

## **TEMA IX: Diseños mediante superficie de respuesta**

### **1. INTRODUCCIÓN**

La metodología de la Superficie de Respuesta ha sido satisfactoriamente utilizada para optimizar muy diferentes tipos de unidades, procesos y sistemas industriales. Este es un enfoque experimental que ha sido aplicado en laboratorios de investigación y desarrollo y, a veces en los propios equipos de fabricación. Sin embargo, en este último caso es con frecuencia más apropiada la Operación Evolutiva, que es una forma modificada de aquella, aplicable tanto para objetivos de cribado como de optimización.

Con la metodología de la superficie de respuesta, los factores que influyen de manera más importante en el proceso se seleccionan de manera muy cuidadosa, se mide la capacidad operativa del proceso y se analizan estos datos para indicar en qué forma se deben ajustar los factores para mejorar el resultado. Estas etapas pueden repetirse, como con frecuencia es necesario. No es preciso ser estadístico o matemático para utilizar estas ideas. Los técnicos de control de la calidad pueden aprender fácilmente sus principales principios y aplicarlos.

Para implantar la metodología de la superficie de respuesta, se utilizan varios procedimientos estadísticos. El concepto de superficie de respuesta fue originalmente desarrollado y descrito por Box y Wilson (1951). Al principio, la metodología de la superficie de respuesta fue utilizada fundamentalmente como técnica de optimización experimental en la industria química. Pero, desde entonces, se le han hallado aplicaciones en muchos otros campos (ver Hill y Hunter 1966).

Se puede considerar que la metodología de la superficie de respuesta se compone de dos etapas:

1. Una etapa de primer orden, en la que se propone un modelo matemático de primer orden; se prepara un factorial u otro diseño de primer orden, se adaptan los datos, se bosquejan los contornos de la superficie de respuesta y se determina y persigue la dirección de mayor pendiente.
2. Una etapa de segundo orden, en la cual se propone un modelo matemático de segundo orden; se prepara un diseño compuesto-central u otro diseño de segundo orden, se adaptan los datos, se bosquejan los contornos, se prepara un análisis canónico y se localiza el óptimo.

La metodología de la superficie de respuesta es, en realidad, más flexible de lo que indican esas breves definiciones. Una presentación esquemática, que muestra algunas de las posibles formas de desarrollar un estudio con esa técnica, se puede ver en el diagrama de flujo de la Figura 1.

**Deficiencias del enfoque de «una variable a la vez».** Un popular método de experimentación es el que aplica «una sola variable cada vez». Cada factor, es variado por turno, mientras los demás se mantienen a un determinado nivel constante. Un inconveniente de este enfoque es que se puede alcanzar un falso óptimo. Consideremos la siguiente hipotética situación.

**Ejemplo.** Tenemos en estudio una reacción química en la que hay dos factores de interés: la concentración de uno de los reactivos y el tiempo de reacción. ¿Qué valores de los dos factores maximizarán el resultado?. Los que se consideraban mejores, al principio de la investigación eran una concentración del 25 por 100 y un tiempo de 1 hora.

Siguiendo el comentado enfoque, el ingeniero realizó una serie de experimentos, variando el tiempo, mientras mantenía la concentración en el 25 por 100. El

resultado mostró que una producción máxima de alrededor del 65 por 100 se obtenía cuando el tiempo era de 1,9 horas. Manteniendo el tiempo fijo en este valor, se varió la concentración, y se obtuvo un máximo en el 25 por 100, con lo que el ingeniero llegó a la conclusión de que la mayor producción (el 65 por 100) se alcanzaba con una concentración del 25 por 100 y un tiempo de 1.9 horas. Esta conclusión, sin embargo, es incorrecta

**Superficie de respuesta.** La situación real, desconocida para el investigador, se puede ver en la Figura 2. Aquí, el resultado se muestra como una función de la concentración y el tiempo. Las curvas de trazo continuo son líneas de contorno de resultado constante. Por ejemplo, hay un conjunto de condiciones de concentración y tiempo que dan una producción del 80 por 100. El conjunto de los contornos puede verse como una montaña cuyo vértice es el punto P. Los contornos de 90, 80 y demás, serían las altitudes. Esos números representan los porcentajes de producción.

