

Capítulo 7:

Variabilidad cuando Y depende de “ r ”

factores ruido. Generalización.

7 Variabilidad cuando Y depende de “r” factores ruido. Generalización

En este capítulo realizamos una generalización del problema tratado en los 3 capítulos anteriores. Se estudia la estructura de las superficies $\sigma_z^2(Y)$ y $\sigma_z(Y)$ para una superficie Y la cual puede expresarse a partir de modelos lineales, donde la parte asociada a la variabilidad contienen “r” factores ruido y “k” factores de control.

Como en la mayoría de las aplicaciones de los estudios de robustez se realizan habitualmente a partir de diseños factoriales a 2 niveles, estudiaremos asimismo las aproximaciones que se tienen con estos diseños a $\sigma_z^2(Y)$ o $\sigma_z(Y)$ y comentaremos los aspectos más interesantes de estas aproximaciones. En particular interesa conocer si estos diseños son adecuados para el estudio de estas superficies.

Aunque en el capítulo 5 se ha presentado algunos resultados del comportamiento de la métrica “ $\log(\sigma)$ ” para 2 factores ruido, como no queda suficientemente clara la necesidad de utilizar la transformación “logaritmo” por sistema y por otra parte resulta complicado obtener una relación entre el modelo para $\log(\sigma)$ y el modelo para Y , no vamos a extraer conclusiones particulares para esta métrica. (Entendemos que su uso puede justificarse por otros criterios como la distribución teórica de la componente del error en los modelos que se ajusten, pero incluso en estos casos, si el número de condiciones experimentales es bajo es difícil encontrar mejoras al utilizarla.)

7.1 Expresión para la Varianza a partir del modelo para la respuesta Y

Sea Y la característica de calidad seleccionada cuyo valor esperado “ μ ” depende del nivel en que se sitúen un número de factores de control que incluyen a los “k” factores seleccionados. Asumimos que la relación con los “k” factores de control (X_i) y “r” factores ruido (Z_i) puede ser aproximada localmente, por un polinomio de primer orden con a lo sumo algunos términos cruzados de segundo orden, tal como se presenta a continuación,

$$Y = \mu + \sum_{l=1}^r \theta_l Z_l + \sum_{i=1}^k \sum_{l=1}^r \delta_{il} X_i Z_l + \sum_{\substack{l=1, m=1 \\ l \neq m}}^r \theta_{lm} Z_l Z_m + \varepsilon \quad (7.1)$$

$$\varepsilon - iid -> N(0, \sigma)$$

Si se fijan las condiciones de los factores de control, la respuesta Y varía dependiendo de las variaciones de los factores ruido Z_l y de "ε". Por esta razón, podemos descomponer $\sigma^2(Y)$ teniendo en cuenta estas fuentes de variación en dos partes independientes, $\sigma_Z^2(Y)$ y $\sigma_\varepsilon^2(Y)$, donde la primera depende de los factores ruido.

$$\sigma^2(Y) = \sum_{l=1}^r \sigma(Z_l) \left(\theta_l + \sum_{i=1}^k \delta_{il} X_i \right)^2 + \sum_{\substack{l=1, m=1 \\ l \neq m}}^r \theta_{lm}^2 \sigma^2(Z_l Z_m) + \sigma^2(\varepsilon)$$

$$\sigma^2(Y) = \sigma_Z^2(Y) + \sigma_\varepsilon^2(Y)$$

Asumiendo que todos los factores están codificados entre -1 y 1 y que los factores ruido son independientes y con igual variabilidad en este rango de trabajo, $\sigma^2(Z_i) = k$, se llega a la expresión,

$$\sigma_Z^2(Y) = k \sum_{l=1}^r \left(\theta_l + \sum_{i=1}^k \delta_{il} X_i \right)^2 + k^2 \sum_{\substack{l=1, m=1 \\ l \neq m}}^r \theta_{lm}^2$$

donde, sin pérdida de generalidad en un problema de minimización de $\sigma_Z^2(Y)$ en función de los factores de control X_i , se puede hacer $k = 1$ y $\theta_{lm} = 0$ para finalmente obtener:

$$\sigma_Z^2(Y) = \sum_{l=1}^r \left(\theta_l + \sum_{i=1}^k \delta_{il} X_i \right)^2 \quad (7.2)$$

Desarrollando (7.2) podemos reescribir $\sigma_Z^2(Y)$ como un polinomio de segundo orden donde los coeficientes son combinación lineal de los coeficientes del modelo en Y.

$$\sigma_Z^2(Y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{\substack{i, j=1 \\ i \neq j}}^k \beta_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 \quad (7.3)$$

$$\text{con } \beta_0 = \sum_{l=1}^r \theta_l^2 \quad \beta_i = 2 \sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{il} \quad \beta_{ij} = 2 \sum_{l=1}^r \delta_{il} \delta_{jl} \quad \beta_{ii} = \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2$$

