Diseño y análisis de experimentos

Estadística para la Calidad y Productividad

Experimentos diseñados

- Un experimento diseñado es una prueba o serie de pruebas en las cuales se inducen cambios deliberados en algunas variables de entrada del sistema mientras otras se mantienen fijas, de manera de identificar las fuentes de los cambios en las variables de salida.

Definiciones básicas

- **Unidad experimental** es el sujeto u objeto sobre el cual se toma una medición de la variable de respuesta.
- Un **punto** del diseño es una combinación de valores de las variables explicativas para las cuales se toma una medición de la variable de respuesta. En otras palabras, estamos hablando de una condición experimental

Definiciones básicas (cont)

- Los **tratamientos** son las variables explicativas cuyo efecto sobre la respuesta nos interesa estudiar.
- Las variables explicativas cuya influencia sobre la respuesta no interesa al experimentador se denominan **variables de ruido**.
- Cuando las variables explicativas son categóricas se les llama **factores**.

Definiciones básicas (cont)

- **Ejemplo:** Se está interesado en estudiar la influencia de la presión y la temperatura de moldeo de un nuevo tipo de plástico sobre su dureza, para lo cual se decide tomar muestras de 2 m^2 (cada una de las cuales representa una **unidad experimental**) producidas a 200, 300 y 400 psi de presión y 200 y 300 ºF de temperatura.

Definiciones básicas (cont)

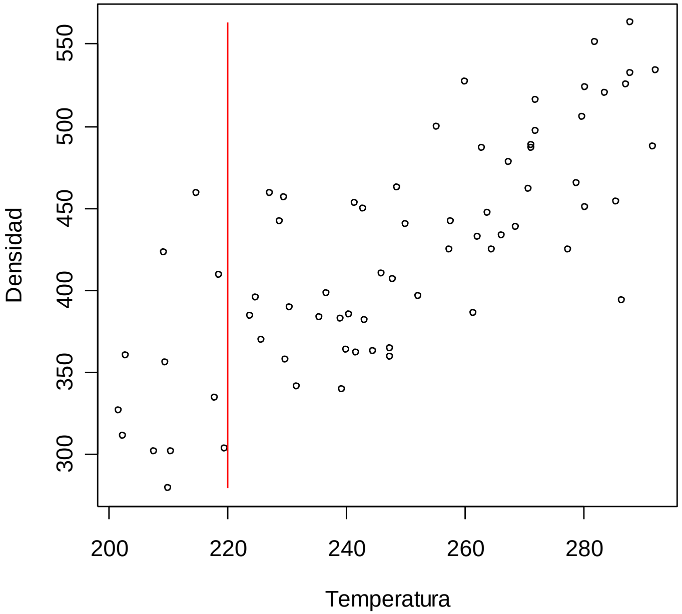
- En este caso la temperatura y la presión representan los **tratamientos** del experimento y los mismos son **factores**
- El diseño comprende seis **puntos**: (200psi,200ºF), (300psi,200ºF), (400psi,200ºF), (200psi,300ºF), (300psi,300ºF) y (400psi,300ºF).
- No hemos identificado ninguna **variable de ruido** para este problema.

Ventajas de los experimentos diseñados

- Elegir los puntos del diseño tiene múltiples ventajas:
  - Se pueden controlar variables de ruido:
    - Las variables de ruido que se conocen pueden incluirse en el estudio en forma de bloques y covariables, o manteniendo su valor durante a lo largo de las distintas corridas.
    - Para reducir la influencia de las variables de ruido cuya presencia se desconoce, la asignación de los tratamientos a las unidades experimentales se debe hacer en forma aleatoria.

Ventajas de los experimentos diseñados

- Con datos históricos el rango de los tratamientos puede ser muy reducido, con lo que el ruido puede enmascarar los cambios en la respuesta.



Ventajas de los experimentos diseñados

- Se puede reducir el tamaño muestral, simplificar el análisis y obtener mejor información:
  - Se puede lograr que los estimadores del modelo tengan propiedades atractivas (como por ejemplo la ortogonalidad). Esto hace que se logren estimaciones más eficientes con menos datos.
  - Se pueden elegir que factores o interacciones han de despreciarse, en caso que esto sea necesario.
  - En los datos históricos es posible que el efecto de algunas variables sea indistinguible (confusión de efectos).

Etapas de un experimento

Identificación del problema
- Objetivo (Hipótesis/Pregunta).
- Escoger variables de respuesta.
- Identificar variables explicativas.
- Vínculo entre VE y VR (modelo)

Diseño del experimento
(¿dónde medir?)

Recolección de la muestra
(medición)

Análisis de resultados
(respuesta a la pregunta)

⌘ El diseño del experimento está influenciado por el modelo para analizar los datos.

Modelaje de sistemas

- En los cursos básicos de estadística se estudiaron los modelos lineales (los cuales incluyen a los modelos de regresión y de análisis de varianza como casos particulares) y se diseñaron herramientas para estimarlos y probar hipótesis sobre ellos. Vamos ahora a utilizar este mismo tipo de modelos para analizar los datos provenientes de experimentos diseñados.

