

CAPITULO VIII

MÉTODOS Y DISEÑOS DE SUPERFICIES DE RESPUESTAS

8.1. Introducción

La metodología de superficies de respuesta, *MSR*, (ó *RSM*, *Response Surface Methodology*), es un conjunto de técnicas matemáticas y estadísticas, útiles para modelar y analizar problemas en los cuales una respuesta de interés es influida por varias variables, y el objetivo es *optimizar la respuesta*. Por ejemplo, un ingeniero desea determinar los niveles de temperatura, (X_1) y presión (X_2) que maximicen el rendimiento (Y) de un proceso. El rendimiento del proceso es función de los niveles de temperatura y presión, o sea;

$$Y = f(X_1, X_2) + \varepsilon$$

donde ε representa el error experimental observado en la respuesta Y . Si la respuesta esperada se denota por $E(Y) = f(X_1, X_2) = \eta$, entonces la superficie representado por:

$$\eta = f(X_1, X_2)$$

se denomina superficie de respuesta.

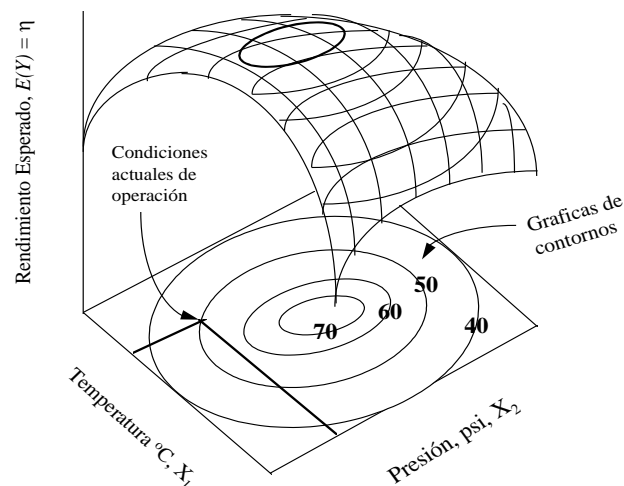


Figura 8.1: Gráfica de contornos con una superficie tridimensional

Es posible representar gráficamente la superficie de respuestas como se muestra en la Figura 8.1, donde η se gráfica contra los niveles X_1 y X_2 . Obsérvese que la respuesta se representa como una superficie sólida en un espacio tridimensional. Para visualizar mejor la forma de una superficie de respuesta, a menudo se gráfica los contornos de dicha superficie, como se muestra en la Figura 8.1. En esta gráfica de contornos se trazan líneas de respuesta constante en el plano X_1, X_2 . Cada contorno corresponde a una altura específica de la superficie de respuesta. Tal gráfica es útil para estudiar los niveles de X_1 y X_2 que dan por resultado cambios en la forma o altura de la superficie de respuesta.

En la mayoría de problemas de *MSR*, la forma de la relación entre la respuesta y las variables independientes se desconoce. Por ello, el primer paso en la *MSR* consiste en determinar una aproximación apropiada a la relación funcional real entre Y y el conjunto de variables independientes. Por lo general, se emplea un polinomio de orden bajo sobre alguna región de las variables independientes. Si la respuesta es descrita adecuadamente por una función lineal entre las variables independientes, la función de aproximación es el modelo de primer orden:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_k X_k + \varepsilon$$

Debe usarse un polinomio de mayor grado, por ejemplo el modelo de segundo orden,

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon$$

cuando existe curvatura en el sistema. Casi todos los problemas de MSR utilizan uno o ambos polinomios de aproximación. Por supuesto, es imposible que un modelo polinomial sea una aproximación razonable de la relación funcional real sobre todo el dominio de las variables independientes. Sin embargo, funcionan muy bien en regiones relativamente pequeñas de las variables independientes.

La MSR es una técnica secuencial. A menudo, cuando se considera un punto sobre la superficie de respuesta alejado del óptimo, como las condiciones de operación actuales de la Figura 8.1, el polinomio de primer grado es apropiado porque existe poca curvatura en el sistema. En este caso, el objetivo consiste en guiar al experimentador rápida y eficientemente a la cercanía general del punto óptimo. Una vez que se ha determinado la región del punto óptimo, puede emplearse un modelo más elaborado, como por ejemplo el de superficie de respuesta de segundo grado, y realizar un análisis para localizar el óptimo. A partir de la Figura 8.1, se observa que el análisis de la superficie de respuesta puede interpretarse como el "ascenso a la loma", donde la cima representa el punto de la respuesta máxima. Si el óptimo real es un punto de respuesta mínima, se puede pensar en el "descenso hacia un valle"

8.2. Método de máxima pendiente en ascenso.

Con frecuencia, la estimación inicial de las condiciones de operación óptimas para un sistema estará alejada del óptimo real. En tales circunstancias, el objetivo del experimento es moverse rápidamente a la vecindad general del óptimo. Se desea usar un procedimiento experimental simple y económicamente eficiente. En la lejanía de un óptimo, generalmente se supone que el modelo de primer orden es una aproximación adecuada a la superficie real en regiones pequeñas de la X.

