



CIMAT

Centro de Investigación en Matemáticas, A. C.

---

---

***“Optimización Multi-Objetivo  
en el Problema de Metodología  
de Superficie Multi-Respuesta”***

T E S I S

que para obtener el grado de

Maestría en Ciencias con Especialidad en  
Probabilidad y Estadística

P R E S E N T A:

**Luz Vanessa Bacio Parra**

Director de Tesis:

Dr. Jorge Domínguez Domínguez

Guanajuato, Gto., México, mayo de 2007.



# Dedicatoria

*A mi hermosa hija:  
Areli Montserrat Ramos Bacio,  
por ser el principal motor de mi vida y mi principal  
motivación. Te amo mi nena.*

*A mi esposo:  
Luis Armando Ramos Enriquez,  
por tu amor y compañía.*

*A mis padres:  
Yolanda Parra Bonilla y Eduardo Bacio de la Torre,  
por que son mi mejor ejemplo de vida.*



# Índice General

<b>Agradecimientos</b>	<b>vii</b>
<b>Resumen</b>	<b>ix</b>
<b>1 Problema General</b>	<b>1</b>
1.1 Antecedentes . . . . .	1
1.2 Planteamiento del problema . . . . .	3
1.2.1 Alcances . . . . .	7
1.2.2 Limitantes . . . . .	7
1.3 Objetivos . . . . .	8
1.4 Metodología . . . . .	8
1.5 Estructura del trabajo . . . . .	10
1.6 Resultados relevantes . . . . .	10
<b>2 Marco Teórico</b>	<b>13</b>
2.1 Metodología de Superficie de Respuesta . . . . .	13
2.2 Diseño de experimentos . . . . .	14
2.2.1 Clasificación de diseños experimentales para MSR . . . . .	15
2.3 Modelación . . . . .	19
2.3.1 Problema de superficie multi-respuesta . . . . .	20
2.3.2 Modelo lineal multi-respuesta . . . . .	20
2.3.3 Mínimos cuadrados Ordinarios . . . . .	21
2.3.4 Mínimos cuadrados generalizados . . . . .	21
2.3.5 Regresiones aparentemente no correlacionadas . . . . .	22
2.3.6 Respuestas estimadas . . . . .	23
2.4 Optimización . . . . .	25
2.4.1 Óptimos individuales . . . . .	26

2.4.2	Estrategia de optimización multi-respuesta . . . . .	28
2.5	Planteamientos de optimización multi-respuesta . . . . .	29
2.5.1	Función de deseabilidad . . . . .	30
2.5.2	Función de deseabilidad como grado de satisfacción. . . . .	35
2.5.3	Planteamientos alternativos de la función de deseabilidad. . . . .	36
2.5.4	Función de distancia . . . . .	37
2.5.5	Función de pérdida . . . . .	40
2.5.6	Índice Topsis . . . . .	41
2.5.7	Componentes principales para la pérdida estandarizada. . . . .	43
<b>3</b>	<b>Análisis Estadístico de Datos</b>	<b>45</b>
3.1	Codificación de variables . . . . .	45
3.2	Recomendaciones para establecer especificaciones . . . . .	46
3.3	Recomendaciones para establecer los pesos. . . . .	48
3.4	Recopilación de datos . . . . .	51
3.4.1	Proceso de producción de quesos . . . . .	52
3.4.2	Proceso de producción de neumáticos . . . . .	55
3.4.3	Proceso de lavado de carne . . . . .	60
3.4.4	Proceso de producción de circuitos . . . . .	64
3.4.5	Estudio de imágenes térmicas . . . . .	69
3.4.6	Propiedades de proteína de suero. . . . .	72
3.5	Propuesta para variables con alta varianza. . . . .	77
<b>4</b>	<b>Propuesta de Optimización Gráfica</b>	<b>83</b>
4.1	Superposición de contornos . . . . .	83
4.1.1	Superposición de contornos para dos factores de control . . . . .	84
4.1.2	Superposición de contornos para tres factores de control. . . . .	86
4.1.3	Propuesta de elección de contornos . . . . .	94
4.1.4	Consideraciones acerca del método gráfico. . . . .	95
4.2	Propuesta gráfica: deseabilidad y grado de satisfacción . . . . .	96
4.3	Monograma para visualizar la función de desabilidad . . . . .	98
<b>5</b>	<b>Resultados y Discusión</b>	<b>101</b>
5.1	Implementación de los métodos . . . . .	101
5.2	Medida de discordancia para comparar . . . . .	103
5.3	Resultados de optimización . . . . .	104

5.3.1	Proceso de producción de queso . . . . .	105
5.3.2	Proceso de producción de neumáticos . . . . .	107
5.3.3	Proceso de lavado de carne . . . . .	112
5.3.4	Proceso de producción de circuitos . . . . .	114
5.3.5	Estudio de imágenes térmicas . . . . .	116
5.3.6	Propiedades de proteína de suero . . . . .	118
5.4	Discusión . . . . .	118
<b>6</b>	<b>Optimización Multi-Objetivo</b>	<b>123</b>
6.1	Problema de Optimización Multi-Objetivo . . . . .	123
<b>7</b>	<b>Conclusiones y Comentarios Finales</b>	<b>127</b>
7.1	Resumen del trabajo . . . . .	127
7.2	Trabajos futuros y líneas de investigación . . . . .	129
<b>A</b>	<b>Glosario</b>	<b>131</b>
<b>B</b>	<b>Lista de abreviaciones</b>	<b>135</b>
<b>C</b>	<b>Códigos en R</b>	<b>137</b>
C.1	Estimación por SUR . . . . .	137
C.2	Óptimos individuales . . . . .	138
C.3	Optimización por DI1, DI2 y FP . . . . .	140



# Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a todas las personas e instituciones que hicieron posible que este trabajo haya sido culminado.

Agradezco de la manera más especial a mis padres, Yolanda Parra Bonilla y Eduardo Bacio de la Torre, por su apoyo incondicional, por todo su esfuerzo y dedicación, pero sobretodo, por el gran amor que me han dado. Gracias a mis hermanos, Zaahira y Alejandro, por su gran cariño.

Gracias a mi esposo, Luis Armando Ramos Enriquez, por su amor, por su paciencia y por haber estado conmigo durante los momentos mas difíciles en esta etapa, sobretodo por ayudarme tanto con los cuidados de nuestra pequeña Areli.

Agradezco profundamente a mi asesor de tesis, Dr. Jorge Domínguez Domínguez, por su atinada dirección en la realización de este trabajo, por su disposición a tratar cualquier asunto relacionado con esta tesis y por su paciencia. Gracias a mis sinodales, Dr. Rogelio Ramos Quiroga y Dr. Ricardo Francisco Vila Freyer, por sus comentarios y sugerencias para mejorar este documento. Quiero agradecer también a cada uno de los investigadores del área de Probabilidad y Estadística de CIMAT, quienes con sus consejos y enseñanzas, son una parte muy importante en mi formación académica.

No quiero dejar de mencionar a mis compañeros de maestría, quienes hicieron más llevadero mi paso por esta institución, sobretodo a Miguel Angel Lopéz y Alejandro Cruz por su apoyo y su amistad. Gracias a mi amiga E. Noemí Ortiz por sus oportunas palabras de aliento y su valiosa amistad.

Agradezco al CONACyT, por la beca que me fue concedida (con número de registro 191508) para llevar a cabo mis estudios de maestría. De igual forma, quiero agradecer al CONCyTEG, por el apoyo económico facilitado durante el desarrollo de mi trabajo de tesis. Gracias a CIMAT, A. C. por haberme brindado los recursos humanos, tecnológicos y económicos para la realización de mis estudios y tesis de maestría.

Finalmente, agradezco a Dios, por nunca abandonarme y por haberme dado la fortaleza necesaria para la culminación satisfactoria de esta etapa de mi vida.



# Resumen

Es común que en diferentes áreas de estudio se consideren problemas representados por muchas características de interés. El tipo de diseño que se utiliza involucra la selección de un conjunto de factores de interés que resultarán en un producto con la mejor combinación de estas características. A este proceso se le conoce como un diseño de optimización multi-respuesta en la que las características de interés se definen como múltiple respuesta.

El objetivo es definir un conjunto de factores que proporcionen la mejor mediación simultáneamente de la múltiple respuesta. Una aproximación usada comúnmente para resolver los problemas de diseño multi-respuesta es considerar una función objetivo unificada; esto es, que las respuestas individuales son matemáticamente combinadas para generar una función simple, a partir de la cual se realiza la optimización. Inicialmente las variables de respuesta individuales son modeladas para crear una superficie de respuesta de un diseño experimental. A cada variable de respuesta se le aplica una transformación de tal manera que todas las respuestas se puedan combinar en una sola función. A partir de ahí se varían los niveles de los factores tal que se puedan cumplir de la mejor manera los óptimos individuales hasta alcanzar un óptimo global.

Este trabajo ofrece una recopilación de algunos de los planteamientos de optimización multi-respuesta que se han publicado en la literatura de investigación, se muestran algunos procedimientos para construir una función que represente a la combinación de los objetivos de las respuestas individuales. Estos procesos se caracterizan por ser modelos de optimización multiplicativos o aditivos. Mediante distintos ejemplos se hará una comparación de estos métodos.



# Capítulo 1

## Problema General

La finalidad en muchos procesos que se realizan en diferentes áreas de estudio, es obtener resultados óptimos. En particular en el contexto de calidad total, la mejora continua es una parte fundamental. La mejora continua busca identificar e implementar mejoras en los productos, servicios y procesos. En la actualidad, realizar mejoras a procesos es una necesidad, en particular cuando se trata de procesos industriales. En esta dirección los métodos de optimización desempeñan un papel importante, ya que permiten evaluar la existencia y trascendencia de una mejora. La planeación y la estrategia que se debe seguir para perfeccionar las características de un proceso son igualmente importantes.

Este trabajo se engloba en el marco de las ideas de la mejora continua, que, de acuerdo al Círculo de Deming [14], consiste en Planear, Hacer, Verificar y Actuar.

En este capítulo se hace una presentación del problema de optimización multi-respuesta, el cual se desarrollará a lo largo de este trabajo.

### 1.1 Antecedentes

Mejorar es el objetivo que se quiere alcanzar en casi todas las actividades que se desarrollan cada día. En particular, en cualquier proceso de producción siempre se piensa en la mejora continua a fin de aumentar la calidad de un producto y, de esta manera, satisfacer las necesidades del consumidor. Es común que en diferentes áreas de estudio la calidad se vea reflejada en varias características de interés, las cuales a su vez dependen de un conjunto de factores, los cuales pueden ser controlables o no. Esta dependencia se ve reflejada en la Figura 1.1, en la cual se explica que en un proceso de producción existen distintas condiciones de operación, tales como temperaturas, velocidades, tiempos, tipos de material entre otros. Todas estas condiciones, las cuales interactúan entre sí,

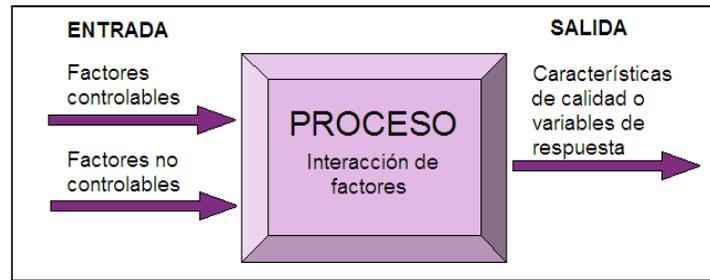


Figura 1.1: Variables que intervienen en un proceso.

dan lugar a un producto con ciertas características las cuales son llamadas respuestas y que son sujetas a medición. Es en este punto donde surgen las preguntas de cuáles son las propiedades que se desean medir, qué factores son los que intervendrán en el proceso, así como saber qué estrategia se debe seguir para establecer la mejora del proceso.

Es en este punto en donde entra la participación del experimentador quien, mediante una estrategia experimental, debe encontrar las condiciones de los factores controlables que dan por resultado los valores óptimos de las características de calidad de un proceso.

La experimentación juega un papel fundamental en prácticamente todos los campos de la investigación y el desarrollo. El objetivo de la experimentación es generar información apropiada que permita desarrollar nuevos productos y procesos, comprender mejor un sistema y tomar decisiones plantear la mejora continua y la estandarización del proceso, comprobar hipótesis científicas, entre otros. Un paso relevante en la estrategia experimental es que el experimentador debe planificar (diseñar) cuidadosamente un experimento para que se proporcione la información adecuada. Para esto se recurre a una metodología que indique como organizar la secuencia de experimentos de la mejor manera, es aquí donde el Diseño de Experimentos surge como una herramienta para este fin. A nivel de laboratorio, se realiza el experimento según el diseño experimental planeado, el cual incluye los factores de diseño que intervienen en el proceso ( $x$  como factores controlables y  $z$  los no controlables o de ruido) para de esta manera obtener la medición para las características de interés ( $y_i$ ), tal como se muestra en la Figura 1.2.

Con el fin de obtener la satisfacción del cliente que consume el producto, es necesario realizar una mejora continua al mismo, por lo que se piensa en optimizar el proceso. Algunas de estas situaciones son: disminuir costos; aumentar producción; minimizar el número de impurezas; maximizar la elasticidad; reducir la cantidad de contaminantes; incrementar porcentaje de humedad; mantener la cantidad de proteína en un rango de valores; lograr que el coeficiente de textura se mantenga en un valor nominal; disminuir la varianza de un proceso; entre otras. En todos estos ejemplos se

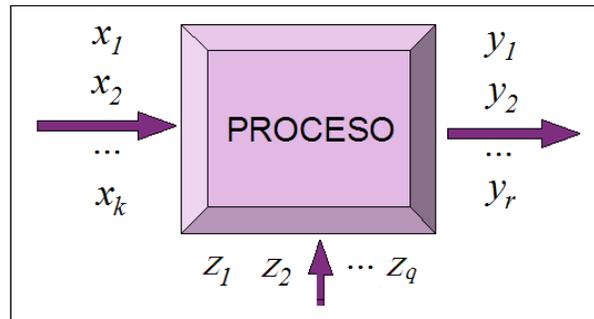


Figura 1.2: Representación de un sistema de estudio en Diseño de Experimentos.

requiere encontrar un óptimo, palabra que se usa en este trabajo como referencia para considerar las condiciones más aceptables o más deseables de las respuestas con respecto a ciertas condiciones.

Una técnica que permite resolver este problema es la Metodología de Superficie de Respuesta (MSR), la cual es muy usada para optimizar procesos de manufactura. En las aplicaciones prácticas de esta metodología es necesario obtener una aproximación mediante un modelo de la verdadera superficie de respuesta para de esta manera realizar la optimización. La MSR es una herramienta que ha sido utilizada ampliamente en el desarrollo de procesos industriales y en el desarrollo tecnológico. En la literatura de investigación se han publicado aplicaciones de la MSR en procesos para la elaboración de alimentos, producción de partes para automóviles, procesos químicos y biológicos, entre otros. En resumen, MSR es un proceso metodológico que considera la planeación experimental, modelar los resultados experimentales y optimizar el proceso a través de la información que proporciona el modelo.

## 1.2 Planteamiento del problema

El experimentador ahora requiere encontrar las condiciones del proceso que satisfaga con los requisitos del proceso. Cuando sólo se considera una variable de respuesta se tiene un problema de optimización simple. La mayoría de la teoría en la MSR se ha enfocado a este tipo de problemas. Sin embargo, en muchos de los procesos, la calidad de los mismos está representada por varias de las características de estudio. A estos procesos se les conoce como diseños de optimización multi-respuesta y el objetivo es definir un conjunto de factores que proporcionen la mejor mediación simultánea de la múltiple respuesta para, de esta forma, alcanzar la calidad global de un producto. En esencia, el problema de optimización multi-respuesta consiste en seleccionar los niveles de las variables independientes que optimicen todas las respuestas a la vez. No obstante, el que todas

las respuestas alcancen su valor óptimo en una misma combinación de factores es prácticamente imposible ya que es muy común que haya conflicto entre estas características, por lo que en realidad lo que se busca es encontrar el conjunto de factores de entrada que resulten en un producto con la mejor combinación de esas particularidades de calidad. A este problema hay que agregar que en muchas ocasiones, además de buscar la optimización de las respuestas, se requiere que los valores para estas se encuentren dentro de ciertos requerimientos expresados mediante límites de especificación.

Como se menciono anteriormente, mediante un **esquema experimental** es posible obtener las respuestas. Los diseños experimentales más usados para este propósito en MSR son los diseños  $2^{k-q}$ ,  $3^{k-q}$ , Box Benhken y Central Compuesto. Los  $n$  tratamientos dictados por el esquema experimental, los cuales son representados mediante una matriz de diseño  $\mathbf{X}_{n \times p}$  donde  $p$  es el número de parámetros a estimar, son aplicados a igual número de unidades experimentales a cada una de las cuales se les mide  $r$  características de interés. En MSR cada una de las respuestas,  $y_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, r$ , de interés se supone que pueden ser escritas en función de las  $k$  variables de control, de la siguiente manera

$$y_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_k) + \varepsilon_i$$

donde la función que **modela** esta relación está dada, generalmente por polinomios de primer y segundo orden. La estimación de los parámetros que caracterizan a cada uno de los modelos para las respuestas son obtenidos mediante técnicas de regresión estadística, para los cuales se tienen ciertos supuestos respecto a la estructura de los datos experimentales, tales como son normalidad, homocedasticidad e independencia entre observaciones. Los métodos de estimación a los que se hace referencia en este trabajo son el de mínimos cuadrado ordinarios (OLS) y el de regresiones aparentemente no relacionadas (SUR).

Una vez que los modelos para cada una de las variables han sido establecidos el siguiente paso es realizar la **optimización**. En el caso en que solo se considere una variable de respuesta, se han propuesto técnicas como la de escalamiento ascendente (descendiente) para detectar curvatura en el modelo, tal como las presentan Myers (1971), Box y Draper (1987), Khuri y Cornell (1987) y Myers y Montgomery (1995). Después fue retomada la idea de Draper (1963) para caracterizar una superficie por medio de una forma canónica, para así encontrar un punto óptimo.

Para el caso en que se requiere optimizar dos respuestas se ha recibido mucha atención y se han hecho varias propuestas para resolverlo, las cuales están dentro del llamado problema de respuesta dual el cual fue introducido por Myers y Carter en 1973. Este problema consiste en optimizar una variable sujeta a que la segunda variable cumpla con cierta restricción. Vining y Myers (1990) aplicaron esta propuesta al problema de considerar tanto la media como la varianza

de una respuesta, según lo señala Taguchi (1986). La propuesta consiste en representar a estas dos medidas por modelos de segundo orden dentro de la región experimental para optimizar el valor de la media de la respuesta sujeto a que la variabilidad de la misma sea mínima. Myers *et al* (1992) analizaron el problema en el que se toma en consideración a la media y a la varianza ante un diseño en el que intervienen factores de ruido, proponiendo un a solución basada en el trabajo de Vining y Myers.

El planteamiento general del problema de optimización se establece mediante el siguiente modelo:

$$\begin{aligned} \text{Optimizar} & \quad [y_1, y_2, \dots, y_r], \\ \text{Sujeto a} & \quad g_l(\mathbf{x}), l = 1, 2, \dots, m. \\ & \quad \mathbf{x} \in \mathfrak{R}. \end{aligned} \tag{1.1}$$

donde se tiene la presencia de  $i$  objetivos:  $O_i$  flexibles  $i = 1, \dots, r$  y  $l$  restricciones  $g_l(x)$ , en el caso  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}$ ,  $\mathfrak{R}$  : región experimental. Una forma de replantear este problema es el de optimizar una de las variables sujeto a que las demás tomen un valor determinado. Otra manera es la de unificar los  $r$  objetivos en una sola función. En el desarrollo de este trabajo se detallará acerca de este planteamiento y de la conexión que hay de este con el problema de optimización multi-objetivo.

El caso que atañe a este trabajo es el de la optimización simultánea de varias respuestas ya que es común encontrar procesos industriales en los que es necesario optimizar hasta 15 respuestas. Un primer procedimiento que sirve para afrontar esta situación es el método de sobreponer contornos a fin de encontrar un conjunto de condiciones de operación satisfactorio a todas las respuestas. Sin embargo este método es muy restrictivo ya que está limitado a dos o tres factores de control, por lo que surgió el interés y la necesidad de contar con más procedimientos. En esta dirección han surgido distintos procedimientos que buscan dar solución al problema de optimización multi-respuesta.

El más popular de los planteamientos de optimización multi-respuesta es el formulado por Derringer y Suich (1980), el cual es una adaptación de la función de deseabilidad propuesto por Harrington (1968) la cual consiste en hacer una transformación de cada una de las respuestas predichas para combinarlas en una función multiplicativa. Autores como de Tabucanon (1988), Del Castillo *et al* (1996), Kim y Lin (2000) y Jeong y Kim (2003) han trabajado en base la función de deseabilidad.

Las técnicas de optimización presentadas hasta el momento no tomas en cuenta la correlación que hay entre las variables. Esta situación fue considerada por Khuri y Conlon (1981), quienes propusieron minimizar la distancia de Mahalanobis entre el predicho y el valor más deseado para cada una de las variables de respuesta. Algunos de los métodos propuestos han usado la idea de la función de pérdida propuesta por Taguchi [51], entre ellos Pignatiello (1993), Ames *et al* (1997),

Vining (1998) y Ko *et al* (2005). Chiao y Hamada (2001) proponen un procedimiento que toma en cuenta la correlación entre las respuestas.

Todos los planteamientos mencionados reducen el problema de optimización multi-respuesta a una función objetivo unificada; esto es, las respuestas individuales son matemáticamente combinadas para generar una función simple. Inicialmente las variables de respuesta individuales son modeladas para crear una superficie de respuesta de un diseño experimental. A cada variable de respuesta se le aplica una transformación de tal manera que todas las respuestas se puedan combinar en una sola función. A partir de ahí se varían los niveles de los factores tal que se puedan cumplir de la mejor manera los óptimos individuales hasta alcanzar un óptimo global. La resolución del problema mediante este camino produce una solución puntual

Otros caminos que han ido ocupando la atención de los investigadores en la optimización multi-respuesta tiene que ver con las técnicas multi-objetivo, las de lógica difusa y algoritmos genéticos como los presentados por Ortiz *et. al.* (2004).

Ante la diversidad de técnicas de optimización multi-respuesta, el experimentador ahora se encuentra ante el dilema de elegir aquella que mejor se adecue a los datos experimentales con los que cuenta. A excepción de la función de deseabilidad, los métodos de optimización no han sido ampliamente discutidos. Algunos artículos que han presentado algunas comparaciones de estos procedimientos han sido los de Wurl y Albin (1999) y Kros y Mastrangelo (2001 y 2004).

Existen diversos aspectos estadísticos que no han sido abordados por los autores que propusieron los métodos de optimización, tales como la no normalidad de las variables, correlaciones significativas entre las mismas, presencia de datos aberrantes o alta varianza para algunas de las variables de respuesta, sin mencionar que el proceso mediante el que se obtienen los datos experimentales no es determinístico, por lo que las variables presentan aleatoriedad. Es de interés conocer cual de los métodos resulta más eficiente ante este tipo de situaciones.

Otra de las situaciones en las que no se ha hecho mucho énfasis es que el punto óptimo global que arroja cada uno de los métodos en ocasiones hace que ciertas características se vean afectadas por favorecer a otras. Además también se da el caso de que la solución encontrada no es del todo satisfactoria para el dueño del proceso. Esto hace pensar en la necesidad de obtener una estrategia para obtener distintas soluciones y tener de este modo la oportunidad de escoger la solución que mejor se adapte a las posibilidades, ya sea monetarias o tecnológicas, que se tengan para el proceso.

En resumen se puede decir que el problema que interesa es el de conocer la herramienta que permita establecer las condiciones óptimas de un proceso, tal que se obtenga la mejor mediación posible en la características que valoran la calidad de un producto y que además tome en consideración aspectos inherentes al problema, tal como los aspectos estadístico y la satisfacción del cliente.

### 1.2.1 Alcances

Como se ha mencionado, la MSR tiene una amplia gama de aplicaciones y los problemas que envuelven múltiples respuestas son muchos. Por esta razón la divulgación adecuada de las metodologías de optimización multi-respuesta tendría ciertas ventajas, tales como la elaboración de productos con mayor calidad, ya que el experimentador contaría con técnicas que permitan obtener condiciones de operación traducidas en características óptimas para el proceso.

Es posible también encontrar condiciones de operación del proceso que den buenos resultados en los que se tengan ahorros en el proceso.

El conocer las técnicas de optimización permite realizar pruebas de los mismos que proporcionen pautas para caracterizar su desempeño ante distintas situaciones.

Quizás la mayor trascendencia que se tendría de hacer del conocimiento estas herramientas en el campo tecnológico, es la de concientizar la importancia de la cultura estadística en este ámbito, la cual muchas veces no es considerada.

### 1.2.2 Limitantes

Una de las complicaciones que se tiene al querer hacer uso de las técnicas de optimización multi-respuesta es la de obtener datos experimentales ya que realizar una estrategia de experimentación puede resultar en altos costos monetarios.

A pesar de las diversas propuestas que se han hecho para resolver el problema multi-respuesta, se cuenta con una gran limitante para tal fin: la falta de software. A pesar de las ventajas que tiene el hacer uso de los métodos de optimización, se ha hecho poca difusión de los mismos debido a las pocas facilidades computacionales que se tienen para implementarlos. En 1990 Khuri planteó este problema, donde además argumenta que "a menos que este problema sea resuelto, los analistas de datos no se verán atraídos por las técnicas de optimización multi-respuesta". El único método que ha sido programado es el de la función de deseabilidad, por lo que se ha vuelto el más popular de todos. Paquetes estadísticos que lo contienen son *MINITAB*, *Design Expert*, *Statgraphics* y *SAS*. Sin embargo el costo de estos sistemas es muy alto y poco accesible fuera del ámbito académico.

En el contexto en el que se desarrolla este trabajo, una limitante que hay que tomar en consideración es que por lo general solo se cuenta con un experimento a partir del cual se obtienen ciertos resultados. Sin embargo, al estar considerando procesos que son aleatorios, no es posible generalizar acerca de las conclusiones obtenidas ya que, si se realizará un nuevo experimento, éstas serían distintas

### 1.3 Objetivos

La realización de este trabajo de tesis pretende lo siguiente:

- Dar a conocer los conocimientos teóricos acerca de la metodología de superficie de respuesta como una alternativa de solución a problemas que generalmente se presentan en distintos procesos de producción.
- Presentar las distintas alternativas para afrontar el problema de optimización multi-respuesta a fin de alcanzar mayor comprensión de los mismos. En este sentido, el presente trabajo puede ser consultado como un manual.
- Realizar una comparación cualitativa de los métodos de optimización propuestos en base su aplicación a distintos conjuntos de datos con características diferentes.
- Evaluar la eficiencia de cada uno de los planteamientos de optimización considerando una medida de eficacia.
- Considerar aspectos estadísticos que no se han hecho en la implementación de técnicas para encontrar un óptimo simultáneo.
- Resolver el problema de la falta de paquetes estadísticos presentando procedimientos que permita aplicar los métodos de optimización multi-respuesta. Esta tesis es una oportunidad para presentar a  $R$  como un lenguaje de programación eficaz de lograr la optimización para procesos multi-respuesta, que además no cuesta ni un solo peso.
- Introducir el problema de optimización multi-objetivo como una alternativa en la solución de problemas con múltiples respuestas, esto con el propósito de que el experimentador cuente con una estrategia para obtener soluciones óptimas de las cuales pueda escoger la que mejor se adapte a sus intereses.

### 1.4 Metodología

Con el fin de cumplir con los objetivos planteados, fue necesario realizar una amplia recopilación de artículos publicados en distintas revistas de investigación en los cuales se presentaron los planteamientos de optimización multi-respuesta. Los artículos fueron analizados con la finalidad de entender su funcionamiento.

Dado que no fue posible contar con datos reales de un algún proceso, se realizó una búsqueda de datos publicados en la literatura con distintas características. En este trabajo se consideran seis

conjuntos de datos, a cada uno de los cuales les fue implementado los métodos de optimización analizados. Cada uno de los datos experimentales es presentado con su respectiva descripción.

Anteriormente se refirió al problema que se tiene al trabajar en este rubro debido a la carencia de software, razón por la cual fue necesario realizar un amplio trabajo de programación estadística con el objetivo de llevar a cabo la realización de las técnicas de optimización. En primera instancia fue preciso escoger un lenguaje de programación que cumpliera con las características necesarias. Entre los lenguajes de programación se pueden encontrar algunos como *MATLAB*, *Gauss*, *C++*, *S*, *FORTRAN*, entre otros. Sin embargo se considero más conveniente utilizar el lenguaje *R*, ya que tiene características como las que se mencionan a continuación.

*R* se ha convertido en los últimos años en una herramienta ampliamente utilizada en la investigación estadística y otros campos con una fuerte componente aplicada. Se trata de un software gratuito, derivado del lenguaje *S*, que se caracteriza por su versatilidad y por la participación constante de una comunidad de investigadores en su desarrollo. Por otro lado, el hecho de no disponer de un interfaz basado en menús hace que el proceso de aprendizaje sea más difícil respecto a otros paquetes comerciales, aunque esto puede verse como una ventaja ya que requiere el entendimiento de lo que se esta realizando. Una vez superado este aprendizaje, *R* se convierte en una herramienta ideal para el análisis estadístico, programación de funciones y para la representación gráfica de resultados. Se tiene también una gran cantidad de códigos en *R*, desarrollado por investigadores particulares, que se encuentra accesible libremente en la página web del proyecto, lo que le convierte en una plataforma ideal para la implementación y difusión de nuevos métodos estadísticos. Además, *R* está disponible para *GNU/Linux*, *Windows* y *Mac*, y su uso es similar en cualquier sistema operativo. Por último se tiene que, al ser *R* un software de libre distribución, se puede fomentar el intercambio académico con la finalidad de difundir las metodologías multi-respuesta.

Una vez seleccionado *R* como lenguaje de programación, se procedió a estimar los modelos, tanto por OLS como por SUR, para las respuestas involucradas en cada uno de los procesos de los que se obtuvieron los datos experimentales. Las técnicas de optimización analizadas fueron programadas, en primera instancia para el conjunto de datos analizado en el artículo original, esto con el fin de reproducir los resultados y asegurarse del buen funcionamiento de los métodos programados. El siguiente paso fue programar cada uno de los métodos de optimización para el resto de los conjuntos de datos para de esta manera encontrar tantos óptimos globales como planteamientos de optimización.

Los resultados obtenidos fueron analizados para, de esta manera, realizar una comparación de cada una de las técnicas en base a una medida de efectividad, además de una discusión acerca del funcionamiento de los mismos.

## 1.5 Estructura del trabajo

Para poder resolver el problema planteado, es necesario que el lector posea los conocimientos básicos acerca de la metodología de superficie de respuesta, para lo cual se presentan los tres pasos clave de la misma: diseño, modelación y optimización. Se dan a conocer los planteamientos de optimización multi-respuesta que han sido publicados en distintas revistas de investigación, los cuales se desean comparar.

Los conjuntos de datos analizados en este trabajo son presentados en el tercer capítulo. Primeramente se dan propuestas ante falta de información para el proceso, así como recomendaciones para establecer ponderaciones para las variables que intervienen en el mismo. También se realiza un análisis estadístico de los datos experimentales recopilados de la literatura, así como para los modelos de estimación obtenidos tanto por el método de mínimos cuadrados ordinarios, así como para el método de regresiones aparentemente no relacionadas. Se presentan también los resultados de la optimización individual de las respuestas para cada uno de los procesos. Por último se presenta una alternativa ante la situación de contar con variables de respuesta heterocedásticas.

En el capítulo 4 se presentan las distintas técnicas gráficas que pueden ser de utilidad para la optimización simultánea de las variables, tal como el método de superposición de contornos. Se explica además el procedimiento gráfico de optimización que está implementado en el software *MINITAB* como una alternativa en la optimización multi-respuesta.

Después de la implementación de los métodos de optimización global presentados en el segundo capítulo, los resultados obtenidos son presentados en el capítulo 5, donde además se hace una discusión acerca de lo reflejado para cada uno de los planteamientos de optimización, esto en base a una medida introducida a fin de cuantificar la efectividad de los mismos. Los resultados obtenidos mediante técnicas gráficas con incluidos en esta discusión. También se explica como se llevo a cabo la realización para cada uno de los métodos analizados.

En el penúltimo capítulo de este trabajo se presenta el problema de optimización multi-objetivo, así como la relación que este guarda con los planteamientos de optimización analizados. Finalmente el séptimo capítulo concluye con este trabajo.

## 1.6 Resultados relevantes

En este trabajo se presentan dos métodos de estimación para los parámetros de un modelo, OLS y SUR. Los estimadores OLS son obtenidos de manera individual para cada una de las variables de respuesta, en tanto que los derivados por SUR estiman conjuntamente los parámetros. A pesar de que la segunda técnica considera la correlación entre las respuestas y provee estimadores más

precisos, se tienen desventajas como el hecho de que los modelos obtenidos con este procedimiento explican menor porcentaje de varianza, así como también arrojan valores más grandes para el cuadrado medio del error que los obtenidos por OLS.

En cuanto a los métodos de optimización analizados, no se puede decir que uno de ellos haya resultado ser más eficiente que los demás, ya que su funcionamiento está en base a la estructura estadística de las respuestas que se están considerando. De aquí se desprende la relevancia de la divulgación de la cultura estadística en los ámbitos científico y tecnológico.

Resultó de gran interés el conocimiento que se tenga acerca del proceso que se quiere mejorar, ya que la información que se tiene del mismo tiene fuertes implicaciones en los resultados que se puedan obtener, esto debido a que varios de los métodos de optimización consideran dicha información en la función unificada que proponen optimizar. El cambiar los valores más deseables o los rangos en los que debe de estar cada variable, repercute en las condiciones óptimas de operación que estos métodos dan como solución.

Como alternativa ante la situación de contar con variables con alta varianza, se propuso un método de estimación basado en regresión en dos etapas, con la finalidad de obtener modelos para este tipo de variables que reducen significativamente el cuadrado medio del error como medida de variabilidad, lo cual produjo mejoras en algunos de los métodos de optimización multi-respuesta.



# Capítulo 2

## Marco Teórico

Una vez que se ha identificado el problema, es necesario conocer la metodología que pueda ayudar a resolverlo. La finalidad de este capítulo es presentar las herramientas estadísticas necesarias para poder realizar la optimización conjunta de las características que miden la calidad de un producto, en esa dirección se inicia con una introducción de la Metodología de Superficie de Respuesta y la extensión de la misma para el caso de varias respuestas. Se presenta además una recopilación de métodos multi-respuesta que han sido publicados por distintas revistas de investigación y de los cuales se quiere evaluar su eficacia.

### 2.1 Metodología de Superficie de Respuesta

La metodología de superficie de respuesta (MSR) es un conjunto de técnicas matemáticas y estadísticas que son útiles para modelar y analizar problemas en los cuales hay una o varias respuestas de interés y el objetivo es optimizar estas respuestas. 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 de respuesta.

Estos conceptos fueron expuestos inicialmente por Box y Wilson en 1951. En 1971 fue editado el primer libro sobre el tema en la autoría de Myers [35] quien posteriormente publicó otro libro en coautoría con Montgomery (1985, con segunda edición en 2002). Esta técnica ha cobrado un gran impulso gracias a los avances tecnológicos, lo cual ha tenido como consecuencia estudios notables más recientes plasmados literariamente por Khuri y Cornell (1987, con segunda edición en 1996) y Box y Draper (1987), además de una amplia gama de aplicaciones realizadas en el desarrollo,

tanto en procesos industriales como en el desarrollo tecnológico, las cuales han sido reportadas en distintas revistas de investigación.

Como primer paso en la MSR se debe de hacer un cribado cuando se tienen muchos factores que pueden influir en la respuesta o característica de interés, esto con el fin de identificar los factores que tienen influencia efectiva en la variable de respuesta. Una vez que los factores relevantes del proceso se tienen identificados se trabaja con un modelo y un diseño de primer orden que permita detectar la presencia de curvatura en la respuesta (en caso de haberla). Si se detecta curvatura se debe de utilizar un diseño de segundo orden con el que se pueda modelar adecuadamente la curvatura de la superficie de respuesta. Cabe recalcar que el número de experimentos y de etapas que se requieren depende del conocimiento que se tenga al comenzar la investigación, en relación a cómo pueden influir los factores que intervienen en cierto proceso. Puede ser que por experiencia anterior ya se conozcan los factores de mayor influencia, e inclusive puede ser que ya se sepa que sí existe la curvatura.

Cuando no se ha detectado curvatura (la superficie es ajustada por un plano) entonces el objetivo del experimento es explorar una nueva región cuya dirección óptima de movimiento se obtiene mediante la técnica conocida como *escalamiento ascendente* (o *descendiente*, según se requiera maximizar o minimizar la respuesta). No se entrará en detalles con respecto a esta técnica ya que los datos que se analizan en este proyecto suponen la existencia de curvatura. Si la superficie es curva (ajustada por un modelo de segundo orden) el objetivo es, en caso de que exista y esté dentro de la región experimental, determinar el punto óptimo o bien, el mejor punto de operación posible dentro de la región experimental. En este último caso las técnicas de optimización del proceso son el *análisis canónico* y el *análisis de cordillera*, de los cuales se hablará brevemente más adelante.

En resumen, se puede decir que MSR consiste en tres pasos clave: Diseño, Modelación y Optimización.

## 2.2 Diseño de experimentos

El diseño estadístico de experimentos es un conjunto de técnicas que permite plantear distintas estrategias para seleccionar, controlar, analizar e interpretar diferentes condiciones de estudio de cierto fenómeno de una manera objetiva y sistemática y cuyo objetivo, en el contexto de este trabajo, es el de estudiar los efectos que tienen un conjunto de factores sobre variables de interés. El diseño de experimentos tiene una enorme utilidad ya que permite mejorar la calidad de los productos y el rendimiento de los procesos, además de su importancia en el desarrollo de nuevos productos.

Un experimento consiste en elegir ciertas unidades experimentales, seleccionar los valores de

los factores en distintos niveles y registrar el valor de la variable de respuesta en cada una de las unidades experimentales. Las etapas que se pueden considerar en el diseño de experimentos son:

1. La planeación, la cual consiste en el planteamiento del problema, la selección de los factores de estudio, la determinación de los niveles en los que deben de operar estos últimos y, por último, la selección de las variables que son de interés medir.
2. La experimentación es la etapa en la cual se plantea y se efectúa el diseño experimental.
3. El análisis de datos, etapa en la que se determina la técnica estadística que mejor describa el comportamiento de los datos
4. Por último esta la etapa de conclusiones, en la que, después de la interpretación de los resultados obtenidos, se recomiendan las medidas a implementar para establecer mejoras en el proceso.

Los principios básicos de la estrategia experimental son:

- Aleatorización, que es la base para establecer relaciones causales del proceso en un experimento.
- Bloqueo, es la agrupación de las unidades experimentales de acuerdo a su homogeneidad en sus respuestas antes de ser tratadas a fin de nulificar causas que puedan afectar la respuesta observada.
- Repetición, es la ejecución más de una vez de un tratamiento con el fin de distinguir de mejor manera que parte de la variabilidad total de los datos se debe a cada factor.

Se han inventado y propuesto muchos diseños experimentales para poder abordar la gran diversidad de situaciones que existen en la práctica. Para más información al respecto se recomienda la lectura de uno de los libros más populares en el ámbito escrito por D. C. Montgomery [34].

### 2.2.1 Clasificación de diseños experimentales para MSR

Hay una relación directa entre el tipo de modelo que se pretende ajustar a ciertos datos y el tipo de diseño que se debe correr. Un diseño experimental debe de proveer la información necesaria para poder ajustar ciertos modelos. En la actualidad se cuenta con una amplia gama de diseños experimentales, los cuales se han clasificado de acuerdo con el objetivo que se persigue al implementarlos, así como al número y tipo de variables independientes. Entre ellos se encuentran los que pueden

ser clasificados como diseños para la optimización de procesos, dentro de los que están los diseños apropiados para ajustar un modelo de regresión de primer y segundo orden.

A continuación se comentará acerca de los diseños más utilizados en la búsqueda de un óptimo en la metodología de superficie de respuesta.

### Diseños de primer orden

Se supone que es de interés utilizar un modelo de primer orden de la forma

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

para estudiar el comportamiento de cierta característica de calidad, es decir que se supone que sólo son importantes los efectos principales y que no existen efectos de interacción. Entre los diseños de primer orden más utilizados están los diseños factoriales  $2^k$ , los diseños factoriales fraccionados, los diseños Plackett-Burman, los diseños simplex y los arreglos ortogonales  $AO(2^k)$ . A excepción del diseño simplex, estos diseños emplean dos niveles en cada factor, esto debido a que sólo interesa detectar el efecto principal de cada factor. El diseño simplex se utiliza cuando se tienen muchos factores, como en la etapa de cribado o bien cuando se quiere minimizar el costo de la experimentación.

En general, estos diseños se utilizan para determinar mejores tratamientos, en términos de aumentar o disminuir el valor de la respuesta. Además es posible aumentar estos arreglos con repeticiones al centro para poder detectar la presencia de curvatura o falta de ajuste del modelo.

En este trabajo no se presentan los diseños de primer orden ya que en la mayoría de los procesos existen efectos de interacción. Se recomienda la lectura del libro de Khuri y Cornell [28], así como el libro de Myers y Montgomery [38] si se desea conocer la estructuras de los diseños mencionados.

### Diseños de segundo orden

Los diseños de segundo orden son aquellos que permiten estudiar a los efectos cuadráticos o de curvatura, además de los efectos lineales y de interacción. Este tipo de diseños se emplean cuando se quiere explorar una región que se espera que tengan una estructura compleja o cuando se cree que el punto óptimo pudiera estar dentro de la región experimental. El modelo de segundo orden, el cual se quiere analizar con los diseños de segundo orden, está dado por

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon. \quad (2.1)$$

Para poder realizar la detección de curvatura alrededor de un óptimo requiere que los niveles de los factores involucrados sean al menos tres. Es deseable que estos diseños sean ortogonales, es decir que las columnas de la matriz de diseño son independientes entre sí, aunque no es fácil que cumplan esta propiedad. Los diseños mas utilizados cumplen con la propiedad de ser rotables, es decir que la varianza de la respuesta estimada sobre un punto depende de la distancia de éste al centro del diseño y no de la dirección en la que se encuentra. Existen varios diseños de segundo orden, pero sólo serán presentados los dos diseños más recomendados: el diseño de Box-Behnken y el diseño central compuesto.

**Box-Behnken** Este diseño fue desarrollado por Box y Behnken [3]. Un diseño de Box-Behnken se forma combinando diseños factoriales en dos niveles con los diseños en bloques incompletos balanceados (DBIB). La forma de combinar los dos tipos de diseños mencionados se muestra a continuación, construyendo el diseño Box-Behnken para tres factores.

**Box-Behnken para tres factores** Primero se obtienen las posibles combinaciones de los 3 factores en bloques de dos factores, dando como resultado  $\binom{3}{2} = \frac{3!}{2!(3-2)!} = 3$  factores (B1, B2, B3).

Se señalan con un asterisco las combinaciones que se prueban, con lo cual se obtiene la siguiente tabla:

	$X_1$	$X_2$	$X_3$
B1	*	*	
B2		*	*
B3	*		*

Como segundo paso, este DBIB se combina con el diseño  $2^2$  de la siguiente manera: los dos asteriscos en cada bloque se reemplazan por las dos columnas del factorial  $2^2$ ; en los espacios en blanco se ponen columnas de ceros. El diseño Box-Behnken se completa agregando un tratamiento extra en cada bloque, el cual es la combinación de los tres factores en su nivel intermedio y es referido como réplica al centro. Gráficamente, este diseño se encuentra representado en la Figura 2.1.

