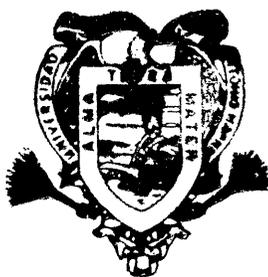


**FUNDAMENTOS DEL ANALISIS DE LAS
SUPERFICIES DE RESPUESTA**

JORGE CARLOS VIVANCO TORRES

T E S I S

**PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL
PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS
EN ESTADISTICA EXPERIMENTAL**



**Universidad Autónoma Agraria
Antonio Narro**

PROGRAMA DE GRADUADOS

Buenavista, Saltillo, Coah.

Octubre de 1988

Tesis elaborada bajo la supervisión del comité particular de asesoría y aprobada como requisito parcial, para optar al grado de

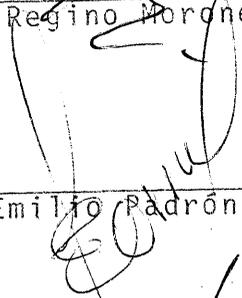
MAESTRO EN CIENCIAS
EN ESTADISTICA EXPERIMENTAL

COMITE PARTICULAR

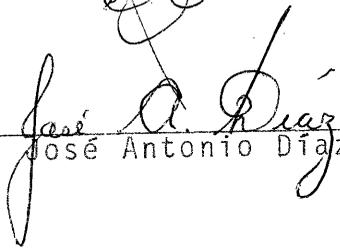
Asesor principal:


M.C. Regino Morones Reza

Asesor:

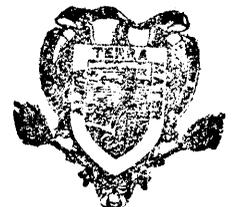

M.C. Emilio Padrón Corral

Asesor:


M.C. José Antonio Díaz García


Dr. Eleuterio López Pérez
Subdirector de Asuntos de Postgrado

Universidad Autónoma Agraria
"ANTONIO JARRO"



BIBLIOTECA

Buenavista, Saltillo, Coahuila. Octubre de 1988

Agradezco a:

Universidad Autónoma Agraria Antonio Narro, por permitirme formar parte de su Programa de Graduados.

Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo económico que me brindó durante mis estudios.

Todos y cada uno de mis maestros, por los conocimientos que compartieron conmigo.

La Sra. Leticia Ayala por su dedicación y paciencia en la elaboración mecanográfica del presente trabajo, ignorando diferencias existentes.

Jose Antonio Diaz García, por su tenacidad y ayuda moral para poder lograr la culminación de este trabajo.

Con amor: Kriss

Con cariño: Christian y Carlos

Con amor: Carlos e Irene

COMPENDIO

Fundamentos del Análisis de las Superficies de Respuesta

Por

JORGE CARLOS VIVANCO TORRES

MAESTRIA EN CIENCIAS
ESTADISTICA EXPERIMENTAL

UNIVERSIDAD AUTONOMA AGRARIA ANTONIO NARRO
BUENAVISTA, SALTILLO, COAHUILA. OCTUBRE DE 1988

M.C. Regino Morones Reza - Asesor -

Palabras clave: Superficies de respuesta; diseños de primer orden; diseños de segundo orden; diseño factorial 2^K ; diseño factorial fraccionado 2^{K-P} ; diseño central compuesto; - diseño rotatable; análisis canónico.

El presente trabajo contiene una exposición de los - aspectos importantes del análisis de la metodología de la su perficie de respuesta. Se está principalmente interesado en los resultados clásicos en este campo, así como en algunos - desarrollos recientes.

Aunque esencialmente no se obtienen nuevas técnicas, se hace un análisis general de las técnicas de mayor interés.

ABSTRACT

Fundamentals of Analysis
of the Response Surfaces

By

JORGE CARLOS VIVANCO TORRES

MASTER OF SCIENCE
EXPERIMENTAL STATISTICS

UNIVERSIDAD AUTONOMA AGRARIA ANTONIO NARRO
BUENAVISTA, SALTILLO, COAHUILA. OCTOBER 1988

M.C. Regino Morones Reza. - Advisor -

Key words: Response surfaces, first order design,
central composite design, rotatable design,
 2^K factorial design, 2^{K-P} fractional factorial
design, second order design.

This work contains an exposition of some important
aspects about the analysis of the Response Surface Methodo -
logy. It is mainly concerned with the classical results in -
this area, but some recent developments in this field are -
presented.

Although essentially no new techniques were obtained, it does an general analysis of the most importan topics of - this area.

INDICE DE CUADROS

Cuadro No.		Página
5.1	Coordenadas a lo largo del camino de máxima pendiente (variables descodificadas)	38
6.1	Matriz de diseño de un factorial 2^3 . . .	57
6.2	Valores de S para un F.F. 2^{4-1} con definición de contraste ABCD	
6.3	Partición de los grados de libertad para un factorial fraccionado con definición de contraste I = ABCD aumentado con cuatro puntos centrales	70
7.1.	Valores de λ_4 para los cuales $V(\rho = 1) = V(\rho = 1)$	90
7.2	Valores de α para un diseño central com- puesto rotatable	92

INDICE DE FIGURAS

Figura No.		Página
4.1.	Curva de respuesta para un factor	22
4.2.	Curva de respuesta para dos factores	23
4.3	Máximo atenuado	23
4.4	Cordillera estacionaria	23
4.5	Punto de silla	24
5.1	Sistema de cordillera ascendente.	28
5.2	Punto de silla en 2 variables	33
5.3	Máximo alargamiento a lo largo del eje ρ_1	33
5.4	Sistema de respuesta	50
6.1	Orientación del diseño óptimo para $n = q$ y $k = 3$	72
7.1	Diseño compuesto central para $k = 3$	75
7.2	$N \text{Var}(\hat{y}_X)/\sigma^2$ como una función de ρ , λ_4 y k_2	89

INDICE DE CONTENIDO

	Página
INDICE DE CUADROS	xi
INDICE DE FIGURAS	xii
INTRODUCCION	1
REVISION DE LITERATURA	4
POSTULADO DEL PROBLEMA	5
DISEÑOS EXPERIMENTALES	6
DISEÑOS EXPERIMENTALES DE PRIMER ORDEN	9
DISEÑOS EXPERIMENTALES DE SEGUNDO ORDEN	9
BLOQUEO	10
ANALISIS DE DATOS	10
PRELIMINARES	13
FUNDAMENTOS DE LA METODOLOGIA DE LA SUPERFICIE DE RESPUESTA	23
DETERMINACION DE LAS CONDICIONES OPTIMAS	26
ANALISIS DE UNA SUPERFICIE AJUSTADA	27
ANALISIS CANONICO	29
INTERPRETACION DEL SISTEMA	32
METODOS DE ASCENSO POR LA PENDIENTE MAXIMA. ANALISIS DE CORDILLERA	34
MULTIPLICADORES INDETERMINADOS DE LAGRANGE	39
DERIVACION DEL METODO	42
PROPIEDADES DEL VALOR ESTACIONARIO	44
DISEÑOS DE PRIMER ORDEN	52
DISEÑO ORTOGONAL	53
DISEÑOS FACTORIALES	55
DISEÑOS FACTORIALES FRACCIONADOS 2^{k-p} ADICION DE PUNTOS EN EL CENTRO DEL DISEÑO 2^k FACTORIAL	61
DISEÑOS SIMPLEX	71
DISEÑOS DE SEGUNDO ORDEN	74
DISEÑO COMPUESTO CENTRAL	74
DISEÑOS ROTABLES DE SEGUNDO ORDEN	79
MATRIZ DE MOMENTOS	79
LA FUNCION VARIANZA PARA EL DISEÑO	79
MOMENTOS DE UN DISEÑO ROTABLE	80

	Página
DISEÑO CENTRAL COMPUESTO ROTABLE	90
EJEMPLOS DE DISEÑOS ROTABLES DE SEGUNDO ORDEN	93
DISEÑOS EN DOS DIMENSIONES	95
DISEÑO EQUIRADIAL EN DOS VARIABLES	97
DISEÑOS PARA EXPERIMENTOS EN BLOQUES	100
BLOQUEO EN EL CASO DEL MODELO DE PRIMER ORDEN	100
USO DE 2^k FACTORIALES EN p BLOQUES PARA AJUSTAR S.R. DE PRIMER ORDEN	103
BLOQUEO EN MODELOS DE SEGUNDO ORDEN	105
DISEÑO CENTRAL COMPUESTO-USO DE DOS BLOQUES	107
LITERATURA CITADA	111

CAPITULO 1 INTRODUCCION

La metodología de la superficie de respuesta es, en esencia, un conjunto de métodos matemáticos y estadísticos - que se utilizan para analizar sistemas o fenómenos en los - cuales se pretende encontrar la respuesta óptima de alguna - característica continua de interés, que está en función de - variables independientes (sujetas a control) dentro de un - área restringida de interés. Este conjunto de métodos, a sa- ber: métodos de optimización matemática, estrategia experi - mental o inferencia estadística, permiten al experimentador analizar de una manera empírica al sistema de interés.

Inicialmente la metodología de la superficie de res- puesta fue desarrollada en el área de química experimental, sin embargo, ha sido ampliamente utilizada en otras áreas co mo: biología, agronomía experimental, psicología, industria de los alimentos, educación, entre otras.

Tales métodos fueron inicialmente desarrollados por Box y Wilson (1951), dando origen a un gran interés por el uso de tales métodos.

A partir de dicha publicación, el aporte de los in - vestigadores ha sido en su mayoría en el área de la -

estrategia experimental, esto es, en la creación de diseños experimentales que permitan obtener un conocimiento empírico del sistema con el menor costo posible.

Así, el objetivo primordial del presente análisis es profundizar los aspectos teóricos de las técnicas utilizadas en la metodología de la superficie de respuesta, con la finalidad de proporcionar al investigador una herramienta, la cual, como ya se mencionó, minimiza el costo de la investigación debido a la considerable reducción del número de unidades experimentales y subsecuentemente, el manejo y análisis de las mismas.

A continuación se presenta una breve descripción de los tópicos abordados en los siguientes capítulos.

En el capítulo dos se enuncian los principales estudios realizados referentes a la Metodología de la Superficie de Respuesta.

Algunos conceptos preliminares sobre Algebra de los Modelos Lineales, así como también sobre Inferencia Estadística, son tratados en el tercer capítulo.

Como cuarto capítulo se comentan los fundamentos y finalidades de la Metodología de la Superficie de Respuesta.

El quinto capítulo es dedicado a la descripción de las técnicas utilizadas en el análisis de la superficie ajustada o ecuación de respuesta, entre éstas se incluyen el Análisis Canónico y el de Cordillera.

El siguiente capítulo trata sobre diseños de primer orden, los cuales son utilizados generalmente para iniciar la investigación empírica en donde se presupone se encuentra el óptimo.

El capítulo siete es dedicado a los diseños de segundo orden, los cuales, como será visto, constituyen una de las principales técnicas de la Metodología de la Superficie de Respuesta, ya que la mayoría de los fenómenos naturales presentan una tendencia cuadrática. Algunos de los tópicos abordados en este capítulo son los diseños centrales compuestos y los diseños rotables.

Finalmente, debido a que en ocasiones el número de puntos experimentales necesarios para realizar el análisis es excesivo, se presentan en el capítulo ocho algunos comentarios sobre el uso del bloqueo en los diseños de Superficie de Respuesta.

CAPITULO 2

REVISION DE LITERATURA

Una de las contribuciones más importantes a la Metodología Estadística en los últimos años, ha sido el desarrollo de procedimientos sistemáticos para determinar experimentalmente aquellos niveles de los factores cuantitativos que producen una respuesta óptima de alguna función, a estos procedimientos generalmente se les conoce como técnicas de la superficie de respuesta, Ostle (1977).

El objetivo de dichas técnicas es encontrar la combinación óptima de los niveles de los factores (tratamientos) que produce la máxima respuesta, e investigar la superficie de respuesta cercana a la producción óptima. En general, la superficie de respuesta será una función no lineal la cual puede ser aproximada adecuadamente por un polinomio cuadrático (2° orden) en una pequeña región cercana a la condición óptima, Anderson-Mc Lean (1974).

La metodología de la superficie de respuesta es esencialmente un conjunto particular de métodos matemáticos y estadísticos usados por los investigadores para ayudar a la solución de ciertos tipos de problemas relacionados con procesos científicos. Los procedimientos de la superficie de

respuesta son una colección que involucra estrategia experimental, métodos matemáticos, e inferencia estadística, los cuales, cuando son combinados, permiten al experimentador hacer una exploración empírica eficiente del sistema de interés, Myers (1971).

Cochran y Cox (1978) han incluido un capítulo dedicado exclusivamente a la discusión de la Metodología de la Superficie de Respuesta.

El presente capítulo se encuentra dividido en tres secciones:

- I. Postulación del problema
- II. Selección del diseño experimental.
- III. Análisis de los datos.

I. Postulación del Problema

En su revisión de literatura sobre Metodología de la Superficie de Respuesta, Hill y Hunter (1966) afirman que ésta fue inicialmente desarrollada por Box y Wilson (1951).

En dicho reporte se supone que una respuesta η es función de los niveles de k factores cuantitativos x_1, x_2, \dots, x_k los cuales pueden ser controlados y sujetos a medición. Si se llevan a cabo N combinaciones factoriales o de tratamientos, se tiene:

$$\eta_i = \phi(x_{1i}, x_{2i}, x_{ki}) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

El problema es encontrar, con el menor número de experimentos, el punto de la región experimental en el cual n llega a su máximo. La suposición principal del reporte de Box y Wilson es que la respuesta puede ser aproximada por un polinomio en los niveles de los diferentes factores involucrados.

Sugieren que, aunque dicho reporte se basa en investigaciones químicas, las conclusiones obtenidas y métodos usados pueden ser de utilidad en otros campos donde la experimentación secuencial pueda llevarse a cabo y el error experimental es pequeño.

Las ideas de Box y Wilson fueron extendidas y discutidas por el mismo Box (1954) ; Box y Youle (1955). En estos reportes se asumió que, aunque la experimentación sobre un proceso fuera secuencial, deberían ser definidos claramente períodos experimentales durante los cuales los procesos bajo investigación estén sujetos a una escala completa de experimentación.

Además, Box (1954) discute desde un punto de vista geométrico la función respuesta en la región cercana al óptimo y propone un método secuencial para explorar la superficie de respuesta.

II. Diseños Experimentales

Box y Hunter (1957) definen un diseño experimental k -dimensional de orden d como el conjunto de N puntos en el

espacio k -dimensional de las unidades o factores, escogido de manera tal que usando los datos generados por la observación en cada uno de los N puntos, todos los coeficientes en el polinomio de grado d puedan ser estimados.

Box y Wilson (1951) remarcan que, debido a la suposición de que la respuesta n puede ser aproximada por una función polinomial, existen dos fuentes de error:

- i) El error experimental en la estimación de la función polinomial, y
- ii) El sesgo debido a las discrepancias entre la función polinomial asumida y la respuesta verdadera.

Así, para decidir sobre algún diseño experimental, la varianza de la función polinomial asumida y la diferencia entre las dos funciones deben ser consideradas.

Box (1954) sugiere el uso de las variables independientes o factores en una forma estandarizada, en la cual el origen es tomado como el centro del diseño.

Box y Hunter (1957) sugieren que si la función respuesta n va a ser aproximada por un polinomio, el diseño experimental debe cumplir:

- a) El diseño debe permitir la aproximación polinomial de grado d (tentativamente asumido para ser la representación adecuada) para ser estimada con suficiente exactitud dentro de la región de

interés.

- b) Debe permitir una comprobación sobre la representación del polinomio.
- c) No debe contener un número excesivo de puntos experimentales.
- d) Debe prestarse a "bloqueo".
- e) Debe de ser posible extenderlo a uno de mayor orden.

Además, introducen el concepto de función varianza - para los diseños y definen el diseño rotatable, el cual tiene la propiedad de que su función varianza es o casi es esférica, lo cual quiere decir que la varianza de la respuesta estimada en un punto tiene un valor que depende solamente de la distancia entre éste y el centro del diseño, y no de la dirección que tiene dicho punto con respecto al origen.

Box y Wilson (1951) comparan las características de algunos diseños experimentales e introducen por vez primera el concepto de Diseño Compuesto.

Box y Draper (1959) sugieren que el diseño adecuado es aquél que minimiza la esperanza del cuadrado medio del error sobre la región experimental, el cual contiene dos componentes: uno asociado con el error muestral y otro con el error debido al sesgo (mide las discrepancias entre la función polinomial asumida y la verdadera respuesta).

Diseños Experimentales de Primer Orden

Los diseños experimentales que permiten la estimación de los parámetros en un modelo de primer orden (lineal) son llamados diseños de primer orden.

Los reportes de Box y Hunter (1961 a,b) contienen algunos tópicos e ideas de los diseños factoriales y factoriales fraccionados, los cuales son muy útiles en trabajo de exploración para el ajuste de relaciones lineales entre la respuesta y los K factores.

Box (1952) demuestra cómo construir diseños óptimos de tamaño mínimo para el ajuste de un polinomio de primer grado. Muchas de las conclusiones obtenidas en este último reporte tienen su fundamento en la publicación de Plackett y Burman (1946). Los diseños utilizados por Box (1952) son, en general, Diseños Ortogonales.

Box y Hunter (1957) demuestran que un diseño rotatable de primer orden tiene las mismas características que los usados por Box (1952).

Diseños Experimentales de Segundo Orden

Box y Wilson (1951) sugieren el uso del diseño factorial 3^K y además introducen el Diseño Compuesto para el ajuste de un polinomio de segundo grado.

Box y Hunter (1957) comentan los diseños ortogonales de segundo orden y sugieren el uso de Diseños rotatables para tal fin.

Box y Behnken (1960) obtienen Diseños rotables de - segundo orden a partir de diseños simplex.

De Baun (1959) proporciona algunos diseños específicos sobre este tópicó, en el caso de tres factores.

Hartley (1959) discute el uso de diseños compuestos formados a partir de un factorial fraccionado 2^{n-K} .

Ya que se puede considerar que el óptimo será un - máximo o un mínimo absoluto, rara vez se utilizan diseños - de tercer orden, algunas referencias sobre este punto son: Draper (1960, 1962); Gardiner et al. (1959)

Bloqueo

Box y Hunter (1957; 1961 a,b) desarrollan criterios adecuados para la eliminación de factores externos (efecto del bloque) y describe el análisis correspondiente.

Box (1959) comenta el aspecto de repetición y blo - queo en diseños compuestos centrales.

De Baun (1956) discute la influencia de los efectos del bloque en la determinación de condiciones óptimas.

III. Análisis de Datos

La metodología de la superficie de respuesta se ba - sa en gran parte en las técnicas usadas en Regresión Lineal Múltiple y más generalmente en las de Modelos Lineales, ta - les técnicas son citadas en Graybill (1961), Draper y Smith (1966)

y Searle (1971), entre otros.

Box y Wilson (1951) sugieren el uso del método del ascenso por la máxima pendiente en la búsqueda de la región estacionaria cercana al óptimo.

Box (1954) discute desde un punto de vista geométrico la función respuesta en la región cercana al óptimo, e investiga a ésta por medio del análisis canónico en la superficie ya ajustada. Además, propone un método secuencial para explorar la superficie de respuesta.

Noble (1969) comenta los fundamentos del análisis canónico, Box y Youle (1955) dan algunos ejemplos del uso de la transformación canónica y las conclusiones que se pueden obtener a partir de tal transformación.

Draper (1969) discute el uso de la técnica del análisis de cordillera para el estudio de superficie de respuesta.

Brooks y Mickey (1961) exploran algunas consideraciones técnicas del uso del método de ascenso rápido.

Draper (1961a) describe el procedimiento del análisis de la M.S.R. cuando se han perdido algunos valores.

CAPITULO 3 PRELIMINARES

En este capítulo se da una breve revisión sobre algunas definiciones básicas y teoremas relacionados con Regresión Múltiple, los cuales son fundamentales para el desarrollo y entendimiento de la metodología de la superficie de respuesta.

Definición 3.1. Sea el modelo $Y = X\beta + e$ (3.1)

donde:

$Y_{N \times 1}$: vector de observaciones

$X_{N \times (K+1)}$: matriz de variables conocidas con $r(X) = K+1 \leq N$

$\beta_{(K+1) \times 1}$: vector de parámetros

$e_{N \times 1}$: vector aleatorio con el supuesto $e \sim N^N(0, \sigma^2 I)$

Se conoce como modelo de Regresión Lineal Múltiple o Modelo de Rango Completo.

