

Uso de la metodología de superficies de respuesta en la optimización de procesos

Use of the response surface methodology to optimize processes

Gustavo Adolfo Ovalles Rodríguez¹

Resumen

La Metodología de Superficies de Respuesta (MSR) es una colección de técnicas matemáticas y estadísticas que se utilizan en el estudio de la relación entre una o más respuestas que dependen de diversos factores o variables independientes. El objetivo final de la MSR consiste en optimizar la(s) respuesta(s) de interés determinando las mejores condiciones de operación del sistema. Se analiza un diseño de Superficies de Respuesta utilizando el software estadístico STATGRAPHICS[7].

Palabras claves: metodología de superficies de respuesta, modelo, optimización.

Abstract

Response Surface Methodology (RSM) is an amount of mathematical and statistical techniques used to study the relationship among two or more responses that depend on several factors or independent variables. The final goal of RSM is to optimize responses determining the best conditions in the operation of the system. A design of response surface is analyzed using the statistical software STATGRAPHICS[7].

Keywords: response surface methodology, model, optimization

Introducción

La Metodología de Superficies de Respuesta es una colección de técnicas que se utilizan para modelar y analizar problemas en los que una variable de interés llamada respuesta depende de otras variables independientes o factores. El objetivo fundamental de la MSR es optimizar la respuesta estableciendo la región más adecuada para operar el sistema[5].

En general una superficie de respuesta está modelada por la expresión:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k) + e$$

donde las x son las variables independientes y e es el ruido o error observado en la respuesta y .

Si la respuesta está modelada por una función lineal de las variables independientes, se utiliza el modelo de primer orden:

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

¹UNIVERSIDAD FRANCISCO DE PAULA SANTANDER. Departamento de Matemáticas y Estadística. E-mail: gustavoovalles@hotmail.com

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

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

Box and Wilson [2] utilizaron la experimentación secuencial para determinar condiciones operativas óptimas en contextos industriales. Es un enfoque que utiliza inicialmente diseños factoriales 2^k y que progresivamente va utilizando diseños cada vez más complejos con el fin de aproximarse a la región de interés o región del óptimo [4].

Materiales y métodos

El procedimiento se ilustra con un ejemplo tomado del libro de Montgomery [5]. Los análisis estadísticos se realizan utilizando el software STATGRAPHICS[7]:

Un ingeniero químico está interesado en determinar las condiciones de operación que maximizan el rendimiento de un proceso. Dos variables controlables influyen en el rendimiento del proceso: el tiempo de reacción y la temperatura de reacción. El ingeniero opera actualmente el proceso con un tiempo de reacción de 35 minutos y una temperatura de 155°F, que dan como resultado rendimientos de cerca del 40%.

Resultados y discusión

Inicialmente se ajusta un modelo de primer orden

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

Del conocimiento del proceso se decide explorar en la región (30,40) minutos de tiempo de reacción y (150,160) °F de temperatura. Las variables se codifican en el intervalo (-1,1).

Sea t el tiempo y T la temperatura, entonces las variables codificadas son

$$A = \frac{t - 35}{5} \quad y \quad B = \frac{T - 155}{5}$$

Se utiliza un diseño factorial 2^2 aumentado con cinco puntos centrales:

Cuadro 1. Diseño factorial del modelo inicial de primer orden

Tiempo	Temperatura	A	B	Rendimiento
30	150	-1	-1	39.3
40	150	+1	-1	40.9
30	160	-1	+1	40.0
40	160	+1	+1	41.5
35	155	0	0	40.3
35	155	0	0	40.5
35	155	0	0	40.7
35	155	0	0	40.2
35	155	0	0	40.6

Fuente: Montgomery. Diseño y análisis de experimentos (Limusa Wiley)

Las réplicas del centro se usan para estimar el error experimental. Generalmente se utilizan entre 3 y 5 réplicas centrales. Obsérvese que el diseño está centrado en las condiciones actuales del proceso.

