

OPTIMIZACIÓN DE UNA SUPERFICIE DE RESPUESTA UTILIZANDO JMP IN

Gudelia Figueroa Preciado
Departamento de Matemáticas
Universidad de Sonora

Resumen

La metodología de Superficie de Respuesta es un conjunto de técnicas utilizadas en el estudio de la relación entre una o más respuestas y un conjunto de factores o variables independientes y donde el objetivo es optimizar ésta(s) respuesta(s). Dicha metodología se realiza mediante una experimentación secuencial, esto es, la aproximación a la región de interés se realiza de forma iterativa utilizando diseños cada vez más complejos que dependen de la información que se obtiene en cada etapa. En la actualidad hay varios paquetes estadísticos para analizar superficies de respuesta, algunos de estos específicamente diseñados para ello. Sin embargo, existen versiones estudiantiles de paquetes estadísticos que permiten un análisis muy completo de esta metodología, entre ellos el que en esta ocasión se presenta que es JMP IN 4 versión estudiantil, con el cual se analizará un problema de aplicación y se explicará cómo efectuar este análisis.

La Metodología de Superficie de Respuesta (MSR), fue introducida por Box y Wilson [1] y es una colección de técnicas que permite al investigador inspeccionar una respuesta, que se puede mostrar como una superficie, cuando los experimentos investigan el efecto que tiene el variar factores cuantitativos en los valores que toma una variable dependiente o respuesta; ejemplo de esto puede ser estudiar cómo los valores de temperatura y presión afectan la tasa de una reacción química y tratar de encontrar los valores que optimicen esta respuesta. Esto es, se trata de encontrar los valores óptimos para las variables independientes que maximizan, minimizan o cumplen ciertas restricciones en la variable respuesta.

La representación matemática de los modelos de MSR puede ser de diversas maneras: Un modelo de primer orden (lineal) sin interacciones o productos cruzados:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + e. \quad (1)$$

El modelo lineal de primer orden con interacciones:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{j=2}^k \sum_{i=1}^{j-1} \beta_{ij} x_i x_j + e, \quad (2)$$

y el modelo cuadrático o de segundo orden:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{j=2}^k \sum_{i=1}^{j-1} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + e, \quad (3)$$

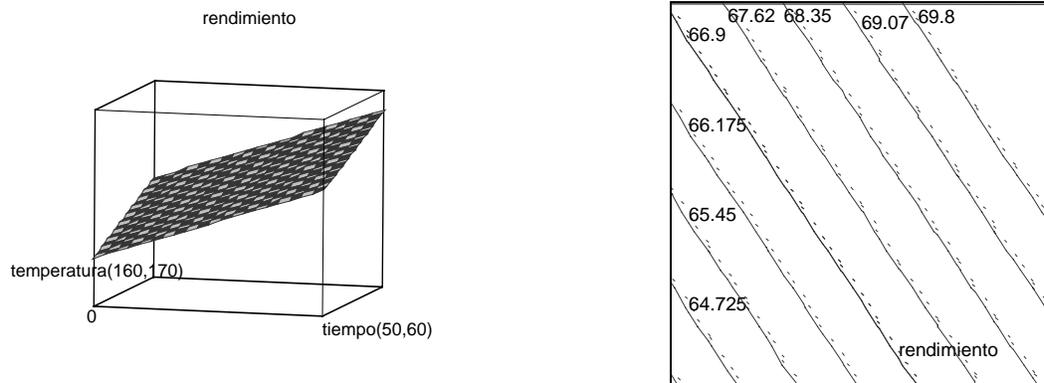
donde e representa el ruido o error observado en la respuesta y .

En la metodología de superficie de respuesta se supone que la variable respuesta y está en función de los niveles de los factores cuantitativos representados por las variables x_1, x_2, \dots, x_k . Los modelos polinomiales se utilizan como una aproximación a la función de respuesta real, y generalmente son buenas aproximaciones cuando se trabaja en pequeñas zonas de los factores cuantitativos.