Teorema 3.1. El mejor estimador linealmente insesgado del modelo citado anteriormente se obtiene al minimizar la suma de cuadrados del error, sin importar las propiedades distribucionales de éste.

Teorema 3.2. Si $Y \sim N(\mu, V)$ [donde V es una matriz positiva definida] y A es una matriz de rango $K + 1$, entonces:

$$Z = (AY \sim N(A\mu, AVA'))$$

Del Teorema 3.1. se sigue que, al minimizar la suma de cuadrados del error $[(Y - X\beta)'(Y - X\beta)]$ con respecto a β se obtiene:

$$(X'X)\hat{\beta} = X'Y \quad (3.2)$$

y por definición del modelo se sigue:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y \quad (3.3)$$

por lo que, conforme al Teorema 3.2, se tiene que:

$$\hat{\beta} \sim N[\beta, \sigma^2(X'X)^{-1}] \quad (3.4)$$

De (3.3) se sigue que la suma de cuadrados del error admite la expresión:

$$\begin{aligned} \text{S.C.E.} &= (Y - X\hat{\beta})'(Y - X\hat{\beta}) \\ &= Y'[I - X(X'X)^{-1}X']Y \\ &= \text{S.C. total} - \text{S.C. regresión} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Ya que las formas cuadráticas juegan un papel muy importante en la Teoría de los Modelos Lineales en general, se verán a continuación algunas características de dichas formas.

Definición 3.2. Si Y es un vector $N \times 1$ con el i -th elemento Y_i y A es una matriz $N \times N$ con el ij -th elemento igual a a_{ij} , entonces la forma cuadrática $Y'AY$ es definida como

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N Y_i Y_j a_{ij}$$

Para cualesquier forma cuadrática existe una y sólo una matriz tal que la forma cuadrática puede ser escrita como $Y'AY$, donde A es una matriz simétrica.

Una forma cuadrática $Y'AY$ se dice que es positiva definida si y sólo si $Y'AY > 0 \forall Y \neq 0$; se dice que es positiva semidefinida si y sólo si $Y'AY \geq 0 \forall Y$ y $Y'AY = 0$ para algún vector $Y \neq 0$.

Una matriz simétrica es positiva definida si y sólo si puede ser escrita como $P'P$ donde P es una matriz no singular.

Teorema 3.3. Para cada matriz simétrica A existe una matriz ortogonal O tal que $O'AO = D$, donde D es una matriz diagonal cuyos elementos principales son las raíces características de A .

A continuación serán vistas algunas propiedades distribucionales de la forma cuadrática $Y'AY$ cuando $Y \sim N^N(\mu, V)$ donde V es no singular (que es la situación más general).

Teorema 3.4. Cuando $Y \sim N^N(\mu, V)$ entonces:

- i) $E(Y'AY) = \text{traza}(AV) + \mu'A\mu$
- ii) $\text{Cov}(Y', Y'AY) = 2VA\mu$
- iii) $\text{Var}(Y'AY) = 2\sigma^2 \text{tr}(A)^2 + 4\sigma^2 \mu'A\mu$

Teorema 3.5. Cuando $Y \sim N^N(\mu, V)$ entonces $Y'AY \sim \chi^2_{[r(A), \lambda = \frac{\mu'A\mu}{2}]}$ si y sólo si AV es idempotente.

Teorema 3.6. Cuando $Y \sim N^N(\mu, V)$, entonces $Y'AY$ y BY están distribuidas independientemente si y sólo si $BVA = 0$.

Teorema 3.7. Cuando $Y \sim N^N(\mu, V)$ las formas cuadráticas $Y'AY$ y $Y'BY$ están distribuidas independientemente si y sólo si $AVB = 0$ o equivalentemente $BVA = 0$.

Teorema 3.8. Si $Y \sim N^N(\mu, V)$ y A_i es una matriz simétrica $N \times N$ de rango K_i ($i = 1, 2, \dots, p$) y $\sum_{i=1}^p A_i = A$ con rango k , entonces:

$$Y'A_i Y \sim \chi^{k_i, 2} (k_i, \lambda = \frac{1}{2} \mu'A_i \mu) \text{ y las } A_i \text{ son mutuamente independientes}$$

Además:

$$Y'AY \sim \chi^{k, 2} (k, \lambda = \frac{1}{2} \mu'A \mu)$$

si y sólo si:

- i) Cualesquiera dos de: (a) $A_i V$ es idempotente $\forall i$
 (b) $A_i V A_j = 0 \forall i < j$
 (c) AV si es idempotente,
 son ciertas, o
- ii) (c) es cierta y (d) $k = \sum_{i=1}^p K_i$ ó
- iii) (d) es cierta y (e) $A_1 V, \dots, A_{(p-1)} V$ son idempotentes y $A_p V$ es no negativa definida.

Así, debido al Teorema 3.4 y a la expresión dada en 3.5, se tiene que un estimador insesgado de la varianza, denotado por $\hat{\sigma}^2$ admite la expresión:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{SCE}{N - (K + 1)}$$

y de acuerdo al Teorema 3.5, se sigue que:

$$\frac{SCE}{\sigma^2} \sim \chi^2_{[N - (K + 1)]}$$

$$\frac{SCR}{\sigma^2} \sim \chi^2_{[(K + 1), \beta' X' X \beta / \sigma^2]}$$

y ya que:

$$[I - X(X'X)^{-1}X'] [X(X'X)^{-1}X'] = 0$$

se tiene que la SCE y la SCR son independientes.

Ahora bien, ya que uno de los aspectos más importantes del método científico es la prueba de hipótesis, a continuación se presenta el procedimiento de la prueba de hipótesis general $H_0: C'\beta = m$ en modelos lineales. La teoría general referente a las pruebas de hipótesis puede consultarse en Lehmann (1959), Mood et al (1974), Brunk (1965), Hoog y Craig (1970), entre otros.

Siguiendo el criterio de la función de prueba de la razón de verosimilitud, denotada por ϕ , se tiene que:

$$\phi = \frac{L_{H_0}(\hat{w})}{L_{\theta}(\hat{\theta})} \quad (3.6)$$

donde: $L_{H_0}(\hat{w})$ = función de verosimilitud bajo la hipótesis nula evaluada en el punto \hat{w} que maximiza dicha función.

$L_{\hat{\theta}}(\Omega)$ = función de verosimilitud del espacio parametral, evaluada en el punto $\hat{\theta}$ que maximiza dicha función.

De 1.1 se sigue que $Y \sim N(X\beta, \sigma^2)$ por lo que la ecuación de verosimilitud admite la expresión:

$$f(Y_i, \sigma^2, \beta) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{N/2}} e^{-\frac{(Y-X\beta)'(Y-X\beta)}{2\sigma^2}} \quad (3.7)$$

Así:

$$\ln f(Y_i, \sigma^2, \beta) = -\frac{N}{2} \ln 2\pi - \frac{N}{2} \ln \sigma^2 - \frac{(Y-X\beta)'(Y-X\beta)}{2\sigma^2}$$

para obtener $L(\hat{\theta})$ se tiene que:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} [\ln f(Y_i, \sigma^2, \beta)] = \frac{2X'Y - 2X'X\beta}{2\sigma^2} = 0$$

por lo que:

$$\tilde{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y \quad (3.8)$$

Ahora bien:

$$\frac{\partial}{\partial (\sigma^2)} [\ln f(Y, \sigma^2, \beta)] = \frac{(Y-X\beta)'(Y-X\beta)}{2\sigma^4} - \frac{N}{2\sigma^2}$$

obteniéndose así:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(Y - X\tilde{\beta})'(Y - X\tilde{\beta})}{N} \quad (3.9)$$

Sustituyendo (3.9) y (3.8) en (3.7), se tiene que la función de verosimilitud $L(\hat{\theta})$ admite la expresión:

$$L(\hat{\Omega}) = \frac{N^{N/2} e^{-N/2}}{(2\pi)^{N/2} [(Y - X\tilde{\beta})' (Y - X\tilde{\beta})]^{N/2}} \quad (3.10)$$

La hipótesis a considerar es $H_0: C'\beta = m$

donde: $\beta_{(k+1) \times 1}$ = vector de parámetros

$C'_{t \times (k+1)}$ = cualesquier matriz con $r(C) = t$

$m_{t \times 1}$ = vector de constantes especificadas

Para determinar $L(\hat{\omega})$ es necesario conocer el estimado de β bajo la hipótesis nula, por lo que, usando mínimos cuadrados restringidos, se tiene que:

$$SCE_{(M.R.)} = (Y - X\beta)' (Y - X\beta) + 2\lambda' [C'\beta - m] \quad (3.11)$$

donde $2\lambda'$ nos representa un vector de multiplicadores de Lagrange y $SCE_{(M.R.)}$ denota la suma de cuadrados del error del modelo reducido por la hipótesis.

Al minimizar (3.11) con respecto a β y λ se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} [SCE_{(M.R.)}] = X'X\tilde{\beta} - X'Y + C\lambda$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} [SCE_{(M.R.)}] = 2[C'\tilde{\beta} - m]$$

A partir de estas últimas ecuaciones se sigue que:

$$\tilde{\beta} = \tilde{\beta} - (X'X)^{-1} C\lambda \quad (3.12)$$

y

$$C'\tilde{\beta} = m$$

por lo que:

$$C'[\tilde{\beta} - (X'X)^{-1}C\lambda] = m$$

y así, λ admite la expresión:

$$\lambda = [C'(X'X)^{-1}C]^{-1}[C'\tilde{\beta} - m] \quad (3.13)$$

Sustituyendo 3.13 en 3.12, se obtiene:

$$\tilde{\beta} = \tilde{\beta} - (X'X)^{-1}C[C'(X'X)^{-1}C]^{-1}[X'\tilde{\beta} - m] \quad (3.14)$$

por lo tanto:

$$\begin{aligned} \text{SCE}_{(M.R.)} &= (Y - X\tilde{\beta})'(Y - X\tilde{\beta}) \\ &= (Y - X\tilde{\beta})'(Y - X\tilde{\beta}) + (\tilde{\beta} - \tilde{\beta})'X'X(\tilde{\beta} - \tilde{\beta}) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Al sustituir 3.14 en 3.15, se obtiene:

$$\text{SCE}_{(M.R.)} = (Y - X\tilde{\beta})'(Y - X\tilde{\beta}) + [C'\tilde{\beta} - m]' [C'(X'X)^{-1}C]^{-1}[X'\tilde{\beta} - m] \quad (3.16)$$

y puesto que $\tilde{\beta} = \hat{\beta}$ se sigue que:

$$\text{SCE}_{(M.R.)} = \text{SCE}_{(M.C.)} + \text{S.C.}_{II}$$

donde SC_{II} denota la suma de cuadrados debida a la hipótesis.

Y ya que:

$$C'\hat{\beta} - m \sim N[C'\beta - m, \sigma^2 C'(X'X)^{-1}C]$$

se sigue que:

$$\frac{S_{CH}}{\sigma^2} \sim \chi^2 [t, \lambda]$$

donde $\lambda = [C'\beta - m]' [C'(X'X)^{-1}X]^{-1} [C.\beta - m] / 2\sigma^2$

Y ya que

$$C'\hat{\beta} - m = C'(X'X)^{-1}X'Y - m = C'(X'X)^{-1}X'[Y - XC(C'C)^{-1}m]$$

se tiene que:

$$S_{CH} = \{Y - XC[X'X]^{-1}m\}' \{X(X'X)^{-1}C[C'(X'X)^{-1}C]^{-1}C'(X'X)^{-1}X'\} \\ \{Y - XC[C'C]^{-1}m\}$$

Debido a lo anterior, $L(\hat{w})$ admite la expresión:

$$L(\hat{w}) = \frac{N^{N/2} e^{-N/2}}{(2\pi)^{N/2} [(Y - X\hat{\beta})' (Y - X\hat{\beta})]^{N/2}} \quad (3.17)$$

sustituyendo 3.17 y 3.10 en 3.6, se obtiene:

$$\phi = \frac{[(Y - X\hat{\beta})' (Y - X\hat{\beta})]^{N/2}}{[(Y - X\hat{\beta})' (Y - X\hat{\beta})]^{N/2}}$$

sustituyendo 3.5 y 3.16 en la ecuación anterior, se sigue que:

$$\phi = \left\{ \frac{SCE_{(M.C.)}}{SCE_{(M.C.)} + SCE_H} \right\}^{N/2} \\ = \left\{ \frac{1}{1 + \frac{SCE_H}{SCE_{(M.C.)}}} \right\}^{N/2}$$

Claramente ϕ es una función monótona decreciente -
cuando la razón $S_{CH}/SCE_{(M.C.)}$ se incrementa, por lo que -

esta última puede ser usada como prueba en lugar de ϕ .

Así, se tiene que:

$$\frac{SC_H[N - (K + 1)]}{SCE(t)} \sim F[t, N - (K + 1); \lambda]$$

donde λ es nulo si y sólo si la hipótesis $H_0: C'\beta = m$ es verdadera. Debido a lo anterior, se tiene la siguiente regla de decisión:

Si $F_C \geq F[t, N - (K + 1)]$ a un nivel de significancia del 100 por ciento, se rechaza $H_0: C'\beta = m$.

CAPITULO 4
FUNDAMENTOS DE LA METODOLOGIA
DE LA SUPERFICIE DE RESPUESTA

Se supone que el experimentador está interesado en el estudio de una relación funcional.

$$\eta = f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) \quad (4.1)$$

entre una respuesta η tal como producción, los niveles $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ de un grupo de k variables cuantitativas o factores como riego, fertilización, etc.

Cuando solamente un factor ξ es estudiado, la función respuesta (4.1) podría ser graficada de la siguiente manera:

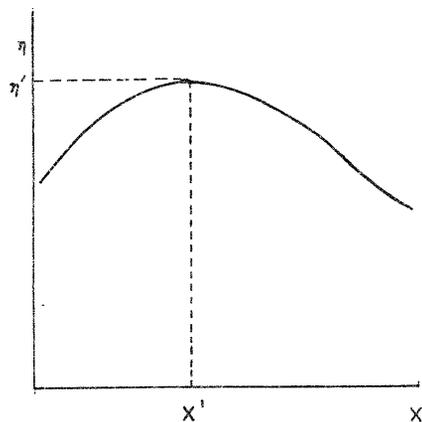


Figura 4.1. Curva de respuesta para un factor.

Con dos factores la función de respuesta, podría ser representada por una superficie semejante a una montaña, donde los contornos representan respuestas constantes (Figura 4.2).

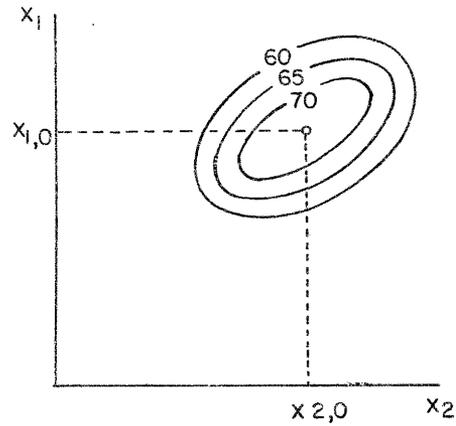


Figura 4.2. Curvas de respuesta para dos factores

Es frecuente encontrar superficies atenuadas en la cercanía del máximo (figura 4.3), como también cordilleras estacionarias (Figura 4.4) y puntos de silla (Figura 4.5).

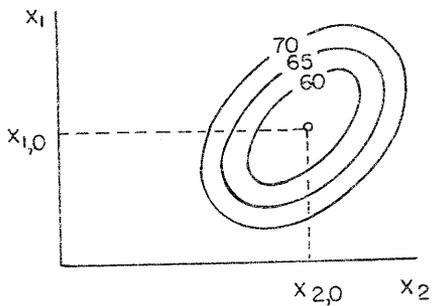


Figura 4.3. Máximo atenuado

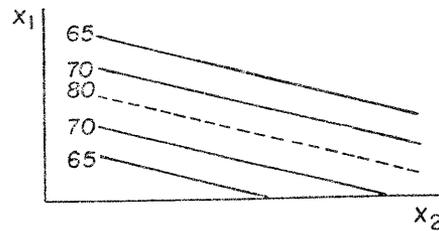


Figura 4.4. Cordillera estacionaria

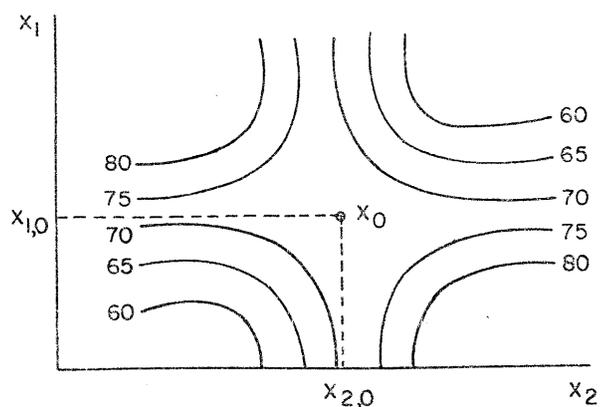


Figura 4.5. Punto silla

La forma de la relación funcional en 4.1, muchas de las veces es desconocida, o si lo es, es muy complicada para manejarse analíticamente, por lo que se usa una aproximación polinomial de bajo orden.

La razón fundamental para usar la aproximación polinomial de f , está basada en la expansión de una serie de Taylor. Así, el éxito de la Metodología de la Superficie de Respuesta depende de la aproximación de la función f por el polinomio de bajo orden en la región experimental.

Los objetivos de la Metodología de la Superficie de Respuesta son:

- i) Encontrar los valores de los ξ 's que optimizan - las respuestas.
- ii) Representar la función η en la región de interés.

En la Metodología de la Superficie de Respuesta frecuentemente la experimentación se lleva a cabo en forma -

secuencial, para ir localizando los puntos de operación óptima. Usualmente se inicia con diseños de primer orden (disposición de los valores de los ξ 's que permite estimar los polinomios de primer grado) y en la cercanía del óptimo se utiliza un diseño de segundo orden. Rara vez son utilizados los diseños de tercer orden debido a que se considera que el óptimo será un máximo local o mínimo. Pueden existir superficies de tercer orden que tengan un máximo local y otro absoluto, lo cual es raro, la mayoría de los fenómenos naturales se ajustan bien a superficies cuadráticas (por lo menos en las regiones cercanas al óptimo).

CAPITULO 5

DETERMINACION DE LAS CONDICIONES OPTIMAS

Frecuentemente, en el trabajo experimental, el investigador es llamado para encontrar las condiciones de experimentación más deseables, dependiendo de algún criterio de preselección.

Un investigador puede iniciar su estudio suponiendo una ignorancia total acerca de dicha investigación e iniciar lo en un región remota de la óptima, por lo que ese plan de investigación debe llevarse a cabo de una manera sistemática de forma tal que secuencialmente se vaya aproximando a la región de interés.

Ahora bien, el investigador puede tener conocimiento a priori de que cierta región experimental contiene el punto óptimo e iniciar su trabajo en dicha región.

Notación. Serán utilizadas las variables estandarizadas definidas de la siguiente forma:

$$x_{iu} = \frac{(\xi_{iu} - \bar{\xi}_i)}{\delta_i} \quad \text{donde } \delta_i = \left\{ \frac{\sum_{u=1}^N (\xi_{iu} - \bar{\xi}_i)^2}{N/C} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

por lo que es claro que:

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} = 0 \quad \text{y} \quad \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = N/C$$

donde generalmente $C = 1$

Análisis de una Superficie Ajustada

En esta sección se considera la situación en la cual el experimentador tiene seleccionada una región de experimentación en la cual él estima que se encuentra el óptimo.

Así, suponiendo un modelo de 2° orden:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{j=1}^K \beta_j x_j + \sum_{j < m} \sum \beta_{jm} x_j x_m + \sum_{j=1}^K \beta_{jj} x_j^2 \quad (5.1.1)$$

se tiene la ecuación de estimación:

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{j=1}^K b_j x_j + \sum_{j < m} \sum b_{jm} x_j x_m + \sum_{j=1}^K b_{jj} x_j^2$$

la cual puede ser representada matricialmente por:

$$\hat{Y} = b_0 + X'b + X'BX \quad (5.1.2)$$

donde:

$$X' = [x_1, x_2, \dots, x_K], \quad b' = [b_1, b_2, \dots, b_K]$$

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12/2} & \cdot & \cdot & \cdot & b_{1K/2} \\ & b_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & b_{2K/2} \\ & & & & & b_{K-1, K-2} \\ & & & & & b_{KK} \end{bmatrix}$$

El punto estacionario x_0 está dado por lo encontrado al resolver:

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial X} [b_0 + X'b + X'BX] = 0$$

por lo que:

$$b + 2BX_0 = 0$$

y así

$$x_0 = - \frac{B^{-1}b}{2} \quad (5.1.3)$$

Debe tenerse en cuenta que x_0 no necesariamente es un máximo (Figura 4.2), puede ser un mínimo o bien un punto silla (Figura 4.5).