Una manera de estudiar las características principales de una superficie cuadrática es a partir de su análisis canónico (Box y Draper, 1987). Sin llegar a hacer un análisis canónico, podemos realizar una primera interpretación de los coeficientes de la expresión de segundo orden para $\sigma_Z^2(Y)$ relacionándolos con los coeficientes originales de Y :

- β_0 : representa al valor esperado de $\sigma_Z^2(Y)$ en el centro de la experimentación ($X_i = 0$). Este valor sólo depende de los efectos principales de los factores ruido en el modelo para Y , θ_i ;
 - Si todos los efectos θ_i se anulan a la vez, la zona de mínima varianza pasa por el centro de la región experimental;
- β_i : es la pendiente de $\sigma_Z^2(Y)$ en el centro del diseño. Este valor depende de la suma de las interacciones del factor X_i con cada factor ruido Z_l , δ_{il} , ponderando cada sumando por el efecto principal de cada factor ruido, θ_i ;
 - Si θ_i se anulan a la vez, la superficie con zona de mínima varianza pasando por el centro se representa por un polinomio sin términos de primer orden, $\beta_i = 0$ para todo “ i ”;
- β_{ij} : está asociado a los ejes de simetría de la superficie $\sigma_Z^2(Y)$: si X_i y X_j son paralelos a dos de los ejes de simetría de la superficie entonces $\beta_{ij} = 0$. El valor de β_{ij} se obtiene a partir de la suma de los dobles productos entre interacciones de los factores X_i y X_j con el mismo factor ruido en el modelo para Y , no dependiendo de los efectos principales de los factores ruido, θ_i ;
 - Si en el modelo para Y un mismo factor ruido Z_l interacciona con varios factores de control, es probable que surjan interacciones entre estos factores al analizar directamente la variabilidad. Cuanto más coincidan dos factores X_i y X_j interaccionando con el mismo factor ruido, más probable es que aparezca su interacción β_{ij} en el análisis de la variabilidad;
 - Si dos factores de control X_i y X_j no coinciden nunca con el mismo factor ruido en el modelo para Y , tampoco aparece su interacción en el modelo para $\sigma_Z^2(Y)$, es decir $\beta_{ij} = 0$;
- β_{ii} : está asociado a la forma de la superficie. En este caso como β_{ii} siempre es positivo, $\sigma_Z^2(Y)$ tiene una zona estacionaria de mínima varianza. El valor de β_{ii} depende de la suma de los cuadrados de todas las interacciones entre el factor X_i y todos los factores ruido;

- Si en el modelo para Y un mismo factor de control X_i interacciona con varios factores ruido, al analizar directamente la variabilidad, el coeficiente β_{ii} es significativo.

A partir de esta expresión se puede observar que si algún factor ruido interacciona con algún factor de control, ya que el término cuadrático puro asociado a este factor de control es no nulo. Como los términos β_{ii} son positivos, la superficie posee una zona de mínima varianza.

La superficie $\sigma_Z^2(Y)$ es de segundo orden siempre y, en general, cuantos más factores en común (de control o ruido) existan entre los efectos asociados a la variabilidad en el modelo de la respuesta Y , más compleja se vuelve $\sigma_Z^2(Y)$, ya que los términos de segundo orden, interacciones y términos cuadráticos puros, se hacen más significativos. (Por supuesto que $\sigma_Z^2(Y)$ podrá ser aproximada localmente por polinomios más sencillos si los términos de segundo orden se vuelven negligibles).

La expresión para la superficie $\sigma_Z(Y) = \sqrt{\sigma_Z^2(Y)}$ no puede obtenerse, en general, de forma directa del modelo para la respuesta Y ni del modelo para $\sigma_Z^2(Y)$. Al ser la función " $\sqrt{\quad}$ " monótona y la superficie $\sigma_Z^2(Y)$ cuadrática, $\sigma_Z(Y)$ podrá ser aproximada por polinomios de primer orden en zonas alejadas de la curvatura pero en general se necesitarán polinomios más complejos.

Como en la mayoría de situaciones prácticas es habitual trabajar con diseños factoriales a 2 niveles que sólo permiten estimar parte de los coeficientes de segundo orden (los términos de las interacciones), nos planteamos bajo qué condiciones estos diseños son apropiados para estudiar el comportamiento de la variabilidad debida a los factores ruido. En concreto queremos evaluar las aproximaciones que se logran con estos diseños en la región experimental al valor de la variabilidad así como a la geometría de la superficie.