El objetivo del ingeniero era hallar aquellos valores de la concentración y del tiempo que daban la máxima producción. Visto geoméricamente, lo que el ingeniero quería hacer era ascender al punto más alto de la montaña. El intento falló por una muy simple razón.

Hablando en forma figurada, al variar el tiempo, el ingeniero, primero, atravesó la montaña a lo largo del camino que va del punto A al punto B (ver la Figura 2). Entre A y E el camino sube, pero, a partir del punto E, empieza a bajar por el otro lado. Entre el punto E y el punto B, el ingeniero ha estado descendiendo por el otro lado de la montaña. Vemos también el camino (de C a E y a D) recorrido al variar las concentraciones.

El investigador ha alcanzado sólo una producción del 65 por 100 (en E), mientras que es posible (en P) llegar al 90 por 100. Esta mayor producción puede

alcanzarse si, *simultáneamente*, se incrementa la concentración y se reduce el tiempo a partir de los valores «óptimos» de los que ha informado el ingeniero.

Si los contornos de la montaña hubieran sido circulares y no hubiera ningún valor experimental, el procedimiento de «uno a la vez» habría llevado al ingeniero al punto más alto de la montaña. En general, los contornos reales de las superficies de respuesta no son circulares o esféricos, y, por eso, es necesaria una estrategia experimental más sofisticada, tal como la metodología de la superficie de respuesta.

## **2. APLICACIÓN DEL ENFOQUE DE SUPERFICIE DE RESPUESTA**

**Iniciación del programa.** Ahora ya podemos aplicar el enfoque de la superficie de respuesta (ver la Figura 1) al ejemplo de maximización de la producción.

**Definir el objetivo de la investigación.** Es de la máxima importancia definir claramente el objetivo del estudio que se va a realizar. Es sorprendente como, en la práctica y con frecuencia, esta etapa es ignorada o no se le da la atención que merece, y cómo conduce a posteriores dificultades. En el presente ejemplo, el objetivo es maximizar la producción. En general, el objetivo puede abarcar múltiples criterios.

**Seleccionar factores e intervalos.** La siguiente etapa es seleccionar los factores a estudiar junto con los intervalos en que han de ser estudiados. Es necesario, para entender los aspectos técnicos de la situación experimental, que eso se haga inteligentemente. También debe elegirse la «escala» concreta en que cada factor se estudiará. Por ejemplo, en vez de variar el tiempo en horas, linealmente, el investigador puede elegir que la escala básica sea el logaritmo del número de horas. En el presente ejemplo, las variables concentración y tiempo fueron las

seleccionadas. Inicialmente, se decidió variar la concentración entre 23 y 27 por 100 y el tiempo de 0,9 a 1,1 horas.

### **Estrategia de primer orden**

**Realizar el diseño y reunir los datos.** Se prepara el diseño factorial  $2^2$  con tres puntos centrales como se muestra en la Tabla 1. (En Cochran y Cox, 1957, y en Hunter, 1959, se da más información sobre el número de puntos centrales y otros temas relativos al desarrollo del diseño). Se determina aleatoriamente el orden de los siete ensayos, se realizan los experimentos y se obtienen los resultados que se muestran en la Tabla 1. (Se supone que, desconocida por el ingeniero, la verdadera relación entre  $X_1$  y  $X_2$  y la producción se da mediante la superficie de respuesta mostrada en la Figura 2). Los resultados se muestran también en la Figura 3.

**Decidir el modelo de primer orden y controlar su adecuación.** El análisis de estos resultados puede conducir a uno de dos caminos equivalentes. Los efectos e interacciones del diseño factorial pueden calcularse con sus correspondientes intervalos de confianza del 95 por 100, como se indica en la Tabla 1.