Puede suceder también que en lugar de un solo punto estacionario exista una región (Figura 4.4).

Si el punto estacionario se encuentra alejado de la región experimental, puede presentarse el caso de una cordillera ascendente (Figura 5.1).

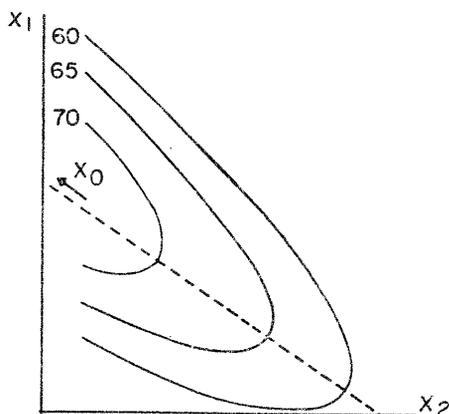


Figura 5.1. Sistema de cordillera ascendente

Análisis Canónico

El objetivo de este análisis es determinar la naturaleza del punto estacionario y del sistema de respuesta, por medio de una transformación de la ecuación 5.1.2, de manera tal que ésta sea más fácilmente interpretada.

La respuesta estacionaria \hat{Y}_0 puede ser escrita en términos de b_0 , el punto estacionario X_0 y el vector b de coeficientes de primer orden.

Así:

$$\hat{Y}_0 = b_0 + X_0' b + X_0' B X_0 \quad (5.2.1)$$

sustituyendo (5.1.3) en (5.2.1) se sigue que:

$$\hat{Y}_0 = b_0 + X_0' b / 2 \quad (5.2.2)$$

transladando el origen de la función respuesta (5.1.2) al punto estacionario mediante la definición de $t = X - X_0$ se tiene que:

$$\begin{aligned} \hat{Y} &= b_0 + (t + X_0)' b + (t + X_0)' B (t + X_0) \\ &= b_0 + X_0' b + X_0' B X_0 + t' b + t' B X_0 + X_0' B t + t' B t \end{aligned} \quad (5.2.3)$$

relacionando (5.2.3) y (5.1.2) se sigue:

$$\hat{Y} = \hat{Y}_0 + t' [b + 2B X_0] + t' B t \quad (5.2.4)$$

sustituyendo (5.1.3) en (5.2.4) se obtiene:

$$\hat{Y} = \hat{Y}_0 + t' B t \quad (5.2.5)$$

Así, la ecuación anterior representa una superficie de 2° grado trasladada a un nuevo origen $(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{k0})$.

Puesto que B es simétrica, se tiene que:

$$t'Bt = \lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 + \dots + \lambda_n w_n^2 \quad (5.26)$$

debido a que $t = P_w$ donde P es una matriz ortogonal cuyas columnas son los vectores característicos de B.

A continuación se incluye un ejemplo numérico.

Ejemplo: Una reacción química involucra la temperatura T, la concentración de uno de los reactivos C, y el tiempo de reacción t. Se quiere investigar cómo la producción Y de la reacción varía cuando T, C y t son alterados dentro de ciertos límites. Experimentos preliminares conducen a los niveles T = 167°C, C = 27.5 por ciento, t = 6.5 hr y es indicado que debe variar $\pm 5^\circ\text{c}$, $C \pm 2.5$ por ciento y $t \pm 1.5$ hr.

Sean las variables estandarizadas:

$$X_1 = \frac{(T - 167)}{5}, \quad X_2 = \frac{(C - 27.5)}{2.5}, \quad X_3 = \frac{(t - 6.5)}{1.5}$$

por lo que el rango de interés es $-1 \leq X_i \leq 1$

Supóngase que la siguiente ecuación es encontrada relacionando Y con las variables independientes.

$$\begin{aligned} Y = & 57.79 + 1.78 x_1 + 0.5 \sqrt{3} x_2 + 1.08 \sqrt{3} x_3 \\ & - 1.4 x_1^2 - 1.4 x_3^2 - 1.4 \sqrt{3} x_1 x_2 - 1.2 \sqrt{3} x_1 x_3 \\ & - 1.2 x_2 x_3 \end{aligned}$$

El valor Y es estacionario cuando $\partial Y / \partial x_i = 0$. Así:

$$2.8x_1 + 1.4\sqrt{3} x_2 + 1.2\sqrt{3} x_3 = 1.78$$

$$1.4\sqrt{3} x_1 + 1.2 x_3 = 0.5\sqrt{3}$$

$$1.2\sqrt{3} x_1 + 1.2 x_2 + 2.8x_3 = 1.08\sqrt{3}$$

siendo las soluciones de este sistema de ecuaciones:

$$x_1 = 0.1; x_2 = 0.1\sqrt{3}; x_3 = 0.3\sqrt{3}$$

Llevando a cabo el siguiente cambio de variables:

$$t_1 = x_1 - 0.1; t_2 = x_2 - 0.1\sqrt{3}; t_3 = x_3 - 0.3\sqrt{3}$$

se tiene:

$$Y = 58.55 - 1.4t_1^2 - 1.4t_3^2 - 1.4\sqrt{3} t_1 t_2 - 1.2\sqrt{3} t_1 t_3 - 1.2 t_2 t_3$$

siendo el objetivo de la transformación eliminar los términos lineales en Y . Esta última ecuación puede ser representada por:

$$Y = 58.44 - t'At$$

donde:

$$A = \begin{bmatrix} 1.4 & 0.7\sqrt{3} & 0.6\sqrt{3} \\ 0.7\sqrt{3} & 0 & 0.6 \\ 0.6\sqrt{3} & 0.6 & 1.4 \end{bmatrix}$$

Las raíces características de la matriz son $\lambda_1 = 3.0$, $\lambda_2 = 0.5$, $\lambda_3 = -0.7$, con los correspondientes vectores característicos normalizados:

$$t_1 = [0.4\sqrt{3}, 0.4, 0.6], \quad t_2 = [0.3\sqrt{3}, 0.3, -0.8],$$

$$t_3 = [0.5, -0.5\sqrt{3}, 0]$$

y puesto que $t = Pw$ donde P es una matriz ortogonal tal que $P[t_1, t_2, t_3]$, se sigue que:

$$Y = 58.44 - 3.0w_1^2 - 0.5w_2^2 + 0.7w_3^2$$

Ahora, ya que $w = P't$, tenemos:

$$w_1 = 0.4\sqrt{3}(x_1 - 0.1) + 0.4(x_2 - 0.1\sqrt{3}) + 0.6(x_3 - 0.3\sqrt{3})$$

$$w_2 = 0.3\sqrt{3}(x_1 - 0.1) + 0.3(x_2 - 0.1\sqrt{3}) - 0.8(x_3 - 0.1\sqrt{3})$$

$$w_3 = 0.5(x_1 - 0.1) - 0.5\sqrt{3}(x_2 - 0.1\sqrt{3})$$

que son las ecuaciones que relacionan las variables w y x .

Interpretación del Sistema

La determinación de la naturaleza del punto estacionario y la del sistema de la Superficie de Respuesta se puede llevar a cabo mediante la observación del signo y la magnitud de los λ 's. Así, se tienen las siguientes situaciones:

a) Si todas las λ_i son negativas, se tiene:

$$\hat{Y} = \hat{Y}_0 - \lambda_1 w_1^2 - \lambda_2 w_2^2 - \dots - \lambda_K w_K^2$$

al alejarse éstas de X_0 la respuesta decrece y, por lo tanto, es un máximo.

b) Si los λ_i son positivos y al alejarse éstas de X_0 la respuesta se incrementa, se tiene que X_0 es un mínimo.

c) Si los λ_i difieren de signo, el punto estacionario es un punto silla. Por ejemplo, sea el caso de dos variables donde $\lambda_1 < 0$ y $\lambda_2 > 0$; al moverse a través del eje w_1 a partir del punto estacionario, la respuesta estimada decrece mientras que si λ_2 se aleja de x_0 la respuesta se incrementa (Figura 5.2.)

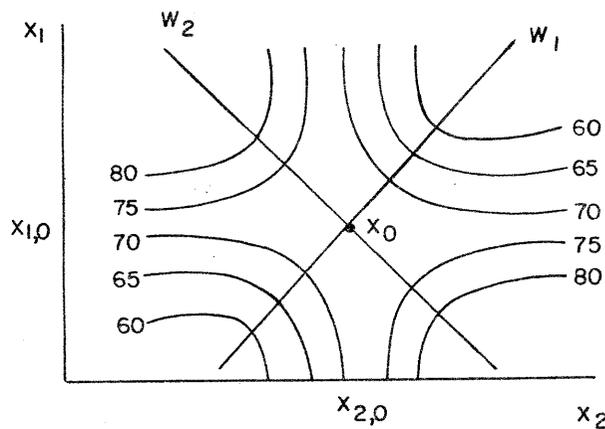


Figura 5.2. Punto silla en dos variables

La magnitud de los λ 's puede también ofrecer información acerca del sistema. Por ejemplo si $k = 2$ y si λ_1 y λ_2 son negativos y supóngase que $|\lambda_1| < |\lambda_2|$, se tendría la siguiente gráfica (Figura 5.3.).

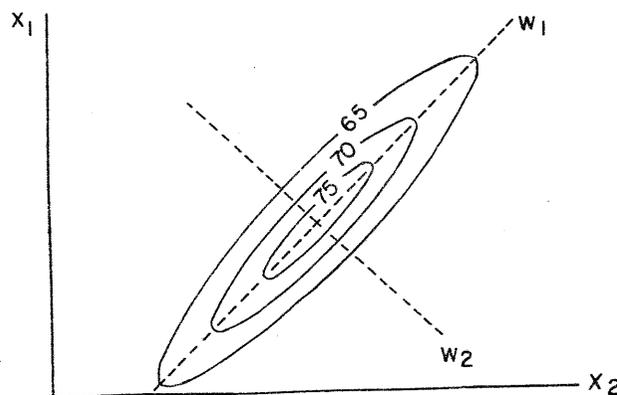


Figura 5.3. Máximo alargamiento a lo largo del eje w_1

Es decir, los λ_i miden la rapidez con la cual cambia la respuesta al moverse las x 's a lo largo de los ejes w_i .

Si alguna λ_i es o tiene un valor cercano a cero, indica que a lo largo del eje correspondiente no hay ningún cambio apreciable en la respuesta.

Nota: En los casos en que no existe punto estacionario en la región explorada, se planean nuevos experimentos para localizarlo y poder hacer la transformación canónica.

Método de Ascenso por la Pendiente Máxima

El procedimiento de ascenso por la pendiente máxima es un método por el cual el experimentador procede secuencialmente a lo largo del camino de máxima pendiente, es decir, a lo largo del camino de máximo incremento en la respuesta.

Este método es utilizado cuando no se tiene un conocimiento a priori sobre la localización del punto óptimo o cuando no son encontrados puntos estacionarios en la región de exploración.

Los pasos en el procedimiento son los siguientes:

- i) El investigador ajusta un modelo de respuesta de primer orden en alguna región restringida de las variables x_1, x_2, \dots, x_K
- ii) La información obtenida en el paso anterior es usada para localizar un camino de ascenso por

la máxima pendiente.

- iii) Se llevarán a cabo más experimentos secuencialmente por el camino encontrado en el paso anterior, hasta que no se obtenga incremento en la respuesta.
- iv) Los tres pasos anteriores se llevan a cabo en la nueva región de exploración.
- v) Si la curvatura es evidente se usa un diseño de 2° orden que permita estimar un modelo de S.R. aproximado por un polinomio del mismo grado. Con este experimento se localiza el máximo y se determina la naturaleza de la superficie de respuesta.

Para el primer paso considérese la función respuesta:

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{j=1}^N b_j x_j$$

en la cual los coeficientes pueden ser estimados por un diseño factorial 2^K o bien un factorial fraccionado.

Es asumido que se desea avanzar R unidades a partir del origen del diseño preliminar sobre la superficie de una hiperesfera, tal que la máxima respuesta sea obtenida. Es decir, si las variables son codificadas con el centro del diseño siendo $(0,0,\dots,0)$ el experimentador desea encontrar los valores de (x_1, x_2, \dots, x_K) que maximicen:

$$b_0 + \sum_{j=1}^K b_j x_j$$

sujeto a la restricción:

$$R^2 = \sum_{i=1}^K x_i^2$$

Usando multiplicadores de Lagrange, se tiene:

$$\frac{\partial L}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ b_0 + \sum_{i=1}^K b_i x_i - \mu \left(\sum_{i=1}^K x_i^2 - R^2 \right) \right\}; j = 1, 2, \dots, K$$

por lo que

$$\partial L / \partial x_j = b_j - 2\mu x_j$$

y

$$\partial L / \partial \mu = - \left\{ \sum_{i=1}^K x_i^2 - R^2 \right\}$$

obteniéndose así:

$$x_j = b_j / 2\mu \quad j = 1, 2, \dots, K \quad (5.4.1)$$

Fijando algún valor arbitrario de μ (que corresponda a una R arbitraria) de manera tal que defina un incremento fijo de una variable, se determinan los incrementos de las variables restantes.

El experimentador continúa con el paso tres del procedimiento. Un ejemplo numérico ilustrando el método se da a continuación.

Ejemplo: Se desea maximizar una respuesta dependiente de x_1 , x_2 , x_3 y x_4 . Se usa inicialmente un factorial fraccionado 2^{4-1} en la siguiente región:

	- 1	+ 1	
ξ_1	10	15	[factor A]
ξ_2	1	2	[factor B]
ξ_3	25	35	[factor C]
ξ_4	75	85	[factor D]

Usando ABCD como generador de la partición, las observaciones tomadas están dadas por:

(1)	ab	cd	ac	ad	bc	bd	abcd
62.0	69.0	57.0	64.5	61.8	64.7	62.2	66.3

Para el modelo ajustado

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^4 b_i x_i$$

donde los x_i representan las variables codificadas, se tienen los siguientes estimadores dados por el método de mínimos cuadrados:

$$b_0 = 63.44; b_1 = 1.9625; b_2 = 2.1125; b_3 = -0.3125; b_4 = -1.6125$$

Supóngase que es decidido escoger μ tal que el cambio de una unidad de la variable ξ_1 defina un incremento a lo largo del camino (A). En las variables codificadas esto corresponde a $1/2.5 = 0.4$. El coeficiente b_1 es positivo, por lo que el valor de x_i para la primera coordenada a lo largo del camino es $+ 0.4$.

Así:

$$\mu = \frac{1.9625}{(0.4)(2)} = 2.453$$

Los valores de x_2 , x_3 y x_4 pueden calcularse por medio de la ecuación 5.4.1. El Cuadro 5.1 representa coordenadas a lo largo del camino usando los incrementos anteriores, nótese que en las repeticiones 9, 10, 11 y 12 están fuera de la región experimental original, por lo que los experimentos adicionales en dichas coordenadas fueron llevados a cabo.

Cuadro 5.1. Coordenadas a lo largo del camino de máxima pendiente (variables descodificadas).

Repetición		ξ_1	ξ_2	ξ_3	ξ_4	Y
	base	12.5	1.5	30	80	
	A	1.0	0.215	-0.319	-1.643	
	base + A	13.5	1.715	29.681	78.357	
	base + 2A	14.5	1.930	29.362	76.714	
	base + 3A	15.5	2.415	29.043	75.071	
9	base + 4A	16.5	2.300	28.724	73.428	74.0
10	base + 6A	18.5	2.790	28.086	70.142	77.0
11	base + 8A	20.5	3.220	27.448	66.856	81.0
12	base + 9A	21.5	3.435	27.129	65.213	78.7

Nótese que en las repeticiones 9, 10, 11, la respuesta se incrementa y en la repetición 12 el decremento sufrido es muy poco, por lo que es conveniente llevar a cabo otro experimento $(0,0,\dots,0)$ en las cercanías de la repetición 12.

Podría considerarse que estas repeticiones extras producen una curvatura evidente, por lo que hay que llevar a cabo un nuevo experimento para determinar qué tipo de curvatura hay (análisis canónico). El enfoque depende del conocimiento a priori que tenga el experimentador.

El procedimiento del ascenso por pendiente máxima depende fuertemente de las escalas de las variables independientes, por lo que el camino tomado por el procedimiento depende de las unidades usadas.

Análisis de Cordillera

En ocasiones llega a ser difícil tomar decisiones sobre las condiciones de operación óptimas después de que el análisis canónico ha sido llevado a cabo. Como por ejemplo, en situaciones tales como cordilleras ascendentes o puntos silla, el óptimo no ha sido señalado con exactitud, por lo que es necesario llevar a cabo otro tipo de análisis con los datos existentes o adicionar puntos experimentales.

La función de respuesta estimada puede ser sujeta a un análisis adicional el cual frecuentemente sirve como una herramienta al experimentador para determinar las mejores condiciones. Este método es llamado análisis de cordillera.

Multiplicadores Indeterminados de Lagrange

Un muy conocido método de obtener el punto estacionario o puntos de cambio de una función $f(x_1, x_2, \dots, x_K)$ de K

variables x_1, x_2, \dots, x_K sujetas a las restricciones sobre las x_i tales como:

$$g_j = (x_1, x_2, \dots, x_K) = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (5.5.1)$$

es el siguiente: Forme la función:

$$F = f - \sum_{j=1}^N \lambda_j g_j \quad (5.5.2)$$

donde los λ 's son desconocidos. Ahora:

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i} - \sum_{j=1}^N \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial x_i} = 0 ; \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (5.5.3)$$

Frecuentemente las cantidades λ_j son ignoradas; sin embargo, en algunos casos, las soluciones para las x 's son fácilmente obtenidas si las λ 's son evaluadas primero; en otros, puede ser más fácil especificar valores de los λ 's en las ecuaciones 5.5.3 y considerar otras cantidades en las ecuaciones 5.5.1 como desconocidas en lugar de ellas.

Supóngase ahora, que $(x_1, x_2, \dots, x_K) = (a_1, a_2, \dots, a_K)$ es una solución de las ecuaciones 5.5.1 y 5.5.3 después de eliminar los λ 's

Sea:

$$M(x) = M(x_1, x_2, \dots, x_K) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_K} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_K} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 F}{\partial x_K \partial x_1} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_K \partial x_2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_K^2} \end{bmatrix} \quad (5.5.4)$$

La matriz de derivadas parciales de se segundo orden.

y sea $M(a_1, a_2, \dots, a_K)$ la matriz resultante después de que la solución $a' = (a_1, a_2, \dots, a_K)$ ha sido sustituida en 5.5.4. Entonces, si $M(a)$ es:

- i) Positiva definida, es decir si $Y'MY > 0 \quad \forall Y$
- ii) Negativa definida, es decir si $Y'MY < 0 \quad \forall Y$

donde $Y' = (y_1, y_2, \dots, y_K)$ es cualesquier vector real $1 \times k$, la función $f(x_1, x_2, \dots, x_K)$ alcanza:

- i) un mínimo local en $x = a$
- ii) un máximo local en $x = a$

respectivamente. Pero si expandemos F a través de una serie de Taylor de derivadas parciales, recordando que todas las derivadas parciales de F son cero en $X = \bar{a}$ se sigue:

$$F(a + h) - F(a) = \frac{1}{2} h'M(a)h + O(h^3)$$

donde h representa un vector de pequeños incrementos h_i del mismo orden y $O(h^3)$ representa un residuo de tercer orden en tales incrementos. Así, el orden h^2 , si $M(a)$ es positiva definida:

$$F(a + h) > F(a) \quad \forall h \text{ pequeño}$$

Si h varía solamente en forma tal que las restricciones sean aún satisfechas, esto implica que:

$$f(a + h) > f(a)$$

es decir, $f(a)$ es localmente un mínimo sujeto a que la

00894

restricción se mantenga. Así, $M(a)$ positiva definida es suficiente pero no necesaria para un mínimo local restringido de f en $x = a$.

Derivación del Método

Considere la S.R. de segundo orden en K variables x_1, x_2, \dots, x_K dadas por:

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_K x_K + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + \dots + b_{KK} x_K^2 + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{K-1, K} x_{K-1} x_K \quad (5.5.5)$$

siendo el punto $(0, 0, \dots, 0)$ el origen de medición de las variables x_1, x_2, \dots, x_K .