Cabe notar que el diseño Box-Behnken es de mucha utilidad debido a que permite realizar la estimación de un modelo de segundo orden con relativamente pocas corridas. También hay que mencionar que este tipo de diseños no considera condiciones experimentales extremas (con tres factores, no se consideran las corridas (-1,-1,-1) o (1, 1, 1), entre otras).

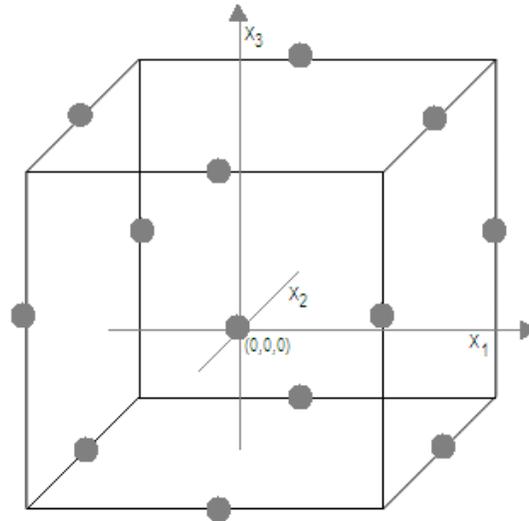


Figura 2.1: Representación Gráfica del diseño de Box-Behnken para tres factores

**Central compuesto** El diseño central compuesto (DCC) es, quizás, el mas popular de los diseños de segundo orden y fue introducido por Box y Wilson [6]. Se puede construir a partir de un diseño factorial completo  $2^k$  o fraccionado  $2^{k-p}$  al que se le agregan 2 puntos sobre cada uno de los ejes a una misma distancia,  $\alpha$ , y se completa con réplicas al centro. Tanto el total de corridas al centro, así como la distancia de los puntos axiales ( $\alpha$ ) deben escogerse de manera adecuada dependiendo de las cualidades que se quieran del diseño. Si se desea que el diseño sea rotable, se toma

$$\alpha = (2^{k-p})^{1/4}.$$

Si se desea que el DCC sea ortogonal se considera

$$\alpha = \left( \frac{(2^{k-p} * T)^{1/2} - 2^{k-p}}{2} \right)^{1/2}$$

donde  $T$  es el número total de corridas experimentales,  $T = 2^{k-p} + 2k + n_0$ , con  $p = 0$  en caso de que el DCC se obtenga de un diseño factorial completo, y  $n_0$  es el número de repeticiones al centro.

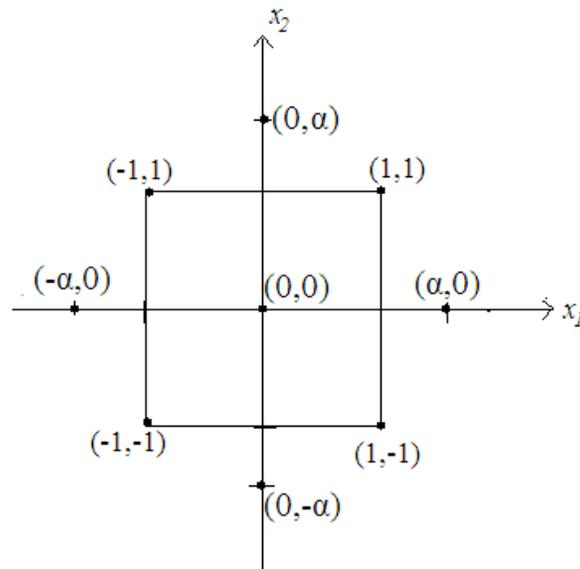


Figura 2.2: Diseño central compuesto para dos factores.

Si se desea que el DCC sea ortogonal y rotable, se debe cumplir

$$\alpha = (2^{k-p})^{1/4} \quad \text{y} \quad n_0 \simeq 4\sqrt{(2^{k-p}) + 4} - 2^{k-p}.$$

El DCC para dos factores se muestra gráficamente en la Figura 2.2.

## 2.3 Modelación

Una vez realizado el experimento y observadas las respuestas es necesario obtener una aproximación apropiada de la verdadera superficie de respuesta. Se sabe que cuando se mide el valor de la respuesta de interés es muy poco probable que se observe el verdadero valor de la variable, lo cual se debe a la existencia de variabilidad. Como no se conoce la ley que rige el comportamiento de la variable de interés como función de los factores de control, debe de estimarse un modelo a partir de los datos experimentales. Es aquí donde comienza el trabajo del estadístico a fin de que el proceso de modelación sea tal que se obtenga la mejor aproximación a la realidad, considerando todos los aspectos que puedan afectar en esta labor.

### 2.3.1 Problema de superficie multi-respuesta

Supóngase existen  $r$  respuestas,  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_r)$ , las cuales son determinadas por un conjunto de  $k$  variables de control  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ . Un problema de superficie multi-respuesta es definido formalmente como

$$y_j = f_j(x_1, x_2, \dots, x_k) + \varepsilon_j, \quad j = 1, 2, \dots, r,$$

donde  $f_j$  denota la función de respuesta entre la  $j$ -ésima respuesta y las variables de control, y  $\varepsilon_j$  es un vector aleatorio. La forma exacta de  $f_j$  es usualmente desconocida pero puede ser estimada sobre una región experimental limitada usando técnicas de modelación tal como regresión.

### 2.3.2 Modelo lineal multi-respuesta

A continuación definimos el modelo lineal multi-respuesta como lo definen Khuri y Cornell [28]. Sea  $n$  el número de corridas experimentales y sea  $r$  el número de respuestas que pueden ser medidas para un grupo de  $k$  variables de control codificadas,  $x_1, x_2, \dots, x_k$ . El modelo lineal univariado para  $i$ -ésima respuesta puede ser escrito vectorialmente de la siguiente forma

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i, \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad (2.2)$$

donde  $\mathbf{y}_i$  es un vector de  $n \times 1$  observaciones para la  $i$ -ésima respuesta,  $\mathbf{X}_i$  es una matriz  $n \times p_i$  de funciones conocidas de las variables del diseño,  $\boldsymbol{\beta}_i$  es un vector  $p_i \times 1$  de parámetros desconocidos y  $\boldsymbol{\varepsilon}_i$  es el vector aleatorio de errores asociado a la  $i$ -ésima respuesta.

Para estos  $r$  modelos, se puede asumir que los errores para cualquier modelo individual tienen varianzas constantes pero que los errores en diferentes modelos son correlacionados. Matemáticamente, esto significa que

$$E(\boldsymbol{\varepsilon}_i) = \mathbf{0} \quad (2.3)$$

$$\text{var}(\boldsymbol{\varepsilon}_i) = \sigma_{ii}^2 \mathbf{I}_n$$

$$\text{cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_k) = \sigma_{ik}^2 \mathbf{I}_n \quad i, k = 1, 2, \dots, r; \quad i \neq k$$

Los  $r$  modelos de regresión dados en la ecuación (2.2) pueden ser representados en forma matricial como

$$\tilde{\mathbf{Y}} = \tilde{\mathbf{X}} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.4)$$

donde  $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}'_1 : \mathbf{y}'_2 : \dots : \mathbf{y}'_r]'$ ,  $\boldsymbol{\beta} = [\boldsymbol{\beta}'_1 : \boldsymbol{\beta}'_2 : \dots : \boldsymbol{\beta}'_r]'$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\boldsymbol{\varepsilon}'_1 : \boldsymbol{\varepsilon}'_2 : \dots : \boldsymbol{\varepsilon}'_r]'$ , y  $\tilde{\mathbf{X}}$  es la matriz diagonal por bloques,  $\tilde{\mathbf{X}} = \text{diag}(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_r)$ .

Cabe notar que este modelo permite que las matrices  $\mathbf{X}_i$  sean diferentes para cada uno de los modelos en (2.2).

### 2.3.3 Mínimos cuadrados Ordinarios

En el caso en el que los modelos para cada una de las respuestas tienen la misma forma y toman en consideración el mismo conjunto de variables de diseño  $x_1, x_2, \dots, x_k$ , entonces los estimadores para cada uno de los  $\boldsymbol{\beta}'_i$  corresponden a los estimadores obtenidos mediante el método de mínimos cuadrados. En el caso anterior se tiene también que para cada respuesta,  $p_i = p$ .

El método de mínimos cuadrados ordinarios (OLS) escoge los  $\boldsymbol{\beta}_i$  en (2.2) tal que la suma de los cuadrados del error sean minimizada. El estimador OLS de  $\boldsymbol{\beta}_i$  es

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_i = (\mathbf{X}'_i \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{X}'_i \mathbf{y}_i, \quad i = 1, 2, \dots, r.$$

El estimador OLS  $\hat{\boldsymbol{\beta}}_i$  es un estimador insesgado de  $\boldsymbol{\beta}_i$ . La matriz de covarianza de  $\hat{\boldsymbol{\beta}}_i$  está dada por:

$$\text{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_i) = \sigma_i^2 (\mathbf{X}'_i \mathbf{X}_i)^{-1}, \quad i = 1, 2, \dots, r$$

donde  $\sigma_i^2$  es la varianza del error aleatorio de la  $i$ -ésima respuesta. El estimador de  $\sigma_i^2$  está dado por:

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{SCE_i}{n - p}, \quad i = 1, 2, \dots, r \quad (2.5)$$

donde  $SCE_i$  es la suma del cuadrado del error para el modelo para la  $i$ -ésima respuesta.

### 2.3.4 Mínimos cuadrados generalizados

Puede darse la situación en que no se cumpla el supuesto de varianza constante dado por (2.3), por lo que una alternativa es obtener estimadores para los modelos mediante el uso de la metodología de mínimos cuadrados generalizados (GLS). En notación matricial, los estimadores de mínimos cuadrados generalizados está dado por

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_i = (\mathbf{X}'_i \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{X}'_i \mathbf{V}^{-1} \mathbf{y}_i \quad (2.6)$$

donde

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} 1/w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1/w_n \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

suponiendo que  $\text{var}(\varepsilon_{ij}) = \sigma_{ii}^2/w_i$  para pesos conocidos  $w_1, w_2, \dots, w_n$ .

### 2.3.5 Regresiones aparentemente no correlacionadas

El método de regresiones aparentemente no correlacionadas (SUR por sus siglas en ingles), es una técnica alternativa para calcular el estimador de  $\beta$  en (2.4). Dicho estimador fue presentado inicialmente por Zellner en 1962 [57]. Khuri y Cornell proponen este método para estimar  $\beta$  ante un modelo lineal multi-respuesta. En 2004, Shah *et al* [49] presentaron el estimador SUR como un método de optimización multi-respuesta bajo el argumento de que este procedimiento puede ser útil cuando las variables de respuesta son correlacionadas, ya que produce estimadores parametrales mas precisos que los obtenidos mediante el uso de OLS, en el sentido de que se obtienen varianzas y covarianzas mas pequeñas para el estimador de  $\beta$ , lo cual implica una mayor precisión de las condiciones optimas de operación del proceso a estudiar. Sin embargo, como se verá mas adelante, el uso de este método para estimar  $\beta$  provee resultados que pueden resultar desfavorables, tal como es el aumento del cuadrado medio del error en las respuestas estimadas, así como la reducción del coeficiente de determinación  $R^2$ .

Se considera el modelo lineal multivariado (2.4). De los supuestos en (2.3) se tiene que

$$\text{var}(\varepsilon) = \Sigma \otimes \mathbf{I}_n$$

donde  $\otimes$  denota el producto de Kronecker. El mejor estimador lineal insesgado (BLUE) de  $\hat{\beta}$  está dado por

$$\hat{\beta} = \left[ \tilde{\mathbf{X}}' (\Sigma \otimes \mathbf{I}_n)^{-1} \tilde{\mathbf{X}} \right]^{-1} \tilde{\mathbf{X}}' (\Sigma \otimes \mathbf{I}_n)^{-1} \tilde{\mathbf{Y}}. \quad (2.8)$$

y su respectiva matriz de varianza-covarianza es

$$\text{var}(\hat{\beta}) = \left[ \tilde{\mathbf{X}}' (\Sigma \otimes \mathbf{I}_n)^{-1} \tilde{\mathbf{X}} \right]^{-1}. \quad (2.9)$$

Las ecuaciones (2.8) y (2.9) requieren del conocimiento de  $\Sigma$ . Si  $\Sigma$  es desconocida, como usualmente es el caso, entonces puede reemplazarse  $\Sigma$  en (2.8) por un estimador  $\hat{\Sigma}$  dado tal que

sea no singular. Zellner [57] propuso un estimador para  $\Sigma$  el cual está dado por  $\hat{\Sigma}^* = (\hat{\sigma}_{ij}^*)$ , donde

$$\hat{\sigma}_{ij}^* = \frac{\mathbf{Y}'_i \left[ \mathbf{I}_n - \mathbf{X}_i (\mathbf{X}'_i \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{X}'_i \right] \left[ \mathbf{I}_n - \mathbf{X}_j (\mathbf{X}'_j \mathbf{X}_j)^{-1} \mathbf{X}'_j \right] \mathbf{Y}_j}{n}, \quad i, j = 1, 2, \dots, r.$$

Usando este estimador de  $\Sigma$  en (2.8), se obtiene el siguiente estimador

$$\hat{\beta}^* = \left[ \tilde{\mathbf{X}}' \left( \hat{\Sigma}^* \otimes \mathbf{I}_n \right)^{-1} \tilde{\mathbf{X}} \right]^{-1} \tilde{\mathbf{X}}' \left( \hat{\Sigma}^* \otimes \mathbf{I}_n \right)^{-1} \tilde{\mathbf{Y}}.$$

El estimador SUR tiene una importante propiedad: existen dos situaciones en las que el estimador  $\hat{\beta}^*$  coincide con los parámetros estimados que se obtienen aplicando el método de mínimos cuadrados a cada una de las respuestas. Estas dos situaciones son:

(a) existe cero correlación entre los errores del modelo y (a) los modelos para cada respuesta tiene la misma forma del modelo y envuelven el mismo conjunto de variables de diseño.

Shah *et al* proponen incluir en los modelos para cada una de las respuestas solamente las variables que son significativas con  $\alpha = 0.05$ .

### 2.3.6 Respuestas estimadas

Sea  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  la respuesta predicha en el punto  $\mathbf{x}$  de interés en la región experimental. La media estimada de la respuesta predicha en este punto es

$$\hat{y}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{f}'(\mathbf{x}) \hat{\beta}_i. \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad (2.10)$$

donde  $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_r]'$  y  $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$  es un vector horizontal de dimensión  $p$  cuyo primer componente es uno y el resto de los  $p - 1$  componentes consiste en potencias y productos cruzados de potencias de  $x_1, x_2, \dots, x_r$  según esté dado por el modelo polinomial. En el caso en que  $k = 2$ , y para un polinomio de segundo grado, se tiene  $\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1 x_2)$ . Si en (2.2) se asume que la matriz de diseño es la misma para cada una de las respuestas, es decir que  $\mathbf{X} = \mathbf{X}_1 = \mathbf{X}_2 = \dots = \mathbf{X}_r$ , entonces el modelo lineal univariado para cada respuesta puede ser escrito como

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X} \beta_i + \varepsilon_i.$$

De este modo, y de la ecuación (2.10), se tiene que

$$\begin{aligned} \text{var} [\hat{y}_i(\mathbf{x})] &= \mathbf{f}'(\mathbf{x}) (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \sigma_{ii}, \quad i = 1, 2, \dots, r, \\ \text{cov} [\hat{y}_i(\mathbf{x}), \hat{y}_j(\mathbf{x})] &= \mathbf{f}'(\mathbf{x}) (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \sigma_{ij}, \quad i \neq j = 1, 2, \dots, r, \end{aligned}$$

donde  $\sigma_{ij}$ , también llamado  $\sigma_i^2$  para el caso en que  $i = j$ , es el elemento  $(i, j)$  de la matriz de varianza-covarianza  $\Sigma$ . Así se tiene que

$$\text{var} [\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})] = \mathbf{f}'(\mathbf{x}) (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \Sigma, \quad (2.11)$$

donde  $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) = [\hat{y}_1(\mathbf{x}), \hat{y}_2(\mathbf{x}), \dots, \hat{y}_r(\mathbf{x})]'$ . Un estimador insesgado de  $\text{var} [\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})]$  esta dado por (2.11) con  $\hat{\Sigma}$  substituyendo a  $\Sigma$  donde

$$\hat{\Sigma} = \frac{\mathbf{Y}' [\mathbf{I}_n - \mathbf{X} (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'] \mathbf{Y}}{n - p} \quad (2.12)$$

donde  $\mathbf{Y} = [y_1, y_2, \dots, y_r]$ ,  $\mathbf{I}_n$  es una matriz identidad de orden  $n \times n$ .

### Estimación por intervalo

Al estar considerando un proceso aleatorio hay que tomar en consideración la variabilidad del mismo al momento de estimar una respuesta, lo cual es posible hacerlo mediante el uso de intervalos de confianza para esta última. Considérese un punto de interés  $\mathbf{x}$  para el cual se pretende encontrar una región para el predicho para una respuesta  $i$ , el cual estará dado por (2.10) con varianza (2.11). Un intervalo de confianza del  $100(1 - \alpha)\%$  para el valor esperado de la respuesta  $i$  en el punto  $\mathbf{x}$  es

$$\hat{y}_i(\mathbf{x}) - t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\mathbf{f}'(\mathbf{x}) (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \hat{\sigma}_i} \leq E(y_i|\mathbf{x}) \leq \hat{y}_i(\mathbf{x}) + t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\mathbf{f}'(\mathbf{x}) (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \hat{\sigma}_i}.$$

Una de las aplicaciones más útiles del modelo de regresión es la de predecir observaciones futuras, las cuales son independientes de las observaciones que fueron utilizadas en la estimación del modelo. Si se quiere predecir un valor futuro de las variables de respuesta en un punto  $\mathbf{x}_0$ , entonces una estimación de la observación futura en el punto referido está dada por

$$\hat{y}_i(\mathbf{x}_0) = \mathbf{f}'(\mathbf{x}_0) \hat{\beta}_i$$

para la cual puede demostrarse que un *intervalo de predicción* al  $100(1 - \alpha)\%$  es

$$\hat{y}_i(\mathbf{x}_0) - t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\left(1 + \mathbf{f}'(\mathbf{x}) (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x})\right) \hat{\sigma}_i} \leq$$

$$E(y_i|\mathbf{x}) \leq \hat{y}_i(\mathbf{x}) + t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\left(1 + \mathbf{f}'(\mathbf{x}) (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x})\right) \hat{\sigma}_i}.$$

## 2.4 Optimización

Una vez que se cuenta con una buena aproximación de la superficie de respuesta el siguiente paso es encontrar las condiciones óptimas de operación del proceso, que son las que dan por resultado valores óptimos de una o varias características de calidad del producto. Estas condiciones óptimas deben cumplir con estar dentro de ciertas regiones, las cuales se describen a continuación.

Para un proceso en específico hay que considerar los valores que pueden tomar cada uno de los factores que intervienen en el mismo, es decir, el conjunto de puntos donde el equipo o proceso puede ser operado. A esta región se le conoce como *región de operabilidad*,  $O$ , y para delimitarla adecuadamente habría de estudiar bien las especificaciones del aparato mediante el cual se lleva a cabo el proceso. En la práctica puede ser difícil realizar el experimento en toda la región de operabilidad, por lo que esta se restringe a una región más pequeña, llamada *región experimental* o *región de interés*, llamada  $\mathfrak{R}$ , y es el espacio delimitado por los rangos de experimentación utilizados con cada factor. Se supone que en ésta región la verdadera superficie de respuesta puede ser aproximada por una función polinomial (en nuestro caso por polinomios de primer o segundo orden) y por lo mismo las conclusiones que se obtengan del experimento sólo tienen validez dentro de esta región. Típicamente la región experimental es una región cúbica, para el caso en que el diseño experimental solo considera los valores centrales, alto y bajo de los factores; o una región esférica, en la que se consideran puntos experimentales fuera de los descritos para la región cúbica. En este último caso  $\mathfrak{R}$  está formada por los vectores  $\mathbf{x}$  tales que  $\mathbf{x}'\mathbf{x} \leq R^2$ , donde  $R$  es el radio experimental tal que describe a la hipersfera más pequeña que contiene todos los puntos experimentales contenidos en la matriz de diseño.

En MSR el punto óptimo es el mejor tratamiento dentro de la región de operabilidad, aunque el encontrar este punto puede requerir de necesitar varios experimentos en forma secuencial y de otras técnicas de análisis. Por esta situación en este trabajo vamos a buscar el mejor punto posible dentro de la región experimental.

Aclarado esto, podemos decir que la etapa de optimización consiste en hacer uso de técnicas matemáticas o gráficas a fin de, dado un modelo ajustado para la superficie de respuesta, explorarlo para obtener información acerca del punto óptimo en  $\mathfrak{R}$ , esto para el caso de una sola respuesta.

Para el caso en el que se requiere optimizar simultáneamente un conjunto de respuestas, entonces se hará un planteamiento de optimización, para luego, mediante el uso de las técnicas de optimización, llegar a un óptimo global.

### 2.4.1 Óptimos individuales

Como se menciono anteriormente, es de suma importancia identificar las condiciones que hacen que se obtenga un valor óptimo en la variable de respuesta estimada. Una vez que se haya planteado un diseño de segundo orden para las variables de respuesta se procede a encontrar un óptimo individual para cada una de dichas variables. El modelo presentado en (2.1), ya ajustado a los datos obtenidos en el experimento se representa como

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \hat{\beta}_{ij} x_i x_j. \quad (2.13)$$

La ecuación (2.13) se utilizará para encontrar el valor óptimo, para lo cual se describe en forma matricial

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{x}'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} \quad (2.14)$$

donde  $\mathbf{x}$  representa el vector de factores codificados, la componentes del vector  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  son los estimadores de los parámetros correspondientes a los términos lineales de los factores, es decir

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}' = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_k)$$

y  $\hat{\mathbf{B}}$  representa una matriz cuyos elementos son los estimadores de los parámetros que corresponden a los términos cuadráticos, según

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \dots & \frac{\hat{\beta}_{1k}}{2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\hat{\beta}_{k1}}{2} & \dots & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}.$$

El problema de optimización que se desea resolver es

$$\begin{array}{ll} \text{Optimizar} & \hat{y}(\mathbf{x}) \\ \text{Sujeto a} & \mathbf{x} \in \mathcal{R}. \end{array}$$

Para resolver este problema se diferencia  $\hat{y}(\mathbf{x})$  con respecto de  $\mathbf{x}$ , obteniendo que

$$\frac{\partial \hat{y}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \hat{\beta} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

de donde se tiene que, igualando a cero, un punto estacionario está dado por

$$\mathbf{x}_* = \frac{-\hat{\mathbf{B}}^{-1}\hat{\beta}}{2}.$$

Ahora se requiere revisar la naturaleza de este punto estacionario, es decir, saber si  $\mathbf{x}_*$  corresponde a un mínimo, máximo o punto silla de la superficie. La metodología utilizada para conocer la naturaleza del punto estacionario se conoce como *análisis canónico*.

Simplificamos el modelo de modo que desaparezcan los términos correspondientes a términos cruzados (interacciones), esto lo hacemos rotando el sistema original a un nuevo sistema. Se puede mostrar (véase Myers y Montgomery [38]) que una representación adecuada de la superficie de respuesta, llamada forma canónica de la superficie, es

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \hat{y}_*(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2$$

donde  $\hat{y}_*(\mathbf{x})$  es el valor estimado de la respuesta en el punto estacionario  $\mathbf{x}_*$  de la superficie de respuesta, las  $w_i$  representan los nuevos factores (determinados por los vectores propios de  $\hat{\mathbf{B}}$ ) y las  $\lambda_i$  son constantes (dados por los valores propios de  $\hat{\mathbf{B}}$ ). Se sabe que los valores característicos dan la siguiente información:

- Si todos los  $\lambda_i < 0$  se tendrá un máximo en  $\mathbf{x}_*$ .
- Si todos los  $\lambda_i > 0$  se tendrá un mínimo en  $\mathbf{x}_*$ .
- Si hay combinaciones de  $\lambda$ 's positivas y negativas, se tendrá un punto silla en  $\mathbf{x}_*$ .

Cuando se tiene un punto silla es necesario encontrar la dirección en la que se encuentra el valor óptimo. Esta búsqueda se hace con el llamado *análisis de cordillera* (para más detalles el lector puede consultar [16]). Para esto se considera el modelo ajustado (2.14). Se desea maximizar  $\hat{y}(\mathbf{x})$  sujeto a la condición

$$\mathbf{x}'\mathbf{x} = R^2.$$

Usando multiplicadores de Lagrange, es necesario diferenciar

$$L(\mathbf{x}) = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}'\hat{\beta} + \mathbf{x}'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} - \mu(\mathbf{x}'\mathbf{x} - R^2)$$

con respecto al vector  $\mathbf{x}$ . La derivada  $\frac{\partial L(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$  está dada por

$$\frac{\partial L(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \hat{\boldsymbol{\beta}} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} - 2\mu\mathbf{x}.$$

Para determinar el punto estacionario restringido se resuelve la ecuación  $\frac{\partial L(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = 0$ , de donde resulta

$$\left(\hat{\mathbf{B}} - \mu\mathbf{I}\right)\mathbf{x} = -\frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\beta}}. \quad (2.15)$$

La selección de  $\mu$  está dada por las siguientes reglas:

1. Si  $\mu$  excede al eigenvalor más grande de  $\hat{\mathbf{B}}$ , la solución  $\mathbf{x}$  en (2.15) resulta un máximo absoluto para  $\hat{y}(\mathbf{x})$  en  $\mathbf{x}'\mathbf{x} = R^2$ .
2. Si  $\mu$  es más pequeño que el eigenvalor más pequeño de  $\hat{\mathbf{B}}$ , la solución  $\mathbf{x}$  en (2.15) resulta un mínimo absoluto para  $\hat{y}(\mathbf{x})$  en  $\mathbf{x}'\mathbf{x} = R^2$ .

El punto óptimo,  $\mathbf{x}_0 = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ , se encuentra al sustituir diferentes valores de  $\mu$  hasta encontrar el punto donde la respuesta predicha alcanza el punto óptimo dentro de la región experimental (aunque se puede ser un poco más flexible si el proceso lo permite y si se tiene un coeficiente de determinación alto para el modelo).

### 2.4.2 Estrategia de optimización multi-respuesta

El problema de optimización con múltiples respuestas consiste en determinar la mejor combinación de los factores tal que produzcan el óptimo global, es decir que todas las respuestas den su mejor valor. El planteamiento más general del problema de optimización en presencia de  $i$  objetivos:  $O_i$  flexibles  $i = 1, \dots, r$  y  $l$  restricciones  $g_l(x)$ , en el caso  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}$ ,  $\mathfrak{R}$ : región experimental, se define así:

$$\begin{aligned} &\text{Optimizar} && [y_1, y_2, \dots, y_r], \\ &\text{Sujeto a} && g_l(\mathbf{x}), l = 1, 2, \dots, m. \\ &&& \mathbf{x} \in \mathfrak{R}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde cada una de las  $y_i$  es un vector de observaciones en los  $n$  tratamientos.

Una forma en que generalmente se plantea el problema de programación multi-respuesta es como sigue:

$$\begin{array}{ll}
\text{Optimizar} & y_1. \\
\text{Sujeto a} & y_2 = O_1, \\
& \dots \\
& y_r = O_{r-1}, \\
& \mathbf{x} \in \mathcal{R}
\end{array} \tag{2.17}$$

donde los  $O_i$  ( $i = 1, \dots, r - 1$ ) representan consideraciones importantes o restricciones para las respuestas.

A pesar de que el planteamiento que realmente se desea resolver es el de optimizar simultáneamente las  $r$  respuestas según 2.16, la mayoría de las propuestas hechas para resolver el problema multi-respuesta lo reducen a un problema de optimización simple mediante una transformación que contiene a las  $r$  respuestas en una sola, por lo que el planteamiento de optimización que se tiene es el siguiente

$$\begin{array}{ll}
\text{Optimizar} & f(y_1, y_2, \dots, y_r) \\
\text{Sujeto a} & \mathbf{x} \in \mathcal{R}.
\end{array}$$

La transformación  $f$  utilizada puede ser aditiva o multiplicativa, en la que además se incluyen pesos para cada una de las variables.

Como resultado de la estrategia experimental las respuestas  $y_i$  se sustituyen por los mejores modelos estimados para cada una de ellas.

## 2.5 Planteamientos de optimización multi-respuesta

El problema que nos atañe es el de optimizar simultáneamente un conjunto de respuestas de interés. Para este fin se han propuesto diversos métodos, que en realidad resultan ser planteamientos de optimización. Los métodos de optimización multi-respuesta se pueden dividir en métodos analíticos y el método gráfico, el cual será tratado con más detalle en capítulos subsecuentes. Se puede decir que todos los procedimientos multi-respuesta analíticos que han sido planteados tienen algo en común: de alguna manera reducen el problema multivariado a un problema en el se busca optimizar una sola variable, la cual esta dada como una transformación (ya sea aditiva o multiplicativa) de las variables originales. Otra similitud que tienen algunos de estos planteamientos es que permiten ponderar las variables de respuesta de acuerdo a su importancia relativa, aunque, como se verá más adelante, no hay claridad en la elección de dichos pesos. A continuación se describen algunos de los métodos multi-respuesta.

### 2.5.1 Función de deseabilidad

Esta técnica de optimización multi-respuesta fue propuesta inicialmente por Harrington (1965) y posteriormente modificada por Derringer y Suich (1980). El método consiste en definir una función de deseabilidad para cada una de las variables de respuesta  $y$ , a partir de estas últimas, se define una deseabilidad global, con lo que el problema de optimización multivariado se convierte en un problema de optimización univariado ya que se desea maximizar la deseabilidad global para obtener un punto óptimo.

Una vez que se tienen los modelos ajustados para cada una de las respuestas hay que definir la función de deseabilidad, tal que refleje los valores más deseados que el usuario tiene para dichas respuestas.

La función de deseabilidad implica transformaciones de cada una de las variables de respuesta estimadas  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  a un valor deseable  $d_i(\mathbf{x})$ , donde  $0 \leq d_i(\mathbf{x}) \leq 1$ . Si  $d_i(\mathbf{x}) = 1$ , significa que la correspondiente respuesta estimada  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  alcanza su máximo valor deseable; si  $d_i(\mathbf{x}) = 0$ , la respuesta toma un valor no deseado. Las deseabilidades individuales son combinadas usando la media geométrica para obtener una deseabilidad global

$$D(\mathbf{x}) = (d_1(\mathbf{x})^{w_1} \times d_2(\mathbf{x})^{w_2} \times \dots \times d_r(\mathbf{x})^{w_r})^{1/\sum w_i}. \quad (2.18)$$

donde los pesos  $w_i$  son constantes que balancean la importancia relativa de cada variable.

Esta elección es lógica ya que si alguna  $d_i(\mathbf{x}) = 0$ , la deseabilidad global será  $D(\mathbf{x}) = 0$ , indicando que el producto total es inaceptable, además de que  $w_i$  son constantes que permiten balancear la importancia relativa de cada variable.

El planteamiento de optimización multi-respuesta basado en la función de deseabilidad es el siguiente

$$\max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}} D(\mathbf{x}). \quad (2.19)$$

La función de deseabilidad puede especificarse con transformaciones de una o dos colas, dependiendo de si la respuesta desea maximizarse, minimizarse o si se desea un valor objetivo, según la propuesta de Derringer y Suich [15]. Otra posibilidad es transformar las respuestas exponencialmente, según la sugerencia de Harrington [20].

#### Transformación de una cola

Para el caso en que se desea maximizar la respuesta  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$ , debe escogerse un valor  $T_i$  de tal forma que  $d_i(\mathbf{x}) = 1$  para cualquier  $\hat{y}_i(\mathbf{x}) > T_i$ . Además se supone que cualquier  $\hat{y}_i(\mathbf{x}) < LIE_i$ , donde

$LIE_i$  es conocido como el límite de especificación inferior, es un valor inaceptable, es decir que  $d_i(\mathbf{x}) = 0$ . Entonces la transformación está dada por

$$d_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \hat{y}_i(\mathbf{x}) \leq LIE_i \\ \left[ \frac{\hat{y}_i(\mathbf{x}) - LIE_i}{T_i - LIE_i} \right]^s & LIE_i < \hat{y}_i(\mathbf{x}) < T_i \\ 1 & \hat{y}_i(\mathbf{x}) \geq T_i . \end{cases} \quad (2.20)$$

El valor de  $s$  usado en la transformación, debe ser especificado por el usuario. En la Figura 2.3 se puede ver que si se toman valores grandes de  $s$ ,  $d_i(\mathbf{x})$  sólo toma valores grandes cuando  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  cae cerca de su valor objetivo. Si se toman valores pequeños para  $s$  entonces se tiene que cualquier valor de  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  que este dentro del intervalo  $[LIE_i, T_i]$  es igualmente deseable. Cuando no se cuenta con información acerca del valor que se debe asignar a  $s$ , se recomienda asignar el valor 1 a dicho exponente, lo cual sugiere un incremento lineal de la deseabilidad hacia el valor objetivo.

Para el caso en que se requiere minimizar la respuesta, de igual forma se selecciona un valor objetivo  $T_i$  tal que si  $\hat{y}_i(\mathbf{x}) < T_i$ ,  $d_i(\mathbf{x}) = 1$ ; además  $LSE_i$  es el valor más grande aceptable (también conocido como límite superior de especificación), es decir que si  $\hat{y}_i(\mathbf{x}) > LSE_i$  se tiene que  $d_i(\mathbf{x}) = 0$ . De este modo la función la transformación está dada por

$$d_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \hat{y}_i(\mathbf{x}) \geq LSE_i \\ \left[ \frac{\hat{y}_i(\mathbf{x}) - LSE_i}{T_i - LSE_i} \right]^s & T_i < \hat{y}_i(\mathbf{x}) < LSE_i \\ 1 & \hat{y}_i(\mathbf{x}) \leq T_i . \end{cases} \quad (2.21)$$

Dicha transformación es presentada gráficamente en la Figura 2.4.

### Transformación de dos colas

Esta transformación se presenta cuando la  $i$ -ésima variable de respuesta es aceptable si

$$LIE_i < \hat{y}_i(\mathbf{x}) < LSE_i.$$

Además se tiene que en este intervalo el valor más deseable de la respuesta es  $T_i$ . La transformación, en este caso, es

$$d_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \hat{y}_i(\mathbf{x}) < LIE_i \text{ o } \hat{y}_i(\mathbf{x}) > LSE_i \\ \left[ \frac{\hat{y}_i(\mathbf{x}) - LIE_i}{T_i - LIE_i} \right]^t & LIE_i \leq \hat{y}_i(\mathbf{x}) \leq T_i \\ \left[ \frac{\hat{y}_i(\mathbf{x}) - LSE_i}{T_i - LSE_i} \right]^u & T_i < \hat{y}_i(\mathbf{x}) \leq LSE_i \end{cases} \quad (2.22)$$

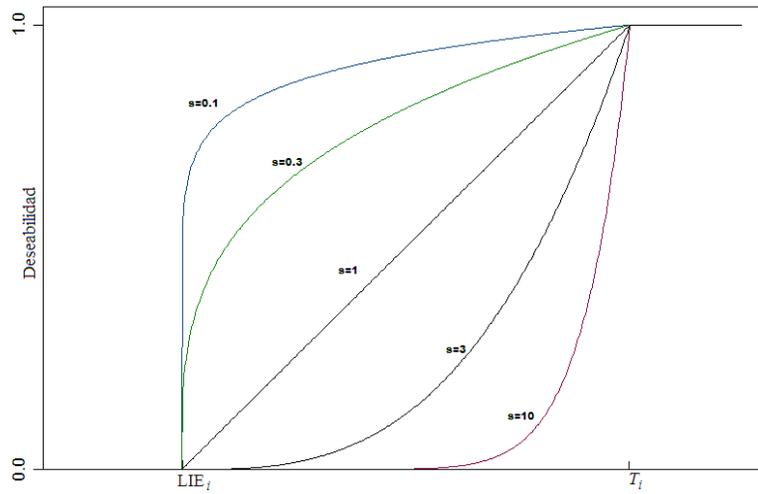


Figura 2.3: Función de desabilidad transformada de una cola para varios valores de  $s$  (maximización).

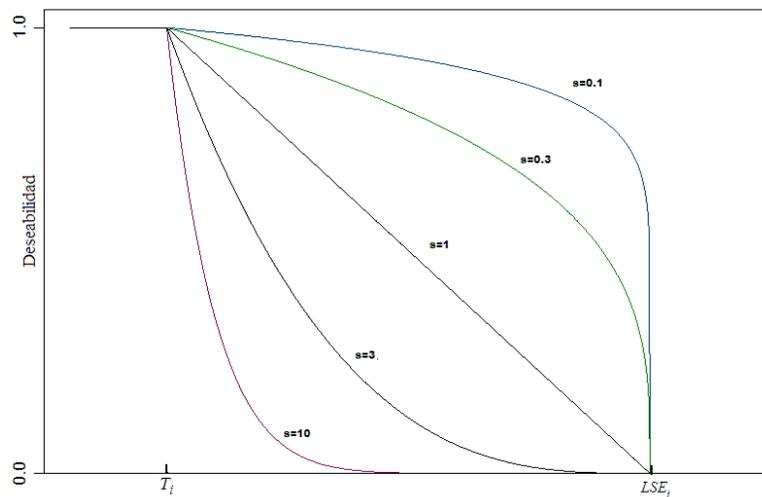


Figura 2.4: Función de desabilidad transformada de una cola para varios valores de  $s$  (minimización).

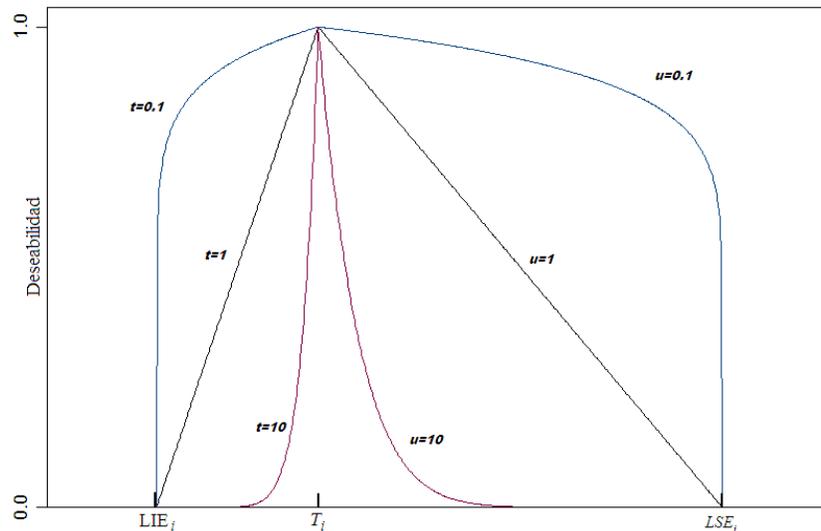


Figura 2.5: Función de deseabilidad transformada en dos colas.

donde  $t$  y  $u$  en la transformación de dos colas juegan el mismo rol que tiene  $s$  en la transformación de una cola.

En la Figura 2.5 se muestran distintos valores para  $t$  y  $u$ . En esta figura también se muestra que valores grandes para  $t$  y  $u$  serían seleccionados si es muy deseable que el valor de  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  sea muy cercano a  $T_i$ . Por otro lado, si casi cualquier valor que esté entre los dos límites de especificación fueran aceptables, entonces valores pequeños para  $t$  y  $u$  serían elegidos. También se pueden tomar combinaciones para los valores de  $t$  y  $u$  (valor pequeño para  $t$  y valor grande para  $u$ , o viceversa) en caso de que los valores a la izquierda (o a la derecha, según sea el caso) del valor  $T_i$  fueran aceptables, dentro de los límites de especificación, y los demás valores no lo fueran.

### Transformación exponencial

Harrington [20] propuso una transformación exponencial con el fin de establecer las deseabilidades individuales para cada respuesta. Dicha transformación, al igual que en la propuesta de Derringer y Suich, depende de si se quiere maximizar, minimizar la respuesta, o en su caso, que ésta tome un valor objetivo. Para este último criterio se propone reescalar cada una de las variables de respuesta estimadas como sigue

$$\hat{y}_i(\mathbf{x})' = \frac{2\hat{y}_i(\mathbf{x}) - (LSE_i + LIE_i)}{LSE_i - LIE_i}.$$

La transformación exponencial de dos colas propuesta para obtener la deseabilidad es

$$d_i(\mathbf{x}) = \exp(-|\hat{y}'_i(\mathbf{x})|^m). \quad (2.23)$$

Esta deseabilidad alcanza su valor máximo cuando la respuesta estimada se encuentra en el valor objetivo de la misma, esto suponiendo que dicho valor sea el punto medio entre los límites de especificación. El valor  $m$  es un entero cuya elección determina la relación entre la respuesta y el valor target: para  $m$  grande no es necesario que la respuesta esté muy cercana al valor objetivo, contrario a la situación en la que escogen valores pequeños de  $m$ .

La transformación de una cola, para cuando se requiere minimizar o maximizar la respuesta, esta dada por

$$d_i(\mathbf{x}) = \exp\left(-e^{-\hat{y}'_i(\mathbf{x})}\right) \quad (2.24)$$

donde la transformación de  $\hat{y}(\mathbf{x})$  a  $\hat{y}'(\mathbf{x})$  es obtenida seleccionando dos valores de la respuesta y asignándoles niveles de deseabilidad. Estos niveles son transformados a su equivalente  $\hat{y}'(\mathbf{x})$  por la ecuación

$$\hat{y}'_i(\mathbf{x}) = -[\ln - \ln d].$$

De estos pares de valores de  $\hat{y}(\mathbf{x})$  y  $\hat{y}'(\mathbf{x})$ , la ecuación lineal de la forma  $\hat{y}'(\mathbf{x}) = b_0 + b_1\hat{y}(\mathbf{x})$  es derivada calculando las constantes  $b_0$  y  $b_1$  por sustitución.

En cuanto a la deseabilidad global, (2.18) Harington propone pesos iguales unitarios.

### Escala para la deseabilidad.

Ninguna de las funciones derivadas de la deseabilidad propuestas han alcanzado una interpretación simple de la misma en base al rendimiento del proceso.

En fechas recientes Lazić (2004), presentó una escala para la deseabilidad, que es una modificación de la presentada por Ribaldo (2003), la cual pretende dar al experimentador una interpretación de los valores de la deseabilidad en términos de la calidad del producto. Los estándares para la deseabilidad se presentan en la Tabla 2.1.

Cabe mencionar que estos estándares para la deseabilidad fueron propuestos en base a las propiedades exponenciales de la deseabilidad, aunque pueden ser adoptados para la transformación dada por Derringer y Suich como una guía para los valores de la deseabilidad.

Tabla 2.1: Escala de deseabilidad en base al rendimiento del proceso

Valores	Escala	Calidad del Producto
1.00	Excelente	Lo esencial en satisfacción o calidad. La mejora más allá de este punto no tendrían ningún valor apreciable
0.80-1.00	Muy bueno	Aceptable y excelente, calidad o desempeño inusual, es mejor que lo disponible comercialmente.
0.63-0.80	Bueno	Aceptable y bueno, representa una mejora sobre la mejor calidad comercial.
0.37-0.63	Satisfactorio	Aceptable pero pobre. La calidad es aceptable para los límites de especificación, pero se desea que mejore.
0.20-0.37	Malo	Inaceptable. Los materiales con esta calidad conducirían a la falla del proceso.
0.00-0.20	Muy malo	Completamente inaceptable.

### Otras líneas de investigación

La función de deseabilidad, tal como la definieron Derringer y Suich, es la técnica de optimización multi-respuesta más popular debido su facilidad en cuanto a su aplicación, sin embargo la búsqueda del óptimo global es realizada mediante métodos de optimización numéricos debido a que las deseabilidades individuales no son diferenciables. En este sentido Del Castillo *et al* (1996) plantearon reemplazar las deseabilidades no diferenciables por sus equivalentes polinomios de cuarto orden diferenciables.