El método de máxima pendiente con ascenso es un procedimiento para recorrer secuencialmente a lo largo de la trayectoria de la máxima pendiente; en otras palabras, en la dirección del máximo incremento de la respuesta. Por supuesto, si se desea la minimización, se hablará del método de máxima pendiente en descenso. El modelo de primer orden ajustado es:

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i X_i$$

y la superficie de respuesta, o sea, las curvas de nivel de Y, constan de una serie de rectas paralelas, como se muestra en la Figura 8.2. La dirección del ascenso máximo es aquella en la que Y aumenta más rápidamente. Esta dirección es paralela a la normal de la superficie de respuesta ajustada. Por lo general, la trayectoria de máxima pendiente en ascenso se toma como la recta que atraviesa el centro de la región de interés y es normal a la superficie ajustada. Por lo tanto, los incrementos a lo largo de la trayectoria son proporcionales a los coeficientes β_i . El tamaño del incremento lo determina el experimentador con base a su experiencia con el proceso u otras consideraciones prácticas.

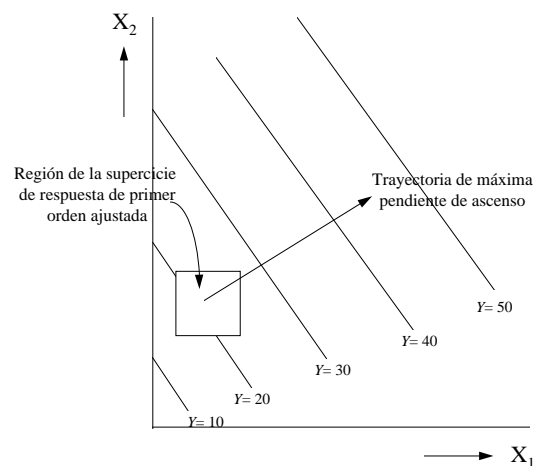


Figura 8.2: Superficie de respuesta de primer orden y trayectoria de máxima pendiente de ascenso.

Los experimentos se llevan a cabo a lo largo de la trayectoria de máximo ascenso hasta que deje de observarse un incremento adicional en la respuesta. Entonces puede ajustarse un nuevo modelo de primer orden, determinar una nueva trayectoria de ascenso máximo y continuar con el procedimiento. Por último, el experimentador llegará a la cercanía del óptimo. Usualmente esto sucede cuando ocurre una falta de ajuste del modelo de primer orden.

8.2.1 Ejemplo de aplicación.

Una ingeniera química está interesada en determinar las condiciones de operación que maximizan el rendimiento de una reacción. Dos variables controlables influyen en este rendimiento: el tiempo y la temperatura de reacción. Actualmente ella opera sobre el proceso con un tiempo de reacción de 35 minutos y temperatura de 155 °F. Esto produce un rendimiento de cerca de 40 %. Ya que es poco probable que esta región contenga el óptimo, se ajustará a un modelo de primer orden y se aplicará el método de ascenso máximo.

La ingeniera decide que la región de exploración para ajustar el modelo de primer orden debe ser 30 - 40 minutos de reacción y 150 - 160 °F. Se codifican estas variables naturales mediante las siguientes expresiones:

$$X_1 = \frac{Z_1 - 35}{5} ; \quad X_2 = \frac{Z_2 - 155}{5}$$

Siendo X_1 y X_2 las variables codificadas y Z_1 y Z_2 las variables naturales.

El diseño que se emplea es un diseño factorial 2^2 , con cinco réplicas en el punto central

Tabla 8.1: Matriz del diseño factorial con 5 réplicas en el centro y respuestas experimentales.

Prueba #	Z_1 Tiempo, min	Z_2 Temper. °F	X_1	X_2	X_1X_2	Respuesta Y
1	30	150	-1	-1	+1	39.3
2	30	160	-1	+1	-1	40.0
3	40	150	+1	-1	-1	40.9
4	40	160	+1	+1	+1	41.5
5	35	155	0	0		40.3
5	35	155	0	0		40.5
5	35	155	0	0		40.7
5	35	155	0	0		40.2
5	35	155	0	0		40.6

Promedio general (exceptúa los puntos en el centro) = 40.425

Promedio	X_1	X_2	X_1X_2
(-)	39.65	40.1	40.45
(+)	41.2	40.75	40.40
Efecto Δ	1.55	0.65	-0.05

Tabla 8.2: Análisis de la Varianza para el ejemplo.

