

Estadística Industrial

Metodologia de superfície de resposta (MSR)



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH

Departament d'Estadística
i Investigació Operativa



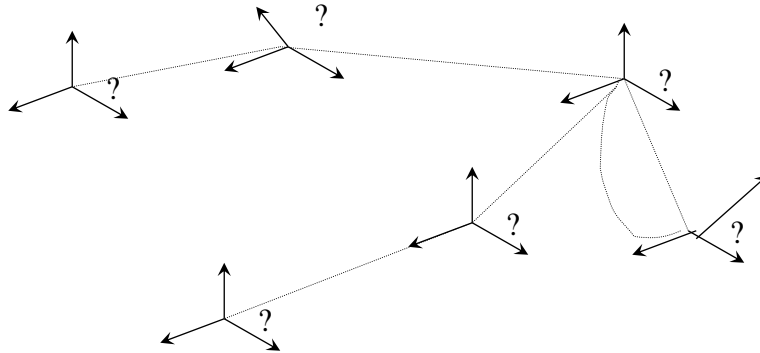
Necessitat de models

- Modelar la realitat $Y = f(X, Z)$ de cara a:
 - Predir Y en determinades condicions X 's
 - Seleccionar condicions òptimes de X 's per Y
 - Determinar condicions X 's robustes de Y per Z 's
- En la pràctica busquem models útils



Exploració de la superfície

L'investigador és un detectiu buscant pistes...



© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

3



Indeterminacions bàsiques

- Quins factors hem d'escollir?
- En quina mètrica?
- Com s'hauria de mesurar la resposta?
- A quins nivells dels factors hauriem de fer els experiments?
- Quin grau de complexitat es necessita per una situació particular?
- Quin disseny cal fer servir?

No hi ha garantia de trobar solució a totes les indeterminacions!

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

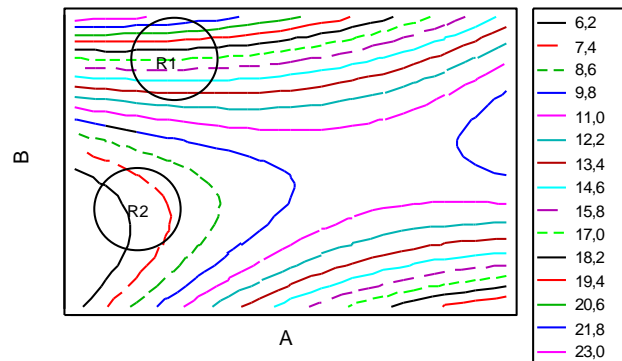
Estadística Industrial

4



Aproximació seqüencial a $f(X, Z)$

- No es tracta de conèixer f en tot el domini de X 's
- S'aproxima localment f mitjançant polinomis (en $R1$ un pla, en $R2$ una teula)



© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

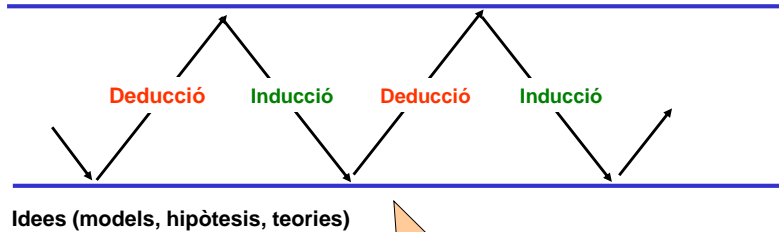
Estadística Industrial

5



Inducció – Deducció: aprenentatge iteratiu

Dades (fets, fenòmens)



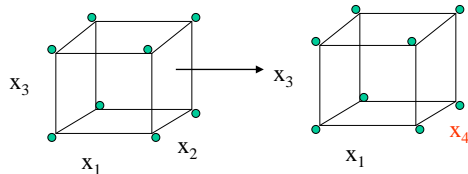
© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

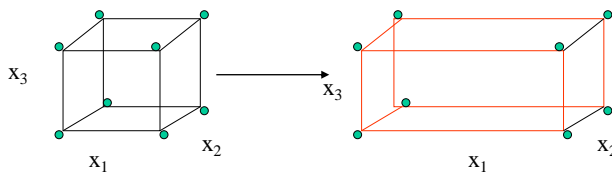
6



Accions més freqüents en les etapes d'experimentació (I)



Eliminar o introduir
nous factors



Canviar l'escala
d'experimentació

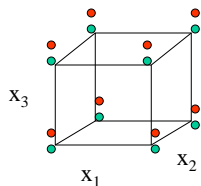
© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

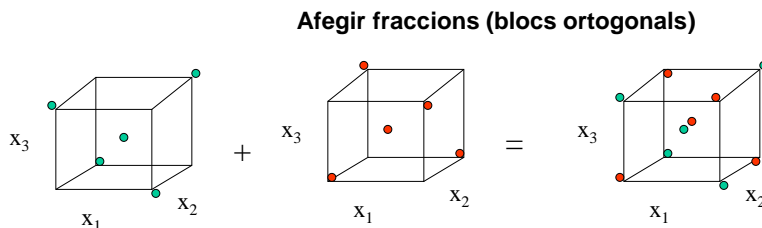
7



Accions més freqüents en les etapes d'experimentació (II)



Replicar les
condicions
experimentals



Afegir fraccions (blocs ortogonals)

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

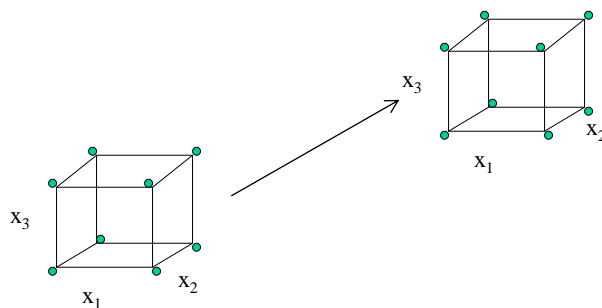
Estadística Industrial

8



Accions més freqüents en les etapes d'experimentació (III)

Moure's a una altra regió pel camí del *steepest ascent (descent)*



Transformar la resposta

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

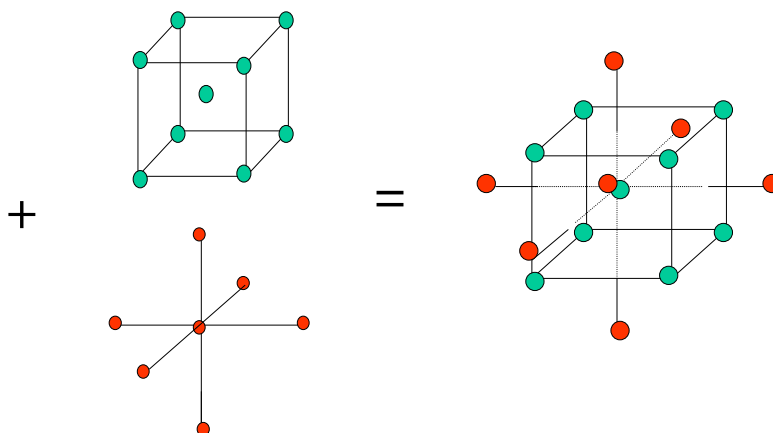
Estadística Industrial

9



Accions més freqüents en les etapes d'experimentació (IV)

Augmentar el disseny (blocs ortogonals)



© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

10



Cada pas genera informació que ajuda a fer el següent pas

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

1. Disseny factorial amb punts centrals (si estem lluny del màxim o mínim, un model lineal serà suficient)
2. Mirem si el model lineal és bo. Si és bo, comencem a moure'ns pel camí de màxim pendent.
3. Quan arribem al màxim (mínim), fem un nou disseny factorial amb punts centrals.
4. Si el model lineal és bo, corregim la direcció i seguim experimentant. Si no és bo, segurament estem ja a prop de l'òptim. Afegim experiments per estimar els coeficients quadràtics.

