

Optimización de sistemas de respuesta dual. Una aproximación compromiso

Dual Response Systems Optimization. A Compromise Approach

CÉSAR A. CRISTANCHO F.*
OSCAR O. MELO M.**

Resumen

Recientemente se han propuesto diversas aproximaciones para la optimización de procesos donde se identifican dos variables respuesta, sin llegar a un consenso en el establecimiento de una solución compromiso ante la presencia de múltiples condiciones contradictorias. Se propone una nueva metodología que toma en cuenta simultáneamente la calidad de las predicciones, las variabilidades relativas y los costos o preferencias asociados a cada respuesta. Se ilustra mediante un ejemplo y los resultados pueden ser replicados utilizando el módulo SOLVER de EXCEL.

Palabras Claves: Análisis multiobjetivo, sistemas de respuesta dual, superficies de respuesta, múltiples respuestas, optimización simultánea.

Abstract

Several approximations have been recently proposed to optimize processes in which are identified two responses variables, but there is no agreement in the establishment of a compromise solution among the multiples conflicting conditions. We propose a new methodology which takes simultaneously into account the quality of the predictions, the relative variabilities and the cost or preference of each response. An example illustrates the methodology and the results can be replicated using EXCEL SOLVER.

Keywords: Multiobjective analysis, Dual response systems, Response surfaces, Multiple responses, Simultaneous optimization.

1. Introducción

La optimización de *sistemas de respuesta dual* (SRD) ha sido un problema muy estudiado en el diseño robusto de procesos y productos industriales, donde

*Estadístico de la Universidad Nacional de Colombia, E-mail: proevalasig_bog@unal.edu.co

**Profesor asistente de la Universidad Nacional de Colombia, E-mail: omelom@unal.edu.co

las situaciones experimentales involucran la realización de múltiples mediciones de diversas características de cada elemento de investigación y se tiene como meta establecer un conjunto de condiciones que, a juicio del investigador, sean favorables al desarrollo del proceso analizado (Myers & Carter 1973).

Sin embargo, su utilidad no se restringe a este campo ya que existe una gran variedad de situaciones donde es de vital importancia el desarrollo de metodologías para la optimización simultánea de dos respuestas, como la optimización conjunta de la media y la varianza de una variable respuesta univariada, la maximización de un rendimiento minimizando una función de costos o sujeto a un presupuesto específico, la minimización de un tiempo de ejecución mientras se optimiza una característica de calidad de un producto, etc., teniendo así aplicaciones en áreas tan diversas como ciencias físicas, químicas, biológicas, sociales, clínicas, ingeniería, economía e investigación de mercados.

En este contexto, las *metodologías basadas en superficies de respuesta* (MSR) juegan un papel fundamental en la estimación de condiciones de operación óptimas para la ejecución del experimento o proceso particular ya que han mostrado ventajas respecto a otros métodos de optimización multirespuesta, en particular para modelar situaciones de tipo continuo y por el hecho de tener medidas en términos de significancia estadística de la bondad de los modelos propuestos.

En la sección 2 se describe el problema de optimización dual. En la sección 3 se propone una transformación y un esquema de optimización para el SRD y en la sección 4, se presenta una aplicación de la metodología planteada y se entregan las conclusiones de este trabajo.

2. El problema de optimización dual

Tomando como referencia los casos enunciados por Taguchi (1986) para la optimización de la media y la varianza de una respuesta, se pueden considerar las siguientes alternativas de optimización para cualquier tipo de respuesta univariada:

- *Aproximación del objetivo a un valor deseado (VD)*: encontrar condiciones bajo las cuales la variable respuesta se acerque a un valor deseado o predefinido por el investigador.
- *Maximización del objetivo (\uparrow)*: encontrar condiciones bajo las cuales la variable respuesta sea tan grande como sea posible.
- *Minimización del objetivo (\downarrow)*: encontrar condiciones bajo las cuales la variable respuesta sea tan pequeña como sea posible.

De esta manera, al considerar respuestas duales, existen nueve casos posibles de optimización, determinados por los pares de objetivos (\mathcal{O}_1 , \mathcal{O}_2) que se encuentran consignados en la siguiente matriz, con las convenciones establecidas para el caso univariado:

$$\begin{bmatrix} (VD, VD) & (VD, \uparrow) & (VD, \downarrow) \\ (\uparrow, VD) & (\uparrow, \uparrow) & (\uparrow, \downarrow) \\ (\downarrow, VD) & (\downarrow, \uparrow) & (\downarrow, \downarrow) \end{bmatrix}$$

Por ejemplo, la pareja de objetivos (VD, \uparrow) corresponde al caso (*Aproximación de la variable respuesta 1 a un valor deseado y maximización de la variable respuesta 2*) y las parejas de la diagonal de la tabla corresponden a objetivos iguales para las dos variables respuestas.