Fuente	SS	g.l.	MS	F_o
X_1	2.4025	1	2.4025	55.87
X_2	0.4225	1	0.4225	9.83
X_1X_2	0.0025	1	0.0025	0.058
Curvatura	0.00272	1	0.00272	0.063
Error	0.172	4	0.043	
Total	3.00222	8		

$$F(\alpha; gl_T, gl_E) = F(0.05; 1, 4) = 7.71$$

El modelo matemático queda definido:

$$\hat{Y} = 40.425 + \frac{1.55}{2} X_1 + \frac{0.65}{2} X_2$$

$$\hat{Y} = 40.425 + 0.775 X_1 + 0.325 X_2$$

Habría que desplazarse 0.775 unidades en la dirección de X_1 por cada 0.325 unidades en la dirección X_2 , para alejarse del centro del diseño, (el punto $X_1 = 0$, $X_2 = 0$) a lo largo de la trayectoria de máximo ascenso. Por lo tanto, dicha trayectoria de máximo ascenso pasa por el punto ($X_1 = 0$, $X_2 = 0$) y tiene una pendiente igual a $0.325/0.775$.

A continuación se asigna un incremento, $\Delta \varepsilon_i$, a una de las variables; por supuesto depende del criterio del investigador, pero se acostumbra a hacer los incremento a la variable de mayor β en el modelo matemático obtenido. La ingeniera decide usar 5 minutos como tamaño de incremento básico del tiempo de reacción. Se calcula los incrementos de las demás variables en función de la ya fijada, en forma proporcional de la siguiente forma:

$$\frac{\Delta \varepsilon_{X_1}}{\beta_1 \Delta Z_1} = \frac{\Delta \varepsilon_{X_2}}{\beta_2 \Delta Z_2} = \dots = \frac{\Delta \varepsilon_{X_k}}{\beta_k \Delta Z_k}$$

donde:

$\Delta \varepsilon_{X_i}$ = Incrementos naturales para la variable X_i

$$\Delta Z_i = \frac{Z_i^{MAX} - Z_i^{MIN}}{2} = \text{radio del diseño}$$

β_i = parámetro en el modelo matemático.

Habiéndose definido como incremento de tiempo, X_1 , de 5 minutos, el incremento de temperatura, X_2 , se calcula:

$$\frac{5}{(0.775) \left(\frac{40-30}{2} \right)} = \frac{\Delta \varepsilon_{X_2}}{(0.325) \left(\frac{160-150}{2} \right)}$$

$$\Delta \varepsilon_{X_2} = 2.097$$

Un criterio adicional para definir los incrementos de las variable en el proceso de ascenso se establece con el uso de la siguiente expresión:

$$x_i = \frac{A \beta_i}{\left(\sum_{j=1}^k \beta_j^2 \right)^{1/2}} \quad o \quad x_1 = \frac{A \beta_1}{\left(\sum_{j=1}^k \beta_j^2 \right)^{1/2}} \quad x_2 = \frac{A \beta_2}{\left(\sum_{j=1}^k \beta_j^2 \right)^{1/2}}$$

donde:

x_i = valor codificado del incremento de la variable i .

A = número de experimento a realizar. Por ejemplo, para el primer incremento de (x_1) y, (x_2), A vale 1. Para el segundo incremento, A vale 2 y así sucesivamente.

β_j = Coeficiente de regresión para las variables del modelo (excluye las interacciones).

Considerando que los incrementos se inician desde el punto central, se elabora la Tabla 8.3 con las respuestas de experimentación respectiva.

Tabla 8.3: Experimento de máximo ascenso para el ejemplo.

	Variables naturales Z_i		Variables codificadas X_i		Respuesta, Y
	Z_1	Z_2	X_1	X_2	
Origen	35	155	0	0	
Δ	5	2.097	1.00	0.4194	
Origen + Δ	40	157.097	1.00	0.4194	41.00
Origen + 2Δ	45	159.194	2.00	0.8338	41.9
Origen + 3Δ	50	161.291	3.00	1.2573	43.1

Origen + 9Δ	80	173.873	9.00	3.7746	77.6
Origen + 10Δ	85	175.97	10.00	4.1940	80.3
Origen + 11Δ	90	178.067	11.00	4.6134	79.2
Origen + 12Δ	95	180.164	12.00	5.0328	75.1

La ingeniera calcula los puntos a lo largo de la trayectoria de ascenso, según se muestran en la Tabla 8.3 y observa el rendimiento en cada punto, hasta notar un decremento en la respuesta. Se observa un incremento en la respuesta hasta el décimo incremento; sin embargo a partir del undécimo se produce un decremento en el rendimiento. Por lo tanto, se debe ajustar otro modelo de primer orden en la cercanía general del punto $Z_1 = 85$ min., $Z_2 = 175$ °F.