Estadística Industrial

11



Exemple: fundició de tapes d'alumini

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

- **Procés**
Fundició de tapes d'alumini
- **Objectiu**
 - Trobar les condicions òptimes de temperatura i pressió per reduir la porositat.
 - Entendre la superfície de resposta.

Estadística Industrial

12



Exemple: fundició de tapes d'alumini

• Situació inicial

- Poc coneixement del problema
 - Es vol explorar el comportament de la porositat al voltant de les condicions actuals
 - Experimentació seqüencial
- Hipòtesis: la superfície podrà ser aproximada per un model de primer ordre.
 - Disseny: factorial 2^2 amb 2 punts centrals (que permeti comprovar la hipòtesis)

Per què fer servir punts centrals ens permet comprovar si existeix curvatura?



Justificació dels punts centrals en dissenys de primer ordre

Què passa quan s'aproxima per un model de primer ordre una superfície que correspon a un model de segon ordre?

Model Estimat

$$H_0 : Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon$$

Model de primer ordre

Model "temut"

$$H_1 : Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_{12} + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \varepsilon$$

Model de segon ordre (amb la interacció i els termes quadràtics)

En notació matricial

$$\begin{cases} H_0 : Y = X\beta + \varepsilon \\ H_1 : Y = X\beta + Z\gamma + \varepsilon \end{cases}$$

Suposant H_0 certa

$$b = \hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$$

$$E(b) = (X'X)^{-1}X'E(Y) = \begin{cases} (X'X)^{-1}X'X\beta = \beta & (\text{si } H_0 \text{ es certa}) \\ (X'X)^{-1}X'(X\beta + Z\gamma) = \beta + A\gamma & (\text{si } H_1 \text{ es certa}) \end{cases}$$

A, matriu d'àlies: $A = (X'X)^{-1}X'Z$



Punts centrals. Cas 1: no hi ha punts centrals

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \gamma = \begin{pmatrix} \beta_{12} \\ \beta_{11} \\ \beta_{22} \end{pmatrix} \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{cases} E(b_0) = \beta_0 + (\beta_{11} + \beta_{22}) \\ E(b_1) = \beta_1 \\ E(b_2) = \beta_2 \end{cases}$$

- Si el model real és de segon ordre i s'estima un model de primer ordre, a més d'obtenir-se una aproximació dolenta, la constant queda afectada per un biaix degut a la curvatura
- No es pot separar el biaix (les columnes X_0 , X_1^2 y X_2^2 són iguals)

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

15



Punts centrals. Cas 1: hi ha k punts centrals

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma = \begin{pmatrix} \beta_{12} \\ \beta_{11} \\ \beta_{22} \end{pmatrix} \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$


$$A = \begin{pmatrix} 0 & 4/4+k & 4/4+k \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{cases} E(b_0) = \beta_0 + \frac{4}{4+k}(\beta_{11} + \beta_{22}) \\ E(b_1) = \beta_1 \\ E(b_2) = \beta_2 \end{cases}$$

- Com abans, la constant queda afectada per un biaix degut a la curvatura (encara que ara el biaix és diferent)
- Es pot estimar conjuntament β_{11} y β_{22} per comprovar si existeix curvatura ja que la columna X_0 és diferent a les columnes X_1^2 y X_2^2 , que són iguals entre si.

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

16




UPC

Exemple

Etapa 1

Temperatura (°C)	Pressió (kg./cm.²)	Porositat
-1 (640)	-1 (950)	6,09
1 (660)	-1 (950)	5,53
-1 (640)	1 (1000)	6,78
1 (660)	1 (1000)	6,16
0 (650)	0 (975)	5,93
0 (650)	0 (975)	6,12

Tenim 2 punts centrals per així poder comprovar si existeix curvatura o no



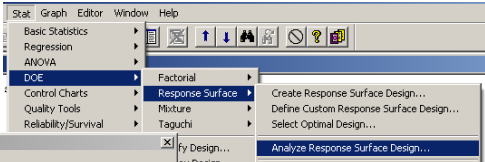
UPC

Exemple (1). Analitzat com Response Surface Design

Amb DOE > Response Surface > Analyze Response Surface Design...

Responses:

Poros



Available Terms:

A
B
AB

Include the following terms: **Linear**

Selected Terms:

A
B

Escollim incloure en el model els termes lineals únicament



Exemple (1). Analitzat com *Response Surface Design*

Response Surface Regression: Porosidad versus Temperatura; Presion

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for Porosida

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	6,1017	0,04508	135,345	0,000
Temperat	-0,2950	0,05521	-5,343	0,013
Presion	0,3300	0,05521	5,977	0,009

Proves d'hipòtesi
pels coeficients

$$H_0 : \beta_i = 0$$

$$H_1 : \beta_i \neq 0$$

S = 0,1104 R-Sq = 95,5% R-Sq(adj) = 92,6%

Analysis of Variance for Porosida

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	2	0,78370	0,78370	0,391850	32,13	0,009
Linear	2	0,78370	0,78370	0,391850	32,13	0,009
Residual Error	3	0,03658	0,03658	0,012194		
Lack-of-Fit	2	0,01853	0,01853	0,009267	0,51	0,702
Pure Error	1	0,01805	0,01805	0,018050		
Total	5	0,82028				

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

19



Exemple (1). Analitzat com *Response Surface Design*

Analysis of Variance for Porosida

Source	DF	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	2	0,78370	0,391850	32,13	0,009
Linear	2	0,78370	0,391850	32,13	0,009
Residual Error	3	0,03658	0,012194		
Lack-of-Fit	2	0,01853	0,009267	0,51	0,702
Pure Error	1	0,01805	0,018050		
Total	5	0,82028			

s^2 dels residus del model

s^2 dels 2 punts centrals

s^2 degut a la manca d'ajust del model

Suma de quadrats dels residus

$$\begin{aligned} & (Y_1 - \hat{Y}_1)^2 + (Y_2 - \hat{Y}_2)^2 + (Y_3 - \hat{Y}_3)^2 + (Y_4 - \hat{Y}_4)^2 + (Y_5 - \hat{Y}_5)^2 + (Y_6 - \hat{Y}_6)^2 = \\ & (0,023)^2 + (0,053)^2 + (0,053)^2 + (0,023)^2 + (-0,172)^2 + (0,023)^2 + (0,018)^2 = 0,03658 \end{aligned}$$