Análisis estadístico de los datos (software estadístico STATGRAPHICS) [7]:

Tabla 1. Análisis de Varianza del modelo inicial de primer orden

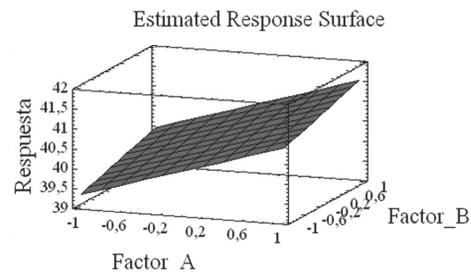
Analysis of Variance for Respuesta					
Source	Sum of Squares	Df	Mean Square	F-Ratio	P-Value
A:Factor_A	2,4025	1	2,4025	68,75	0,0004
B:Factor_B	0,4225	1	0,4225	12,09	0,0177
AB	0,0025	1	0,0025	0,07	0,7998
Total error	0,174722	5	0,0349444		
Total (corr.)	3,00222	8			

El análisis de varianza indica que los dos efectos principales son significativos. Obsérvese que las 5 réplicas del centro corresponden a los grados de libertad del error experimental. Excluyendo el efecto de la interacción AB que no es significativo, se ajusta el modelo de regresión lineal a los datos:

This pane displays the regression equation which has been fitted to the data. The equation of the fitted model is
 Respuesta = 40,4444 + 0,775*Factor_A + 0,325*Factor_B

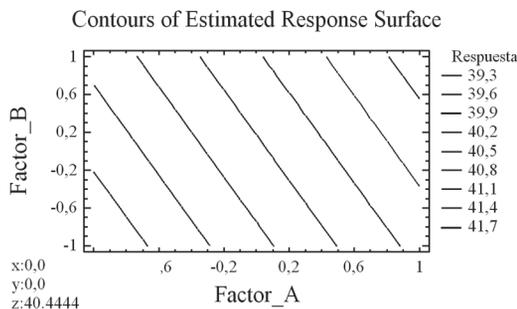
que es el modelo de primer orden buscado y cuya gráfica representa un plano en el espacio tridimensional:

Figura 1. Superficie de respuesta del modelo inicial



A continuación se obtiene el mapa de contorno de la superficie (curvas de nivel), que está conformado por líneas rectas de rendimiento constante:

Figura 2. Curvas de nivel de rendimiento constante



Con el fin de encontrar las condiciones óptimas se sigue la trayectoria del ascenso más pronunciado, que corresponde a la recta perpendicular a las curvas de nivel, es decir, el desplazamiento debe hacerse en la dirección indicada por el vector gradiente. Los pasos sobre esta trayectoria, por lo tanto, deben ser proporcionales a los coeficientes de regresión. Se hace un movimiento de 0.775 unidades en la dirección de A por cada 0.325 unidades en la dirección de B.

Por tanto, la pendiente de la trayectoria es $\Delta B / \Delta A = 0.325 / 0.775$. Asumiendo inicialmente un paso $\Delta A = 1$, se obtiene $\Delta B = 0.42$. Con estos pasos, se realizan experimentos sobre la trayectoria del ascenso más pronunciado hasta que deja de observarse un incremento adicional en la respuesta:

Cuadro 2. Experimentos secuenciales para encontrar la respuesta óptima

PASO	A	B	Tiempo	Temperatura	Respuesta
	0	0	35	155	
1	1.00	0.42	40	157	41.0
2	2.00	0.84	45	159	42.9
3	3.00	1.26	50	161	47.1
4	4.00	1.68	55	163	49.7
5	5.00	2.10	60	165	53.8
6	6.00	2.52	65	167	59.9
7	7.00	2.94	70	169	65.0
8	8.00	3.36	75	171	70.4
9	9.00	3.78	80	173	77.6
10	10.00	4.20	85	175	80.3
11	11.00	4.62	90	179	76.2
12	12.00	5.04	95	181	75.1

Fuente: Montgomery. Diseño y análisis de experimentos (Limusa Wiley)

Se observa que el rendimiento del proceso se incrementa hasta el décimo paso. Por lo tanto, se ajusta otro modelo de primer orden tomando como centro el punto (85, 175). Se decide explorar en la región (80,90) minutos de tiempo de reacción y (170,180) °F de temperatura. Las variables se codifican nuevamente en el intervalo (-1,1).