Se ajusta un nuevo modelo de primer orden alrededor del punto $Z_1 = 85$ min., $Z_2 = 175$ °F. La región de exploración para Z_1 es 80 - 90 min. y para Z_2 es 170 - 180 °F. Se utiliza un diseño 2^2 , centrado en cinco punto. Los datos se expresan en la Tabla

Tabla 8.4: Matriz del diseño factorial con 5 réplicas en el centro y respuestas experimentales para el segundo modelo de primer orden.

Prueba #	Z_1 Tiempo, min	Z_2 Temper. °F	X_1	X_2	X_1X_2	Respuesta Y
1	80	170	-1	-1	+1	76.5
2	80	180	-1	+1	-1	77.0
3	90	170	+1	-1	-1	78.0
4	90	180	+1	+1	+1	79.5
5	85	175	0	0		79.9
5	85	175	0	0		80.3
5	85	175	0	0		80.0
/5	85	175	0	0		79.7
5	85	175	0	0		79.8

Promedio general (exceptúa los puntos en el centro) = 77.75

Promedio para pruebas en el centro $\bar{Y}^o = 79.94$

Promedio	X_1	X_2	X_1X_2
(-)	76.75	77.25	77.5
(+)	78.75	78.25	78.0
Efecto Δ	2.00	1.00	0.50

Tabla 8.5: Análisis de la Varianza para el ejemplo.

Fuente	SS	g.l.	MS	F_o
X_1	4.00	1	4.00	75.47
X_2	1.00	1	1.00	18.86
X_1X_2	0.25	1	0.25	4.72
Curvatura	10.658	1	10.658	201.09
Error	0.212	4	0.053	
Total	16.120	8		

$$F(\alpha; g|_T, g|_E) = F(0.05; 1, 4) = 7.71$$

El modelo matemático queda definido:

$$\hat{Y} = 77.75 + \frac{2.00}{2} X_1 + \frac{1.00}{2} X_2$$

$$\hat{Y} = 77.75 + 1.0 X_1 + 0.5 X_2$$

La curvatura que presenta este modelo matemático indica que este no es una aproximación adecuada; además que indica la proximidad del punto óptimo. En este momento debe hacerse un análisis adicional para localizar el óptimo con mayor precisión.

8.3. Diseños para ajustar modelos de segundo orden: el diseño factorial 3^k y diseño central compuesto

Los diseños de primer orden no conducen a determinar superficies que describan un máximo o un mínimo. Por esta razón se requiere por lo menos de un modelo de segundo orden. El diseño factorial 2^k no puede ser utilizado para estimar los coeficientes en un modelo de segundo orden tal como:

$$Y = \beta_o + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon$$

Esto porque se necesita por lo menos tres diferentes niveles para cada factor para estimar una función de segundo orden. Se puede utilizar un diseño factorial 3^k , donde cada factor se dispone a tres niveles: (+), (0), y (-). Para $k = 2$ se diseña la matriz codificada según se muestra en la Tabla 8.6.

Tabla 8.6: Matriz codificada para un diseño factorial 3^2 .

N	X_1	X_2
1	-1	-1
2	0	-1
3	+1	-1
4	-1	0
5	0	0
6	+1	0
7	-1	+1
8	0	+1
9	+1	+1

Un problema con los diseños factoriales 3^k es que el número de pruebas se incrementa rápidamente con k . Otros diseños, tales como el *diseño compuesto central (dcc)* han sido desarrollados para simplificar el número de pruebas. En estos se inicia el trabajo con un diseño factorial 2^k y se adicionan $2k$ puntos axiales, de la siguiente forma:

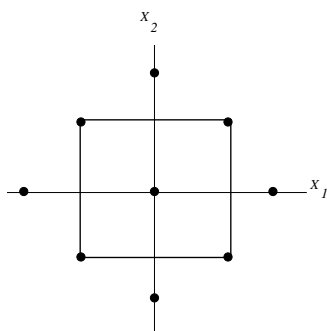
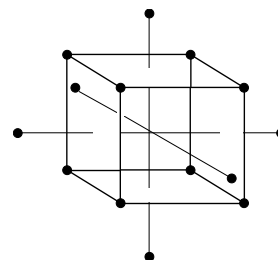
$$(\pm w, 0, \dots, 0), (0, \pm w, 0, \dots, 0), \dots, (0, \dots, \pm w)$$

Tabla 8.7: Diseño compuesto central $k = 2$

N	X_1	X_2
1	-1	-1
2	+1	-1
3	-1	+1
4	+1	+1
5	-w	0
6	w	0
7	0	-w
8	0	w
9	0	0
	:	:
n	0	0

Tabla 8.8: Diseño compuesto central $k = 3$

N	X_1	X_2	X_3
1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1
3	-1	+1	-1
4	+1	+1	-1
5	-1	-1	+1
6	+1	-1	+1
7	-1	+1	+1
8	+1	+1	+1
9	-w	0	0
10	w	0	0
11	0	-w	0
12	0	w	0
13	0	0	-w
14	0	0	w
15	0	0	0
	:	:	:
	.	.	.
n	0	0	0