Suma de quadrats per manca d'ajust:

$$\begin{aligned} & (Y_1 - \hat{Y}_1)^2 + (Y_2 - \hat{Y}_2)^2 + (Y_3 - \hat{Y}_3)^2 + (Y_4 - \hat{Y}_4)^2 + (\bar{Y}_{\text{central}} - \hat{Y}_5)^2 + (\bar{Y}_{\text{central}} - \hat{Y}_6)^2 = \\ & (0,023)^2 + (0,053)^2 + (0,053)^2 + (0,023)^2 + (-0,077)^2 + (-0,077)^2 = 0,03658 \end{aligned}$$

Suma de quadrats de l'error pur:

$$(Y_5 - \bar{Y}_{\text{central}})^2 + (Y_6 - \bar{Y}_{\text{central}})^2 = (5,93 - 6,025)^2 + (6,12 - 6,025)^2 = 0,01805$$

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

20



Exemple (1). Analitzat com *Response Surface Design*

$$SS_{\text{model}} = SS_{\text{manca d'ajuste}} + SS_{\text{error pur}}$$

Analysis of Variance for Porosida

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	2	0,78370	0,78370	0,391850	32,13	0,009
Linear	2	0,78370	0,78370	0,391850	32,13	0,009
Residual Error	3	0,03658	0,03658	0,012194		
Lack-of-Fit	2	0,01853	0,01853	0,009267	0,51	0,702
Pure Error	1	0,01805	0,01805	0,018050		
Total	5	0,82028				

$$s_{\text{pur}}^2 = 0,018050$$

$$s_{\text{ajust}}^2 = 0,009267$$

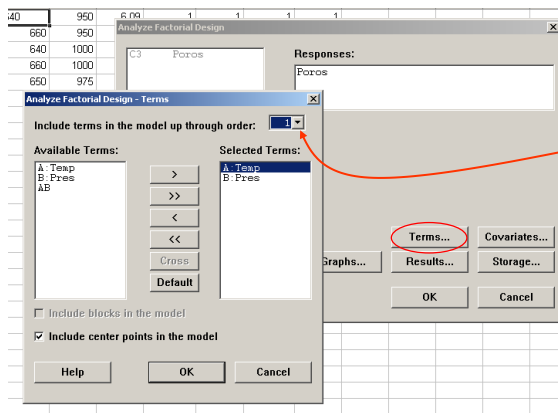
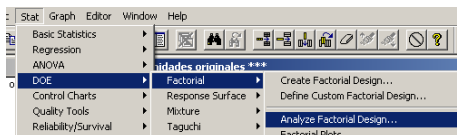
Si el model s'ajusta bé a les dades, els 2 valors són estimacions independents de σ^2 (la variància poblacional dels residus del model), i el seu quocient segueix una F-Snedecor

$$\frac{s_{\text{ajust}}^2}{s_{\text{pur}}^2} = \frac{0,009267}{0,018050} = 0,51$$



Exemple (1). Analitzat amb *Factorial Design*

Amb DOE > Factorial
> Analyze Factorial
Design...



Escollim només
incloure en el model
els termes fins a
ordre 1 (no posem la
interacció)



Exemple (1). Analitzat amb *Factorial Design*

Fractional Factorial Fit: Porosidad versus Temperatura; Presion

Estimated Effects and Coefficients for Porosida (coded units)

Term	Effect	Coef	SE Coef	T	P
Constant		6,1400	0,04867	126,16	0,000
Temperat	-0,5900	-0,2950	0,04867	-6,06	0,026
Presion	0,6600	0,3300	0,04867	6,78	0,021
Ct Pt		-0,1150	0,08430	-1,36	0,306

Minitab denota com Ct Pt a $-(b_{11}+b_{22})$.

Si el p-valor ens indica que Ct Pt no és significatiu, no necessitem termes quadràtics en el model

Aquest p-valor correspon a la prova d'hipòtesis:

$$H_0 : \beta_{11} + \beta_{22} = 0$$

$$H_1 : \beta_{11} + \beta_{22} \neq 0$$



Exemple (1). Analitzat amb *Factorial Design*

Fractional Factorial Fit: Poros versus Temp; Pres

Estimated Effects and Coefficients for Poros (coded units)

Term	Effect	Coef	SE Coef	T	P
Constant		6,1400	0,04867	126,16	0,000
Temp	-0,5900	-0,2950	0,04867	-6,06	0,026
Pres	0,6600	0,3300	0,04867	6,78	0,021
Ct Pt		-0,1150	0,08430	-1,36	0,306

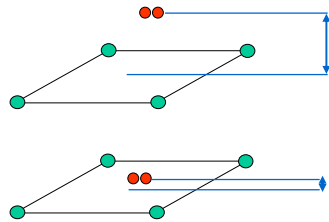
Els 2 tests (un t-test i un F-test) són equivalents

Analysis of Variance for Poros (coded units)

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Main Effects	2	0,783700	0,783700	0,391850	41,36	0,024
Curvature	1	0,017633	0,017633	0,017633	1,86	0,306
Residual Error	2	0,018950	0,018950	0,009475		
Lack of Fit	1	0,000900	0,000900	0,000900	0,05	0,860
Pure Error	1	0,018050	0,018050	0,018050		
Total	5	0,820283				



Exemple (1). Analitzat amb *Factorial Design*



$$\bar{Y}_{\text{centre}} - \bar{Y}_{\text{cubo}}$$

Sí hi ha curvatura

$$\bar{Y}_{\text{centre}} - \bar{Y}_{\text{cubo}}$$

No hi ha curvatura

S'ha de veure si la diferència entre la mitjana dels punts centrals i la mitjana dels punts del cub és "gran"

$$\frac{(\bar{Y}_{\text{centre}} - \bar{Y}_{\text{cub}})}{s \sqrt{\frac{1}{n_{\text{centre}}} + \frac{1}{n_{\text{cub}}}}}$$

Gran o petit està en funció de la variabilitat que tenim, per això "normalitzem" la diferència