Obsérvese que  $Y_i$  es la producción del ensayo  $y$ , ( $n$ ) el número de ensayos del diseño factorial (en este caso cuatro),  $n_0$  es el número de puntos centrales (en este caso tres) y  $t$  el apropiado valor  $t$  del intervalo de confianza del 95 por 100. La cantidad ( $s$ ) es la raíz cuadrada de

$$s^2 = \frac{\sum_{i=5}^7 (Y_i - \bar{Y}_0)^2}{n_0 - 1}$$

En la que  $\bar{Y}_o$  es la media de los puntos centrales  $Y_5, Y_6,$  e  $Y_7$ . Por supuesto que los intervalos de confianza a niveles diferentes del 95 por 100 habrá que calcularlos. Se ha calculado un efecto de curvatura, que es la diferencia entre la media de los puntos del diseño factorial (ensayos 1 a 4) e  $\bar{Y}_o$ , la media de los puntos centrales (ensayos 5 a 7).

Como las condiciones del punto central han sido replicadas tres veces, puede obtenerse fácilmente una estimación de la varianza. (Si no se han realizado ensayos replicados, es posible obtener una adecuada estimación por otros caminos, como, por ejemplo, a partir de alguna fuente externa, de la experiencia pasada, o de alguna técnica similar a la de los trazados semi-normales; ver Daniel, 1959). Con los tres valores 46,8, 45,9 y 45,3,  $s^2 = 0,57$  se calcula como una estimación de la varianza de una observación individual con dos grados de libertad

**Tabla 1.** Resultados de un plan de primer orden

Ensayo número	X <sub>1</sub> = concentración		X <sub>2</sub> = tiempo		Y = Rendimiento	
	%	Código	Horas	Código	%	
1	23	-1	0,9	-1	43,7	
2	27	+1	0,9	-1	44,5	
3	23	+1	1,1	+1	47,2	
4	27	+1	1,1	+1	51,8	
5	25	0	1,0	0	46,8	
6	25	0	1,0	0	45,9	
7	25	0	1,0	0	45,3	

**Cálculo de los efectos principales**

Concentración:	$(-Y_1 + Y_2 - Y_3 + Y_4) / 2 = (-43,7 + 44,5 - 47,5 + 51,8) / 2 = 2,7$
Tiempo:	$(-Y_1 - Y_2 + Y_3 + Y_4) / 2 = (-43,7 - 44,5 + 47,5 + 51,8) / 2 = 5,4$
Interacción:	$(+Y_1 - Y_2 - Y_3 + Y_4) / 2 = (43,7 - 44,5 - 47,5 + 51,8) / 2 = 1,9$
Curvatura:	$(+Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4) / 4 - (Y_5 + Y_6 + Y_7) / 3 = 46,8 - 46,0 = 0,8$

**Cálculos de los intervalos de confianza**

Concentración:	$\pm 2ts / \sqrt{n} = \pm 2 (4,30)(0,755) / \sqrt{4} = \pm 3,25$
Tiempo:	$\pm 2ts / \sqrt{n} = \pm 2 (4,30)(0,755) / \sqrt{4} = \pm 3,25$
Interacción:	$\pm 2ts / \sqrt{n} = \pm 2 (4,30)(0,755) / \sqrt{4} = \pm 3,25$
Curvatura:	$\pm 2ts / \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{n_o}} = \pm 2 (4,30)(0,755) / \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{1}{3}} = \pm 2,48$

Efectos	Intervalo de confianza 95% calculado, % rendimiento
Concentración:	2,7 ± 3,25
Tiempo:	5,4 ± 3,25
Interacción:	1,9 ± 3,25
Curvatura:	0,8 ± 2,48

Estos intervalos sugieren, primero, que, como los estadígrafos que miden los efectos de segundo orden (interacción y curvatura) son pequeños, la relación entre tiempo, concentración y producción puede ser descrita geométricamente como un plano. Es decir, no hay ninguna aparente falta de adecuación del modelo de primer orden. Segundo, parece que el tiempo es claramente importante. El dato sugiere que, más tiempo y quizás mayor concentración, incrementarían la producción. Podría hacerse un análisis más preciso utilizando la ecuación.