Las preguntas que nos hacemos son las mismas que en capítulos anteriores:

- ¿Qué circunstancias se han de dar para que al aproximar las superficies $\sigma_Z^2(Y)$ o $\sigma_Z(Y)$ por polinomios se necesiten que estos tengan por lo menos términos de segundo orden?;
 - ¿Es posible aproximar localmente la superficie $\sigma_Z(Y)$ por un plano? ¿Qué condiciones se han de dar?;
 - ¿En qué situaciones en los modelos que aproximan $\sigma_Z^2(Y)$ o $\sigma_Z(Y)$ desaparecen los términos de primer orden, β_1 y β_2 , quedando únicamente los de segundo: β_{12} , β_{11} y β_{22} ?;
 - ¿De qué depende el grado de significación de β_{12} ?
-

- ¿Qué ocurre cuando $\sigma_Z^2(Y)$ o $\sigma_Z(Y)$ son aproximadas por modelos obtenidos a partir de diseños de primer orden?

A igual que en capítulos anteriores primero encontraremos las condiciones bajo las cuales $\sigma_Z(Y)$ puede ser expresada, localmente, de forma exacta como un polinomio de primer orden. Lo haremos en 2 pasos:

- Primero expresaremos $\sigma_Z^2(Y)$ como una potencia al cuadrado de una expresión candidata a representar a $\sigma_Z(Y)$;
- A continuación determinaremos las condiciones para que la expresión anterior sea positiva, como lo ha de ser $\sigma_Z(Y)$.

En el caso de encontrar solución a este problema, $\sigma_Z(Y)$ podrá ser expresada de forma exacta como un polinomio de primer orden.

En los demás casos en que $\sigma_Z(Y)$ no admite una representación exacta por un polinomio la aproximaremos por polinomios de segundo orden. En esta situación un caso particular es el que se obtiene al aproximar $\sigma_Z(Y)$ sólo con términos de segundo orden. También habrá situaciones en las que al considerar negligibles los términos de segundo orden $\sigma_Z(Y)$ se aproxime por sólo términos de primer orden

A partir de este estudio se obtendrán las consecuencias generales que se derivan al plano experimental.

7.2 Expresión de la superficie *Desv. Típica(Y)* como un plano

Siguiendo el mismo razonamiento que en capítulos anteriores, primero encontraremos las condiciones para que $\sigma_Z^2(Y)$ se pueda expresar como una potencia al cuadrado y a continuación obligaremos a que las raíces sean positivas.

$\sigma_Z^2(Y)$ como potencia al cuadrado

$$\begin{aligned}
 \text{a) Si } \beta_0 \neq 0 \Rightarrow \quad & \beta_{ii} = \frac{\beta_i^2}{4\beta_0} \quad ; \quad \beta_{ij} = \frac{\beta_i\beta_j}{2\beta_0} \quad \text{para } i \neq j = 1, 2, \dots, k \\
 \text{b) Si } \beta_0 = 0 \Rightarrow \quad & \beta_{ij} = 2\sqrt{\beta_{ii}}\sqrt{\beta_{jj}} \quad \text{para } i \neq j = 1, 2, \dots, k
 \end{aligned}
 \tag{7.4}$$

Estas restricciones si se expresan en términos de los coeficientes del modelo en Y dan lugar a las restricciones en (7.5) y (7.6) respectivamente,

$$a) \exists \theta_l \neq 0 \text{ para algún } l \quad (\beta_0 \neq 0)$$

$$i) \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 = \frac{\left[\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{il} \right]^2}{\sum_{l=1}^r \theta_l^2} \quad \forall i = 1, 2, \dots, k \quad (7.5)$$

$$ii) \sum_{l=1}^r \delta_{il} \delta_{jl} = \frac{\left(\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{il} \right) \left(\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{jl} \right)}{\sum_{l=1}^r \theta_l^2} \quad \forall i \neq j; i, j = 1, 2, \dots, k$$

$$b) \theta_l = 0 \quad \forall l, l = 1, 2, \dots, r \quad (\beta_0 = 0)$$

$$\left(\sum_{l=1}^r \delta_{il} \delta_{jl} \right)^2 = \left(\sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \right) \left(\sum_{l=1}^r \delta_{jl}^2 \right) \quad \forall i \neq j; i, j = 1, 2, \dots, k$$

(7.6)