Modelos asociados

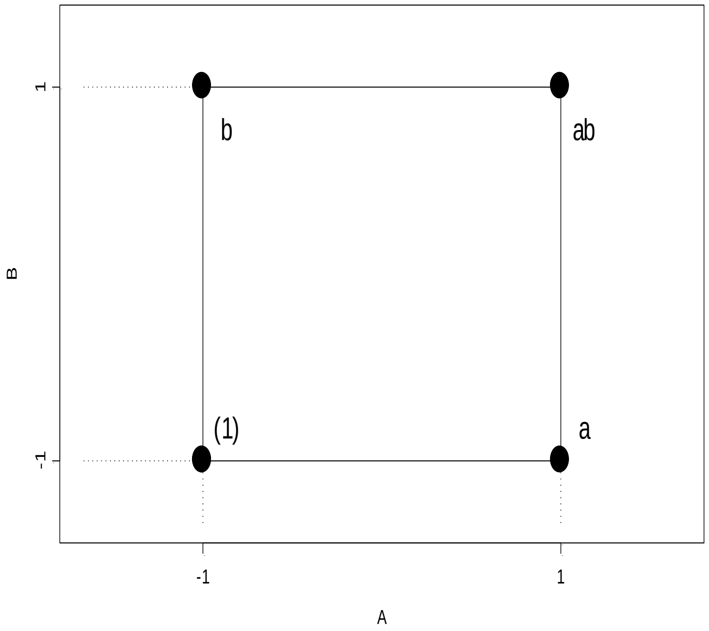
- Por ser un conjunto de datos con tratamientos categóricos, el modelo lógico a utilizar es un modelo de análisis de varianza con k vias que incluya todas las interacciones entre factores.
- También puede utilizarse un modelo de regresión lineal con variables codificadas, el cual resulta equivalente al modelo ANOVA.

Definición de efecto

- En el ámbito de los diseños 2^k se denomina **efecto** de una variable (o de una interacción) a la diferencia entre la respuesta esperada que se obtiene en el nivel alto de la variable y la respuesta esperada que se obtiene en el nivel bajo de la misma.

Diseños 2^2

- Llamaremos A y B a las variables explicativas, así como a sus efectos.
- La interacción entre ambos factores y el efecto correspondiente la denotaremos AB.
- Las condiciones experimentales pueden ubicarse en un cuadro.



Nomenclatura de diseños 2^2

- Para denotar los puntos experimentales se utiliza una palabra compuesta por las letras minúsculas correspondientes a los factores que deban colocarse a nivel alto. El punto que corresponde a todas las variables en nivel bajo se denota (1).

Nomenclatura de diseños 2^2 (cont)

- Así, los puntos en **orden estándar** son:

	A	**B**
(1)	-1	-1
a	+1	-1
b	-1	+1
ab	+1	+1

- En algunos casos se usa la misma nomenclatura para el valor de la variable de respuesta obtenida en ese punto, pero esto puede inducir a errores.

Estimación en diseños 2^2

- La forma más sencilla de estimar los efectos en este diseño es usar un modelo de regresión con la estructura:

$$y_i = \mu + \alpha x_{1i} + \beta x_{2i} + (\alpha\beta) x_{1i} x_{2i} + \varepsilon_i$$

donde

$$x_{1i} = \begin{cases} -1 & \text{si} \quad A \text{ en bajo} \\ +1 & \text{si} \quad A \text{ en alto} \end{cases} \qquad x_{2i} = \begin{cases} -1 & \text{si} \quad B \text{ en bajo} \\ +1 & \text{si} \quad B \text{ en alto} \end{cases}$$

Estimación en diseños 2^2 (cont)

- Así se obtienen como estimadores

$$\hat{\alpha} = \frac{y_{a.} + y_{ab.} - y_{(1).} - y_{b.}}{2^2 R}$$

$$\hat{\beta} = \frac{y_{b.} + y_{ab.} - y_{(1).} - y_{a.}}{2^2 R}$$

$$\alpha\beta = \frac{y_{(1).} + y_{ab.} - y_{a.} - y_{b.}}{2^2 R}$$

donde el punto indica la suma sobre todas las réplicas obtenidas en el mismo punto.

Estimación en diseños 2^2 (cont)

⌘ Este modelo de regresión es equivalente a ajustar un modelo de análisis de varianza de 2 vías:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i^* + \beta_j^* + (\alpha\beta)_{ij}^* + \varepsilon_{ijk} \quad i, j = 1,2 \quad k = 1,R$$

donde se utilizan las restricciones

$$\sum_i \alpha_i^* = 0 \quad \sum_j \beta_j^* = 0 \quad \sum_i \alpha\beta_{ij}^* = 0 \quad \sum_j \alpha\beta_{ij}^* = 0$$

cumpliéndose así las relaciones

$$\alpha_1^* = \alpha \qquad \beta_1^* = \beta \qquad \alpha\beta_{11}^* = \alpha\beta$$

Estimación en diseños 2^2 (cont)

- Recordemos que en este modelo μ representa la media general de todas las observaciones y los demás coeficientes la diferencia respecto de esta media general que se produce en la respuesta para cada nivel de la variable correspondiente. Así:

$$Efecto\,(A) = (\mu + \alpha) - (\mu - \alpha) = 2\alpha$$

$$Efecto\,(B) = (\mu + \beta) - (\mu - \beta) = 2\beta$$

$$Efecto\,(AB) = (\mu + \alpha\beta) - (\mu - \alpha\beta) = 2(\alpha\beta)$$

Estimación en diseños 2^2 (cont)

- El estimador del efecto de A que obtuvimos anteriormente puede escribirse

$$Efecto\,(A) = \left(\frac{y_{a.} + y_{ab.}}{2R}\right) - \left(\frac{y_{(1).} + y_{b.}}{2R}\right)$$

Es decir, el promedio de todas las observaciones a nivel alto de A menos el promedio de todas las observaciones a nivel bajo de A. Esto está en línea con nuestra definición de efecto.