Cuando se trabaja con dos factores y se utiliza el modelo lineal ajustado de primer orden

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2, \quad (4)$$

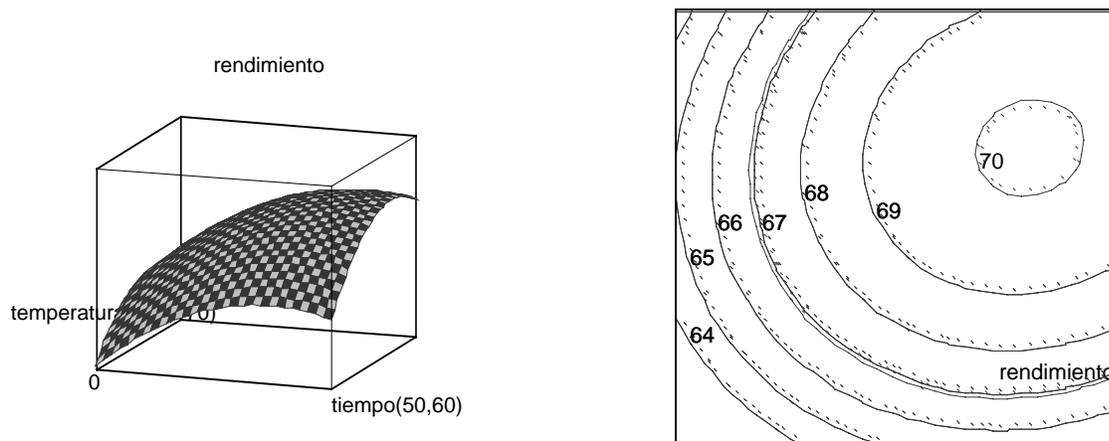
la superficie de respuesta y sus curvas de nivel, que son las líneas con valores iguales de respuesta, se podrían representar con las siguientes gráficas tomadas de un ejemplo donde los factores son temperatura y tiempo y la respuesta es el rendimiento:



Si el modelo anterior lo convertimos en un modelo de segundo orden, el modelo ajustado sería:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_{11} x_1^2 + \hat{\beta}_{22} x_2^2 + \hat{\beta}_{12} x_1 x_2, \quad (5)$$

y podría ser representado gráficamente de la siguiente manera:



Es claro que las superficies de respuesta y las gráficas de contornos (curvas de nivel) pueden tener, aparte de las anteriores, representaciones de un mínimo, una cresta elevada, una silla de montar, etcétera.

En la fase inicial del estudio de una superficie de respuesta se trata de identificar la región de respuesta óptima y para ello se utilizan experimentos factoriales completos 2^k o fraccionarios 2^{k-p} , con el fin de estimar las respuestas medias para un modelo lineal o de primer orden, como el de la ecuación (4). Se recomienda generalmente agregar dos o más observaciones en el nivel medio de cada uno de los factores para estimar el error experimental y tener un mecanismo de evaluación para saber si el modelo lineal es apropiado.

Ya identificada la región de respuesta óptima, los diseños factoriales completos o fraccionarios a dos niveles no son suficientes, pues se requieren al menos tres niveles para cada factor y el diseño debe de tener $1 + 2k + k(k - 1)/2$ puntos distintos para estimar los parámetros de un modelo de regresión cuadrática. Sin embargo utilizar factoriales 3^k requiere un número de combinaciones de tratamientos poco práctico, pues si se tienen $k = 2$ factores se necesitarían 9 combinaciones de tratamientos y agregar un factor más, esto es, tener un diseño factorial 3^3 requiere 27 combinaciones de tratamientos.

Existen varias clases de diseños desarrollados para la aproximación a una superficie de segundo orden, que no requieren tantas combinaciones de tratamientos como los diseños factoriales 3^k y donde cada uno de ellos posee ciertas características y propiedades. Entre estos están los diseños centrales compuestos propuestos por Box y Wilson (1951), que no crecen tanto como los diseños factoriales 3^k , y los diseños Box-Behnken.

