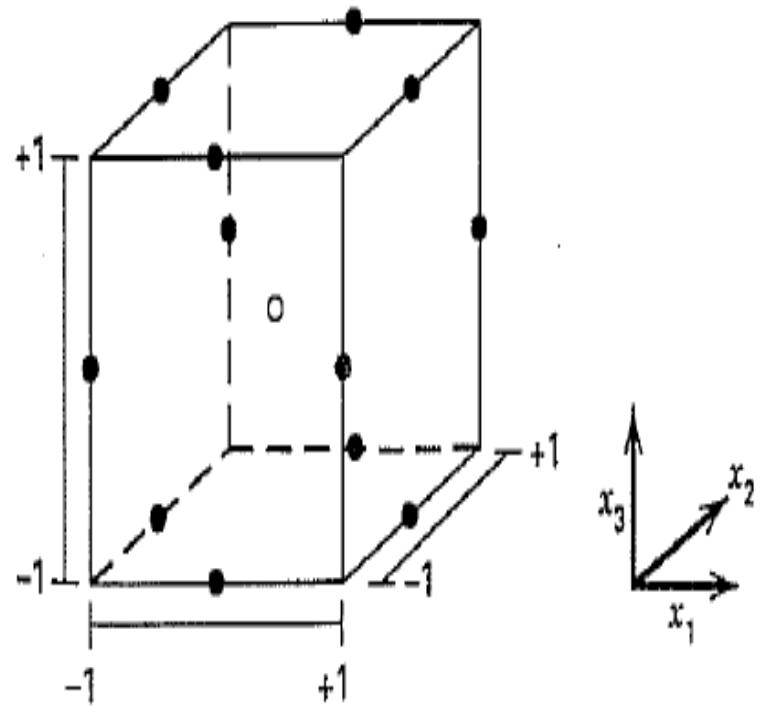


Figura 11-22 Diseño de Box-Behnken para tres factores.

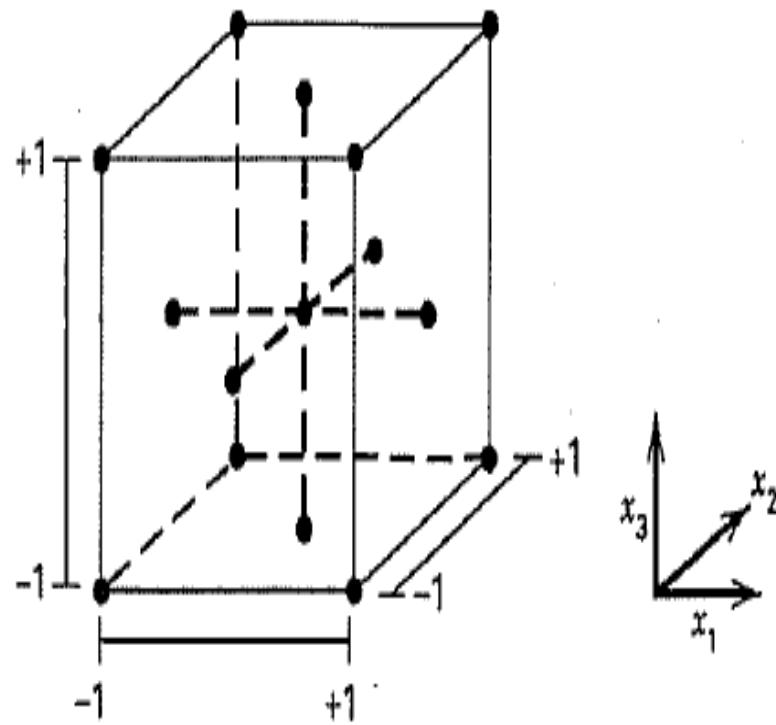
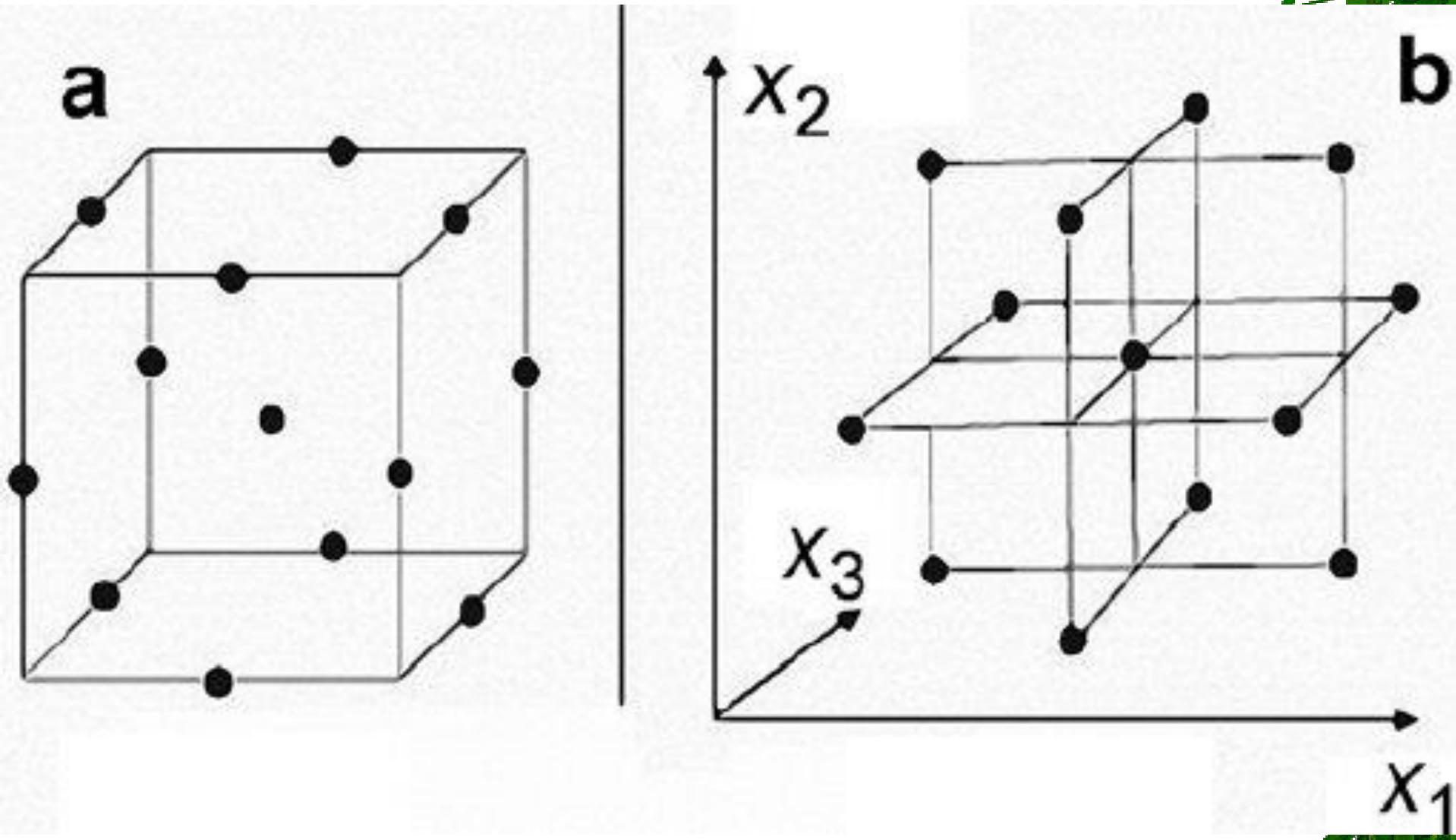