Supongamos que imaginamos una esfera (en el espacio x -dimensional) con el centro en el punto $(0, 0, \dots, 0)$ y que el radio de ésta es R . Entonces, en algunos puntos de la esfera existiría un máximo absoluto \hat{Y} y del mismo modo un mínimo absoluto \hat{Y} , y posiblemente también valores de \hat{Y} en los cuales exista un máximo o un mínimo locales; es decir, un máximo o un mínimo para todos los puntos cercanos sobre la esfera, pero no un máximo y mínimo absoluto cuando todos los puntos de la esfera sean tomados en consideración. Si investigamos los valores estacionarios de la función \hat{Y} sobre la esfera, es decir, los valores estacionarios sujetos a la restricción:

$$g(x_1, x_2, \dots, x_K) = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_K^2 - R^2 = 0 \quad (5.5.6)$$

podemos encontrar todos aquellos máximos y mínimos locales y

absolutos. Usando el método de los multiplicadores de Lagrange, sea:

$$F = \hat{Y} - \lambda g$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i} - \sum_{i=1}^N \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_i} = 0$$

después de un arreglo y divididos por un factor, de (2) se sigue:

$$\begin{aligned} (b_{11} - \lambda)x_1 + \frac{1}{2} b_{12}x_2 + \dots + \frac{1}{2} b_{1K}x_K &= -\frac{1}{2} b_1 \\ \frac{1}{2} b_{21}x_1 + (b_{22} - \lambda)x_2 + \dots + \frac{1}{2} b_{2K}x_K &= -\frac{1}{2} b_2 \\ \dots &\dots \dots \\ \frac{1}{2} b_{K1}x_1 + \frac{1}{2} b_{K2}x_2 + \dots + (b_{KK} - \lambda)x_K &= -\frac{1}{2} b_K \end{aligned} \quad (5.5.7)$$

los cuales pueden ser representados matricialmente por:

$$(B - \lambda I)X = -\frac{1}{2} b \quad (5.5.8)$$

donde:

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & \frac{1}{2} b_{12} & \dots & \frac{1}{2} b_{1K} \\ \frac{1}{2} b_{21} & b_{22} & \dots & \frac{1}{2} b_{2K} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2} b_{K1} & \frac{1}{2} b_{K2} & \dots & b_{KK} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_K \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{K-1} \\ x_K \end{bmatrix}$$

e I es la matriz identidad K x K.

Ahora, teóricamente, las (K + 1) ecuaciones (5.5.6) y (5.5.8) pueden ser resueltas para conjuntos de x_1, x_2, \dots, x_K y λ correspondientes a los diversos valores estacionarios

de Y sobre la esfera de radio R . Ya que la solución en esta forma lleva muchos cálculos, un método más fácil y equivalente de solución es el siguiente:

- i) Considérese R variable, fijándose λ en su lugar
- ii) Sustitúyase el valor seleccionado de λ a las ecuaciones (5.5.8) y resuélvalas para x_1, x_2, \dots, x_K .
- iii) Calcúlese $R = (x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_K^2)^{\frac{1}{2}} = (x'x)^{\frac{1}{2}}$
- iv) Evalúe \hat{Y}

Diferentes valores de λ darán origen a diferentes puntos estacionarios, los cuales estarán situados sobre la misma esfera de radio R .

Sin embargo, un valor estacionario particular, ya sea el máximo absoluto, mínimo absoluto, máximo o mínimo local, es determinado por el valor de λ .

Propiedades del Valor Estacionario

Sean las raíces características de la matriz B denotadas por α_i ($i = 1, 2, \dots, K$). Entonces, las α_i son tales que:

$$BX = \alpha X \quad (5.5.9)$$

ó

$$(B - \alpha I)X = 0 \quad (5.5.10)$$

Por lo que:

$$|B - \alpha I| = 0 \quad (5.5.11)$$

donde el determinante proporciona una ecuación de grado K con raíces $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_K$.

Supóngase que $\lambda = \lambda_1$ y $\lambda = \lambda_2$ son substituidas en la ecuación (5.5.8) y las soluciones $X_1 = (a_1, a_2, \dots, a_K)$ y $X_2 = (c_1, c_2, \dots, c_K)$ resultan; así, tenemos dos valores estacionarios \hat{Y}_1 y \hat{Y}_2 sobre las esferas $X_1'X_1 = R_1^2$ y $X_2'X_2 = R_2^2$ respectivamente. Entonces se tiene

i) Si $R_1 = R_2$ y $\lambda_1 > \lambda_2$, entonces $\hat{Y}_1 > \hat{Y}_2$

Prueba. Sabemos que:

$$(B - \lambda_1 I)X_1 = \frac{1}{2} b \quad (5.5.12)$$

$$(B - \lambda_2 I)X_2 = -\frac{1}{2} b \quad (5.5.13)$$

$$X_1'X_1 = X_2'X_2 = R^2 \quad (5.5.14)$$

$$Y_1 = X_1'BX_1 + X_1'b + b_0 \quad (5.5.15)$$

$$Y_2 = X_2'BX_2 + X_2'b + b_0 \quad (5.5.16)$$

Premultiplicando (5.5.12) y (5.5.13) por x_1' y x_2' respectivamente y sustrayendo, se tiene:

$$X_1' (B - \lambda_1 I)X_1 = -\frac{1}{2} x_1'b$$

$$X_2' (B - \lambda_2 I)X_2 = -\frac{1}{2} x_2'b$$

Por lo que:

$$X_1'BX_1 - \lambda_1 X_1'X_1 + \frac{1}{2} X_1'b = 0$$

$$X_2'BX_2 - \lambda_2 X_2'X_2 + \frac{1}{2} X_2'b = 0$$

Así se obtiene:

$$X_1'BX_1 - X_2'BX_2 + \frac{1}{2}(X_1' - X_2')'b - (\lambda_1 - \lambda_2)R^2 \quad (5.5.17)$$

Usando (5.5.15) y (5.5.16) se tiene:

$$\begin{aligned}\hat{Y}_1 - \hat{Y}_2 &= X_1'BX_1 - X_2'BX_2 + X_1'b - X_2'b \\ &= X_1'BX_1 - X_2'BX_2 + (X_1 - X_2)'b\end{aligned}$$

De acuerdo a (5.5.17) se sigue:

$$\hat{Y}_1 - \hat{Y}_2 = \frac{1}{2}(X_1 - X_2)'b + (\lambda_1 - \lambda_2)R^2 \quad (5.5.18)$$

Premultiplicando (5.5.12) y (5.5.13) por x_1' y x_2' respectivamente y sustrayendo, se obtiene:

$$(\lambda_2 - \lambda_1)X_1'X_2 = \frac{1}{2}(X_1 - X_2)'b \quad (5.5.19)$$

ya que $X_2'BX_1 = X_1'BX_2$ y $X_2'X_1 = X_1'X_2$. De (5.5.18) y (5.5.19) se tiene:

$$\hat{Y}_1 - \hat{Y}_2 = (\lambda_1 - \lambda_2)(R^2 - X_1'X_1)$$

Pero $R^2 - X_2'X_1 = (a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_K^2)^{\frac{1}{2}}(c_1^2 + c_2^2 + \dots + c_K^2)^{\frac{1}{2}} - (a_1c_1 + a_2c_2 + \dots + a_Kc_K) > 0$ por lo que $\lambda_1 > \lambda_2$ implica que $\hat{Y}_1 > \hat{Y}_2$.

ii) Si $R_1 = R_2$, $M(X_1)$ es positiva definida y $M(X_2)$ es indefinida, entonces $\hat{Y}_1 < \hat{Y}_2$

Prueba. De 5.5.4 se sigue:

$$M(x_i) = B - \lambda_i I$$

para el punto estacionario x_i . Entonces, si y es cualquier vector $K \times 1$

$Y'(B - \lambda_2 I)Y \leq 0$ para al menos un vector $y = q$ ($q \neq 0$)

$Y'(B - \lambda_1 I)Y > 0 \forall Y$, incluyendo $y = q$

Por lo tanto:

$$\lambda_2 q'q \geq q'Bq > \lambda_1 q'q$$

lo cual implica que $\lambda_2 > \lambda_1$. Del resultado anterior se sigue que $\hat{Y}_1 < \hat{Y}_2$. Similarmente, si $R_1 = R_2$, $M(X_1)$ es negativa definida y $M(X_2)$ es indefinida, entonces $\hat{Y}_1 > \hat{Y}_2$

iii) Si $\lambda_1 > \alpha_i(\forall i)$ entonces X_1 es un punto en el cual \hat{Y} alcanza un máximo local sobre la esfera de radio R_1 ; si $\lambda_1 < \alpha_i(\forall i)$ entonces X_1 es un punto en el cual \hat{Y} obtiene un mínimo local sobre la esfera de radio R_1 .

Prueba

$$\begin{aligned} Y'M(X_1)Y &= Y'(B - \lambda_1 I)Y \\ &= Y'BY - \lambda_1 Y'Y \\ &= Y'Y(\alpha - \lambda_1) \end{aligned}$$

si α es cualquier raíz característica de B .

Así, si $\lambda_1 > \alpha_i(\forall i)$, $M(X_1)$ es negativa definida y por lo tanto X_1 es un punto sobre la esfera de radio R en el cual \hat{Y} obtiene un máximo; si $\lambda_1 < \alpha_i(\forall i)$, $M(X_1)$ es positiva definida y por lo tanto X_1 es un punto sobre la esfera de radio R en el cual \hat{Y} obtiene un mínimo.

iv) Supóngase que conforme R se incrementa se trazan diagramas de puntos estacionarios (máximo absoluto, mínimo absoluto, mínimo o máximo locales) y se examinan los cambios de \hat{Y} . Entonces, como R se incrementa, \hat{Y} cambia en alguna de las siguientes formas (cuando la s.r. es cuadrática).

- a) Decrece monótonamente
- b) Se incrementa monótonamente
- c) Pasa a través de un máximo y entonces decrece monótonamente.
- d) Pasa a través de un mínimo y entonces se incrementa monótonamente.

Si (c) o (d) suceden se debe a que el locus ha pasado por el centro del sistema cuadrático.

Prueba

$$\begin{aligned} Y &= b_0 + X'BX + B'b \\ &= b_0 + \lambda X'X + \frac{1}{2} X'b \end{aligned} \quad (5.5.20)$$

Supóngase que hacemos un pequeño cambio $\delta\lambda$ en λ esto inducirá un pequeño cambio δX en X en la ecuación (5.5.8), un pequeño cambio δR en R y un cambio pequeño $\delta\hat{Y}$ en \hat{Y} . Así

$$\hat{Y} + \delta\hat{Y} = b_0 + (\lambda + \delta\lambda)(x + \delta x)'(x + \delta x) + \frac{1}{2}(X + \delta X)'b \quad (5.5.21)$$

Sustrayendo (5.5.20) de (5.5.21) se obtiene:

$$\delta\hat{Y} = 2\lambda X'\delta X + \delta\lambda X'X + \frac{1}{2}\delta X'b + Q^2 \quad (5.5.22)$$

donde Q_2 denota términos de segundo orden en $\delta\lambda$ y δx . Sea $\lambda_2 = \lambda + \delta\lambda$; $\lambda_1 = \lambda$, $X_2 = X + \delta X$ y $X_1 = X$ en la ecuación (5.5.19) se tiene:

$$\delta\lambda X'X + \frac{1}{2}\delta X'b = Q_2' \quad (5.5.23)$$

donde Q_2' denota otros términos de segundo orden en $\delta\lambda$ y δX . Así, (5.5.22) y (5.5.23) implican que:

$$\delta\hat{Y} = 2\lambda X'\delta X + Q_2'' \quad (5.5.24)$$

y ya que $X'X = R^2$ se sigue que:

$$\delta\hat{Y} = 2\lambda R \delta R + Q_2'' \quad (5.5.25)$$

Dividiendo por δR y estableciendo que todos los incrementos tienden a cero, se obtiene:

$$\partial Y / \partial R = 2\lambda R \quad (5.5.26)$$

lo cual es cero cuando $R = 0$ y cuando $\lambda = 0$. Cuando $R = 0$ estamos en el origen y el valor de \hat{Y} cuando $R = 0$ es el valor inicial para el locus del máximo absoluto y mínimo absoluto \hat{Y} . Cuando $R \neq 0$, Y es estacionario con respecto a R solamente cuando $\lambda = 0$, pero si $\lambda = 0$ las ecuaciones (5.5.8) producen como solución el centro de una superficie de segundo orden, ya que se obtendría el punto en el cual:

$$\partial\hat{Y} / \partial x_i = 0 \quad ; \quad (i = 1, 2, \dots, K)$$

Así, cualesquier locus, pasando a través del centro de la superficie, satisface (c) o (d). De otro modo satisface

(a) o (b).

Ejemplo: Considérese las S.de R. en dos factores:

$$\hat{Y} = 82.17 - 1.01x_1 - 8.6x_2 + 1.4x_1^2 - 8.76x_2^2 - 7.2x_1x_2$$

Los contornos de respuesta constante son graficados en la Figura 5.4. Los puntos sobre la figura representan la localización de los puntos del diseño. Así:

$$x_0 = (-0.439, -0.311)$$

las raíces características de B son las raíces de la ecuación

$$\begin{vmatrix} 1.4 - \alpha & -3.6 \\ -3.6 & -8.76 - \alpha \end{vmatrix} = 0$$

las cuales son: $\alpha_1 = -9.9063$ y $\alpha_2 = 2.5463$.

Asumiendo que el experimentador desea obtener la máxima producción, los valores de λ mayores que 2.5763 son sustituidos en (5.5.8).

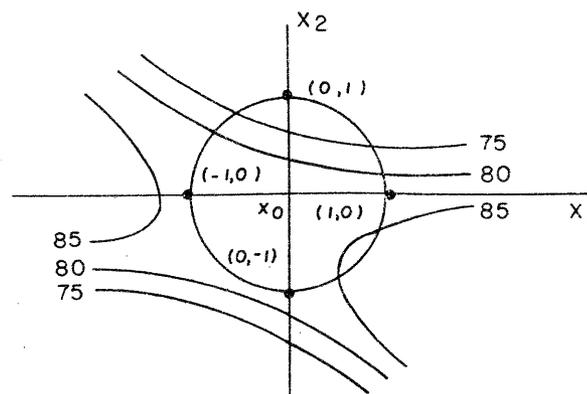


Figura 5.4. Sistema de Respuesta

Por lo que es necesario resolver:

$$\begin{bmatrix} 1.4 - \lambda & -3.6 \\ -3.6 & -8.7 - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.505 \\ 4.305 \end{bmatrix}$$

$$x_1 = \frac{11.0742 - 0.505 \mu}{\lambda^2 + 7.6\lambda - 25.224}$$

y

$$x_2 = \frac{7.845 - 4.305\mu}{\lambda^2 + 7.36\lambda - 25.224}$$

Estos valores dan la localización de puntos sobre la cordillera máxima absoluta para \hat{y} . Para un punto particular, R es calculado por:

$$R^2 = x_1^2 + x_2^2$$

y la respuesta estimada en ese punto está dada por la función respuesta.

Así, sea por ejemplo $\lambda = 4$. Sus coordenadas correspondientes son:

$$x_1 = 0.4479 \quad \text{y} \quad x_2 = -0.4637$$

El radio está dado por:

$$R = \sqrt{(0.4479)^2 + (0.4637)^2} = 0.644$$

y la respuesta estimada es: $Y = 85.602$

CAPITULO 6

DISEÑOS DE PRIMER ORDEN

Los diseños de primer orden son los que se usan en las etapas preliminares y sólo para poder determinar las direcciones a seguir. Supóngase que el efecto de k variables o factores $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ sobre una respuesta η va a ser analizado en una región de la superficie de respuesta, de manera tal que ésta pueda ser representada adecuadamente por un plano (y) tal que:

$$E(y) = \eta, \quad E(y - \eta)^2 = \sigma^2 \quad (6.1)$$

Considérese un experimento con $N > k$ pruebas, los resultados serán usados para estimar los parámetros del modelo:

$$y = \gamma_0 + \gamma_1 \xi_1 + \gamma_2 \xi_2 + \dots + \gamma_k \xi_k$$

El problema es decidir cuál de las N combinaciones de niveles usar de modo que las constantes que definen el plano sean estimadas con la mayor exactitud posible.

El presente capítulo es dedicado a la discusión de diseños para ajustar modelos de primer orden.

Diseño Ortogonal

Si el valor actual del u -th nivel de la variable i es denotado por ξ_{iu} ; sea la variable codificada denotada por x_{iu} y definida por

$$x_{iu} = \frac{\xi_{iu} - \bar{\xi}_i}{\delta_i} \quad \begin{array}{l} i = 1, 2, \dots, K \\ u = 1, 2, \dots, N \end{array}$$

donde:

$$\delta_i = \left\{ \frac{\sum_{u=1}^N (\xi_{iu} - \bar{\xi}_i)^2}{N/C} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad i = 1, 2, \dots, K$$

las utilizadas en la matriz diseño (D).

Debe ser notado, que para las variables codificadas se tiene:

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} = 0 \quad (6.2)$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = N/C$$

Así, la u -th respuesta observada está dada por:

$$Y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^K \beta_i x_{iu} + \xi_u \quad u = 1, 2, \dots, N$$

donde, para fines de pruebas de hipótesis, se supone:

$$\xi_u \sim N(0, \sigma^2)$$

Supóngase que el verdadero plano de regresión considerado es:

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_K x_K \quad (6.3)$$

el cual admite la expresión matricial

$$\eta = X_1 \beta_1 \quad (6.4)$$

donde $X_1 = [U \vdots D]$ y cada elemento de la columna vector U es la unidad. Si Y es una columna vector de observaciones y_1, y_2, \dots, y_N hecho en estos puntos experimentales y el rango de X_1 es $K + 1$, estimadores lineales b_0, b_1, \dots, b_K de cada uno de los β 's pueden ser calculados. Para un diseño particular D , estimadores lineales teniendo la menor varianza son proporcionados por el método de mínimos cuadrados y están dados por: $B_1 = (X_1'X_1)^{-1}X_1'Y = T'Y$, es bien conocido que la matriz de varianzas y covarianzas de los estimadores es $(X_1'X_1)^{-1}\sigma^2$. Por lo tanto, tenemos que escoger D tal que los elementos diagonales de $(X_1'X_1)^{-1}$ sean minimizados.

Considérese el **determinante** simétrico de la suma de cuadrados y productos $A = |C_{ij}| = |X_1'X_1|$ y denótese por C_{hh} el cofactor de c_{hh} en A y por $C_{ij, hh}$ el cofactor de c_{ij} en C_{hh} . Usando la expresión de Cauchy, tenemos:

$$A = C_{hh}C_{hh} - Q \quad (6.5)$$

donde Q es una forma cuadrática de las K variables c_{hi} ($i = 0, 1, \dots, h-1, h+1, \dots, k$) y

$$Q = \sum_{ij \neq h} c_{hi}c_{hj}c_{ij, hh} \quad (6.6)$$

Ahora, ya que el rango de X_1 es $K + 1$, Q es necesariamente **positiva definida** y A es positiva. A partir de (6.2)

se sigue que $C_{hh} = N$ y $V(b_h) = \sigma^2 C_{hh}/A$ donde $V(b_h)$ es la varianza de b_h . Reacomodando (6.5) se tiene:

$$V(b_h) = N^{-1} \cdot \sigma^2 \{1 + A^{-1} (\text{forma cuadrática p.d. en } c_{hi})\}$$

Así, la varianza $V(b_h)$ es mínima solamente cuando cada uno de los c_{hi} (las K sumas de productos de la h -th variable con cada una del resto de las variables) es cero. Cuando esto sucede, todos los C_{hi} deben ser cero también, y por lo tanto b_h es no-correlacionado con cada uno de los otros estimadores y tiene varianza σ^2/N . Para una máxima eficiencia para todos los coeficientes, se sigue que $\{c_{ij}\} = NI$ y un diseño D apropiado es reemplazado por cualesquiera K columnas - después de la primera, de una matriz $N^{\frac{1}{2}}O$, donde O es ortogonal con los elementos de su primera columna iguales.

Los diseños ortogonales más frecuentemente usados para ajustar modelos de primer orden son los factoriales 2^K , los diseños factoriales fraccionados 2^{K-P} y los diseños simplex.

Diseños Factoriales

Un diseño factorial 2^K requiere de todas las posibles combinaciones de dos niveles de cada uno de los K factores, cada posible combinación representando un tratamiento.