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

en las que  $\beta$  son constantes, cuyos valores podemos estimar a partir de los datos; y es el valor de la respuesta (la producción),  $\varepsilon$  el error aleatorio y

$$X_1 = \frac{\text{Concentración}(\%) - 25}{5}$$

$$X_2 = \frac{\text{Tiempo}(\text{min}) - 1.0}{0.1}$$

Las fórmulas para  $X_1$  y  $X_2$  codifican los valores originales de situación, es decir, + 1 para el nivel alto, 0 para el nivel medio y - 1 para el nivel bajo (ver Tabla 1).

A partir de nuestros datos, el modelo de primer orden será

$$\hat{Y} = 46,46 + 1.35 X_1 + 2.70 X_2$$

que es una ecuación de regresión, los coeficientes de la cual pueden obtenerse mediante las técnicas de regresión normales. Alternativamente, en este caso ya que se ha empleado un diseño factorial; el término constante puede obtenerse calculando la media es decir,  $\bar{Y} = 46,46$ , y los otros dos valores calculando el efecto de media concentración =  $1/2 (2,7) = 1,35$  y el efecto de medio tiempo =  $1/2 (5,4) = 2,70$ .

Un segundo método para evaluar la adecuación es el de la aplicación del análisis de la varianza. La tabla resultante (tabla 2) indica que el modelo de primer orden (ecuación anterior) es adecuado a los datos (ver Draper y Smith, 1981). El ratio del cuadrado medio de la falta de adecuación al cuadrado medio del error absoluto es 4,13 y, como este valor es menor que  $F_{2,2} (0.95) = 19,0$ , no hay evidencia de falta de adecuación del modelo de primer orden; luego, es razonable estudiar sus implicaciones (ecuación anterior). El plano descrito por esa ecuación esta representado en la Figura 3 por líneas de contorno rectas.

**Determinar la dirección de la línea de máxima pendiente.** La dirección de esta línea esta indicada en la Figura 3. (Para más detalles sobre la dirección de la línea de máxima pendiente ver Cochran y Cox, 1957, y Davies, 1954). Es perpendicular a las líneas de contorno. Cuatro experimentos (números 8 a 11) realizados en esta dirección indican que el centro de un segundo diseño debe estar aproximadamente a una concentración del 31 por 100 y a un tiempo de 1,6 horas. El diseño empleado y los datos obtenidos después de realizados los ensayos, por orden aleatorio, se muestran en la Tabla 3.

**Tabla 2.** Tabla de análisis de la varianza: modelo de primer orden, primer plan \*

Fuente	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Cuadrado medio
Media $b_0$	15107,86	1	7,29
Media $b_1$	7,29	1	29,16
Media $b_2$	29,16	1	2,36
Falta de ajuste	4,71	2	0,57
Error Puro	1,14	2	
<b>Total</b>	<b>15150,16</b>	<b>7</b>	

\* En la bibliografía sobre la metodología de la superficie de respuesta es habitual que esta tabla incluya un término para la suma de cuadrados de la media. En otras aplicaciones algunos autores excluyen ese término.

ensayos 12 al 18. Un análisis de los datos muestra una aparente falta de adecuación (Tabla 4). El ratio del cuadrado medio de la falta de adecuación al cuadrado medio del error absoluto vale 26,8, y, como este valor es mayor que  $F_{2,2}(0,95) = 19,0$ , es evidente la falta de adecuación del modelo de primer orden.

### **Estrategia de segundo orden**

**Realizar el diseño y reunir los datos.** Ya que se ha detectado una falta de adecuación, el diseño se ampliará con la adición de los ensayos 19 a 25 para formar el diseño de segundo orden (compuesto-central) mostrado en la Tabla 3 (En general, si un modelo no es adecuado, puede ser ventajoso, en lugar de considerar inmediatamente un modelo de orden superior considerar transformaciones de los factores y/o de las respuestas. Ver Box y Cox 1964; Box y Tidwell, 1962; y Draper v Hunter 1967).