Caso a) $\beta_0 \neq 0$

Multiplicando las dos expresiones en i) para los índices "i" y "j" en los factores de control, y partir de la expresión en ii) se obtiene la primera condición para los coeficientes del modelo en Y

$$\left(\sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \right) \left(\sum_{l=1}^r \delta_{jl}^2 \right) = \frac{\left[\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{il} \right]^2}{\sum_{l=1}^r \theta_l^2} \frac{\left[\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{jl} \right]^2}{\sum_{l=1}^r \theta_l^2} = (ii) = \left(\sum_{l=1}^r \delta_{il} \delta_{jl} \right)^2 = \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \delta_{jl}^2 + 2 \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il} \delta_{jl} \delta_{im} \delta_{jm}$$

$$\sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il}^2 \delta_{jm}^2 + \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \delta_{jl}^2 = \dots = (ii) = \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \delta_{jl}^2 + 2 \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il} \delta_{jl} \delta_{im} \delta_{jm}$$

$$\sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il}^2 \delta_{jm}^2 - 2 \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il} \delta_{jl} \delta_{im} \delta_{jm} = 0 \quad \Rightarrow \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl})^2 = 0$$

$$\Rightarrow \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl} = 0 \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, k; l, m = 1, 2, \dots, r \text{ con } l \neq m$$

Equivalentemente a

$$\Rightarrow \frac{\delta_{il}}{\delta_{im}} = \frac{\delta_{jl}}{\delta_{jm}} \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, k; \quad l, m = 1, 2, \dots, r \text{ con } l \neq m \quad (7.7)$$

Ahora, a partir de la expresión i) se logra una condición más que implica a los efectos de los factores ruido θ_l

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 &= \frac{\left[\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{il} \right]^2}{\sum_{l=1}^r \theta_l^2} \Rightarrow \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \sum_{l=1}^r \theta_l^2 = \left[\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{il} \right]^2 \\ \Rightarrow \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il}^2 \theta_m^2 + \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \theta_l^2 &= \sum_{l=1}^r \theta_l^2 \delta_{il}^2 + 2 \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \theta_l \delta_{il} \theta_m \delta_{im} \Rightarrow \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il}^2 \theta_m^2 - 2 \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \theta_l \delta_{il} \theta_m \delta_{im} = 0 \\ \Rightarrow \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r (\theta_m \delta_{il} - \theta_l \delta_{im})^2 &= 0 \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\theta_m \delta_{il} - \theta_l \delta_{im} = 0 \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, k; \quad l, m = 1, 2, \dots, r \text{ con } l \neq m$$

O equivalentemente,

$$\frac{\delta_{il}}{\delta_{im}} = \frac{\theta_l}{\theta_m} \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, k; \quad l, m = 1, 2, \dots, r \text{ con } l \neq m \quad (7.8)$$

Caso b) $\beta_0 = 0$

$$\begin{aligned} \left(\sum_{l=1}^r \delta_{il} \delta_{jl} \right)^2 &= \left(\sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \right) \left(\sum_{l=1}^r \delta_{jl}^2 \right) \Rightarrow \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \delta_{jl}^2 + 2 \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il} \delta_{jl} \delta_{im} \delta_{jm} = \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \delta_{jl}^2 + \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il}^2 \delta_{jm}^2 \\ \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il}^2 \delta_{jm}^2 - 2 \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r \delta_{il} \delta_{jl} \delta_{im} \delta_{jm} &= 0 \quad \Rightarrow \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^r (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl})^2 = 0 \\ \Rightarrow \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl} &= 0 \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, k; \quad l, m = 1, 2, \dots, r \text{ con } l \neq m \end{aligned}$$

O equivalentemente,

$$\Rightarrow \frac{\delta_{il}}{\delta_{im}} = \frac{\delta_{jl}}{\delta_{jm}} \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, k; \quad l, m = 1, 2, \dots, r \text{ con } l \neq m \quad (7.9)$$

Por lo tanto si se cumplen las anteriores condiciones la expresión de $\sigma_Z^2(Y)$ queda como una potencia al cuadrado de la forma,

Si $\beta_0 \neq 0$

$$\begin{aligned} \sigma_Z^2(Y) &= \left(\sqrt{\beta_0} + \sum_{i=1}^k \frac{\beta_i}{2\sqrt{\beta_0}} X_i \right)^2 = \left(\sqrt{\sum_{l=1}^r \theta_l^2} + \sum_{i=1}^k \frac{\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{il}}{\sqrt{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}} X_i \right)^2 = \\ &= \left(\sqrt{\sum_{l=1}^r \theta_l^2} + \sum_{i=1}^k \frac{\sum_{l=1}^r \theta_l \delta_{im} \frac{\theta_l}{\theta_m}}{\sqrt{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}} X_i \right)^2 = \left(\sqrt{\sum_{l=1}^r \theta_l^2} + \sum_{i=1}^k \frac{\sum_{l=1}^r \theta_l^2 / \theta_m}{\sqrt{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}} \delta_{im} X_i \right)^2 = \\ &= \left(\sqrt{\frac{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}{\theta_m^2}} \left(\theta_m + \sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right) \right)^2 \quad \text{para cualquier valor de } m = 1, 2, \dots, r, \text{ con } \theta_m \neq 0 \end{aligned} \quad (7.10)$$