Como se menciona anteriormente, tanto Harrington como Derringer y Suich emplean la media geométrica para definir la deseabilidad global. También se ha propuesto el empleo de funciones aditivas para combinar las deseabilidades individuales, como el método del criterio global de Tabucanon (1988).

En 2000 Kim y Lin [29] propusieron maximizar el mínimo grado de deseabilidad.

Otro de los procedimientos que trabaja en base a las deseabilidades individuales propuestas por Derringer y Suich es el método de la deseabilidad iterativa de Jeong y Kim (2003)

#### 2.5.2 Función de deseabilidad como grado de satisfacción.

La propuesta hecha por Kim y Lin [29] es una formulación alternativa del procedimiento de la función de deseabilidad convencional para un problema multi-respuesta basado en maximizar la función de deseabilidad. Como se explicó anteriormente, el grado de satisfacción del experimentador con respecto a la  $i$ -ésima respuesta se maximiza cuando  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  toma el valor  $T_i$  y decrece según  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  se aleje de  $T_i$ .

En el proceso de optimización multi-respuesta se desea que todas las respuestas satisfagan de

manera simultánea la deseabilidad. Una formulación del problema optimización multi-respuesta se plantea como:

$$\begin{aligned} & \text{Maximizar } \lambda, \\ & \text{Sujeto a } d(\hat{y}_i(\mathbf{x})) \geq \lambda, \quad i = 1, 2, \dots, r, \\ & \mathbf{x} \in \mathfrak{R} : \text{ región experimental.} \end{aligned} \quad (2.25)$$

La finalidad principal de esta formulación es encontrar  $\mathbf{x}_o$  que maximice el mínimo grado de satisfacción  $\lambda$  con respecto a todas las respuestas dentro de la región experimental, es decir

$$\max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}} \{ \min [d_1(\hat{y}_1(\mathbf{x})), d_2(\hat{y}_2(\mathbf{x})), \dots, d_r(\hat{y}_r(\mathbf{x}))] \}$$

Nótese que los valores presentados en la Tabla 2.1 pueden servir como guía para establecer el grado de satisfacción.

### 2.5.3 Planteamientos alternativos de la función de deseabilidad.

A continuación serán descritos con más detalle los planteamientos de Criterio Global así como el planteamiento para la función de deseabilidad iterativa, aunque no serán implementados para fines de este trabajo.

#### Criterio Global

Tabucanon [50] propuso el llamado método del Criterio Global el cual usa una función aditiva que combina las respuestas individuales.

Cuando se requiere maximizar o minimizar la  $i$ -ésima respuesta, la transformación propuesta es

$$d_i^*(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \hat{y}_i(\mathbf{x}) \leq LIE_i \\ \left[ \frac{\hat{y}_i(\mathbf{x}) - y_{i \min}}{y_{i \max}} \right]^p & LIE_i \leq \hat{y}_i(\mathbf{x}) \leq LSE_i \\ 1 & \hat{y}_i(\mathbf{x}) \geq LSE_i \end{cases} \quad (2.26)$$

donde el valor  $p$  es un peso usado para determinar la importancia de las variables,  $y_{i \max}$  es el máximo valor aceptable para la respuesta  $i$  y  $y_{i \min}$  el mínimo valor aceptable. Estos últimos valores serían los comparables con los valores  $T_i$  usados en la transformación propuesta por Derringer y Suich, aunque hay que notar que en este caso se usa la misma transformación para las deseabilidades individuales. Para el caso en que se requiere que la variable tenga cierto valor nominal, la transformación dada en (2.26) no es adecuada ya que no hay manera de que ésta alcance su valor más alto cuando la respuesta se encuentre cerca de su valor objetivo. Autores como Kros y Mastrangelo [32] proponen usar la transformación dada por (2.22) para este último caso.

La función de deseabilidad global propuesta es

$$GC(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^r d_i^*(\mathbf{x}).$$

El planteamiento de optimización para el método del Criterio Global es

$$\max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}} GC(\mathbf{x}).$$

### Deseabilidad Iterativa

Jeong y Kim [23] propusieron un algoritmo que toma en cuenta a la función de deseabilidad de Derringer y Suich así como el planteamiento de optimización del grado de satisfacción de Kim y Lin. El procedimiento se puede resumir en los siguientes pasos

1. Se determinan las especificaciones de cada respuesta.
2. Se construyen las funciones de deseabilidad basadas en las ecuaciones (2.20), (2.21) y (2.22), según el tipo de variable.
3. Se resuelve el modelo de optimización en el  $n$ -ésimo ciclo, el cual está dado por

$$\begin{aligned} &\text{Maximizar } \lambda, \\ &\text{Sujeto a } d_i^n(\mathbf{x}) \geq \lambda, i = 1, 2, \dots, r, \\ &\quad \mathbf{x} \in \mathfrak{R} : \text{región experimental.} \end{aligned}$$

4. Se examina la solución actual. Si ésta es satisfactoria el procedimiento termina aquí, en caso contrario se sigue con el procedimiento
5. Se ajusta la forma de la deseabilidad (dada por los valores  $s$ ,  $t$  y  $u$  (2.20), (2.21) y (2.22)) para las variables que tengan valores insatisfactorios a fin de relajar o de ajustar dicha variable. Sigue paso 3.

El algoritmo concluye cuando todas las respuestas sean satisfactorias para el experimentador.

#### 2.5.4 Función de distancia

El método de la función de distancia fue introducido por Khuri y Conlon [27] en 1981 y se distingue de los otros métodos por ser el más formal de todos y por tomar en cuenta la aleatoriedad de las

respuestas predichas de cada uno de los modelos, además del requisito de que las respuestas deben ser linealmente independientes.

Este método consiste en minimizar la distancia del vector de valores óptimos individuales al vector de predichos, convirtiendo el problema de multi-respuesta a un problema de optimización univariado. Como primer paso hay que seleccionar a las respuestas que sean linealmente independientes estadísticamente para trabajar solamente con este conjunto de variables de respuesta. Cada una de estas respuestas debe ser optimizada haciendo uso de técnicas de superficie de respuesta univariadas como el "análisis de cordillera" [16]. Además, este método considera que la matriz de diseño para cada una de las respuestas puede ser definida por el mismo modelo polinomial, es decir que la matriz de diseño es la misma para cada respuesta, por lo que para cada una de ellas se considera el modelo presentado en (??).

Sea  $\phi_i$  el valor óptimo de  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$ , optimizada individualmente sobre la región experimental,  $i = 1, 2, \dots, r$ , y sea  $\phi = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_r]'$ . Es necesario encontrar condiciones de operación que sean favorables a todas las respuestas, es decir, condiciones bajo las cuales las respuestas estimadas se desvíen lo menos posible del óptimo ideal. Khuri y Conlon formularon dicha desviación en términos de una métrica, escogida apropiadamente y la cual puede ser expresada en términos de las  $r$  respuestas. Dicha métrica, la cual será denotada como  $\rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \phi]$ , mide la distancia de  $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})$  a l vector de óptimos individuales  $\phi$ . El planteamiento de optimización es encontrar las condiciones en  $\mathbf{x}$  que minimicen  $\rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \phi]$  en la región experimental  $\mathfrak{R}$ , es decir

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}} \rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \phi] \quad (2.27)$$

La distancia elegida, basada en consideraciones estadísticas (distancia de Mahalanobis), es

$$\rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \phi] = \left[ (\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) - \phi)' \{var[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})]\}^{-1} (\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) - \phi) \right]^{1/2}. \quad (2.28)$$

Si se reemplaza  $var[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})]$  por su estimador, entonces se tiene que (2.28) puede ser denotada como

$$\rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \phi] = \left[ \frac{(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) - \phi)' \hat{\Sigma}^{-1} (\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) - \phi)}{\mathbf{f}'(\mathbf{x})(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x})} \right]^{1/2}. \quad (2.29)$$

donde  $\hat{\Sigma}$  es la matriz de varianzas y covarianzas estimada de las respuestas según como se presenta en (2.12). De la ecuación (2.29) se puede observar que se requiere que no exista dependencia lineal entre las respuestas, ya que en caso de existiera dicha dependencia, entonces  $\hat{\Sigma}$  sería una matriz

singular y  $\rho$  estaría indefinida. Nótese que en caso de que sea razonable asumir que  $\Sigma$  es una matriz diagonal, basados en consideraciones estadísticas, entonces la medida de distancia puede ser escrita como

$$\rho_2 [\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \phi] = \left[ \sum_{i=1}^r (\hat{y}_i(\mathbf{x}) - \phi_i)^2 / (\hat{\sigma}_{ii} \mathbf{f}'(\mathbf{x})(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x})) \right]^{1/2},$$

donde  $\hat{\sigma}_{ii}$  es el  $i$ -ésimo elemento en la diagonal de  $\hat{\Sigma}$ .

Otra posible función de distancia global sugerida por los autores, es considerar diferencias relativas entre los predichos y los óptimos individuales, es decir

$$\tilde{\rho} [\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \phi] = \left[ \sum_{i=1}^r (\hat{y}_i(\mathbf{x}) - \phi_i)^2 / \phi_i^2 \right]^{1/2}.$$

### Medida de distancia que toma en cuenta la aleatoriedad de $\phi$

Hay que recalcar el hecho de que los componentes de  $\phi$  son los óptimos individuales de las variables aleatorias  $\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_r$ , por lo que por sí mismos también son variables aleatorias. Como  $\phi$  es pues un vector aleatorio, entonces el verdadero óptimo ideal esta dado por  $\zeta$ , donde  $\zeta = [\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_r]$  y  $\zeta_i$  es el verdadero óptimo de la  $i$ -ésima respuesta, optimizada individualmente sobre la región experimental.

El procedimiento propuesto por Khuri y Conlon, tal que tome en cuenta las consideraciones anteriores, es el siguiente: sea  $\rho$  la medida de distancia. El objetivo es encontrar un  $\mathbf{x}$  en la región experimental,  $\mathfrak{R}$ , tal que  $\rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \zeta]$  tenga un mínimo absoluto sobre  $\mathfrak{R}$ . Sin embargo, como  $\zeta$  es desconocido, se acota superiormente esta distancia para después minimizarla. Para lograr esto se construye una cierta región de confianza alrededor de  $\zeta$ . Dicha región es denotada por  $D_\zeta$ . Para un  $x$  fijo en  $\mathfrak{R}$ , se tiene que

$$\rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \zeta] \leq \max_{\eta \in D_\zeta} \rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \eta] \quad (2.30)$$

donde  $\eta$  es un punto en  $D_\zeta$ , y el máximo en es obtenido con respecto a  $\eta$  sobre  $D_\zeta$ . El lado derecho de (2.30) sirve como una sobrestimación de la distancia  $\rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \zeta]$ . Posteriormente, el mínimo de  $\rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \zeta]$  no puede exceder al correspondiente mínimo de la cota superior mencionada anteriormente, esto es

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}} \rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \zeta] \leq \min_{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}} \left\{ \max_{\eta \in D_\zeta} \rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \eta] \right\}.$$

Si se hace

$$d_0 = \min_{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}} \left\{ \max_{\eta \in D_\zeta} \rho[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \eta] \right\}, \quad (2.31)$$

entonces el mínimo sobre  $\mathfrak{R}$  de las distancias entre  $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})$  y  $\boldsymbol{\zeta}$  es menor o igual que  $d_0$ .

Según el artículo que presentaron Khuri y Conlon [27], las desigualdades

$$\gamma_{1i} \leq \zeta_i \leq \gamma_{2i}, \quad i = 1, 2, \dots, r,$$

cumplen simultáneamente con un intervalo de confianza de al menos  $1 - \alpha^*$ , donde

$$\begin{aligned} \gamma_{1i} &= \phi_i - g_i(\mathbf{X}, \hat{\boldsymbol{\xi}}_i) \sqrt{CME_i t_{\alpha/2, n-p}}, \\ \gamma_{2i} &= \phi_i + g_i(\mathbf{X}, \hat{\boldsymbol{\xi}}_i) \sqrt{CME_i t_{\alpha/2, n-p}}, \quad i = 1, 2, \dots, r, \end{aligned}$$

$\alpha^* = 1 - (1 - \alpha)^r$ .  $CME_i$  es el cuadrado medio del error para la  $i$ -ésima respuesta,  $\hat{\boldsymbol{\xi}}_i$  es un punto en  $\mathfrak{R}$  en el cual  $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})$  alcanza el óptimo individual  $\phi_i$ , y  $g_i(\mathbf{X}, \hat{\boldsymbol{\xi}}_i) = \left[ \mathbf{f}'(\hat{\boldsymbol{\xi}}_i) (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\hat{\boldsymbol{\xi}}_i) \right]^{1/2}$ .

### 2.5.5 Función de pérdida

En 1997 Ames *et al* [1], en vez de maximizar una función de deseabilidad, proponen minimizar una función de pérdida global. Dicha función de pérdida global se define como la suma ponderada de las diferencias cuadráticas de los predichos con respecto del valor objetivo en cada punto  $x$ .

Supóngase que se tienen los modelos ajustados, según se definen en (2.10) para  $r$  variables de respuesta y sea  $T_i$  el valor objetivo correspondiente a la  $i$ -ésima respuesta. La función de pérdida global se define pues como

$$QLP(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^r W_i (\hat{y}_i(\mathbf{x}) - T_i)^2, \quad (2.32)$$

donde  $W_i$  es el peso que pondera la importancia relativa de la variable  $y_i$  en la función de pérdida. Se tiene pues que el planteamiento de optimización planteado por Ames *et al* es

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}} QLP(\mathbf{x}).$$

Los valores  $W_i$  se eligen, en primera instancia para eliminar el efecto de las unidades de medición sobre las variables, además de que también es posible incluir en  $W_i$  un peso adicional que balancee la importancia relativa de cada una de las variables. Es importante mencionar que para la función de pérdida no se vea afectada en el caso de maximizar (o minimizar, según sea el caso), es necesario considerar una función indicadora tal que si el valor estimado sobrepasa (o esta por debajo) el valor target para la variable en un punto  $\mathbf{x}$ , la diferencia entre las la respuesta ajustada y el valor objetivo no sea cuantificada. En resumen, se considera la función de pérdida para los casos de maximizar,

o minimizar, respectivamente, como

$$QLP(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^r W_i U(a, b) (\hat{y}_i(\mathbf{x}) - T_i)^2,$$

donde

$$\begin{aligned} U(a, b) &= U(T_i, \hat{y}_i(\mathbf{x})) && \text{si se requiere maximizar} \\ U(a, b) &= U(\hat{y}_i(\mathbf{x}), T_i) && \text{si se requiere minimizar} \end{aligned}$$

y  $U(a, b)$  toma el valor de cero si  $a \leq b$  y el valor unitario si  $a > b$ . Aquí es de interés mencionar que en el artículo en el que este método es propuesto, la función  $QLP(\mathbf{x})$  es usada por Ames et al de distinta a la forma aquí presentada, hecho del que se percataron De la Vara y Domínguez [11] quienes hacen una propuesta de mejora.

### 2.5.6 Índice Topsis

Para la estrategia de optimización se formula un procedimiento surgido de la técnica de orden de preferencia por similaridad a la solución ideal (TOPSIS por sus siglas en ingles).

Este viene derivado de la toma de decisiones multi atributo, la idea básica es hacer un escalamiento en las respuestas  $\hat{y}_i(\mathbf{x})$  y ponderar éste en función de la importancia de cada respuesta para el proceso, a partir de este definen las metas  $M_i$  con lo cual se construye un índice que toma en cuenta las soluciones ideal y negativa ideal. El procedimiento es como sigue:

1. Se identifica a las  $\hat{y}_{ij}$  estimadas en cada modelo ( $i=1, \dots, r$  y  $j=1, \dots, n$ ), se construye variable  $d_{ji}$  mediante el proceso de normalización de las variables de respuesta  $\hat{y}_{ij}$ :

$$d_{ij} = \frac{\hat{y}_{ij}}{\sqrt{\sum_j \hat{y}_{ij}}}. \quad (2.33)$$

2. La variable  $d_{ij}$  se pondera mediante pesos  $w_i$  y se construyen la variable:

$$v_{ij} = w_i d_{ij}, \quad (2.34)$$

en el marco de la teoría difusa existen diferentes criterios para asignar los  $w_i$ .

3. En esta etapa se propone una solución óptima ideal positiva y se calcula la distancia  $D_i^+$ .

$$\begin{aligned} M^+ &= \{(\max_j v_{ij} | i \in I) \text{ o } (\min_j v_{ij} | i \in I') \text{ para } i = 1, \dots, r\} \\ &= \{M_1^+, M_2^+, \dots, M_r^+\}, \end{aligned}$$

$$D_j^+ = \sqrt{\sum_{i=1}^r (v_{ij} - M_i^+)^2}. \quad (2.35)$$

donde  $I$  ( $i = 1, \dots, r$ ) está asociado con algún criterio de beneficio y, por otro lado,  $I'$  ( $i = 1, \dots, r$ ) está asociado con algún criterio de costo. Para el caso de maximizar o minimizar la respuesta, la solución ideal estará dada por el max o min, respectivamente. Cuando se requiera que la respuesta  $i$  alcance un valor objetivo,  $T_i$ , dicha respuesta se puede describir como

$$\hat{y}_{ij}^* = |\hat{y}_{ij} - T_i| \text{ o } \hat{y}_{ij}^* = (\hat{y}_{ij} - T_i)^2,$$

de esta manera se desea minimizar  $\hat{y}_{ij}^*$ . En ese sentido  $d_{ij} = \frac{\hat{y}_{ij}^*}{\sqrt{\sum_j \hat{y}_{ij}^*}}$ .

4. También se plantea una solución ideal negativa que se puede establecer como la peor de la soluciones y de manera análoga se obtiene la distancia  $D_j^-$ .

$$\begin{aligned} M^- &= \{(\min_j v_{ij} | i \in I) \text{ o } (\max_j v_{ij} | i \in I') \text{ para } i = 1, \dots, r\} \\ &= \{M_1^-, M_2^-, \dots, M_r^-\}, \end{aligned}$$

$$D_j^- = \sqrt{\sum_{i=1}^r (v_{ij} - M_i^-)^2}. \quad (2.36)$$

5. Finalmente se obtiene el índice:

$$C_j = \frac{D_j^-}{D_j^+ + D_j^-}, \quad (2.37)$$

tal que si se alcanza la solución óptima ideal  $C_j = 1$ , se logra la solución óptima para el proceso, lo que significa que la solución ideal positiva,  $D_j^+$ , tiende a cero. También se pueden conseguir soluciones alternativas adecuadas, si el índice tiene valores entre 0.7 y 1. En el caso de que el proceso apoye a la solución ideal negativa el índice tiende a cero.

Las expresiones (2.33), (2.35) y finalmente el índice (2.37) se obtienen usando los datos generados por el experimento. Sin embargo, en lugar de esos datos se pueden emplear los valores predichos por el modelo de regresión cuadrático o el mejor modelo. En ese sentido la estimación del índice (2.37) está en función de los modelos, y según el peso  $w_i$  para cada una de las variables, esta relación se vería reflejada en la estimación del modelo de regresión considerando ahora el índice  $C_j$  como respuesta.

Cabe observar que se puede usar una escala como la presentada en la Tabla 2.1 para dar una interpretación el índice obtenido con el procedimiento analizado.

### 2.5.7 Componentes principales para la pérdida estandarizada.

Este método fue presentado en 2002 por Antony Jiju [24] y básicamente lo que se propone es un procedimiento de optimización basado en el método de componentes principales. El planteamiento original está propuesto para diseños de la metodología de Taguchi. En este trabajo se propone una adecuación al planteamiento original de Jiju, la cual se describe a continuación.

1. Según la naturaleza de la respuesta, se calcula la función de pérdida según la metodología de Taguchi de la siguiente manera.

- Si se requiere minimizar la respuesta, la función de pérdida para la  $i$ -ésima respuesta es

$$L_{ij} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_{ijk}^2$$

donde  $m$  es el número de replicas para cada uno de los  $n$  tratamientos,  $i = 1, 2, \dots, r$  y  $j = 1, 2, \dots, n$ .

- Cuando se desea maximizar la respuesta, la función de pérdida es

$$L_{ij} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \frac{1}{y_{ijk}^2}.$$

- En el caso en que se requiere que la  $i$ -ésima respuesta alcance un cierto valor  $T_i$ , la función de pérdida es

$$L_{ij} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m (y_{ijk} - T_i)^2.$$

Una vez calculadas las pérdidas para cada respuesta, se definen

$$\begin{aligned} L_i^{\min} &= \min_j \{L_{ij}\} \\ L_i^{\max} &= \max_j \{L_{ij}\}. \end{aligned}$$

2. Se calcula la pérdida estandarizada para todas las respuestas usando la siguiente ecuación

$$E_{ij} = \frac{L_i^{\max} - L_{ij}}{L_i^{\max} - L_i^{\min}}. \quad (2.38)$$

De esta manera se obtienen  $r$  pérdidas estandarizadas  $E_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, r$ .

3. Se calcula el primer componente principal,  $Z$ , para las  $r$  pérdidas estandarizadas definidas anteriormente
4. Se encuentran las condiciones óptimas tales que  $Z$  alcance su valor máximo.

Al igual que en el procedimiento TOPSIS, la expresión (2.38), se obtienen usando los datos generados por el experimento, tal cual es la propuesta de Jiju, sin embargo, se pueden emplear los valores predichos en lugar de esos datos. En ese sentido la estimación  $Z$  está en función de los modelos, y esta relación estaría reflejada en la estimación del modelo de regresión considerando el primer componente principal de las pérdidas estandarizadas,  $Z$ , como la variable de respuesta.

Cabe mencionar que en su artículo Jiju no aclara si la obtención del primer componente debe hacerse mediante el uso de la matriz de varianza-covarianza de las pérdidas estandarizadas o con la matriz de correlación, ya que estas matrices producen distintos componentes. La mayoría de los autores que trabajan con componentes principales recomiendan trabajar con la matriz de correlación debido a algunas propiedades que se tienen al usarla. Para más detalles el lector puede consultar a Jolliffe [25].

### Conclusiones del capítulo

Este capítulo contiene las herramientas teóricas necesarias para resolver el problema de optimización multi-respuesta. Fue presentada la metodología de superficie de respuesta, desglosada en los tres pasos de que esta consiste: diseño, modelación y optimización.

Se presentó la importancia de planificar debidamente un experimento a fin de obtener la información adecuada que permita mejorar el proceso, esto mediante el diseño de experimentos. En lo concerniente a la modelación de las respuestas, se consideran dos técnicas de estimación: OLS y SUR. La estimación OLS propone optimizar individualmente cada una de las respuestas de interés, en tanto que con SUR la sugerencia es optimizar conjuntamente tal que se tome en cuenta la correlación de las variables.

En cuanto a la optimización, se dió la técnica para encontrar óptimos individuales para cada una de las respuestas dentro de la región experimental. En lo respectivo al problema de optimización multi-respuesta que interesa a este trabajo, se presentaron diferentes planteamientos que han sido publicados para dar solución a estos, los cuales simplifican el problema original a una transformación de las variables de respuesta a fin de contar con una función unificada sobre la cual realizar la optimización. Con la aplicación de estos métodos a distintos conjuntos de datos, se quiere evaluar su eficacia, sobre lo que se entrará en detalles más adelante.

## Capítulo 3

# Análisis Estadístico de Datos

En el capítulo anterior se explicó con detalle el funcionamiento de cada uno de los planteamientos analíticos para la optimización multi-respuesta y, a partir de eso se pretende compararlos. Para este fin es necesario implementar dichos procedimientos con el objetivo de evaluar su eficacia.

El objetivo de este capítulo es establecer los pasos necesarios para poder llevar a cabo la optimización multi-respuesta ante situaciones que se presentan en la práctica, como el contar con variables independientes cuyas unidades de medida son diferentes. Otro escenario que se presenta con frecuencia es el no contar con la información necesaria para llevar a cabo la optimización, esto en cuanto a los valores permisibles para las variables de respuesta, así como sus valores más deseables. Una última condición que se manifiesta es la ponderación de las variables de respuesta, para lo que se dan algunas propuestas.

Por último se presenta una recopilación de datos experimentales para distintos procesos, así como su respectivo análisis estadístico.

### 3.1 Codificación de variables

En la estrategia experimental la mayoría de los factores que son de interés para un proceso en específico tienen diferentes escalas de medición, lo cual puede complicar la construcción y análisis de los modelos que se proponen para las respuestas de estudio. La propuesta hecha por la mayoría de los autores para solucionar dicho problema, es codificar la región experimental, de este modo se puede contar con la propiedad de ortogonalidad.

El  $i$ -ésimo factor para cada conjunto de datos será llamado como  $X_i$ , y al mismo factor, ya codificado, se le denotará como  $x_i$ . La codificación de las variables se obtiene considerando los valores máximo y mínimo para cada factor. El valor codificado, en caso de que los datos estén

equiespaciados, se obtiene restando a cada nivel del factor elegido el promedio de los valores máximo y mínimo y se divide entre el semi rango. La transformación, para  $k$  fijo, se describe en la siguiente expresión

$$x_{kl} = \frac{X_{kl} - [\max(X_{kl}) + \min(X_{kl})]/2}{[\max(X_{kl}) - \min(X_{kl})]/2}$$

donde  $k$  representa el factor, y  $l$  es el nivel del factor.

Una vez que se hayan encontrado los valores de los factores codificados en los que el proceso se encuentra en condiciones óptimas, el siguiente paso es regresar dichos factores a su escala original, lo cual se hace despejando  $X_{kl}$  de la ecuación anterior.

### 3.2 Recomendaciones para establecer especificaciones

Una vez que el diseño experimental es implementado se contará con un conjunto de datos como respuestas. Los valores que las variables de respuesta en un proceso en particular deben de tomar son llamadas especificaciones del proceso y por lo general son valores delimitados o acotados. Las variables de respuesta deben de cumplir con estas especificaciones para así considerar que el proceso cumple con los requerimientos de calidad. De acuerdo al tipo de especificaciones que se deben cumplir, las variables de salida pueden clasificarse como:

- Más pequeña es mejor, son las características de calidad cuya exigencia es que no excedan un cierto valor máximo tolerado o una especificación superior (*LSE*), y cuanto menor sea su valor es mejor.
- Más grande es mejor, son las variables de respuesta a las que se les exige que sean mayores a un valor mínimo o especificación inferior (*LIE*), y los valores más grandes son los más deseables.
- Target es mejor, son las variables que deben de tener un valor específico (*T*) o al menos deben de estar dentro de ciertas especificaciones inferior y superior (*LIE* y *LSE*, respectivamente).

Puede darse el caso en que, a pesar de quererse minimizar o maximizar, no se tengan ganancias al estar por debajo, o sobrepasar, según sea el caso, un cierto valor nominal el cual puede ser considerado como el valor más deseable o el target. Hay que recordar que varios de los planteamientos de optimización presentados anteriormente requieren del conocimiento de estos valores.

Hay procesos para los cuales las especificaciones y valores objetivos están bien determinadas sin embargo puede darse la situación contraria en la cual, a pesar de saber a que tipo de variables pertenece la característica de interés, no hay conocimiento acerca de los valores que debe de tomar

dicha variable. Ante esta falta de información es necesario establecer ciertos criterios para determinar tanto los límites, así como los valores más deseables para las variables de respuesta ya que son necesarios para la correcta implementación de los procesos de optimización multi-respuesta que se estudian en este trabajo.

Los criterios tomados para el establecimiento de las especificaciones son explicados a continuación:

1. En el caso de que se tengan cotas bien definidas para el proceso se propone establecer nuevos límites de especificación considerando la variabilidad del proceso. Esto se hace reduciendo las especificaciones proporcionalmente a la desviación estándar estimada de la respuesta, es decir, los nuevos límites estarán dados por

$$\begin{aligned}LIE_i^* &= LIE_i + k\hat{\sigma}_i \\LSE_i^* &= LSE_i - k\hat{\sigma}_i\end{aligned}\tag{3.1}$$

donde  $\hat{\sigma}_i$  está dada por la raíz cuadrada del cuadrado medio del error ( $CME_i$ ) para la  $i$ -ésima respuesta, según la expresión 2.5.

2. Cuando se desconozca el valor más deseable para la variable, ante la situación de maximizar una variable, se propone incrementar al punto medio entre los valores máximo y mínimo estimados para la variable en cuestión tres desviaciones estándar, es decir, para la  $i$ -ésima variable el valor  $T_i$ , el más deseable, estará dado por

$$T_i = \frac{\hat{y}_i^{\max} + \hat{y}_i^{\min}}{2} + 3\hat{\sigma}_i.\tag{3.2}$$

donde  $\hat{y}_i^{\min} = \min_{x \in \Omega} \{\hat{y}_i(\mathbf{x})\}$  y  $\hat{y}_i^{\max} = \max_{x \in \Omega} \{\hat{y}_i(\mathbf{x})\}$  en el que  $\Omega$  es el conjunto de puntos incluidos en el la matriz de diseño.

Cuando se requiera minimizar una variable, el valor  $T_i$  se obtiene cambiando el signo a  $3\hat{\sigma}_i$ , es decir

$$T_i = \frac{\hat{y}_i^{\max} + \hat{y}_i^{\min}}{2} - 3\hat{\sigma}_i.\tag{3.3}$$

Otra posibilidad es tomar como valor objetivo el óptimo individual obtenido mediante el análisis de cordillera.

Una tercera opción para establecer estos valores objetivo es el de considerar, en el caso de maximizar

$$T_i = \hat{y}_i^{\max}$$

y cuando se quiere minimizar la respuesta, el valor objetivo puede ser considerado como

$$T_i = \hat{y}_i^{\min}.$$

3. Para establecer los límites de especificación, en el caso de que estos no sean conocidos, se tomará el mismo criterio que para obtener el valor target, es decir, para el caso de maximizar la respuesta  $i$ , la cota inferior para la misma será

$$LIE_i = \frac{\hat{y}_i^{\max} + \hat{y}_i^{\min}}{2} - 3\hat{\sigma}_i.$$

De manera similar, la cota superior, en caso de que se requiera minimizar, estará dada por

$$LSE_i = \frac{\hat{y}_i^{\max} + \hat{y}_i^{\min}}{2} + 3\hat{\sigma}_i.$$

La segunda propuesta es establecer las especificaciones en el caso de maximizar o minimizar, según sea el caso, como

$$\begin{aligned} LIE_i &= \hat{y}_i^{\min} \\ LSE_i &= \hat{y}_i^{\max} \end{aligned}$$

Los criterios que se adoptarán durante el desarrollo de este trabajo para establecer valores objetivo y límites de especificación, son aquellos que consideran la variabilidad de las respuestas. Cabe aclarar que estos criterios serán considerados para fines prácticos a fin de poder implementar los procedimientos de optimización bajo las mismas reglas para los conjuntos de datos para los cuales no se tenga disponible mayor información del proceso, sin embargo la elección de estos valores es equivalente a que se den las especificaciones inherentes al proceso. Ante una situación real en la que se cuente con este tipo de datos la información necesaria puede obtenerse de las personas que manejan el proceso en una labor interdisciplinaria. Aquí cabe mencionar que las especificaciones pueden estar dictaminadas por los empresarios dueños del proceso, o bien pueden ser dictadas por las necesidades del cliente que consume el producto de acuerdo a obtener la satisfacción del mismo.

### 3.3 Recomendaciones para establecer los pesos.

La mayoría de los planteamientos multi-respuesta permiten establecer pesos para cada una de las variables de acuerdo a su importancia dentro del proceso. Sin embargo para algunos de los métodos

no está claro como establecer dichos pesos. En este apartado se pretende dar algunas sugerencias para establecer las ponderaciones pertinentes.

Cabe mencionar que la elección de los pesos adecuados para las variables de respuestas puede tener un gran impacto en los resultados de la optimización dependiendo del método que se este aplicando, por lo que hay que tener en consideración que se pueden obtener resultados que no sean satisfactorios si no se eligen correctamente las ponderaciones. También hay que considerar que los pesos que se proponen en la siguientes secciones pueden no funcionar igual para todos los conjuntos de datos, por lo que no deben usarse sin conocimiento pleno del proceso.

### **Función de deseabilidad**

Al implementar la función de deseabilidad puede darse el caso de que algunas variables se vean sacrificadas en beneficio de otras. Para contrarrestar este hecho se pueden hacer distintas ponderaciones, trabajo que puede resultar no práctico. En este sentido, De la Vara y Domínguez [11] proponen utilizar pesos  $w_i$  originados en un índice de capacidad de procesos a partir de los datos experimentales de cada variable, y del modelo ajustado. De esta manera proponen una cantidad que permite medir el potencial de cada modelo para predecir valores dentro de las especificaciones como sigue

$$C_{Pi} = \frac{T_i - LIE_i}{3\sqrt{CME_i + (\hat{\mu}_i - T_i)^2}}$$

donde  $\hat{\mu}_i$  es el estimador de la media del proceso para la  $i$ -ésima respuesta,  $T_i$  es el punto medio de las especificaciones, para el caso de variables con doble especificación, y es el valor más deseable en el caso de maximizar o minimizar la respuesta, y para este último caso  $LIE_i$  se reemplaza por  $LSE_i$ . Entonces los pesos están dados por

$$w_i = \frac{1}{C_{Pi}}$$

### **Función de pérdida.**

Para el caso de la función de pérdida, Ames et al proponen establecer los pesos  $W_i$ , para eliminar el efecto de las unidades de medición de las variables, como el inverso del cuadrado medio del error, es decir

$$W_i = \frac{1}{CME_i}.$$

Estos pesos no toman en cuenta la dificultad que algunas variables tienen para cumplir los requerimientos individuales, por lo que De la Vara y Domínguez plantean el uso de pesos inspirados en la capacidad del proceso y que además considere el sesgo de los datos respecto a los valores

Tabla 3.1: Ponderación de variables en el índice TOPSIS

Escala	1	2	3	4	5	6	7	8
Términos usados								
1. Extre. alto								.954
2. Muy alto			0.909		0.917	0.909	0.917	0.864
3. Alto-muy alto							0.875	0.701
4. Alto	0.750	0.833	0.717	0.885	0.750	0.773	0.750	0.667
5. Casi alto				0.700	0.584		0.630	
6. Poco alto						0.637		0.590
7. Medio	0.583	0.500	0.500	0.500		0.500	0.500	0.500
8. Poco bajo						0.363		.410
9. Casi bajo				0.300	0.416		0.370	
10. Bajo		0.166	0.283	0.115	0.250	0.227	0.250	0.333
11. Bajo-muy bajo							0.125	0.299
12. Muy bajo			0.091		0.083	0.091	0.083	0.136
13. Nada								0.046

nominales. Los pesos propuestos para el método de la función de pérdida son

$$W_i = \frac{|T_i - \hat{\mu}_i| / \sqrt{CME_i}}{CME_i + (\hat{\mu}_i - T_i)^2}.$$

Estas cantidades otorgan menos peso a las variables cuando sus predichos se alejan demasiado del valor objetivo o cuando se tiene mayor variabilidad.

### Índice TOPSIS

Para la implementación del planteamiento del índice TOPSIS, los pesos  $w_i$  se proponen según los dados por la Tabla 3.1. Estos pesos fueron propuestos por Chon y Hwang [10].

La forma de utilizar la tabla es la siguiente: según el número de variables que se estén analizando, se elige la correspondiente columna. Después se asocia la importancia de la variable con los términos de la primera columna y se suma el total de las cantidades asociadas. El peso final para cada variable estará dado por el cociente entre la cantidad asociada a la importancia de la respuesta entre la suma de estas últimas cantidades.

Por ejemplo, si se cuenta con tres variables de respuesta siendo la primera de alta importancia, la segunda de importancia media y la tercera de muy baja importancia, entonces los pesos estarían dados como sigue:

$$w_1 = \frac{0.717}{(0.717 + .500 + 0.283)}, \quad w_2 = \frac{0.500}{(0.717 + .500 + 0.283)}, \quad w_3 = \frac{0.283}{(0.717 + .500 + 0.283)}.$$

A pesar de que los pesos propuestos por Chon y Hwang están pensados para la metodología TOPSIS, estos pueden adoptarse para establecer los pesos a otros métodos.

### Componentes principales

El planteamiento de optimización planteado por Jiju no propone algún tipo de ponderación para las variables, sin embargo el propio método de componentes principales provee esa posibilidad, la cual consiste en, una vez que las pérdidas estandarizadas  $E_i$  para cada una de las variables son calculadas, en vez de usar la matriz de varianza-covarianza o la matriz de correlación de dichas pérdidas, se propone usar la matriz de varianza y covarianza de  $E_i/w_i$ , donde los pesos,  $w_i$ , se eligen para reflejar alguna idea a priori de la importancia relativa de las variables. En este sentido algunos autores han propuesto distintos pesos. Para mas detalle se recomienda la lectura de la discusión al respecto hecha por Jolliffe (Sección 12.1).

## 3.4 Recopilación de datos

Para poder hacer una comparación de los planteamientos de optimización multi-respuesta analizados en este trabajo es necesario implementarlos a distintos conjuntos de datos con características diferentes. Se aplicaron los distintos métodos de optimización mencionados en el capítulo anterior a distintos conjuntos de datos citados en la literatura. A continuación se da una breve descripción de dichos datos, así como el análisis estadístico correspondiente, a partir del cual se pretende abordar situaciones que no han sido consideradas por la mayoría de los autores y que pueden afectar el funcionamiento adecuado de los métodos.

Con el fin de modelar la superficie de respuesta de una manera adecuada hay un amplio debate entre el uso del modelo completo de segundo grado y un modelo reducido en base a la significancia de los parámetros, aunque en este trabajo no se va ahondar en el tema por considerarse de gran extensión. Para fines de introducir al lector en el empleo de la metodología de estimación mediante el uso de regresiones aparentemente no correlacionadas (SUR), y por ser considerada esta metodología como una técnica para la optimización multi-respuesta, en este trabajo serán analizados los modelos reducidos jerárquicos (esto como una recomendación de distintos autores).

Como se menciona anteriormente, se ha propuesto que los modelos reducidos estén conformados por los términos que resultaron ser significativos con  $\alpha = 0.05$ . El uso de los modelos así propuestos implica realizar una selección manual de términos. En este sentido se propone hacer uso del procedimiento stepwise en la elección de los componentes del modelo. Para cada uno de los conjuntos de datos presentados se obtuvieron los estimadores para el mejor modelo jerárquico obtenido mediante la selección de variables mediante stepwise con  $\alpha, \beta = 0.1$ , Para más detalles

Tabla 3.2: Diseño experimental para la producción de quesos

Diseño (original)		Diseño (codificado)		Respuestas			
$X_1$	$X_2$	$x_1$	$x_2$	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
8	6.5	-1	-1	2.48	0.55	1.95	0.22
34	6.5	1	-1	0.91	0.52	1.37	0.67
8	25.9	-1	1	0.71	0.67	1.74	0.57
34	25.9	1	1	0.41	0.36	1.2	0.69
2.6	16.2	-1.414	0	2.28	0.59	1.75	0.33
2.6	16.2	1.414	0	0.35	0.31	1.13	0.67
21	16.2	0	-1.414	2.14	0.54	1.68	0.42
21	16.2	0	1.414	0.78	0.51	1.51	0.57
21	16.2	0	0	1.5	0.66	1.8	0.44
21	16.2	0	0	1.66	0.66	1.79	0.5
21	16.2	0	0	1.48	0.66	1.79	0.5
21	16.2	0	0	1.41	0.66	1.77	0.43
21	16.2	0	0	1.58	0.66	1.73	0.47

acerca de el método de selección de variables utilizado se recomienda la lectura del Apéndice 1 del libro de Myers y Montgomery [38].

### 3.4.1 Proceso de producción de quesos

Este conjunto de datos fue analizado por Khuri y Conlon [27] (presentado inicialmente por Schmidt *et al* [47]). Schmidt *et al* investigaron los efectos de las combinaciones de la cistina ( $x_1$ ) y el clorhidro de calcio ( $x_2$ ) sobre la textura y retención de agua de una proteína del suero utilizada en la producción de quesos. Las características de textura que fueron medidas son dureza ( $y_1$ ), cohesión ( $y_2$ ), elasticidad ( $y_3$ ) y compresión del agua ( $y_4$ ). Es de interés maximizar simultáneamente las cuatro respuestas.

Para analizar los efectos se trabajó con un diseño central compuesto con cinco puntos centrales, con  $n = 13$  tratamientos experimentales, cuyos resultados obtenidos se presentan en la Tabla 3.2. Los valores originales para los factores de control son mostrados en la misma tabla.

Es de importancia analizar la correlación que hay entre las variables de respuesta, la cual es mostrada en la Figura 3.1. en la cual se puede notar que existe una fuerte correlación negativa entre las variable  $y_4$  con las variables  $y_1$  y  $y_3$ , lo cual va a afectar la optimización simultanea de las cuatro respuestas ya que al maximizar  $y_4$  necesariamente se tendrá que reducir los valores para las otras respuestas, y viceversa.

Después de una selección de variables, se obtuvieron los estimadores de los parámetros de los términos contenidos en los modelos para cada una de las variables de respuesta, tanto por

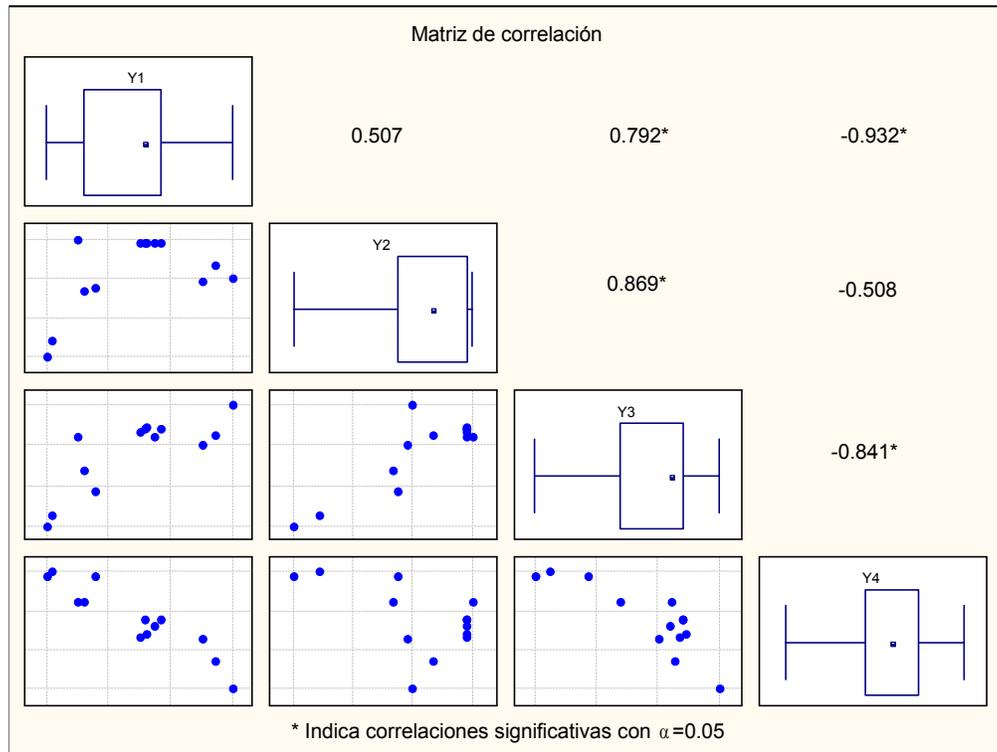


Figura 3.1: Matriz de correlación y gráficas de dispersión para la producción de quesos.

el método de mínimos cuadrados como por las regresiones aparentemente no correlacionadas, los cuales se presentan en las Tablas 3.3 y 3.4 respectivamente. Estas tablas muestran que, para cada una de las respuestas el cuadrado medio del error es un poco menor para los estimadores OLS en comparación con los estimadores SUR, situación contraria al coeficiente de determinación  $R^2$  ya que los primeros estimadores explican un mayor porcentaje de la varianza explicada que los segundos. Cabe mencionar que para este proceso los modelos, tanto los modelos completos como los mejores modelos para los dos tipos de estimación, presentan falta de ajuste, por lo que los resultados que se puedan obtener con estos modelos están sujetos a la consideración de este hecho.