**TABLA 3.** Resultados de un plan de segundo orden

Ensayo número	Concentración (código) $X_1$	Tiempo (código) $X_2$	Rendimiento $Y_o$ %
<b>Plan de primer orden</b>			
12	-1	-1	69,3
13	+1	-1	85,1
14	-1	+1	72,8
15	+1	+1	73,6
16	0	0	80,9
17	0	0	78,4
18	0	0	80,4
<b>Ensayos agregados</b>			
19	-1,4142	0	71,4
20	+1,4142	0	78,9
21	0	-1,4142	73,9
22	0	+1,4142	69,1
23	0	0	76,4
24	0	0	78,5
25	0	0	76,3

**Tabla 4.** Tabla de análisis de la varianza: modelo de primer orden, segundo plan

Fuente	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Cuadrado medio
Media $b_0$	41734,32	1	
Media $b_1$	68,89	1	68,89
Media $b_2$	16,00	1	16,00
Falta de ajuste	94,12	2	47,06
Error Puro	3,50	2	1,75
<b>Total</b>	<b>41916,83</b>	<b>7</b>	

**Decidir el modelo de segundo orden y controlar su adecuación.** La adecuada ecuación de segundo orden obtenida mediante mínimos cuadrados es

$$\hat{Y} = 78,50 + 3,40 X_1 - 1,85 X_2 - 3,75 X_1 X_2 - 1,21 X_1^2 - 3,03 X_2^2$$

Los contornos de esta ecuación se muestran en la Figura 4 con los resultados del diseño de segundo orden. No resulta evidente falta de adecuación alguna ni de la

inspección visual ni de los cálculos estadísticos (ver Tabla 5). La anterior ecuación puede ser simplificada para que la forma de la superficie de respuesta pueda apreciarse mejor. Es difícil visualizar la superficie a partir de la ecuación dado que contiene sus constantes. Un análisis canónico, que comprende una traslación y rotación de las coordenadas desde los ejes originales ( $X_1, X_2$ ) a los nuevos ( $Z_1, Z_2$ ), da una ecuación que contiene solo tres constantes:

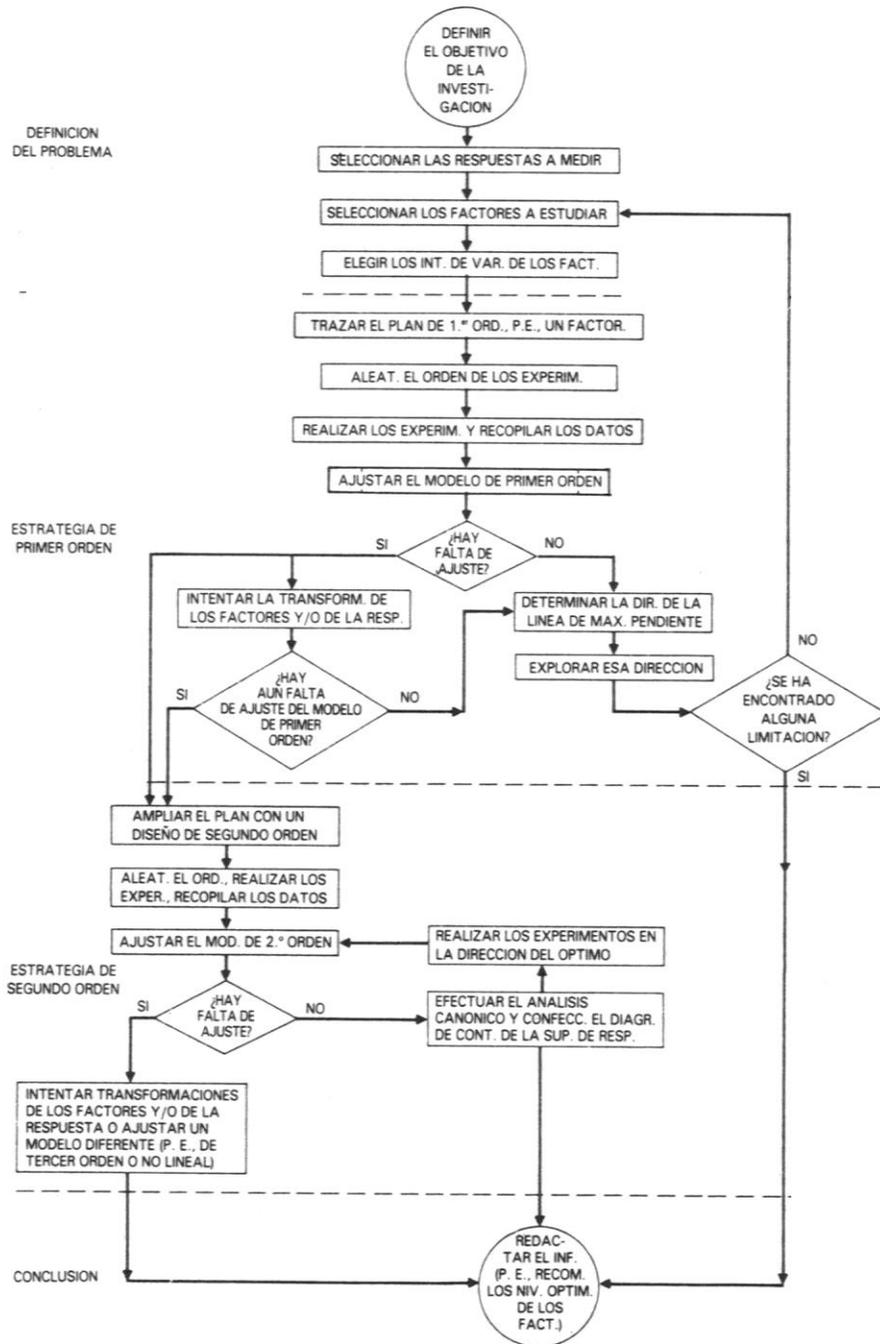
$$Y - 173,83 = -0,0332 Z_1^2 - 8,4075 Z_2^2$$