Exemple (1). Analitzat amb *Factorial Design*

Fractional Factorial Fit: Poros versus Temp; Pres

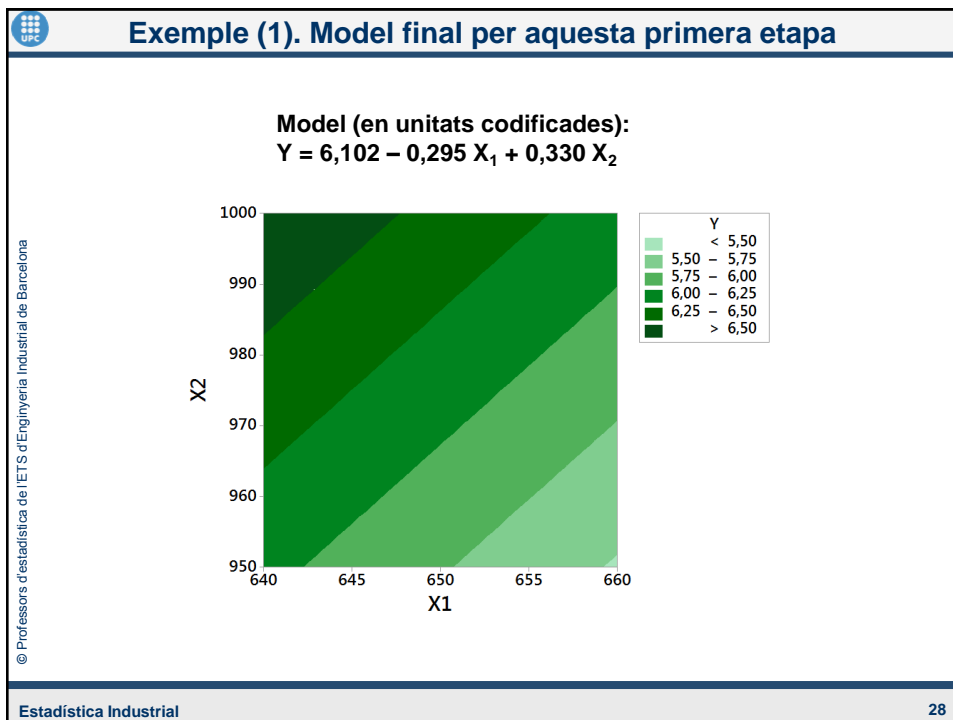
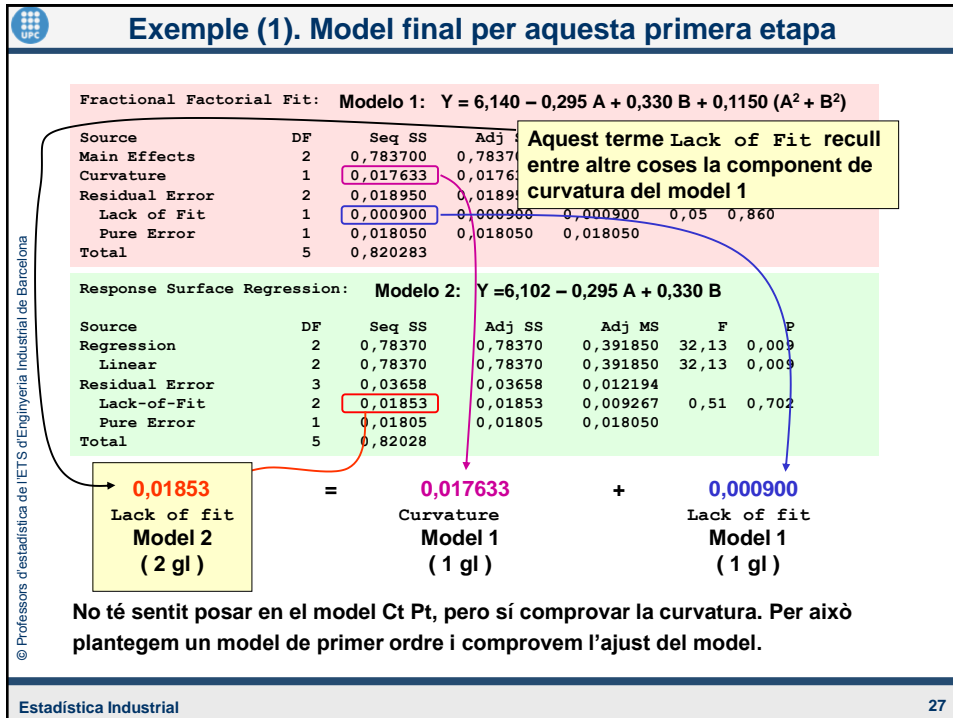
Estimated Effects and Coefficients for Poros (coded units)

Term	Effect	Coef	SE Coef	T	P
Constant		6,1400	0,04867	126,16	0,000
Temp	-0,5900	-0,2950	0,04867	-6,06	0,026
Pres	0,6600	0,3300	0,04867	6,78	0,021
Ct Pt		-0,1150	0,08430	-1,36	0,306

Analysis of Variance for Poros (coded units)

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Main Effects	2	0,783700	0,783700	0,391850	41,36	0,024
Curvature	1	0,017633	0,017633	0,017633	1,86	0,306
Residual Error	2	0,018950	0,018950	0,009475		
Lack of Fit	1	0,000900	0,000900	0,000900	0,05	0,860
Pure Error	1	0,018050	0,018050	0,018050		
Total	5	0,820283				

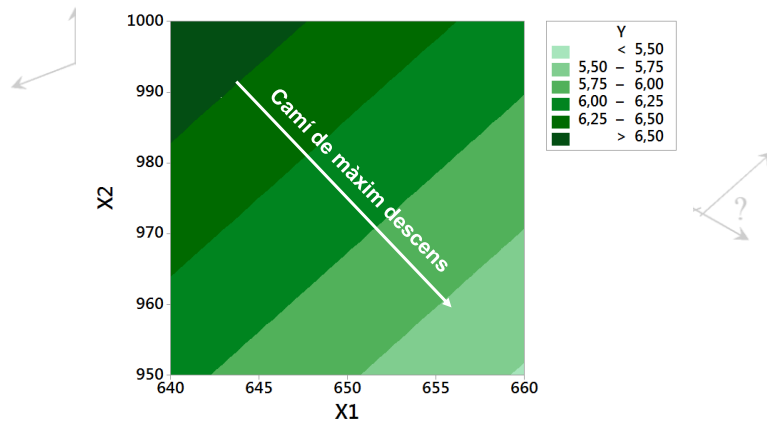
$$\frac{(\bar{Y}_{\text{centre}} - \bar{Y}_{\text{cub}})}{s \sqrt{\frac{1}{n_{\text{centre}}} + \frac{1}{n_{\text{cubc}}}}} = \frac{(6,025 - 6,140)}{\sqrt{0,009475} \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}}} = -1,364$$





Com continuar?

Com volem minimitzar la porositat, sembla raonable moure'ns cap avall seguint el camí de màxim descens.



© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

29



Mètode del màxim pendent (creixent o decreixent)

↗ **Màxim pendent creixent: *steepest ascent***

↘ **Màxim pendent decreixent: *steepest descent***

- Procediment preliminar per localitzar la regió on un model de segon ordre pot ser més útil
- En aquest estat s'estimen normalment models de primer ordre i a partir d'aquests s'obté el gradient.
- Es fa servir per realitzar canvis seqüencials a una nova regió d'interès allunyada de l'actual regió.
- La direcció del gradient és orientativa i en funció de les característiques del procés se seleccionen k condicions experimentals que es poden executar seqüencialment o a la vegada.