Figura 8.3: Diseño compuesto central $k = 2$ Figura 8.4: Diseño compuesto central $k = 3$

Además, se hacen varias observaciones en el punto central $(0, 0, \dots, 0)$, sean estos n_1 . Esto conduce a un total de $n = 2^k + 2k + n_1$ pruebas, un número que es mucho menor que 3^k . Mas aún, si $w \neq 1$, cada variable se mide a 5 puntos diferentes, sean ellos, $-w$, -1 , 0 , 1 , y w ; esto permite realizar un mejor estimado de la curvatura.

El diseño compuesto central para $k = 2$ factores, se muestra en la Tabla 8.7. El valor de w se selecciona por el experimentador. Se pueden utilizar diversos criterios para hacer la selección. Por

ejemplo se puede escoger $w = \sqrt{2}$. Entonces el diseño es rotatable, porque, geométricamente, todos los puntos del diseño corresponden a un círculo de radio $\sqrt{2}$.

El diseño compuesto central para $k = 3$ factores, se muestra en la Tabla 8.8. Frecuentemente, con $k = 3$, w se selecciona como $w = 2^{3/4} = 1.682$. Nótese que con un punto central ($n_1 = 1$) este diseño consta de solo 15 pruebas, mientras que el diseño 3^3 requiere 27 pruebas. Para más de tres variables, la ventaja, para el diseño compuesto central en términos de número de pruebas, se hace más notoria.

8.3.1 Interpretación del modelo de segundo orden

Un modelo de segundo orden con dos variables, $k = 2$, se da por:

$$E(Y) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{12} X_1 X_2$$

Dependiendo de los valores de los coeficientes, se puede describir diferentes superficies de respuesta. Los tres más comunes son aquellos con un *máximo*, un *mínimo*, ó un punto "silla de caballo". Gráficos de los contornos de estos tres tipos de superficie se muestran en la Figura 8.5.

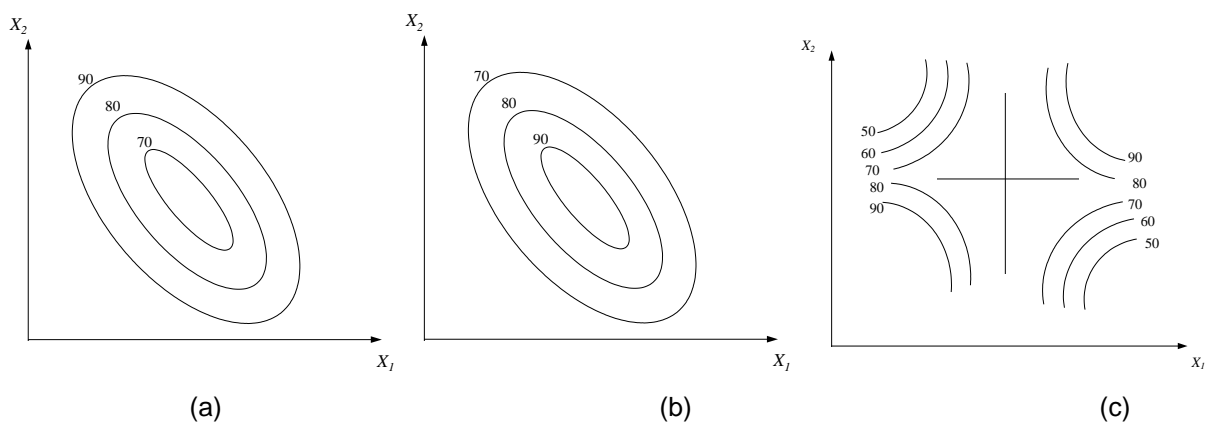


Figura 8.5: Gráficos de contornos de modelos de segundo orden : a) mínimo; b) máximo, c) "silla de caballo".

Alejándose del punto crítico (el punto del óptimo) en cualquier dirección, resulta en una disminución (o incremento) de la respuesta. Sin embargo, en el caso del punto en "la silla de caballo" el experimentador puede obtener un incremento o disminución en la respuesta cuando se aleje del punto crítico, dependiendo de la dirección que tome.