Esta ecuación indica que a causa de los coeficientes negativos de  $Z_1^2$  y  $Z_2^2$  la adecuada superficie de respuesta tiene un punto máximo. La dirección en la que se debe proceder en el siguiente paso para investigar este máximo está indicada por la flecha de la Figura 4. La flecha apunta hacia el «vértice de la montaña». La investigación debe terminar una vez que se haya experimentado en esa dirección quizás, con unos pocos puntos más en la vecindad del máximo. En algunas situaciones, puede ser útil preparar un diseño completo de segundo orden cerca del óptimo final. (Para más detalles sobre el análisis canónico y sobre la tecnología de superficie de respuesta en general, ver Davies, 1954 Myer, 1971. o Box y Draper, 1987).

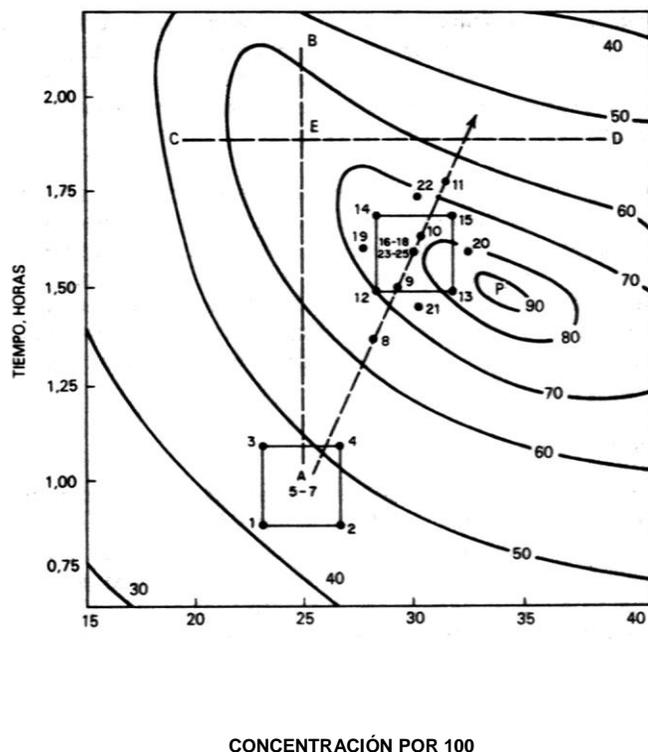
**Tabla 5.** Tabla de análisis de la varianza, modelo de segundo orden.