Estimación en diseños 2^2 (cont)

⌘ El mismo efecto también puede escribirse

$$Efecto\,(A) = \frac{\left(\dfrac{y_{a.} - y_{(1).}}{R}\right) + \left(\dfrac{y_{ab.} - y_{b.}}{R}\right)}{2}$$

El primer paréntesis representa el cambio de respuesta que produce la variable A cuando B está en nivel bajo y la segunda el mismo cambio cuando B esta en alto.

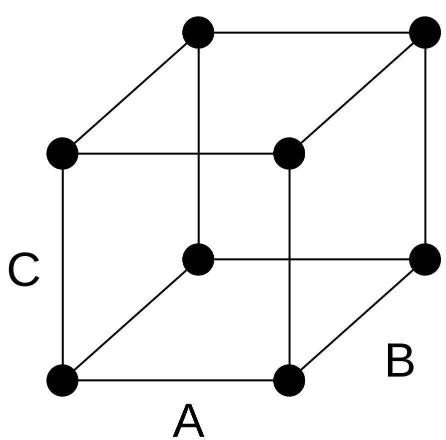
Diseños factoriales 2^k

- El más importante de los casos especiales de los diseños factoriales es el que tiene *k* factores cada uno a dos niveles. Estos niveles pueden ser cuantitativos, valores de temperatura o presión, o pueden ser cualitativos, tales como 2 máquinas o dos operadores, o tal vez pueda ser la presencia o ausencia de un factor.
- Una réplica completa de tal diseño requiere $2 \times 2 \times \cdot \cdot \cdot \times 2 = 2^k$ *observaciones y se conoce como un* ***diseño factorial 2^k.***

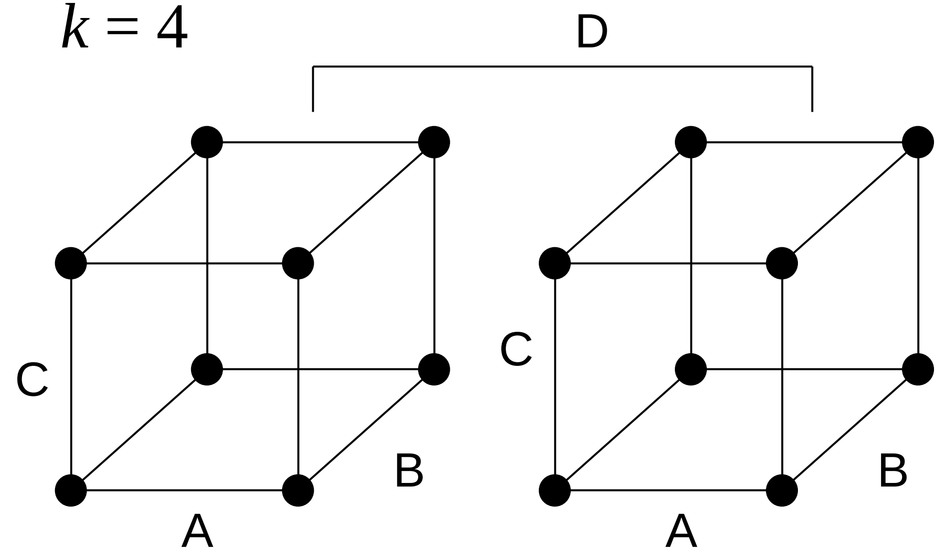
Diseños 2^k

- El espacio de condiciones experimentales puede representarse mediante un cubo (para $k = 3$) o pares de cubos (para $k > 3$).

$k = 3$



$k = 4$



Nomenclatura de diseños 2^k

- La forma de denotar los puntos es la misma que el diseño 2^2. En cuanto al orden estándar de un diseño 2^k, este puede hallarse duplicando el orden estándar de un 2^{k-1}, uno para el nivel bajo de la nueva variable seguido del otro para el nivel alto de la nueva variable.

Nomenclatura de diseños 2^k

- Por ejemplo, para $k = 3$ y $k = 4$.

	A	B	C
(1)	-1	-1	-1
a	+1	-1	-1
b	-1	+1	-1
ab	+1	+1	-1
c	-1	-1	+1
ac	+1	-1	+1
bc	-1	+1	+1
abc	+1	+1	+1

	A	B	C	D
(1)	-1	-1	-1	-1
a	+1	-1	-1	-1
b	-1	+1	-1	-1
ab	+1	+1	-1	-1
c	-1	-1	+1	-1
ac	+1	-1	+1	-1
bc	-1	+1	+1	-1
abc	+1	+1	+1	-1
d	-1	-1	-1	+1
ad	+1	-1	-1	+1
bd	-1	+1	-1	+1
abd	+1	+1	-1	+1
cd	-1	-1	+1	+1
acd	+1	-1	+1	+1
bcd	-1	+1	+1	+1
abcd	+1	+1	+1	+1

Estimación en diseños 2^k

- Un modelo de regresión con k variables de la forma

$$x_j = \begin{cases} -1 & \text{si} \quad j\text{-esimo factor en bajo} \\ +1 & \text{si} \quad j\text{-esimo factor en alto} \end{cases}$$

puede utilizarse para estimación en este problema.