Al realizar el análisis de cordillera, se obtuvieron los óptimos individuales presentados tanto en la Tabla 3.5 y en la Tabla 3.6 para cada uno de los estimadores. El vector óptimo, en cuyos valores de los factores la  $i$ -ésima respuesta alcanza su valor óptimo, esta denotado como  $\mathbf{x}_{0i}$ . El valor óptimo que alcanza cada una de las repuestas se presenta sombreado, además de que se presentan los valores que toma el resto de las variables en los puntos óptimos individuales.

Es importante hacer notar que el punto donde la primer variable toma su valor óptimo se

Tabla 3.3: Estimadores parametrales por OLS producción de quesos

		Respuestas			
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Estimadores OLS	$\hat{\beta}_0$	1.458	0.660	1.776	0.498
	$\hat{\beta}_1$	-0.575	-0.092	-0.250	0.131
	$\hat{\beta}_2$	-0.524	-0.010	-0.078	0.073
	$\hat{\beta}_{11}$	-0.158	-0.096	-0.156	--
	$\hat{\beta}_{22}$	--	-0.058	-0.079	--
	$\hat{\beta}_{12}$	0.318	-0.070	--	-0.083
$R^2$		93.99%	98.11%	97.64%	91.55%
CME		0.043	0.000	0.002	0.002
p value FA		0.0320	*	0.0809	0.1718

Tabla 3.4: Estimadores parametrales por SUR producción de quesos

		Respuestas			
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Estimadores SUR	$\hat{\beta}_0$	1.437	0.668	1.781	0.498
	$\hat{\beta}_1$	-0.575	-0.092	-0.250	0.131
	$\hat{\beta}_2$	-0.524	-0.010	-0.078	0.073
	$\hat{\beta}_{11}$	-0.125	-0.102	-0.156	--
	$\hat{\beta}_{22}$	--	-0.065	-0.087	--
	$\hat{\beta}_{12}$	0.343	-0.071	--	-0.082
$R^2$		93.81%	97.80%	97.58%	91.55%
CME		0.045	0.001	0.002	0.002
p value FA		0.0302	*	0.0769	0.1718

Tabla 3.5: Óptimos individuales para el proceso de producción de quesos (OLS)

	Óptimo Individual		Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	-0.884	-1.101	2.729	0.539	1.865	0.222
$\mathbf{x}_{02}$	-0.577	0.260	1.553	0.685	1.843	0.454
$\mathbf{x}_{03}$	-0.797	-0.491	2.197	0.636	1.895	0.326
$\mathbf{x}_{04}$	1.321	-0.306	0.455	0.398	1.190	0.683

Tabla 3.6: Óptimos individuales para el proceso de producción de quesos (SUR)

	Óptimo Individual		Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	-0.916	-1.075	2.761	0.533	1.862	0.219
$\mathbf{x}_{02}$	-0.529	0.211	1.558	0.691	1.849	0.453
$\mathbf{x}_{03}$	-0.801	-0.446	2.174	0.643	1.898	0.332
$\mathbf{x}_{04}$	1.325	-0.302	0.478	0.393	1.192	0.683

Tabla 3.7: Óptimos individuales para el proceso de producción de quesos (OLS)

Respuesta		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Requerimiento		Maximizar	Maximizar	Maximizar	Maximizar
OLS	$LIE_i$	0.901	0.433	1.348	0.310
	$T_i$	2.145	0.561	1.631	0.586
SUR	$LIE_i$	0.932	0.429	1.347	0.310
	$T_i$	2.199	0.567	1.635	0.587

encuentra en el lado opuesto al punto óptimo para la cuarta variable, es decir, la dirección óptima para una de estas variables es la peor dirección para la otra. Este contraste entre las variables  $y_1$  y  $y_4$  afecta a cualquier método de optimización simultánea.

Para este conjunto de datos no se tiene mayor información con respecto a las especificaciones que deben tener las cuatro características de interés, razón por la cual se adoptarán los criterios fijados en la sección 3.2. Hay que recalcar que cada uno de los modelos presentados en las Tablas 3.5 y 3.6. dan pie a distintas especificaciones según el método de estimación. Las especificaciones para este conjunto de datos, así como los valores objetivo para cada una de las respuestas, tanto para los estimadores OLS y SUR, se muestran a continuación.

### Características especiales

- Existe una fuerte correlación negativa entre la primera y la tercera variable con la cuarta variable de respuesta, lo cual hace que el aumentar el valor de las primeras se sacrifique el valor de la última.
- Los modelos para la primera y tercera variable presentan falta de ajuste. No fue posible realizar la prueba de falta de ajuste para la variable  $y_2$  debido a que los valores experimentales para los puntos centrales son los mismos.
- Los modelos para  $y_4$  obtenidos por OLS y SUR coinciden.

### 3.4.2 Proceso de producción de neumáticos

Derringer y Suich [15] discuten un proceso de producción de neumáticos en el cual se quiere encontrar la combinación óptima simultánea de tres ingredientes de un compuesto de las bandas de los

neumáticos. Dichos compuestos son los que se presentan en la siguiente tabla

Factores de control	Niveles	
	Bajo	Alto
Nivel de silicona hidratado ( $x_1$ )	0.7	1.7
Nivel de un agente de silano ( $x_2$ )	40	60
Nivel de azufre ( $x_3$ )	1.8	2.8

Se tomaron en cuenta cuatro variables de respuesta que son de interés. Las propiedades que se consideran, con sus respectivas restricciones, son las siguientes:

Respuestas	Restricciones	
Índice de Abrasión ( $y_1$ )	$120 < y_1$	
Modulo 200 ( $y_2$ )	$1000 < y_2$	(3.4)
Elongación a la ruptura ( $y_3$ )	$400 < y_3 < 600$	
Dureza ( $y_4$ )	$60 < y_4 < 75$	

Si bien las dos primeras variables no tienen valores objetivo especificados, desde punto de vista práctico para el proceso se considera que no hay ganancia adicional en estas propiedades si las respuestas  $y_1$  y  $y_2$  toman valores mayores a 170 y 1300, respectivamente. En el caso de las variables  $y_3$  y  $y_4$  se pretende que las respuestas alcancen el valor dado por el punto medio de los intervalos determinados por las especificaciones. Para investigar el proceso de interés se propuso un diseño central compuesto con seis puntos centrales, dando un total de  $n = 20$  tratamientos. El diseño y los resultados experimentales se presentan en la Tabla 3.8.

En lo concerniente al análisis de correlación, en la Figura 3.2 es posible percatarse de la existencia de correlaciones negativas significativas de la variable  $y_3$  con las variables  $y_1$  y  $y_2$ . De acuerdo a los requerimientos de las respuestas estas correlaciones no necesariamente representan algún conflicto, sin embargo es de interés ver como afectan en la optimización conjunta.

Los modelos estimado aplicando el procedimiento de mínimos cuadrados y para el método de regresiones aparentemente no correlacionadas, para cada una de las cuatro respuestas, están dados por los coeficientes presentados por las tablas y respectivamente.

Se puede observar que, a pesar de que el coeficiente de determinación  $R^2$  en cada una de las respuestas es el mismo para ambos métodos de estimación, los estimadores por OLS producen  $CME$  menores que los obtenidos para los estimadores SUR. También es posible notar que los modelos obtenidos no presentan falta de ajuste, a excepción de la segunda variable, cuyo modelo además provee un valor para el error estándar de gran magnitud, lo cual, tomando en cuenta la aleatoriedad

Tabla 3.8: Diseño experimental para la producción de neumáticos.

Diseño (codificado)			Respuestas			
$x_1$	$x_2$	$x_3$	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
-1	-1	1	102	900	470	67.5
1	-1	-1	120	860	410	65
-1	1	-1	117	800	570	77.5
1	1	1	198	2294	240	74.5
-1	-1	-1	103	490	640	62.5
1	-1	1	132	1289	270	67
-1	1	1	132	1270	410	78
1	1	-1	139	1090	380	70
-1.633	0	0	102	770	590	76
1.633	0	0	154	1690	260	70
0	-1.633	0	96	700	520	63
0	1.633	0	163	1540	380	75
0	0	-1.633	116	2184	520	65
0	0	1.633	153	1784	290	71
0	0	0	133	1300	380	70
0	0	0	133	1300	380	68.5
0	0	0	140	1145	430	68
0	0	0	142	1090	430	68
0	0	0	145	1260	390	69
0	0	0	142	1344	390	70

Tabla 3.9: Estimadores parametrales por el método OLS para producción de neumáticos

		Respuesta			
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Estimadores OLS	$\hat{\beta}_0$	137.920	1112.950	406.330	68.725
	$\hat{\beta}_1$	16.490	268.150	-99.670	-1.410
	$\hat{\beta}_2$	17.880	246.500	-31.400	4.320
	$\hat{\beta}_3$	10.910	139.480	-73.920	1.635
	$\hat{\beta}_{11}$	-3.900	--	--	1.575
	$\hat{\beta}_{22}$	-3.330	--	16.750	--
	$\hat{\beta}_{33}$	--	213.070	--	--
	$\hat{\beta}_{12}$	5.130	--	--	-1.625
	$\hat{\beta}_{13}$	7.120	--	--	--
	$\hat{\beta}_{23}$	7.870	--	--	--
	$R^2$	96.91%	62.85%	97.37%	95.28%
CME	31.59	103800	399.43	1.29	
p value FA	0.3502	0.0039	0.7900	0.2611	

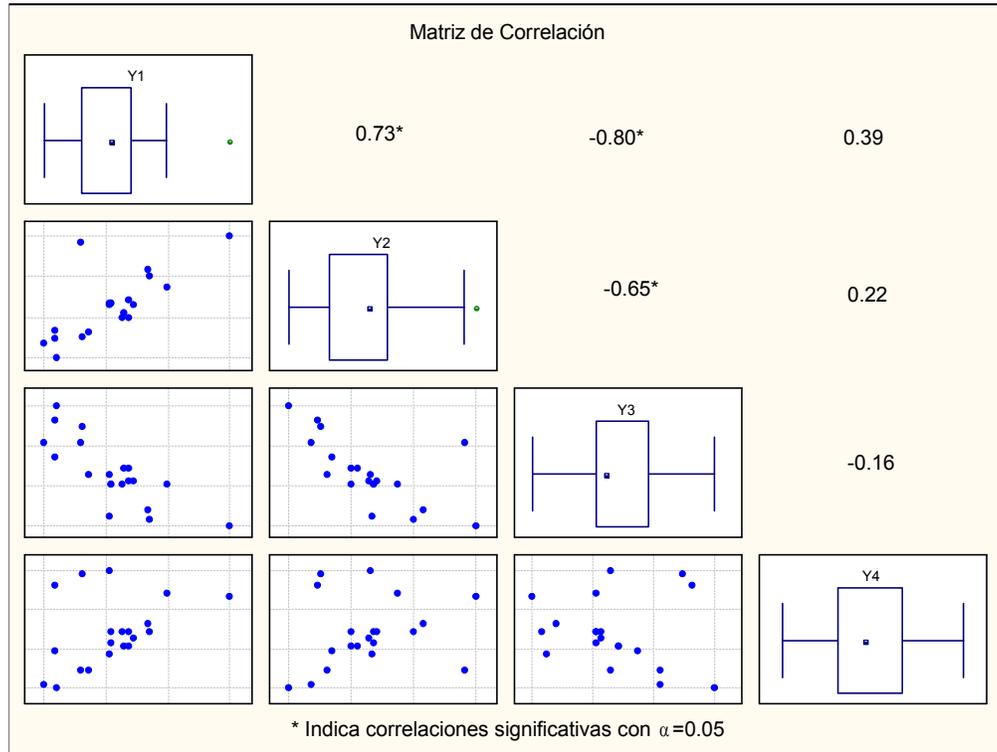


Figura 3.2: Matriz de correlación y gráficas de dispersión para los datos de producción de neumáticos.

de la respuesta estimada, puede provocar que dicha respuesta este fuera del límite de especificación inferior.

Los puntos óptimos individuales que se obtuvieron mediante el análisis de cordillera son presentados en la Tabla 3.11, para los estimadores por mínimos cuadrado, y en la Tabla 3.12 para los estimadores por el método SUR.

Las especificaciones para este proceso de encuentran bien definidas. En ese sentido se propone estrechar dichas especificaciones proporcionalmente a su desviación estándar, según (3.1), se toma  $k = 2$  para todas las variables, a excepción de la segunda variable, cuyo valor del  $CME$  es muy grande y hace que, al adoptar el mismo criterio que para el resto de las respuestas, el límite de especificación inferior esté por encima del valor objetivo para  $y_2$ . Para esta última variable, el óptimo individual toma un valor mucho mayor al valor más deseable, por lo que se propone cambiar dicho valor, así como la cota inferior, esto con el fin de darle mayor flexibilidad. De esta manera las nuevas especificaciones están dadas en la Tabla 3.13.

Tabla 3.10: Estimadores parametrales por el método SUR para producción de neumáticos

	Respuesta				
	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$	
Estimadores SUR	$\hat{\beta}_0$	137.892	1111.244	406.960	68.713
	$\hat{\beta}_1$	16.494	268.151	-99.666	-1.410
	$\hat{\beta}_2$	17.881	246.503	-31.396	4.320
	$\hat{\beta}_3$	10.907	139.485	-73.919	1.635
	$\hat{\beta}_{11}$	-3.815	--	--	1.593
	$\hat{\beta}_{22}$	-3.373	--	15.810	--
	$\hat{\beta}_{33}$	--	215.634	--	--
	$\hat{\beta}_{12}$	5.157	--	--	-1.614
	$\hat{\beta}_{13}$	6.985	--	--	--
	$\hat{\beta}_{23}$	8.122	--	--	--
	$R^2$	96.91%	62.85%	97.37%	95.28%
CME	31.66	103782.00	400.22	1.29	
p value FA	0.3488	0.0039	0.7886	0.2610	

Tabla 3.11: Óptimos individuales para proceso de producción de neumáticos (OLS)

	Óptimo Individual			Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	0.851	0.934	1.137	194.653	2005.416	222.748	73.268
$\mathbf{x}_{02}$	0.519	0.477	1.547	182.871	2095.397	229.080	72.605
$\mathbf{x}_{03}$	-0.984	0.429	-0.081	122.220	944.939	500.005	74.044
$\mathbf{x}_{04}$	0.192	-0.278	0.063	136.076	1105.541	392.560	67.501

Tabla 3.12: Óptimos individuales para proceso de producción de neumáticos (SUR)

	Óptimo Individual			Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	0.850	0.939	1.135	194.860	2006.738	222.804	73.289
$\mathbf{x}_{02}$	0.514	0.473	1.546	182.669	2096.702	230.139	72.587
$\mathbf{x}_{03}$	-0.993	0.418	-0.060	122.055	940.415	500.003	74.061
$\mathbf{x}_{04}$	0.195	-0.277	0.067	136.144	1105.565	392.482	67.499

Tabla 3.13: Especificaciones propuestas para proceso de producción de neumáticos

Respuesta		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Requerimiento		Maximizar	Maximizar	Target	Target
OLS	$LIE_i$	131.241	1300.000	439.971	62.272
	$T_i$	170.000	1350.000	500.000	67.500
	$LSE_i$	--	--	560.029	72.728
SUR	$LIE_i$	131.254	1300.000	440.011	62.275
	$T_i$	170.000	1350.000	500.000	67.500
	$LSE_i$	--	--	559.989	72.725

### Características especiales

- El porcentaje de varianza explicada para la segunda variable es muy bajo.
- Existe una correlación negativa significativa entre las variables  $y_1$  y  $y_3$ .
- El cuadrado medio del error para  $\hat{y}_2$  es de gran magnitud. Se propone hacer una mejora sobre al respecto más adelante.

### 3.4.3 Proceso de lavado de carne

Tseo *et al* [53] investigaron los efectos que en un proceso de lavado de carne tienen la temperatura de lavado ( $x_1$ ), tiempo de lavado ( $x_2$ ), y razón de lavado ( $x_3$ ) sobre la elasticidad ( $y_1$ ), número de ácido tiobarbitúrico ( $y_2$ ), porcentaje de pérdida de cocimiento ( $y_3$ ) y el índice de blancura ( $y_4$ ) de la carne picada de salmonete. Los valores de las variables independientes no codificadas no son proporcionadas en la referencia de donde se tomaron los datos. El objetivo es encontrar los valores de las variables de diseño que satisfagan las siguientes condiciones de las variables de respuesta:

Elasticidad	máximo $\geq 1.7$
Ácido tiobarbitúrico	mínimo $\leq 21$
Pérdida de cocimiento	mínimo $\leq 20$
Índice de blancura	máximo $\geq 45$

Para estudiar dichos efectos se trabajó con un diseño central compuesto para tres factores con tres repeticiones al centro, obteniendo un total de  $n = 17$  tratamientos, cuyos resultados experimentales se presentan en la Tabla 3.14.

Este conjunto de datos fue analizado por Shah *et al* con el fin de introducir los estimadores SUR como una metodología de optimización, argumentando que cuando las respuestas están correlacionadas estos producen estimadores más precisos, por lo que es de interés analizar dicha correlación, la cual se presenta en la Figura 3.3. En esta gráfica se puede observar que la variable cuatro no está correlacionada con el resto de las variables. sin embargo existe correlación significativa entre las variables  $y_1$ ,  $y_2$  y  $y_3$ . También es posible notar la presencia de datos aberrantes para todas las respuestas, a excepción de la tercera variable. Localizando estos datos en el diseño corresponden a los tratamientos en los que el factor  $x_1$  tiene valores extremos.

Los estimadores para cada una de las respuestas según la selección de variables, tanto por el método OLS y SUR se presentan en las Tablas 3.15 y 3.16 respectivamente. Los modelos obtenidos

Tabla 3.14: Diseño experimental para el proceso de lavado de carne

Diseño (codificado)			Respuestas			
$x_1$	$x_2$	$x_3$	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
-1	-1	-1	1.83	29.31	29.50	50.36
1	-1	-1	1.73	39.32	19.40	48.16
-1	1	-1	1.85	25.16	25.70	50.72
1	1	-1	1.67	40.18	27.10	49.69
-1	-1	1	1.86	29.82	21.40	50.09
1	-1	1	1.77	32.20	24.00	50.61
-1	1	1	1.88	22.01	19.60	50.36
1	1	1	1.66	40.02	25.10	50.42
-1.682	0	0	1.81	33.00	24.20	29.31
1.682	0	0	1.37	51.59	30.60	50.67
0	-1.682	0	1.85	20.35	20.90	48.75
0	1.682	0	1.92	20.53	18.90	52.70
0	0	-1.682	1.88	23.85	23.00	50.19
0	0	1.682	1.90	20.16	21.20	50.86
0	0	0	1.89	21.72	18.50	50.84
0	0	0	1.88	21.21	18.60	50.93
0	0	0	1.87	21.55	16.80	50.98

para las variables  $y_1$  y  $y_4$  son prácticamente los mismos para los dos métodos de estimación, en tanto que los modelos para la tercera variable son diferentes, siendo el obtenido mediante OLS el que presenta mayor porcentaje de varianza explicada y menor  $CME$ . Se puede observar que el factor más significativo para las variables es  $x_1$ . Los modelos para las tres primeras características explican un buen porcentaje de varianza, caso contrario al valor  $R^2$  para la cuarta variable, la cual además presenta falta de ajuste al igual que la variable  $y_2$ .

Pasando por alto la falta de ajuste de algunos de los modelos prosigue a encontrar los puntos óptimos individuales mediante el análisis de cordillera para ambos métodos de estimación, cuyos resultados se presentan en las Tablas 3.17 y 3.18.

En este proceso se cuenta con la información en cuanto a las cotas superiores, o inferiores, según el caso, sin embargo no se cuenta con información acerca de los valores más deseables para las respuestas. Haciendo uso de los criterios dados por las ecuaciones (3.2) y (3.3) se tienen las especificaciones del problema mostradas en la Tabla 3.19.

Hay que recalcar que los valores objetivo obtenidos mediante el uso de los criterios planteados para la segunda variable, están por fuera de los límites requeridos para esta, por lo que se tomo como valor objetivo al valor óptimo individual. En el caso de la cuarta variable el target obtenido estaba por encima del valor óptimo individual por lo que se uso este último como el valor más deseado. El caso de la segunda variable es similar.

Tabla 3.15: Estimadores parametrales por OLS para los datos del proceso de lavado de carne

		Respuesta			
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Estimadores OLS	$\hat{\beta}_0$	1.885	22.648	18.960	51.910
	$\hat{\beta}_1$	-0.097	5.615	0.740	2.436
	$\hat{\beta}_2$	-0.001	-0.218	-0.012	--
	$\hat{\beta}_3$	--	--	-1.070	--
	$\hat{\beta}_{11}$	-0.104	7.832	3.220	-3.429
	$\hat{\beta}_{33}$	--	--	1.340	--
	$\hat{\beta}_{12}$	-0.026	2.580	1.800	--
	$\hat{\beta}_{13}$	--	--	2.100	--
$R^2$		94.00%	93.42%	84.09%	54.06%
CME		0.001	7.540	4.560	14.220
p value FA		0.0555	0.0074	0.1638	0.0003

Tabla 3.16: Estiamdores parametrales SUR para los datos del proceso de lavado de carne.

		Respuesta			
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Estimadores SUR	$\hat{\beta}_0$	1.885	22.648	18.892	51.910
	$\hat{\beta}_1$	-0.097	5.615	0.744	2.436
	$\hat{\beta}_2$	0.003	-0.329	-0.226	--
	$\hat{\beta}_3$	--	--	-1.297	--
	$\hat{\beta}_{11}$	-0.104	7.832	3.231	-3.429
	$\hat{\beta}_{33}$	--	--	1.407	--
	$\hat{\beta}_{12}$	-0.026	2.564	1.770	--
	$\hat{\beta}_{13}$	--	--	1.805	--
$R^2$		93.93%	93.41%	83.28%	54.06%
CME		0.001	7.551	4.794	14.221
p value FA		0.0549	0.0074	0.1564	0.0003

Tabla 3.17: Óptimos individuales para el proceso de lavado de carne (OLS)

	Óptimo Individual			Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	-0.603	1.326	0.000	1.925	19.758	18.229	49.194
$\mathbf{x}_{02}$	-0.579	1.579	0.000	1.929	19.320	17.946	49.350
$\mathbf{x}_{03}$	-0.031	0.003	0.051	1.888	22.480	18.886	51.831
$\mathbf{x}_{04}$	0.355	0.000	0.000	1.837	25.628	19.629	52.343

Tabla 3.18: Óptimos individuales para el proceso de lavado de carne (SUR)

	Óptimo Individual			Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	-0.604	1.400	0.000	1.931	19.485	17.808	49.188
$\mathbf{x}_{02}$	-0.582	1.597	0.000	1.935	19.124	17.547	49.334
$\mathbf{x}_{03}$	-0.012	0.004	0.021	1.886	22.580	18.856	51.880
$\mathbf{x}_{04}$	0.355	0.000	0.000	1.837	25.628	19.629	52.343

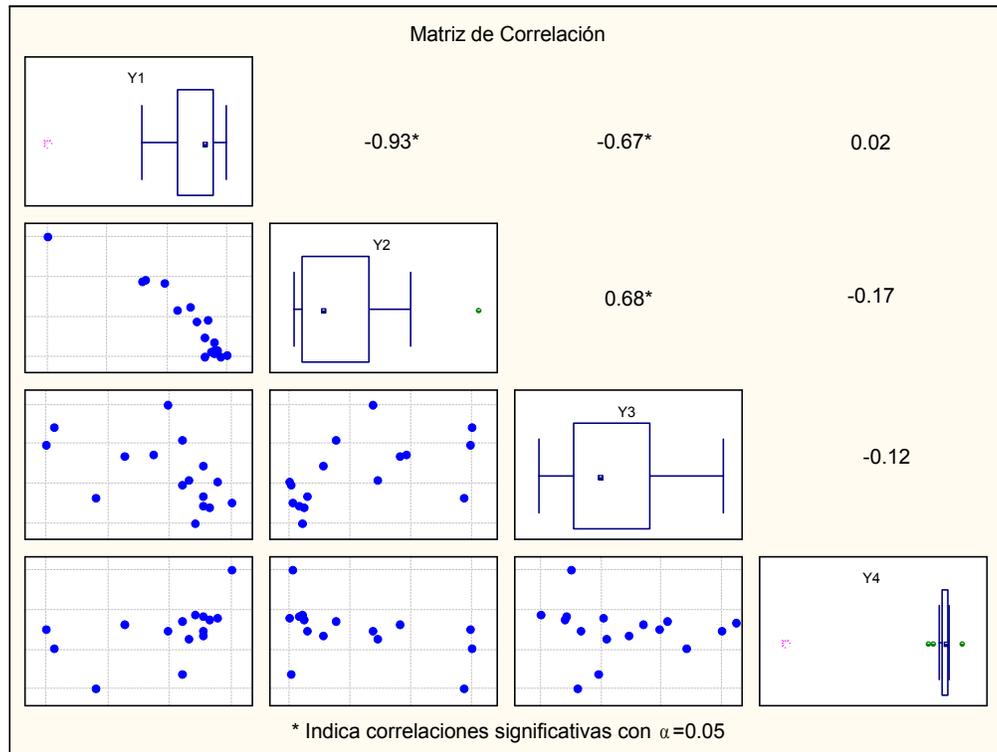


Figura 3.3: Matriz de correlación y gráficas de dispersión para los datos del proceso de lavado de carne.

### Características especiales

- La variable  $y_2$ , según las especificaciones del proceso, debe ser menor a 21, sin embargo los valores estimados para el diseño utilizado están todos por encima de este valor, tanto para el modelo obtenido por OLS como al obtenido por SUR, lo cual hace que la implementación del procedimiento de optimización conocido como el grado de satisfacción no pueda llevarse a cabo ya que, al ser todos los valores mayores al límite inferior de especificación, entonces las deseabilidades estimadas son todas igual a cero, lo cual hace imposible modelarlas y, por lo tanto, estimarlas.
- Hay presencia de datos aberrantes para algunas de las variables.
- Los modelos estimados, tanto por OLS como por SUR, para dos de las variables presentan falta de ajuste.
- Los modelos estimados para la variable  $y_4$  explican un bajo porcentaje de la variabilidad del

Tabla 3.19: Óptimos individuales para el proceso de producción de quesos (OLS)

Respuesta		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Requerimiento		Maximizar	Minimizar	Minimizar	Maximizar
OLS	$LIE_i$	1.700	–	–	45.000
	$T_i$	1.780	19.320	18.886	52.343
	$LSE_i$	–	21.000	20.000	–
SUR	$LIE_i$	1.700	–	–	45.000
	$T_i$	1.782	19.124	18.856	52.343
	$LSE_i$	–	21.000	20.000	–

proceso.

### 3.4.4 Proceso de producción de circuitos

Del Castillo *et al* [13] presentaron este conjunto de datos, en el cual se describe un proceso de unión de alambres (wire bond, en inglés), el cual consiste en interconectar placas de plomo (posición A) y chips de silicón (posición B) con el fin de obtener circuitos. El proceso de manufactura consiste en introducir las placas en un sistema de calentamiento en el que el alambre se une en ambos extremos usando una cierta combinación de calor, de presión, y de energía ultrasónica que producen una soldadura, después los componentes son adheridos a un empaque de plástico. Las variables que afectan la temperatura de la unión de alambres son la razón de flujo  $N_2$  ( $x_1$ ), la temperatura del flujo  $N_2$  ( $x_2$ ) y la temperatura de un calentador de roca ( $x_3$ ). Los valores originales para cada una de las variables independientes son los siguientes.

Factor	Nivel		
	Bajo	Medio	Alto
$x_1$	40	80	120
$x_2$	200	325	450
$x_3$	150	250	300

El objetivo del experimento es encontrar condiciones de operación que logren la obtención de temperaturas óptimas durante la unión de los alambres que no excedan las temperaturas de fundido del empaque plástico. Las respuestas que fueron medidas, así como sus especificaciones y valores objetivos, son las siguientes.

Tabla 3.20: Diseño experimental para el proceso de producción de circuitos.

Diseño (codificado)			Respuestas					
$x_1$	$x_2$	$x_3$	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$	$y_5$	$y_6$
-1	-1	0	139	103	110	110	113	126
1	-1	0	140	125	126	117	114	131
-1	1	0	184	151	133	147	140	147
1	1	0	210	176	169	199	169	171
-1	0	-1	182	130	122	134	118	115
1	0	-1	170	130	122	134	118	115
-1	0	1	175	151	153	143	146	164
1	0	1	180	152	154	152	150	171
0	-1	-1	132	108	103	111	101	101
0	1	-1	206	143	138	176	141	135
0	-1	1	183	141	157	131	139	160
0	1	1	181	180	184	192	175	190
0	0	0	172	135	133	155	138	145
0	0	0	190	149	145	161	141	149
0	0	0	180	141	139	158	140	148

Respuestas	<i>LIE</i>	<i>T</i>	<i>LSE</i>
Temperatura máxima en posición A ( $y_1$ )	185	190	195
Temperatura de inicio de unión en posición A ( $y_2$ )	170	185	195
Temperatura al finalizar la unión en posición A ( $y_3$ )	170	185	195
Temperatura máxima en posición B ( $y_4$ )	185	190	195
Temperatura de inicio de unión en posición B ( $y_5$ )	170	185	195
Temperatura al finalizar la unión en posición B ( $y_6$ )	170	185	195

Para investigar los efectos que tienen los tres factores en los modelos de las respuestas, un diseño Box-Behnken fue utilizado para un total de  $n = 15$  tratamientos. El diseño y los resultados experimentales obtenidos son presentados en la Tabla 3.20.

Por la naturaleza de las respuestas (todas son temperaturas) se sospecha la existencia de correlaciones altas entre todas estas temperaturas, lo cual se puede verificar en la Figura 3.4, siendo las mayores correlaciones las que se presentan entre la variable  $y_5$  con las variables  $y_2$  y  $y_3$ .

La existencia de correlación entre las variables pueden tener impacto en la proporción de conformidad para las respuestas, es decir, la probabilidad de que las respuestas estén dentro de la región determinada por las especificaciones [9].

Los estimadores de los parámetros contenidos en los modelos para cada una de las variables de respuesta después de la selección de variables, para los dos métodos de estimación, se presentan en las Tablas 3.21 y 3.22. En estas tablas se observa que los modelos obtenidos mediante OLS y SUR

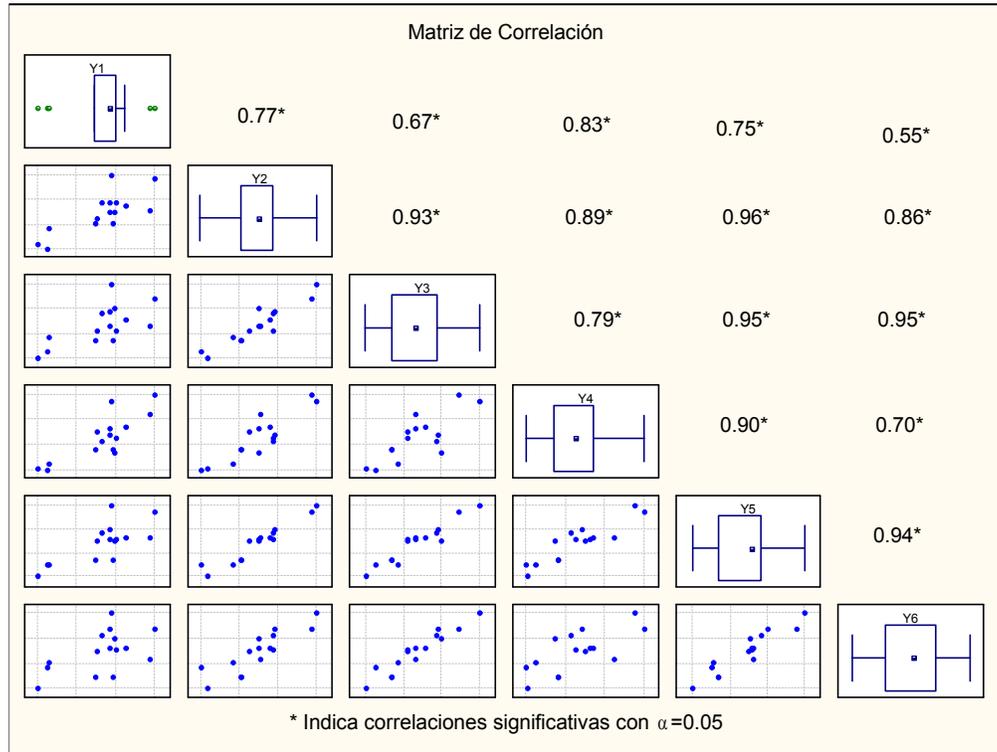


Figura 3.4:

difieren para todas las respuestas, lo cual se esperaba debido a la alta correlación que existe entre las variables. Los modelos obtenidos para este ejemplo no presentan falta de ajuste y su porcentaje de varianza explicada es alto.

Los óptimos individuales obtenidos para este conjunto de datos mediante el uso de los estimadores OLS, se presentan en la Tabla 3.23 en la cual es posible observar que las respuestas predichas  $\hat{y}_2$  y  $\hat{y}_3$  alcanzan sus valores óptimos en el mismo punto dentro de la región experimental. Para el caso de los modelos ajustados con los estimadores SUR, cuyos óptimos individuales se encuentran en la Tabla 3.24, la respuesta  $\hat{y}_5$  también alcanza su mejor valor en el mismo punto que las variables antes mencionadas. Asimismo se observa que tres de las variables no alcanzan sus valores objetivo dentro de la región experimental.

Para este proceso las especificaciones se encuentran bien establecidas, por lo que se toma la propuesta de reducir dichas especificaciones proporcionalmente a la desviación estándar, según (3.1), tomando  $k = 1$  para todas las respuestas, a excepción de las variables  $y_1$  y  $y_4$ , a las que se les considerarán sus especificaciones originales ya que, debido a los valores que toman los cuadrados

Tabla 3.21: Estimadores parametrales para el proceso de producción de circuitos(OLS)

		Respuesta					
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$	$y_5$	$y_6$
Estimadores OLS	$\hat{\beta}_0$	174.930	141.000	139.200	154.857	139.290	146.860
	$\hat{\beta}_1$	--	6.000	6.625	8.500	4.250	4.500
	$\hat{\beta}_2$	23.370	21.620	16.000	30.625	19.750	15.620
	$\hat{\beta}_3$	3.630	14.130	20.375	7.875	16.500	27.380
	$\hat{\beta}_{11}$	--	--	--	-12.857	-5.790	-4.360
	$\hat{\beta}_{12}$	--	--	--	11.250	7.000	4.750
	$\hat{\beta}_{23}$	-19.000	--	--	--	--	--
$R^2$		83.44%	90.70%	85.86%	95.70%	97.92%	98.68%
CME		106.790	52.430	85.650	48.370	13.600	12.260
p value FA		0.4887	0.5701	0.3007	0.1374	0.1272	0.2489

Tabla 3.22: Óptimos individuales para el proceso de producción de quesos (OLS)

		Respuesta					
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$	$y_5$	$y_6$
Estimadores SUR	$\hat{\beta}_0$	174.933	141.000	139.200	154.167	138.742	146.387
	$\hat{\beta}_1$	--	4.656	5.119	7.796	3.756	4.187
	$\hat{\beta}_2$	23.375	21.625	16.000	30.625	19.750	15.625
	$\hat{\beta}_3$	3.625	14.125	20.375	7.875	16.500	27.375
	$\hat{\beta}_{11}$	--	--	--	-11.563	-4.766	-3.475
	$\hat{\beta}_{12}$	--	--	--	11.440	7.024	4.750
	$\hat{\beta}_{23}$	-20.954	--	--	--	--	--
$R^2$		83.23%	90.47%	85.59%	95.60%	97.82%	98.64%
CME		108.178	53.745	87.300	49.524	14.251	12.672
p value FA		0.4839	0.5603	0.2958	0.1344	0.1217	0.2417

Tabla 3.23: Óptimos individuales para el proceso de producción de circuitos (OLS)

	Óptimo Individual			Respuesta					
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$\hat{y}_5$	$\hat{y}_6$
$x_{01}$	0.000	0.962	0.506	190.000	168.948	164.902	188.303	166.639	175.741
$x_{02}$	1.000	1.000	1.000	182.930	182.750	182.200	200.250	181.000	194.750
$x_{03}$	1.000	1.000	1.000	182.930	182.750	182.200	200.250	181.000	194.750
$x_{04}$	0.997	0.778	0.875	183.354	176.166	176.081	189.995	173.005	186.807
$x_{05}$	0.972	1.000	1.000	182.930	182.582	182.015	200.407	181.005	194.732
$x_{06}$	0.837	0.776	0.812	184.041	174.273	173.706	190.431	172.062	185.011

Tabla 3.24: Óptimos individuales para el proceso de producción de circuitos (SUR)

	Óptimo Individual			Respuesta					
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$\hat{y}_5$	$\hat{y}_6$
$\mathbf{x}_{01}$	0.000	0.926	0.417	189.999	166.915	162.512	185.810	163.911	172.271
$\mathbf{x}_{02}$	1.000	1.000	1.000	180.979	181.406	180.694	200.340	181.006	194.849
$\mathbf{x}_{03}$	1.000	1.000	1.000	180.979	181.406	180.694	200.340	181.006	194.849
$\mathbf{x}_{04}$	0.998	0.777	0.875	182.021	174.809	174.569	189.988	172.974	186.882
$\mathbf{x}_{05}$	1.000	1.000	1.000	180.979	181.406	180.694	200.340	181.006	194.849
$\mathbf{x}_{06}$	0.822	0.778	0.816	182.774	173.178	172.482	190.331	171.931	185.013

Tabla 3.25: Especificaciones para el proceso de producción de circuitos

Respuesta	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$	$y_5$	$y_6$	
Requerimiento	Target	Target	Target	Target	Target	Target	
OLS	$LIE_i$	185.000	177.241	179.255	185.000	173.688	173.501
	$T_i$	190.000	185.000	185.000	190.000	185.000	185.000
	$LSE_i$	195.000	187.759	185.745	195.000	191.312	191.499
SUR	$LIE_i$	185.000	177.241	179.255	185.000	173.747	173.548
	$T_i$	190.000	185.000	185.000	190.000	185.000	185.000
	$LSE_i$	195.000	187.759	185.745	195.000	191.253	191.452

medios del error para ellas, las nuevas especificaciones están fuera de las originales. De este modo, los nuevos límites a considerar para la implementación de los planteamientos multi-respuesta son los siguientes.

Para este proceso las especificaciones se encuentran bien establecidas, y se podría considerar propuesta de reducir dichas especificaciones proporcionalmente a la desviación estándar, según (3.1), sin embargo el considerar este criterio da lugar a que los valores estimados para las variables de respuestas se encuentren fuera de las nuevas especificaciones lo que dificulta la implementación de algunos de los métodos, así que se consideraran las especificaciones originales del proceso.

### Características especiales

- Existe una alta correlación entre todas las variables de respuesta.
- Los valores de los cuadrados medios del error para algunas variables es grande y puede provocar valores fuera de las especificaciones.
- Los valores objetivo para las variables  $y_2$ ,  $y_3$  y  $y_5$  no se alcanzan dentro de la región experimental.
- Debido a la alta correlación que hay entre la variable  $y_2$  con las variables  $y_3$  y  $y_5$  es posible

Tabla 3.26: Diseño experimental para imágenes térmicas

Diseño (codificado)		Respuestas		
$x_1$	$x_2$	$y_1$	$y_2$	$y_3$
-1	-1	1.37	2.45	2.17
-1	1	3.35	3.22	1.72
1	-1	2.29	3.04	2.38
1	1	3.44	3.63	1.75
-1.41421	0	2.79	2.87	1.89
1.41421	0	2.8	3.38	2.04
0	-1.414214	2.07	2.72	2.35
0	1.414214	3.86	3.31	1.57
0	0	2.91	3.44	1.96
0	0	3.23	3.33	2.03
0	0	2.79	2.9	1.92
0	0	3.24	3.47	2.06
0	0	3.24	3.47	1.83

eliminar dos de ellas para fines de la aplicación de los métodos de optimización ya que además alcanzan su valor óptimo en el mismo punto.

- Para la primer variable ni los datos experimentales ni los predichos se encuentran dentro de los límites de especificación.

### 3.4.5 Estudio de imágenes térmicas

Ames *et al* presentaron un conjunto de datos pertenecientes a un proceso sobre medios infrarrojos en la proyección de imágenes térmicas. Para construir un prototipo, capas de material fueron revestidas en un laboratorio. Estas placas incluyen un tinte que absorbe el calor, activado térmicamente por un iniciador, y materiales formadores de color, todos dispersos en una pieza de polímero. El objetivo del experimento fue encontrar las cantidades del iniciador ( $x_1$ ) y material para formar color ( $x_2$ ) necesarios para producir color con la menor exposición al calor, sin que la cantidad de iniciador sea degradada. Los valores originales para cada uno de los factores no son proporcionados. Las respuestas que fueron medidas son las densidades ópticas formadas en tres diferentes niveles de exposición láser, siendo estos niveles el nivel 4 ( $y_1$ ), nivel 3 ( $y_2$ ) y nivel 2.5 ( $y_3$ ) y se quiere que todas las densidades de color sean máximas.

El diseño experimental usado fue un diseño central compuesto para dos factores con cinco puntos centrales para un total de  $n = 13$  tratamientos, cuyos resultados experimentales se presentan en la Tabla 3.26.

La matriz de correlación, así como las gráficas de dispersión para este conjunto de datos se presentan en la Figura 3.5, en la que se puede ver que existe una correlación significativa alta entre

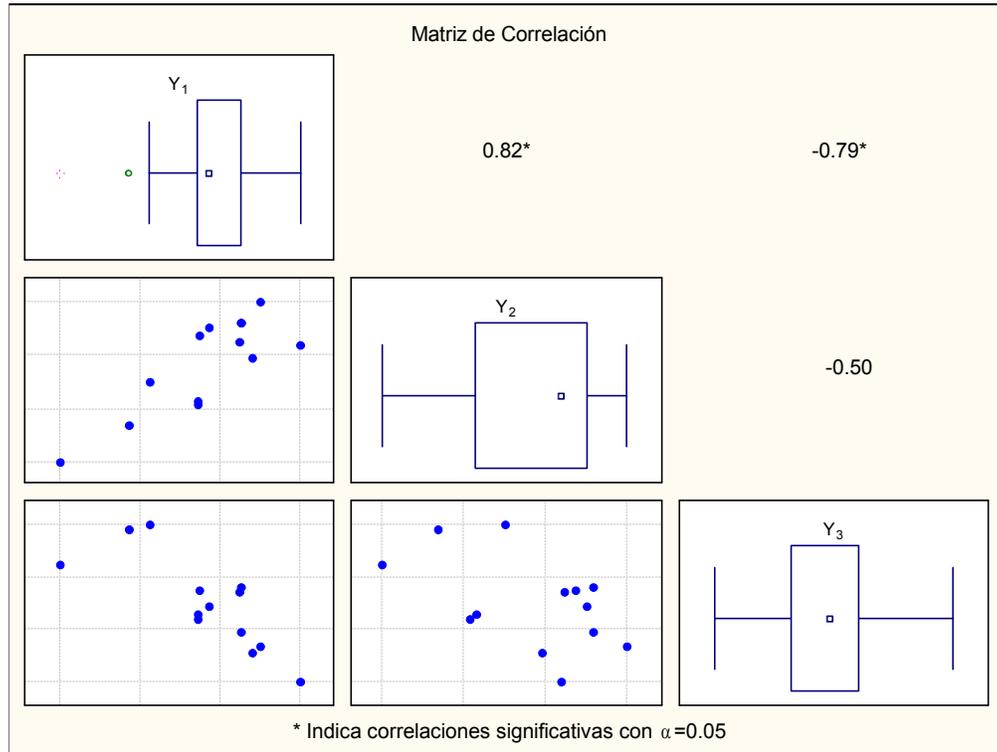


Figura 3.5: Matriz de correlación y gráficas de dispersión para los datos de producción de imágenes térmicas.

las variables  $y_1$  y  $y_2$ , así como una correlación negativa entre las variables  $y_1$  y  $y_3$ , la cual tendrá implicaciones cuando se quiera optimizar conjuntamente las respuestas, ya que como se mencionó anteriormente se quiere maximizar las tres respuestas y la existencia de una correlación negativa hará que al optimizar una de ellas la otra se vea afectada. También se tiene la existencia de un dato aberrante para la variable  $y_1$ , el cual corresponde al tratamiento en que los factores se encuentran en sus niveles bajos.