Para comprender los diseños centrales compuestos, que se utilizarán en el ejemplo que abordaremos, hay que aclarar que los factores generalmente se codifican, pues es más sencillo trabajar con los niveles de factores codificados pues proporcionan un marco de trabajo uniforme para investigar los efectos de los factores. Los niveles codificados de los factores de un diseño factorial 2^k son:

$$x_i = \frac{(A_i - \bar{A})}{D}, \quad (6)$$

donde A_i es el i -ésimo nivel del factor A , \bar{A} es el nivel promedio del factor A y $D = \frac{1}{2}(A_2 - A_1)$.

Los diseños centrales compuestos son diseños de tratamientos factoriales 2^k con $2k$ combinaciones adicionales llamadas *puntos axiales* y n_c *puntos centrales*. Las coordenadas de los puntos axiales de los ejes del factor codificado son $(\pm\alpha, 0, 0, \dots, 0)$, $(0, \pm\alpha, 0, 0, \dots, 0)$, ..., $(0, 0, 0, \dots, \pm\alpha)$ y los puntos centrales son de la forma $(0, 0, 0, \dots, 0)$. Dependiendo de la elección de α en los puntos axiales, el diseño central compuesto puede tener diferentes propiedades como *ortogonalidad*, *rotabilidad* y *uniformidad*. Consideraremos solamente una propiedad deseable en estos diseños consistente en que la varianza de los valores estimados sea constante en puntos equidistantes del centro del diseño. Esta propiedad llamada rotabilidad se logra estableciendo $\alpha = (2^k)^{1/4}$. Así, el valor de α para un diseño con dos factores es $\alpha = 1.414$ y para tres factores $\alpha = 1.682$. La fórmula para α cambiará si se realizan réplicas del diseño o si se utiliza un diseño factorial fraccionario.

Para analizar un diseño de superficie de respuesta en el JMP IN 4 podemos seguir los pasos que a continuación se detallan:

1. En el menú **JMP Starter** seleccionamos **Response Surface Designs**, para indicar que deseamos construir un modelo de superficie de respuesta en JMP IN. Al escoger esta opción aparecerá una pantalla con el nombre **DOE** (Design of Experiments) donde se introduce el número de factores a analizar y sus nombres o etiquetas. Al oprimir **Continue** aparece una variedad de diseños con diferentes características donde se escoge el que se piensa utilizar y oprimiendo **Continue** se establece el valor de los puntos axiales. Con **Make Table** se generará una hoja para la captura de los valores que toma la variable respuesta. Se puede establecer un orden para la aparición de las observaciones en esta hoja o bien pueden presentarse en forma aleatoria.
2. Ya capturados los valores que tomó la variable respuesta, es recomendable salvar el diseño. Para analizar la superficie de respuesta, en el menú principal de JMP IN se escogerá **Analyze**, luego **Fit Model** y aparecerá una pantalla donde se enlistan las columnas capturadas. Se envía a **Y** la columna correspondiente a la variable respuesta, luego se seleccionan los factores o variables independientes y del menú que aparece en **Macros** se escoge **Response Surface**. Aparte de este último menú aparecen en la misma pantalla un menú llamado **Personality** y otro de **Emphasis**, en ellos debe escogerse **Standard Least Squares** y **Effect Screening** respectivamente. Por último se oprime el icono **Run Model** y aparecerán los resultados del análisis.

El procedimiento anterior se ilustrará con un ejercicio propuesto por Robert Kuehl [3].

Ejemplo. Se desea estudiar la relación entre el crecimiento de los pollos y el metabolismo de metionina (un aminoácido azufroso) y caroteno (vitamina A). Se ha encontrado, por experimentos previos, que los niveles óptimos de metionina y caroteno son 0.9% de metionina en la dieta y 50 microgramos de caroteno al día. Se usó un diseño central compuesto rotatorio para el experimento. Se asignaron al azar ocho pollos a cada tratamiento dietético y se registraron sus aumentos de peso después de 38 días. El aumento promedio de peso para los tratamientos es el siguiente:

<i>Factores Originales</i>		<i>Factores Codificados</i>		<i>Aumento de Peso (en gramos)</i>
<i>Metionina</i>	<i>Caroteno</i>	x_1	x_2	
1.183	85.36	+1	+1	445
1.183	14.64	+1	-1	331
0.617	85.36	-1	+1	443
0.617	14.64	-1	-1	336
1.300	50.00	$\sqrt{2}$	0	414
0.500	50.00	$-\sqrt{2}$	0	389
0.900	100.00	0	$\sqrt{2}$	435
0.900	0.00	0	$-\sqrt{2}$	225
0.900	50.00	0	0	442
0.900	50.00	0	0	412
0.900	50.00	0	0	418
0.900	50.00	0	0	440
0.900	50.00	0	0	441

Utilizando la fórmula (6) se pueden obtener los valores codificados de los factores que aparecen en la tabla anterior. Por ejemplo, para Metionina $A_1 = 0.617$, $\bar{A} = 0.9$ y $D = \frac{1}{2}(1.183 - 0.617) = 0.283$ y su factor codificado como nivel bajo es $x_1 = \frac{(0.617 - 0.9)}{0.283} = -1$. Al efectuar el análisis de superficie de respuesta en el JMP IN obtenemos lo siguiente:

Response AumentoPeso

Summary of Fit

RSquare	0.944488
RSquare Adj	0.904837
Root Mean Square Error	19.98143
Mean of Response	397.7692
Observations (or Sum Wgts)	13

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Ratio
Model	5	47551.504	9510.30	23.8200
Error	7	2794.804	399.26	Prob > F
C. Total	12	50346.308		0.0003

Lack Of Fit

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Ratio
Lack Of Fit	3	1963.6036	654.535	3.1498
Pure Error	4	831.2000	207.800	Prob > F
Total Error	7	2794.8036		0.1484
				Max RSq
				0.9835

De los resultados anteriores se puede observar que el modelo completo de segundo orden es significativo, esto es se rechaza la hipótesis

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \beta_{11} = \beta_{22} = \beta_{12} = 0, \quad (7)$$

pues $F_0 = 23.82 > F_{0.01,5,7}$, donde $F_0 = F_{Ratio}$. También se puede observar que no existe falta de ajuste al modelo cuadrático pues $F_0 = 3.1498 < F_{0.01,3,4}$, esto es, no se rechaza la hipótesis nula de que no hay falta de ajuste.

Parameter Estimates

Term	Estimate	Std Error	t Ratio	Prob> t
Intercept	430.6	8.935968	48.19	<.0001
Metionina&RS	4.0444174	7.064503	0.57	0.5849
Caroteno&RS	64.748106	7.064503	9.17	<.0001
Metionina*Caroteno	1.75	9.990716	0.18	0.8659
Metionina*Metionina	-8.8	7.575836	-1.16	0.2835
Caroteno*Caroteno	-44.55	7.575836	-5.88	0.0006

De la tabla anterior podemos ver que la ecuación de la superficie de respuesta de segundo orden, estimada para los datos de aumento de peso es:

$$\hat{y} = 430.6 + 4.04x_1 + 64.75x_2 - 8.80x_1^2 - 44.55x_2^2 + 1.75x_1x_2. \quad (8)$$

En la tabla siguiente podemos observar que el caroteno es muy significativo ($p < 0.0001$) y la metionina no lo es ($p = 0.5849$). Otro efecto significativo es Caroteno*Caroteno ($p = 0.0006$).

Effect Tests

Source	Nparm	DF	Sum of Squares	F Ratio	Prob > F
Metionina&RS	1	1	130.858	0.3278	0.5849
Caroteno&RS	1	1	33538.538	84.0022	<.0001
Metionina*Caroteno	1	1	12.250	0.0307	0.8659
Metionina*Metionina	1	1	538.713	1.3493	0.2835
Caroteno*Caroteno	1	1	13806.626	34.5807	0.0006

El siguiente resultado nos muestra que JMP IN encontró un máximo en la superficie de respuesta y los valores codificados de Metionina y Caroteno donde se alcanza este máximo son 0.3026436 y 0.7326345, respectivamente.