Fuente	Suma de Cuadrado	Grados de libertad	Cuadrado medio
	<b>S</b>		
Media $b_0$	81016,07	1	
Primer orden $b_1$	119,87	2	59,946
Segundo orden puro $b_0$	80,73	2	40,37
Segundo orden mezclado $b_0$	56,25	1	56,25
Falta de ajuste	2,23	3	0,74
Error Puro	21,77	5	4,35
<b>Total</b>	<b>81296,92</b>	<b>14</b>	

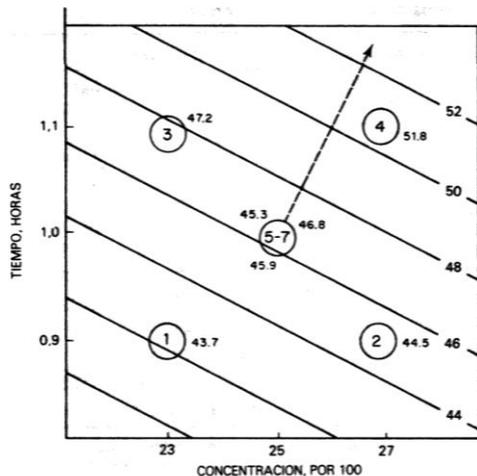
Nota. El ratio del cuadrado medio de la falta de ajuste al cuadrado medio del error puro vale 0,17 y como este valor es menor que  $F_{0,95}$  para 3, 5 grados de libertad (5,41) no hay evidencia de falta de ajuste del modelo de segundo orden.



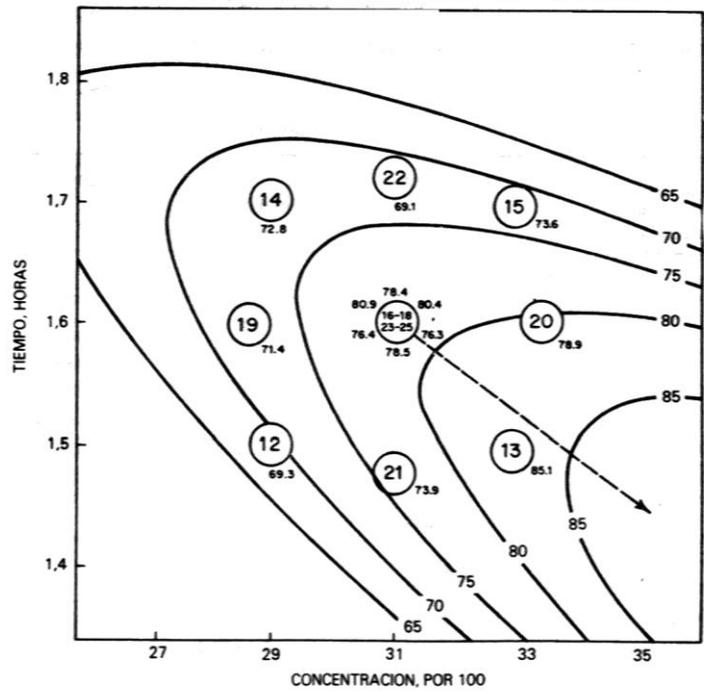
**Figura 1.** Esquema de las principales fases de la metodología de la superficie de respuesta.



**Figura 2.** Superficie de respuesta que muestra el rendimiento de una reacción química en función de la concentración y del tiempo.



**Figura 3.** Resultados de un plan de primer orden, con superficie de respuesta (plana), ajustada, de primer orden.



**Figura 4.** Resultados de un plan de segundo orden con superficies de respuesta (no plana), ajustada, de segundo orden.