Figura 11-23 Diseño central compuesto con centros en las caras para $k = 3$.



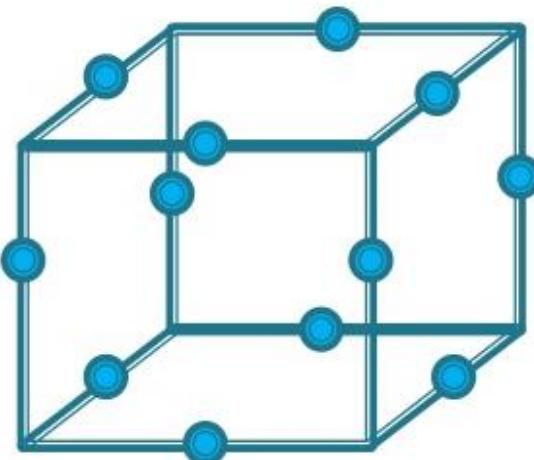


Response surface methodology

Box Behnen

- It is portion of 3^k Factorial
- 3 levels of each factor is used
- Center points should be included
- It is possible to estimate main effects and second order terms
- Box-Behnken experiments are particularly useful if some boundary areas of the design region are infeasible, such as the extremes of the experiment region

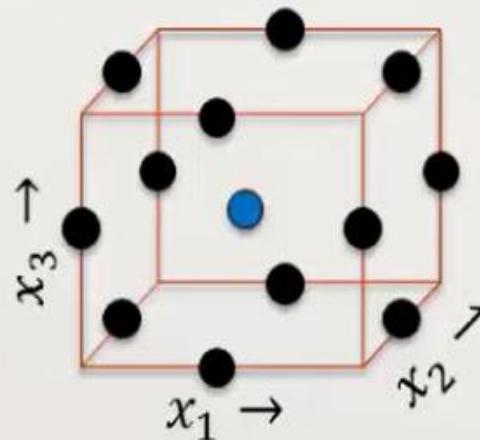
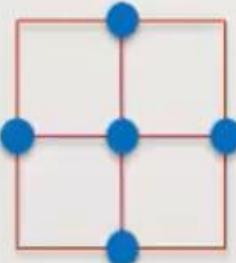
eg. 3 factor



12 experiments

Box-Behnken Design

- Put a data point in the center, then one data point at the midpoints of each edge of the process space
 - Does not contain an embedded factorial design
 - No corner (extreme) points