Algoritmo de los signos

- Podemos usar la ortogonalidad del diseño para simplificar la fórmula de los estimadores mínimo cuadráticos. De hecho es fácil probar que estos se pueden escribir como un múltiplo del producto escalar de dos vectores:

$$Efecto = \frac{columna\ del\ \ factor \cdot vector\ de\ observaciones}{2^{k-1}}$$

Algoritmo de los signos (cont)

- Por ejemplo, en un diseño 2^3, el estimador del efecto de la interacción ABC viene dado por:

$$Efecto\,(ABC) = \frac{(-1,+1,+1,-1,+1,-1,-1,+1)\cdot(y_{(1)},y_a,y_b,y_{ab},y_c,y_{ac},y_{bc},y_{abc})}{2^2}$$

$$= \frac{-y_{(1)} + y_a + y_b - y_{ab} + y_c - y_{ac} - y_{bc} + y_{abc}}{4}$$

- La columna ABC se obtiene multiplicando las columnas de A, B y C.

Análisis de diseños 2^k (cont)

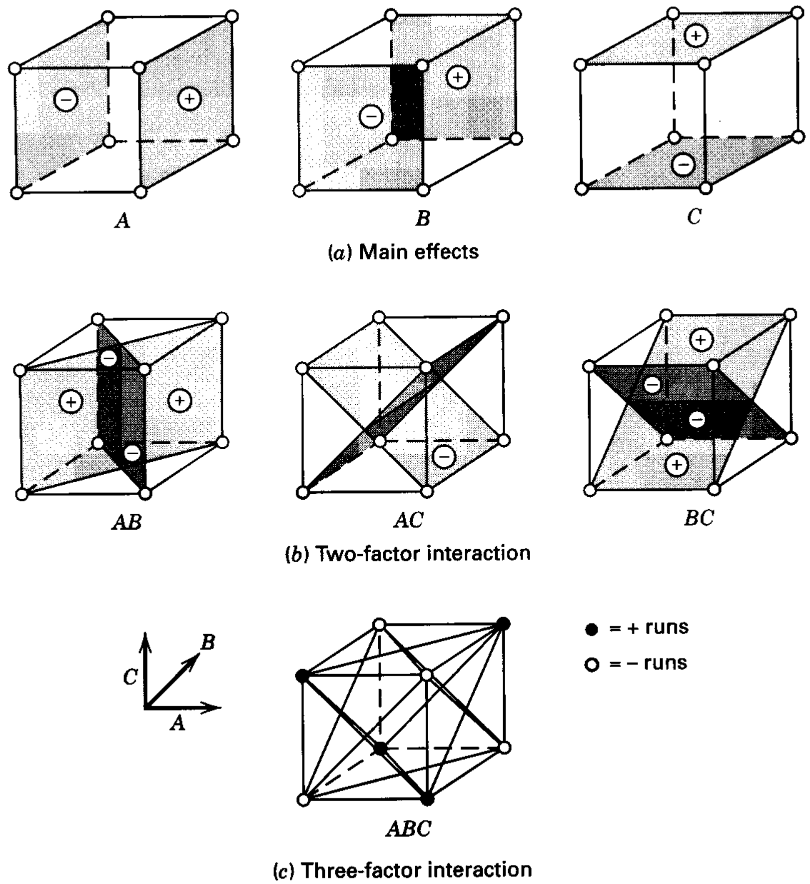


Figure 6-5 Geometric presentation of contrasts corresponding to the main effects and interactions in the 2^3 design.

Análisis de diseños 2^k (cont)

$$A = \bar{y}_{A^+} - \bar{y}_{A^-}$$

$$B = \bar{y}_{B^+} - \bar{y}_{B^-}$$

$$C = \bar{y}_{C^+} - \bar{y}_{C^-}$$

$$AB = \frac{1}{4n}\left[ab + (1) + abc + c - b - a - bc - ac\right]$$

$$AC = \frac{1}{4n}\left[ac + (1) + abc + b - a - c - ab - bc\right]$$

$$BC = \frac{1}{4n}\left[bc + (1) + abc + a - b - c - ab - ac\right]$$

$$ABC = \frac{1}{4n}\left[abc - bc - a + c - ab + b + a - (1)\right]$$

Análisis de diseños 2^k

- Si se toma más de una réplica entonces se utiliza una tabla de análisis de varianza de k vías para determinar cuales efectos son significativos. La suma de cuadrados de cada variable tiene 1 grado de libertad y puede obtenerse a partir del efecto mediante la fórmula:

$$SS = \frac{(Efecto)^2}{n2^K}$$

Análisis de diseños 2^k (cont)

Ejemplo diseño factorial 2^3

Una empresa embotelladora de refrescos está interesada en obtener alturas de llenado más uniformes en las botellas que se fabrican en su proceso de manufactura. Teóricamente, la máquina de llenado llena cada botella a la altura objetivo correcta, pero en la práctica, existe variación en torno a este objetivo, y a la embotelladora le gustaría entender mejor las fuentes de variabilidad y, en última instancia, reducirla.

