Pontificia Universidad
JAVERIANA
Bogotá

| VIGILADA MINEDUCACIÓN |

Superficies de respuesta
Diseño de Experimentos

Pontificia Universidad
JAVERIANA
Colombia

Introducción

La metodología de **superficies de respuesta**, o MSR, es una colección de técnicas matemáticas y estadísticas útiles en el modelado y el análisis de problemas en los que una respuesta de interés recibe la influencia de diversas variables y donde el objetivo es optimizar esta respuesta.

Por ejemplo, suponga que un ingeniero químico quiere encontrar los niveles de temperatura (Xl) y presión (x2) que maximicen el rendimiento (y) de un proceso. El rendimiento del proceso es una función de los niveles de la temperatura y la presión, por ejemplo:

$$y = f(x_1, x_2) + \varepsilon$$

Superficie de respuesta

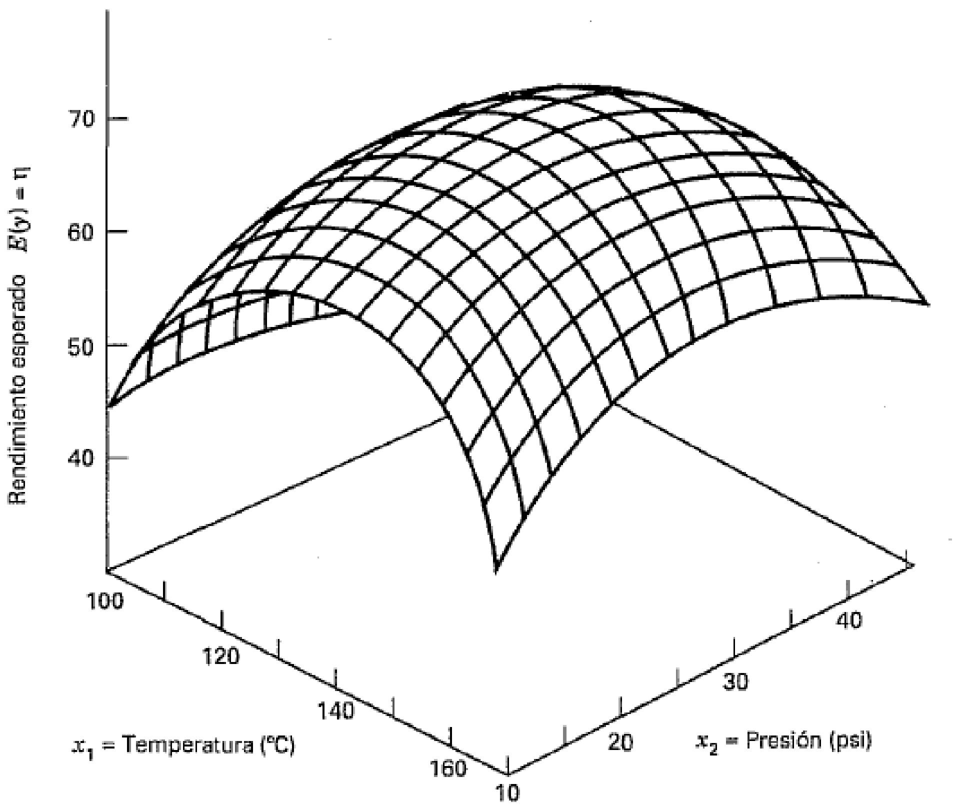


Figura 11-1 Superficie de respuesta tridimensional donde se indica el rendimiento esperado (η) como una función de la temperatura (x_1) y la presión (x_2).