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

30



Direcció del gradient en un model estimat

Model (en unitats codificades)

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k$$

Gradient

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial x_1}, \frac{\partial Y}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial Y}{\partial x_k} \right)$$



Steepest ascent

$$(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)$$

Steepest descent

$$-(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)$$



S'acostuma a normalitzar el vector amb la direcció de màxim pendent:

$$u = \frac{(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)}{\sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2 + \dots + \beta_k^2}}$$

$$u = \frac{-(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)}{\sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2 + \dots + \beta_k^2}}$$



Experimentació orientativa en direcció del gradient

- Una manera de fer-ho: A partir de las condicions representades per $u, 2u, 3u, 4u, \dots$ desfer la codificació per estudiar aquestes condicions (tenint en compte el coneixement que es tingui del procés, pressupost, etc.) i seleccionar les noves condicions experimentals.
- Probablement la condició “ u ” no se seleccionarà per estar dins de l'actual regió experimental i la resta de condicions estaran massa a prop.

Per passar d'unitats originals a codificades:

$$x_i : \text{unitats codificades} \quad \xi_i : \text{unitats originals} \quad x_i = \frac{\xi_i - \frac{\max(\xi_i) + \min(\xi_i)}{2}}{\frac{\max(\xi_i) - \min(\xi_i)}{2}}$$

(ara ve un exemple!)



Exemple

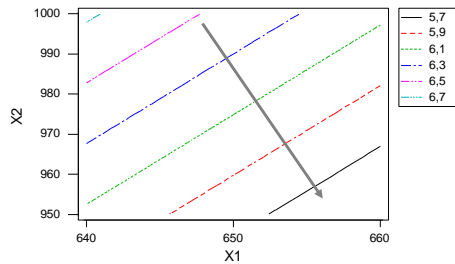
Etape 2

$$Y = 6,102 - 0,295 X_1 + 0,330 X_2$$

Gradient

$$\frac{\partial Y}{\partial x_1} = -0,295$$

$$\frac{\partial Y}{\partial x_2} = 0,330$$



Direcció de decreciment:

$$d = [0,295 ; -0,330]$$

I normalitzant el vector...

$$u = \left(\frac{0,295}{0,44}, \frac{-0,330}{0,44} \right) = (0,67 ; -0,75)$$



Exemple (2). Experiments seguint el màxim decreciment

Partim de l'origen (0 ; 0) i fem experiments primer a 3 u, després a 5 u, etc.

Primer experiment a 3 u = (2,01 ; - 2,25)

¿Quant és en unitats originals?

Temperatura

- 1 correspon a 640

+1 correspon a 660

$$x_1 = \frac{\text{Temp} - \frac{660 + 640}{2}}{\frac{660 - 640}{2}} = \frac{\text{Temp} - 650}{10}$$

$$\text{Temp} = 10 x_1 + 650$$

Aquí $x_1 = 2,01$; Temp = 670,1

Presió

- 1 correspon a 950

+1 correspon a 1000

$$x_2 = \frac{\text{Pres} - \frac{1000 + 950}{2}}{\frac{1000 - 950}{2}} = \frac{\text{Pres} - 975}{25}$$

$$\text{Pres} = 25 x_2 + 975$$

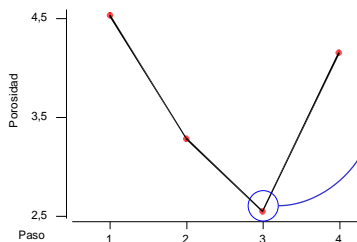
Aquí $x_2 = - 2,25$; Pres = 918,75



Exemple (2). Experiments seguint el màxim decreciment

Partim de l'origen (0 ; 0) i fem experiments primer a 3 u, després a 5 u, etc.

Posició	Temp (°C)	Pres (kg./cm. ²)	Porositat
3 u = (2,01 ; - 2,25)	670	920	4,53
5 u = (3,35 ; - 3,75)	685	880	3,28
7 u = (4,69 ; - 5,25)	700	845	2,54
9 u = (6,03 ; - 6,85)	710	805	4,15



Tenim el mínim pel tercer experiment que hem fet. Farem servir aquest com a punt central de la nova tongada.



Exemple (3)

Fem un 2² amb punts centrals prenent com a centre de l'experiment la millor condició (mínima) que hem trobat a l'etapa anterior.

Etapa 3

Temperatura (°C)	Pressió (kg./cm. ²)	Porositat
-1 (690)	-1 (820)	2,20
1 (710)	-1 (820)	3,71
-1 (690)	1 (870)	2,86
1 (710)	1 (870)	3,49
0 (700)	0 (845)	2,53
0 (700)	0 (845)	2,30
0 (700)	0 (845)	2,54

Afegim també com a punt central el tercer experiment de l'etapa anterior



Exemple (3)

Analitzem l'experiment (amb *Response Surface Design*) ...

Response Surface Regression: Poros versus Temp; Pres

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for Poros

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	2,8043	0,1758	15,956	0,000
Temp	0,5350	0,2325	2,301	0,083
Pres	0,1100	0,2325	0,473	0,661

Ara sí que hi
ha manca
d'ajust

S = 0,4650 R-Sq = 58,0% R-Sq(adj) = 37,0%

Analysis of Variance for Poros

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	2	1,19330	1,19330	0,59665	2,76	0,177
Linear	2	1,19330	1,19330	0,59665	2,76	0,177
Residual Error	4	0,86487	0,86487	0,21622		
Lack-of-Fit	2	0,82800	0,82800	0,41400	22,46	0,043
Pure Error	2	0,03687	0,03687	0,01843		
Total	6	2,05817				

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

37



Exemple (4)

Analitzem l'experiment (amb *Factorial Design*) ...

Fractional Factorial Fit: Poros versus Temp; Pres

Estimated Effects and Coefficients for Poros (coded units)

Term	Effect	Coef	SE Coef	T	P
Constant		3,0650	0,1386	22,12	0,000
Temp	1,0700	0,5350	0,1386	3,86	0,031
Pres	0,2200	0,1100	0,1386	0,79	0,485
Ct Pt		-0,6083	0,2117	-2,87	0,064

Necessitarem
afegir experiments
per poder estimar
els termes
quadràtics

Analysis of Variance for Poros (coded units)

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Main Effects	2	1,19330	1,19330	0,59665	7,77	0,065
Curvature	1	0,63440	0,63440	0,63440	8,26	0,064
Residual Error	3	0,23047	0,23047	0,07682		
Lack of Fit	1	0,19360	0,19360	0,19360	10,50	0,083
Pure Error	2	0,03687	0,03687	0,01843		
Total	6	2,05817				

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

38



¿Com continuar?