Para determinar el *punto crítico*, denominado también el *punto estacionario*, se establece las siguientes derivadas igual a cero:

$$\frac{\partial E(y)}{\partial X_1} = \beta_1 + 2\beta_{11} X_1 + \beta_{12} X_2 = 0$$

$$\frac{\partial E(y)}{\partial X_2} = \beta_2 + 2\beta_{22} X_2 + \beta_{12} X_1 = 0$$

Esto conduce a determinar el *punto estacionario*, según:

$$X_{1,0} = \frac{\beta_{12} \beta_2 - 2\beta_{22} \beta_1}{4\beta_{11} \beta_{22} - \beta_{12}^2}$$

$$X_{2,0} = \frac{\beta_{12} \beta_1 - 2\beta_{11} \beta_2}{4\beta_{11} \beta_{22} - \beta_{12}^2}$$

Para determinar la naturaleza de la superficie en el punto estacionario, se debe investigar la segunda derivada:

$$\frac{\partial^2 E(Y)}{\partial X_1^2} = 2\beta_{11}; \quad \frac{\partial^2 E(Y)}{\partial X_1 \partial X_2} = \beta_{12}; \quad \frac{\partial^2 E(Y)}{\partial X_2^2} = 2\beta_{22}$$

Si las dos soluciones de la ecuación cuadrática:

$$(2\beta_{11} - \lambda)(2\beta_{22} - \lambda) - \beta_{12}^2 = 0$$

sean λ_1 y λ_2 son ambas negativas, la función tiene un máximo en el punto estacionario $(X_{1,0}, X_{2,0})$. Si ambas son positivas, existe un mínimo; sin embargo, si presentan diferentes signos, se trata de una superficie de "silla de caballo".

Ahora, existen diversos métodos analíticos que se pueden utilizar para investigar la naturaleza de las superficies de respuesta. Por ejemplo en el caso del la "silla de caballo", esos métodos indican la dirección en la que se debe mover a fin de incrementar la respuesta. En el caso del máximo, esos métodos indican la dirección en la que la disminución de la respuesta es la más lenta. Esta información es importante, ya que indica al experimentador la dirección en la cual la respuesta es menos sensible a cambios en los factores de ingreso. Esos métodos están fuera del objetivo de este curso y tan solo se indicará que con $k = 2$ factores, se puede graficar los contornos de la superficie estimada de segundo orden y efectuar evaluaciones gráficas.

8.4. Ejemplo de aplicación

Se continua con el ejemplo de la ingeniera química que está interesada en determinar las condiciones de operación que maximizan el rendimiento de una reacción. Las dos variables controlables que influyen en este rendimiento son el tiempo y la temperatura de reacción. El modelo de primer orden que se obtuvo anteriormente:

$$\hat{Y} = 77.75 + 1.0 X_1 + 0.5 X_2$$

indicaba que este no respondía adecuadamente a los datos experimentales, por el notorio efecto de curvatura.

La experimentadora decide aumentar estos datos con suficientes puntos para ajustar un modelo de segundo orden a través de un diseño compuesto central. Diseña cuatro observaciones:

considerando $\sqrt{2} = 1.414$; $(X_1 = 0, X_2 = \pm 1.414)$ y en $(X_1 = \pm 1.414, X_2 = 0)$

El conjunto completo de los datos se muestra en la Tabla 8.9 y el diseño en la Figura 8.6

Tabla 8.9: Diseño compuesto central para el Ejemplo.

N	Variables naturales		Variables codificadas		Respuesta Y
	Z_1	Z_2	X_1	X_2	
1	80	170	-1	-1	76.5
2	80	180	-1	+1	77.0
3	90	170	+1	-1	78.0
4	90	180	+1	+1	79.5
5	85	175	0	0	79.9
6	85	175	0	0	80.3
7	85	175	0	0	80.0
8	85	175	0	0	79.7
9	85	175	0	0	79.8
10	92.07	175	1.414	0	78.4
11	77.93	175	-1.414	0	75.6
12	85	182.07	0	1.414	78.5
13	85	167.93	0	-1.414	77.0

Un modelo de segundo orden:

$$E(Y) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{12} X_1 X_2$$

se ajusta mediante mínimos cuadrados usando los datos codificados. el resultado es:

$$\hat{Y} = 79.9408 + 0.9949 X_1 + 0.5151 X_2 - 1.377 X_1^2 - 1.0018 X_2^2 + 0.25 X_1 X_2$$

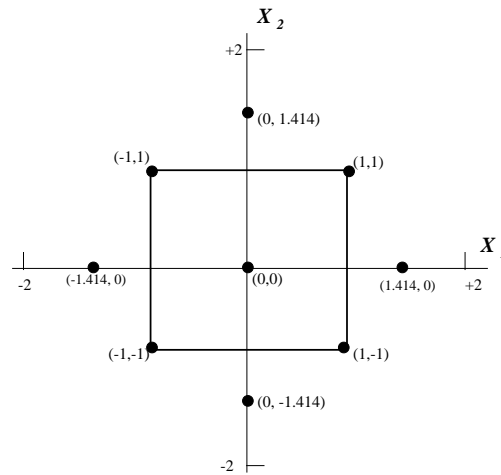


Figura 8.6: Diseño compuesto central para el ejemplo.