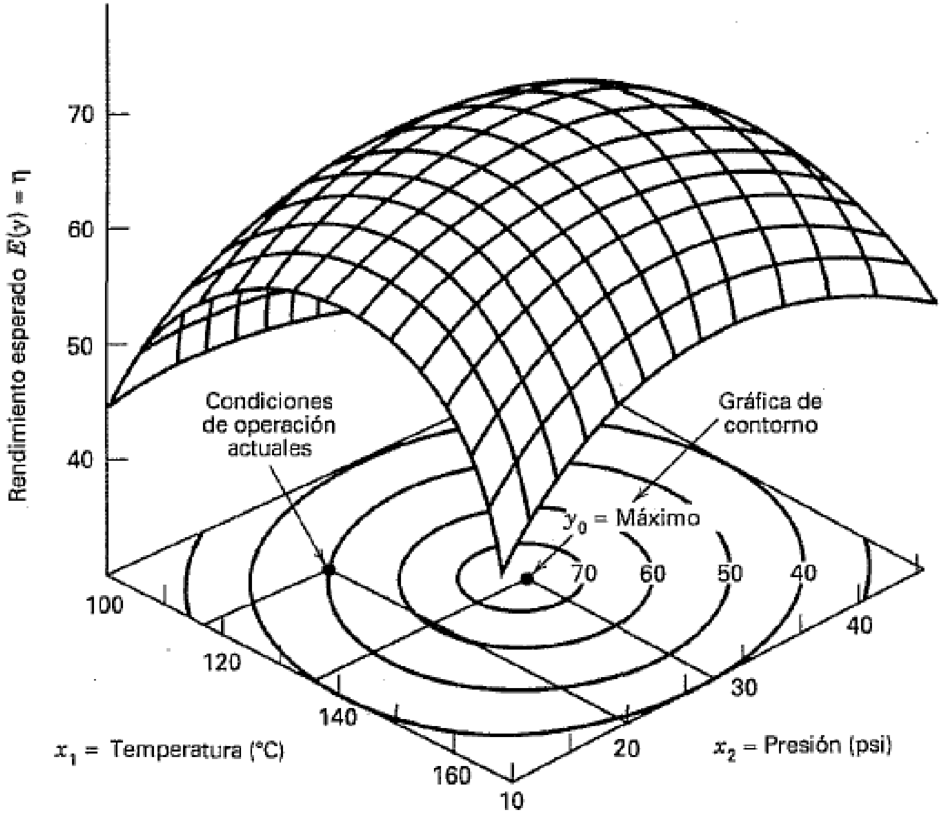


Figura 11-2 Gráfica de contorno de una superficie de respuesta.

Superficie de respuesta

Si la respuesta está bien modelada por una función lineal de las variables independientes, entonces la función de aproximación es el modelo de primer orden:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_k x_k + \varepsilon$$

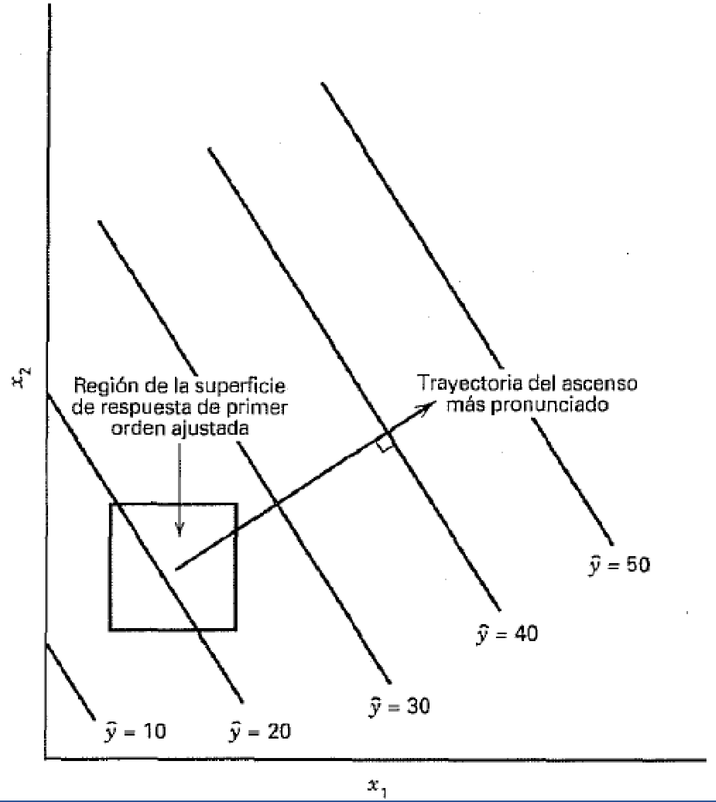
Si hay curvatura en el sistema, entonces debe usarse un polinomio de orden superior, tal como el modelo de segundo orden:

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

Método del ascenso más pronunciado

El método del ascenso más pronunciado es un procedimiento para moverse secuencialmente sobre la trayectoria del ascenso más pronunciado, es decir, en la dirección del incremento máximo de la respuesta. Desde luego, si lo que se pretende es una minimización, entonces esta técnica se llama método del descenso más pronunciado.

Por lo general se toma como la trayectoria del ascenso más pronunciado a la recta que pasa por el centro de la región de interés y que es normal a la superficie ajustada.



Método del ascenso más pronunciado

1. Se escoge un tamaño de incremento para uno de las variables independientes o factores Δxj. Normalmente elegimos la variable con mayor coeficiente de regresión absoluto |βj|.