Análisis de diseños 2^k (cont)

El ingeniero del proceso puede controlar tres variables durante el proceso de llenado: el porcentaje de carbonatación (A), la presión de operación en el llenador (B) y las botellas producidas por minuto o rapidez de línea (C). Para los fines del experimento, el ingeniero puede controlar la carbonatación en dos niveles: 10 y12 por ciento. Elige dos niveles para la presión (25 y 30 psi) y dos niveles para la rapidez de línea (200 y 250 bpm). El ingeniero decide correr dos réplicas de un diseño factorial con 2^3, haciendo 24 corridas de manera aleatoria.

Análisis de diseños 2^k (cont)

La variable de respuesta observada es la desviación promedio de la altura del llenado objetivo que se observa en una corrida de producción de botellas con cada conjunto de condiciones

Análisis de diseños 2^k (cont)

Factor B					
	25 psi (-)		30 psi (+)		
Factor A	**Factor C**		**Factor C**		
	200 (-)	250 (+)	200 (-)	250 (+)	$y_{i..}$
10 (-)	-3 -1 - 4	-1 0 -1	-1 0 -1	1 1 2	-4
12 (+)	0 1 1	2 1 3	2 3 5	6 5 11	20
Totales	-3	2	4	13	
$y_{.j..}$	-1		17		
$y_{...}$	-3 + 2 + 4 + 13 = 16				

Análisis de diseños 2^k (cont)

- El estimador y la suma de cuadrados para cada efecto pueden calcularse con el algoritmo de signos.
- El efecto de la interacción no parece tener un impacto tan grande sobre la desviación de la altura de llenado como los efectos principales.
- Los efectos principales dominan en realidad este proceso explicando más del 87% de la variabilidad total, mientras que la interacción AB explica menos de 3%

Factor	Efecto	SS	%
A	3	36	46,15
B	2,25	20,25	25,96
C	1,75	12,25	15,70
AB	0,75	2,25	2,88
AC	0,25	0,25	0,32
BC	0,50	1	1,28
ABC	0,50	1	1,28
Error		5	6,41
Total		78	

Análisis de diseños 2^k (cont)

Analysis of Variance Table

Response: desviacion

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
A	1	36.000	36.000	57.6	6.368e-05 ***
B	1	20.250	20.250	32.4	0.0004585 ***
C	1	12.250	12.250	19.6	0.0022053 **
A:B	1	2.250	2.250	3.6	0.0943498 .
A:C	1	0.250	0.250	0.4	0.5447373
B:C	1	1.000	1.000	1.6	0.2415040
A:B:C	1	1.000	1.000	1.6	0.2415040
Residuals	8	5.000	0.625		

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Se puede confirmar la magnitud de los efectos principales, son altamente significativos (todos con valores *p* muy pequeños).

La interacción AB es significativa con un nivel del 10%, existe una ligera interacción entre la carbonatación y la presión

Análisis de diseños 2^k (cont)

- Los responsables del proceso decidieron correrlo con presión baja y velocidad de línea alta, y reducir la variabilidad de la carbonatación controlando con mayor precisión la temperatura. Se consiguió así una reducción sustancial en la desviación de la altura de llenado del valor objetivo.

Análisis de diseños 2^k (cont)

- Si se dispone de solo una réplica del experimento entonces la suma de cuadrados del error es nula y no es posible utilizar una tabla de análisis de varianza para determinar cuales efectos son significativos.

Análisis de diseños 2^k (cont)

- Si se supone que no hay **ningún** efecto significativo y que los errores cometidos en cada medición siguen una distribución normal con media 0 y varianza σ^2, entonces para todos los efectos:

$$Efecto \sim N\left(0, \frac{\sigma^2}{2^{k-2}}\right)$$

Análisis de diseños 2^k (cont)

- Esto sugiere dos posibilidades para realizar el análisis:
  - Utilizar un gráfico cuantil – cuantil de efectos contra la districión normal y considerar significativos los que no esten sobre la línea.
  - Utilizar un estimador de σ^2 (o bien externo, o bien obtenido a partir de los datos en forma robusta) para calcular intervalos de confianza.
- Ambas técnicas suponen pocos efectos significativos.

Modelo de regresión

Modelo de regresión

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2$$
$$= 1.0 + \left(\frac{3}{2}\right) x_1 + \left(\frac{2.25}{2}\right) x_2 + \left(\frac{1.75}{2}\right) x_3 + \left(\frac{0.75}{2}\right) x_1 x_2$$