Sea t el tiempo y T la temperatura, entonces las variables codificadas son ahora

$$A = \frac{t - 85}{5} \quad y \quad B = \frac{T - 175}{5}$$

Se utiliza de nuevo un diseño factorial 2^2 aumentado con cinco puntos centrales:

Cuadro 3. Diseño factorial del segundo modelo de primer orden

Tiempo	Temperatura	A	B	Rendimiento
80	170	-1	-1	76.5
90	170	+1	-1	78.0
80	180	-1	+1	77.0
90	180	+1	+1	79.5
85	175	0	0	79.9
85	175	0	0	80.3
85	175	0	0	80.0
85	175	0	0	79.7
85	175	0	0	79.8

Fuente: Montgomery. Diseño y análisis de experimentos (Limusa Wiley)

Las réplicas del centro se usan para estimar el error experimental. Obsérvese que el diseño está centrado en las condiciones $t = 85, T = 175$.

El Análisis de Varianza indica que ninguno de los efectos es significativo:

Tabla 2. Análisis de Varianza del segundo modelo de primer orden

Analysis of Variance for Respuesta					
Source	Sum of Squares	Df	Mean Square	F-Ratio	P-Value
A:Factor_A	4,0	1	4,0	1,84	0,2330
B:Factor_B	1,0	1	1,0	0,46	0,5277
AB	0,25	1	0,25	0,11	0,7483
Total error	10,87	5	2,174		
Total (corr.)	16,12	8			

Es decir, el modelo de primer orden no es una aproximación adecuada. Dada la cercanía del óptimo, se requiere un modelo que incorpore la curvatura del sistema para encontrar esta respuesta. Debe utilizarse el modelo de segundo orden

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i^2 + \sum \sum \beta_j x_i x_j + \varepsilon$$

Para dos variables experimentales, este modelo se reduce a

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_1^2 + \beta_5 x_2^2 + e$$

Donde x_1 es el factor A (tiempo) y x_2 es el factor B (temperatura).

Los diseños de superficie de respuesta más utilizados para ajustar modelos de segundo orden se conocen como DCC (diseño central compuesto), propuestos por Box and Wilson[2]. Los DCC son diseños factoriales 2^k con $2k$ combinaciones adicionales llamadas puntos axiales. Las coordenadas de los puntos axiales de los ejes del factor son $(\pm\alpha, 0, 0, \dots, 0)$ $(0, \pm\alpha, 0, \dots, 0)$ $(0, 0, \dots, \pm\alpha)$

Para un diseño con dos factores el valor de α es 1.414 [3].

Debido a que no se pueden estimar los seis parámetros del modelo (las β) porque sólo existen cinco corridas independientes, se hace necesario aumentar el diseño con cuatro corridas axiales. El experimento completo se muestra en la siguiente tabla:

Cuadro 4. Diseño central compuesto para ajustar el modelo de segundo orden

Tiempo	Temperatura	A	B	Rendimiento
80	170	-1	-1	76.5
90	170	+1	-1	78.0
80	180	-1	+1	77.0
90	180	+1	+1	79.5
85	175	0	0	79.9
85	175	0	0	80.3
85	175	0	0	80.0
85	175	0	0	79.7
85	175	0	0	79.8
92.07	175	1.414	0	78.4
77.93	175	-1.414	0	75.6
85	182.07	0	1.414	78.5
85	167.93	0	-1.414	77.0

Fuente: Montgomery. Diseño y análisis de experimentos (Limusa Wiley)

El Análisis de Varianza indica que los efectos lineales y cuadráticos de los factores son significativos:

Tabla 3. Análisis de Varianza del modelo de segundo orden

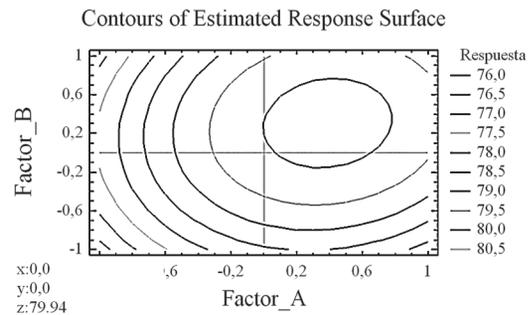
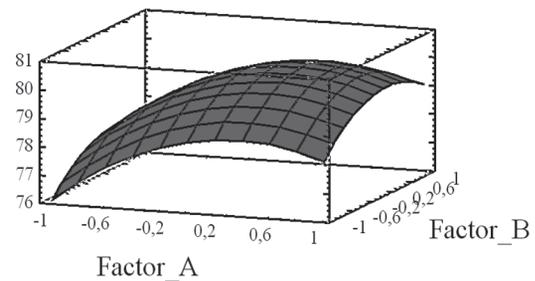
Analysis of Variance for Respuesta					
Source	Sum of Squares	Df	Mean Square	F-Ratio	P-Value
A:Factor_A	7,9198	1	7,9198	111,69	0,0000
B:Factor_B	2,12315	1	2,12315	29,94	0,0009
AA	13,1742	1	13,1742	185,79	0,0000
AB	0,25	1	0,25	3,53	0,1025
BB	6,9721	1	6,9721	98,32	0,0000
Total error	0,496373	7	0,0709105		
Total (corr.)	28,7431	12			

El modelo de regresión que se ajusta a los datos es el siguiente:

$$\text{Respuesta} = 79,94 + 0,99505*\text{Factor_A} + 0,515203*\text{Factor_B} - 1,37645*\text{Factor_A}^2 - 1,00134*\text{Factor_B}^2$$

que es el modelo de segundo orden buscado y cuya gráfica es una superficie en el espacio tridimensional:

Figura 3. Superficie de respuesta y curvas de nivel para el modelo de segundo orden



El mapa de contorno indica que bajo las condiciones actuales de operación (85 minutos y 175°F) el rendimiento del proceso es de 79.94. El programa STATGRAPHICS[7] entrega las condiciones óptimas de operación:

Tabla 4. Condiciones óptimas de operación

Factor	Low	High	Optimum	Optimum value = 80,2124
Factor_A	-1,414	1,414	0,389537	
Factor_B	-1,414	1,414	0,305092	

Este punto donde se encuentra el máximo rendimiento del proceso, es un punto estacionario, con $A = 0.389$ y $B = 0.305$. En términos de las variables naturales, el punto óptimo se encuentra mediante:

$$0.389 = \frac{t-85}{5} \quad \text{y} \quad 0.305 = \frac{T-175}{5}$$

Donde finalmente se concluye que las condiciones óptimas del proceso son $t = 87$ y $T = 176.5$. El valor del rendimiento óptimo predicho es de 80.21.

Para verificar la validez del modelo es necesario realizar el análisis de los residuales. Debe recordarse que uno de los supuestos del modelo es que los errores experimentales son variables aleatorias independientes que siguen una distribución normal con media cero y varianza constante. Las gráficas de diagnóstico de los residuales y pruebas estadísticas no paramétricas como la de Kolmogorov-Smirnov indicarán si los residuales satisfacen los supuestos del modelo.

Conclusiones

1. La aproximación a la región del óptimo es un proceso secuencial que inicia con el ajuste de un modelo lineal y que posteriormente requiere el ajuste de un modelo cuadrático.
2. El procedimiento de aproximación sigue la trayectoria del ascenso más pronunciado, el cual está indicado por la dirección del vector gradiente.
3. El modelo de segundo orden ajustado es un diseño central compuesto (DCC) propuesto por Box y Wilson.
4. La verificación de los supuestos del modelo implica el análisis de los residuales como variables aleatorias normales e independientes con media cero y varianza constante.

Bibliografía

ANDERSON y WHITCOMB. RSM Simplified: optimizing process using Response Surface

Methods for Design of Experiments. Productivity, Inc. New York

BOX, G.E. y WILSON K.G. "On the experimental attainment of optimum conditions". Journal of the Royal Statistical Society. B13, 1-45. 1951

FIGUEROA, G. Optimización de una Superficie de Respuesta utilizando JMP IN. Departamento de Matemáticas. Universidad de Sonora. Mosaicos matemáticos No. 11. 2003

KUEHL, R. Diseño de Experimentos. Thomson Learning. Segunda edición. 2001

MONTGOMERY, D. Diseño y Análisis de Experimentos. Editorial Limusa. Segunda edición. 2005

MONTGOMERY, D. y MYERS, R. Response Surface Methodology: Process and Product Optimization using Designed Experiments. Jhon Wiley and Sons. New York.

<http://www.statgraphics.com/downloads.htm>. Sitio de descarga gratis de copia de evaluación durante 30 días.