2. Aplicamos el incremento en el resto de las variables:

$$\Delta x_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\beta}_j / \Delta x_j} \qquad i = 1, 2, \ldots, k \qquad i \neq j$$

3. Convertimos Δxi a unidades naturales.

Método del ascenso más pronunciado

Steps	x_1	x_2	ξ_1	ξ_2	y
Origin	0	0	35	155	
Δ	1.00	0.42	5	2	
Origin + Δ	1.00	0.42	40	157	41.0
Origin + 2Δ	2.00	0.84	45	159	42.9
Origin + 3Δ	3.00	1.26	50	161	47.1
Origin + 4Δ	4.00	1.68	55	163	49.7
Origin + 5Δ	5.00	2.10	60	165	53.8
Origin + 6Δ	6.00	2.52	65	167	59.9
Origin + 7Δ	7.00	2.94	70	169	65.0
Origin + 8Δ	8.00	3.36	75	171	70.4
Origin + 9Δ	9.00	3.78	80	173	77.6
Origin + 10Δ	10.00	4.20	85	175	80.3
Origin + 11Δ	11.00	4.62	90	179	76.2
Origin + 12Δ	12.00	5.04	95	181	75.1

Método del ascenso más pronunciado

En una planta química se produce oxígeno licuando aire y separándolo por destilación fraccionada en sus gases componentes. La pureza del oxígeno es una función de la temperatura del condensador principal y de la relación de la presión entre las columnas superior e inferior. Las condiciones de operación actuales son temperatura (E1) = -220°C y la relación de la presión (E2) = 1.2. Utilizando los datos siguientes, encontrar la trayectoria del ascenso más pronunciado:

Temperatura (ξ_1)	Índice de la presión (ξ_2)	Pureza
–225	1.1	82.8
–225	1.3	83.5
–215	1.1	84.7
–215	1.3	85.0
–220	1.2	84.1
–220	1.2	84.5
–220	1.2	83.9
–220	1.2	84.3

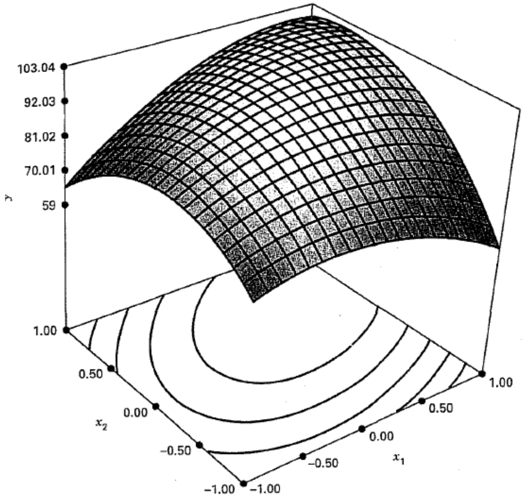
Superficie de segundo orden

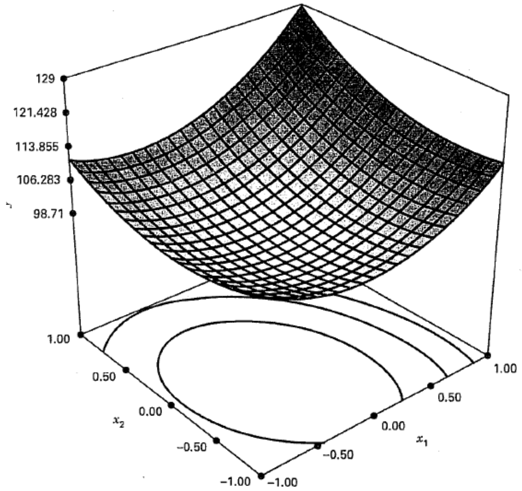
Cuando el experimentador se encuentra relativamente cerca del óptimo, por lo general se requiere un modelo que incorpore la curvatura para aproximar la respuesta. En la mayoría de los casos, el modelo de segundo orden es adecuado.

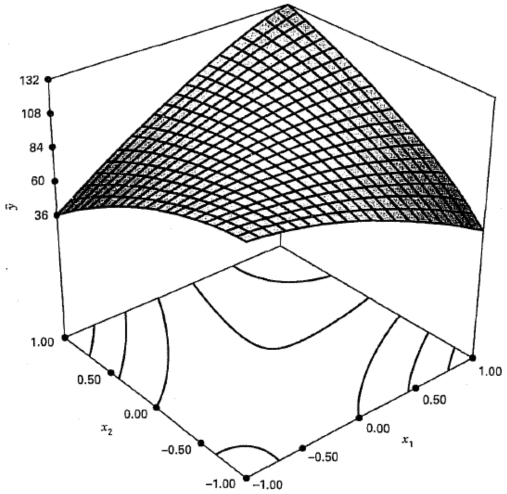
$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i<j}\sum \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon$$

Superficie de segundo orden

Suponga que quieren encontrarse los niveles de las variables x que optimizan la respuesta predicha. Este punto, en caso de existir se le llama punto estacionario. El punto estacionario podría representar 1) un punto de respuesta máxima, 2) un punto de respuesta mínima, o 3) un punto silla.