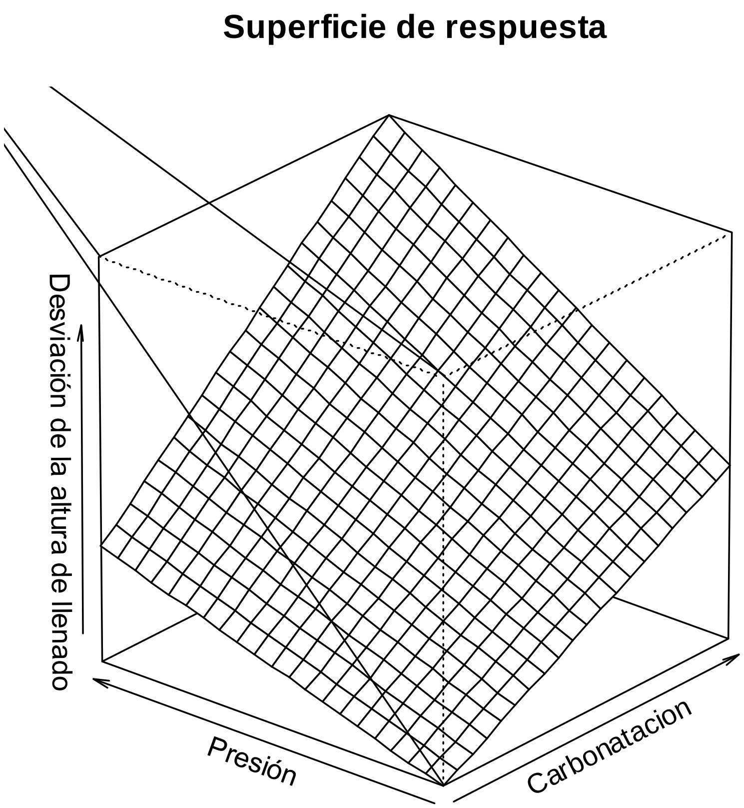
Donde las variables codificadas x_1, x_2 y x_3 representan a A, B y C, respectivamente. El término $x_1 x_2$ es la interacción AB.

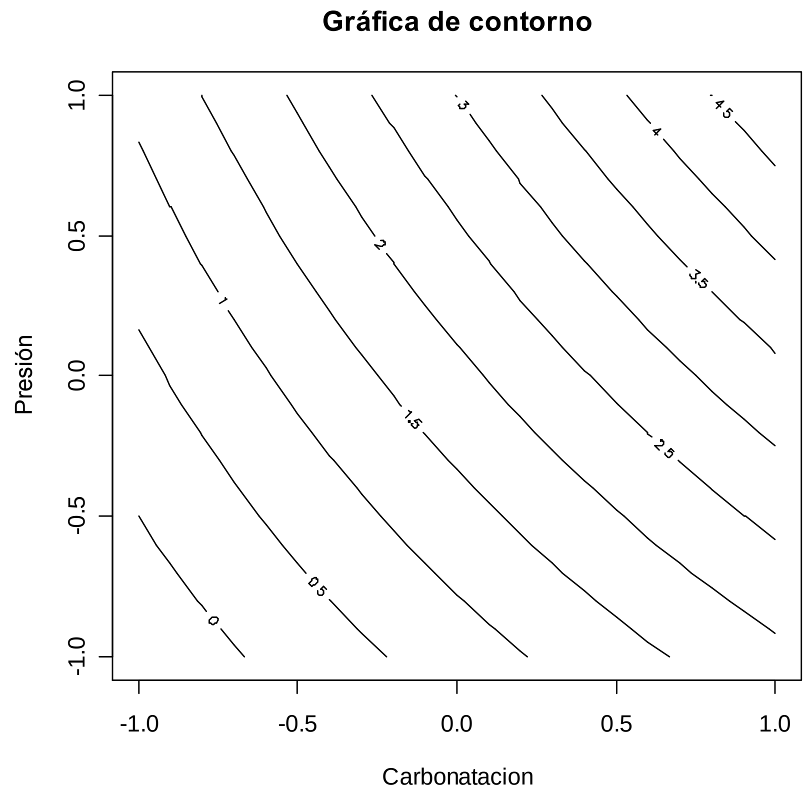
- Los residuos pueden obtenerse como la diferencia entre las desviaciones de la altura de llenado observada y predicha.

Introducción a la metodología de superficie de respuesta

- Cada contorno corresponde a una altura particular de la superficie de respuesta. Es útil para estudiar los niveles x_1, x_2 que producen cambios en la forma de la altura de la superficie de respuesta. El objetivo en este caso es llevar al experimentador de manera rápida y eficiente a la vecindad general del óptimo.

Superficie de respuesta y Gráfica de contorno





Superficie de respuesta y Gráfica de contorno

- Se muestran la superficie de respuesta y la gráfica de contorno para la desviación de la altura de llenado obtenida en el modelo de regresión, suponiendo que la velocidad de línea está en el nivel alto (x_3= 1). Observe que como el modelo contiene la interacción, las líneas de contorno de la desviación de las alturas constantes son curvas (o la superficie es un plano "torcido")

Superficie de respuesta y Gráfica de contorno

- En la superficie de respuesta se grafica el valor predicho de la desviación del llenado en términos de las dos variables del proceso (x_1 y x_2).
- La gráfica de contorno bidimensional se obtiene al mirar desde arriba la gráfica de superficie de respuesta y al unir los puntos que tienen una desviación del llenado (respuesta) constante en el plano x_1 - x_2