Cal afegir experiments per poder estimar els termes quadràtics
¿Com afegim els nous experiments?

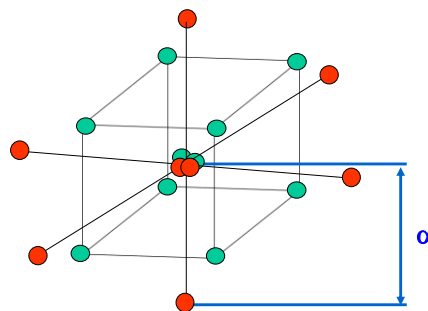
El que volem:

- No haver de fer massa experiments
- Que puguem fer les tongades d'experiments seqüencialment (en blocs)
- Que permetin estimar amb precisió els coeficients del model
- Que permetin tenir una estimació de l'error independent del model
- Tenir un bon comportament de la variança de predicció a la zona d'experimentació



Dissenys per estimar models de segon ordre

Disseny central compost (*Central Composite Design, CCD*)



Es tracta d'afegir punts al 2^k inicial en forma d'estrella.

- Cub
- Estrella

Sovint es fan primer els experiments del cub, i si és necessari perquè el model lineal no és suficient, es fan després els experiments de l'estrella. Pot haver, doncs, efecte bloc.



Dissenys per estimar models de segon ordre

Cub

A	B	C
-1	-1	-1
1	-1	-1
-1	1	-1
1	1	-1
-1	-1	1
1	-1	1
-1	1	1
1	1	1
0	0	0
0	0	0
...
0	0	0

Estrella

A	B	C
$-\alpha$	0	0
α	0	0
0	$-\alpha$	0
0	α	0
0	0	$-\alpha$
0	0	α
0	0	0
0	0	0
...
0	0	0

N_c : número de punts en els vèrtexs del cub (és de la forma 2^k o 2^{k-p})

n_{oc} : número de punts centrals en el cub

El valor de α i el número de punts centrals en l'estrella (n_{oe}) s'escullen de manera que el disseny aconsegueixi les condicions de rotabilitat i ortogonalitat



Dissenys per estimar models de segon ordre

- Rotabilitat

La varianza dels valors previstos $V[\hat{y}(x)] = \sigma^2 x'(X'X)^{-1}x$ és la mateixa per tots els punts x que estan a la mateixa distància del centre del disseny

Aquesta condició depèn només del valor de α i del número d'experiments que s'han realitzat en el cub (sense comptar els del centre), N_c

$$\alpha = \sqrt[4]{N_c}$$



Dissenys per estimar models de segon ordre

- **Ortogonalitat**

Les estimacions dels paràmetres són independents entre si i independents a la seva vegada de l'efecte bloc

S'han d'acomplir 2 condicions:

1. Cada bloc ha de contenir un disseny ortogonal
2. La fracció del total de la suma de quadrats de cada variable x_i en cada bloc ha de ser igual a la fracció del número total d'observacions distribuïdes en cada bloc

$$\frac{\sum_{j=1}^{n_b} x_{bij}^2}{\sum_{j=1}^N x_{bij}^2} = \frac{n_b}{N}$$

n_b : número d'observacions en el bloc b

N: número total d'observacions



Dissenys per estimar models de segon ordre

Cas particular d'ortogonalitat per dissenys centrals compostos

$$\alpha = \sqrt{\frac{N_c(2k + n_{oe})}{2(N_c + n_{oc})}}$$

N_c : número de punts del cub sense els punts del centre

K : número de factors

n_{oc} : número de punts centrals del cub

n_{oe} : número de punts centrals de l'estrella

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Alguns dissenys centrals compostos

El més fàcil és fer-ho amb Minitab!

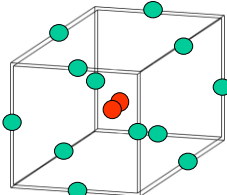
K	2	3	4	5	5(1/2)	6
Fracció del cub	1	1	1	1	½	½
N_c	4	8	16	32	16	32
Bloc (en cub)	1	2	2	4	1	2
N_e = 2k	4	6	8	10	10	12
n_{oc} (per bloc)	3	2	2	2	6	4
n_{oe}	3	2	2	4	1	2
N total	14	20	30	54	33	54
α (ortogonalitat)	1.414	1.633	2	2.366	2	2.366
α (rotabilitat)	1.414	1.682	2	2.378	2	2.378
Generadors de bloc		B=123	B=1234	B ₁ =123 B ₂ =2345		B=123
Generadors del disseny fraccional					5=1234	6=12345

De vegades no s'aconsegueix simultàniament ortogonalitat i rotabilitat

Estadística Industrial
45

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Dissenys Box-Behnken



Són dissenys a 3 nivells, són rotables o quasi-rotables

No té punts en els vèrtexs del cub, pel que mai s'ha d'experimentar amb els nivells extrems de totes les variables (això pot ser un avantatge en segons quines situacions).

Per exemple, es fan servir bastant en el sector de l'alimentació

Estadística Industrial
46



Exemple (1)

Als experiments de l'etapa 3 afegim ara els que corresponen a l'estrella

Etapa 4

Temperatura (°C)	Pressió (kg./cm. ²)	Porositat
- $\sqrt{2}$ (685)	0 (845)	3,02
$\sqrt{2}$ (715)	0 (845)	4,40
0 (700)	- $\sqrt{2}$ (810)	3,90
0 (700)	$\sqrt{2}$ (880)	3,76
0 (700)	0 (845)	3,20
0 (700)	0 (845)	3,28
0 (700)	0 (845)	3,17

Afegim a l'anàlisi l'efecte bloc, per veure si surt significatiu

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

47



Exemple (2)

Response Surface Regression: Poros versus Temp; Pres

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for Poros

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	2,8372	0,05143	55,166	0,000
Block	-0,3578	0,03371	-10,614	0,000
Temp	0,4953	0,04322	11,461	0,000
Pres	0,0308	0,04477	0,688	0,514
Temp*Temp	0,2356	0,04234	5,566	0,001
Pres*Pres	0,3329	0,04719	7,055	0,000
Temp*Pres	-0,2200	0,06300	-3,492	0,010

S = 0,1260 R-Sq = 98,0% R-Sq(adj) = 96,2%

Analysis of Variance for Poros

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Blocks	1	1,85786	1,78842	1,78842	112,66	0,000
Regression	5	3,45479	3,45479	0,69096	43,53	0,000
Linear	2	2,09271	2,09271	1,04635	65,91	0,000
Square	2	1,16849	1,16849	0,58424	36,80	0,000
Interaction	1	0,19360	0,19360	0,19360	12,20	0,010
Residual Error	7	0,11112	0,11112	0,01587		
Lack-of-Fit	3	0,06779	0,06779	0,02260	2,09	0,245
Pure Error	4	0,04333	0,04333	0,01083		
Total	13	5,42377				

Existeixen diferències en la resposta en les dues etapes d'experimentació. En el centre dona en promig 2,84; cal restar-li 0,36 pel bloc 1(+1) i sumar-li 0,36 pel bloc 2 (-1)