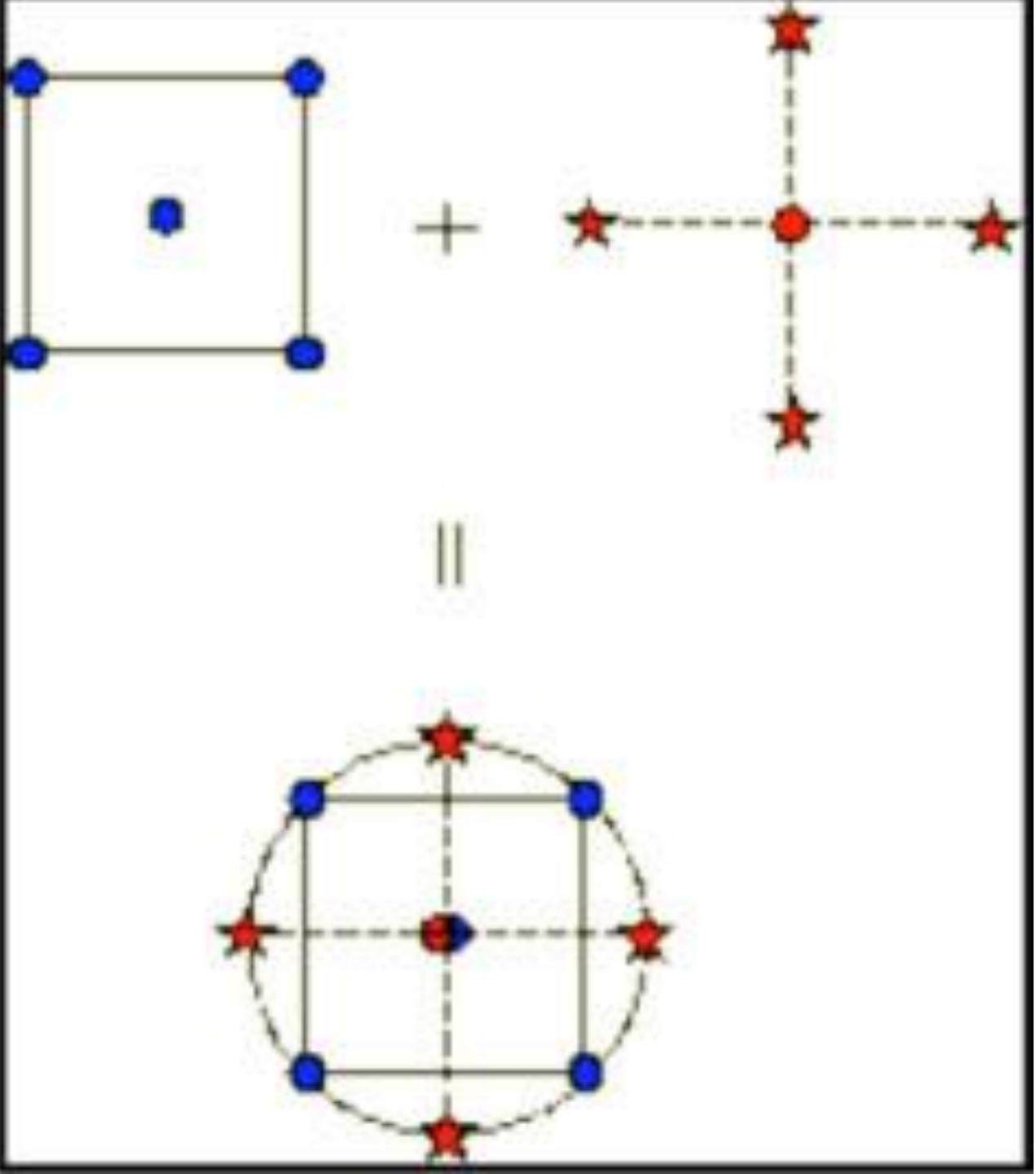


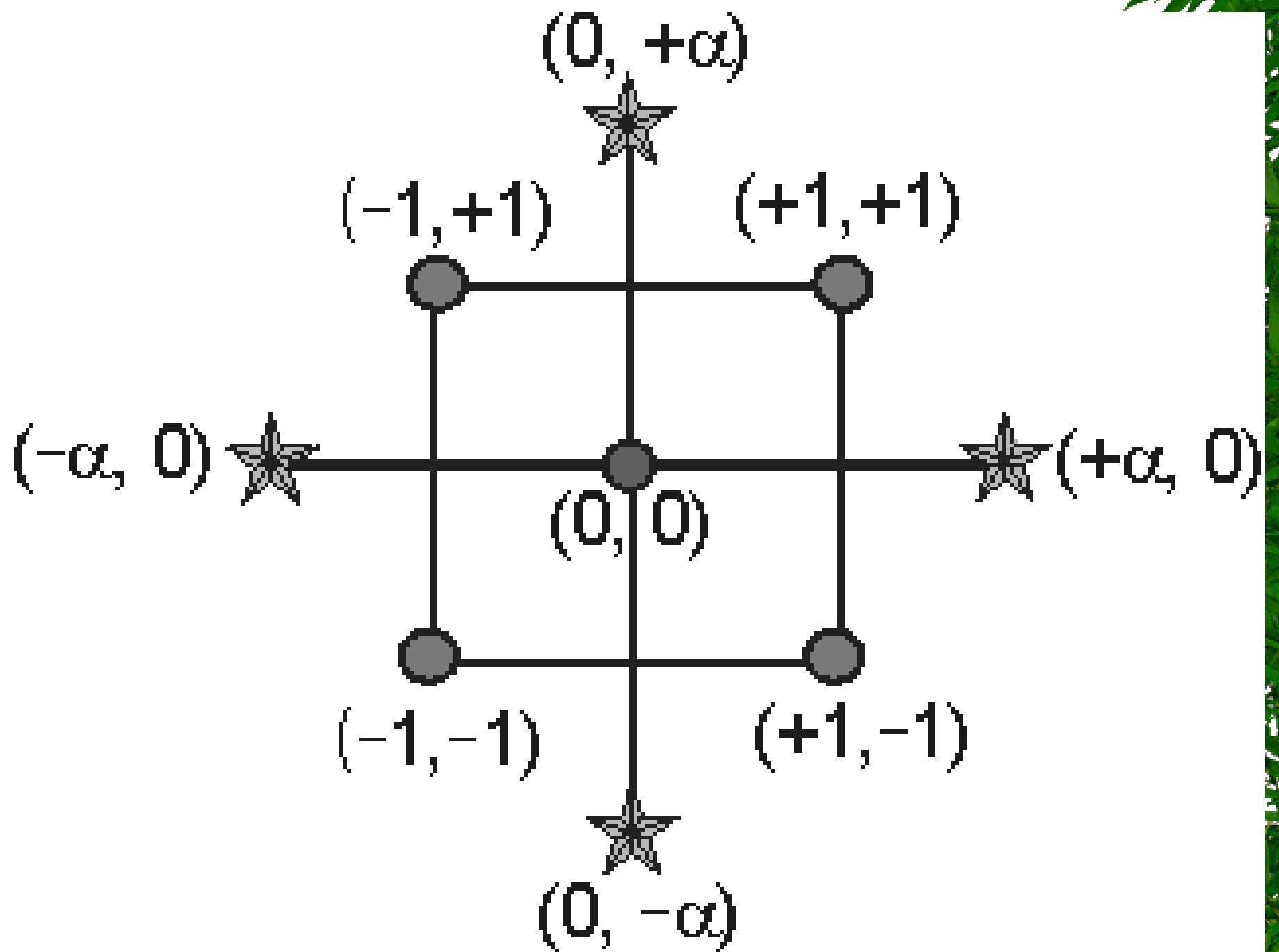
Diseño Central Compuesto (CCD)



- **La rotabilidad** es una base razonable para la selección de un diseño de superficie de respuesta.
- Puesto que la finalidad de la **MSR** es la **optimización**, y la localización del óptimo se desconoce antes de correr el experimento, tiene sentido el uso de un diseño que proporcione una precisión de estimación igual en todas las direcciones (**puede demostrarse que cualquier diseño de primer orden ortogonal es rotable**).