Después de la selección de variables, los estimadores paramétricos resultantes, para el método de mínimos cuadrados como para el de regresiones aparentemente no correlacionadas, se presentan en las Tablas 3.27 y 3.28, respectivamente, de las cuales se tiene que los modelos obtenidos para las respuestas  $y_1$  y  $y_3$  por OLS son casi los mismos que los obtenidos por SUR. Ninguno de los modelos presenta falta de ajuste. Los modelos para la primera y segunda variable explican porcentajes de la variabilidad aceptables, mientras que el mismo porcentaje para la tercera variable es alto. Para las tres respuestas se tiene que el efecto cuadrado de  $x_1$  no es significativo para el modelo, como

Tabla 3.27: Estimadores parametrales para el proceso de producción de imágenes térmicas (OLS)

		Respuestas		
		$y_1$	$y_2$	$y_3$
Est. OLS	$\hat{\beta}_0$	2.875	3.260	1.970
	$\hat{\beta}_1$	--	0.220	0.057
	$\hat{\beta}_2$	0.708	0.270	-0.270
	$\hat{\beta}_{22}$	--	-0.140	--
	$R^2$	77.28%	75.90%	92.96%
	CME	0.107	0.039	0.005
	p value FA	0.1502	0.8346	0.9237

Tabla 3.28: Estimadores parametrales para el proceso de producción de imágenes térmicas (SUR)

		Respuestas		
		$y_1$	$y_2$	$y_3$
Est. SUR	$\hat{\beta}_0$	2.875	3.236	1.975
	$\hat{\beta}_1$	--	0.168	0.055
	$\hat{\beta}_2$	0.708	0.274	-0.273
	$\hat{\beta}_{22}$	--	-0.104	--
	$R^2$	77.28%	74.13%	92.96%
	CME	0.107	0.042	0.005
	p value FA	0.1502	0.7805	0.9236

tampoco lo es el efecto de interacción entre los dos factores del proceso. Para la primer respuesta solamente el segundo factor es significativo.

Considerando el análisis de cordillera para los modelos presentados anteriormente, se obtuvieron los puntos óptimos para cada una de las respuestas indicados en las Tablas 3.29 y 3.30 para los métodos de estimación.

En el artículo en el que Ames *et al* presentaron estos datos proponen distintos valores target, pero estas propuestas no hablan de los verdaderos valores objetivo del proceso, si no que son propuestas para ilustrar el funcionamiento del planteamiento de la función de pérdida, sin embargo mencionan que son valores aceptables para cada una de las respuestas, por lo que estos valores serán considerados como los límites de especificación inferiores. En cuanto a los valores objetivo

Tabla 3.29: Óptimos individuales para el estudio de imágenes térmicas (OLS)

	Óptimo Individual		Respuesta		
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$
$\mathbf{x}_{01}$	0.000	1.410	3.873	3.362	1.589
$\mathbf{x}_{02}$	1.279	0.597	3.298	3.653	1.882
$\mathbf{x}_{03}$	0.291	-1.378	1.900	2.686	2.359

Tabla 3.30: Óptimos individuales para el estudio de imágenes térmicas (SUR)

	Óptimo Individual		Respuesta		
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$
$\mathbf{x}_{01}$	0.000	1.410	3.873	3.416	1.590
$\mathbf{x}_{02}$	1.166	0.779	3.427	3.582	1.826
$\mathbf{x}_{03}$	0.279	-1.378	1.900	2.707	2.366

Tabla 3.31: Especificaciones para estudio de imágenes térmicas

Respuesta		$y_1$	$y_2$	$y_3$
Requerimiento		Maximizar	Maximizar	Maximizar
OLS	$LIE_i$	3.330	3.460	1.870
	$T_i$	3.857	3.653	2.180
SUR	$LIE_i$	3.330	3.460	1.870
	$T_i$	3.857	3.582	2.180

se adoptó el criterio establecido en (3.2), a excepción de la segunda variable, cuyo valor target obtenido es mayor que el óptimo individual, por lo que este último es considerado como el valor objetivo de la variable. Los valores target y especificaciones para este proceso son los presentados en la Tabla 3.31.

### Características especiales

- Las variables  $y_1$  y  $y_3$  están correlacionadas negativamente, lo cual implica la existencia de un conflicto al momento de la optimización simultánea.
- La primer variable presenta un valor para el cuadrado medio del error mayor a las otras variables (medidas en las mismas unidades).
- Existe la presencia de un dato aberrante para la variable  $y_1$ .

### 3.4.6 Propiedades de proteína de suero.

Khuri y Conlon [27] presentan un conjunto de datos, analizados anteriormente por Richert *et al* [46], en el que se investigan los efectos de la temperatura del calor ( $x_1$ ), nivel de PH ( $x_2$ ), potencial de reducción ( $x_3$ ), oxalato de sodio ( $x_4$ ) y lauril sulfato de sodio ( $x_5$ ) sobre las propiedades espumosas de concentrados de una colección de proteínas globulares que se pueden aislar del suero. Khuri y Conlon escogieron cuatro variables de respuesta relevantes para el proceso, las cuales se quieren maximizar. Estas respuestas son el máximo desbordamiento ( $y_1$ ), tiempo de la primer caída ( $y_2$ ),

proteína no desnaturalizada ( $y_3$ ), y proteína soluble ( $y_4$ ). Los valores originales de los factores son los siguientes.

Factor	Niveles				
	-2	-1	0	1	2
$x_1$	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0
$x_2$	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
$x_3$	-0.025	0.075	0.175	0.275	0.375
$x_4$	0.05	0.035	0.025	0.0125	0
$x_5$	0	0.05	0.10	0.15	0.20

Para investigar los efectos de los factores sobre las cuatro variables de respuesta, se empleó un diseño central compuesto para cinco factores con seis puntos centrales, cuyos resultados experimentales para sus  $n = 32$  tratamientos se presentan en la Tabla 3.32.

La correlación entre las variables de respuesta de interés se presenta en la Figura 3.6, en la que se puede ver que las variables están muy poco correlacionadas, aunque hay que notar la existencia de una correlación negativa entre las variables  $y_2$  y  $y_3$ . También es posible notar la existencia de un dato aberrante para la segunda respuesta, el cual corresponde al octavo tratamiento.

Los estimadores obtenidos para los mejores modelos obtenidos mediante el método de mínimos cuadrados se presentan en la Tabla 3.33.

En cuanto a los estimadores obtenidos mediante la metodología de relaciones aparentemente no correlacionadas, estos son mostrados en la Tabla 3.36. Tanto los modelos obtenidos por OLS como los extraídos por SUR para cada una de las variables presentan falta de ajuste, a pesar de ser los mejores modelos. Los modelos para las cuatro variables, por ambos métodos de estimación, explican un buen porcentaje de varianza.

Mediante un análisis de cordillera se obtuvieron los óptimos individuales para cada una de las respuestas para los dos métodos de estimación, los cuales son presentados en las Tablas 3.35 y 3.36. En estas tablas se puede observar que cuando la segunda variable alcanza su valor óptimo las respuestas estimadas  $\hat{y}_1$  y  $\hat{y}_3$  se ven perjudicadas y viceversa.

Las especificaciones para este proceso, así como los valores más deseables para cada una de las variables, no son conocidos. Ante esta situación se adoptaron los criterios para establecer dichos valores según los descritos

### Características especiales.

- Los modelos para las cuatro respuestas presentan falta de ajuste.
- Existe una correlación negativa significativa entre las variables  $y_2$  y  $y_3$ , y aunque dicha cor-

Tabla 3.32: Diseño central compuesto para datos de proteína del suero.

Diseño (codificado)					Respuestas			
$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
-1	-1	-1	-1	1	1082	4.5	80.6	81.4
1	-1	-1	-1	-1	824	7.5	67.9	69.6
-1	1	-1	-1	-1	953	8.3	83.1	105
1	1	-1	-1	1	759	17	38.1	81.2
-1	-1	1	-1	-1	1163	6.7	79.7	80.8
1	-1	1	-1	1	839	9.5	74.7	76.3
-1	1	1	-1	1	1343	12	71.2	103
1	1	1	-1	-1	736	36	36.8	76.9
-1	-1	-1	1	-1	1027	4	81.7	87.2
1	-1	-1	1	1	836	5	66.8	74
-1	1	-1	1	1	1272	12.5	73	98.5
1	1	-1	1	-1	825	20	40.5	94.1
-1	-1	1	1	1	1363	15	74.9	95.9
1	-1	1	1	-1	855	7.5	74.2	76.8
-1	1	1	1	-1	1284	18.5	63.5	100
1	1	1	1	1	851	12	42.8	104
2	0	0	0	0	1283	12	80.9	100
2	0	0	0	0	651	8.5	42.4	50.5
0	-2	0	0	0	1217	4.5	73.4	71.2
0	2	0	0	0	982	10.5	45	101
0	0	-2	0	0	884	9	66	85.8
0	0	2	0	0	1147	9	71.7	103
0	0	0	-2	0	1081	9	77.5	104
0	0	0	2	0	1036	10	76.3	89.4
0	0	0	0	-2	1213	16	67.4	105
0	0	0	0	2	1103	8.5	86.5	113
0	0	0	0	0	1171	11	77.4	102
0	0	0	0	0	1179	9	74.6	104
0	0	0	0	0	1183	9	79.8	107
0	0	0	0	0	1120	10	78.3	104
0	0	0	0	0	1180	9.5	74.8	101
0	0	0	0	0	1195	11	80.9	103

Tabla 3.33: Estimadores parametrales por OLS de propiedades de proteína

		Respuesta			
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Estimadores OLS	$\hat{\beta}_0$	1146.904	11.020	77.170	104.880
	$\hat{\beta}_1$	-176.083	1.080	-10.121	-8.250
	$\hat{\beta}_2$	--	3.690	-8.679	7.510
	$\hat{\beta}_3$	57.583	1.600	-0.104	2.380
	$\hat{\beta}_4$	21.833	-0.210	--	1.130
	$\hat{\beta}_5$	19.083	-1.500	--	1.660
	$\hat{\beta}_{11}$	-54.221	--	-4.105	-7.460
	$\hat{\beta}_{22}$	--	--	-4.717	-4.750
	$\hat{\beta}_{33}$	-42.096	--	-2.305	-2.670
	$\hat{\beta}_{44}$	-31.346	--	--	-2.100
	$\hat{\beta}_{12}$	--	2.150	-6.206	--
	$\hat{\beta}_{13}$	-48.875	--	2.769	--
	$\hat{\beta}_{14}$	--	-2.750	--	--
	$\hat{\beta}_{15}$	-36.750	-2.120	--	--
	$\hat{\beta}_{25}$	--	-2.350	--	--
	$\hat{\beta}_{35}$	--	--	--	4.090
$R^2$	90.05%	74.97%	93.26%	88.91%	
CME	5291.660	12.560	19.408	34.350	
p value FA	0.0101	0.0021	0.0867	0.0089	

Tabla 3.34: Estimadores parametrales SUR de propiedades de proteína

		Respuesta			
		$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Estimadores SUR	$\hat{\beta}_0$	1119.262	11.016	77.344	104.448
	$\hat{\beta}_1$	-176.083	1.083	-10.121	-8.246
	$\hat{\beta}_2$	--	3.631	-8.959	7.588
	$\hat{\beta}_3$	57.583	1.600	-0.104	2.379
	$\hat{\beta}_4$	18.257	-0.444	--	1.289
	$\hat{\beta}_5$	25.963	-1.047	--	1.355
	$\hat{\beta}_{11}$	-51.204	--	-3.902	-7.446
	$\hat{\beta}_{22}$	--	--	-5.196	-4.614
	$\hat{\beta}_{33}$	-39.603	--	-2.261	-2.642
	$\hat{\beta}_{44}$	--	--	--	-1.704
	$\hat{\beta}_{12}$	2.068	2.067	-6.591	--
	$\hat{\beta}_{13}$	-50.044	--	2.465	--
	$\hat{\beta}_{14}$	--	-2.328	--	--
	$\hat{\beta}_{15}$	-34.087	-1.930	--	--
	$\hat{\beta}_{25}$	--	-2.040	--	--
	$\hat{\beta}_{35}$	--	--	--	3.832
$R^2$	87.42%	73.93%	93.05%	88.77%	
CME	6400.464	13.077	20.031	34.779	
p value FA	0.0065	0.0019	0.0812	0.0087	

Tabla 3.35: Óptimos individuales para el proceso de producción de quesos (OLS)

	Óptimo Individual					Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	-1.421	0.000	1.140	0.285	-0.747	1328.156	11.233	75.664	96.211
$\mathbf{x}_{02}$	1.074	1.248	0.239	-0.472	-1.002	897.198	28.265	35.622	86.161
$\mathbf{x}_{03}$	-1.706	0.200	-1.023	0.000	0.000	1101.234	7.545	85.209	93.326
$\mathbf{x}_{04}$	-0.445	0.573	0.984	0.145	1.573	1310.077	10.833	72.375	118.636

Tabla 3.36: Óptimos individuales para el proceso de producción de quesos (OLS)

	Óptimo Individual					Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	-1.581	-0.050	0.944	0.332	1.217	1467.988	14.433	77.714	104.666
$\mathbf{x}_{02}$	1.233	1.403	0.269	-0.558	-1.058	832.244	29.954	25.362	81.200
$\mathbf{x}_{03}$	-1.931	0.361	-1.067	0.000	0.000	1057.270	7.087	85.638	89.198
$\mathbf{x}_{04}$	-0.458	0.615	1.095	0.197	1.780	1307.051	11.522	71.481	119.091

Tabla 3.37: Especificaciones propuestas para el proceso de propiedades de proteína de suero

	Respuesta	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
	Objetivo	Maximizar	Maximizar	Maximizar	Maximizar
OLS	$LIE_i$	760.419	3.817	46.725	67.023
	$T_i$	1196.882	25.081	73.158	102.188
SUR	$LIE_i$	738.509	3.290	46.540	66.471
	$T_i$	1218.526	24.987	73.394	101.856

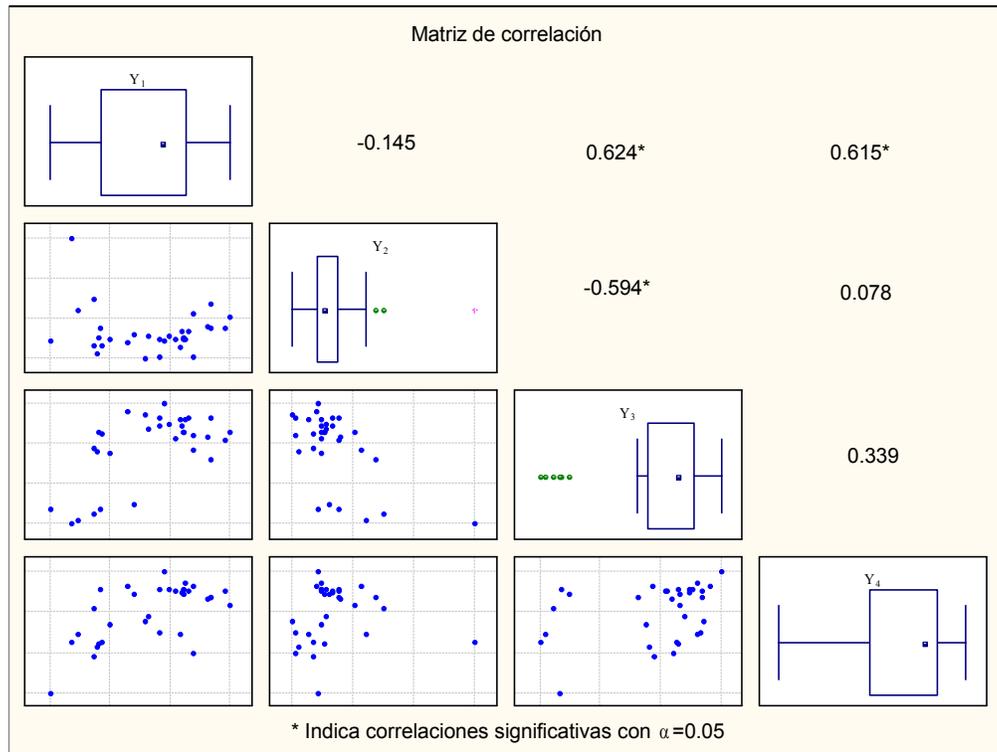


Figura 3.6: Matriz de correlación y gráficas de dispersión para los datos de investigación de propiedades de proteína.

relación no es muy alta, la optimización de dicha variables entra en conflicto.

- La segunda variable presenta un dato aberrante.

### 3.5 Propuesta para variables con alta varianza.

El ejemplo de producción de neumáticos, presentado en la sección 3.4.2, ha sido ampliamente utilizado en la literatura de optimización multi-respuesta para ilustrar la efectividad de los métodos propuestos. En todos los casos se han considerado las restricciones planteadas por Derringer y Suich, pero hay dos situaciones que no han sido consideradas, una de ellas es el cuadrado medio del error de la variable  $\hat{y}_2$  que de alguna manera afecta la eficiencia de los métodos de optimización, debido a que su valor es grande. La otra está relacionada con la desviación estándar y con la estimación de la respuesta en el punto óptimo, ya que al tomar una o dos desviaciones estándar entorno al óptimo, o bien considerando los intervalos de confianza, ya no se cumple con las condiciones propuestas para

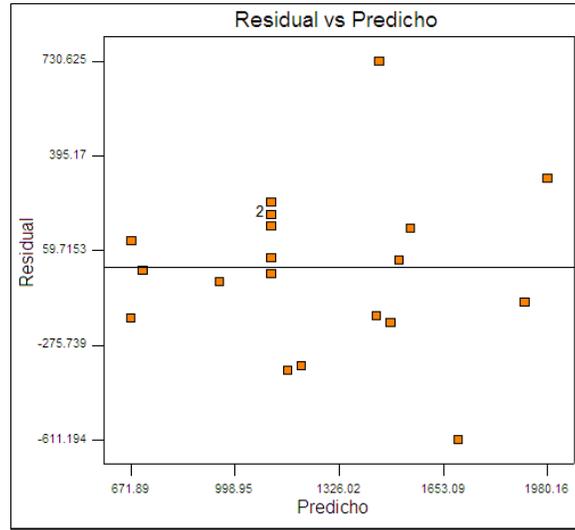


Figura 3.7: Gráfica de residuales contra predichos para la segunda variable.

la variable de respuesta.

Este hecho hace suponer acerca de la existencia de errores con varianza heteroscedástica. La gráfica de residuales contra los valores ajustados se presenta en la Figura 3.7. Ante la posible presencia de heteroscedasticidad, se propone modelar la varianza de la variable  $y_2$  (modulo 200) mediante un procedimiento propuesto por Park [41] en 1976.

Cuando no se cuenta con replicas para una variable de respuesta, una alternativa para obtener una estimación para la varianza del proceso es mediante regresión en dos etapas. El primer paso consiste en tomar el logaritmo natural del cuadrado de los residuales resultantes de la aplicación de mínimos cuadrados ordinarios (OLS) al modelo de regresión. El segundo paso es usar estos valores como los estimadores del logaritmo de la varianza para construir estimadores por mínimos cuadrados generalizados (GLS) de los coeficientes en la ecuación de regresión original. El lector puede encontrar la justificación teórica en el artículo de Park [41], así como en la publicación de Harvey [22] en la que también se propone otro método de estimación.

De esta manera se define una nueva variable  $z_2$ , dada como sigue

$$z_{2j}(\mathbf{x}) = \log [(y_{2j} - \hat{y}_{2j}(\mathbf{x}))^2] \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Considerando los estimadores de mínimos cuadrados para la segunda variable, presentados en la Tabla 3.9, se obtienen sus correspondientes valores estimados a partir de los cuales se obtienen los residuales para la construcción de la variable  $z_2$  la cual se presenta en la Tabla.3.38.

Tabla 3.38: Construcción de la variable  $z_2$ 

$y_2$	$\hat{y}_2$	$z_2$
900	950.855	7.858
860	1208.188	11.705
800	1164.892	11.799
2294	1980.163	11.498
490	671.886	10.407
1289	1487.157	10.578
1270	1443.861	10.317
1090	1701.194	12.831
770	675.059	9.107
1690	1550.841	9.871
700	710.410	4.686
1540	1515.489	6.398
2184	1453.375	13.188
1784	1908.932	9.656
1300	1112.950	10.463
1300	1112.950	10.463
1145	1112.950	6.935
1090	1112.950	6.267
1260	1112.950	9.982
1344	1112.950	10.885

El siguiente paso en la regresión en dos etapas es modelare la nueva variable  $z_2$ . Para esto primeramente se analizó la gráfica de Pareto para esta variable, presentada en la Figura 3.8, en la cual es posible notar que el término que tiene una mayor contribución a la respuesta es el tercer factor cuadrático, lo cual se verifica en el análisis de varianza, presentado en la Tabla 3.39, en la cual resulta que dicho término tienen un efecto significativo sobre la respuesta ( $\alpha = 0.05$ ).

De lo anterior, y tomando un criterio de selección de variables el considerar solamente los términos significativos, resulta que el modelo para la variable  $z_2$  está dado por

$$\hat{z}_2(x) = 8.85 + 1.35x_3^2. \quad (3.5)$$

Estos predichos son los estimadores del logaritmo de la varianza, por lo que se utilizan para estimar los pesos  $w_j$  en la ecuación (2.7) como sigue

$$\hat{w}_j(x) = \exp(\hat{z}_{2j}(x)).$$

Mediante el uso de estos pesos se construye la matriz  $\mathbf{V}$  y se calculan los estimadores por mínimos cuadrados generalizados según la ecuación (2.6), lo cual da un nuevo modelo para la segunda variable, llamada ahora  $y_2^*$ , dado por los estimadores presentados en la Tabla 3.40. Se puede notar que el nuevo modelo obtenido mediante la regresión en dos etapas mejoró notablemente

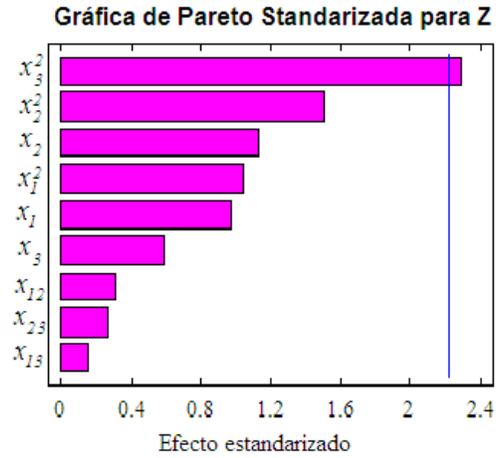


Figura 3.8: Gráfica de Pareto estandarizada para la variable  $z_2$  en el proceso de producción de neumáticos.

Tabla 3.39: Análisis de varianza para la variable  $z_2$ . (DESIGN EXPERT)

Fuente de variación	SC	GL	CM	F	p-valor
Modelo	62.218	9	6.913	1.979	0.1512
$x_1$	4.197	1	4.197	1.202	0.2987
$x_2$	5.667	1	5.667	1.623	0.2315
$x_3$	11.274	1	11.274	3.228	0.1026
$x_1^2$	4.848	1	4.848	1.388	0.2660
$x_2^2$	10.094	1	10.094	2.890	0.1200
$x_3^2$	23.384	1	23.384	6.695	0.0271
$x_1x_2$	0.408	1	0.408	0.117	0.7397
$x_1x_3$	0.309	1	0.309	0.088	0.7724
$x_2x_3$	0.093	1	0.093	0.027	0.8739
Error total	34.928	10	3.493		
Falta de ajuste	14.558	5	2.912	0.715	0.6393
Error puro	20.370	5	4.074		
Total	97.146	19			

Tabla 3.40: Estimadores por OLS y GLS para la segunda variable.

	$y_2$	$y_2^*$
$\hat{\beta}_0$	1112.950	1213.65
$\hat{\beta}_1$	268.150	279.62
$\hat{\beta}_2$	246.500	255.56
$\hat{\beta}_3$	139.480	310.9
$\hat{\beta}_{33}$	213.070	-82.16
$R^2$	62.85%	90.68%
CME	103800	0.00012769
p value FA	0.0039	0.8358

ya que aumentó el porcentaje de varianza estimada, se redujo considerablemente el valor para el cuadrado medio del error y no hay evidencia de falta de ajuste en contraste con el modelo obtenido por mínimos cuadrados ordinarios.

El objetivo de realizar este procedimiento es trabajar con el modelo obtenido mediante mínimos cuadrados generalizados para la optimización conjunta de las variables de respuesta. También se plantea, según el modelo de la varianza presentado en la ecuación (3.5), encontrar el valor del tercer factor tal que la varianza para la segunda variable se minimice y realizar la optimización con este valor fijo. La propuesta es realizar este procedimiento para las variables para las cuales exista la evidencia de varianza heterocedástica.

### Conclusiones del capítulo

A lo largo de este capítulo fueron presentados seis conjuntos de datos experimentales, de cuyo análisis estadístico se pueden notar distintos aspectos que los caracterizan de los demás. Entre las características mencionadas, se destaca que pares de variables en algunos ejemplos presentan correlaciones altas, tanto positivas como negativas, lo cual hace que determinadas variables entren en conflicto según sea la condición óptima que se quiere alcanzar.

Se establecieron criterios para establecer las especificaciones del proceso, en caso de que estos sean desconocidos. También se hacen propuestas acerca de las ponderaciones para cada una de las variables.

En cuanto a la estimación de los parámetros de los modelos para cada una de las variables, es posible establecer que para todos los procesos aquí presentados, los estimadores obtenidos por OLS presentan un mayor porcentaje de varianza explicada y un menor valor para el cuadrado medio del error que los obtenidos por SUR. A pesar de esta situación, los puntos óptimos individuales para cada uno de los procesos producen mejores predichos con los estimadores SUR que con los estimadores OLS.

Se presentó un procedimiento alternativo de modelación ante situaciones en las que se tiene valor alto para la varianza estimada de alguna de las variables. Tal procedimiento ofrece estimadores que reducen significativamente la variabilidad de las respuestas.

Los ejemplos analizados en este capítulo serán retomados en capítulos siguientes para establecer la comparación de los métodos de optimización multi-respuesta así como para evaluar el desempeño de los mismos.

## Capítulo 4

# Propuesta de Optimización Gráfica

En el Capítulo 2 se presentaron los métodos analíticos de optimización, los cuales una vez implementados dan lugar a un punto óptimo. En este capítulo se tiene como propósito presentar una alternativa gráfica al problema de la optimización conjunta de varias características mediante el método de superposición de curvas de nivel, el cual es capaz de proveer toda una región de puntos óptimos los cuales pueden dar soluciones competitivas con los resultados obtenidos para los métodos analíticos, además de que permite al experimentador interactuar con el proceso permitiendo la visualización gráfica de las respuestas analizadas.

En este capítulo también se presentan técnicas gráficas que permiten ilustrar el proceso de optimización para dos de los métodos analíticos presentados anteriormente, así como una herramienta gráfica que permite visualizar la deseabilidad para un conjunto de variables.

### 4.1 Superposición de contornos

Un método de optimización multi-respuesta que puede resultar muy eficaz cuando el número de factores es pequeño (2 o 3 factores) es el conocido como superposición de curvas de nivel. La idea de este método es ajustar un modelo para cada una de las respuestas, y una vez hecho esto, se superponen todas las superficies sobre la región experimental, para localizar dentro de ella sub-regiones en las cuales todos los modelos predicen valores admisibles para las respuestas de interés. Los paquetes *Design Expert* y *Minitab* pueden ser utilizados para la aplicación de este procedimiento.

Cuando se cuenta con dos factores de control, este método resulta muy ilustrativo ya que es muy sencillo superponer las superficies de respuesta sobre la región experimental. Sin embargo cuando se consideran mas de dos factores se tiene que no es tan fácil visualizar las superficies a

la vez sobre la región experimental, pero es posible fijar uno de los factores y estudiar los otros dos factores sobreponiéndolos. Cuando el número de factores es de cuatro, a pesar de ser difícil, es posible aplicar este método fijando dos de los factores y analizar los dos restantes. En este sentido es importante recalcar la importancia que tiene un buen análisis estadístico para cada una de las variables de respuesta, ya que dicho análisis puede dar la pauta correcta para elegir los factores que deben fijarse: por ejemplo, si una vez que se realiza el análisis de varianza resulta que uno de los factores resulta ser no significativo para la variable de estudio este factor puede fijarse ya que el valor se tome para él no va a tener impacto significativo en la respuesta.

A continuación se describe con más detalle el funcionamiento del procedimiento de superposición de contornos para dos y tres variables de control.

#### 4.1.1 Superposición de contornos para dos factores de control

El caso en el que se cuenta con dos factores de control el método gráfico resulta de lo más sencillo, ya que la superposición de curvas de nivel sobre la región experimental puede visualizarse muy fácilmente. Para cada variable de respuesta se plasman las curvas de nivel correspondientes, las cuales se van a sobreponer una sobre otra.

Para mejor entendimiento del método se presentará mediante un ejemplo. Consideremos los datos correspondientes a la producción de quesos, presentados en la sección 3.4.1. Las gráficas de nivel para los modelos completos para cada una de las respuesta se presentan en la Figura 4.1. En este caso la región experimental es una región circular delimitada por la línea punteada.

Una vez que se cuenta con las curvas de nivel individuales, hay que establecer que valores son los mas deseados para cada respuesta. Si se considera como valores factibles a aquellos cuyas respuestas predichas están por encima del valor delimitado por el mayor contorno (tomando en cuenta que se desea maximizar conjuntamente las cuatro respuestas), entonces al realizar la superposición de contornos se obtiene la Figura 4.2. Las respuestas factibles individuales son representadas por las regiones sombreadas. En esta figura se puede observar que hay una región que cumple simultáneamente los requerimientos para las respuestas  $y_1$  y  $y_3$  (denotada por la región sólida), pero no hay una región común a todas las respuestas. Se puede notar que la región factible para la cuarta respuesta está a una distancia considerable del resto de la regiones aceptables por lo que se hace necesario hacer una negociación en cuanto a los valores de la variable  $y_4$  de modo que el resto de las respuestas se puedan maximizar.

Para poder encontrar una región simultanea hay aceptar valores predichos por las respuestas mas bajos que los utilizados anteriormente, en especial para la cuarta variable. Considerando como valores factibles para las tres primeras variables, los mayores al segundo contorno, y para la cuarta variable, valores mayores al último contorno, entonces se obtiene la región que se presenta

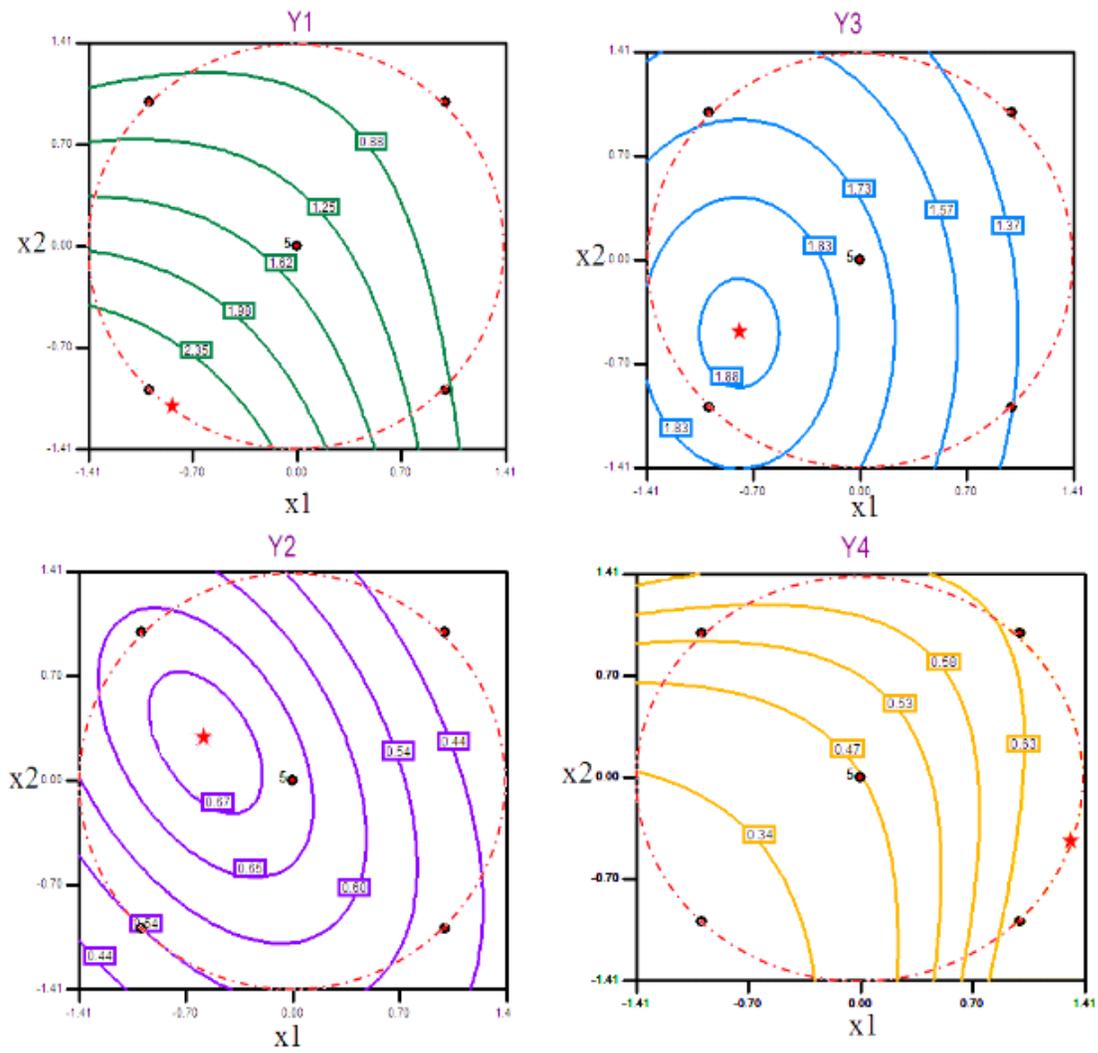


Figura 4.1: Gráficas de contornos para las cuatro respuestas para la producción de quesos. Los puntos marcados con una estrella representan los óptimos individuales.

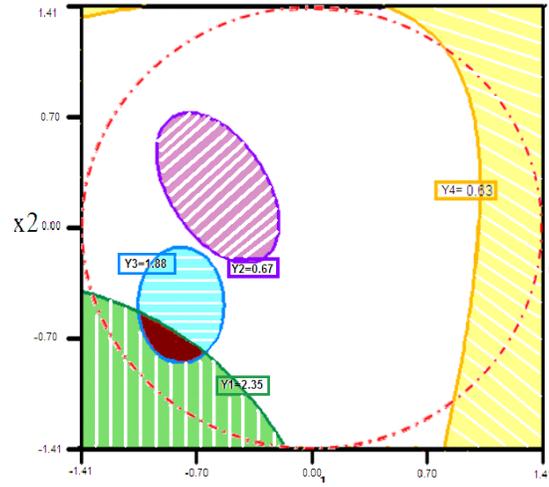


Figura 4.2: Gráfica de superposición de contornos para los datos de producción de quesos. Región óptima para las respuestas  $y_1$  y  $y_3$ .

en la Figura 4.3. De aquí podemos observar que existe una región que es factible y en la que los valores predichos para cada una de las respuestas satisfacen simultáneamente con ser mayores a los establecidos para la elección de estos contornos.

#### 4.1.2 Superposición de contornos para tres factores de control.

El método será ilustrado para un conjunto de datos para mayor comprensión del mismo. Retomando los datos de producción de neumáticos, presentado en la sección 3.4.2, se considera los mejores modelos estimados mediante mínimos cuadrados, según los estimadores presentados en la Tabla 3.9.

Para el caso en que se cuenta con tres factores de control el método gráfico es como sigue, según la propuesta de De la Vara y Domínguez [11].

1. Se consideran los posibles cortes bidimensionales del cubo, para este caso los cortes son en el sentido de los planos  $(x_1, x_2)$ ,  $(x_1, x_3)$  y  $(x_2, x_3)$  y están dados por los valores que se fijen para un tercer factor
2. Para cada variable de respuesta se dibujan las curvas de nivel correspondientes a las especificaciones, esto para cada posible corte del cubo. Para el ejemplo en cuestión se consideran las especificaciones originales del problema, dadas por (3.4).

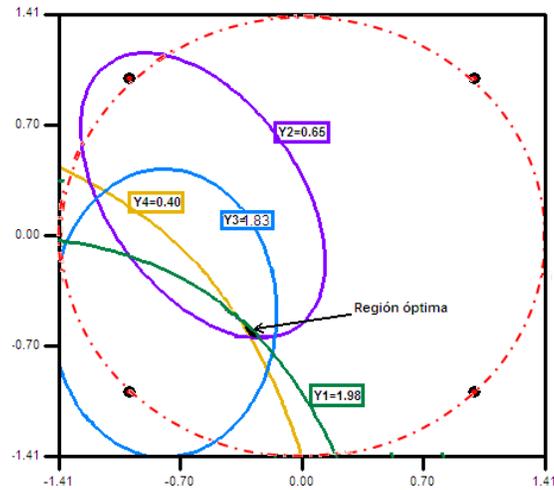


Figura 4.3: Gráfica de superposición de contornos para la producción de quesos. Región óptima para las cuatro respuestas.

3. Se localiza la región donde todas las respuestas predicen valores factibles. Haciendo uso del software *Desing Expert* y fijando el factor no incluido en cada plano, en el centro de la región experimental (haciendo  $x_1, x_3, x_2 = 0$  para los planos  $(x_1, x_2)$ ,  $(x_1, x_3)$  y  $(x_2, x_3)$ , respectivamente) se obtienen las curvas de nivel presentadas en la Figura 4.4. Las regiones que presentan resultados factibles para todas las respuestas se encuentran sombreadas.
  
4. Una vez que se localiza la región factible, se localizan los planos donde la región sombreada es más grande, es decir, los planos que cortan las regiones factibles por su centro. Para el ejemplo particular dichas regiones se muestran en la Figura 4.5
  
5. Una vez que se ha ubicado las regiones descritas en el punto anterior, el siguiente paso es ir estrechando las especificaciones iniciales. De la Vara y Domínguez proponen ir estrechando las especificaciones de acuerdo a la importancia de las mismas. También es posible ir estrechando las especificaciones en porcentajes o proporcionalmente a la desviación estándar. Una vez que se tiene una región factible suficientemente pequeña se localiza el centro de la misma que resulta ser el óptimo simultáneo. Para el caso de la producción de neumáticos las curvas de

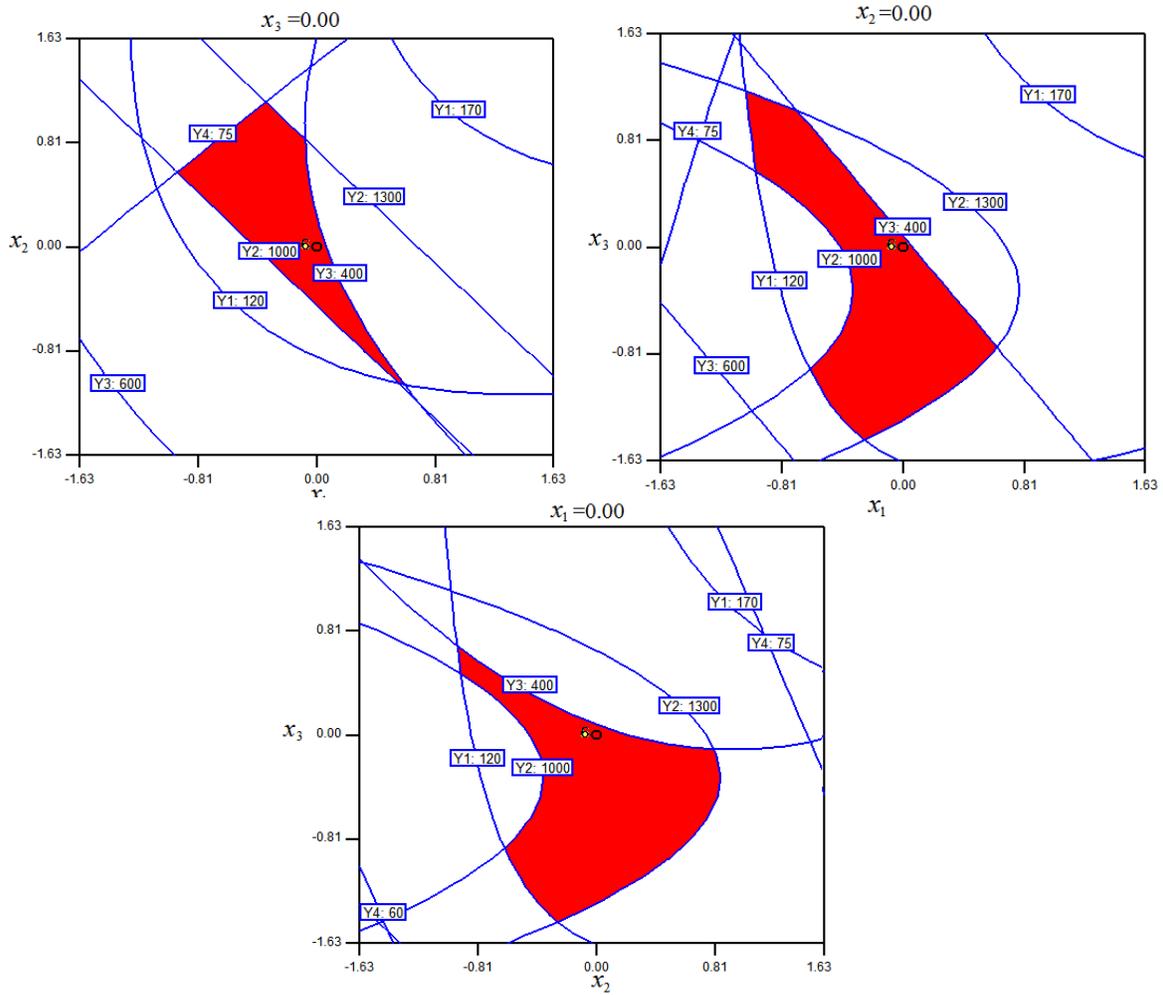


Figura 4.4: Superposición de contornos para los datos de producción de neumáticos, cada uno de los planos centrados en el centro.