Si $\beta_0 = 0$

$$\begin{aligned} \sigma_Z^2(Y) &= \left(\sum_{i=1}^k \sqrt{\beta_{ii}} X_i \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^k \left(\sqrt{\sum_{l=1}^r \delta_{il}^2} \right) X_i \right)^2 = (\text{ver}(2.6)) = \left(\sum_{i=1}^k \left(\sqrt{\sum_{l=1}^r \frac{\delta_{ml}^2}{\delta_{mm}^2} \delta_{im}^2} \right) X_i \right)^2 = \\ &= \left(\sqrt{\frac{\sum_{l=1}^r \delta_{ml}^2}{\delta_{mm}^2}} \left(\sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right) \right)^2 \quad \text{para cualquier valor de } m \text{ con } \delta_{mm} \neq 0 \end{aligned} \quad (7.11)$$

Los modelos anteriores tienen 2 raíces

$$\beta_0 \neq 0$$

$$\left. \begin{aligned} R_1 &: \sqrt{\frac{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}{\theta_m^2}} \left(\theta_m + \sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right) \\ R_2 &: \sqrt{\frac{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}{\theta_m^2}} \left(-\theta_m - \sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right) \end{aligned} \right\} \text{ si } \theta_m \neq 0 \text{ para algún } m, m = 1, 2, \dots, r$$

$$\beta_0 = 0$$

$$\left. \begin{aligned} R_1 &: \sqrt{\frac{\sum_{l=1}^r \delta_{ml}^2}{\delta_{mm}^2}} \left(\sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right) \\ R_2 &: \sqrt{\frac{\sum_{l=1}^r \delta_{ml}^2}{\delta_{mm}^2}} \left(-\sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right) \end{aligned} \right\} \text{ si } \theta_m = 0 \forall m, m = 1, 2, \dots, r$$

$\sigma_Z^2(Y)$ raíces positivas

Si tomamos en el espacio generado por los factores de control la región acotada por las condiciones de un diseño factorial a dos niveles y obligamos a que el valor mínimo de una de las raíces de $\sigma_Z^2(Y)$ sea positivo, el problema no tiene solución cuando $\beta_0 = 0$. Si no es así tenemos,

$$\beta_0 \neq 0$$

Si $\theta_m > 0$ R_2 puede ser negativa luego obligamos a R_1 a ser positiva

$$\min(R_1 / \text{diseño}) \geq 0 \quad \Rightarrow \left(\theta_m - \sum_{i=1}^k |\delta_{im}| \right) \geq 0 \tag{7.12}$$

Si $\theta_m < 0$ R_1 puede ser negativa luego obligamos a R_2 a ser positiva

$$\min(R_2 / \text{diseño}) \geq 0 \quad \Rightarrow \left(-\theta_m - \sum_{i=1}^k |\delta_{im}| \right) \geq 0$$

$$\text{es decir } \Rightarrow |\theta_m| \geq \sum_{i=1}^k |\delta_{im}| \quad \text{para cualquier } \theta_m \neq 0$$

Por lo tanto, las condiciones que se han de cumplir en los coeficientes del modelo expresado en (7.1), que liga la respuesta Y con los factores de control y los factores ruido a estudio, para que el modelo que representa a la varianza transmitida a Y por los factores ruido, $\sigma_Z^2(Y)$, se pueda expresar como una potencia al cuadrado con al menos una raíz positiva son:

$$\frac{\delta_{il}}{\delta_{im}} = \frac{\delta_{jl}}{\delta_{jm}} = \frac{\theta_l}{\theta_m} \quad \forall i \neq j; i, j = 1, 2, \dots, k; \quad \forall l \neq m; l, m = 1, 2, \dots, r; \theta_l, \theta_m \neq 0$$

$$|\theta_m| \geq \sum_{i=1}^k |\delta_{im}| \quad \forall m = 1, 2, \dots, r; \theta_m \neq 0$$

(7.13)

En este caso las superficies $\sigma_Z^2(Y)$ y $\sigma_Z(Y)$ admiten una representación exacta por polinomios de la siguiente forma,

$$\sigma_Z^2(Y) = \frac{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}{\theta_m^2} \left(\theta_m + \sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right)^2 \quad \text{para cualquier } m = 1, 2, \dots, r \text{ con } \theta_m \neq 0$$

$$\sigma_Z(Y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}{\theta_m^2}} \left(\theta_m + \sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right) & \text{si } \theta_m > 0; \quad m = 1, 2, \dots, r \\ \sqrt{\frac{\sum_{l=1}^r \theta_l^2}{\theta_m^2}} \left(-\theta_m - \sum_{i=1}^k \delta_{im} X_i \right) & \text{si } \theta_m < 0; \quad m = 1, 2, \dots, r \end{cases} \quad (7.14)$$

Si no se cumplen las condiciones en (7.13), $\sigma_Z^2(Y)$ sigue representándose de forma exacta por un polinomio de segundo orden pero deja de ser un "plano cuadrático". Si esta superficie tiene su zona de mínima varianza suficientemente alejada de la región experimental y no presenta curvatura en la región, la superficie $\sigma_Z(Y)$ podría aproximarse por polinomios de primer orden.