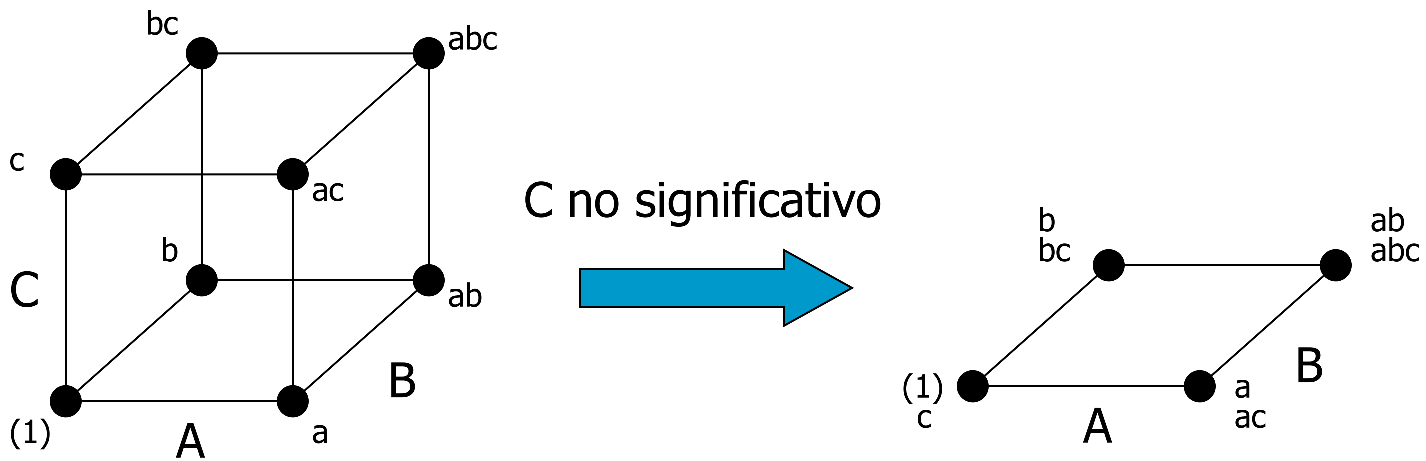
Superficie de respuesta y Gráfica de contorno

- La gráfica de contorno indica que si la velocidad de línea está en el nivel alto, entonces hay varias combinaciones de los niveles de carbonatación y la presión que satisfarán que la desviación del llenado esté tan cerca de cero como sea posible.
- Por ejemplo si se quiere minimizar la desviación del llenado, se necesita correr x_1 y x_2 en sus niveles bajos (o cerca de ellos)

Intervalos de confianza y R^2

Proyección de diseños 2^k

- Gracias a su ortogonalidad, un diseño 2^k en el cuál n factores ($n < k$) son no significativos corresponde a 2^n réplicas de un diseño en el cuál participan solo k - n factores.



Proyección de diseños 2^k (cont)

- **Ejemplo 3 (continuación)**: usando el gráfico cuantil – cuantil vimos que la concentración (B) parece no tener efecto sobre el rendimiento. Podríamos pensar entonces que nuestros resultados provienen de un diseño 2^3 con dos réplicas en los factores A, C y D, tal y como se muestra en la siguiente tabla.

Proyección de diseños 2^k (cont)

Punto	Orden Real	Rendimiento
(1)	5	12
a	9	18
b	8	13
ab	12	16
c	3	17
ac	7	15
bc	14	20
abc	1	15
d	6	10
ad	11	25
bd	2	13
abd	15	24
cd	4	19
acd	16	21
bcd	10	17
abcd	12	23

Punto	Rendimiento	
	Replica I	Replica II
(1)	12	13
a	18	16
c	17	20
ac	15	15
d	10	13
ad	25	24
cd	19	17
acd	21	23

Proyección de diseños 2^k (cont)

Podemos ahora construir una tabla de análisis de varianza para estos 3 factores.

Factor	**gl**	**SS**	**MS**	**F**
A	1	81,00	81,00	40,500
C	1	16,00	16,00	8,000
D	1	42,25	42,25	21,125
AC	1	72,25	72,25	36,125
AD	1	64,00	64,00	32,000
CD	1	0,00	0,00	0,000
ACD	1	0,25	0,25	0,125
Error	8	16,00	2,00	
Total	15	291,75		

Proyección de diseños 2^k (cont)

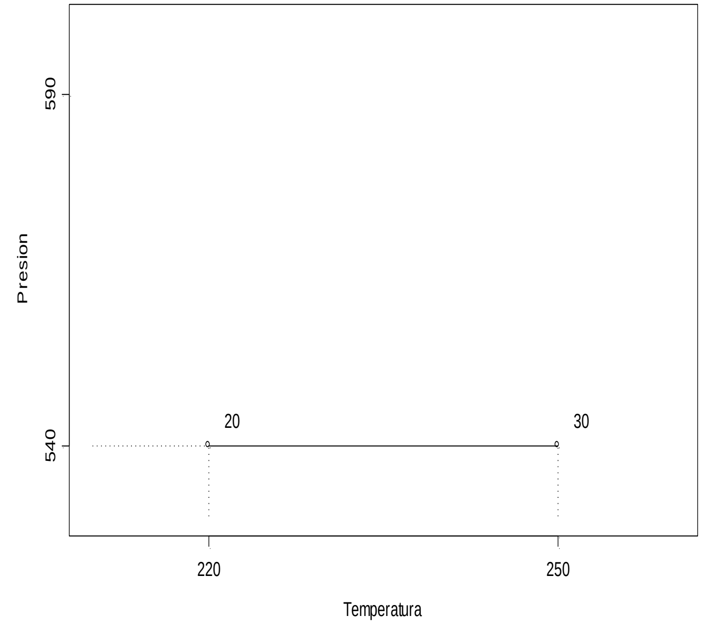
Esta tabla confirma los resultados obtenidos mediante el gráfico cuantil – cuantil: tanto la interacción ACD como la interacción CD son no significativas, pero el resto de los coeficientes del modelo si lo son.