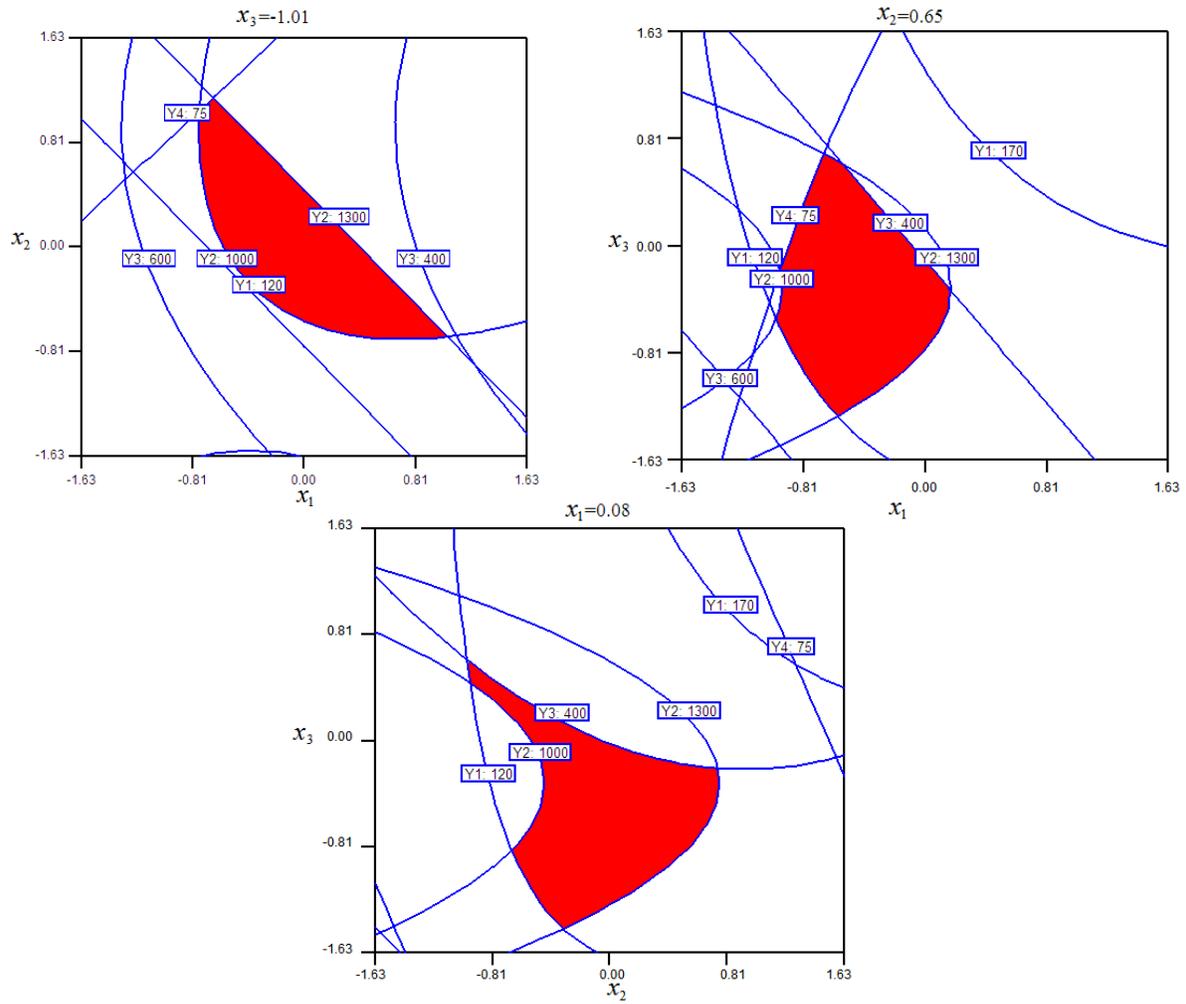


Figura 4.5: Superposición de contornos para los datos de producción de neumáticos, los cortes muestran los planos que hacen las regiones factibles más grandes.

nivel que se tomaron en cuenta, después de estrechar las especificaciones originales, son

$$\begin{aligned} 129 < y_1 < 170 \\ 1192 < y_2 < 1300 \\ 466 < y_3 < 536 \\ 64.8 < y_4 < 70.5 \end{aligned}$$

Las regiones factibles después del estrechamiento de las especificaciones se presentan en la Figura 4.6. En esta figura también se puede observar la interpretación gráfica de cada uno de los cortes del cubo.

Cabe mencionar que las especificaciones empezaron a ser reducidas en la misma proporción esperando que todas las variables se redujeran por igual, sin embargo hubo la necesidad de sacrificar el valor de la variable  $y_1$  con el fin de no perjudicar el desempeño del resto de las variables. El punto óptimo que se obtuvo mediante este proceso, y que corresponde al centro de la región factible, así como los valores obtenidos para cada una de las cuatro variables, se muestran a continuación

Óptimo	$\mathbf{x}_o = (-0.08, 0.65, -1.01)$
Predichos	$\hat{y}_1(\mathbf{x}_o) = 132.85$
	$\hat{y}_2(\mathbf{x}_o) = 1371.79$
	$\hat{y}_3(\mathbf{x}_o) = 460.341$
	$\hat{y}_4(\mathbf{x}_o) = 69.715$

Otra forma de hacer uso de la metodología de superposición de contornos, y que quizá requiere de una buena capacidad de visualización por parte del diseñador, es la de escoger uno de los cortes del cubo y trabajar en base a este plano. En este sentido es donde se hace hincapié en la importancia de un análisis estadístico adecuado a fin de detectar factores poco o no significativos, lo cual será un indicio de la elección de los factores que van a estar fijos. Una vez que se tiene elegido el plano en el que se va a trabajar, se plasman los contornos correspondientes a las especificaciones para cada una de las variables de control. La idea es ir fijando distintos valores del factor que no considerado en el plano y tratar de concebir la región factible en tres dimensiones. Este procedimiento corresponde al punto 3 descrito anteriormente. Retomando los datos de la producción de neumáticos, las curvas de nivel, trabajando en el plano  $(x_1, x_3)$ , se toman distintos valores para el factor  $x_2$ , para los cuales se obtienen sus respectivas curvas de nivel, mostradas en la Figura 4.7.

Una vez que se tiene una idea de las posibles regiones que se pueden obtener, entonces se trata de visualizar la región factible, que para este caso se muestra en 4.9. Mediante este procedimiento el experimentador cuenta con toda una región de puntos que satisfacen simultáneamente los re-

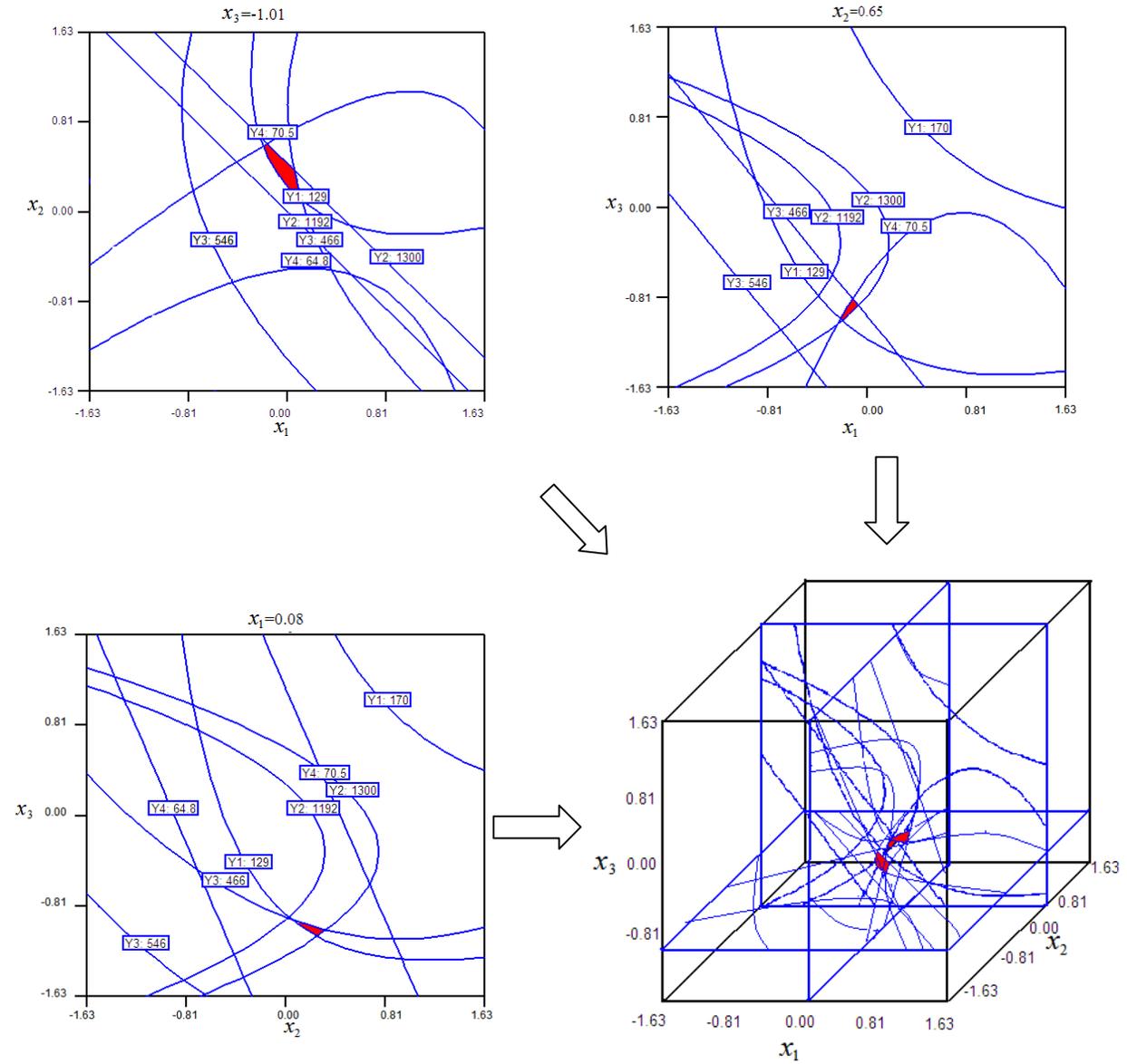


Figura 4.6: Optimización simultánea mediante el uso del método de superposición de curvas de nivel para los datos de producción de neumáticos. Se muestra la interpretación gráfica de cada uno de los cortes.

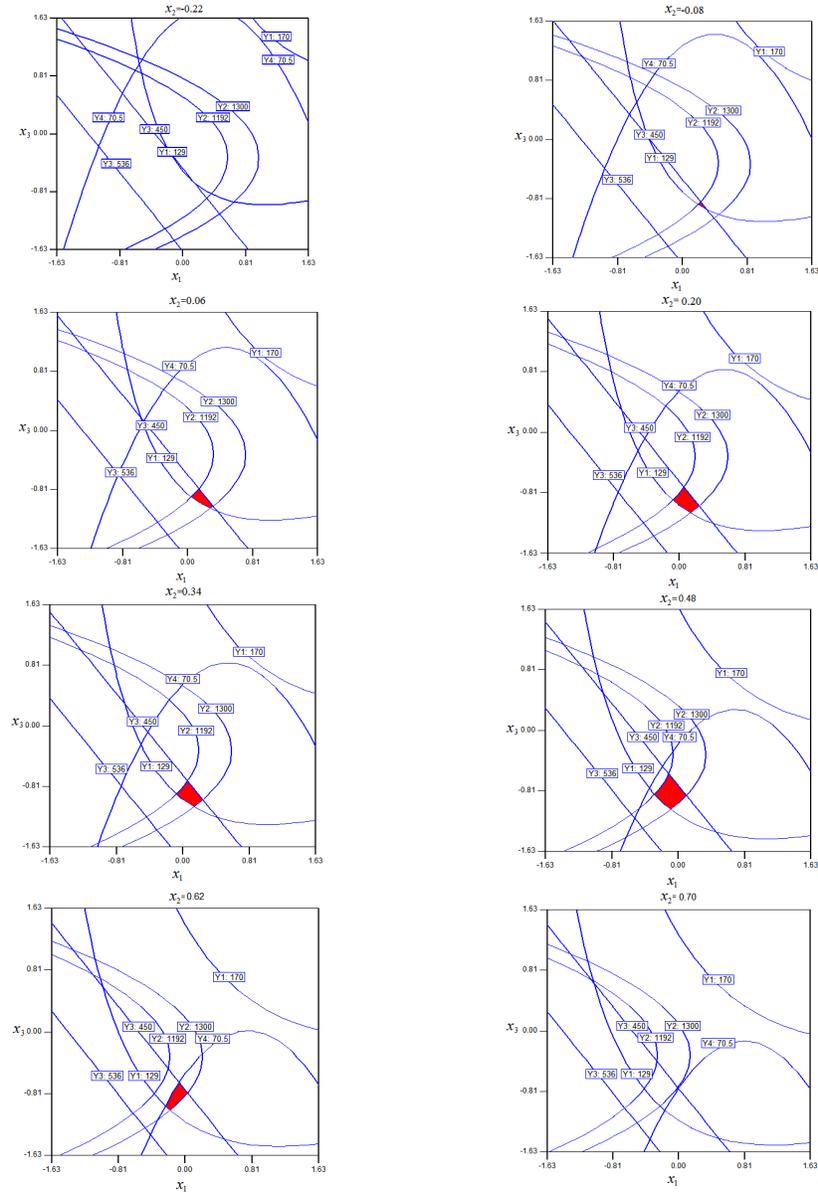


Figura 4.7: Superposición de contornos para distintos valores de  $x_2$  en el plano  $(x_1, x_3)$  para los datos de producción de neumáticos.

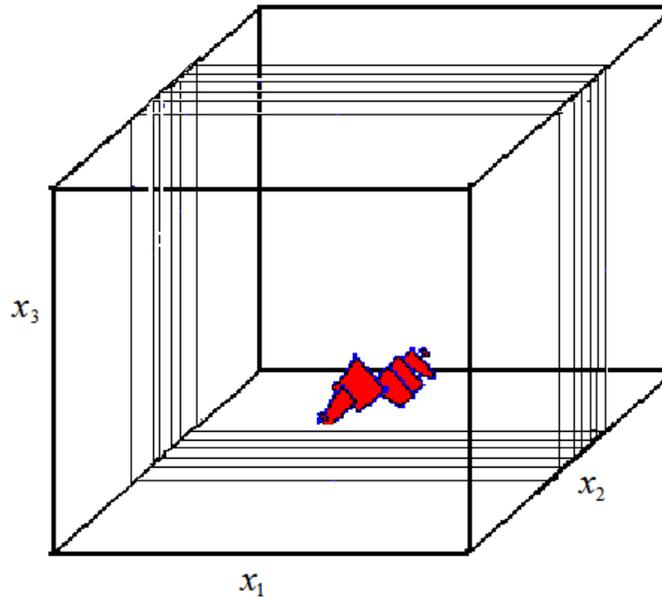


Figura 4.8: Visualización de región de puntos factibles para el proceso de producción de neumáticos.

querimientos para cada una de las respuestas, así que de esta región se puede elegir el punto que más convenga al dueño del proceso.

Una tercer variante del método de superposición de contornos es, haciendo uso del paquete *Design Expert* que tiene una interfaz muy agradable para realizar este procedimiento, elegido un plano, dibujar en este un contorno para cada variable (el valor elegido del contorno puede ser una de las especificaciones) e ir moviendo cada uno de los contornos según el valor requerido para la respuesta, así como ir cambiando los valores del tercer factor, hasta encontrar un punto que satisfaga los valores requeridos. Esta última variante requiere que el investigador tenga la capacidad de reconocer el efecto que tiene cada uno de los factores sobre la respuesta a fin de intuir en que sentido se debe ir moviendo el valor del factor fijo para cada plano a fin de dar con el punto óptimo.

Retomando una vez más el proceso de producción de neumáticos, y tomando como factor fijo a  $x_3$ , el resultado de la optimización se muestra en la Figura 4.9, en la que el punto óptimo se encuentra resaltado en el círculo.

Hay que resaltar que la región obtenida mediante la segunda variante el método gráfico de superposición de contornos contiene a las soluciones obtenidas mediante la primera y tercera variantes, siempre y cuando se estén utilizando las mismas especificaciones.

Otra de las cosas que hay que mencionar en el uso de esta herramienta de optimización es que

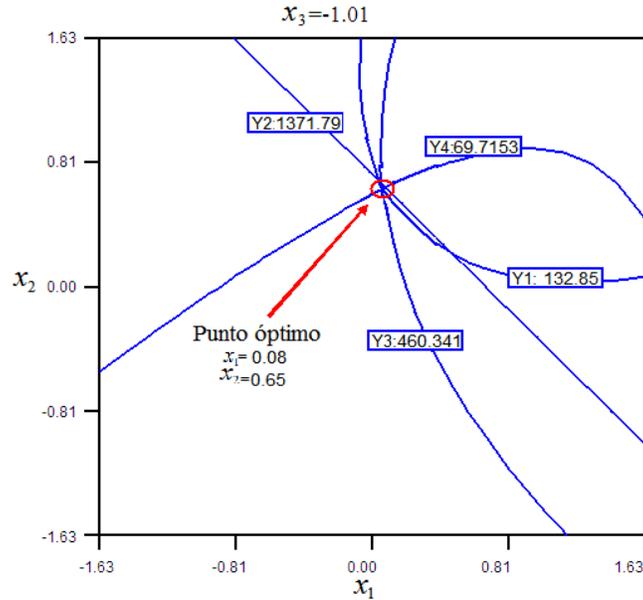


Figura 4.9: Gráfica de superposición de contornos, el punto óptimo obtenido se encuentra señalado con un círculo.

para ciertos conjuntos de datos es posible que con las especificaciones originales no sea posible encontrar una región factible, en cuyo caso no existe una solución para el problema para las restricciones consideradas, por que será necesario que por lo menos una de las variables de respuesta deba de tomar valores fuera de las especificaciones del proceso. También es posible que se localicen varias regiones factibles en cuyo caso puede ser necesario considerar aspectos del proceso, como costos de operación, para elegir una de las regiones.

### 4.1.3 Propuesta de elección de contornos

Como se mencionó anteriormente, para el uso del método gráfico de superposición de contornos es necesario establecer los valores de los contornos para cada una de las variables de respuesta a fin de encontrar una región factible para todas ellas.

Hay que tomar en cuenta que los predichos obtenidos para cada una de las respuestas están basados en aspectos probabilísticos, por lo que de alguna manera hay que tomar en cuenta la aleatoriedad de las variables estimadas, ya que el no hacerlo puede causar que puntos dentro de las regiones que se consideran factibles predigan valores fuera de las especificaciones al considerar los intervalos de confianza

En este sentido se propone realizar la optimización gráfica haciendo uso contornos que tomen

en cuenta la variabilidad de los predichos. Se plantea que los valores de los contornos iniciales en la superposición de curvas de nivel sean como sigue

$$\begin{aligned}y_i^{\max} &= LSE_i - 1.5\hat{\sigma}_i \\y_i^{\min} &= LIE_i + 1.5\hat{\sigma}_i.\end{aligned}$$

El elegir los valores para los contornos de esta manera equivale a ir estrechando las especificaciones con el fin de ir cazando al óptimo global, además de que se considera la variabilidad de cada una de las respuestas estimadas del proceso, lo cual puede traducirse en mejores condiciones óptimas de operación.

Cabe mencionar que la elección de estos contornos puede dar lugar a que no exista una región factible por lo que será necesario sacrificar el valor de una de las variables de modo que el resto de ellas puedan satisfacer los nuevos requerimientos. Una vez más se hace énfasis en la importancia del análisis estadístico de los modelos para las variables de respuesta, ya que a partir de este se pueden elegir variables sacrificables según los aspectos estadísticos que las distingan de las otras.

#### 4.1.4 Consideraciones acerca del método gráfico.

Como se ha mencionado anteriormente, es posible que dentro de un proceso en particular ciertas variables tengan mas importancia que otras. Varios de los métodos analíticos tienen la capacidad de incluir dicha importancia en el planteamiento de optimización. En este sentido mediante el uso de la técnica de superposición de contornos el experimentador tiene la capacidad de incluir la jerarquía de las respuestas al momento de mover los contornos para las mismas, aunque este proceso necesitará de un mayor conocimiento del proceso.

A pesar de las múltiples críticas que este método ha recibido por algunos autores, el método gráfico cuenta con las siguientes ventajas:

- Tiene la habilidad de localizar varias regiones factibles, en caso de que existan, lo cual no sucede con los métodos analíticos.
- Presenta soluciones competitivas con las obtenidas por procedimientos analíticos.
- El experimentador puede explorar visualmente las superficies de respuesta.
- Es capaz de proveer un conjunto de puntos factibles de los cuales el dueño del proceso podrá escoger el tratamiento que mas convenga a sus intereses, asegurándose de que cualquier punto dentro de una región óptima cumplirá con los mismos requerimientos .

Aunque el método de superposición de contornos puede resultar muy eficiente en algunos casos, hay que considerar que tiene ciertas desventajas, las cuales se presentan a continuación:

- El método no es factible para más de cuatro factores de control.
- Es necesario contar con un software que genere las curvas de nivel para cada uno de los modelos de regresión, lo cual para los modelos estimados por el método SUR no está disponible, aunque es posible realizar la superposición con ayuda de un lenguaje de programación pero sin tener la flexibilidad que ofrece un software como Design Expert para los modelos obtenidos por OLS.

## 4.2 Propuesta gráfica para la deseabilidad y el grado de satisfacción

Dada la facilidad que existe actualmente en cómputo, mediante técnicas de graficación se puede ilustrar los procedimientos analíticos de optimización como es el caso de la función de deseabilidad y el planteamiento que mide el grado de satisfacción.

El software *MINITAB* contiene un interfaz gráfico que permite visualizar el proceso de optimización para estos procedimientos, cuyos valores óptimos se obtienen mediante métodos de programación lineal.

Una vez que se han establecido las especificaciones y valores objetivo de la función de deseabilidad para cierto conjunto de datos, el software muestra gráficamente un primer punto óptimo, según se muestra en la Figura 4.10. Esta gráfica fue obtenida para los datos de producción de neumáticos. En la parte de arriba de la figura se presenta los valores óptimos para cada uno de los factores, los cuales se encuentran señalados en los paréntesis [] y que pueden irse cambiando con la línea vertical; los valores correspondientes a la primer columna representan los valores estimados para cada una de las respuestas, representadas por las líneas horizontales punteadas, así como las deseabilidades individuales para cada una de ellas. En cada una de las gráficas interiores, las curvas representan a las respuestas estimadas como funciones unidimensionales cuando los valores de los factores fuera de cada columna se encuentran fijos. El valor de la deseabilidad global se encuentra dado en la parte superior izquierda. Una vez que se cuenta con esta herramienta, el experimentador puede mejorar, de ser posible, el punto óptimo inicial que provee el paquete estadístico cambiando los valores de los factores en la dirección sugerida por las curvas, según se desee incrementar o disminuir, el valor de cierta respuesta. Esta herramienta es de utilidad para predecir los valores de cada una de las respuestas en diferentes valores de los factores.

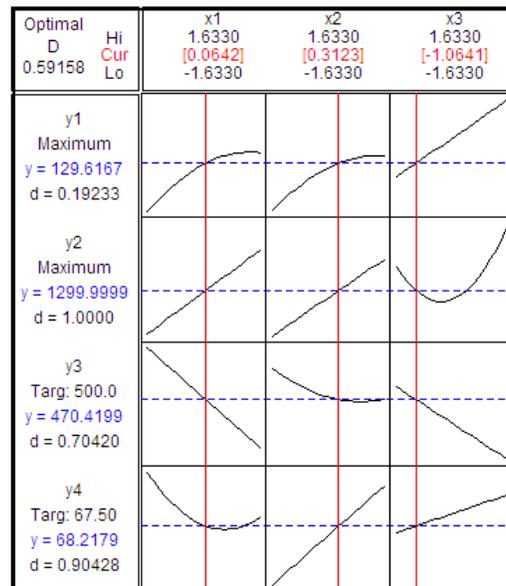


Figura 4.10: Herramienta gráfica para optimizar la función de deseabilidad.

Para el planteamiento que propone optimizar el grado de satisfacción (2.25), se tiene que éste equivale a maximizar  $\{\min[d(\hat{y}_1(\mathbf{x})), d(\hat{y}_2(\mathbf{x})), d(\hat{y}_3(\mathbf{x})), d(\hat{y}_4(\mathbf{x}))]\}$  en la región experimental. Este planteamiento se puede resolver la misma técnica gráfica tal como se muestra en la Figura 4.11. Lo que se ilustra en ésta es la aplicación de la función de deseabilidad a los grados de aceptación:  $d(\hat{y}_i(\mathbf{x}))$ ,  $i = 1, \dots, r$ , fijando como valores objetivo para todas las respuestas al mínimo grado de satisfacción que se desee. En este caso en la primer columna de la gráfica se muestran los grados de satisfacción estimados obtenidos para cada una de las respuestas (en este caso denotados con  $y$ ).

Puede darse el caso de que el punto óptimo que se obtiene en la aplicación del alguno de los planteamientos mencionados tenga un alto costo en la implementación. Esta herramienta gráfica puede ser de utilidad para el experimentador ante esta situación, ya que permite explorar puntos cercanos al óptimo con deseabilidades, o grados de satisfacción, según sea el caso, aceptables que no produzcan esos costos.

En el uso de esta herramienta hay que tener en cuenta la restricción que se tiene en cuanto la región experimental, ya que puede ser que los óptimos obtenidos estén fuera de ésta.

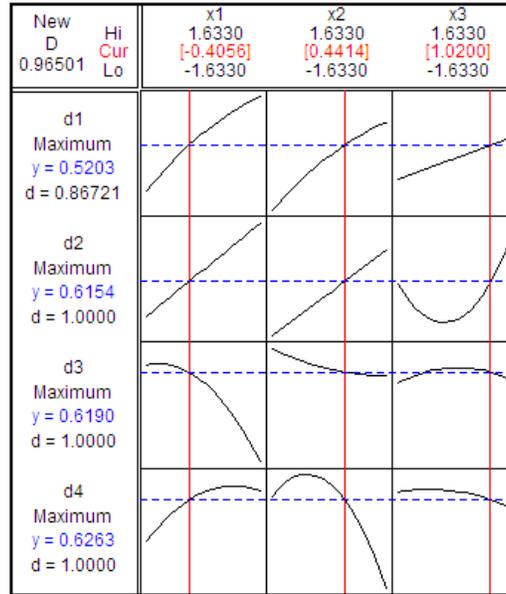


Figura 4.11: Herramienta gráfica para optimizar el grado de satisfacción.

### 4.3 Monograma para visualizar la función de desabilidad

Lazić [33] presentó una herramienta gráfica para visualizar la desabilidad en términos de la escala para la misma, presentada en la Tabla 2.1. El primer caso es considerar la transformación exponencial propuesta por Harrington [20] según la naturaleza de la respuesta.

En el caso de maximizar o minimizar una respuesta, la recta que define la transformación exponencial es definida en base a los valores de la Tabla 2.1 asignando las especificaciones a un valor de desabilidad dado por la calidad esperada del producto. Una vez transformada la variable original en forma lineal se aplica (2.24). Para el caso en que se requiere que la variable de respuesta tome un valor objetivo se recurre a la transformación dada por (2.23)

Una vez que las transformaciones exponenciales son realizadas se deben de reescalar para que sea posible representar todas las desabilidades en una misma gráfica la es llamada *Monograma*, en el cual en el eje de las abcisas se presenta en un primer plano las variables estandarizadas y debajo las mismas variables en su forma original.

La Figura 4.12 representa el monograma para el proceso de producción de quesos presentado en la sección 3.4.1. Para la construcción del mismo se hizo uso de las especificaciones presentadas en la Tabla 3.7 para el modelo con los estimadores OLS y se estableció que dichas especificaciones estuvieran entre las calidades "malo" y "bueno" correspondientes a niveles de desabilidad 0.20 y

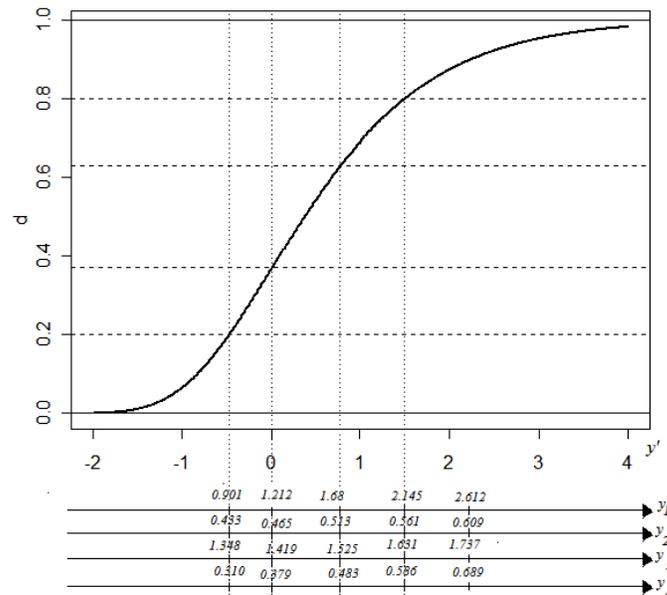


Figura 4.12: Monograma para el proceso de producción de quesos.

0.80, respectivamente. Cabe mencionar que estos niveles se escogieron con el propósito de ejemplificar, aunque la decisión debe tomarse en base a un mayor conocimiento del proceso y de la calidad que se espera del producto.

Para el proceso de producción de circuitos, presentado en la sección 3.4.3, se construyó el monograma para las tres primeras variables del proceso según las especificaciones originales, el cual se presenta en la Figura 4.13.

El monograma permite al experimentados visualizar en conjunto las deseabilidades individuales, además de que permite concebir que valores deberían de tener cada de las variables de respuesta para obtener una buena calidad en el producto. No obstante que el monograma esta diseñado para la tranformación propuesta por Harrington, puede adecuarse a la tranformación de Derringer y Suich. También cabe mencionar que el monograma puede establecerse aun antes de llevar a cabo la experimentación si es que se conocen las especificaciones del proceso.

Una de las desventajas que tiene este instrumento es que solo permite emplearlo para el mismo tipo de respuestas, es decir que en un proceso en que parte de las variables requieran minimizarse y las restantes deban de tomar un valor objetivo, el monograma no podrá ser utilizado.

A pesar de lo intuitivo de esta herramienta, no puede ser aprovechada para fines de optimización ya que a través de ella no es posible establecer los valores que deben tener los factores de control

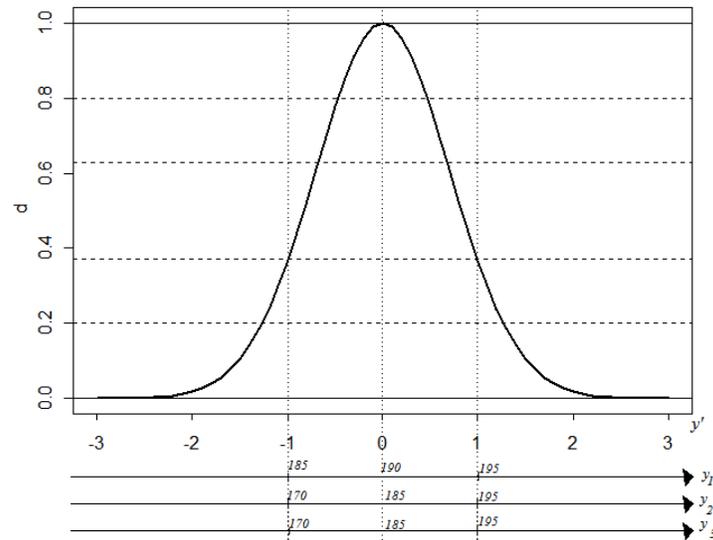


Figura 4.13: Monograma para las tres primeras variables en el proceso de producción de circuitos.

para alcanzar la calidad del producto deseada, aunque puede darse el caso de que, una vez que el experimentador tenga claro la calidad deseada del producto, se tenga un conjunto de soluciones factibles tales que hagan que los valores estimados para las respuestas cumplan todas con esos requerimientos.

### Conclusiones del capítulo

En este capítulo fue presentada la técnica de superposición de contornos la cual, a pesar de las desventajas que presenta, presenta resultados competitivos con los métodos analíticos. Esta técnica además de que permite una visualización gráfica de las respuestas, requiere de gran conocimiento del proceso por parte del experimentador.

También fue presentada una técnica gráfica de optimización para la función de deseabilidad, la cual permite manipular los valores de los factores y al mismo tiempo conocer los predichos para cada respuesta. Se mostró como puede ser utilizada esta técnica como un instrumento en la optimización de la función de deseabilidad como grado de satisfacción.

Por último fue presentada una herramienta que permite visualizar las deseabilidades individuales para las respuestas de interés. A pesar de que el monograma no es útil para fines de optimización, puede resultar útil para mayor entendimiento intuitivo de las variables del proceso.

## Capítulo 5

# Resultados y Discusión

En este apartado se mostrarán los resultados obtenidos para cada uno de los conjuntos de datos cuyas características de interés fueron optimizadas conjuntamente haciendo uso de cada uno de los planteamientos mencionados en la sección 2.5, además del método gráfico.

Para poder realizar una comparación entre los distintos métodos de optimización multi-respuesta es necesario establecer un criterio para tal fin, el cual estará dado por un índice que cuantifique, de alguna manera, la diferencia entre los valores más deseables para cada una de las variables de respuesta con los valores resultantes para dichas variables de la aplicación de los procedimientos.

### 5.1 Implementación de los métodos

Una vez que fueron estimados los modelos de regresión para cada una de las variables de todos los conjuntos de datos presentados en la sección 3.4 el siguiente paso fue proceder con la optimización simultánea. Para tal fin fue necesario obtener una herramienta de tal modo que fuera posible implementar cada uno de los procedimientos de optimización. Los estimadores OLS fueron obtenidos en el software *Design Expert*, mientras para obtener los estimadores SUR fue necesario instalar la librería *systemfit* del software *R* [21], para más detalles se recomienda la lectura de Farnsworth [17].

Cada uno de los planteamientos de optimización que se consideraron para la realización de este proyecto, así como los pasos necesarios para su implementación, son presentados a continuación.

#### **Función de deseabilidad.(FD)**

El planteamiento presentado en la ecuación (2.19), dado por Derringer y Suich [15] puede ser implementado sin dificultad ya sea en *Design Expert* o en *MINITAB*, esto para el caso de los modelos estimados por el método de mínimos cuadrados. Cuando se trabaja con los estimadores

obtenidos por regresiones aparentemente no relacionadas es necesario realizar la programación, que para este trabajo fue realizada en el software *R* y optimizada con el método de Nelder-Mead [39].

### **Grado de satisfacción (GS)**

Para aplicar el modelo de optimización definido en (2.25) para obtener el grado de satisfacción  $\lambda$ , fue necesario calcular las deseabilidades individuales para cada uno de los tratamientos experimentales y luego en *MINITAB* se implementó la herramienta presentada en la sección 4.2.

### **Función de distancia (DI1 y DI2)**

Los dos planteamientos de optimización de la función de distancia presentados en las ecuaciones (2.27) y (2.31), fueron programadas en el software *R*. Cabe recalcar que el método tal como es propuesto por Khuri y Conlon [27] busca obtener el punto  $x$  donde la distancia entre los predichos y los valores óptimos individuales para las respuestas, llamada de aquí en adelante como DI1(OI), sea mínima. En este sentido se programó el método tal cual, tanto para la ecuación (2.27) como para (2.31), aunque también se propone encontrar la mínima distancia entre los valores estimados y el valor objetivo, DI1(T). La función de distancia que toma en cuenta la aleatoriedad de las respuestas (DI2) solamente se optimizó tomando en cuenta a los predichos y los óptimos individuales. Para realizar la optimización para los tres planteamientos dados se utilizó el método de Nelder-Mead (para mayor referencia consultar [39]) en conjunto con el método L-BFGS-B (véase [7]) para la optimización en un área rectangular en el caso de la distancia que toma en cuenta la aleatoriedad.

Es de suma importancia mencionar que el procedimiento tal como lo plantearon Khuri y Conlon supone que cada una de las respuestas tiene la misma estructura en cuanto al modelo del que provienen, por lo que bajo este entendido se debería de trabajar con los modelos completos para cada una de las variables dependientes. Se trató de afrontar esta situación suponiendo la misma estructura en el modelo haciendo que los coeficientes de los términos que no se encuentran en el modelo para las variables tengan valor nulo. Es de interés investigar si esto afecta de alguna manera la efectividad del método.

### **Función de pérdida (FP)**

Para la implementación del método de la función de pérdida (FP) planteado en la ecuación (2.32) se programó dicha ecuación en el software *R* y la optimización se realizó con el método de Nelder-Mead (a excepción de los datos para producción de circuitos, cuya región experimental es cúbica, para los cuales se utilizó el método L-BFGS-B).

### Índice TOPSIS (TO)

Con el fin de poder ejecutar el planteamiento dado por el índice TOPSIS (TO), fue necesario calcular en primera instancia el indicador presentado en la ecuación (2.37) para después plantear un modelo de regresión de segundo orden para el mismo. Una vez realizado este paso se optimizó el modelo obtenido en el software *R*. Dicha optimización puede realizarse mediante un análisis de cordillera si se toma en consideración al índice *C* como una variable de respuesta. Otra opción es optimizar el modelo de regresión como una función de los factores de control mediante el uso del método de Nelder-Mead.

### Componentes principales (PC)

Una vez que las pérdidas estandarizadas, según la ecuación (2.38), son calculadas el siguiente paso es calcular el primer componente principal para estas nuevas respuestas. Como se mencionó anteriormente los componentes principales fueron calculados en base a la matriz de correlación. Este paso puede realizarse en paquetes como *MINITAB*, *STATISTICA*, *STATGRAPHICS*, o incluso *R*, entre otros. El primer componente principal, al igual que en el índice TOPSIS, se considera como una nueva variable de respuesta, cuyo modelo estimado se optimiza con las mismas opciones que las mencionadas para el índice *C*.

### Método grafico (GR)

El método de superposición de contornos (GR) para obtener un óptimo global fue llevado a cabo en el software *Desing-Expert* solamente para los modelos estimados mediante mínimos cuadrados y para los conjuntos de datos con dos o tres factores de control.

## 5.2 Medida de discordancia para comparar

Es necesario establecer una medida que cuantifique la eficiencia de los métodos con el fin de poder establecer una comparación entre ellos. La medida elegida debe de tomar en cuenta el tipo de cada variable, así como los valores más deseables para las mismas. De está manera se propone emplear la función de discordancia estandarizada para hacer una evaluación de la eficiencia de los métodos, así el que tenga la menor función de discordancia será considerado como el método más eficiente.

Se define la función de discordancia estandarizada como

$$P(\mathbf{x}) = \sqrt{\sum_{i=1}^r (Z_i(\mathbf{x}) - Z_i^{\max})^2}, \quad (5.1)$$

donde  $Z_i^{\max} = 1$  y  $Z_i$  está dada según el tipo de variable, como sigue:

- Cuando se desea maximizar la respuesta,

$$Z_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} \hat{y}_i(\mathbf{x})/T_i & \text{si } \hat{y}_i(\mathbf{x}) \leq T_i \\ 1 & \text{si } \hat{y}_i(\mathbf{x}) > T_i \end{cases} .$$

- Si se quiere minimizar una respuesta, entonces

$$Z_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} \hat{y}_i(\mathbf{x})/T_i & \text{si } \hat{y}_i(\mathbf{x}) \geq T_i \\ 1 & \text{si } \hat{y}_i(\mathbf{x}) < T_i \end{cases} .$$

- En el caso de que se requiera que la variable de respuesta tome un valor nominal  $T_i$ , se tiene que

$$Z_i(\mathbf{x}) = \hat{y}_i(\mathbf{x})/T_i \text{ para todo } \hat{y}_i(\mathbf{x}).$$

La función de discordancia generalizada definida anteriormente será pequeña cuando el valor predicho para cada una de las respuestas sea cercano a los valores más deseables, y además no penaliza a los métodos cuando la respuesta predicha en el óptimo encontrado por cada uno de ellos alcanza valores mayores al más deseable en el caso de maximizar la respuesta, o valores menores en el caso de minimizar. También es posible incluir un pesos adicional a esta función de modo que tome en cuenta la importancia de la variable.

### 5.3 Resultados de optimización

En cada uno de los casos, y al no contar con mayor información al respecto, se supuso que todas las variables contaban con igual importancia dentro del proceso. Las especificaciones consideradas para cada uno de los conjuntos de datos corresponden a las presentadas en la sección 3.4 en el apartado correspondiente a cada uno de los ejemplos. Hay que mencionar que los resultados obtenidos para cada uno de los dos métodos de estimación (OLS y SUR) no son comparables entre sí, a menos que se tengan los mismos valores objetivo y las mismas especificaciones, ya que de otra manera cada uno de los modelos estimados persiguen distintos valores target. En esta dirección no será posible comparar los métodos de estimación OLS y SUR a menos que se indique que las especificaciones del problema son las mismas para ambos.

Aunque en esta sección se presentan los resultados de la optimización global para cada uno de los métodos a los seis conjuntos de datos analizados, los dos ejemplos que serán analizados con más detalle serán el proceso de producción de quesos y el de producción de neumáticos.

### 5.3.1 Proceso de producción de queso

Se retoman los datos del proceso de producción de quesos presentados en la sección 3.4.1. Se quiere encontrar la mejor combinación de los dos factores de control tal que las cuatro variables de respuesta se maximicen simultáneamente. Con el empleo de los estimadores obtenidos por mínimos cuadrados, presentados en la Tabla 3.3 y después de la implementación de los procedimientos de optimización multi-respuesta se obtuvieron los óptimos globales presentados en la Tabla 5.1. En la primer columna de esta tabla se refiere al método implementado y la última columna representa el valor obtenido para la función de discordancia presentada en (5.1) para el método correspondiente.

Este conjunto de datos fue analizado por Khuri y Conlon [27] y por Kim y Lin [29]. En el primer artículo estos datos son optimizados conjuntamente usando la función de distancia de los predichos a los óptimos individuales y en el segundo se maximiza el mínimo grado de satisfacción. En este último escrito Kim y Lin afirman que el método que proponen produce mejores resultados que el de Khuri y Conlon, aunque ésta afirmación la hacen considerando como medida de comparación el mínimo grado de satisfacción.

En la tabla antes mencionada puede observarse que, según la medida de discordancia y con las especificaciones consideradas, el método más eficiente resultó ser el conocido como el grado de satisfacción seguido por la función de distancia al valor target y la función de deseabilidad. Cabe mencionar que mediante el método gráfico se obtiene un resultado competitivo con los tres mencionados anteriormente. El punto óptimo que se generó mediante el método de superposición de contornos, así como la ubicación gráfica para los óptimos globales obtenidos por los distintos métodos de estimación, se presentan en la Figura 5.1(a). El método de la función de distancia de los predichos al óptimo individual no obtiene resultados satisfactorios ya que la primer variable persigue estar cercana a su valor óptimo, el cual es grande a comparación del valor objetivo propuesto. Además, como se menciona anteriormente, debido a la alta correlación negativa que existe entre las variables  $y_1$  y  $y_4$ , el lograr mejores valores estimados para una de estas variables, se hace a expensas de peores valores para la otra. Esta situación se repite para los métodos DI2, TO y PC, lo que puede observarse en la Figura 5.1 (b), donde, tomando como referencia a la figura (a) se nota que los métodos que hacen que el primer factor tome valores mas chicos tiene como consecuencia valores altos para la primer variable, en perjuicio de la cuarta variable. Los métodos FD, GS, DI1(T), FP y GR parecen dar una solución que balancea los valores para las variables  $y_1$  y  $y_4$ .

Es relevante mencionar que en el caso del método de componentes principales es posible notar que la variable que se ve más afectada en su valor, es decir la cuarta variable, corresponde a un peso negativo en la estructura del primer componente principal. De esta manera al maximizar este componente se estará afectando a la variable cuyo peso es negativo.