Un caso particular ocurre cuando en la relación entre la respuesta Y y los factores a estudio expresado en (7.1) todos los efectos principales asociados a los factores ruido se anulan a la vez, es decir,

$$\theta_l = 0 \quad \forall l = 1, 2, \dots, r$$

En este caso, $\sigma_Z^2(Y)$ y $\sigma_Z(Y)$ son superficies cuadráticas con un punto de mínima varianza situado en el centro de la región

$$(X_1, X_2, \dots, X_k) = (0, 0, \dots, 0)$$

y los modelos respectivos no contienen los términos de primer orden, es decir, $\beta_i = 0$ para todos los factores X_i . Además, los términos β_{ij} serán no nulos si los ejes de simetría de la superficie no son paralelos a los ejes X_i y X_j .

7.3 Aproximaciones a Varianza(Y) y Desv. Típica(Y) a partir de e diseños factoriales a 2 niveles

En la experimentación ordinaria, tanto si se trabaja con matrices producto como si no, con mucha frecuencia se recurre a diseños factoriales a 2 niveles, la mayoría de las veces fraccionados, a la hora de estudiar el comportamiento de la respuesta Y ante los factores de control y factores ruido. A partir de estos diseños se identifican los factores que afectan a la localización de Y y los que son sensibles a la transmisión de la variabilidad provocada por los factores ruido a la respuesta.

Si la relación entre la respuesta Y y los factores a estudio puede expresarse por un modelo lineal de primer orden con a lo sumo términos cruzados, tal y como se ha representado en (7.1), estos diseños permiten estimar de forma adecuada los coeficientes del modelo, salvo problemas de alias si el diseño es muy fraccionado.

Para este tipo de modelos en Y , hemos visto que la estructura de la superficie asociada a $\sigma_Z^2(Y)$ es en general más complicada en los factores X_i . Si planteamos 2 tipos de aproximaciones polinómicas, las representadas en (7.15) como "L" y "Q",

$$L: Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i \neq j}^k \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon = \mathbf{X}\beta + \varepsilon$$

$$Q: Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i \neq j}^k \beta_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \varepsilon = \mathbf{X}\beta + \Phi\beta_{ii} + \varepsilon \quad (7.15)$$

con Φ matriz de columnas X_i^2 y β_{ii} vector conteniendo los coeficientes β_{ii}

El error que se comete al aproximar por un modelo como "L", una superficie que asumimos es como "Q", puede ser calculado de una manera sencilla,

Cuando se estima pensando que el modelo apropiado es L $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$

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

si L es el modelo apropiado $E(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1}X'(X\beta) = \beta$ (7.16)

si el modelo apropiado es Q $E(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1}X'(X\beta + \Phi\bar{\beta}_{ii}) = \beta + A\bar{\beta}_{ii}$

con $A = (X'X)^{-1}X'\Phi$

Cuando las condiciones experimentales llevadas a cabo son las representadas por un diseño factorial a dos niveles, la expresión (7.16) adquiere la siguiente forma:

$$E(\hat{\beta}_0) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_{ii}^2$$

$$E(\hat{\beta}_i) = \beta_i \quad i = 1, 2, \dots, k$$

$$E(\hat{\beta}_{ij}) = \beta_{ij} \quad i \neq j; i, j = 1, 2, \dots, k$$

De forma general, las diferencias entre las dos aproximaciones "L" y "Q" pueden expresarse como sigue,,

$$L(X_1, X_2) = Q(X_1, X_2) + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} (1 - X_i^2) \tag{7.17}$$

$$E(L - Q) = \sum_{i=1}^k \beta_{ii} (1 - X_i^2) = \sum_{i=1}^k \left(\sum_{l=1}^r \delta_{il}^2 \right) (1 - X_i^2)$$

Por lo tanto, al aproximar la superficie $\sigma_Z^2(Y)$ por modelos "L, se superestima la variabilidad transmitida por los factores ruido en el centro del diseño y el error que se comete depende directamente de la suma de los cuadrados de las interacciones de los factores de control con los factores ruido en el modelo para Y.