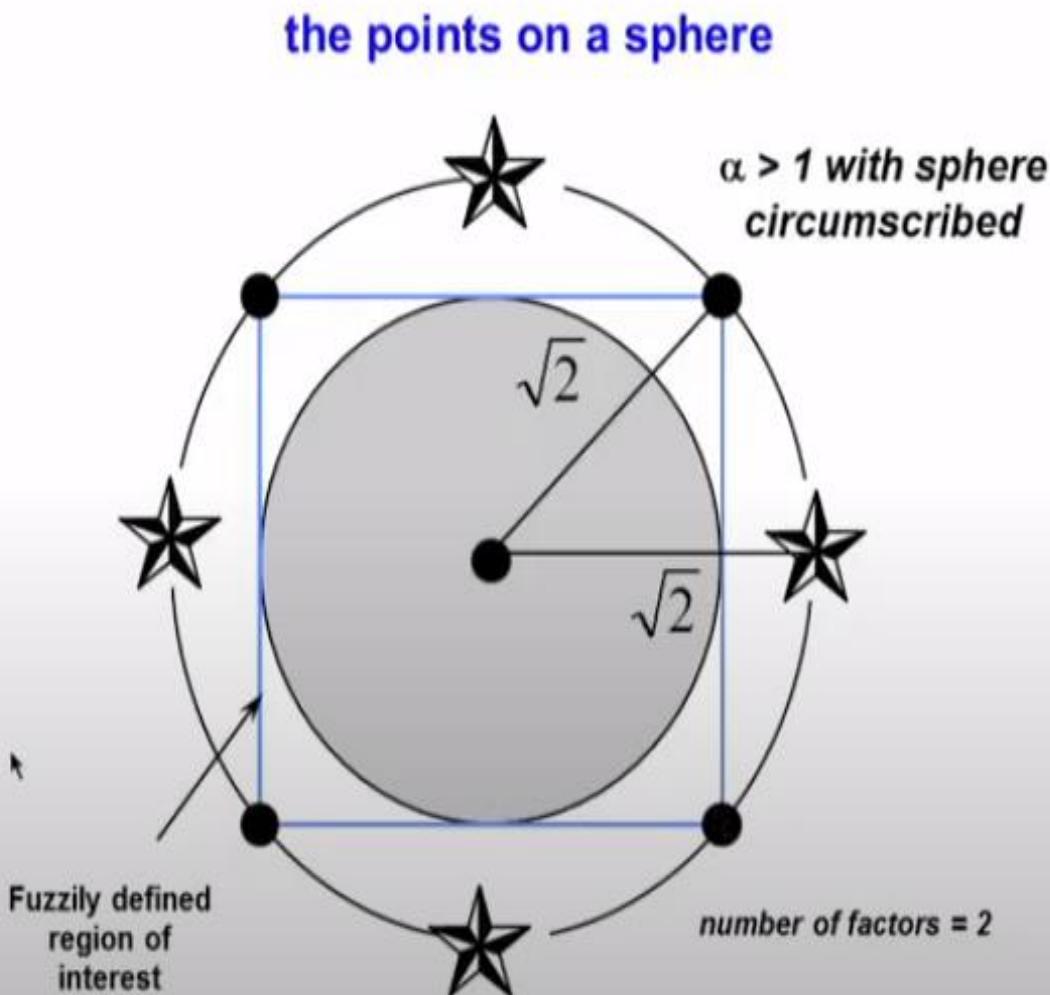




The Optimal Value of α

For three-dimensional case, it is $\sqrt{3}$.

For six dimensional case, it is $\sqrt{6} = 2.44$.



- Un diseño central compuesto se hace rotable **mediante la elección de “ α ”.**
- El valor de “ α ” para la rotabilidad **depende del número de puntos en la porción factorial del diseño;** de hecho, “ α ” = $(n_f)^{1/4}$ produce un diseño central compuesto rotable, donde **n_f es el número de puntos usados en la porción factorial del diseño.**



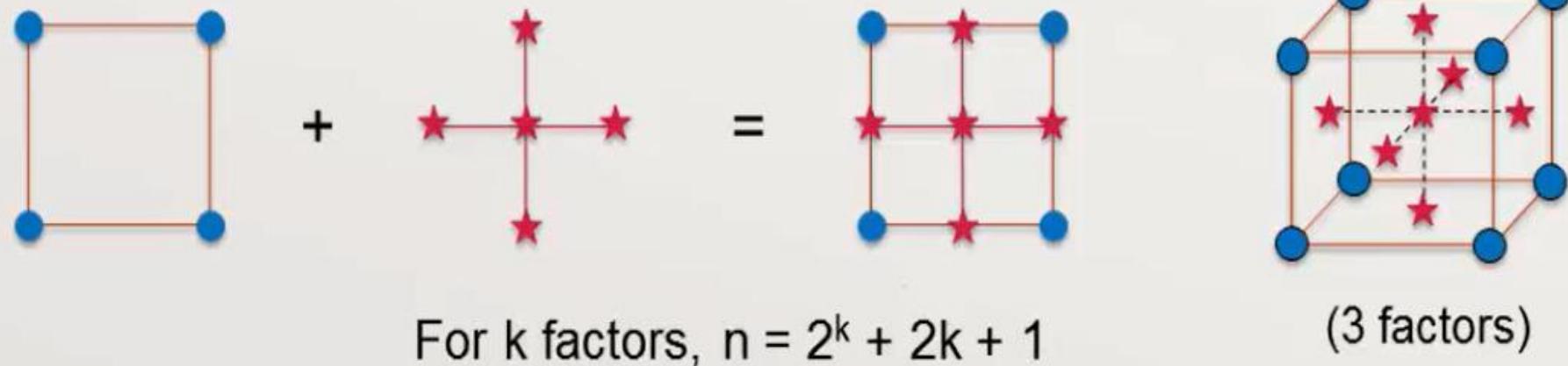
Design	Rotatable	Factor Levels	Uses Points Outside ± 1	Accuracy of Estimates
Circumscribed (CCC)	Yes	5	Yes	Good over entire design space
Inscribed (CCI)	Yes	5	No	Good over central subset of design space
Faced (CCF)	No	3	No	Fair over entire design space; poor for pure quadratic coefficients