Tabla 5.1: Resultados de los métodos de optimización para datos de producción de quesos (OLS)

Método	Óptimo Global		Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	0.230	-1.370	1.929	0.561	1.670	0.460	0.23734
GS	0.320	-1.370	1.837	0.556	1.639	0.477	0.23527
DI1(OI)	-0.404	-1.355	2.549	0.550	1.812	0.302	0.48568
DI1(T)	0.297	-1.383	1.867	0.556	1.645	0.471	0.23557
DI2	-0.592	-1.284	2.658	0.545	1.839	0.264	0.54948
FP	0.095	-1.411	2.099	0.559	1.704	0.419	0.28546
TO	-0.870	-1.115	2.731	0.539	1.864	0.223	0.62057
PC	-0.606	-1.043	2.495	0.584	1.865	0.291	0.50357
GR	0.200	-1.300	1.925	0.568	1.680	0.460	0.23813

Tabla 5.2: Resultados de los métodos de optimización para datos de producción de quesos SUR con especificaciones determinadas para OLS

Método	Óptimo Global		Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	0.330	-1.295	1.767	0.561	1.636	0.482	0.24964
GS	0.304	-1.317	1.803	0.560	1.642	0.475	0.24690
DI1(OI)	-0.486	-1.328	2.605	0.542	1.815	0.285	0.51466
DI1(T)	0.251	-1.392	1.895	0.551	1.648	0.459	0.24706
DI2	-0.565	-1.296	2.653	0.539	1.827	0.270	0.54063
FP	0.102	-1.411	2.067	0.553	1.690	0.421	0.28425
TO	-0.911	-1.082	2.763	0.532	1.861	0.219	0.62751
PC	-0.643	-0.896	2.423	0.601	1.877	0.302	0.48513

A fin de hacer comparable al método de estimación SUR como método de optimización multi-respuesta con respecto al método de estimación OLS se realizará la optimización para este conjunto de datos con los modelos obtenidos por regresiones aparentemente no relacionadas usando las mismas especificaciones que fueron usadas para los modelos derivados por mínimos cuadrados. Los resultados obtenidos, mostrados en la Tabla 5.2, presentan resultados semejantes a los obtenidos mediante el uso de los estimadores de mínimos cuadrados en cuanto a la eficacia de los métodos, a excepción del método de componentes principales que resulta ser más eficiente que el de la distancia al óptimo individual. En cuanto a la comparación de los métodos de estimación como una opción en la optimización multi-respuesta, puede notarse que para los métodos FD, GS, DI1(OI), DI1(T) y TO los estimadores por mínimos cuadrados producen mejores resultados, considerando la medida de discordancia, con respecto a los estimadores obtenidos por regresiones aparentemente no relacionadas; situación contraria es la que se presenta para los métodos DI2, FP y PC.

Gráficamente los puntos óptimos para cada uno de los planteamientos de estimación, tanto para los modelos estimados obtenidos por OLS como por SUR con las mismas especificaciones,

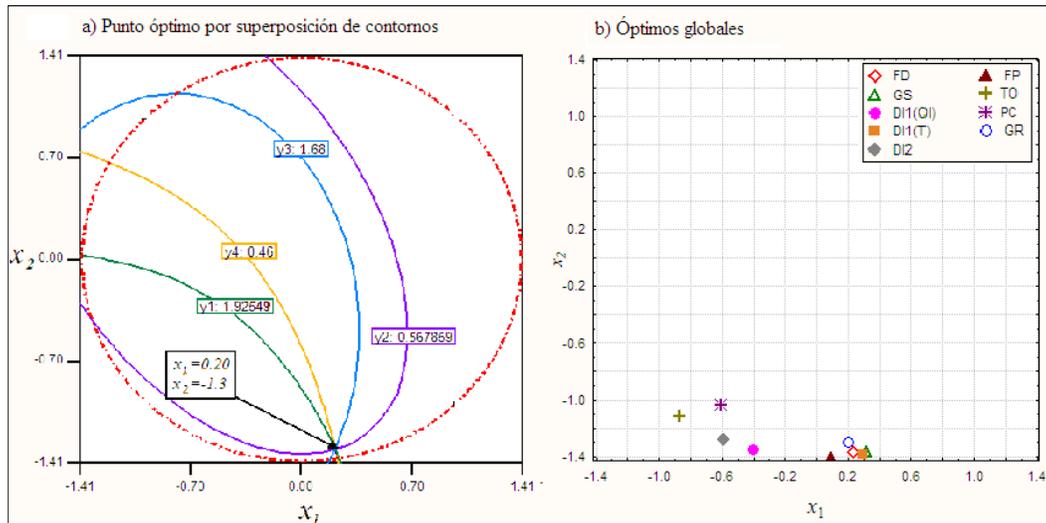


Figura 5.1: Sobreposición de contornos y óptimos globales para los estimadores OLS del proceso de producción de quesos.

son mostrados en la Figura 5.2 en la cual se puede observar que hay dos subconjuntos de óptimos globales, el primero es el formado por TO, PC, DI2 y DI1(OI) los cuales tienen valores más altos para la discordancia estandarizada. El segundo bloque de métodos es el que conforman FD, GS, FP y DI1(T) (incluyendo el método gráfico, GR, para el caso de los estimadores OLS), que son los que según la medida de discordancia dan mejores resultados. Cabe mencionar que estos últimos son en los que los valores  $T_i$  intervienen para su implementación.

Para los modelos obtenidos mediante el uso de los estimadores SUR, y con el uso de las especificaciones correspondientes obtenidas mediante los criterios establecidos en la sección 3.2, se obtuvieron los resultados mostrados en la Tabla 5.3, en la cual es posible notar que la eficacia de los métodos, según la medida de discordancia, se presenta en el mismo orden que los resultados dados en la Tabla 5.2.

### 5.3.2 Proceso de producción de neumáticos

Como se ha mencionado anteriormente, los datos publicados por Derringer y Suich [15] han sido ampliamente analizados en el contexto de optimización multi-respuesta. Las especificaciones del proceso se encuentran bien definidas así que se adoptó el criterio de reducir dichas respuestas proporcionalmente a la desviación estándar estimada de cada variable con el fin de "arrinconar" al punto óptimo.

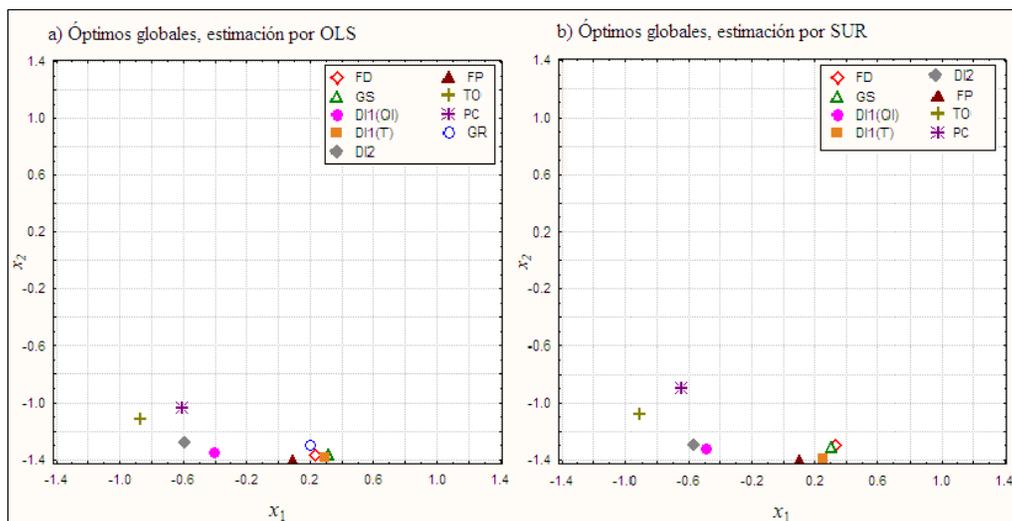


Figura 5.2: Ubicación gráfica de los puntos óptimos globales para cada uno de los métodos de optimización usando las mismas especificaciones para los estimadores OLS y SUR.

Los óptimos globales obtenidos para cada uno de los métodos para los modelos estimados por mínimos cuadrados son mostrados en la Tabla 5.4. En esta tabla se puede observar que el método que tiene un mejor desempeño es el de la función de desabilidad, seguido por el método gráfico y el grado de satisfacción. En cuanto al resultado obtenido mediante la técnica gráfica fue necesario sacrificar el valor de la segunda variable de modo que el resto de ellas pudieran satisfacer los requerimientos dados en la Tabla 3.13, aunque bien se pudo hacer sacrificado otra de las variables. Los métodos DI1(OI), DI2, TO y PC dan puntos óptimos para los cuales la tercer respuesta estimada se encuentra fuera de las especificaciones. Hay que recordar del análisis de correlación para este proceso se detecto la presencia de correlación negativa alta entre las variables  $y_1$  y  $y_3$  hecho que

Tabla 5.3: Resultados de los métodos de optimización para datos de producción de quesos (SUR

Método	Óptimo Global		Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	0.308	-1.261	1.777	0.567	1.649	0.479	0.26614
GS	0.300	-1.370	1.831	0.552	1.635	0.472	0.25926
DI1(OI)	-0.486	-1.328	2.605	0.542	1.815	0.285	0.51628
DI1(T)	0.217	-1.397	1.935	0.552	1.658	0.450	0.26360
DI2	-0.565	-1.296	2.653	0.539	1.827	0.270	0.54223
FP	0.036	-1.414	2.140	0.553	1.708	0.405	0.31298
TO	-0.911	-1.082	2.763	0.532	1.861	0.219	0.62904
PC	-0.643	-0.896	2.423	0.601	1.877	0.302	0.48601

Tabla 5.4: Resultados de optimización para los datos de producción de neumáticos (OLS)

Método	Óptimo global			Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	0.020	0.740	-0.910	134.419	1350.00	457.287	70.380	0.23005
GS	0.311	0.850	-1.043	136.141	1492.19	437.913	69.976	0.23756
DI1(OI)	0.523	1.537	-0.504	155.731	1615.82	382.827	72.928	0.26159
DI1(T)	0.396	0.962	-1.345	131.272	1653.93	451.536	69.752	0.24981
DI2	0.236	1.613	0.481	175.896	1743.59	340.170	75.617	0.34153
FP	0.117	0.563	-0.645	138.704	1281.80	429.998	69.849	0.23928
TO	-0.001	1.451	0.851	175.821	1770.30	333.237	76.387	0.35857
PC	1.136	0.579	1.125	190.721	1956.75	197.441	72.427	0.60950
GR	0.070	0.670	-0.930	134.365	1350.36	454.018	69.927	0.23171

Tabla 5.5: Resultados de optimización para los datos de producción de neumáticos (SUR)

Método	Óptimo global			Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	0.027	0.735	-0.905	134.321	1350.00	456.610	70.342	0.23098
GS	0.351	1.247	-1.103	136.615	1621.24	438.943	71.291	0.23798
DI1(OI)	0.503	1.554	-0.470	156.183	1611.35	380.980	73.091	0.26482
DI1(T)	0.414	0.932	-1.360	130.733	1661.14	450.708	69.584	0.25303
DI2	0.236	1.613	0.482	175.976	1743.42	338.265	75.609	0.34506
FP	0.117	0.521	-0.634	138.369	1269.44	430.087	69.684	0.24245
TO	0.022	1.516	0.768	175.752	1763.83	336.691	76.433	0.35241
PC	1.135	0.579	1.125	190.802	1957.99	197.779	72.446	0.60887

parece que si afecta la optimización conjunta. La técnica de componentes principales tiene el peor desempeño favoreciendo en mucho a la primer y segunda respuestas a expensas de la tercer variable, la cual se ve seriamente afectada. Este hecho se puede explicar debido a que el primer componente principal obtenido da un peso negativo a la tercer variable.

En la Tabla 5.5. se presentan los resultados para los modelos estimados por SUR, los cuales presentan el mismo orden en cuanto a su desempeño, así como también se presentan puntos óptimos para los cuales algunas de las respuestas se encuentran fuera de sus especificaciones para los mismos métodos mencionados para los estimadores OLS.

Para este proceso, al estar bien definidas las especificaciones, es posible realizar una comparación entre los resultados obtenidos para los modelos estimados por SUR y OLS. En este sentido se puede notar que los métodos DI2, TO y PC mejoran con el uso de los estimadores SUR, aunque para el resto de los métodos la diferencia en la medida de discordancia es mínima. Los puntos óptimos para los dos métodos de estimación se muestran gráficamente en la Figura 5.3, en la cual se puede notar que la ubicación de los óptimos globales es similar y en ambos casos se puede notar que los métodos FD, GS, DI1(T) y FP se encuentran en la misma región.

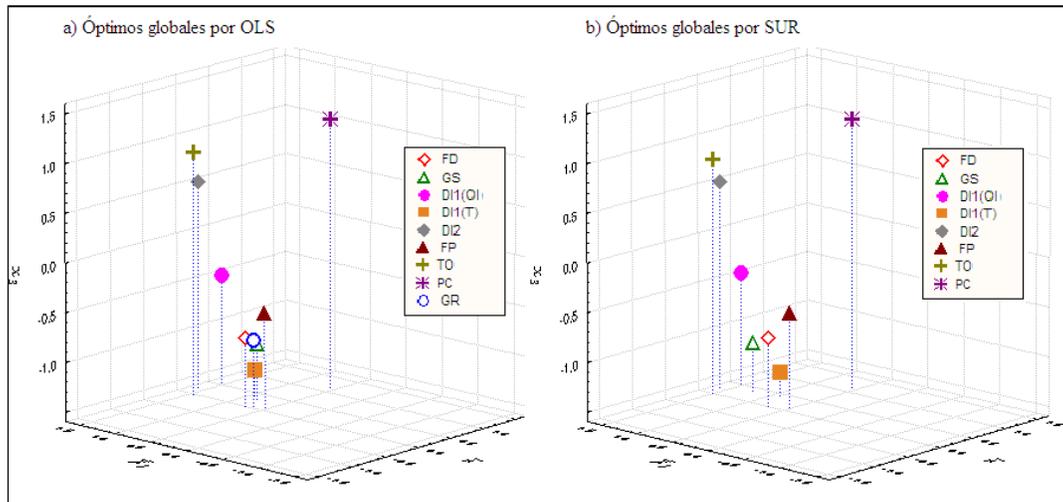


Figura 5.3: Ubicación gráfica de los puntos óptimos globales para los métodos de estimación OLS y SUR para el proceso de producción de neumáticos.

A pesar de que este ejemplo ha sido utilizado en distintos artículos publicados referentes a la optimización multi-respuesta, no se considerado el hecho de que la segunda variable estimada de este proceso presenta un valor muy grande para el *CME*. Este hecho puede estar afectando la efectividad de los métodos. En este sentido se propone encontrar un modelo estimado para la segunda variable a fin de reducir la varianza estimada del error. Para esto se retoma la sugerencia de modelar la segunda variable por el método de mínimos cuadrados generalizado según el procedimiento explicado en la sección 3.5.

Haciendo uso del modelo estimado mediante mínimos cuadrados generalizados presentado en la Tabla 3.40 se obtuvo que el punto óptimo individual para  $y_2$  es  $\mathbf{x}_{02} = (1.125, 1.028, 0.753)$  cuya respuesta óptima individual es mucho menor a la que se obtuvo para OLS. Este hecho va a impactar en el desempeño de las técnicas de optimización que persiguen a los valores más altos para las variables en lugar del valor objetivo de las mismas. Los óptimos individuales, ahora evaluados en el nuevo modelo para la segunda variable, se presentan en la Tabla 5.6. Además se espera que los métodos DI1(OI), DI1(T) y DI2 presenten una mejoría con respecto a los resultados para los estimadores OLS ya que estos métodos consideran la varianza de las variables.

Se llevó a cabo la implementación de los métodos multi-respuesta analíticos considerando ahora el modelo estimado para la segunda variable por GLS y se obtuvieron los resultados proporcionados en la Tabla 5.7. Cabe resaltar que las nuevas especificaciones para la segunda variable, con el criterio que se adoptó, pueden relajarse mucho ya que el *CME* es muy pequeño para el nuevo modelo, sin

Tabla 5.6: Óptimos individuales para el proceso de producción de neumáticos modelando la segunda varianza por GLS

	Óptimo Individual			Respuesta			
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$
$\mathbf{x}_{01}$	0.851	0.934	1.137	194.653	1937.579	222.748	73.268
$\mathbf{x}_{02}$	1.125	1.028	0.753	192.669	1978.460	223.961	72.925
$\mathbf{x}_{03}$	-0.984	0.429	-0.081	122.220	1022.417	500.005	74.044
$\mathbf{x}_{04}$	0.192	-0.278	0.063	136.076	1215.552	392.560	67.501

Tabla 5.7: Resultados de optimización para los datos de producción de neumáticos (GLS)

Método	Óptimo global			Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	0.316	1.419	-0.881	142.279	1327.34	429.070	72.398	0.22861
GS	0.2604	1.2	-1.1798	134.003	1610.596	454.027	71.2117	0.23731
DI1(OI)	0.324	1.514	-0.701	147.181	1433.02	416.695	73.031	0.22911
DI1(T)	0.384	1.367	-0.935	141.763	1307.84	425.506	71.937	0.23470
DI2	0.262	0.960	-1.378	129.340	1217.21	467.355	69.951	0.26919
FP	-0.538	1.542	-0.473	134.229	1349.12	486.291	77.171	0.25604
TO	0.136	1.581	0.559	174.728	1783.55	343.641	75.953	0.33686
PC	1.187	0.641	1.005	190.520	1939.12	200.500	72.445	0.60346

embargo se consideraron las mismas especificaciones que en los casos de estimación SUR y OLS. Una vez aclarado este punto, es posible notar, en cuanto a la eficiencia de los métodos, que el que obtuvo mejor desempeño fue el de la función de deseabilidad seguido por el de la mínima distancia al óptimo individual, y por el mismo método pero considerando el valor target de las respuestas. Estos tres métodos mejoraron considerablemente con respecto a la medida de discordancia resultante del uso del modelo estimado por OLS para  $y_2$ . Otros métodos que mejoraron su desempeños con respecto a este modelo fueron DI2, TO y PC, sin embargo este último sigue presentando malos resultados. En el caso de GS y FP el desempeño se vio un poco desfavorecido.

En muchas ocasiones puede ser de interés reducir la varianza de una variable de respuesta, sobre todo en procesos que tengan que ver con la producción de piezas que se tengan que ensamblar. Si se considera la situación hipotética de que la segunda variable tuviera que tener valores muy precisos, es decir, que la desviación estándar fuera mínima, entonces se requiere encontrar la combinación de factores de control tales que se satisfaga simultáneamente con los requerimientos de las cuatro variables de respuesta, además de que la varianza para  $y_2$  sea mínima.

Con este propósito se considera el modelo estimado para la varianza de segunda variable de respuesta (el cual fue obtenido en la sección 3.5), el cual está dado por la siguiente ecuación

$$\hat{z}_2(x) = 8.85 + 1.35x_3^2.$$

Tabla 5.8: Resultados de optimización para los datos de producción de neumáticos con el tercer factor fijo tal que se minimiza la varianza (GLS)

Método	Óptimo global			Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	-0.375	0.421	0.000	137.316	1216.35	433.443	71.548	0.26092
GS	0.638	-0.703	0.000	130.340	1212.27	373.137	66.158	0.36001
DI1(OI)	0.444	1.528	0.000	167.503	1728.54	353.173	73.908	0.30897
DI1(T)	0.697	1.391	0.000	170.911	1763.99	325.582	72.940	0.35802
DI2	0.058	1.398	0.000	157.753	1587.01	389.401	74.555	0.25503
FP	-0.857	1.468	0.000	133.529	1349.09	481.779	79.478	0.28079
TO	0.435	1.642	0.000	168.400	1755.09	356.537	74.342	0.30445
PC	1.625	0.497	0.000	166.635	1795.16	232.851	71.429	0.53782

La respuesta estimada  $\hat{z}_2$  toma su valor mas bajo cuando el tercer valor es nulo. De esta manera se fija el valor de  $x_3$  en cero y se procede con la optimización conjunta. En cuanto a las especificaciones, fue necesario relajar la correspondiente a la segunda variable debido a que para la implementación del método de la función de deseabilidad fue necesario hacerlo. El nuevo límite de especificación inferior considerado para  $y_2$  fue de 1200. Los resultados obtenidos, con el tercer factor fijo, son presentados en la Tabla 5.8. En cuanto la efectividad de las técnicas, el que resulto con la menor discordancia es el de la distancia que toma en cuenta la aleatoriedad de la respuesta, a pesar de que el predicho para la tercer variable para este punto se encuentra fuera de los límites de especificación para la misma. El método FD es el que sigue en cuanto a eficacia, aunque el valor de la segunda variable se ve desfavorecido. El método de la función de pérdida favorece a la tercer variable a costa de la cuarta. La técnica de componentes principales fue, nuevamente, el de peores resultados. Se puede decir que el único método que, con el tercer factor inmóvil, el único método que dio predichos dentro de los valores permitidos es el de la función de deseabilidad.

El procedimiento utilizado anteriormente puede resultar útil en procesos en los que las respuestas requieran ser muy precisas.

### 5.3.3 Proceso de lavado de carne

Se consideran los datos del proceso de lavado de carne de la sección 3.4.3. En este proceso se quiere maximizar la primer y la cuarta respuestas, a su vez que se requiere que la segunda y tercera respuestas alcancen sus valores mínimos.

Para la implementación del método del grado de satisfacción (GS) y debido a que ninguno de los valores estimados para la segunda variable, tanto para los estimadores OLS como los estimadores SUR, están dentro de las especificaciones del problema fue necesario trabajar con los valores experimentales de  $y_2$  a fin de estimar las deseabilidades individuales para poder implementar la

Tabla 5.9: Resultados de la optimización simultanea para el proceso de producción de lavado de carne (OLS)

Método	Óptimo global			Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	-0.490	1.490	0.620	1.925	19.561	17.237	49.868	0.04924
GS	-0.143	1.549	0.680	1.901	21.095	18.482	51.491	0.12185
DI1(OI)	-0.434	1.636	-0.163	1.925	19.498	18.305	50.207	0.07989
DI1(T)	0.175	-0.038	0.115	1.865	23.860	19.113	52.231	0.26171
DI2	-0.474	1.518	0.601	1.925	19.559	17.584	49.987	0.05342
FP	-1.688	-0.121	0.164	1.729	32.109	19.798	50.917	0.68102
TO	-0.293	1.129	-1.237	1.912	20.576	18.837	50.902	0.12166
PC	-0.299	1.314	1.036	1.914	20.370	17.933	50.876	0.07673
GR	0.370	1.630	0.230	1.921	19.752	17.675	50.563	0.05130

herramienta gráfica presentada en la sección 4.2.

Los resultados de la optimización global conseguidos para los modelos ajustados por mínimos cuadrados son mostrados en la Tabla 5.9 en la cual es posible notar que el planteamiento de optimización multi-respuesta más eficiente, de acuerdo a la medida de discordancia, es el de la función de desabilidad, seguido por el punto óptimo resultante de la superposición de contornos. La función de distancia que toma en cuenta la aleatoriedad de la respuesta para este conjunto de datos produce muy buenos resultados a pesar de ser un planteamiento pesimista. El método propuesto por Jiju [24] resulta ser otro de los métodos más eficientes.

En contraste con lo sucedido para el proceso de producción de quesos, el método DI1(OI) resulta más eficaz que DI1(T) lo cual resulta comprensible ya que los valores objetivo considerados para la optimización, a excepción de la primer variable, son los óptimos individuales de la respuesta. En este caso el óptimo global obtenido mediante GS produce valores estimados fuera de las especificaciones del proceso para la segunda variable, situación semejante a las respuestas estimadas en el punto óptimo obtenido para FP, el cual produce los peores resultados.

En el caso de los modelos ajustados con los estimadores SUR, los resultados de la optimización global se presentan en la Tabla 5.10. En esta tabla se puede observar que el método más eficiente resulto ser el de componentes principales al tener la menor medida de discordancia, seguido por la función de distancia que toma en cuenta la aleatoriedad y por la función de desabilidad. Nuevamente el método FP resulto ser el menos eficiente, el cual junto con DI1(T) produce valores para la segunda variable fuera de las especificaciones.

Este conjunto de datos fue analizado por Shah *et al* [49] y argumentan que después de la optimización numérica realizada con la función de desabilidad los estimadores SUR obtienen mejores resultados, sin embargo no aclaran cuales fueron los límites de especificación que usaron para realizar dicha optimización (que parecen ser maximos o mínimos predichos), además de que su argumento

Tabla 5.10: Resultados de la optimización simultanea para el proceso de producción de lavado de carne (SUR)

Método	Óptimo global			Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	-0.471	1.631	0.083	1.932	19.234	17.361	50.003	0.05219
GS	0.092	1.277	1.180	1.910	20.806	17.883	51.313	0.10673
DI1(OI)	-0.435	1.613	-0.314	1.930	19.357	18.366	50.201	0.09577
DI1(T)	0.090	0.025	0.185	1.875	23.212	18.822	52.101	0.24169
DI2	-0.472	1.523	0.591	1.930	19.398	17.206	49.994	0.05013
FP	-1.700	0.009	0.013	1.722	32.295	20.248	50.917	0.71764
TO	-0.322	1.213	-1.147	1.919	20.250	18.563	50.768	0.11767
PC	-0.448	1.600	0.361	1.930	19.340	17.325	50.130	0.04999

de mejores resultados lo hacen en términos de comparar la máxima deseabilidad individual, esto adicional a que consideran una región experimental cúbica para la optimización, cuando en realidad es esférica.

### 5.3.4 Proceso de producción de circuitos

Se consideran los datos de producción de circuitos que fueron presentados en la sección 3.4.4, proceso para el cual se quiere encontrar la combinación de factores tales que las seis respuestas alcancen los valores objetivos presentados en la Tabla 3.25.

Debido a la alta correlación que existe entre los pares de variables  $y_2 - y_3$  y  $y_2 - y_5$ , y también a que las tres variables alcanzan su valor óptimo individual en el mismo punto, se propone realizar la optimización global sin considerar ni la tercera ni la quinta variable. De esta manera se procede con la optimización conjunta de las variables de respuesta  $y_1$ ,  $y_2$ ,  $y_4$  y  $y_6$ . Cabe mencionar que en el caso de la primer variable ni los valores experimentales ni los predichos están dentro de los límites de especificación, por lo que la implementación del método GS no es posible. Para resolver este problema, y sólo con el fin de implementar el método, se relajaron las especificaciones para  $y_1$  a la siguiente restricción

$$179.658 \leq y_1 \leq 200.342.$$

Los resultados obtenidos de la optimización simultánea para este proceso, para los estimadores OLS, son mostrados en la Tabla 5.11. En cuanto a la eficiencia de cada uno de los métodos se tiene que mediante la técnica gráfica se obtuvo el mejor óptimo según la medida de discordancia seguido por la función de distancia que toma en cuenta la aleatoriedad de las respuestas. Los métodos DI1(OI), DI1(T) y TO arrojaron el mismo punto óptimo global. Aquí cabe mencionar que a pesar que estos tres métodos tienen una menor medida de discordancia que métodos como la función de deseabilidad, función de pérdida y componentes principales, producen que la cuarta variable

Tabla 5.11: Resultados de optimización para los datos de producción de circuitos (OLS)

Método	Óptimo global			Valor estimado						Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$\hat{y}_5$	$\hat{y}_6$	$P$
FD	1.000	0.900	0.780	185.458	177.63	176.261	194.559	174.878	186.877	0.08979
GS	0.016	1.000	1.000	182.933	176.844	175.679	193.664	175.711	190.001	0.09741
DI1(OI)	1.000	1.000	1.000	182.930	182.750	182.200	200.250	181.000	194.750	0.08898
DI1(T)	1.000	1.000	1.000	182.930	182.750	182.200	200.250	181.000	194.750	0.08898
DI2	0.981	0.981	0.981	183.129	181.968	181.395	199.429	180.197	193.846	0.08590
FP	1.000	0.912	0.739	186.127	177.161	175.495	194.518	174.356	185.808	0.09352
TO	1.000	1.000	1.000	182.930	182.750	182.200	200.250	181.000	194.750	0.08898
PC	0.471	0.625	1.000	181.289	171.456	172.695	186.318	170.908	186.543	0.13466
GR	0.990	0.870	1.000	182.353	179.801	179.989	194.792	177.467	192.047	0.08300

Tabla 5.12: Resultados de optimización para los datos de producción de circuitos (SUR)

Método	Óptimo global			Valor estimado						Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$\hat{y}_5$	$\hat{y}_6$	$P$
FD	1.000	0.897	0.573	187.212	173.150	170.346	192.652	171.206	181.062	0.12962
GS	1.000	1.000	1.000	180.979	181.406	180.694	200.340	181.006	194.849	0.09714
DI1(OI)	1.000	1.000	1.000	180.979	181.406	180.694	200.340	181.006	194.849	0.09714
DI1(T)	1.000	1.000	1.000	180.979	181.406	180.694	200.340	181.006	194.849	0.09714
DI2	1.000	1.000	1.000	180.979	181.406	180.694	200.340	181.006	194.849	0.09714
FP	1.000	0.936	0.708	185.498	175.888	173.710	195.339	174.464	185.537	0.10370
TO	1.000	1.000	1.000	180.979	181.406	180.694	200.340	181.006	194.849	0.09714
PC	0.546	0.630	1.000	180.083	171.285	172.445	186.071	170.724	186.485	0.13883

se encuentre fuera de las especificaciones. Es importante hacer énfasis en que el método gráfico permite controlar esta situación.

La Tabla 5.12 presenta los resultados obtenidos para los modelos estimadores por SUR, para los cuales se presenta una situación parecida a los modelos por OLS, se tiene que 5 de los métodos, GS, DI1(OP), DI1(T), DI2 y TO, dieron como resultado el mismo óptimo global con el menor valor en la función de discordancia pero con valores fuera de las especificaciones para la variable  $\hat{y}_4$ .

Hay que recordar que la optimización se llevo a cabo con cuatro de las seis variables de respuesta que intervinieron en el proceso. En este caso se cuenta con los estimadores para las variables  $y_3$  y  $y_5$  y las variables  $y$  de esta manera se calcularon los predichos. Otra alternativa para obtener los valores estimados de estas variables es considerar a las mismas en función de la segunda variable mediante un modelo de regresión lineal simple. Los modelos lineales para las variables  $y_3$  y  $y_5$  en términos de la variable  $y_2$  están dados por

$$\begin{aligned}\hat{y}_3(\mathbf{x}) &= 2.7 + 0.968\hat{y}_2(\mathbf{x}) \\ \hat{y}_5(\mathbf{x}) &= 4.7 + 0.933\hat{y}_2(\mathbf{x}).\end{aligned}\tag{5.2}$$

Tabla 5.13: Resultados de optimización para los datos de estudio de imágenes térmicas (OLS)

Método	Óptimo Global		Valor estimado			Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$P$
FD	1.260	0.640	3.331	3.647	1.870	0.19701
GS	0.930	0.972	3.564	3.595	1.760	0.20756
DI1(OI)	1.337	-0.460	2.550	3.400	2.171	0.34600
DI1(T)	1.412	0.081	2.933	3.592	2.029	0.25004
DI2	0.717	-1.219	2.013	2.881	2.340	0.52281
FP	0.937	1.060	3.625	3.595	1.737	0.21237
TO	0.374	1.364	3.841	3.450	1.623	0.26147
PC	0.374	1.364	3.841	3.450	1.623	0.26147
GR	1.265	0.640	3.330	3.648	1.871	0.19692

Una situación hipotética procedimiento anterior puede resultar útil es cuando las variables  $y_3$  y  $y_5$  resultan muy difíciles o costosas de medir y se requiera de un nuevo experimento como parte de un plan de experimentación secuencial. de esta manera el experimentador tendría la opción de medir las cuatro variables restantes y una vez que se encuentra un óptimo global para estas respuestas, basta con evaluar los modelos dados en (5.2) en el punto óptimo para estimar los valores de las respuestas que no se midieron.

El mismo procedimiento puede realizarse para los datos en los que las correlaciones sean altas, como en el caso de los datos de producción de quesos en los que la primer variable se encuentra altamente correlacionada negativamente con la cuarta variable, por lo que se puede poner esta última variable en función de la primera y realizar la optimización para las primeras tres variables.

### 5.3.5 Estudio de imágenes térmicas

En el ejemplo de los datos para el estudio de imágenes térmicas, los cuales son presentados en la sección 3.4.5, los resultados de la optimización para los modelos obtenidos por OLS y SUR se muestran en las Tablas 5.13 y 5.14, respectivamente. El objetivo es maximizar simultáneamente las tres respuestas.

En el caso de los modelos estimados por OLS el método con mejor desempeño fue el de la función de deseabilidad, a pesar de que la tercera variable se encuentra al límite de la especificación inferior. Los métodos gráfico y del grado de satisfacción son los que siguen en cuanto a su efectividad. El método peor evaluado es el de la función de distancia que toma en cuenta la aleatoriedad de la respuesta al darle mayor peso a la tercer variable y esto, debido a la correlación negativa que existe, perjudica a las otras dos variables. La situación contraria se presenta para los métodos FP, TO y PC (estos dos últimos arrojan el mismo punto óptimo), en la que se aumenta los valores en las dos primeras variables a expensas de la tercera la cual está fuera de las especificaciones.

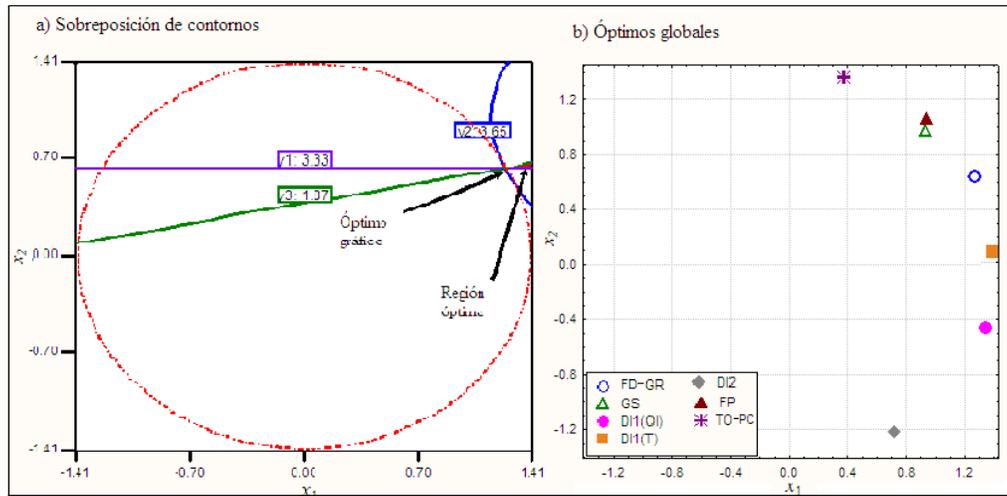


Figura 5.4: Sobreposición de contornos y óptimos globales para los estimadores OLS del estudio de imágenes térmicas.

Tabla 5.14: Resultados de optimización para los datos de estudio de imágenes térmicas (SUR)

Método	Óptimo Global		Valor estimado			Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$P$
FD	1.270	0.642	3.330	3.582	1.870	0.19742
GS	0.279	0.804	3.445	3.436	1.771	0.21995
DI1(OI)	1.351	-0.419	2.579	3.329	2.164	0.33897
DI1(T)	1.412	0.081	2.933	3.494	2.030	0.25044
DI2	0.730	-1.211	2.018	2.873	2.345	0.51614
FP	0.915	1.079	3.639	3.564	1.731	0.21377
TO	0.374	1.364	3.841	3.479	1.623	0.25712
PC	0.374	1.364	3.841	3.479	1.623	0.25712

La Figura 5.4 presenta tanto la superposición de contornos para los modelos estimados por OLS así como los puntos óptimos globales obtenidos por cada uno de los procedimientos de optimización. En la primer gráfica se muestra la región en la que las tres respuestas cumplen con las especificaciones dadas, pero ésta se encuentra fuera de la región experimental. Los óptimos obtenidos por el método gráfico y la función de deseabilidad están en el límite de las especificaciones y de la región experimental.

En cuanto a los estimadores SUR los resultados en el desempeño de los métodos son iguales que los obtenidos para los estimadores OLS. Para los dos procedimientos de estimación solamente uno de los métodos analíticos da puntos óptimos cuyas respuestas estimadas se encuentran dentro de las especificaciones, este es el método de la función de deseabilidad.

Tabla 5.15: Resultados de optimización para los datos de propiedades de proteína de suero (OLS)

Método	Óptimo global					Valor estimado				Dicordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$\hat{Y}_1$	$\hat{Y}_2$	$\hat{Y}_3$	$\hat{Y}_4$	$P$
FD	-0.900	1.020	0.460	1.250	-1.540	1196.880	18.486	73.158	102.188	0.26295
GS	0.120	0.840	0.750	1.260	-1.450	1096.470	20.398	63.509	98.245	0.24653
D11(OI)	-1.469	-0.048	0.107	1.108	1.265	1380.096	16.009	82.672	102.079	0.36169
D11(T)	-0.933	0.808	0.642	1.703	-0.322	1241.964	16.868	74.954	103.933	0.32745
D12	-1.401	-0.181	0.229	0.744	1.548	1422.058	15.398	82.099	104.384	0.38605
FP	0.328	0.106	0.300	-1.589	0.397	948.846	20.267	57.818	88.169	0.37758
TO	-1.719	0.530	1.044	0.133	0.812	1460.399	12.162	74.585	104.175	0.51508
PC	-0.625	-0.090	0.926	-0.612	1.836	1333.320	10.760	78.610	114.844	0.57097

### 5.3.6 Propiedades de proteína de suero

El último conjunto de datos analizado en este trabajo es el retomado de la sección 3.4.6. Se requiere que las cuatro variables de respuesta que intervienen en este proceso tomen su máximo valor. La Tabla 5.15 muestra los puntos óptimos globales para los modelos estimados por OLS, en la cual se observa que el método que resultó más eficaz es el del mínimo grado de satisfacción seguido por la función de deseabilidad. En cuanto al método TOPSIS, se observa que con el propósito de maximizar las cuatro respuestas, da menor peso a la segunda variable la cual se ve muy afectada. El método que tuvo peores resultados fue el método PC.

Para este caso en el que se cuenta con cinco factores de control la implementación del método gráfico resultó poco viable pues después de realizar el análisis estadístico de los datos no se presento evidencia de factores poco significativos tal que estos pudieran tomarse en cuenta para la sobreposición de contornos.

En el caso de los resultados para los métodos de optimización para los estimadores SUR, los cuales se muestran en la Tabla 5.16, se tiene que el método del grafo de satisfacción vuelve a obtener el mejor desempeño. El método de deseabilidad es el que sigue en esta lista. El método peor evaluado fue el de componentes principales.

## 5.4 Discusión

En el método de la función de deseabilidad, FD, es de gran importancia la selección de los límites de especificación y los valores objetivos. En este trabajo estos valores fueron propuestos basados en cierto criterio, pero esta selección debe hacerse en base a mayor conocimiento del proceso. A pesar de que los resultados que arroja este método están dentro de las especificaciones determinadas, se ignora por completo la variabilidad de las respuestas lo que puede dar lugar, como se vio en algunos de los ejemplos, a respuestas predichas cerca de los límites de especificación, pero que

Tabla 5.16: Resultados de optimización para los datos de propiedades de proteína de suero (SUR)

Método	Óptimo global					Valor estimado				Discordancia
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$\hat{y}_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$	$\hat{y}_4$	$P$
FD	-0.744	0.884	0.534	1.517	-1.038	1236.823	16.336	73.394	104.583	0.34622
GS	0.030	0.841	0.501	1.462	-1.031	1133.023	17.112	65.079	102.707	0.34219
DI1(OI)	-1.451	-0.123	0.225	0.845	1.454	1422.436	15.119	82.721	103.237	0.39494
DI1(T)	-0.779	0.542	0.768	1.357	-1.292	1234.575	15.194	76.368	102.439	0.39193
DI2	-1.730	-0.077	0.196	0.842	1.120	1411.367	15.211	82.014	98.420	0.39268
FP	0.045	0.086	0.057	-1.696	0.037	956.184	19.131	62.242	85.830	0.38615
TO	-1.614	-0.172	0.772	0.492	1.237	1464.669	15.071	78.579	102.741	0.39686
PC	-0.936	0.280	0.805	-0.167	1.835	1399.891	11.820	78.802	115.497	0.52695

considerando los intervalos de confianza se encuentren fuera. En este sentido es en donde el uso de pesos apropiados puedes ofrecer una mejora ante la situación de la variabilidad. La mayor ventaja de este planteamiento es que, por la manera en que es definido, es el único que garantiza un punto óptimo, en caso de que exista, dentro de las especificaciones del proceso.

En cuanto al planteamiento del mínimo grado de satisfacción este proporciona un mayor balance entre todas las respuestas, sin embargo puede darse la situación en que al buscar el menor grado de satisfacción ignora los grados de satisfacción para el resto de las respuestas, lo cual puede resultar en decisiones no razonables. En el artículo donde este procedimiento es planteado, [29], se propone establecer los límites de especificación inferior y superior como el máximo y mínimo estimados, respectivamente lo cual puede darle mayor peso a algunas variables. Hay que mencionar que en algunos de los ejemplos este método no dio muy buenos resultados, incluso se dieron predichos fuera de las especificaciones del proceso, pero no hay que perder de vista que esto último puede deberse a la herramienta usada para la optimización en la que primero se estiman las deseabilidades individuales a partir de los valores predichos para cada una de las respuestas. El software MINITAB considera estos últimos valores como los valores experimentales y estima nuevos valores sobre los cuales realiza la optimización.

El planteamiento dado por Khuri y Conlon en el que se minimiza la distancia entre los predichos y los valores objetivo se propone una manera de determinar dichos valores tomándolos como los valores óptimos individuales para cada una de las respuestas, DI1(OI); sin embargo se dan casos en los que se castiga a variables por favorecer a las que tienen valores extremos como óptimos individuales. En cuanto a hacer uso de los valores más deseables para el proceso en vez de los óptimos individuales se logra un mejor balance entre las respuestas. Al considerar dentro de la función objetivo a la matriz de varianza-covarianza de las respuestas, el planteamiento puede verse afectado ante la existencia de variables con alta varianza. Este planteamiento es el único que toma en cuenta la aleatoriedad de las respuestas y, a pesar de que considerar este hecho no provee

resultados satisfactorios según la medida de discordancia no hay que perder de vista que se trata de un óptimo pesimista. Tampoco hay que olvidar el hecho de que esta técnica supone el hecho de que las variables de respuesta tienen que ser linealmente independientes, lo cual es un supuesto bastante fuerte y habría que probarlo para cada conjunto de datos.

En lo referente al planteamiento de la función de pérdida de Ames *et al* [1], FP, se puede decir que en la mayoría de los casos presentó resultados competitivos con el resto de los métodos. Este método tampoco toma en cuenta la variabilidad de las respuestas más que como solución al problema de las unidades de las mismas. Además esta técnica puede dar lugar a valores predichos que estén fuera de las especificaciones del proceso, como se vio en algunos ejemplos. Es posible mejorar este método con el uso de pesos alternativos, como lo discuten De la Vara y Domínguez [11], sin embargo habría que comprobar que las recomendaciones que se hacen son robustas como para hacer uso de ellas en todos los ejemplos analizados. Otra alternativa de mejora a este método es sustituir la función de pérdida propuesta por Ames *et al* por las presentadas en la sección 2.5.7 según la naturaleza de la respuesta.

El uso del índice TOPSIS como método de optimización no obtuvo los resultados que se esperaban. Esto se debe en gran parte a que este método se enfoca en encontrar las soluciones óptimas (máximas o mínimas) sin tomar en cuenta las especificaciones del problema, y en esa dirección puede darle mayor peso a ciertas variables con el fin de que estas alcancen su valor óptimo, lo cual actúa en perjuicio de otras variables. Los ejemplos en los que este índice obtuvo resultados son en los que se requerirá que las variables tuvieran un valor nominal o en los que los valores objetivo para la maximización (o minimización) estaban dados por los valores óptimos individuales o al menos cercanos a estos. Este método es susceptible de mejora ya que se puede incorporar la información acerca de los valores más deseables a fin de que el índice  $C$  no afecte los valores de ciertas variables. En cuanto al empleo de este índice se puede decir que se puede calcular directamente de los valores experimentales y que el uso de los predichos no mejora significativamente su predicción. Como alternativa en esta técnica es trabajar con el índice  $A^+$  en cuyo caso el procedimiento consiste en minimizar este índice.