Sea, por ejemplo, un factorial 2^3 con A , B y C como factores, y 6-8, 10-12 y 14-20 como niveles de cada factor - respectivamente, el número posible de combinaciones es ocho

y son representadas de la siguiente manera:

Tratamiento	Combinación		
	A	B	C
(1)	6	10	14
a	8	10	14
b	6	12	14
ab	8	12	14
c	6	10	20
ac	8	10	20
bc	6	12	20
abc	8	12	20

Donde la presencia (ausencia) de uno de los dos niveles posibles de cada factor en el tratamiento es representada por la presencia (ausencia) de la letra minúscula correspondiente a cada factor.

Estandarizando los factores, como se mencionó anteriormente, se tiene que:

$$S_A^2 = \sum_{j=1}^8 \frac{(\epsilon_{ij} - \bar{\epsilon}_1)^2}{N} = \frac{(6-7)^2 + (8-7)^2 + \dots + (8-7)^2}{8} = 1$$

$$S_B^2 = 1$$

$$S_C^2 = 9$$

por lo que:

$$x_{11} = \frac{(6-7)}{1} = -1$$

$$x_{12} = \frac{(8-7)}{1} = 1$$

$$x_{31} = \frac{(14-17)}{3} = -1$$

donde, en este caso en particular:

$$\beta' = \{\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{23}, \beta_{123}\}$$

Así, un diseño factorial advierte la expresión:

$$Y = X\beta + \epsilon$$

con el supuesto $\epsilon \sim N(0, \sigma^2 I_N)$

Y ya que la matriz X es de rango completo por columnas, se sigue que el m.e.l.i. del vector de parámetro β está dado por:

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

Ahora bien, puesto que la finalidad del diseño factorial en la M.S.R. es ajustar una ecuación de primer orden, se tiene que, en general, el modelo a ajustar está dado por:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^K \beta_i X_i + \epsilon$$

ignorando las interacciones entre los factores.

Ejemplo. Supóngase que las variables x_1 , x_2 y x_3 tienen influencia en alguna respuesta de acuerdo al modelo

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^3 \beta_i X_i + \epsilon$$

Un diseño experimental 2^3 factorial es usado y el vector de observaciones y la matriz X están dadas por:

$$Y = \begin{bmatrix} (1) = 3.0 \\ a = 5.0 \\ b = 7.0 \\ ab = 12.0 \\ c = 2.0 \\ ac = 4.0 \\ bc = 5.0 \\ abc = 14.0 \end{bmatrix} \quad X = \begin{bmatrix} & A & B & C \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & +1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & +1 & -1 \\ 1 & +1 & +1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & +1 \\ 1 & +1 & -1 & +1 \\ 1 & -1 & +1 & +1 \\ 1 & +1 & +1 & +1 \end{bmatrix}$$

Claramente $(X'X)^{-1} = \frac{1}{8} I_4$, por lo que

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y = \frac{1}{8} [52 \quad 18 \quad 24 \quad -2]$$

y así:

$$\hat{\beta}_0 = 6.5 \quad ; \quad \hat{\beta}_1 = 2.25 \quad ; \quad \beta_2 = 3 \quad ; \quad \beta_3 = -0.25$$

Y ya que:

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

se tiene:

$$SC_{REG} = 451$$

obteniendo el siguiente ANVA:

Fuente	S.C.	g.l.	CM	Fc	F $_{\alpha}$ 95%
Regresión	451	4			
$\hat{\beta}_0$	338	1	338		
$\hat{\beta}_1$	40.5	1	40.5	9.52*	7.71
$\hat{\beta}_2$	72	1	72	16.94*	
$\hat{\beta}_3$	0.5	1	0.5	0.11	
Error	17	4	4.25		
Total	468	8			

Las conclusiones del análisis de varianza para este caso son que $\hat{\beta}_3$ no difiere significativamente de cero mientras que las contribuciones de $\hat{\beta}_1$ y $\hat{\beta}_2$ son significantes.

Debe tenerse en cuenta que al ajustar una respuesta en un modelo lineal en el modelo asumido se ignoran las interacciones de los factores; así, en un factorial 2^K tales interacciones proporcionan $2^K - K - 1$ grados de libertad a la SCE cuando una observación por tratamiento es tomada.

Así, la SCE representa la contribución de los $2^K - K - 1$ interacciones factoriales y no el error experimental puro. Esta suma de cuadrados es conocida como SC de falta de ajuste.

Para obtener un estimador de σ^2 pueden repetirse puntos experimentales bajo las mismas condiciones. Tal estimador se dice que representa el error puro, ya que solamente la variación aleatoria puede influenciar el resultado y proporcionar diferencias entre dichos puntos.

El estimador de error puro de σ^2 es encontrado como sigue:

$Y_{11}, Y_{12}, \dots, Y_{1n_1}$ son n_1 observaciones repetidas en X_1
 $Y_{21}, Y_{22}, \dots, Y_{2n_2}$ son n_2 observaciones repetidas en X_2
 $Y_{k1}, Y_{k2}, \dots, Y_{kn_k}$ son n_k observaciones repetidas en X_k

así, la contribución a la suma de cuadrados del error puro en el punto X_1 es:

$$\sum_{j=1}^{n_1} (Y_{1j} - \bar{Y}_1)^2 = \sum_{j=1}^{n_1} Y_{1j}^2 - n_1 \bar{Y}_1^2$$

y su suma de cuadrados tiene $n_1 - 1$ g.l.

El total de la SCEP = $\sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2$ con grados de libertad totales dados por $\sum_{i=1}^K (n_i - 1) = \sum_{i=1}^K n_i - K$

Así, el C.M.E.P. es:

$$S_{e.p.}^2 = \left\{ \frac{\sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2}{\sum_{i=1}^K n_i - k} \right\}$$

y representa un estimador de σ^2 .

La S.C.E.P. puede ser introducida en el análisis de varianza siendo la función de prueba la razón $F = CM_{FA}/CM_{EP}$ con el 100α por ciento de una distribución F con sus respectivos grados de libertad.

Diseños Factoriales Fraccionados 2^{K-P}

Un diseño factorial fraccionado, como su nombre lo dice, es un diseño que consta de una fracción de un experimento factorial completo. Puede ser particularmente útil cuando la cantidad de experimentación requerida por el factorial completo es más de la que el experimentador puede proporcionar. El diseño 2^{K-P} es usado en la S.R. para ajustar modelos de regresión, cuando K es grande y pocas o ninguna interacción son consideradas para ser importantes.

Como ejemplo, considérese un experimento en el cual se asume el modelo:

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4$$

en lugar de llevar a cabo un experimento factorial 2^4 completo, los siguientes puntos experimentales son observados: a, b, c, d, abc, abd, bcd y acd. La matriz X está dada por:

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{array} \end{array}$$

El diseño sigue siendo ortogonal, ya que $(X'X) = 8I_5$; así, los estimadores $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3, \hat{\beta}_4$ son no-correlacionados.

Los puntos experimentales sacrificados son: $x_1 x_2, x_1 x_3, x_1 x_4, x_2 x_3, x_2 x_4, x_3 x_4, x_1 x_2 x_3, x_1 x_2 x_4, x_1 x_3 x_4, x_2 x_3 x_4$ y $x_1 x_2 x_3 x_4$.

Nótese que el contraste usado en la estimación de x_1 es igual al que se usaría al estimar $x_2 x_3 x_4$ con excepción del signo. Es decir:

$$x_1(1 \ -1 \ -1 \ -1 \ 1 \ 1 \ -1 \ 1) \equiv x_2 x_3 x_4(-1 \ 1 \ 1 \ 1 \ -1 \ -1 \ 1 \ -1)$$

Así, se dice que los efectos de x_1 y $x_2 x_3 x_4$ están -

confundidos uno con otro. El efecto de x_1 se dice que es alias de $x_2x_3x_4$.

Es fácil observar que: (el signo \equiv denota alias con)

$$\begin{aligned}x_2 &\equiv -x_1x_3x_4 \\x_3 &\equiv -x_1x_2x_4 \\x_4 &\equiv -x_1x_2x_3 \\x_1x_2 &\equiv -x_3x_4 \\x_1x_3 &\equiv -x_2x_4 \\x_1x_4 &\equiv -x_2x_3\end{aligned}$$

El efecto de $x_1x_2x_3x_4$ es completamente sacrificado y la interacción (usualmente la de mayor orden) que es sacrificada, se le denomina definición de contraste.

Construcción de un Factorial Fraccionado 2^{K-1}

Sea $x_1x_2\dots = A^{\gamma_1}B^{\gamma_2}\dots$ la definición de contraste escogida, donde $\gamma_i = 0$ ó 1 . Defínase el conjunto de variables Z_1, Z_2, \dots, Z_K asociadas con a, b, c, \dots respectivamente. Para una combinación particular, Z_j será uno si su correspondiente letra (a, b, \dots) aparece en la combinación, o cero de otro modo. Por ejemplo, si $k = 4$, $Z_1 = 1$, $Z_2 = 1$ y todas las otras Z 's son ceros, se tiene combinación ab . Entonces se evalúa:

$$L = \gamma_1 Z_1 + \gamma_2 Z_2 + \gamma_3 Z_3 + \dots + \gamma_K Z_K$$

para las 2^K combinaciones (1), a, b, \dots . Así, para los 2^K valores de L .

$$S = L \pmod{2}$$

son calculados. Esto implica evaluar $L/2$ y tomar S como el residuo (0 ó 1). El procedimiento resultará en 2^{K-1} combinaciones con $S = 0$ y un igual número con $S = 1$.

En el fraccional 2^{K-1} cada efecto tiene un alias, el cual es determinado multiplicando el efecto en cuestión por la definición de contraste seleccionado, con los exponentes reducidos al módulo 2.

Por ejemplo, sea el contraste de definición $x_1x_2x_3x_4$ (ABCD), el efecto A tiene como alias a: $A(ABCD) = A^2BCD = BCD$.

Ejemplo: Considérese el ejemplo 2 citado anteriormente

Con $x_1x_2x_3x_4$ como definición de contraste:

$$L = Z_1 + Z_2 + Z_3 + Z_4$$

ya que $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 1$. Así, se obtienen los siguientes valores de S .

Cuadro 6.2. Valores de S para un F.F. 2^{4-1} con definición de contraste ABCD

Combinación	S	Combinación	S
(1)	0	d	1
a	1	ad	0
b	1	bd	0
ab	0	abd	1
c	1	cd	0
ac	0	acd	1
bc	0	bcd	1
abc	1	abcd	0

El diseño escogido consiste en los puntos experimentales (combinaciones) teniendo $S = 1$ ó $S = 0$.

En algunas ocasiones, cuando el número de factores (K) involucrado es muy grande, resulta conveniente escoger un diseño más pequeño que 2^{K-1} . Sin embargo, hay que tomar en cuenta que cuando se trabaja con $1/4$ a $1/8$, etc. de un diseño factorial, se sacrifica mucha información.

Un cuarto de fracción requiere que el experimentador escoja dos contrastes de definición ($2^{K-2} = \frac{1}{4} 2^K$), $A^{\gamma_1} B_2 \dots$ y $A^{w_1} B^{w_2} \dots$

Debe notarse que un tercer contraste de definición es obtenido al multiplicar los dos iniciales y reduciendo los exponentes al módulo 2.

Uno entonces determina:

$$L_1 = \gamma_1 Z_1 + \gamma_2 Z_2 + \dots + \gamma_k Z_k$$

$$L_2 = w_1 Z_1 + w_2 Z_2 + \dots + w_k Z_k$$

y el correspondiente $S_1 = L_1$ módulo 2 y $S_2 = L_2$ módulo 2 pasa cada una de las 2^K combinaciones. Esto resulta en cuatro conjuntos de combinaciones:

$$\left\langle \begin{array}{l} S_1 = 0 \\ S_2 = 0 \end{array} \right\rangle, \left\langle \begin{array}{l} S_1 = 0 \\ S_2 = 1 \end{array} \right\rangle, \left\langle \begin{array}{l} S_1 = 1 \\ S_2 = 0 \end{array} \right\rangle, \left\langle \begin{array}{l} S_1 = 1 \\ S_2 = 1 \end{array} \right\rangle$$

cada uno conteniendo 2^{K-2} combinaciones. Cualesquier de estos conjuntos proporciona la fracción de un 2^{K-2}

Así, supóngase que un experimentador desea ajustar un modelo del tipo:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^6 \beta_i x_i + \varepsilon$$

y decide utilizar un f.f. 2^{6-2} con definiciones de contraste ABDE y CDEF.

La tercera definición de contraste está dada por:

$$(ABDE)(CDEF) = ABCF$$

si se escoge el conjunto en el cual $S_1 = S_2 = 0$ para la expresión

$$L_1 = Z_1 + Z_2 + Z_4 + Z_5$$

$$L_2 = Z_3 + Z_4 + Z_5 + Z_6$$

se obtienen las siguientes combinaciones: (1), ab, de, cf, - adf, acf, acd, ace, bed, bef, bce, bdf, abde, abcf, edef, - abcdef.

Otras fracciones de factoriales pueden ser obtenidas aplicando el procedimiento anterior.

Ya que cada efecto principal tiene uno o más alias - en el análisis de un experimento factorial fraccionado, cada coeficiente de regresión de primer orden tiene como alias coeficientes de mayor orden, los cuales actúan como sesgos en la presencia de un sistema más complicado que el de primer orden asumido. Por ejemplo, si la verdadera función respuesta está dada por:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^3 \beta_i x_i + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon$$

y el modelo de primer orden es ajustado usando un experimento factorial fraccionado con definición de contraste $I = ABC$, entonces el estimador b_3 estará sesgado por el coeficiente β_{12} ; es decir:

$$E(b_3) = \beta_3 + f(\beta_{12})$$

donde $f(\beta_{12})$ implica que el sesgo es alguna función del coeficiente β_{12}

Supóngase entonces que el experimentador postula el modelo:

$$Y = X_1\beta_1 + \epsilon$$

donde Y es el vector $N \times 1$ de respuestas, X_1 es una matriz $N \times p_1$ y β_1 es el vector $p_1 \times 1$ de parámetros postulado por el experimentador ($N \geq p_1$). Sin embargo, supóngase que la verdadera función respuesta involucra los p_1 parámetros más p_2 adicionales, estamos interesados en los sesgos de los coeficientes del vector

$$\hat{\beta} = (X_1'X_1)^{-1}X_1'Y$$

en la presencia del modelo

$$Y = X_1\beta_1 + X_2\beta_2 + \epsilon$$

donde X_2 es $N \times p_2$ y β_2 es un vector $p_2 \times 1$ de parámetros adicionales

Así:

$$\begin{aligned}
 E(\hat{\beta}_1) &= E\{(X_1'X_1)^{-1}X_1'Y\} \\
 &= E\{(X_1'X_1)^{-1}X_1'[X_1\beta_1 + X_2\beta_2 + \epsilon]\} \\
 &= E\{(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_1\beta_1 + (X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2\beta_2 + (X_1'X_1)^{-1}X_1'\epsilon\} \\
 &= \beta_1 + (X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2\beta_2 = \beta_1 + A\beta_2
 \end{aligned}$$

bajo el supuesto $E(\epsilon) = 0$.

El alcance de los sesgos dependerá de la magnitud de los elementos de la matriz alias (A) las cuales dependen a su vez de los puntos experimentales escogidos.

Ejemplo: Supóngase que el diseño usado para ajustar un modelo de primer orden es un 2^k factorial y la verdadera función es:

$$Y = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_{12}x_1x_2 + \beta_{11}x_1^2 + \beta_{22}x_2^2 + \epsilon$$

las matrices necesarias para calcular los sesgos son:

$$X_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad X_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

La matriz alias está dada por:

$$A = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Por lo que:

$$E(\hat{\beta}) = \beta + A\beta_2 = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{11} \\ \beta_{12} \\ \beta_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_0 & \beta_{11} & \beta_{22} \\ \beta_1 & & \\ \beta_2 & & \end{bmatrix}$$

y así b_0 está sesgado por $\beta_{11} + \beta_{22}$ mientras que b_1 y b_2 permanecen insesgados.

Adición de Puntos en el Centro del Diseño 2^K Factorial

El diseño 2^K como ha sido ejemplificado anteriormente, no proporciona un estimador de la varianza del error experimental, ya que la suma de cuadrados del error contiene variación debida al error experimental más la falta de ajuste de la ecuación de primer grado. En algunas ocasiones, el estimador del error puro puede ser obtenido debido a experimentos previos; otras veces dicho estimador puede ser logrado al repetir los puntos experimentales; pero este procedimiento no es siempre deseable debido a la cantidad de puntos experimentales involucrados.

Un procedimiento por medio del cual puede obtenerse un estimador de la varianza del error libre de la falta de ajuste, es aumentar el diseño básico con puntos experimentales en el centro del diseño, siendo éste tomado como el punto experimental en el cual:

$$(x_1, x_2, \dots, x_K) = (0, 0, \dots, 0)$$

Si el origen de un diseño factorial se repite n_2 veces, se logra:

- i) $n_2 - 1$ grados de libertad para estimar el error puro, el cual es utilizado para las pruebas de significancia de la variación encontrada debida a la falta de ajuste.
- ii) Un grado de libertad para obtener cierta información acerca de la existencia de términos cuadráticos puros en la superficie actual.

Para ilustrar la partición de los grados de libertad para un diseño factorial aumentado con puntos centrales, será el siguiente ejemplo:

Ejemplo: Considérese un factorial fraccionado 2^{4-1} con definición de contraste $I = ABCD$ aumentado con cuatro puntos centrales. La partición del coeficiente de primer orden está dada en el Cuadro 6.3:

Cuadro 6.3. Partición de los grados de libertad para un factorial fraccionado con definición de contraste $I = ABCD$ aumentado con cuatro puntos centrales.

Fuente	g.l.	Fuente	g.l.
β_0	1	Falta de ajuste	4
β_1	1	Productos cruzados	3
β_2	1	Cuadrático puro	1
β_3	1	Error	3
β_4	1	Total	12

Los tres grados de libertad de productos cruzados re presentan en este caso la variación debida a la interacción de dos factores. Es decir: $\beta_{12} = \beta_{34}$, $\beta_{13} = \beta_{24}$ y $\beta_{23} = \beta_{14}$.

Diseños Simplex

El diseño simplex es un diseño ortogonal cuya principal característica es que requiere exactamente de $N = K + 1$ puntos experimentales. Así, N puntos experimentales pueden ser obtenidos de cualquier matriz ortogonal O con elementos en su primer columna todos iguales y $X = N^{\frac{1}{2}}O$. Ahora bien, ya que $X = [U : D]$, el rango de D es $K = N - 1$, los N puntos experimentales son los vértices de una figura regular $N - 1$ dimensional o simplex.

Sea X_u' el u -th renglón de X y denótese por θ_{us} el ángulo que se forma respecto al origen entre los puntos experimentales u -th y s -th, ya que $X = [U : D]$ la distancia de cada punto experimental al origen es $(N - 1)^{\frac{1}{2}}$ y

$$X_u X_s = 0 = 1 + (N - 1) \cos \theta_{us}$$

por lo que:

$$\cos \theta_{us} = - (N - 1)^{-1} \quad (\forall u \neq s)$$

Si $K = 2$ y $N = 3$ los puntos experimentales son los vértices de un triángulo equilátero; si $K = 3$ y $N = 4$ los puntos experimentales forman un tetraedro regular y así sucesivamente.

Nótese que ninguna restricción es necesaria sobre la orientación del diseño.

Como un ejemplo, la Figura 6.1 muestra dos orientaciones particulares del diseño óptima para $N = 4$ y $K = 3$.