El model ajusta bé

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

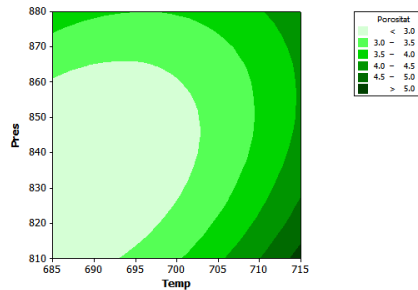
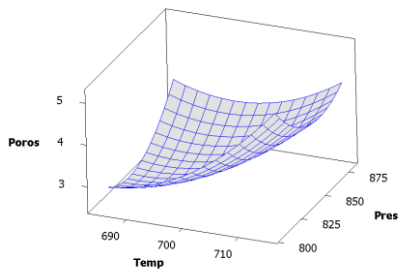
Estadística Industrial

48



Exemple (3). Model definitiu

Les corbes de nivell les
dibuixa Minitab
promediant l'efecte bloc,
que no influeix en la
localització de l'òptim



$$\begin{aligned} \text{Porositat} = & 2,84 - 0,36 B + \\ & + 0,50 \text{ Temp} + 0,03 \text{ Pres} + \\ & 0,24 \text{ Temp}^2 + 0,33 \text{ Pres}^2 - \\ & 0,22 \text{ Temp} \cdot \text{Pres} \end{aligned}$$

(model en unitats codificades)

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

49



Exemple (4). Càlcul del punt crític

Derivem i igualem a 0...

$$\begin{aligned} \text{Porositat} = & 2,84 - 0,36 B + 0,50 \text{ Temp} + 0,03 \text{ Pres} + 0,24 \text{ Temp}^2 + \\ & + 0,33 \text{ Pres}^2 - 0,22 \text{ Temp} \cdot \text{Pres} \end{aligned} \quad (\text{model en unitats codificades})$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \text{Poros}}{\partial \text{Temp}} = 0 & \Rightarrow 0,50 + 0,48 \text{ Temp} - 0,22 \text{ Pres} = 0 \\ \frac{\partial \text{Poros}}{\partial \text{Pres}} = 0 & \Rightarrow 0,03 + 0,66 \text{ Pres} - 0,22 \text{ Temp} = 0 \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \text{Temp} &= -1,25 \\ \text{Pres} &= -0,46 \end{aligned} \right\} \quad (\text{unitats codificades})$$

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

50



Condicions de mínima porositat i porositat esperada

$$\left. \begin{array}{l} \text{Temp} = -1,25 \\ \text{Pres} = -0,46 \end{array} \right\} \text{ (unitats codificades)}$$

Passem a unitats originals:

Temperatura

- 1 corresponde a 690

+1 corresponde a 710

Temp = 687,5 °C

Pressió

- 1 corresponde a 820

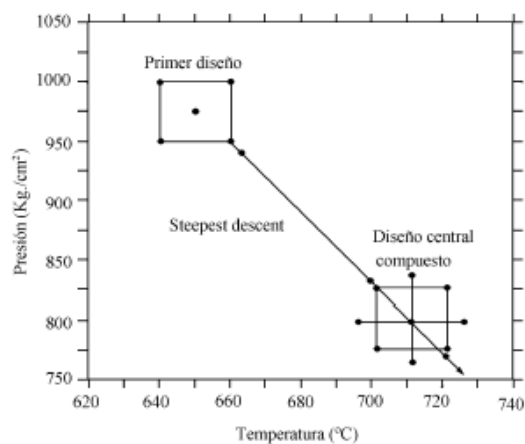
+1 corresponde a 870

Pres = 833,5 Kg/cm³

$$\text{Porositat}_{\text{condicions òptimes}} = \left\{ \begin{array}{l} 2,17 \text{ (bloc 1)} \\ 2,89 \text{ (bloc 2)} \end{array} \right.$$



Resum de l'estratègia seguida





Què fer si tenim 3 o més factors?

- Si tenim 3 factors (i tots ells entren en el model) podem dibuixar les corbes de nivell per 2 d'ells, a nivell baix, mig i alt del tercer factor.
- Si tenim 4 o més factors, potser alguns d'ells són inerts i no entren en el model (podem passar d'ells). Si només estudiem 2 o 3 factors podríem dibuixar també les corbes de nivell.
- Si tenim 4 o més factors que entren en el model es pot treballar amb projeccions sobre un subconjunt de 2 o 3 factors, però la interpretació es aleshores més difícil.
- Si tenim 4 o més factors, l'anàlisi canònic pot ajudar-nos a descobrir com és la superfície.

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

53



Anàlisi canònic (1)

- La forma canònica d'una superfície correspon a la seva representació amb eixos de simetria paral·lels als eixos de coordenades i centrada a l'origen de coordenades. Aquesta representació permet "veure" com és la superfície.
- Les superfícies que surten de la metodologia de superfície de resposta sovint no són superfícies canòniques.
- Una superfície qualsevol es pot transformar en superfície canònica realitzant 2 operacions:
 - Canviar els eixos de coordenades de manera que queden paral·lels als eixos de simetria de la superfície (forma canònica A)
 - Seleccionar el punt crític de la superfície com a nou origen de coordenades (forma canònica B)

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

54



Mètode per obtenir formes canòniques

$$\mathbf{b}_0 = (\mathbf{b}_0) \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_k \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \dots \\ b_k \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & \frac{1}{2}b_{12} & \dots & \frac{1}{2}b_{1k} \\ \frac{1}{2}b_{12} & b_{22} & \dots & \frac{1}{2}b_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{1}{2}b_{1k} & \frac{1}{2}b_{2k} & \dots & b_{kk} \end{pmatrix}$$

Expressat en forma matricial

$$\mathbf{Y} = \mathbf{b}_0 + \mathbf{X}'\mathbf{b} + \mathbf{X}'\mathbf{B}\mathbf{X}$$



Forma canònica A

M: matriu que té en les seves columnes els vectors propis estandaritzats de **B**: m_1, m_2, \dots, m_k .

$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ són els seus valors propis

$$\mathbf{B}\mathbf{M} = \mathbf{M}\mathbf{\Lambda}$$

Multipliquem a esquerra i dreta per \mathbf{M}'

$$\mathbf{M}'\mathbf{B}\mathbf{M} = \mathbf{M}'\mathbf{M}\mathbf{\Lambda} = \mathbf{\Lambda}$$

Com $\mathbf{M}'\mathbf{M} = \mathbf{I}$:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{b}_0 + \mathbf{X}'\mathbf{b} + \mathbf{X}'\mathbf{B}\mathbf{X}$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{b}_0 + (\mathbf{X}'\mathbf{M})(\mathbf{M}'\mathbf{b}) + (\mathbf{X}'\mathbf{M})(\mathbf{M}'\mathbf{B}\mathbf{M})(\mathbf{M}'\mathbf{X})$$



Forma canònica A

$$Y = b_0 + (X'M)(M'b) + (X'M)(M'BM)(M'X)$$

Forma canònica A

$$Y = b_0 + P'\theta + P'\Delta P$$

$$P = M'X \quad \theta = M'b$$

La forma canònica A només conté termes quadràtics purs,
han desaparegut les interaccions

(ara ve un exemple!)