En lo concerniente a la técnica que propone maximizar el primer componente principal de las pérdidas estandarizadas, PC, se tiene que en la mayoría de los ejemplos fue el que obtuvo peor desempeño, a excepción del proceso de lavado de carne. En este último ejemplo es en el que este método resulta ser el más eficaz de todos. Los casos en los que este método tiene peores resultados es en los que el primer componente principal obtenido tiene un peso negativo en alguna de las variables, hecho que hace que se le de mayor importancia al resto de las respuestas en perjuicio de esta última. También hay que tener en cuenta el porcentaje de variación que explique el primer componente principal.

Por último hay que mencionar el método de optimización SUR, el cual fue propuesto por Shah et al [49] como una herramienta de optimización. En cuanto a las propiedades estadísticas que se tienen para estos estimadores se puede decir que, a pesar de que la varianza de estos es menor en algunos casos que para los estimadores OLS, también se tiene la desventaja de tener mayor variabilidad en cuanto las respuestas y explicar un menor porcentaje de variación. En cuanto a los ejemplos que permitieron realizar una comparación entre los dos métodos de estimación, no se puede decir que la haya una mejora significativa usando el método SUR en comparación de OLS.



## Capítulo 6

# Optimización Multi-Objetivo

Hasta este momento todos los métodos de optimización analíticos que han sido estudiados tienen algo en común: todos reducen el problema de multi respuesta a una función simple. En este sentido ninguna de las propuestas trabaja realmente con el problema de optimizar  $r$  respuestas a la vez, sino que a partir de una transformación, ya sea aditiva (FP, TO, PC) o multiplicativa (FD, GS, DI1, DI2) reducen el problema de optimización multi-respuesta a un problema de optimización simple. Otra de las coincidencias que tienen estos métodos analíticos es que todos dan como resultado una única solución puntual

En este capítulo se presenta el problema de optimización multi-objetivo como una alternativa para el problema de optimización multi-respuesta, así como la relación que guarda el primero con los métodos de optimización analizados hasta aquí.

### 6.1 Problema de Optimización Multi-Objetivo

Debido a la amplia gama de problemas que requieren de encontrar condiciones óptimas, los problemas de optimización han sido ampliamente estudiados y existe un gran contenido de aspectos teóricos que tienen que ver con el tema, así como un amplio repertorio de algoritmos de optimización propuestos; sin embargo, la mayoría de estos se enfocan a la solución de problemas de optimización simple, es decir, con una sola función objetivo. La mayoría de los problemas que envuelven objetivos múltiples han sido transformados en una sola función objetivo y resueltos como tal, por lo que los dos problemas han sido tratados indistintamente. En los últimos años, y gracias a los avances tecnológicos, el análisis de los problemas de optimización multi-objetivo como tal, ha sido retomado.

Un problema de optimización multi-objetivo (MOOP por sus siglas en inglés) tiene un número

de funciones objetivo las cuales deben ser maximizadas o minimizadas. Tal como en un problema de optimización simple se tiene una cantidad de restricciones, tanto para las funciones objetivo como para los valores en el espacio de decisión. El problema de optimización multi-objetivo, según la definición dada por Deb [12], tiene la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 & \min / \max && f_i(\mathbf{x}) && i = 1, 2, \dots, r \\
 & \text{sujeto a} && g_j(\mathbf{x}) \geq 0 && j = 1, 2, \dots, J \\
 & && h_l(\mathbf{x}) = 0 && l = 1, 2, \dots, L \\
 & && x_m^{(L)} \leq x_m \leq x_m^{(U)} && m = 1, 2, \dots, M.
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

En el contexto de superficie de multi-respuesta, el problema descrito en (6.1) puede describirse como

$$\begin{aligned}
 & \min / \max && \hat{y}_i(\mathbf{x}) && i = 1, 2, \dots, r \\
 & \text{sujeto a} && LIE_i \leq \hat{y}_i(\mathbf{x}) \leq LSE_i \\
 & && \hat{y}_i(\mathbf{x}) = T_i \\
 & && \mathbf{x} \in \mathfrak{R}.
 \end{aligned}$$

En los problemas de optimización multi-objetivo en los que se dan objetivos en conflicto, por lo general no existe una solución única que pueda ser considerada la mejor para todas las funciones objetivo, sino un conjunto de estas representando las mejores compensaciones (o soluciones *trade-off*) entre los objetivos, en el sentido que cada una es mejor que las otras en algún objetivo, pero ninguna es mejor que otra en todos los objetivos simultáneamente. De esta manera existe un conjunto de soluciones que son óptimas y, sin ninguna información adicional, ninguna solución del conjunto de soluciones óptimas puede decirse que sea la mejor y todas son igualmente importantes. Es aquí donde se establece la desigualdad entre un problema de optimización simple y uno de optimización multi-objetivo.

La principal diferencia, pues, entre los dos tipos de optimización esta en la cardinalidad del conjunto óptimo, sin embargo desde un punto de vista práctico el experimentador solamente necesita una solución. De esta manera se plantea el dilema de escoger esa solución. En base a un nivel mayor de información el experimentador puede evaluar los pros y los contras de cada una de las soluciones de compromiso (si esto es viable) basados en distintas consideraciones y comparar para realizar una elección. El procedimiento de optimización multi-objetivo ideal, según Deb, consiste de dos pasos. La Figura 6.1 muestra esquemáticamente este procedimiento.

**Paso 1.** Encontrar del conjunto de soluciones de compensación con una amplia gama de valores para los objetivos.

**Paso 2.** Escoger una de las soluciones usando un mayor nivel de información.

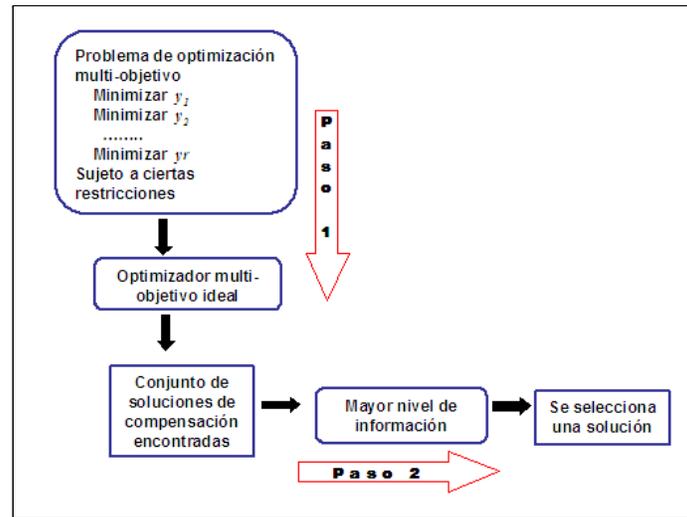


Figura 6.1: Esquema de un procedimiento ideal de optimización multi-objetivo.

Cada una de las soluciones de compromiso corresponden a un orden específico de importancia para cada una de las funciones objetivo. Así, si es bien conocida una relación de preferencia entre los objetivos, no existe la necesidad de seguir el principio de optimización multi-objetivo, si no que puede reducirse el problema a uno simple formando una nueva función compuesta por los objetivos originales ponderados. Este método de reescalar el vector de objetivos en una función objetivo compuesta convierte el problema de optimización multi-objetivo en problema de optimización simple. Este procedimiento es llamado un problema de optimización multi-objetivo basado en preferencias y es ilustrado en la Figura 6.2. Es importante recalcar que la solución obtenida con esta la estrategia es sumamente sensible al vector de preferencia usado para formar la función compuesta. En este sentido la elección de este vector es altamente subjetiva y requiere de un análisis detallado de la información disponible del proceso.

Con este panorama es posible decir que los métodos de optimización analizados en este trabajo, a excepción del método gráfico de superposición de contornos, pertenecen al procedimiento de optimización multi-objetivo basado en preferencias, ya que todos ellos convierten el problema con múltiples objetivos en un problema de optimización simple mediante el uso de una función compuesta. En cuanto al proceso ideal de optimización multi-objetivo, el método de superposición de contornos es el único de los procedimientos analizados que puede clasificarse dentro en este ámbito, ya que cumple con el esquema planteado: una vez que el problema de optimizar las  $r$  respuestas es establecido, la superposición de los contornos para ciertas especificaciones se efectúa como un optimizador multi-objetivo para el cual se obtiene una región factible de soluciones a partir de la

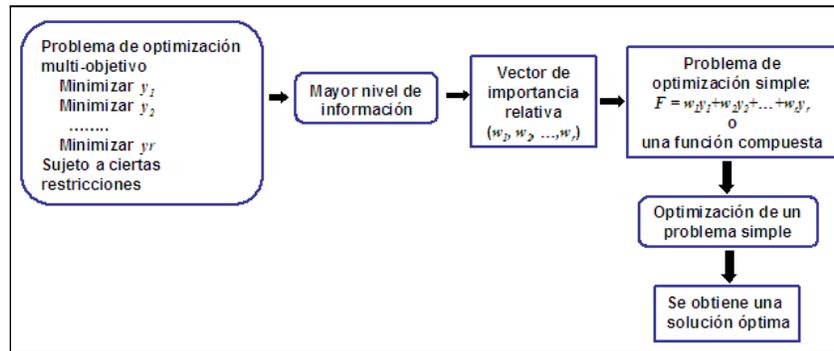


Figura 6.2: Esquema del procedimiento de optimización multi-objetivo basado en preferencias.

cual, con cierto nivel de información, se escoge una solución.

En la actualidad existen distintos algoritmos para solucionar problemas de optimización multi-objetivo los cuales ofrecen un conjunto de soluciones óptimas. Entre los más populares se encuentran los algoritmos evolutivos y los algoritmos genéticos. No se entrará en detalles acerca del funcionamiento de dichos algoritmos, pero si se hace la recomendación de hacer uso de las herramientas disponibles para dar solución a un problema. Sin embargo no hay que perder de vista que para que la optimización en el contexto de superficie de multi-respuesta sea eficaz hay que considerar los aspectos estadísticos inherentes al problema, tal como lo son incertidumbre y la estructura de correlación. Estos aspectos han sido tratados en algunos de los planteamientos de optimización aquí analizados, tal como la estimación SUR y en la función de distancia. Sin embargo, el MOOP fue originado y se desarrolló en situaciones deterministas y las consideraciones estadísticas no se han tratado seriamente. Así, esta es una línea de investigación en la que se procura incorporar la incertidumbre y la estructura de correlación en los algoritmos multi-objetivo.

En conclusión, el problema de optimización multi-respuesta puede ser resuelto mediante los métodos analíticos estudiados en la sección 2.5, los cuales pueden verse desde la perspectiva de método de solución a un MOOP basado en preferencias, que en ocasiones pueden dar lugar a soluciones no satisfactorias del todo. La otra alternativa es tratar el problema de optimización con múltiples objetivos y hacer uso de nuevos procedimientos para encontrar un conjunto de soluciones óptimas de las cuales se pueda seleccionar la que mejor se adecue a los requerimientos del problema o bien, la que reditúe en menores costos (ya sean monetarios o tecnológicos).

## Capítulo 7

# Conclusiones y Comentarios Finales

Este capítulo está dedicado a presentar algunas conclusiones generales sobre el análisis desarrollado a lo largo de este trabajo. Así mismo, se discuten algunos de los aspectos observados en la optimización multi-respuesta con base a los resultados obtenidos. Para finalizar se presenta el trabajo y la investigación por hacer para posibles estudios futuros donde se trate este tema.

### 7.1 Resumen del trabajo

Este trabajo surgió por la necesidad de afrontar diversos problemas que se presentan en los procesos de producción. Como se menciona en el primer capítulo, mejorar es un propósito que se debe tener en cuenta en el quehacer de quien se dice ser estadístico. Con este pensamiento en mente, se pretende divulgar el conocimiento adquirido en pro de colaborar con la investigación científica y tecnológica del país.

La aportación principal de esta tesis es proporcionar al lector una metodología que permita dar solución a un problema que frecuentemente se presenta, ya que ignorarlo puede tener serias repercusiones para los dueños de un proceso. El trabajo incluyó una fase de análisis teórica de la metodología señalada, así como de aplicación de la misma a distintos ejemplos, para lo cual se requirió considerablemente de aspectos computacionales.

Fueron presentadas dos alternativas de estimación para los modelos de cada una de las respuestas. No se puede concluir que alguno de los métodos de estimación analizados en este trabajo sea más eficiente para obtener óptimos globales, aunque hay que considerar que la estimación SUR si considera la correlación de las variables, por lo que puede ser recomendable usar estos modelos para las técnicas de optimización multi-respuesta que no consideren dicha relación entre las respuestas.

Un aspecto que se considera que es muy importante es el del conocimiento de las técnicas

estadísticas que se utilizan para resolver problemas en la industria, esto en el sentido de que no hay que usarlas como cajas negras ya que hay que entender que puede haber situaciones ante las que puedan dar lugar a resultados no deseables. La implementación de las técnicas de optimización en un software como lo es *R* requiere de dicho entendimiento.

Acerca del trabajo computacional que se realizó, la implementación de las técnicas realizada en *R* requiere de cierto conocimiento de programación, así como del lenguaje. Sin embargo, la elección de *R* como lenguaje de programación se realizó con la finalidad de divulgar dentro del ámbito académico como el tecnológico las herramientas para la mejora del proceso, por lo que en el apéndice C se muestran algunos de los códigos utilizados.

En cuanto a la eficacia que tiene cada uno de los métodos de optimización aquí analizados, no es posible asegurar que alguno de ellos sea mejor que otro, lo que sí se puede decir es que cada uno de ellos tiene distintas particularidades y que su desempeño está relacionado con la estructura estadística de los datos que se trabajan. En este sentido se resalta que el análisis estadístico que se realiza a los datos es de suma importancia para, junto con el conocimiento de los procesos de optimización, tomar una decisión adecuada sobre cuál de estos últimos puede dar mejores resultados. Tampoco hay que olvidar que algunos de los métodos de optimización son susceptibles de mejora en cuanto a incorporar información o probar distintas ponderaciones a las variables, aunque esto puede resultar en un trabajo difícil.

Algo que hay que recalcar es que, a pesar de que las técnicas gráficas puedan tener ciertas desventajas, la integración de éstas con los métodos analíticos puede proporcionar un potencial para la optimización y mejora continua de los procesos industriales.

No hay que olvidar que las metodologías descritas en este trabajo son auxiliares en la mejora sistemática de procesos, no una simple aplicación, y deben de ser utilizadas en vinculación de otras herramientas.

Al principio de este trabajo se habló de su pertenencia en el rubro de la mejora continua. Muchos de los autores que hicieron propuestas para resolver el problema de optimización hablan de mejorar los procesos, pero no dan pautas para hacerlo. En este sentido surge la pregunta de cuál debe ser el siguiente paso una vez que se ha encontrado un óptimo global. Para esto es necesario verificar si el punto dado es realmente el óptimo en el proceso o si se acerca a tal. Al respecto, existe una estrategia experimental que trata de adaptar los resultados obtenidos experimentalmente para encontrar de manera secuencial mejores condiciones de operación, la estrategia es conocida como operación evolutiva [4]. Una vez que se han verificado las condiciones óptimas mediante experimentos, hay que llevar estas condiciones al proceso real de producción. De esta manera se completa el ciclo del Deming.

El uso de los principios bien desarrollados y de las metodologías del problema de optimización

multi-objetivo a los problemas de optimización multi-respuesta provee una alternativa de gran utilidad para el experimentador, ya que le permite escoger la solución que mejor convenga a sus intereses.

## 7.2 Trabajos futuros y líneas de investigación

Uno de los objetivos primordiales de este trabajo era el de ofrecer al lector la pauta sobre que método utilizar para realizar la optimización en base a su eficacia. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, no fue posible establecer cual de ellos sea el más apropiado ya que los resultados para cada una de las técnicas se obtuvieron en base a las distintas características de las variables para cada uno de los procesos. No hay que perder de vista que el estudio comparativo que se realizó estuvo limitado a la disponibilidad de los datos. En esa dirección es de sumo interés establecer si cada una de las técnicas de optimización darán los mismos resultados en cuanto a su desempeño en conjuntos de datos con las mismas características que los aquí estudiados, por lo que un trabajo de simulación de distintos conjuntos de datos es altamente recomendable.

Otro análisis de interés es el de, con la base de datos disponible, modificar mediante simulación algunas de las características para evaluar el desempeño de los métodos ante estos cambios, y también establecer pautas en cuanto más datos simulados.

El uso de regresiones en dos etapas mejoró el desempeño para la mayoría de los métodos para uno de los procesos en particular. Es relevante conocer si este hecho se repite para el resto de los datos que tengan una o varias variables con varianza grande.

No hay que olvidar que en este trabajo sólo se implementaron siete de los procedimientos de optimización existentes, por lo que resulta conveniente implementar el resto de las alternativas de optimización para obtener mejores conclusiones en cuanto a las recomendaciones de uso de algunas de las técnicas que se pueda hacer.

Una línea de trabajo interesante es la de proveer un software que ofrezca las técnicas de optimización multi-respuesta con la finalidad de que estas resulten atractivas para los encargados de procesos y, de esta forma, mejorar la producción. Esto requiere de una ardua labor de cooperación entre investigadores en el área, programadores y analistas de datos. Dentro de este rubro, también es de utilidad la inclusión de interfaz gráfico amigable que permita realizar la superposición de contornos para estimadores SUR u otros. Además resulta de interés incluir en este software la técnica de regresión en dos etapas como una alternativa de mejora en los procedimientos multi-respuesta.

Finalmente, el trabajo de la presente tesis plantea puntos de investigación a los que pueden darse seguimiento. Entre los más importantes se identifican los siguientes:

- Incorporar la variabilidad de las respuestas a los métodos de optimización con el fin de que

los intervalos de confianza para las respuestas cumplan con las especificaciones.

- Investigar acerca de los algoritmos que permiten obtener un conjunto de soluciones óptimas en el contexto del problema de optimización multi-objetivo.
- Realizar estudios acerca de las consideraciones estadísticas que puedan ser incorporadas al problema de optimización multi-objetivo para que esta alternativa de optimización para el problema multi-respuesta sea más atractiva.
- Implementación de software amigable para el usuario mediante herramientas computacionales, el cual incluya las diversas técnicas de optimización multi-respuesta y multi-objetivo.
- Considerando que en algunos procesos intervienen factores de control cualitativos, es necesario trabajar en técnicas multi-respuesta que ofrezcan la búsqueda de condiciones óptimas para este tipo de problemas.

# Apéndice A

## Glosario

En este apéndice se presentan los significados de los términos más usados durante el desarrollo de este trabajo. La mayoría de las definiciones fueron tomadas de las referencias [8], [18] y [19].

**Análisis de varianza.** Es un procedimiento para descomponer la variabilidad de la variable respuesta en sumandos, cada uno asignable a una fuente conocida.

**Bloque.** Conjunto de variables experimentales agrupadas de acuerdo a la homogeneidad en cuanto a sus respuestas antes de aplicar algún tratamiento.

**Calidad.** Es una fijación mental del consumidor que asume conformidad con un producto o servicio determinado, que solo permanece hasta el punto de necesitar nuevas especificaciones.

**Capacidad de proceso.** Es la manera en la que las variables de salida cumplen con sus especificaciones.

**Coefficiente de correlación  $\rho$ .** Índice que mide la intensidad de la relación lineal entre dos variables

**Coefficiente de determinación  $R^2$ .** Índice que mide la proporción de la variabilidad explicada por el modelo.

**Cuadrado medio del error (CME).** Medida de variabilidad que se obtiene al dividir la suma del cuadrado del error entre sus grados de libertad. Se utiliza para estimar la varianza del error.

**Diagrama de Pareto.** Gráfico de barras que representa los efectos para un modelo ordenados en forma descendente de acuerdo a su magnitud.

**Diseño de experimentos.** Conjunto de técnicas estadísticas que permiten lograr la máxima eficacia de los procesos de producción al menor costo.

**Diseño ortogonal.** Diseño en el que las columnas de la matriz de diseño son independientes entre sí.

**Diseño rotatable.** Diseño en el que la varianza de la respuesta estimada depende de la distancia

al centro del diseño y no de la dirección en la que se encuentra.

**Escalamiento ascendente.** Técnica utilizada para determinar tratamientos por experimentar ubicados sobre la dirección de máximo ascenso a partir del diseño inicial.

**Especificación.** Es el rango de valores que una variable de respuesta de un proceso puede tomar para que el desempeño sea el adecuado.

**Estimador.** Es un estadístico (esto es, una función de la muestra) usado para estimar un parámetro desconocido de la población.

**Experimento.** Cambio en las condiciones de operación de un sistema o proceso, cuyo objetivo es medir el efecto en el cambio de las propiedades del producto

**Factor.** Variable independiente del proceso. Se investigan en el experimento para observar como influyen en la variable de respuesta.

**Factor controlable.** Son los factores que pueden ser controlados por el experimentador, quien los fija en un punto o nivel de operación.

**Factor no controlable o de ruido.** Variables que no pueden ser controlables durante la operación normal del proceso.

**Matriz de diseño.** Arreglo conformado por las diferentes condiciones de proceso que serán ejecutadas.

**Mejora Continua.** Estrategia que busca identificar e implementar mejoras en los productos, servicios y procesos.

**Metodología de superficie de respuesta (MSR).** Estrategia de experimentación y modelación que permite encontrar condiciones de operación óptima de un proceso.

**Mínimos cuadrados ordinarios (OLS).** Procedimiento para estimar los parámetros de un modelo de regresión minimizando los errores de ajuste del modelo.

**Modelo jerárquico.** Un modelo es jerárquico si contiene todos los términos más simples que componen a los términos de mayor orden que están en el modelo.

**Nivel.** Valor que se asigna a cada factor estudiado en un diseño experimental.

**Parámetro.** Características que mediante su valor numérico ayudan a describir a un

**Predicho o valor estimado.** Es el valor que, según el modelo de regresión, toma la variable dependiente en un punto  $\mathbf{x}$ .

**Proceso.** Es un conjunto de actividades entrelazadas o interrelacionadas que reciben ciertos insumos y los transforman en un resultado o en un producto.

**Producto.** Es el resultado de un proceso.

**Prueba de falta de ajuste.** Prueba que verifica la calidad del ajuste (en cuanto al orden del mismo) del modelo.

**Residual.** Diferencia entre los valores experimentales y los valores estimados o predichos.

**Región experimental.** Espacio delimitado por los rangos de experimentación utilizados con cada factor.

**Réplica o repetición.** Consiste en la aplicación repetida de un tratamiento a distintas unidades experimentales.

**Significancia.** En estadística, un resultado se llama significativo si es poco probable que haya ocurrido por casualidad.

**Solución de compensación o trade off.** Se refiere generalmente a perder alguna calidad o aspecto a cambio de ganar en otra.

**Suma de cuadrados del error (SCE).** Suma de residuos al cuadrado. Se utiliza para estimar la varianza del error.

**Superficie de respuesta.** Es la representación gráfica del modelo ajustado.

**Tratamiento.** Combinación de niveles de todos los factores.

**Unidad experimental.** Objeto, individuo o unidad a la que se le aplica un tratamiento con el fin de obtener una medición de la variable de respuesta.

**Variabilidad.** Se refiere a la diversidad de resultados de una variable o de un proceso.

**Variable de respuesta.** Característica del producto cuyo valor interesa mejorar mediante el diseño de experimentos.



## Apéndice B

### Lista de abreviaciones

$CME_i$	Cuadrado medio del error.
DBIB	Diseño en bloques incompleto balanceado.
DI1	Método de la función de distancia de Khuri y Conlon
DI1(OI)	Método de la función de distancia de los predichos al óptimo individual.
DI1(T)	Método de la función de distancia de los predichos al valor target..
DI2	Método de la función de distancia que considera la aleatoriedad de la respuesta.
FD	Método de la función de deseabilidad de Derringer y Suich.
FP	Método de la función de pérdida de Ames. <i>et al.</i>
GLS	Mínimos cuadrados generalizados (generalized least squares).
GR	Método de superposición de contornos.
GS	Método del mínimo grado de satisfacción.
$LIE_i$	Límite inferior de especificación para la $i$ -ésima respuesta
$LSE_i$	Límite superior de especificación para la $i$ -ésima respuesta
MOOP	Problema de optimización multi-objetivo (multiobjective optimization problem)
MSR	Metodología de superficie de respuesta.
OLS	Mínimos cuadrados ordinarios (ordinari least squares).
PC	Método de componentes principales de Jiju.
$\mathfrak{R}$	Región experimental.
$SCE_i$	Suma de cuadrado del error para la $i$ -ésima respuesta
SUR	Regresiones aparentemente no relacionadas (seemengly unrelated regressions).
$T_i$	Valor objetivo para la $i$ -ésima respuesta
TO	Método del índice TOPSIS.
TOPSIS	Técnica de orden de preferencia por similaridad a la solución ideal



## Apéndice C

# Códigos en R

Como se mencionó en el Capítulo 5 la implementación de algunos de los métodos requirió de la programación de los mismos en el lenguaje *R*. Los códigos que fueron programados tanto para la estimación por SUR, la optimización individual y la optimización global de tres de los métodos (DI1, DI2 y FP) se presentan en este apéndice. Cabe mencionar que para los métodos TOPSIS y de componentes principales (PC) se utiliza el código para encontrar un óptimo individual considerando a los coeficientes estimados para el índice *C* y el primer componente principal, respectivamente.

Es de importancia mencionar que al ser *R* un software de distribución gratuita, y con el fin de promover el uso de procedimientos de optimización distintos a los que contienen los paquetes estadísticos para diseño de experimentos (solamente esta disponible la función de deseabilidad de Derringer y Suich), se ponen a disposición del lector, en caso de ser de su interés, los códigos completos utilizados para la realización de este trabajo solicitándolos a las siguientes direcciones electrónicas: *lbacio@cimat.mx*, *jorge@cimat.mx* y *vanebacio@hotmail.com*.

### C.1 Estimación por SUR

El código en *R* para estimar los modelos por el método de regresiones aparentemente no relacionadas se presenta a continuación. Hay que recordar que es necesario instalar la paquetería *systemfit* para el correcto funcionamiento del programa.

```
### Se llaman los datos experimentales
x<-read.csv("D:\\tesis\\llantas.csv")
x1<-x[,1]
x2<-x[,2]
x3<-x[,3]
```

```

y1<-x[,4]
y2<-x[,5]
y3<-x[,6]
y4<-x[,7]
# Se forma los términos cuadráticos y los correspondientes a iteraciones.
x11<-x1^2
x22<-x2^2
x33<-x3^2
x12<-x1*x2
x13<-x1*x3
x23<-x2*x3
### Se definen los modelos según los términos significativos
Y1<-y1~x1+x2+x3+x11+x22+x12+x13+x23
Y2<-y2~x1+x2+x3+x33
Y3<-y3~x1+x2+x3+x22
Y4<-y4~x1+x2+x3+x11+x12
### Se realiza la estimación por SUR
system<-list(Y1, Y2, Y3, Y4)
labels<-list("Y1", "Y2", "Y3", "Y4")
resultsur<-systemfit("SUR", system, labels)
summary(resultsur)

```

## C.2 Óptimos individuales

El código de programación en *R* que se utilizó para la optimización individual de las respuestas mediante el método de análisis de cordillera es el que se presenta a continuación. Sólo se considera el caso en que se maximiza la respuesta ya que para los casos de minimizar y encontrar un valor nominal, el código solo sufre pequeñas modificaciones.

```

k<-3      #Numero de factores
r<-4      #Numero de respuestas
#### Poner 1 si se quiere maximizar y -1 si se quiere minimizar, 0 target
op<-c(1,1,0,0)
tar<-c(0,0,500,67.5)
radio<-1.7^2
### Llamo estimadores

```

```

coef<-read.csv("D:\\tesis\\llantascoef2.csv")
optimo<-matrix(rep(0,k*r),ncol=r)
yopt<-c()
### Formo la matriz B
inter<-function(y)
y[1]
lin<-function(y)
c(y[2],y[3],y[4])
cua<-function(y)
matrix(c(y[5],y[8]/2,y[9], y[8]/2,y[6],y[10]/2, y[9]/2,y[10]/2,y[7]), nrow=k)}
### Procedimiento para encontrar el óptimo
for (kk in 1:r)
{beta<-coef[,kk]
b0<-inter(beta)
b<-lin(beta)
B<-cua(beta)
pre<-function(x)
  (b0+t(x)%*%b+t(x)%*%B)%*%x)
##punto estacionario
x0<-(-1/2)*ginv(B)%*%b
eigen<-eigen(B)$values
# Para maximizar la respuesta
if (op[kk]==1)
  {mu<-seq(max(eigen),max(eigen)+10,0.001)
  R<-c(20)
  x<-matrix(rep(0,k),nrow=k)
  y<-c(0)
  I<-diag(1,k)
  for(j in 1:length(mu))
  { aux<-(-1/2)*ginv(B-mu[j]*I)%*%b
    aux2<-t(aux)%*%aux
    aux3<-pre(aux)
    if(aux2<=radio)
      { x<-cbind(x,aux)
        R<-rbind(R,aux2)
      }
    }
  }
}

```

```

                y<-rbind(y,aux3)
            }}
        for(j in 1:length(y)){
            if(y[j]==max(y))
                numero<-j}
    optimo[,kk]<-x[,numero]
    yopt[kk]<-y[numero]
}
# Aqui se acaba la optimización individual
# El código para minimizar y para obtener target es parecido
optimo # Contiene los puntos óptimos
yopt  # Contiene el valor óptimo de la respuesta

```

### C.3 Optimización por DI1, DI2 y FP

El código en R para la optimización con los métodos de función de distancia (DI1 y DI2) y función de pérdida (FP) se presenta a continuación.

```

### Se define número de factores y respuestas
r<-4          #numero de respuestas
k<-3          #numero de factores
R<-2.89 #Radio experimental
# Aqui llamo a las respuestas
to<-read.csv("D:\\tesis\\llantas.csv")
n<-length(todo[,2])      #numero de tratamientos
uno<-rep(1,n)
# Matriz de diseño
X<-cbind(uno*1,to[,1],to[,2],to[,3],to[,1]^2, to[,2]^2,to[,3]^2,
  to[,1]*to[,2],to[,1]*to[,3],to[,2]*to[,3])
p<-10
# Llamo los óptimos individuales
opti<-read.csv("D:\\tesis\\llantasoptimosur.csv")
# Llamo estimadores
beta<-read.csv("D:\\tesis\\llantascoefsur.csv")
# Defino respuestas
ys<-cbind(todo[,k+1], todo[k+2], todo[k+3], todo[k+4])

```

```

# Defino la matriz de varianzas estimadas para las respuestas
In<-diag(1,n)
sigma<-(t(ys)%%(In-X%%ginv(t(X)%%X)%%t(X))%*%ys)/(n-p)
# Defino funcion de polinomio para estimar
z<-function(x)
{d<-c(1,x[1],x[2],x[3],x[1]^2, x[2]^2, x[3]^2, x[1]*x[2],x[1]*x[3],x[2]*x[3])
return(d)}
# Defino funcion de estimacion
est<-function(X,beta)
  X%%beta
estima<-function(X)
{esti<-c()
  for(i in 1:r)
    esti[i]<-est(z(X),beta[,i])
  return(esti)}
# Óptimos individuales en las respuestas
aux<-matrix(rep(0,r*r), ncol=r)
for(i in 1:r)
{  aux[i,]<-estima(opti[,i])}
yop<-c()
for(i in 1:r)
{  yop[i]<-aux[i,i] }
### Defino funcion de distancia DI1
distancia<-function(x,y)
{  if ( t(x)%%x<=R)
    dis<-(( t(estima(x)-y)%%ginv(sigma)%%(estima(x)-y) )/
          t(z(x))%%ginv(t(X)%%X)%%z(x) )^0.5
    else
    dis<-999999999
  return(dis)}
# Distancia al óptimos
dist1<-function(x)
{1*distancia(x,yop)}
ini<-c(0,0,0)      # Doy un valor inicial
di1<-optim(ini,dist1)$par  # Es el punto óptimo individual para DI1

```

```

### Defino distancia que toma en cuenta aleatoriedad DI2
cme<-c(31.59,103800,399.43,1.29)
g<-function(X,x)
{ (t(z(x))%*%ginv(t(X)%*%X)%*%z(x))^0.5}
# Intervalos de confianza simultáneos
alfaestrella<-0.05
alfa<-1-(1-alfaestrella)^(1/r)
liminf<-c()
limsup<-c()
for (i in 1:r)
{ limsup[i]<-yop[i]-g(X,opti[,i])*cme[i]^0.5*qt(alfa/2,n-p)
  liminf[i]<-yop[i]+g(X,opti[,i])*cme[i]^0.5*qt(alfa/2,n-p)}
# Distancia que toma en cuenta aleatoriedad
dist2<-function(equis)
{ disaux<-function(y)
  -distancia(equis,y)
  yoptestrella<-optim(yop,diaux, method = "L-BFGS-B", lower = liminf, upper =limsup)$par
  d<-distancia(equis,yoptestrella)
  return(d)}
di2<-optim(ini,dist2)$par # Es el punto óptimo individual para DI2
### Defino función de pérdida FP
# Defino pesos
w<-1/cme # Se puede considerar pesos iguales con "w<-rep(1,r)"
# Defino función de pérdida
qlp2<-function(y)
{
if( est(z(y),beta[,1])<=170)
suma1<-w[1]*( est(z(y),beta[,1])-T[1] )^2
else
suma1<-0
if( est(z(y),beta[,2])<=1350)
suma2<-w[2]*( est(z(y),beta[,2])-T[2] )^2
else
suma2<-0
suma3<-w[3]*( est(z(y),beta[,3])-T[3] )^2

```

```
suma4<-w[4]*( est(z(y),beta[,4])-T[4] )^2
if(t(y)%*%y<=R)
dd<-suma1+suma2+suma3+suma4
else
dd<-9999999999
return(dd)}
fp<-optim(ini,qlp2)$par # Es el punto óptimo individual para FP
```



# Bibliografía

- [1] Ames, A. E.; Mattucci, N.; MacDonald, S.; Szonyi, G. and Hawkins, D. M. (1997). "Quality Loss Functions for Optimization Across Multiple Response Surface". *Journal of Quality Technology*, **29**, pp 339-346.
- [2] Bagby, S. and Pearson, G. (2005). *Typesetting Documents in Scientific Workplace & Scientific Word*. Tercera Edición. MacKichanSoftware, Inc. Washington.
- [3] Box, G. E. P. and Behnken, D. W. (1960). "Some New Three Level Desings for the Study of Quantitative Variables". *Technometrics*, 2, pp 455-475. Correcciones (1961) *Technometrics*, **3**, pp 576.
- [4] Box, G. E. P. and Draper, N. R. (1969). *Evolutionary Operation; A Statistical Method for Process Improvement*. John Wiley & Sons, New York
- [5] Box, G. E. P. and Draper, N. R. (1987). *Empirical Model Building and Response Surface*, John Wiley & Sons, New York.
- [6] Box, G. E. P. and Wilson, K. B. (1951). "On the Experimental Attainment of Optimum Conditions". *Journal of the Royal Statistical Society. Series B*, **13**, pp 1-45.
- [7] Byrd, R. H.; Lu, P.; Nocedal, J. and Zhu, C. (1995). "A limited memory algorithm for bound constrained optimization". *SIAM J. Scientific Computing*, **16**, pp 1190-1208.
- [8] Castaño, E. y Domínguez, J. (2003). *Experimentos: Estrategia y Análisis en Ciencia y Tecnología*. Centro de Investigación en Matemáticas, México.
- [9] Chiao, C.H. and Hamada, M. (2001). "Analyzing Experiments with Correlated Multiple Responses". *Journal of Quality Tecnology*, **33**, pp 451-465.
- [10] Chon, S. J. and Hwang, C. L. (1992). *Fuzzy Multiple Attribute Decision-Making. Methods and Applications*. Springer-Verlag, New York.

- [11] De la Vara, R. y Domínguez, J. (1998). "Metología de Superficie de Respuesta". *Comunicación Técnica*, I-90-08, CIMAT.
- [12] Deb, K. (2001). *Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms*. Wiley. Chichester.
- [13] Del Castillo, E.; Montgomery, D. C. and McCarville, D. R. (1996). "Modified Desirability Functions for Multiple Response Optimization". *Journal of Quality Technology* **28**, pp. 337-345.
- [14] Deming W.E. (1982). *Out of the crisis*. Institute of Technology Centre Advanced Engineering Study, Massachusetts
- [15] Derringer, G. and Suich, R. (1980). "Simultaneous Optimization of Several Response Variables". *Journal of Quality Technology*, **21**, pp 214-219.
- [16] Draper, N. R.(1963). "Ridge Analysis of Response Surfaces". *Technometrics*, **5**, pp 469-479.
- [17] Farnsworth, G. V. (2005). Econometrics in R. URL <http://www.fordham.edu/economics/vinod/farnsworth-econometricsInR.pdf>
- [18] Gutierrez-Pulido, H. y De la Vara, R. (2003). *Análisis y Diseño de Experimentos*. McGraw-Hill, México.
- [19] Gutierrez-Pulido, H. y De la Vara, R. (2004). *Control Estadístico de Calidad y Seis Sigma*. McGraw-Hill, México.
- [20] Harrington, E. C. (1965). "The Desirability Function". *Industrial Quality Control*, **21**, pp 494-498.
- [21] Hamann, J. D. and Henningsen, A. (2006). systemfit: Simultaneous Equation Estimation Package. R package version 0.8-0. <http://www.r-project.org>, <http://www.forestinformatics.com>, <http://www.arne-henningsen.de>, <http://www.systemfit.org/>.
- [22] Harvey, A.C. (1976). "Estimating regression models with multiplicative heteroscedasticity". *Econometrics*. **44**, pp 461-465.
- [23] Jeong, I. J. and Kim, K. J. (2003). "Interactive Desirability Function Approach to Multi-Response Surface Optimization". *International Journal of Reliability, Quality and Safety Engineering*. **10**. pp 205-217.

- [24] Jiju, A. (2000). "Multi-Response Optimization in Industrial Experiments Using Taguchi's Quality Loss Function and Principal Component Analysis". *Quality and Reliability Engineering International*, **16**, pp 3-8.
- [25] Jolliffe, I. T. (1986). *Principal Component Analysis*. Springer-Verlag, New York.
- [26] Khuri, A. I. (1990). "Analysis of Multiresponse Experiments: A Review". Publicado en: Subir, G. (1990) *Statistical Design & Analysis of Industrial Experiments*. Marcel Dekker Inc., New York.
- [27] Khuri, A. I. and Conlon, M. (1981). "Simultaneous Optimization of Multiple Responses Represented by Polynomial Regression-Functions". *Technometrics*, **23**, pp 363-375.
- [28] Khuri, A. I. and Cornell, J. A. (1987). *Response Surfaces: Designs and Analyses*. Marcel Dekker, New York.
- [29] Kim, K. J. and Lin, D.K.J. (2000). "Simultaneous Optimization of Mechanical Properties of Steel by Maximizing Exponential Desirability Functions". *Applied Statistics*, **49**, pp.311-325.
- [30] Ko, Y. H.; Kim, K. J. and Jun, C. H. (2005). "A new Loss Function-Based Method for Multiresponse Optimization". *Journal of Quality Technology*, **37**, pp 50-59.
- [31] Kros, J. F. and Mastrangelo, C. M. (2001). "Comparing Methods for the Multi-Response Design Problem". *Quality and Reliability Engineering International*, **17**, pp 323-331.
- [32] Kros, J. F. and Mastrangelo, C. M. (2004). "Comparing Multi-Response Designs Methods with Mixed Responses". *Quality and Reliability Engineering International*, **20**, pp 527-539.
- [33] Lazić, Ž. R. (2004). *Design of Experiments in Chemical Engineering*. WILEY-VCH. Germany.
- [34] Montgomery, D. C. (1991). *Design and Analysis of Experiments*. Tercera Edición. John Wiley & Sons, New York.
- [35] Myers, R. H. (1971). *Response Surface Methodology*. Allyn and Bacon, INC. Boston.
- [36] Myers, R. H. and Carter, W. H. (1973). "Response Surface Techniques for Dual Response Systems". *Technometrics*, **15**, pp 301-317.
- [37] Myers, R. H.; Khuri, A. I. and Vining, G. G. (1992). "Response Surface Alternatives to the Taguchi Robust Parameter Design Approach". *American Statistician*, **46**, pp 131-139.

- [38] Myers, R. H. and Montgomery, D. C. (1995). *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*. John Wiley & Sons, New York.
- [39] Nelder, J. A. and Mead, R. (1965). "A Simplex Method for Function Minimization". *Computer Journal*, **7**, pp 308-313.
- [40] Ortiz, F. Jr.; Simpson, J. R.; Pignatiello, J. J. Jr. and Heredia-Lagner, A. (2004). "A Genetic Algorithm Approach to Multi-Response Optimization". *Journal of Quality Technology*, **36**, pp 432-450.
- [41] Park, R. E. (1966). "Estimation with Heteroscedastic Error Terms", *Econometrica*, **34**, p. 888.
- [42] Phadke, M. S. (1989). *Quality Engineering Using Robust Design*. Prentice-Hall. New Jersey.
- [43] Pignatiello, J. J. Jr. (1993) "Strategies for Robust Multiresponse Quality Engineering". *IIE Transactions*, **25**, pp 5-15.
- [44] R Development Core Team (2006). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, URL <http://www.R-project.org>.
- [45] Ribardo, C. and Allen, T. T. (2003). "An Alternative Desirability Function for Achieving 'Six Sigma' Quality". *Quality and Reliability Engineering International*. **19**, pp 227-240.
- [46] Richert, S. H., Morr, C. V., and Cooney, C. M. (1974). "Effect of Heat and Other Factors Upon Foaming Properties of Whey Protein Concentrates", *Journal of Food Science*, **39**, pp 42-48.
- [47] Schmidt, R. H.; Illingworth, B. L.; Deng, J. C. and Cornell, J. A. (1979). "Multiple Regression and Response Surface Analysis of the Effects of Calcium Chloride and Cysteine on Heat-Induced Whey Protein Gelation". *J. Agricult. Food Chemistry*, **27**, pp 529-532.
- [48] Srivastava, V. K. (1987). *Seemingly Unrelated Regression Equations Models Estimation and Inference*. Marcel Dekker, Inc. New York.
- [49] Shah, H. K.; Montgomery, D. C. and Carlyle, W. M. (2004). "Response Surface Modeling and Optimization in Multiresponse Experiments Using Seemingly Unrelated Regressions". *Quality Engineering*, **16**, pp 387-397.
- [50] Tabucanon, M. T. (1988). *Multiple Criteria Decision Making in Industry*. Elsevier. New York.

- 
- [51] Taguchi, G. (1986). *Introduction to Quality Engineering*. Asian productivity Organization.
- [52] Tarnag, Y. S. and Yang, W. H. (1998). "Application of the Taguchi Method to the Optimization of the Submerged Arc Weilding Process". *Journal of Materials and Mnuufacturing Processes*, **13**, pp. 455-467.
- [53] Tseo, C. L., Deng, J. C., Cornell, J. A., Khuri, A. I. and Schmith, R. H. (1980). "Effect of washing treament on quality of minced mullet flesh". *Journal of. Food Science*,**48**, pp 163-167.
- [54] Vining, G. G. (1998). "A Compromise Approach to Multiresponse Optimization". *Journal of Quality Technology*, **30**, pp 309-313.
- [55] Vining, G. G. and Myers, R. H. (1990). "Combining Taguchi and Response Surface Philosophies: A Dual Response Approach". *Juornal of Quality Technology*, **22**, pp 38-45.
- [56] Wurl, R. C. and Albin, S. L. (1999). "A Comparison of Multiresponse Optimization: Sensitivity to Parameter Selection". *Quality Engineering*, **11**, pp 405-415.
- [57] Zellner, A. (1962). "An Efficient Method of Estimating Seemingly Unrelated Regressions and Tests for Aggregation Bias". *American Statistical Association Journal*, **57**, pp 348-368.