El punto estacionario se da por:

$$X_{1,0} = \frac{\beta_{12} \beta_2 - 2\beta_{22} \beta_1}{4\beta_{11} \beta_{22} - \beta_{12}^2} = \frac{(0.25)(0.5151) - 2(-1.008)(0.9949)}{(4)(-1.377)(-1.008) - (0.25)^2} = 0.389$$

$$X_{2,0} = \frac{\beta_{12} \beta_1 - 2\beta_{11} \beta_2}{4\beta_{11} \beta_{22} - \beta_{12}^2} = \frac{(0.25)(0.9949) - (2)(-1.377)(0.5151)}{(4)(-1.377)(-1.008) - (0.25)^2} = 0.3056$$

En términos de las variables naturales, el punto estacionario, tienen los siguientes valores:

$$X_1 = \frac{Z_1 - 85}{5}; 0.389 = \frac{Z_1 - 85}{5} \Rightarrow Z_1 = 86.945 \text{ min}$$

$$X_2 = \frac{Z_2 - 175}{5}; 0.3056 = \frac{Z_2 - 175}{5} \Rightarrow Z_2 = 176.53 \text{ } ^\circ F$$

Usando la ecuación de segundo orden obtenida con el diseño experimental, y reemplazando los valores en el punto estacionario, ($X_1 = 0.389$, $X_2 = 0.3056$), se obtiene:

$$\hat{Y} = 80.213$$

La forma más simple de caracterizar la superficie de respuesta consiste en construir una gráfica de contornos del rendimiento en función del tiempo y temperatura. El gráfico tridimensional que se obtenga permitirá observar las tendencias de la respuesta por cambios en los valores de tiempo y temperatura.

Los valores propios de λ_1 , λ_2 son las raíces de la ecuación:

$$(2\beta_{11} - \lambda)(2\beta_{22} - \lambda) - \beta_{12}^2 = 0$$

que se reduce a:

$$\lambda^2 + 4.7576 \lambda + 5.4554 = 0$$

Las raíces de esta ecuación cuadrática son $\lambda_1 = -1.415$ $\lambda_2 = -0.964$. Siendo ambos valores negativos, el punto estacionario es un máximo.

De ese modo, a pesar que el experimentador inicio su estudio con un tiempo de reacción de 35 minutos y temperatura de 155 °F produciendo un rendimiento de cerca de 40 %, una secuencia de experimentos iterativos le ha conducido a un máximo.

8.5. Diseños experimentales para ajustar superficies de respuesta

El ajuste y análisis de superficies de respuestas se facilita en gran medida con la elección apropiada de un diseño experimental. Cuando se selecciona un diseño de superficie de respuesta, algunas de las características deseables de un diseño son como sigue:

- Proporciona una distribución razonable de puntos de datos (y por lo tanto de información) en toda la región de interés.
- Permite investigar la idoneidad del modelo, incluyendo la falta de ajuste.
- Permite la realización de experimentos en bloques.
- Permite la construcción secuencial de diseños de orden superior.
- Proporciona una estimación de error interna.
- No requiere de número grande de corridas.
- No requiere demasiados niveles de las variables independientes.
- Asegura la simplicidad de los cálculos de los parámetros del modelo.

Algunas veces estas características son conflictivas, así que debe aplicarse el buen juicio en la elección del diseño.

8.5.1. Diseños para ajustar el modelo de primer orden

Si se desea ajustar el modelo de primer orden de k variables:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i X_i + \varepsilon$$

hay una clase única de diseños que minimizan la varianza de los coeficientes de regresión, estos son los diseños ortogonales de primer orden. Esta clase de diseños ortogonales de primer orden incluye diseños factoriales 2^k y fraccionales de la serie 2^k , en los que los efectos principales no son alias entre sí. Al usar estos diseños se considera que los k factores se codifican a los niveles estandarizados ± 1 . Como ejemplo, supongamos que se usa el diseño 2^3 para ajustar el diseño de primer orden:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \varepsilon$$

se usa el siguiente diseño:

-1	-1	-1
1	-1	-1
-1	1	-1
1	1	-1
-1	-1	1
1	-1	1
-1	1	1
1	1	1

El diseño 2^k no permite la estimación del error experimental a menos que se repitan algunos ensayos. Un método común para incluir la repetición de ensayos consiste en aumentar las repeticiones en el centro. La adición de puntos centrales no tiene influencia sobre las β_i para $i \geq 1$, pero como resultado, la estimación de β_0 es el promedio general de todas las observaciones. Además, agregar puntos centrales no altera las propiedades del diseño.