Ventajas y desventajas de los diseños 2^k (cont)

- Los diseños 2^k son preferibles a los experimentos donde se inducen cambios en un factor a la vez:
  - En estos últimos no es posible estudiar la interacción.
  - Estos últimos tienen una eficiencia menor, ya que se requieren más observaciones para lograr la misma precisión en la estimación.

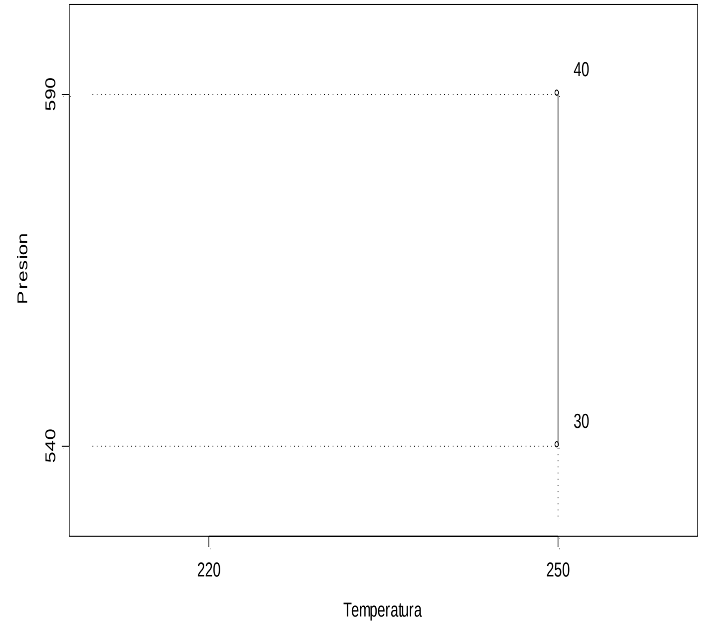
Ventajas y desventajas de los diseños 2^k (cont)

- Por ejemplo, se desea estudiar la influencia de la presión y la temperatura sobre la viscosidad de un producto. Bajo el esquema "un factor a la vez", estudiaríamos primero la temperatura:



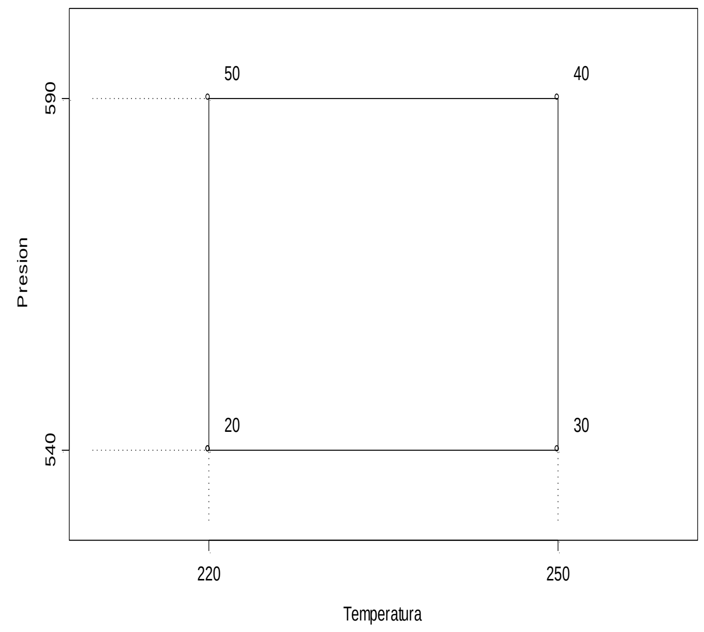
Ventajas y desventajas de los diseños 2^k (cont)

- Ahora, estudiaríamos la presión partiendo del mejor punto encontrado en el experimento anterior. Así, la condición óptima sería (250, 590) y cada estimación del efecto estaría basada en dos observaciones.



Ventajas y desventajas de los diseños 2^k (cont)

- Si usamos un diseño 2^k podríamos advertir que la interacción es importante y por tanto el óptimo estaría en (220,590) y cada estimación del efecto sería calculada usando cuatro observaciones.



Ventajas y desventajas de los diseños 2^k

- La principal ventaja es que son experimentos pequeños y baratos, ya que tienen la menor cantidad de puntos necesarios para estimar interacciones entre variables.
- La desventaja es que no proveen suficiente información para estudiar en profundidad la curvatura de la superficie.

Ventajas y desventajas de los diseños 2^k (cont)

- Los experimentos factoriales a dos niveles se encuentran ampliamente difundidos y suelen usarse en las primeras etapas de la experimentación para reducir el número de variables explicativas a considerar.
- Sin embargo, los resultados que se obtienen con ellos suelen complementarse posteriormente.