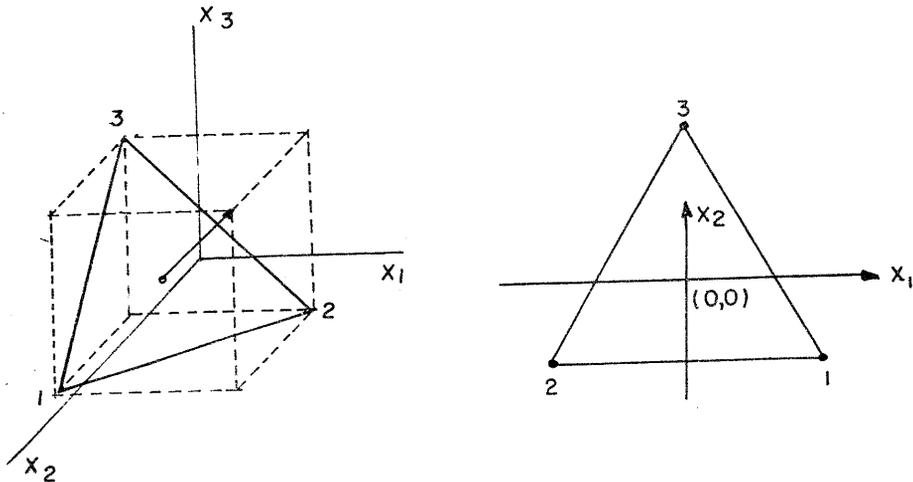


Figura 6.1. Orientaciones del diseño óptimo para $N = 4$ y $K = 3$.

cuyas matrices diseño son:

$$D_a = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 \\ \begin{matrix} (1) \\ (2) \\ (3) \\ (4) \end{matrix} & \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}, D_b = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 \\ \begin{matrix} (1) \\ (2) \\ (3) \\ (4) \end{matrix} & \begin{bmatrix} -\sqrt{2} & -\sqrt{2}/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2}/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} \\ 0 & 2\sqrt{2}/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 3/\sqrt{3} \end{bmatrix} \end{matrix}$$

y es fácilmente notorio que:

$$(X_a)'(X_a) = [U:D_a]'[U:D_a] = [U:D_b]'[U:D_b] = 4I_4$$

por lo que las varianzas y covarianzas de los estimadores permanecen constantes bajo la rotación del diseño ortogonal; sin embargo, los sesgos de los coeficientes de regresión en la presencia de una s.r. cuadrática dependen definitivamente

de la orientación del simplex usado.

CAPITULO 7

DISEÑOS PARA AJUSTAR DISEÑOS DE SEGUNDO ORDEN

Los diseños experimentales para ajustar superficies de respuesta de segundo orden deben contener al menos tres niveles de cada variable para que los coeficientes involucrados en el modelo puedan ser estimados. Así, el más usual debería ser el diseño factorial 3^k . Sin embargo, tal tipo de diseño tiene el inconveniente del número excesivo de observaciones requeridas.

Box y Wilson desarrollaron un procedimiento alternativo al sistema factorial 3^k , el cual, en este caso particular, es llamado diseño compuesto central. Tal diseño es muy utilizado en el ajuste de Superficies de Respuesta de segundo orden y será discutido en el presente capítulo:

Diseño Compuesto Central

Este diseño fue ideado como una alternativa para el factorial 3^k en el ajuste de modelos de segundo orden. Básicamente está constituido por un núcleo consistente en un factorial 2^k o un factorial fraccionado cuyos niveles se codifican de la manera usual (+1,-1), además, contiene uno o más puntos centrales y 2^k puntos axiales que se encuentran a una

distancia $\pm \alpha$ del centro del diseño.

Así, la matriz diseño D en el caso de 3 variables, -
está dada por:

$$D' = \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{matrix} \begin{bmatrix} -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & 0 & -\alpha & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & \alpha \end{bmatrix}$$

la cual gráficamente estará representada por:

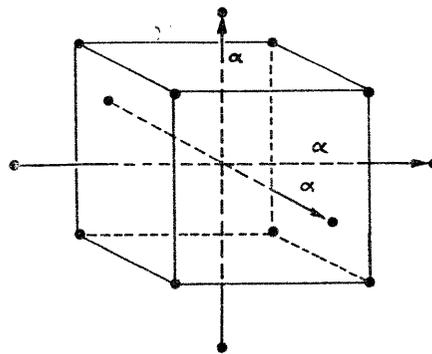


Figura 7.1. Diseño compuesto central para $k = 3$

Supóngase que hay F número de puntos factoriales y $T = 2k + n_2$ número de puntos adicionales, donde n_2 representa el número de puntos experimentales en el centro del diseño. Para $k = 2$ y $n_2 = 1$ el modelo

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

es idéntico a

$$Y = \beta_0 + \beta_{11} \bar{x}_1 + \beta_{22} \bar{x}_2 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} (x_1^2 - \bar{x}_1^2) + \beta_{22} (x_2^2 - \bar{x}_2^2)$$

Es decir, considerando el modelo con los términos cuadráticos puros corregidos por su media, se tiene:

$$y = \beta_0^* + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} (x_1^2 - \bar{x}_1^2) + \beta_{22} (x_2^2 - \bar{x}_2^2)$$

Así, si $F = 4$ y $T = 5$ se tiene que:

$$X = \begin{bmatrix} \beta_0^* & \beta_1 & \beta_2 & \beta_{12} & \beta_{11} & \beta_{22} \\ 1 & -1 & -1 & +1 & 1-\gamma & 1-\gamma \\ 1 & +1 & -1 & -1 & 1-\gamma & 1-\gamma \\ 1 & -1 & +1 & -1 & 1-\gamma & 1-\gamma \\ 1 & +1 & +1 & +1 & 1-\gamma & 1-\gamma \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -\gamma & -\gamma \\ 1 & -\alpha & 0 & 0 & \alpha^2-\gamma & -\gamma \\ 1 & \alpha & 0 & 0 & \alpha^2-\gamma & -\gamma \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & -\gamma & \alpha^2-\gamma \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & -\gamma & \alpha^2-\gamma \end{bmatrix}$$

donde:
$$\gamma = \frac{4 + 2\alpha^2}{9} = \frac{F + 2\alpha^2}{F + T}$$

Por lo tanto:

$$X'X = \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 & 0 & \phi & \phi \\ 0 & \Omega & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ \phi & 0 & 0 & 0 & p & q \\ \phi & 0 & 0 & 0 & q & p \end{bmatrix}$$

donde:

$$\Omega = 4 + 2\alpha^2 = F + 2\alpha^2$$

$$\phi = 4(1 - \gamma) - 3\gamma + 2(\alpha^2 - \gamma)$$

$$p = 4(1 - \gamma)^2 + 3\gamma^2 + 2(\alpha^2 - \gamma)^2$$

$$q = 4(1 - \gamma)^2 + \gamma^2 - 4(\alpha^2 - \gamma)(\gamma)$$

obteniéndose así, después de álgebra, los siguientes resultados:

$$\phi = 0$$

$$p = \frac{20}{9} - \frac{16}{9}\alpha^2 + \frac{14}{9}\alpha^4$$

$$q = \frac{20}{9} - \frac{16}{9}\alpha^2 + \frac{4}{9}\alpha^4$$

lo cual puede generalizarse a:

$$p = \frac{FT - 4F\alpha^2 - 2[F + T - 2]\alpha^4}{F + T}$$

$$q = \frac{FT - 4F\alpha^2 - 4\alpha^4}{F + T}$$

La inversa de la matriz

$$\begin{bmatrix} p & q & \dots & q \\ q & p & \dots & q \\ q & q & \dots & p \end{bmatrix}$$

está dada por:

$$\begin{bmatrix} e & f & \dots & f \\ f & e & \dots & f \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f & f & \dots & e \end{bmatrix}$$

donde:

$$e = [p + (k - 2)q] \{ [p - q][p + kq - q] \}^{-1}$$

$$f = q \{ [q - p][p + (k - 1)q] \}^{-1}$$

por lo que:

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\beta}_0^*) &= \sigma^2/N \\ \text{Var}(\hat{\beta}_i) &= \sigma^2[F + 2\alpha^2]^{-1} & i = 1, 2, \dots, k \\ \text{Var}(\hat{\beta}_{ij}) &= \sigma^2 F^{-1} & i \neq j \\ \text{Var}(\hat{\beta}_{ii}) &= \sigma^2 e & i = 1, 2, \dots, k \\ \text{Cov}(\hat{\beta}_{ii}, \hat{\beta}_{jj}) &= \sigma^2 f & i \neq j \end{aligned}$$

Nótese que si $\alpha \neq 1$ cada variable es medida en 5 niveles y que el número de puntos experimentales necesarios son suficientes para ajustar una superficie de segundo orden. El diseño compuesto central permite una experimentación secuencial ya que si el experimentador comienza su investigación de la superficie de respuesta con un factorial 2^k y descubre falta de ajuste en el análisis de varianza, sólo necesita adicionar $2k + n_2$ puntos experimentales los cuales permitirán la estimación de una superficie de respuesta de segundo orden.

Ahora bien, si α es escogido de manera tal que las covarianzas f sean cero, el diseño será completamente ortogonal; así, si $f = 0$, entonces $q = 0$ por lo que:

$$q = FT - 4F\alpha^2 - 4\alpha^4 = 0$$

y así:

$$\alpha = \left(\frac{QF}{4} \right)^{\frac{1}{4}}$$

donde:

$$Q = [(F + T)^{\frac{1}{2}} - F^{\frac{1}{2}}]$$

Diseños Rotables de Segundo Orden

Un diseño se dice que es rotatable cuando la varianza de la respuesta estimada (\hat{y}) está en función solamente de la distancia del punto de interés hacia el origen y no de la dirección de éste.

Matriz de Momentos

Si $k = 2$ variables y se considera un diseño de segundo grado, la ecuación a ser ajustada está dada por:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2$$

y la matriz $N^{-1}X'X$ es:

$$\begin{bmatrix} 1 & [1] & [2] & [11] & [22] & [12] \\ & [11] & [12] & [111] & [122] & [112] \\ & & [22] & [112] & [222] & [122] \\ & & & [1111] & [1122] & [1112] \\ & & & & [1222] & [1222] \\ & & & & & [1122] \end{bmatrix}$$

Simétrica

donde la cantidad entre paréntesis denota los momentos del diseño, es decir, $[1] = N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{1u}$, $[112] = N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 x_{2u}$ y así sucesivamente. Así, la matriz $N^{-1}X'X$ es la matriz de momentos y su inversa $N(X'X)^{-1}$ es llamada la matriz precisión.

La Función Varianza para el Diseño

Denótense las k coordenadas x_1, x_2, \dots, x_k de un punto en el espacio de las variables por el vector $k + 1$ $X = \{x_i\}$.

Supongase que \hat{y}_x es la respuesta estimada en el punto X usando un polinomio ajustado por mínimos cuadrados a N observaciones hechas de acuerdo con algún diseño experimental D . La varianza $V(\hat{y}_x)$ del valor estimado es una función de X y σ^2 y puede ser reducida incrementando N . La cantidad $V(X) = NV(\hat{y}_x)/\sigma^2$ es una medida estandarizada de la exactitud con la cual el diseño D permite que la respuesta en el punto X sea estimada; así, $NV(\hat{y}_x)\sigma^2$ será llamada la función varianza del diseño.

Así, para cualquier diseño k -dimensional, si la varianza de la respuesta estimada por el polinomio ajustado es función solamente de

$$\rho^2 = \sum_{i=1}^k x_i^2$$

tal que la gráfica de las varianzas en el espacio de las variables son círculos, esferas o hiperesferas centradas en el origen del diseño, será llamado para tener una función varianza esférica $V(\rho)$. Un arreglo de puntos con una función varianza esférica será llamado un diseño rotable.

Momentos de un Diseño Rotable

En el caso de un diseño experimental para ajustar una s.r. de orden α en k variables, el momento del diseño de orden α está dado por:

$$N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{1u}^{\alpha_1} x_{2u}^{\alpha_2} \dots x_{ku}^{\alpha_k}$$

donde: $\sum_{i=1}^k \alpha_i = \alpha$

Sea $z' = [z_1, z_2, \dots, z_k]$, denótese por $z'^{[p]}$ el vector de potencia derivadas de grado p definido por:

$$(z'z)^p = z'^{[p]} z^{[p]}$$

Por ejemplo, si $z' = [z_1, z_2, z_3]$ se tiene que:

$$(z'z)^2 = [z_1^4 + z_2^4 + z_3^4 + 2z_1^2z_2^2 + 2z_1^2z_3^2 + 2z_2^2z_3^2]$$

por lo que

$$z'^{[2]} = [z_1^2, z_2^2, z_3^2, \sqrt{2} z_1 z_2, \sqrt{2} z_1 z_3, \sqrt{2} z_2 z_3]$$

Ahora, si un vector z es transformado a un vector x por $x = HZ$, la p -th matriz Schlaflian $H^{[p]}$ es definida tal que $x^{[p]} = H^{[p]} z^{[p]}$, por lo que $[HK]^{[p]} = H^{[p]} K^{[p]}$ y es fácilmente visto que si H es ortogonal, también lo es $H^{[p]}$.

Considérese la respuesta estimada \hat{y}_x ajustada por un polinomio de grado d en el punto cuyas coordenadas están dadas por los últimos k elementos del vector x' definido como $x' = [1, x_1, x_2, \dots, x_k]$. El polinomio contiene $\binom{k+d}{d} = L$ términos y la respuesta estimada en el punto x_1, x_2, \dots, x_k es:

$$\hat{y}_x = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + \dots + b_{kk} x_k^2 + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{k-1,k} x_{k-1} x_k + b_{111} x_1^3 + \dots \text{etc.}$$

lo cual puede ser representado por:

$$\hat{y}_x = x'^{[d]} b$$

Supóngase que la verdadera respuesta en este punto -

está dada por:

$$\eta_X = X' [d] \beta$$

Entonces, para una matriz diseño dada D para la cual existe una matriz de variables independientes X de rango completo L la varianza de \hat{y}_X es:

$$\begin{aligned} V(\hat{y}_X) &= E[(\hat{y}_X - \eta_X)(\hat{y}_X - \eta_X)'] = X' [d] E\{(b - \beta)(b - \beta)'\} X [d] \\ &= X' [d] [X'X]^{-1} X [d] \sigma^2 \end{aligned}$$

Considérese ahora la varianza de un segundo valor estimado \hat{y}_Z el cual está a la misma distancia ρ del origen y cuyas coordenadas son los últimos k elementos del vector $Z = R'X$, donde R es una matriz ortogonal $(k+1) \times (k+1)$ consistiendo de una matriz ortogonal arbitraria H marginada por un primer renglón $u' = (1, 0, 0, \dots, 0)$ y una primera columna u . Así:

$$\begin{aligned} V(\hat{y}_Z) &= X' [d] R' [d] (X'X)^{-1} R [d] X [d] \sigma^2 \\ &= X' [d] (R' [d] X'X R [d])^{-1} X [d] \sigma^2 \end{aligned}$$

Para satisfacer la condición de que la varianza es constante sobre esferas centradas en el origen del diseño, es necesario que $V(\hat{y}_X) = V(\hat{y}_Z)$, por lo que:

$$X'X = R' [d] X'XR [d]$$

para cualquier matriz ortogonal R .

Sea el vector $t' = (1, t_1, t_2, \dots, t_k)$ y considérese la

expresión:

$$Q = N^{-1} t'^{[d]} X' X t^{[d]}$$

la cual es función generatriz de momentos de orden $2d$ y menores del diseño, ya que si $X'_u = (1, x_{1u}, x_{2u}, \dots, x_{ku})$, $X'X = \sum_{u=1}^N X'_u X_u$ se tiene:

$$\begin{aligned} Q &= N^{-1} t'^{[d]} \left(\sum_{u=1}^N X'_u X_u \right) t^{[d]} \\ &= N^{-1} \sum_{u=1}^N (t' X_u X'_u t)^{[d]} \\ &= N^{-1} \sum_{u=1}^N (1 + t_1 x_{1u} + t_2 x_{2u} + \dots + t_k x_{ku})^{2d} \end{aligned}$$

Así, si $[1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}]$ representa el momento $N^{-1} \sum_{i=1}^N x_{1u}^{\alpha_1} x_{2u}^{\alpha_2} \dots x_{ku}^{\alpha_k}$ entonces, el coeficiente de $t_1^{\alpha_1}, t_2^{\alpha_2}, \dots, t_k^{\alpha_k}$ en Q es:

$$\frac{(2d)!}{\prod_{i=1}^k \alpha_i! (2d - \alpha)!} [1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}]$$

y ya que el diseño es rotatable si y sólo si:

$$\begin{aligned} Q &= N^{-1} t'^{[d]} X' X t^{[d]} = N^{-1} t'^{[d]} R'^{[d]} X' X R^{[d]} t^{[d]} \\ &= N^{-1} (t' R')^{[d]} X' X (t R)^{[d]} \end{aligned}$$

se tiene que es rotatable si y sólo si Q es alguna función de $t't$ y ya que ésta es un polinomio en los t 's, debe de ser de la forma:

$$Q = \sum_{s=0}^d a_{2s} \left(\sum_{i=1}^k t_i^2 \right)^s$$

El coeficiente de $t_1^{\alpha_1}, t_2^{\alpha_2}, \dots, t_k^{\alpha_k}$ en esta expresión es:

$$a_\alpha (\frac{1}{2}\alpha)! / \prod_{i=1}^k (\frac{1}{2}\alpha_i)!$$

así se obtiene que:

$$\frac{(2d)!}{\prod_{i=1}^k \alpha_i! (2d-\alpha)!} [1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}] = \frac{a_\alpha (\frac{1}{2}\alpha)!}{\prod_{i=1}^k (\frac{1}{2}\alpha_i)!}$$

por lo que:

$$[1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}] = \frac{a_\alpha (\frac{1}{2}\alpha)! (2d-\alpha)!}{2d!} \cdot \frac{\prod_{i=1}^k \alpha_i!}{\prod_{i=1}^k (\frac{1}{2}\alpha_i)!}$$

haciendo

$$\lambda_\alpha = \frac{a_\alpha 2^{\alpha/2} (\frac{1}{2}\alpha)! (2d-\alpha)!}{2d}$$

se tiene que los momentos de un diseño rotatable de orden d son:

$$[1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}] = 0 \quad \text{si uno o más de los } \alpha_i \text{ son nones}$$

$$= \lambda_\alpha \frac{\prod_{i=1}^k \alpha_i!}{2^{\alpha/2} \prod_{i=1}^k (\frac{1}{2}\alpha_i)!} \quad \text{si todos los } \alpha_i \text{ son par}$$

Así, supóngase que se tienen k variables y se desea ajustar un polinomio de grado dos. Los momentos de un diseño rotatable de segundo orden adecuado para esta situación son tales que todos los momentos nones son cero y los momentos restantes son:

$$[ii] = \lambda_2 \left\{ \frac{2!}{2(1)} \right\} = \lambda_2$$

$$[ijjj] = \lambda_4 \left\{ \frac{(2)!(2!)}{2^2(1)(1)} \right\} = \lambda_4$$

$$[iiii] = \lambda_4 \left\{ \frac{4!}{2^2 \cdot 2!} \right\} = 3\lambda_4$$

por lo que la matriz de momentos de un diseño rotatable de segundo orden es de la forma:

	0	1	2	...	k	11	22	...	kk	12	13	...	k-1,k
0	1		*			1	1	1				*	
1		1											
2			1										
⋮	*			⋮			*					*	
⋮					⋮								
k					1								
11	1					3λ ₄	λ ₄	...	λ ₄				
22	1					λ ₄	3λ ₄	...	λ ₄				
⋮	⋮		*			⋮	⋮	⋮				*	
⋮	⋮					⋮	⋮	⋮					
kk	1					λ ₄	λ ₄		3λ ₄				
12										λ ₄			
13											λ ₄		
⋮	*		*				*					⋮	
⋮													⋮
k-1,k													λ ₄

donde los asteriscos denotan submatrices nulas.