Central Composite Designs

- Central Composite Circumscribed



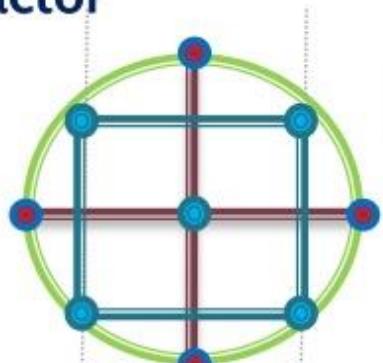
- Central Composite Face-centered



Response surface methodology

Central composite design (CCD)

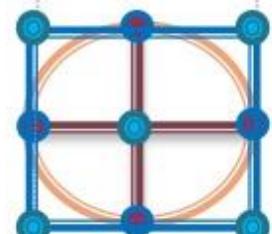
e.g. 2 factor



Central composite circumscribed (CCC)

5 Levels

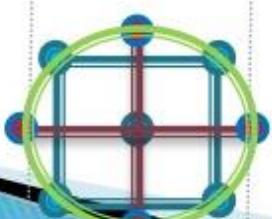
α (star point) are beyond levels



Central composite face centered (CCF)

3 Levels

α (star point) are within levels (center)



Central composite inscribed (CCI)

5 Levels

α (star point) are within levels

Scale down of CCC

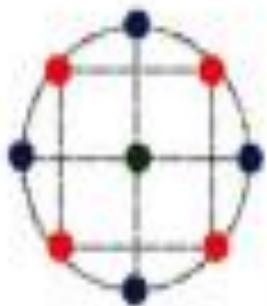


Plan

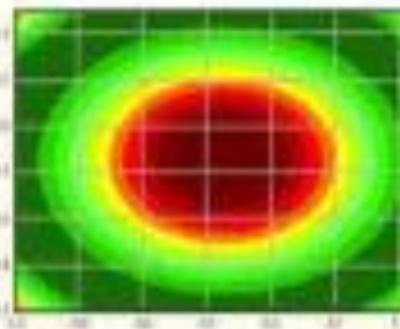
Standard deviations and parameter correlations

Prediction variances

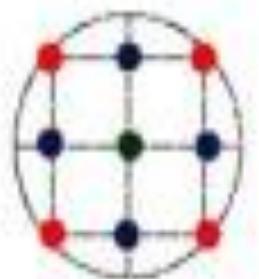
Rotatable



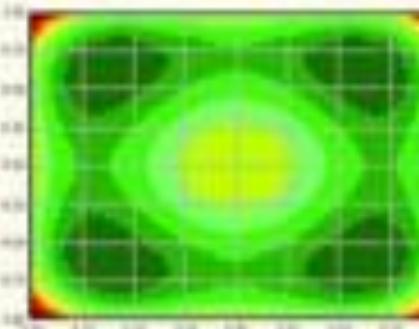
	s(b)	Cst	X ₁	X ₂	X ₁ ²	X ₂ ²	X ₁ X ₂
Cst	1	1	0	0	.48	-.48	0
X ₁	.35		1	0	0	0	0
X ₂	.35			1	0	0	0
X ₁ ²	.48				1	.47	0
X ₂ ²	.48					1	0
X ₁ X ₂	.5						1



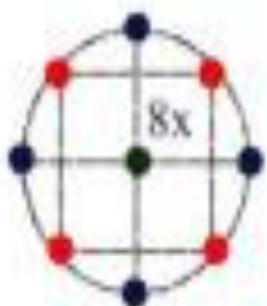
Orthogonal



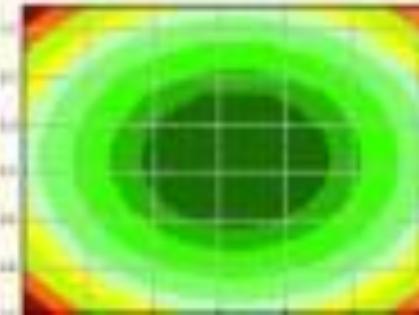
	s(b)	Cst	X ₁	X ₂	X ₁ ²	X ₂ ²	X ₁ X ₂
Cst	.75	1	0	0	-.63	-.63	0
X ₁	.41		1	0	0	0	0
X ₂	.41			1	0	0	0
X ₁ ²	.71				1	0	0
X ₂ ²	.71					1	0
X ₁ X ₂	.5						1