Superficie de segundo orden

$$\mathbf{x}_s = -\frac{1}{2}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11}, & \hat{\beta}_{12}/2, & \ldots, & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ & \hat{\beta}_{22}, & \ldots, & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ & & \ddots & \\ \text{simétrica} & & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$

Diseños para aplicar superficies de respuesta

Primer orden: la clase de los diseños de primer orden incluye los diseños factoriales 2k y las fracciones de la serie 2k en las que los efectos principales no son alias entre sí. Al usar estos diseños se supone que los niveles bajo y alto de los k factores están codificados en los niveles usuales ± 1. El diseño 2k no permite la estimación del error experimental a menos que se hagan réplicas de algunas corridas. Un método común de incluir las réplicas en el diseño 2k es aumentar el diseño con varias observaciones en el centro.

Segundo orden: para estimar los parámetros de un modelo polinómico de segundo grado podrían utilizarse diseños factoriales 3k, pero ello requeriría de un número de combinaciones muy alto. Existen otra clase de diseños que permiten ajustar este tipo de modelo con un número menor de combinaciones. Entre ellos están los Diseños Centrales Compuestos (DCC: muestras factoriales, muestras axiales, y muestras centrales replicadas).

Bloques en diseños de superficie de respuesta

$$\mathbf{D} = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \quad x_1 & \qquad\quad x_2 \end{array} \\ \left[\begin{array}{cc} -1 & -1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1.414 & 0 \\ -1.414 & 0 \\ 0 & 1.414 \\ 0 & -1.414 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{l} \left.\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}\right\} \text{Block 1} \\ \left.\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}\right\} \text{Block 2} \end{array}$$

Ejercicio 1

Para el modelo de primer orden encontrar la trayectoria del ascenso más pronunciado. Las variables están codificadas entre -1 y 1.

$$\hat{y} = 60 + 1.5x_1 - 0.8x_2 + 2.0x_3$$

Ejercicio 2

La región de experimentación de dos factores son la temperatura (entre 100 y 300°F) y la velocidad de alimentación del catalizador (entre 10 y 30 lb/pulg). Un modelo de primer orden con las variables codificadas usuales ±1 se ha ajustado a la respuesta peso molecular, obteniéndose el modelo siguiente:

$$\hat{y} = 2000 + 125x_1 + 40x_2$$

a) Encontrar la trayectoria del ascenso más pronunciado.
b) Se desea mover a una región donde los pesos moleculares rebasen 2500. Con base en la información que se tiene por la experimentación en esta región, ¿aproximadamente cuántos pasos en la trayectoria del ascenso más pronunciado se necesitan para moverse a la región de interés?

Ejercicio 3

Un ingeniero químico recolectó los siguientes datos. La respuesta y es el tiempo de filtración, x1 es la temperatura y x2 es la presión. Ajustar un modelo de segundo orden.

x_1	x_2	y
–1	–1	54
–1	1	45
1	–1	32
1	1	47
–1.414	0	50
1.414	0	53
0	–1.414	47
0	1.414	51
0	0	41
0	0	39
0	0	44
0	0	42
0	0	40

a) ¿Qué condiciones de operación se recomendarían si el objetivo es minimizar el tiempo de filtración?
b) ¿Qué condiciones de operación se recomendarían si el objetivo es operar el proceso con una velocidad de filtración media muy próxima a 46?

Ejercicio 4

El diseño que se presenta a continuación se usa en un experimento que tiene como objetivo ajustar un modelo de segundo orden:

x_1	x_2	y
1	0	68
0.5	$\sqrt{0.75}$	74
−0.5	$\sqrt{0.75}$	65
−1	0	60
−0.5	$-\sqrt{0.75}$	63
0.5	$-\sqrt{0.75}$	70
0	0	58
0	0	60
0	0	57
0	0	55
0	0	69

a) Ajustar el modelo de segundo orden.
b) Efectuar el análisis canónico. ¿Qué tipo de superficie se ha encontrado?
c) ¿Qué condiciones de operación para x1 y x2 llevan al punto estacionario?
d) ¿Dónde se correría este proceso si el objetivo es obtener una respuesta que esté tan cerca de 65 como sea posible?

Bibliografía

Gutierrez, H. Análisis y diseño de experimentos. México: Mc Graw Hill, 2004.

Montgomery. Diseño y análisis de Experimentos. 2 Edición. John Wiley and sons, 2002.