Por lo tanto se deduce que la estimación de la variabilidad a partir de los modelos obtenidos con diseños factoriales a dos niveles (modelos "L")

- Es correcta en los puntos del diseño ya que $|X_i|=1$ para todo $i = 1, 2, \dots, k$;
- Está superestimada en los puntos interiores y en el borde del diseño ya que $|X_i| \leq 1$ para todo $i = 1, 2, \dots, k$;
- Está subestimada en aquellos puntos donde $|X_i| > 1$ para todo $i = 1, 2, \dots, k$;

En general, si se estima un modelo "L" y surgen interacciones significativas explicando en su conjunto una parte significativa de la respuesta, es porque hay varios sumatorios como los que siguen significativos

$$\beta_{ij} = 2 \sum_{l=1}^r \delta_{il} \delta_{jl}$$

y por lo tanto se ha de sospechar que también lo serán expresiones del tipo

$$\beta_{ii} = \sum_{l=1}^r \delta_{il}^2$$

es decir, se ha de pasar a estimar un modelo de segundo orden completo aumentando el diseño si es necesario.

Un caso particular ocurre cuando se estudia con un modelo "L" una superficie que posee una zona de mínima varianza pasando por el centro del diseño. En este caso el modelo "L" sólo tiene como efectos significativos los términos de la interacción ya que los efectos principales son nulos.

Otro tema que es sumamente importante es el de la interpretación geométrica que se realiza del comportamiento de la variabilidad a partir de los modelos estimados bien sean "L" o "Q". No vamos a volver sobre este tema porque creemos que ha quedado suficientemente claro, a partir de los ejemplos expuestos en capítulos anteriores, que los modelos "L" no identifican las zonas de mínima varianza y pueden proponer estrategias secuenciales de experimentación incorrectas.

7.4 Conclusiones generales

Hemos estudiado la superficie que representa a la variabilidad transmitida a Y por los “ r ” factores ruido en la región determinada por los “ k ” factores de control, utilizando tres métricas: Varianza, $\sigma_Z^2(Y)$, Desviación Típica, $\sigma_Z(Y)$, y la transformación logarítmica de la desviación típica, $\log(\sigma)$.

Para ello hemos asumido que la relación entre la respuesta Y y los factores de control y ruido seleccionados puede ser representada por un modelo lineal del tipo,

$$Y = \mu + \sum_{l=1}^r \theta_l Z_l + \sum_{i=1}^k \sum_{l=1}^r \delta_{il} X_i Z_l + \varepsilon \quad (7.18)$$

$i = 1, \dots, k \quad l = 1, \dots, r \quad \varepsilon - iid -> N(0, \sigma)$

donde “ ε ” es independiente tanto de los factores de control como de los factores ruido y tiene varianza constante.

Hemos comprobado que la forma de las superficies asociadas a la variabilidad, o equivalentemente, la estructura de los modelos que las representan, dependen directamente de la relación existente entre la respuesta Y y los factores ruido, incluyendo esta relación a las interacciones de los factores de control con estos factores ruido.

La superficie $\sigma_Z^2(Y)$, asociada al modelo en Y representado en (7.18), puede ser representada en el espacio (X_1, X_2, \dots, X_k) de una manera exacta por un polinomio de segundo orden completo y posee una zona estacionaria de mínima varianza. La zona estacionaria puede ser expresada en función de los coeficientes del modelo en Y .

En el caso particular de que en el modelo para Y todos los efectos principales asociados a los factores ruido se anulen ($\theta_l = 0$ para $l = 1, 2, \dots, r$), la zona de mínima varianza pasa por el centro de la región experimental y si se aproximan las superficies $\sigma_Z^2(Y)$, $\sigma_Z(Y)$ y $\log(\sigma)$ por polinomios de segundo orden, los términos de primer orden se anulan ($\beta_i = 0$ para $i = 1, 2, \dots, k$).

Por otra parte, si se selecciona como región de interés la que cumple $|X_i| \leq 1$, y los coeficientes del modelo en Y cumplen las condiciones en (7.13), la superficie $\sigma_Z^2(Y)$ toma la forma de un “plano cuadrado” y $\sigma_Z(Y)$ admite una aproximación exacta por un plano.

En general, sólo si la zona de mínima varianza está suficientemente alejada de la región experimental, las tres superficies, $\sigma_Z^2(Y)$, $\sigma_Z(Y)$ y $\log(\sigma)$, admiten

aproximaciones locales por polinomios de primer orden; si no es así, se necesitan términos de segundo orden para aproximarlas. Por lo tanto si estas superficies se aproximan a partir de métricas resumen, se ha de partir de diseños de segundo orden para obtener una buena aproximación. (Si se parte de diseños factoriales recomendamos añadir puntos centrales para chequear la necesidad o no de ampliar el diseño a uno de segundo orden).