**Rotatable
and
orthogonal**

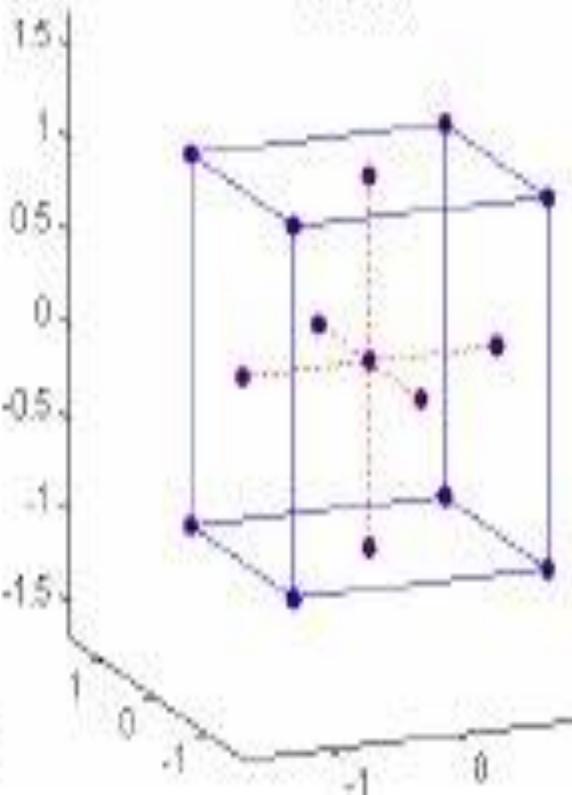


	s(b)	Cst	X ₁	X ₂	X ₁ ²	X ₂ ²	X ₁ X ₂
Cst	.35	1	0	0	-.5	-.5	0
X ₁	.35		1	0	0	0	0
X ₂	.35			1	0	0	0
X ₁ ²	.35				1	0	0
X ₂ ²	.35					1	0
X ₁ X ₂	.5						1

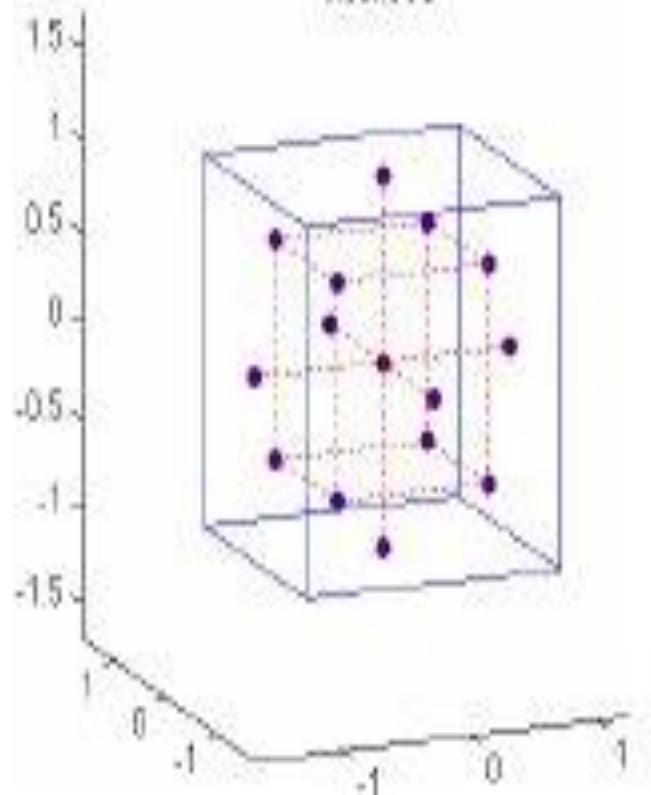




Faced



Inscribed



Circumscribed

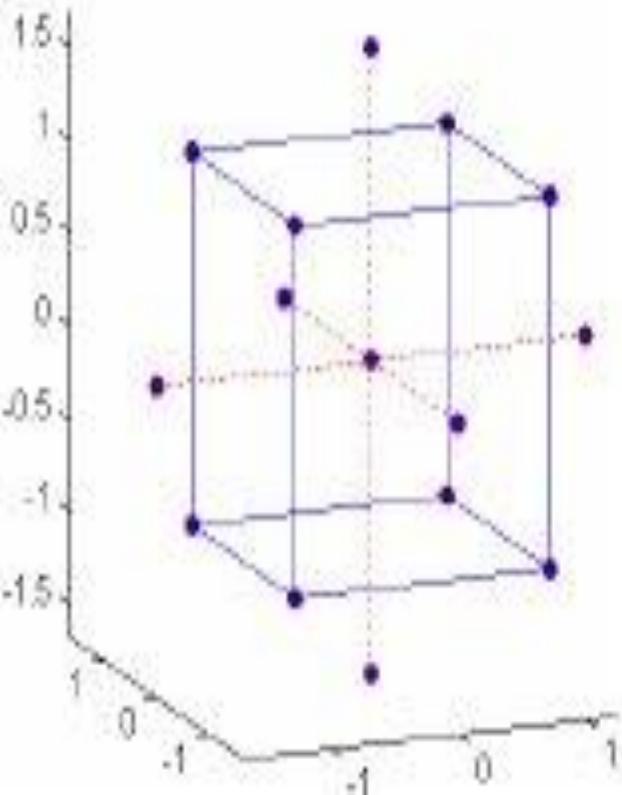




Table 6.2. Parameters of rotatable, orthogonal and rotatable-orthogonal CC designs where N_f is the number of experiments of a factorial design, N is the total number of trials and k is the number of factors

Design	α	Number of points at the center
Rotatable	$\alpha = \sqrt[4]{N_f}$	$N_0 = 1$
Orthogonal	$\alpha = \sqrt{\frac{\sqrt{N_f * N} - N_f}{2}}$	$N_0 = 1$
Rotatable and orthogonal	$\alpha = \sqrt[4]{N_f}$	$N_0 = 4\sqrt{N_f} + 4 - 2k$