Otro diseño ortogonal de primer orden es el *simplex*. Este se representa por una figura regular con $k+1$ vértices en k dimensiones. Así, para $k=2$ el diseño simplex es un triángulo equilátero; mientras que para $k=3$ es un tetraedro regular; como se muestra las Figuras 8.7

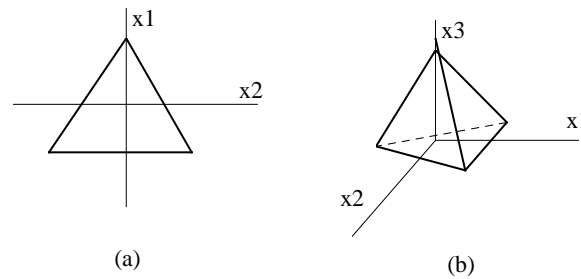


Figura 8.7: Diseño *simplex* para : (a) $k=2$ variables; (b) $k=3$ variables.

8.5.2. Diseños para ajustar un modelo de segundo orden

Un diseño experimental para ajustar un modelo de segundo orden debe tener por lo menos tres niveles de cada factor. Existen muchos diseños que podrían emplearse para ajustar un modelo de segundo orden, así que elegir el modelo apropiado es útil con el objeto de establecer un criterio de diseño apropiado. Un criterio importante en un diseño de segundo orden es la rotabilidad. Se dice que un diseño experimental es rotable o girable si la varianza de la respuesta predicha en algún punto de X es función solo de la distancia al punto desde el centro del diseño y no es una función de dirección. Además, un diseño con esta propiedad dejará sin cambio la varianza de la respuesta cuando el diseño se haga rotar alrededor del centro. De aquí el nombre de rotable.

La rotabilidad es una propiedad muy importante en la elección de un diseño de superficie de respuesta. Dado que la finalidad de la *RSM* es la optimización y se desconoce la localización del óptimo antes de correr el experimento, tiene sentido usar un diseño que proporcione estimaciones igualmente precisas en todas direcciones. Obsérvese que todo diseño ortogonal de primer orden es rotable.

Un diseño 3^2 no es rotable, por este motivo, un diseño 3^k y sus fracciones no son buenas elecciones como diseños de superficie de respuesta de segundo orden. Un diseño central compuesto es rotable; y es probablemente el diseño experimental más utilizado para ajustar superficies de respuesta de segundo orden.

Un diseño central compuesto tiene dos factores de porción factorial que contiene 2^k puntos para lograr la invariabilidad ante el giro. Para el caso en que $k=2$ los puntos de porción factorial equivalen a 1.414. Otra propiedad útil del diseño central compuesto es que puede "crecer" a partir de un diseño factorial de primer orden (el 2^k) agregando puntos axiales y quizá algunos puntos centrales.

Existen otros diseños rotables que ocasionalmente son útiles en problemas con dos o tres variables. Estos diseños consisten en puntos igualmente espaciados sobre una circunferencia ($k=2$) o una esfera ($k=3$), y son polígonos regulares o poliedros. A menudo estos arreglos se conocen como diseños equirradiales, porque los puntos del diseño son equidistantes del origen.

El diseño equirradial con $k=2$, se obtiene combinando $n_2 \geq 5$ puntos igualmente espaciados sobre una circunferencia con $n_1 \geq 1$ puntos en su centro. El pentágono y el hexágono son diseños particularmente útiles para $k=2$. Estos diseños se muestran en la Figura 8.8. Para $k=3$ los únicos arreglos equirradiales que contienen suficientes puntos para permitir la estimación de todos los parámetros del modelo de segundo orden son icosaedro (20 puntos) y el dodecaedro (12 puntos).

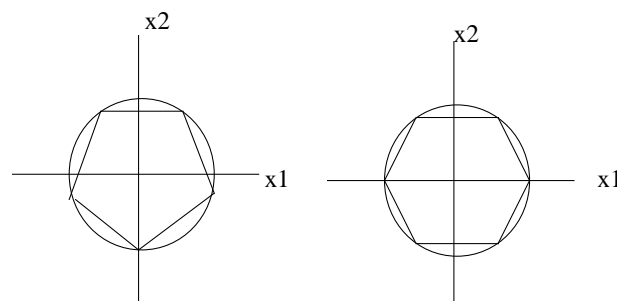


Figura 8.8: Diseños equirradiales para dos variables, pentágono y hexágono.

La matriz de diseño para un diseño pentagonal y hexagonal se establece como sigue;

Tabla 8.10: Diseño pentagonal $k = 2$

N	X_1	X_2
1	1.0	0.0
2	0.309	0.951
3	-0.809	0.588
4	-0.809	-0.588
5	0.309	-0.951
6	0.0	0.0

Tabla 8.11: Diseño hexagonal $k = 2$

N	X_1	X_2
1	1.0	0.0
2	0.5	0.866
3	-0.5	0.866
4	-1.0	0.0
5	-0.5	-0.866
6	0.5	-0.866
7	0.0	0.0
8	0.0	0.0
9	0.0	0.0