Response Surface Solution

Variable	Critical Value
Metionina	0.3026436
Caroteno	0.7326345

Solution is a Maximum
 Predicted Value at Solution
 454.93036

Observando los valores originales de Metionina que corresponden a los valores codificados -1, 0, 1, como se ilustra en la siguiente figura

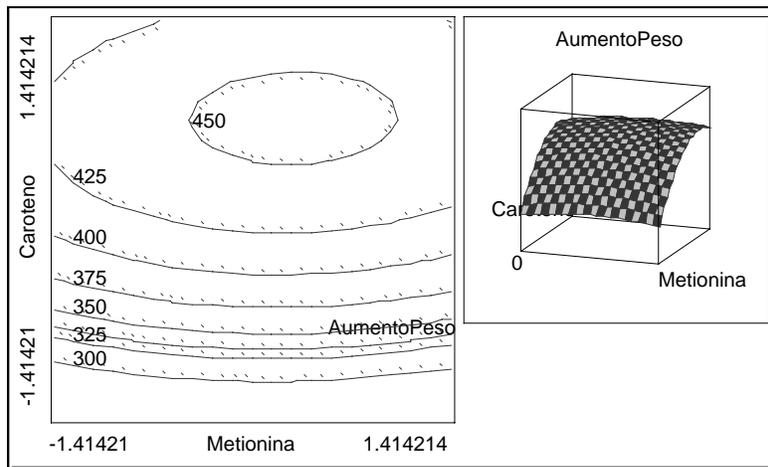
-1	0	1
0.617	0.9	1.183

y utilizando la ecuación (6), dejando A_i como incógnita, entonces se tiene que el valor codificado 0.3026436 corresponde a un valor de Metionina de 0.986. De igual manera podemos obtener que el valor para Caroteno sería 75.91. La respuesta en ganancia de peso que se predice para estos valores es de 454.93036 gramos.

Se puede llegar a la solución anterior explorando con el cursor la gráfica de contornos que JMP IN ofrece. En esta gráfica se puede observar que los valores de la respuesta van aumentando conforme los círculos se van cerrando en el centro, lo que nos indica que la solución es un máximo.

Contour Profiler

Horiz	Vert	Factor	Current X		
<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	Metionina	0.3026436		
<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	Caroteno	0.7326435		
		Response	Contour	Current Y	Lo Limit
		AumentoPeso	335	454.93036	



Aunque no se ilustra en este ejemplo, hay ocasiones en que se desea que la respuesta se encuentre en cierto intervalo de valores; para ello se pueden establecer estos límites en **Lo Limit**, **Hi Limit** de la ventana **Contour Profiler**. Asimismo se pueden manejar más factores o más de una respuesta. En este último caso, la gráfica de contornos usará diferentes colores para las curvas de nivel de las diferentes respuestas y se puede llegar a encontrar gráficamente (este es uno de varios métodos de superficies de multirespuesta) la región donde se optimizan todas las respuestas.

Como se pudo observar, se pueden resolver problemas de superficie de respuesta sin necesidad de tener software muy sofisticado. Habrá sin embargo ocasiones en que si será necesario disponer de software más adecuado o diseñado especialmente para este análisis, esto dependerá del número de factores, el número de respuestas y el diseño que se planea utilizar.

Referencias Bibliográficas

- [1] Box, G. E. P., Wilson, K. G. (1951), On the experimental attainment of optimum conditions, *Journal of the Royal Statistical Society, B* 13, 1-45
- [2] Cornell, John A. (1984), *How to apply Response Surface Methodology*, American Society for Quality Control, Milwaukee, WI.
- [3] Kuehl, Robert O. (2001) *Diseño de Experimentos*, 2a. Edición, Thomson Learning.
- [4] Melvin T. A. *Response Surface Optimization using JMP Software*,
< <http://www2.sas.com/proceedings/sugi22/STATS/PAPER265.PDF> >
- [5] Montgomery, D. C. (2002), *Diseño y Análisis de Experimentos*, Editorial Limusa, Segunda Edición.

JMP IN 4, Marca Registrada de SAS Institute Inc., Cary, NC 27513.