Response surface methodology

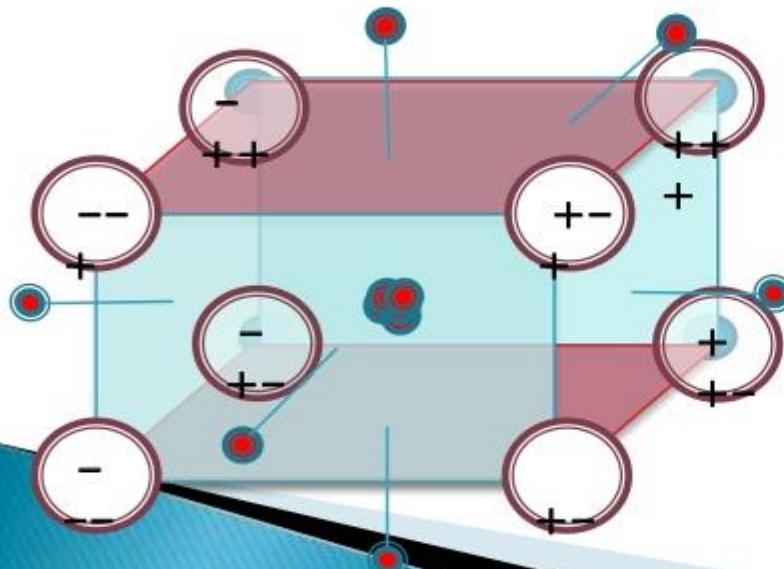
Central composite design (CCD)

Central composite circumscribed (CCC)

3 factors

Total exp: 20

Full factorial 8
Axial points 6
Center points 6



Pattern	X1	X2	X3
+++	1	1	1
++-	1	1	-1
+-+	1	-1	1
+--	1	-1	-1
--+	-1	1	1
--	-1	1	-1
---	-1	-1	1
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
00a	0	0	-1.68179
00A	0	0	1.681793
0a0	0	-1.68179	0
0A0	0	1.681793	0
A00	1.681793	0	0
a00	-1.68179	0	0

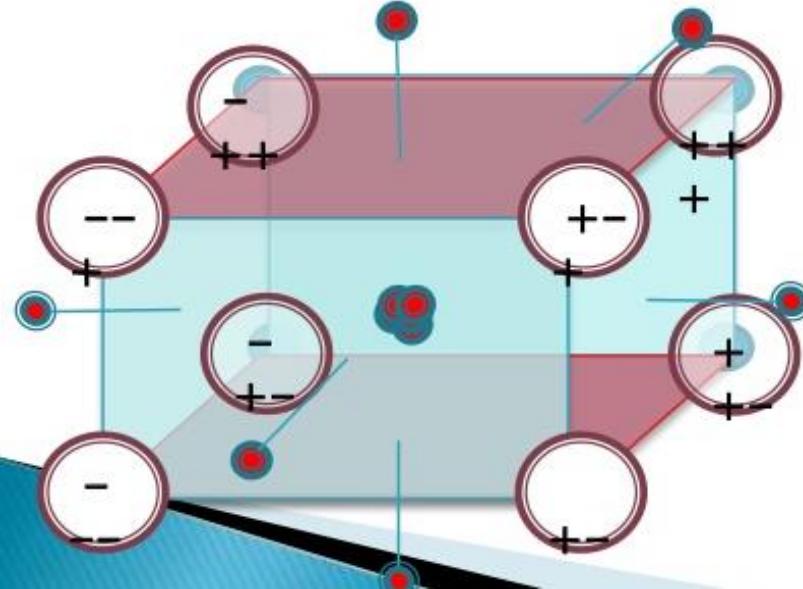
Response surface methodology

Central composite design (CCD)

Randomization:

Central composite circumscribed (CCC)

To avoid effect of **uncontrollable** nuisance variables



Pattern	X1	X2	X3
000	0	0	0
A00	1.681793	0	0
++-	1	1	-1
00a	0	0	-1.681793
---+	-1	-1	1
000	0	0	0
0a0	0	-1.681793	0
---	-1	-1	-1
-+-	-1	1	-1
000	0	0	0
++-	1	-1	1
000	0	0	0
000	0	0	0
a00	-1.681793	0	0
000	0	0	0
+-+	1	-1	-1
-++	-1	1	1
00A	0	0	1.681793
0A0	0	1.681793	0
+++	1	1	1

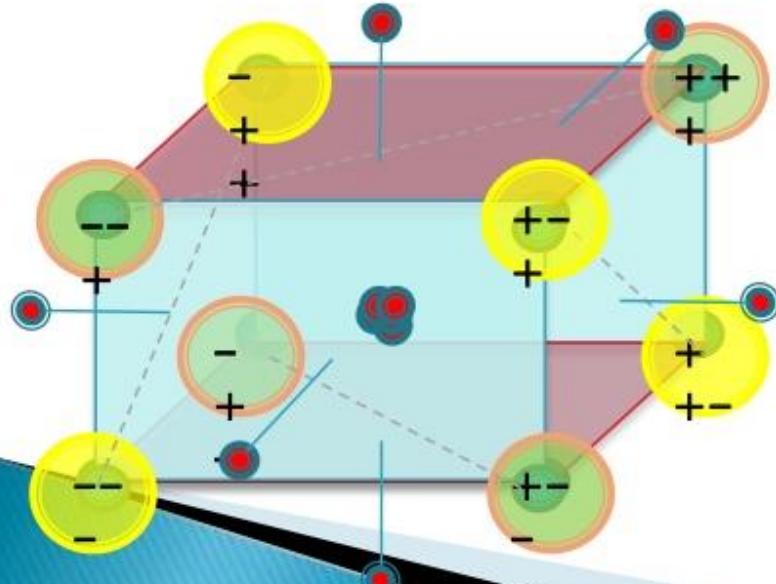
Response surface methodology

Central composite design (CCD)

Central composite circumscribed (CCC)

Blocking:

To avoid effect of **controllable** nuisance variables



Pattern	X1	X2	X3	Block
---	-1	-1	-1	1
--+	-1	1	1	1
++-	1	1	-1	1
+++	1	-1	1	1
000	0	0	0	1
000	0	0	0	1
-+-	-1	1	-1	2
000	0	0	0	2
---+	-1	-1	1	2
000	0	0	0	2
+++	1	1	1	2
---	1	-1	-1	2
000	0	0	0	3
000	0	0	0	3
a00	-1.63299	0	0	3
0a0	0	-1.63299	0	3
A00	1.632993	0	0	3
0A0	0	1.632993	0	3
00a	0	0	-1.63299	3
00A	0	0	1.632993	3