Forma canònica B

Per trobar la forma canònica B primer veiem a quina distància de
l'origen de coordenades es troba el punt crític

- Si el punt crític està dins de la zona d'experimentació,
l'aproximació de la superfície serà igual de vàlida al voltant del
nou origen de coordenades
- Si el punt crític està fora de la zona d'experimentació, no té
sentit extrapolar la superfície i no es troba la forma canònica B

En l'exemple de les llantes, la distància del punt crític a
l'origen de coordenades...

$$\begin{array}{ll} \text{Temperatura} \rightarrow & x_1 = -1,25 \\ \text{Pressio} \rightarrow & x_2 = -0,46 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} x_1 \\ x_2 \end{array}} \right\} \Rightarrow d = \sqrt{(-1,25 - 0)^2 + (-0,46 - 0)^2} = 1,3$$



Forma canònica B

Per l'exemple de les llantes...

El punt crític està a 1,3 unitats de l'origen de coordenades, dins de la zona d'experimentació.

Té sentit fer servir el model trobat al voltant del nou origen de coordenades

Per passar a la forma canònica B:

- Canviem l'origen de coordenades de (0,0) a (-1,23; - 0,41), si treballem en unitats codificades originals
- Canviem l'origen de coordenades de (0,0) a $M'(-1,23; - 0,41)$, si treballem en unitats codificades noves (les de la forma canònica A)



Forma canònica B

Es pot primer girar els eixos i després canviar l'origen de coordenades, o al revés.

Fent servir el canvi d'origen després de girar els eixos:

$$Y = b_0 + (X'M)(M'b) + (X'M)(M'BM)(M'X)$$

$$Y = b_0 + ((X - X_0)'M)(M'b) + ((X - X_0)'M)(M'BM)(M'(X - X_0))$$

Així movem l'origen de coordenades

Forma canònica B

$$Y = Y_0 + \lambda_1 \omega_1^2 + \lambda_2 \omega_2^2 + \dots + \lambda_k \omega_k^2$$

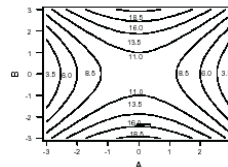
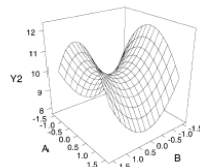
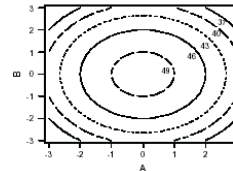
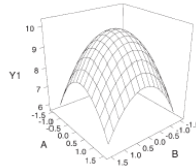
$$\omega_i = M'(X_i - X_{i0}) = M'X_i - M'X_{i0} = P_i - P_{i0}$$



Anàlisi de la superfície a partir de la forma canònica B

En funció del signe dels valors propis podem veure com és la superfície:

Màxim, $\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$ (o mínim si els 2 vaps són >0)



Punt de sella, λ_1 y λ_2 de diferent signe

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

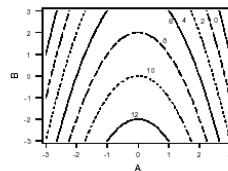
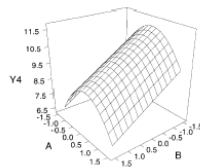
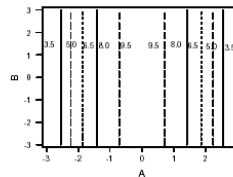
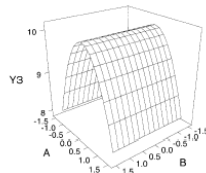
61



Anàlisi de la superfície a partir de la forma canònica B

En funció del signe dels valors propis podem veure com és la superfície:

Teula horitzontal, $\lambda_2 = 0$



Teula inclinada, $\lambda_2 = 0$ i terme lineal en X_1

© Professors d'estadística de l'ETS d'Enginyeria Industrial de Barcelona

Estadística Industrial

62



Exemple. Anàlisi canònic per les tapes d'alumini

$$\text{Porositat} = 2,84 - 0,36 B + 0,50 \text{ Temp} + 0,03 \text{ Pres} + 0,24 \text{ Temp}^2 + \\ + 0,33 \text{ Pres}^2 - 0,22 \text{ Temp} \cdot \text{Pres} \quad (\text{model en unitats codificades})$$

Porositat serà Y, Temp serà X_1 i Pres serà X_2

$$Y = 2,84 - 0,36 B + 0,50 X_1 + 0,03 X_2 + 0,24 X_1^2 + 0,33 X_2^2 - 0,22 X_1 \cdot X_2$$

$$b_0 = (2,84) \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 0,50 \\ 0,03 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 0,24 & -0,11 \\ -0,11 & 0,33 \end{pmatrix}$$

$$M = \begin{pmatrix} -0,56 & 0,83 \\ 0,83 & 0,56 \end{pmatrix} \quad \lambda_1 = 0,40 \quad \lambda_2 = 0,17$$



Exemple. Anàlisi canònic per les tapes d'alumini

La forma canònica B serà:

$$Y = Y_0 + 0,36 B + 0,40 \omega_1^2 + 0,17 \omega_2^2$$

Els dos valors propis són > 0. La superfície té un mínim.

$$\begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \end{pmatrix} = M' \begin{pmatrix} X_1 - X_{10} \\ X_2 - X_{20} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -0,56 & 0,83 \\ 0,83 & 0,56 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 - (-1,23) \\ X_2 - (-0,41) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,56 & 0,83 \\ 0,83 & 0,56 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 + 1,23 \\ X_2 + 0,41 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,56 & 0,83 \\ 0,83 & 0,56 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 + 1,23 \\ X_2 + 0,41 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\omega_1 = -0,56 X_1 + 0,83 X_2 - 0,35$$

$$\omega_2 = 0,83 X_1 + 0,56 X_2 + 1,25$$

Per passar de les unitats originals a les transformades.



Conclusions de l'anàlisi canònic

- La porositat canvia més ràpidament en la direcció de w_1 que en la de w_2 (el seu valor propi és més gran)
- Direcció de mínim canvi en porositat.
La tenim quan $\omega_1 = 0$.
$$\omega_1 = 0 = -0,56 X_1 + 0,83 X_2 - 0,35$$
- Direcció de màxim canvi en porositat.
La tenim quan $\omega_2 = 0$.
$$\omega_2 = 0 = 0,83 X_1 + 0,56 X_2 + 1,25$$
- Donada una porositat mínima, existeixen unes quantes combinacions de temperatura i pressió que permeten treballar amb la porositat desitjada.