La matriz inversa (matriz precisión) está dada por:

0	0	1	2	...	k	11	22	...	kk	12	13	k-1, k
	$2\lambda_4^2(k+2)A$	1	*	*	*	$-2\lambda_4 A$	$-2\lambda_4 A$	$-2\lambda_4 A$	$-2\lambda_4 A$	λ_4^{-1}	*	*
1	*	$[(k+1)\lambda_4 - (k-1)]A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	λ_4^{-1}	*	*
2	$(1-\lambda_4)A$	$[(k+1)\lambda_4 - (k-1)]A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	λ_4^{-1}	*	*
...	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	λ_4^{-1}	*	*
k	1	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	λ_4^{-1}	*	*
11	$-2\lambda_4 A$					$[(k+1)\lambda_4 - (k-1)]A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	λ_4^{-1}	*	*
22	$-2\lambda_4 A$		*	*	*	$(1-\lambda_4)A$	$[(k+1)\lambda_4 - (k-1)]A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	λ_4^{-1}	*	*
...	$-2\lambda_4 A$		*	*	*	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	λ_4^{-1}	*	*
kk	$-2\lambda_4 A$		*	*	*	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	$(1-\lambda_4)A$	λ_4^{-1}	*	*
12			*	*	*					λ_4^{-1}	*	*
13			*	*	*					λ_4^{-1}	*	*
...			*	*	*					λ_4^{-1}	*	*
k-1, k			*	*	*					λ_4^{-1}	*	*

donde:

$$A = [2\lambda_4 \{ (k+2)\lambda_4 - k \}]^{-1}$$

Así:

$$\frac{NV(b_0)}{\sigma^2} = 2\lambda_4^2 (k+2)A$$

$$\frac{NV(b_{ii})}{\sigma^2} = [(k+1)\lambda_4 - (k-1)]A$$

$$\frac{NV(b_i)}{\sigma^2} = 1$$

$$\frac{N \text{ Cov}(b_0, b_{ii})}{\sigma^2} = -2\lambda_4 A$$

$$\frac{NV(b_{ij})}{\sigma^2} = \frac{1}{\lambda_4}$$

$$\frac{N \text{ Cov}(b_{ii}, b_{ij})}{\sigma^2} = (1 - \lambda_4)A$$

por lo que todos los coeficientes de primer y segundo grado son no correlacionados a excepción de los coeficiente cuadráticos que tienen un coeficiente de correlación.

$$\{ [2/(1 - \lambda_4)] - (k+1) \}^{-1}$$

Si $\lambda_4 = 1$ se tiene:

$$\frac{NV(b_0)}{\sigma^2} = \frac{k+2}{2}$$

$$\frac{NV(b_{ii})}{\sigma^2} = \frac{1}{2}$$

$$\frac{NV(b_i)}{\sigma^2} = 1$$

$$\frac{N \text{ COV}(b_0, b_{ii})}{\sigma^2} = \frac{1}{2}$$

$$\frac{NV(b_{ij})}{\sigma^2} = 1$$

$$\frac{N \text{ Cov}(b_{ii}, b_{jj})}{\sigma^2} = 0$$

por lo que las correlaciones entre los coeficientes cuadráticos son cero. Debido a lo anterior, se sigue que la función varianza de cualesquier diseño de segundo orden rotatable general está dada por:

$$\frac{NV(\hat{y}_x)}{\sigma^2} = \frac{N}{\sigma^2} [\text{Var}(b_0 + \sum_i b_i x_i + \sum_i b_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j)]$$

donde x_1, x_2, \dots, x_k es el punto de interés.

Ahora bien:

$$\begin{aligned} \frac{NV(\hat{y}_x)}{\sigma^2} &= \frac{N}{\sigma^2} [\text{Var } b_0 + \sum_i x_i^2 \text{Var } b_i + \sum_i x_i^4 \text{Var } b_{ii} + \sum_{i < j} \sum_i x_i^2 x_j^2 \text{Var } b_{ij} \\ &+ 2 \sum_i x_i^2 \text{Cov}(b_0, b_{ii}) + 2 \sum_{i < j} \sum_i x_i^2 x_j^2 \text{Cov}(b_{ii}, b_{jj}) \\ &= A[2\lambda_4^2 (k+2) + \rho^2 (1/A) + 2\rho^2 (-2\lambda_4)] + \frac{N}{\sigma^2} [\sum_i x_i^4 \text{Var}(b_{ii}) + \\ &\quad \sum_{i < j} \sum_i x_i^2 x_j^2 \text{Var}(b_{ij}) + 2 \sum_{i < j} \sum_i x_i^2 x_j^2 \text{Cov}(b_{ii}, b_{jj})] \end{aligned}$$

y ya que:

$$\frac{N}{\sigma^2} \text{Var}(b_{ii}) = \frac{N}{\sigma^2} \text{Cov}(b_{ii}, b_{jj}) + \frac{N}{\sigma^2} \text{Var}(b_{ij})$$

se sigue que:

$$\begin{aligned} \frac{N(\text{Var } \hat{y}_x)}{\sigma^2} &= A\{2\lambda_4^2 (k+2) + 2\rho^2 \lambda_4 (\lambda_4 - 1) (k+2)\} + \frac{N}{\sigma^2} \{\sum_i x_i^4 \text{Var}(b_{ii}) + \\ &\quad 2 \sum_{i < j} \sum_i x_i^2 x_j^2 \cdot [\text{Cov}(b_{ii}, b_{jj}) + \frac{1}{2} \text{Var } b_{ij}]\} \end{aligned}$$

Tomando en cuenta que:

$$\rho^4 = \sum_i x_i^4 + 2 \sum_{i < j} \sum_i x_i^2 x_j^2$$

se obtiene:

$$\frac{N(\text{Var } \hat{y}_x)}{\sigma^2} = A\{2\lambda_4^2 (k+2) + 2\rho^2 \lambda_4 (\lambda_4 - 1) (k+2) + \rho^4 [(k+1)\lambda_4 - (k-1)]\}$$

Nótese que en la ecuación anterior la varianza de la respuesta estimada en algún punto (x_1, x_2, \dots, x_k) de un diseño rotatable de segundo orden depende de ρ, λ_4 y k .

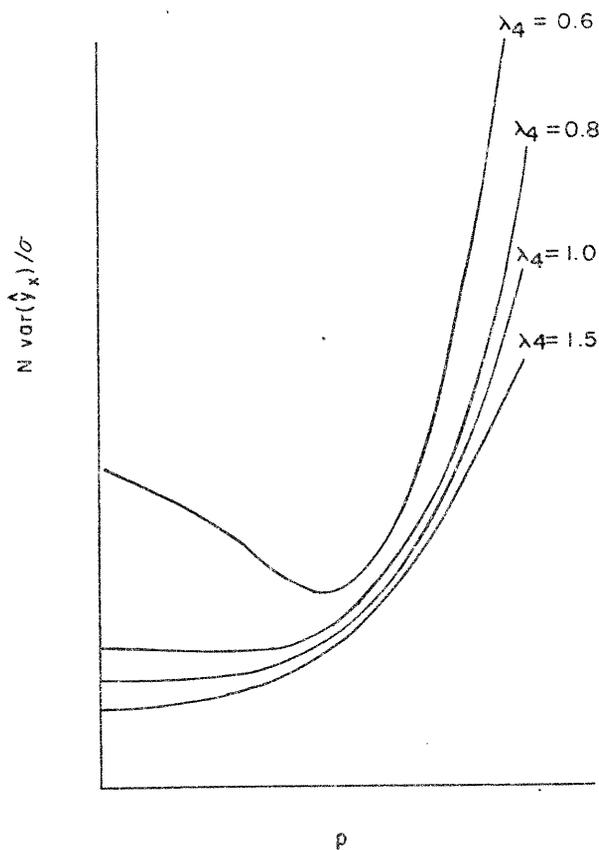


Figura 7.2. $N \text{Var}(\hat{y})/\sigma^2$ como una función de ρ, λ_4 y $k=2$

Como lo indica la gráfica 7.2, los valores mayores de λ_4 proporcionan una buena precisión en el centro del diseño perdiéndose ésta para valores de $\rho > 1$.

Ahora bien, es conveniente escoger λ_4 de manera tal que la precisión esté uniformemente distribuida en la vecindad inmediata del diseño; es decir, que la varianza en $\rho = 1$ sea igual en $\rho = 0$.

El Cuadro 7.1 muestra los valores de λ_4 requeridos

para que la varianza en $\rho = 1$ sea igual a la existente en $\rho = 0$.

Cuadro 7.1. Valores de λ_4 para los cuales $V(\rho = 1) = V(\rho = 0)$

k	2	3	4	5	6	7	8
λ_4	0.7844	0.8385	0.8704	0.8918	0.9070	0.9184	0.9274

El valor de λ_4 puede ser alterado por el experimentador por medio de la repetición de puntos experimentales en el centro del diseño rotatable, cuya finalidad es aproximarse lo más posible al valor de λ_4 necesario para una precisión uniforme en el diseño.

Diseño Central Compuesto Rotable

Este tipo de diseño es el que más uso tiene en la práctica. Se construye escogiendo adecuadamente el valor de los puntos axiales (α) de manera tal que el diseño resultante sea rotatable.

Este se forma teniendo como núcleo un diseño central compuesto, así, considérese la siguiente matriz de un diseño central compuesto, en tres variables:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha^2 \\ 1 & 0 & 0 & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha^2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{matrix} \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_1\beta_2 & \beta_1\beta_3 & \beta_2\beta_3 & \beta_1^2 & \beta_2^2 & \beta_3^2 \end{matrix}$$

De la matriz anterior se sigue:

$$\sum_{u=1}^N x_{i_u}^4 = 8 + 2\alpha^4 = F + 2\alpha^4$$

$$(i = 1, 2, \dots, k)$$

$$\sum_{u=1}^N x_{i_u}^2 x_{j_u}^2 = 8 = F$$

$$[ij] = 0 \quad (i \neq j) \quad [iii] = 0$$

$$[iij] = 0 \quad [ijk] = 0$$

$$[iiij] = 0 \quad (i \neq j) \quad [iiijk] = 0$$

Ahora bien, puesto que un diseño rotatable debe cumplir con:

a) Todos los momentos que tengan al menos un α_i non son cero y

b) Los cuartos momentos puros $-[iiii]$ son tres veces los cuartos momentos, dado por $-[iijj]$, es

decir:

$$\sum_{i=1}^N x_{iu}^4 = 3 \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2$$

Por lo anterior se sigue que:

$$F + 2\alpha^4 = 3F$$

y así:

$$\alpha = (F)^{\frac{1}{4}}$$

El Cuadro 7.2. da los valores de α para varios valores de α para un diseño central compuesto rotatable, también se proporcionan los valores de F y T .

Dicho cuadro está formado tomando en cuenta que el diseño contiene sólo un punto experimental en el centro del diseño, lo cual no significa que siempre se debe utilizar sólo uno.

Cuadro 7.2. Valores de α para un diseño central compuesto rotatable.

K	F	T	N	α
2	4	5	9	1.414
3	8	7	16	1.682
4	16	9	25	2.000
5	32	11	43	2.378
5 ($\frac{1}{2}$ Rep)	16	11	27	2.000
6	64	13	77	2.828
6 ($\frac{1}{2}$ Rep)	32	13	45	2.378
7	128	15	143	3.364
7 ($\frac{1}{2}$ Rep)	64	15	79	2.828
8	256	17	273	4.000
8 ($\frac{1}{2}$ Rep)	128	17	145	3.364

Debe tomarse en cuenta que el parámetro λ_4 puede ser adecuadamente alterado para obtener una precisión, si no uniforme, por lo menos lo más cercana posible.

$$\text{Ya que } \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = F + 2\alpha^2$$

$$g = \sqrt{\frac{N}{F + 2\alpha^2}}$$

es el factor con el cual el diseño es escalado.

$$\begin{aligned} \text{Se sigue que: } [iiii] &= (Fg^4 + 2\alpha^4g^4)/N \\ &= g^4(3F)/N \\ &= 3NF/(F + 2\alpha^2)^2 \\ &= 3N/(F + 4F^{\frac{1}{2}} + 4) \end{aligned}$$

y para que el diseño sea rotable, $[iijj] = \lambda_4 = 1/3[iiii]$, entonces:

$$\lambda_4 = N/(F + 4F^{\frac{1}{2}} + 4)$$

Debe notarse que la adición de puntos centrales no afectan las condiciones necesarias para la rotabilidad, por lo que por medio de la ecuación anterior, se puede determinar el valor más conveniente de λ_4 (precisión uniforme u or togonalidad) por la adición de puntos centrales.

Ejemplos de Diseños Rotables de Segundo Orden

Es importante considerar los diseños construidos a partir de conjuntos de puntos, teniendo cada conjunto todos sus puntos equidistantes del origen.

Estos son llamados conjuntos equiradiales y ρ es la distancia de cada punto al origen. Si todos los momentos de orden $2d$ de un conjunto tal son invariantes bajo rotación, se dice que el conjunto es rotable equiradial de orden d .

Un conjunto rotable equiradial de orden d no necesariamente proporciona un diseño.

Para un conjunto de puntos $\rho^2 = \sum_{i=1}^k x_{iu}^2$ para $u = 1, 2, \dots, N$, por lo tanto:

$$\rho^2 = N^{-1} \sum_{u=1}^N \sum_{i=1}^k x_{iu}^2 = \sum_{i=1}^k [ii] = K$$

$$\rho^4 = N^{-1} \sum_{u=1}^N \left\{ \sum_{i=1}^k x_{iu}^2 \right\}^2 = \sum_{i=1}^k [iiii] + \sum_{i=1}^k \sum_{j \neq i}^k [iijj]$$

por lo que:

$$3K\lambda_4 + K(K-1)\lambda_4 = K^2$$

y así:

$$\lambda_4 = \frac{K}{K+2}$$

el cual, si es sustituido en A , ésta se hace infinita y los términos cuadráticos y el término constante no son estimables separadamente; así, se dice que λ_1 tiene un valor singular.

Supóngase ahora, que se tienen S conjuntos rotables equiradiales de puntos teniendo el mismo origen, tal que en el w -th conjunto existan n_w puntos distantes cada uno p_w -

puntos distantes cada uno p_w del origen; así, el valor de λ_4 para el agregado total es:

$$\lambda_4 = \frac{NK \sum_{w=1}^S \eta_w p_w}{(k+1) (\sum \eta_w \rho_w^2)^2} \quad (7.4.1)$$

el cual, en general, no será un valor singular.

Combinando conjuntos equiradiales, se pueden obtener diseños rotables.

Diseños en Dos Dimensiones

Primeramente se demostrará que para los vértices de un n -gon regular, todos los momentos mayores de orden $n-1$ son invariantes bajo rotación.

Supóngase que las coordenadas del u -th punto son $\rho \cos(\theta + 2\pi u/n)$ y $\rho \sin(\theta + 2\pi u/n)$ y que $a = e^{i\theta}$ y $w = e^{i2\pi/n}$. Así, el momento $[pq]$, el cual es de orden $p+q$ está dado por:

$$\begin{aligned} [pq]_0 &= \sum_{u=1}^{n-1} x_{iu}^p x_{ju}^q = \sum_{u=0}^{n-1} (\rho)^{p+q} \{\cos(\theta + 2\pi u/n)\}^p \{\sin(\theta + 2\pi u/n)\}^q \\ &= \sum_{u=1}^{n-1} (\rho/2)^{p+q} \{e^{i[\theta+2\pi u/n]} + e^{-i[\theta+2\pi u/n]}\}^p \left\{ \frac{1}{i} [e^{i[\theta+2\pi u/n]} \right. \\ &\quad \left. - e^{-i[\theta+2\pi u/n]}] \right\}^q \\ &= \sum_{u=0}^{n-1} (\rho/2)^{p+q} (i)^{-q} \{a^u + a^{-1}w^{-u}\}^p \{a^u + (i)^2 a^{-1}w^{-u}\}^q \end{aligned}$$

donde:

$$\{aw^w + a^{-1}w^{-u}\}^p = \sum_{r=0}^p \binom{p}{r} (a^{-1}w^{-u})^r (aw^u)^{p-r} = \sum_{r=0}^p \binom{p}{r} a^{p-2r} w^{pu-2ru}$$

$$\{aw^u + (i)^2 a^{-1}w^{-1}\}^q = \sum_{t=0}^q \binom{q}{t} i^{2t} a^{-t} w^{-tu} a^{q-t} w^{uq-ut}$$

$$= \sum_{t=0}^q \binom{q}{t} (i)^{2t} a^{q-2t} w^{qu-2tu}$$

por lo que:

$$[pq]_{\theta} = (p/2)^{p+q} \sum_{r=0}^p \sum_{t=0}^q (i)^{2t-q} \binom{p}{r} \binom{q}{t} a^{p+q-2(r+t)} \sum_{u=1}^{n-1} w^{u[p+q-2(r+t)]}$$

Si $a = 1$ en la expresión anterior y el resultado se resta, se obtiene el cambio en el valor del momento después de la rotación a través de un ángulo θ , es decir:

$$[pq]_{\theta} - [pq] = (p/2)^{p+q} \sum_{r=0}^p \sum_{t=0}^q (i)^{2t-q} \binom{p}{r} \binom{q}{t} [a^{p+q-2(r+t)} - 1] \sum_{u=0}^{n-1} w^{u[p+q-2(r+t)]} \quad (7.4.2)$$

Nótese que:

$$\sum_{u=0}^{n-1} w^{u[p+q-2(r+t)]} = n \quad \text{si } p+q-2(r+t) = 0 \quad (7.4.3)$$

$$= 0 \quad \text{de otra manera}$$

y $-(p+q) \leq p+q-2(r+t) \leq p+q$. Así, si $(p+q) < n$ la expresión de la izquierda en (7.43) es cero a menos que $p+q = 2(r+t)$, pero en este caso $a^{[p+q-2(r+t)]} - 1 = 0$. Por lo tanto, si $p+q < n$ entonces (7.4.2) es igual a cero cualesquiera que sea el valor de θ y así la afirmación es probada.

Así, una clase de diseños rotables de dos dimensiones de segundo orden, puede ser construido a partir de dos o más círculos concéntricos de puntos equiespaciados con radio desigual. Los puntos en el origen constituyen un círculo de radio cero y cada círculo cuyo radio sea diferente de cero debe de contener al menos cinco puntos. El número de puntos en cada conjunto y las distancias radiales determinarán el valor de λ_4 de acuerdo a la ecuación (7.4.1).

Diseño Equiradial en Dos Variables (Ejemplo)

Sean $n_1 \geq 5$ puntos equidistantes sobre un círculo de radio ρ aumentado por n_2 puntos centrales. Si el primer punto del diseño forma un ángulo θ con el eje real, entonces la porción de la matriz diseño involucrando los puntos sobre un círculo puede ser escrita de la siguiente manera:

$$\begin{array}{cc} x_1 & x_2 \\ \{\rho \text{ Cos}[\theta + 2u\pi/n_1]\} & \{\rho \text{ Sen}[\theta + 2u\pi/n_1] \quad u=0,1,2,\dots,n-1 \end{array}$$

Supóngase un diseño experimental con seis puntos igualmente espaciados sobre un círculo más n_2 puntos centrales, así:

$$D = \begin{bmatrix} \rho \text{ Cos } \theta & \rho \text{ Sen } \theta \\ \rho \text{ Cos}[\theta + \pi/3] & \rho \text{ Sen}(\theta + \pi/3) \\ \rho \text{ Cos}[\theta + 2\pi/3] & \rho \text{ Sen}(\theta + 2\pi/3) \\ \rho \text{ Cos}[\theta + \pi] & \rho \text{ Sen}[\theta + \pi] \\ \rho \text{ Cos}[\theta + 4/3\pi] & \rho \text{ Sen}[\theta + 4/3\pi] \\ \rho \text{ Cos}[\theta + 5\pi/3] & \rho \text{ Sen}[\theta + 5\pi/3] \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Para obtener los elementos de $X'X$ considérese:

$$\begin{aligned} \sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u}^p &= \sum_{u=0}^{n_1-1} \{\rho \cos[\theta + 2\pi u/n_1]\}^p \\ &= (\rho/2)^p \sum_{u=0}^{n_1-1} [aw^u + a^{-1}w^{-u}]^p \\ &= (\rho/2)^p \sum_{t=0}^p \binom{p}{t} a^{p-2t} \sum_{u=0}^{n_1-1} w^{(p+2t)u} \end{aligned}$$

donde:

$$\begin{aligned} \sum_{u=0}^{n_1-1} w^{(p-2t)u} &= n_1 \quad \text{si } p = 2t \\ &= 0 \quad \text{de otra manera} \end{aligned}$$

Ahora:

$$\begin{aligned} \sum_{u=0}^{n_1-1} x_{2u}^q &= \sum_{u=0}^{n_1-1} \{\rho \sin[\theta + 2\pi u/n_1]\}^q \\ &= (\rho/2)^q (i)^{2t-q} \sum_{t=0}^q \binom{q}{t} a^{q-2t} \sum_{u=0}^{n_1-1} w^{(q-2t)u} \end{aligned}$$

donde nuevamente debe notarse que:

$$\begin{aligned} \sum_{u=0}^{n_1-1} w^{(q-2t)u} &= n_1 \quad \text{si } q = 2t \\ &= 0 \quad \text{de otra manera} \end{aligned}$$

Tomando en cuenta lo anterior se obtiene:

$$\sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u} = \sum_{u=0}^{n_1-1} x_{2u} = 0$$

$$\sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u} x_{2u} = 0$$

$$\sum_{u=1}^{n-1} x_{1u}^2 x_{2u} = \sum_{u=0}^{n-1} x_{1u} x_{2u}^2 = 0$$

$$\sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u}^3 = \sum_{u=0}^{n_1-1} x_{2u}^3 = 0$$

$$\sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u}^2 = \sum_{u=0}^{n_1-1} x_{2u}^2 = n_1 \rho^2 / 2$$

$$\sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u}^4 = \sum_{u=0}^{n_1-1} x_{2u}^4 = 3n_1 \rho^4 / 8$$

$$\sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u}^2 x_{2u}^2 = n_1 \rho^4 / 8$$

$$\sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u}^3 x_{2u} = \sum_{u=0}^{n_1-1} x_{1u} x_{2u}^3 = 0$$

observándose que las condiciones necesarias para un diseño rotatable son conservadas o mantenidas.