Response surface methodology

Comparison of RSM experiments

<u>Number of Factors</u>	<u>3^k Factorial</u> <u>3 Center points</u>	<u>CCD with 4 Center points</u>	<u>Box-Behnken with 4 Center points</u>
2	12	12	—
3	30	18	16
4	84	28	28
5*	84	30	44
6*	246	48	52
7*	732	82	60

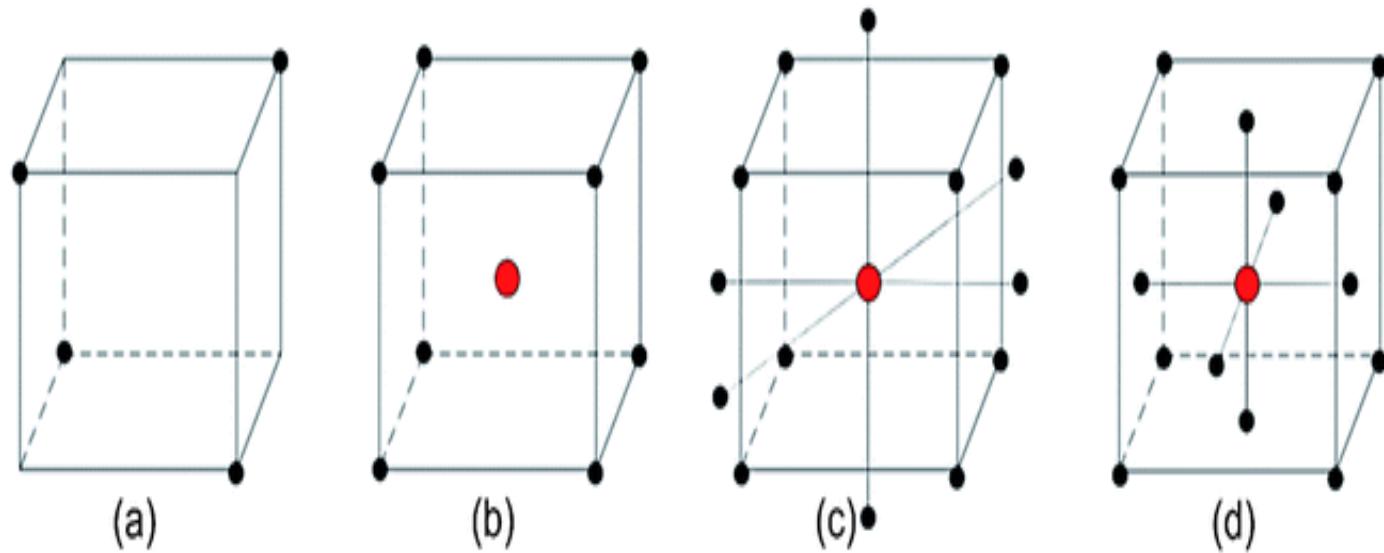
* One third replicate is used for a 3^k factorial design and one-half replicate is used for a 2^k factorial design with the CCD for 5, 6 and 7 factors.



■ Tabla 12.13 Número de puntos en los diseños de segundo orden

Número de factores	Número de parámetros	Número de corridas			
		Factorial completo 3^k	Central compuesto	Box-Behnken	Draper y Lin
2	6	9	13-16	—	—
3	10	27	17-23	15	12
4	15	81	27-36	27	18
5	21	243	29-36	46	24
6	28	729	47-59	54	30





Scheme 1 Experimental designs. (a) Half-fractional 2^3 factorial; (b) full 2^3 factorial with center point; (c) central composite design; (d) face-centered central composite design.



*Otros criterios
útiles en el análisis
de diseños
experimentales*



Sobre MSR

- * El diseño de una MSR simple, **debe permitir que otros diseños** de orden mayor se construyan a partir de él.
- * Esto permite que, cuando el comportamiento de la respuesta resulta ser más complicado de lo que se pensaba (**por ejemplo, se detecta curvatura**), se **agregan puntos adicionales** al diseño para tratar de explicar ese comportamiento.



Sobre MSR

- * El experimento debe permitir la detección de la falta de ajuste, para lo cual se requieren **repeticiones al menos en el centro del diseño.**
- * El diseño debe proporcionar un **estimador puro de la varianza del error**, lo cual se logra con **repeticiones al menos en el punto central.**



Sobre MSR

- * Se considera que un *diseño* es *ortogonal* cuando los coeficientes estimados en el modelo ajustado **no están correlacionados entre sí,**
- * Lo cual hace que el efecto de cada término, representado por el parámetro correspondiente, **se estime de manera más precisa.**



Sobre MSR

- * **Diseño ortogonal**
- * Cuando las columnas de la matriz de diseño son **independientes entre sí**, hace que los coeficientes del modelo ajustado **no estén correlacionados**.



Sobre MSR

- * Un *diseño* se llama *rotable* si la varianza de $\hat{Y}(x)$ sólo depende de la **distancia del punto x al centro del diseño** y no de la dirección en la que se encuentra.
- * Es decir, si pensamos en la variable $\text{var}[\hat{Y}(x)]$ como otra respuesta, su gráfica de contornos tiene la forma de **círculos concéntricos alrededor del centro del diseño**.



Sobre MSR

- * La rotabilidad del diseño asegura que la calidad de la predicción, medida por $\text{var}[Y^*(x)]$, sea **invariante a cualquier rotación del diseño alrededor del centro** del mismo; de aquí se deriva el nombre de esta propiedad.
- * **Diseño rotable:** Es aquel en el que la **varianza de la respuesta estimada sobre un punto depende de la distancia de éste al centro del diseño**, y no de la dirección en la que se encuentra.