En principio no hemos encontrado una razón para que de una manera generalizada la transformación $\log(\sigma)$ sea aproximada por polinomios mejor que $\sigma_Z(Y)$ aunque reconocemos que habrá casos particulares donde esto ocurra (y donde por criterios teóricos de distribución muestral funcione mejor la primera). Sin embargo, hemos encontrado condiciones bajo las cuales $\sigma_Z(Y)$ admite representaciones más sencillas.

Si se trabaje bajo cualesquiera de estas métricas con modelos “L” que no contienen los términos cuadráticos puros, se pueden cometer graves errores en la estimación de la superficie ya que es muy probable que ésta sea cuadrática. El error de estimación cuando se trabaja con $\sigma_Z^2(Y)$ viene dado por la expresión:

$$\text{Error estimación} = L - Q = \sum_{i=1}^k \beta_{ii} (1 - X_i^2)$$

y por lo tanto aunque no se comete error de estimación en los puntos de diseño, se superestima la variabilidad dentro de la región experimental.

Por otra parte, los modelos “L” tienen serios problemas de ajuste en la zona de mínima varianza lo cual es grave si esta zona está próxima a la región de estudio. Si es así, las soluciones seleccionadas como robustas no corresponden con las teóricas. Además, en caso de querer planificar la siguiente etapa de experimentación, se tiende a seleccionar una estrategia equivocada, ya que la zona seleccionada no mejora la robustez sino todo al contrario (se pueden consultar ejemplos de este tipo en los dos capítulos anteriores).

Hemos mostrado señales que pueden ayudar al experimentador a sospechar sobre una falta de ajuste de modelos “L” a las superficies teóricas, una de ellas era la presencia de términos de segundo orden en el modelo y la otra es la presencia de valores negativos de variabilidad en las previsiones.

Si el modelo para Y expresado en (7.18) necesitara de términos de mayor grado para ser aproximado, las superficies $\sigma_Z^2(Y)$, $\sigma_Z(Y)$ y $\log(\sigma)$ también aumentarían su complejidad. En general, si tomamos el orden en que aparecen los términos en X_i interaccionando con los factores ruido en el modelo para Y , estos mismos factores tienden a aparecer en un orden mayor en los modelos de dispersión, por esto decimos que los modelos de dispersión son más complejos que los de localización en términos de los factores de control.

Recomendaciones

- Cuando se vaya a trabajar en problemas de robustez modelando directamente la variabilidad transmitida por los factores ruido a partir de métricas resumen, se recomienda utilizar diseños de segundo orden en los factores de control que permitan estimar superficies de segundo orden. La experimentación también se puede llevar a cabo de forma secuencial: partiendo de diseños factoriales con puntos centrales y completando el diseño en una segunda etapa si se detectase evidencia de curvatura;
- Si en el anterior problema se utilizasen diseños factoriales para modelar la variabilidad, los modelos estimados pueden utilizarse para comparar la variabilidad en las condiciones experimentales pero hay que tener cuidado a la hora de interpretar la superficie en la región experimental, sobre todo si se sospecha de que la zona de mínima varianza está próxima;
- Así, si en un entorno industrial la selección de las condiciones óptimas de trabajo dentro de la región experimental se realiza teniendo en cuenta, entre otros criterios, el de la variabilidad debida a los factores ruido, si esta se estima a partir de un modelo "L", el error de estimación que se puede llegar a transmitir puede afectar de una manera significativa a la elección (por ejemplo en los métodos de Jones (1990) y Grima (1993)).
- En modelos obtenidos a partir de diseños factoriales, se puede pensar que la zona de mínima varianza está próxima si surgen varias interacciones significativas o si los valores estimados para la variabilidad son negativos. En estos casos si se necesita una buena aproximación fuera de las condiciones experimentales se ha de aumentar el diseño,
- Como ya hemos comentado, es de esperar que en los modelos que aproximan las superficies asociadas a la variabilidad aparezcan interacciones entre factores de control significativas y si la zona de mínima varianza está próxima los efectos principales tienden a no ser significativos. Por lo tanto los diseños a utilizar han de ser de Resolución IV o superior para que no se seleccionen los efectos principales como significativos cuando en realidad son las interacciones;
- También, se podría pensar en obtener una estimación del modelo para Y a partir de la matriz ampliada y deducir el modelo para $\sigma^2(Y)$ pero como veremos en el capítulo 8, esta manera de proceder es muy sensible al modelo estimado para Y y además $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas resumen puede recoger fuentes de variación diferentes a las que recoge el modelo para la respuesta;