Para que la matriz de momentos sea consistente con la escala convenida, cada punto del diseño debe de ser multiplicado por:

$$c^* = \frac{1}{\rho} \sqrt{\frac{2(n_2 + n_1)}{n_1}}$$

obteniéndose así el valor de λ_4 para un diseño equiradial el cual es:

$$\lambda_4 = \frac{n_2 + n_1}{2n_1}$$

Así, manipulando de la manera más favorable posible los valores de n_1 y n_2 , es posible obtener ya sea un diseño rotatable ortogonal o bien un diseño rotatable para una precisión uniforme.

CAPITULO 8

DISEÑOS PARA EXPERIMENTOS EN BLOQUES

Muy frecuentemente, debido a limitaciones, físicas, cuando es ajustada una s.r., es necesario conducir el experimento en bloques. Muchas de las veces es necesario asignar los tratamientos a grupos más pequeños que el conjunto total, con la finalidad de lograr condiciones más homogéneas en el material dentro de cada uno de estos grupos; así, el bloque llega a formar en estos casos una parte esencial del procedimiento experimental. Si es asumido que la influencia del bloque es representada por un efecto aditivo, uno puede ajustar la función de respuesta libre del efecto del bloqueo. En este capítulo, el bloqueo, en los casos de primer y segundo orden, son tratados. Por lo que respecta al diseño, uno busca diseños para los cuales los efectos de bloque (los cuales deben ser tomados en cuenta en el modelo de respuesta), sean ortogonales a los coeficientes. Tales diseños son llamados diseños para bloqueo ortogonal.

Bloqueo en el Caso del Modelo de Primer Orden

Un conjunto de diseños muy utilizado son los factoriales 2^k , divididos en 2^p bloques ($p < k$).

Para un diseño 2^k factorial en 2^p bloques, uno selecciona p definiciones de contraste. Así, para el caso en el que 2 bloques son requeridos, $p = 1$ contraste de definición es seleccionado, siendo éste de la forma:

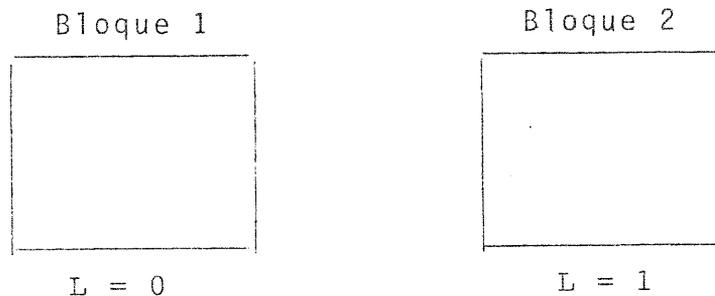
$$A^{\gamma_1} B^{\gamma_2} \dots$$

donde γ_i es cero o la unidad. La ecuación de definición

$$L = \gamma_1 z_1 + \gamma_2 z_2 + \dots$$

módulo 2 es evaluada para cada combinación de factores. Los valores de z son cero o uno, dependiendo si el factor correspondiente aparece o no en el tratamiento.

La mitad de los tratamientos produce $L = 0$ y la otra mitad $L = 1$; así, la asignación de los tratamientos a los bloques es como sigue:



Bajo este procedimiento, el efecto representado por el contraste de definición está confundido con los bloques, es decir, la influencia del bloque y el efecto debido al contraste de definición no son separables.

En general, para el caso de 2^p bloques, p contrastes

de definición son necesarios y seleccionados por el experimentador, mientras que $2^p - p - 1$ efectos adicionales son confundidos haciendo un total de $2^p - 1$ efectos confundidos.

Es decir, si los dos contrastes de definición seleccionados son ABCD y CD, entonces:

$$(ABCD)(CD) = ABC^2D^2 = AB$$

es también confundido con el efecto de los bloques.

Ejemplo: Supóngase que un factorial 2^4 se desea llevar a cabo en cuatro bloques con cuatro tratamientos cada bloque.

Los contrastes de definición seleccionados son las interacciones ACD y BCD. Así:

$$(ACD)(BCD) = AB$$

es también confundido con los bloques.

Los contrastes de definición son escritos como:

$$L_1 = z_1 + z_3 + z_4$$

$$L_2 = z_2 + z_3 + z_4$$

El bloque $L_1 = L_2 = 0$ (llamado el bloque principal) contiene los tratamientos:

$$\{(1), cd, abd, abc\}$$

$$(L_1 = 0, L_2 = 1) \{ b, c, ad, bcd \}$$

$$(L_1 = 1, L_2 = 0) \{ a, bc, acd, bd \}$$

$$(L_1 = L_2 = 1) \{ ab, abcd, d, c \}$$

Uso del 2^k Factoriales en p Bloques para Ajustar S.R. de Primer Orden

Diseños experimentales del tipo descrito anteriormente son utilizados para ajustar modelos de primer orden, debido a que los efectos del bloque son ortogonales a los estimadores de los coeficientes de primer orden. Ya que la función de respuesta de primer orden contiene normalmente términos que corresponden solamente a la contribución de efectos principales, es importante que ningún efecto principal sea confundido con bloques.

Ejemplo: Sea un factorial 2^3 con definición de contraste ABC. Así:

(1)
ab
ac
bc

bloque 1

a
b
c
abc

bloque 2

siendo el modelo asumido:

$$y_u = \beta_0 + \beta_1 x_{1u} + \beta_2 x_{2u} + \beta_3 x_{3u} + \delta_1 z_{1u} + \delta_2 z_{2u} + \epsilon_u \quad (u=1,2,\dots,8)$$

donde δ_1 y δ_2 representan los efectos del primer y segundo bloque respectivamente y la z_{ju} toma el valor de 0 ó 1 (1 si la u -th observación está en el j -th bloque).

El modelo anterior puede ser redefinido de la siguiente manera:

$$y_u = \beta_0 + \beta_1 x_{1u} + \beta_2 x_{2u} + \beta_3 x_{3u} + \delta_1 (z_{1u} - \bar{z}_1) + \delta_2 (z_{2u} - \bar{z}_2) + \epsilon_u \quad (u=1,2,\dots,8)$$

y así:

$$Y = \begin{array}{c|c} \begin{array}{c} (1) \\ ab \\ ac \\ bc \\ \hline a \\ b \\ c \\ abc \end{array} & \begin{array}{c} \text{bloque 1} \\ \\ \\ \\ \\ \text{bloque 2} \end{array} \end{array} \quad X = \begin{array}{c|cccccc} \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \delta_1 & \delta_2 \\ \hline 1 & -1 & -1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 1 & 1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 1 & -1 & 1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -1 & 1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \hline 1 & 1 & -1 & -1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Nótese que las δ columnas son ortogonales a las restantes columnas de X y así los estimadores son:

$$b_0' = \frac{\sum_1^8 Y}{8} \quad ; \quad b_1 = \left[\frac{a + ab + ac + abc - (1) - b - c - bc}{8} \right]$$

$$b_2 = \left[\frac{b + ab + bc + abc - (1) - a - c - ac}{8} \right]$$

$$b_3 = \left[\frac{c + ac + bc + abc - (1) - a - b - ab}{8} \right]$$

El esquema de los grados de libertad para el análisis de varianza se muestra a continuación.

Fuente de variación	G. de L.
Media	1
Bloques	1
Factor A	1
Factor B	1
Factor C	1
Falta de ajuste	3
Total	8

Bloqueo en Modelos de Segundo Orden

Existen muchas clases de diseños de segundo orden - que admiten bloqueo ortogonal. Un diseño apropiado para una situación dada depende del número de factores y el número de bloques dictado por la situación experimental.

Para N puntos experimentales asignados a m bloques - con n'_w puntos en el w -th bloque, se tiene:

$$n_u = \sum_{w=1}^m \beta_{0w} Z_{wu} + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_{iu} x_{ju}$$

donde β_{0w} es el valor esperado de la respuesta en el w -th - bloque en las condiciones experimentales correspondientes al origen del diseño y Z_{wu} es una variable dummy que toma el valor unitario para aquellos puntos experimentales que se en - cuentran en el w -th bloque y cero para todos los otros pun - tos experimentales.

Nótese que el modelo anterior puede ser representado equivalentemente de la siguiente manera:

$$n_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + \sum_{w=1}^m \delta_w (Z_{wm} - \bar{Z}_w)$$

donde:

$$\beta_0 = \sum_{w=1}^m \frac{n'_w}{N} \beta_{0w}, \delta_w = \beta_{0w} - \beta_0; \bar{Z}_w = n'_w/N$$

nótese que:

$$\begin{aligned} Z_{wu} - Z_w &= 1 - \frac{n'_w}{N} \quad \text{cuando el } u\text{-th conjunto de condiciones -} \\ &\quad \text{está en el } w\text{-th bloque.} \\ &= - \frac{n'_w}{N} \quad \text{de otro modo} \end{aligned}$$

Las condiciones para el bloqueo ortogonal en un polinomio de segundo grado son:

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju}(z_{wu} - \bar{z}_w) = 0 \quad (i, j = 1, 2, \dots, t)$$

Es decir:

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju}z_{wu} = \bar{z}_w \sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju}$$

Ahora bien, para cualesquier diseño rotable de segundo orden, si $i \neq j$, $\sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju} = 0$

Por lo tanto, para un bloqueo ortogonal se requiere:

$$\sum_{u=1}^{\eta'_w} x_{iu}x_{ju} = 0 \quad i \neq j, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

donde la sumatoria incluye sólo aquellos valores de m en el w -th bloque. Así (i) todas las sumas de productos entre x_1, x_2, \dots, x_k deben ser cero para cada bloque.

Una segunda condición procede estableciendo $i = j$.

Por lo tanto

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 z_{wu} = \bar{z}_w \sum_{u=1}^N x_{iu}^2$$

por lo que

$$\bar{z}_w = \frac{\eta'_w}{N} = \frac{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 z_{wu}}{N \sum_{u=1}^N x_{iu}^2} = \frac{\sum_{u=1}^{\eta'_w} x_{iu}^2}{N \sum_{u=1}^{\eta'_w} x_{iu}^2}$$

Así (ii) la fracción de la suma total de cuadrados para cada variable proporcionada por cada bloque debe ser -

proporcional al número de observaciones en cada bloque.

Diseño Central Compuesto - Uso de Dos Bloques

El diseño central compuesto consiste de n_c puntos en el vértice de un cubo correspondiendo a un 2^k factorial (o alguna fracción) con coordenadas $(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$ conjuntamente con $n_a = 2k$ puntos axiales con coordenadas $(\pm \alpha, 0, 0, \dots, 0)$ $(0, \pm \alpha, 0, \dots, 0)$, ... $(0, 0, 0, \dots, \pm \alpha)$ y n_o puntos en el centro del diseño con coordenadas $(0, 0, \dots, 0)$.

El conjunto de puntos en los vértices del cubo y el conjunto de los puntos axiales son cada uno de ellos diseños rotables de primer orden. Estas dos partes del diseño proporcionan una base para una primera división del diseño compuesto en dos bloques. El bloqueo será ortogonal si es posible - distribuir los puntos centrales a las dos partes, tal que el número total de puntos en cada parte es proporcional a la suma de cuadrados para cada variable contribuida por esta parte. Si n_{co} y n_{ao} son los números de puntos centrales en la parte cúbica y axial respectivamente, entonces es requerido:

$$\frac{2\alpha^2}{n_c} = \frac{n_a + n_{ao}}{n_c + n_{co}}$$

por lo que para cualesquier diseño central compuesto con:

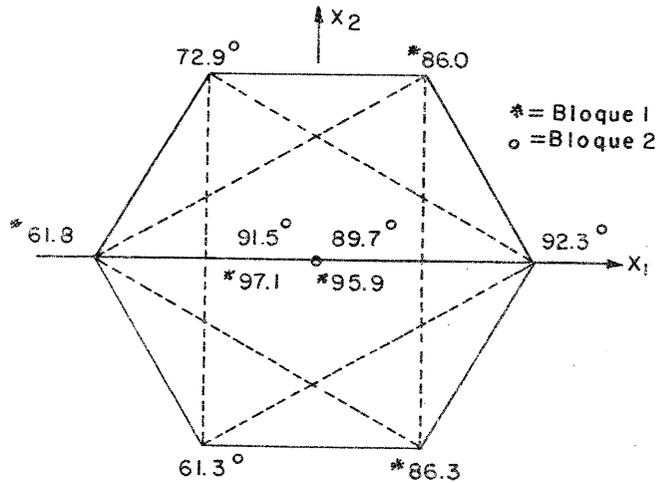
$$\alpha = \left\{ \frac{n_c(n_a + n_{ao})}{2(n_c + n_{co})} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

se obtiene bloqueo ortogonal.

Ahora, para la rotalidad $\alpha = n_c^{\frac{1}{4}}$ por lo que para obtener un diseño rotable con bloqueo ortogonal se requiere:

$$\frac{2}{n_c^2} = \frac{n_a + n_{ao}}{n_c + n_{co}}$$

Ejemplo: Los datos en la figura provienen de un diseño experimental hexagonal para dos factores en dos bloques:



nótese que los puntos experimentales (no los centrales) que forman un bloque constituyen un diseño simplex.

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -1.0 & 0 & 1.0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 0.5 & \sqrt{0.75} & 0.25 & 0.75 & \sqrt{3/16} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 0.5 & -\sqrt{0.75} & 0.25 & 0.75 & -\sqrt{3/16} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \dots & \dots \\ 1 & -0.5 & \sqrt{0.75} & 0.25 & 0.75 & -\sqrt{3/16} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & -0.5 & -\sqrt{0.75} & 0.25 & 0.75 & \sqrt{3/16} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 1.0 & 0 & 1.0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{matrix} \text{b} \\ \text{l} \\ \text{o} \\ \text{q} \\ \text{u} \\ \text{e} \\ \dots \\ \text{b} \\ \text{l} \\ \text{o} \\ \text{q} \\ \text{u} \\ \text{e} \end{matrix} \begin{matrix} 1 \\ \dots \\ 2 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} x_1 & x_2 & x_1^2 & x_2^2 & x_1 x_2 & \delta_1^2 & \delta_2^2 \end{matrix}$$

y así:

$$X'X = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 3 & 3 & 0 \\ & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 3 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2.25 & 0.75 & 0 \\ & & & & 2.25 & 0 \\ & & & & & 0.75 \end{bmatrix} \quad X'Y = \begin{bmatrix} 834.8000 \\ 49.5500 \\ 9.7858 \\ 230.7250 \\ 229.8750 \\ -5.1527 \end{bmatrix}$$

obteniéndose por mínimos cuadrados los siguientes estimados:

$$b_0' = 93.5500 \quad ; \quad b_1 = 16.5150 \quad ; \quad b_2 = 3.2616$$

$$b_{11} = -16.5077 \quad ; \quad b_{22} = -17.0744 \quad ; \quad b_{12} = -6.8701$$

siendo las coordenadas del punto estacionario $x_{1,0} = 0.5013$ y $x_{2,0} = -0.0053$. Los valores λ en el análisis canónico son las series características de la matriz:

$$B = \begin{bmatrix} -16.5077 & -3.4350 \\ -3.4350 & -17.0744 \end{bmatrix}$$

obteniéndose: $\lambda_1 = -13.3443$ y $\lambda_2 = -20.2378$

indicando que el punto estacionario representa la localización de una respuesta estimada máxima.

El análisis de varianza es llevado a cabo de la manera usual.

$$SC \text{ para regresión lineal} = b_1(49.55) + b_2(9.7858) = 850.24$$

$$SC \text{ para regresión cuadrática} = b_{11}(230.725) + b_{22}(229.875) + b_{12}(-5.1527) + b_0'(834.80) - (834.8)^2/10$$

$$= 708.12$$

cuya representación está dada en seguida.

Análisis de varianza del ejemplo 8.4.1.

Fuente	G. de L.	SC	CM	F
Bloques	1	37.64	37.64	32.17
Reg. Lin.	2	860.24	425.12	363.35
Reg. Cuad.	3	708.12	236.04	201.74
Falta de ajuste	1	10.44	10.44	8.92
Error	2	2.34	1.17	

LITERATURA CITADA

- Anderson, V.L. and McLean, R.A. 1974. Design of experiments. Marcel Dekker, Inc. New York. 387 p.
- Box, G.E.P. 1952. Multifactor designs of first order. *Biometrika*. United Kingdom. 39:49-57.
- _____. 1954. The exploration and exploitation of response surfaces. *Biometrics*. USA. 10:16-60.
- _____. 1959. Answer the query: replication of non-central point in the rotatable and near-rotatable central composite design. *Biometrics*. USA. 15:139.
- Box, G.E.P. and D.W. Behnken. 1960. Simplex-sum design: A class of second order rotatable designs derivable from those of first order. *Ann. Math. Statist.* USA. 31:838-864.
- Box, G.E.P. and N.R. Draper. 1959. A basis for the selection of a response surface design. *Biometrika*. U. Kingdom. 50:335-352.
- Box, G.E.P. and J.S. Hunter. 1957. Multifactor experimental designs for exploring response surfaces. *Ann. Math. Statist.* USA. 28:195-241.
- _____. 1961a. The 2^{k-p} fractional factorial design, Part. I. *Technometrics*. USA. 3:311.
- _____. 1961b. The 2^{k-p} fractional factorial design, Part. II. *Technometrics*. USA. 3:449.

- Box, G.E.P. and K.B. Wilson. 1951. On the experimental attainment of optimum conditions. J. Roy. Statist. Soc., Ser. B. ENGLAND 13:1-44.
- Box, G.E.P. and P.V. Youle. 1955. Exploration and exploitation of response surface: an example of the link between the fitted surface and the basic mechanism of the system. Biometrics. USA.11:287-322.
- Brooks, S.H. and M.R. Mickey. 1961. Optimum estimation of gradient direction in steppe ascent experiments. Biometrics. USA.16:48-56.
- Brunk, H.D. 1965. An introduction to mathematical statistics. Blaisdell Publishing Company, A division of Ginn and Company. Waltham, Boston. 597 p.
- Cochran, W.G. and G.M. Cox. 1978. Diseño de experimentos. Ed. Trillas. México. 661 p.
- De Baun, R.M. 1956. Block effects in the determination of optimum conditions. Biometrics. USA. 12:20-22.
- _____. 1959. Response surface designs for three factors at three levels. Technometrics. USA 1:1-8.
- Draper, N.R. 1960. Third order rotatable designs in three dimensions. Ann. Math. Statist. 31, 865.
- _____. 1962. Third order rotatable designs in three factors: Analysis. Technometrics. USA. 4:219-234
- _____. 1969. Ridge analysis of response surfaces. Technometrics. USA. 5:469-479.
- Draper, N.R. and H. Smith. 1966. Applied regression analysis. John Wiley and Sons, Inc. New York. 556 p.
- Gardiner, D.A., A.H. Grandage and R.J. Hader. 1959. Third order rotatable designs for exploring response surface. Ann. Math. Statist. USA. 30:1082-1096.

- Graybill, F.A. 1961. An introduction to linear statistical models. Mac Graw-Hill Book Company Inc. New York. 463 p.
- Hartley, H.O. 1959. Smallest composite designs for quadratic response surfaces. Biometrics. USA. 15:611-624.
- Hill, W.J. and W.G. Hunter. 1966. A review of response surface methodology: a literature survey. Technometrics. USA. 8(4):571-590.
- Hoog, R.V. and A.T. Craig. 1970. Introduction to mathematical statistics. The Mac Millan Co. of Canada, Limited. Toronto. 438 p.
- Lehmann, E.L. 1959. Testing statistical hypotheses. John Wiley and Sons, Inc. New York. 368 p.
- Mood, A.M., F.A. Graybill and D.C. Boes. 1974. Introduction to the theory of statistics. Mac Graw-Hill. New York. 564 p.
- Myers, R.H. 1971. Response surface methodology. Allyn and Bacon, Inc. Boston. 246 p.
- Noble, B. 1969. Applied linear algebra. Prentice-Hall. Englewood Cliffs. USA. 670 p.
- Ostle, B. 1977. Estadística aplicada. Ed. Limusa. México. 629 p.
- Plackett, T.R.L. and J.P. Burman. 1946. The design of optimum-multifactorial experiments. Biometrika. United Kingdom. 33:305-325.
- Searle, S.R. 1971. Linear models. John Wiley and Sons. New York. 532 p.