El principal problema en el establecimiento de una solución compromiso es la existencia de alternativas no dominadas. Un *conjunto de alternativas no dominadas*, también conocido como conjunto de soluciones óptimas de Pareto o conjunto de soluciones no inferiores, se produce cuando, al conseguir una mejoría en la optimización de un objetivo, se desmejoran otros objetivos (Censor 1977).

La razón principal para la existencia de soluciones no dominadas está en la comparación de vectores duales de un espacio m -dimensional ($m \geq 2$) donde la relación “menor o igual que” sólo es de *orden parcial*¹ (Smith, Mesa, Dyner, Jaramillo, Poveda & Valencia 2000), convirtiendo la optimización dual en un problema complejo que involucra la toma de decisiones. Por ejemplo, se puede afirmar que $(2, 3) < (4, 8)$, pero no se puede comparar por medio de la relación “menor o igual que” a $(5, 6)$ con $(4, 7)$.

A grandes rasgos, las formulaciones para la resolución del problema de optimización se clasifican en: i) *enfoques basados en la optimización media-varianza (MV)*, como los presentados en Del Castillo & Montgomery (1993), Lin & Tu (1995) y Tang & Xu (2002) y ii) *enfoques basados en múltiples respuestas*, como los presentados en Harrington (1965), Derringer & Such (1980) y Vining (1998).

La tabla 1 resume las formulaciones de algunos enfoques que en la actualidad se consideran más relevantes y presentan mayor difusión. A continuación se presentan algunos autores que han trabajado en este tipo de problemas.

Derringer & Such (1980, referido como DS) retomaron la función de deseabilidad propuesta por Harrington (1965) y la adaptaron para su utilización mediante MSR. El establecimiento de funciones de deseabilidad presupone un conocimiento *a priori* de los rangos de valores más deseables para las respuestas analizadas.

Vining (1998, referido como V), retomó el trabajo de Khuri & Conlon (1981, referido como KC), al proponer una función que incorpora *la matriz de varianzas y covarianzas de las respuestas predichas*, e introducir un término que penaliza regiones donde la calidad de la predicción es relativamente pobre. Además, se incluye el uso de una función de costos. Una seria desventaja de este enfoque está en la escogencia de una matriz de costos que constituye un componente subjetivo que refleja la calidad de conocimiento del proceso.

Tang & Xu (2002, referido como TX) generalizaron varias de las metodologías propuestas, mediante programación por metas. Este enfoque considera restriccio-

¹Una relación entre pares de elementos de un conjunto es de orden parcial si es reflexiva y transitiva. Una relación de orden parcial en un conjunto X es de orden total si para dos elementos cualesquiera a, b de X siempre se puede afirmar o bien que $a \leq b$, o que $b \leq a$.

nes sobre las variables independientes, tanto de tipo esférico como cuboidal. Como casos particulares pueden considerarse Del Castillo & Montgomery (1993) y Lin & Tu (1995). Su desventaja está en no hacer consideraciones sobre la matriz de varianzas y covarianzas de las respuestas y en la calidad de las predicciones.

Tabla 1: Resumen de algunas de las metodologías más relevantes

Autor	Enfoque	Formulación
DS (1980)	Múltiple	Maximizar $D = (d_1 * d_2 * \dots * d_m)^{1/m}$ donde $d_l = \begin{cases} \left(\frac{\hat{y}_l - M_l}{T_l - M_l}\right)^r & M_l \leq \hat{y}_l \leq T_l \\ \left(\frac{\hat{y}_l - S_l}{T_l - S_l}\right)^t & T_l \leq \hat{y}_l \leq S_l \\ 0 & \hat{y}_l < M_l, \text{ o } \hat{y}_l > S_l \end{cases}$
KC (1981)	Múltiple	Minimizar $(\widehat{y}(x) - T)'(\Sigma_{\widehat{y}}(x))^{-1}(\widehat{y}(x) - T)$
V (1998)	Múltiple	Minimizar $(\widehat{y}(x) - T)'(C)(\widehat{y}(x) - T) + t_0$ donde $t_0 = \text{traza}(C\Sigma_{\widehat{y}}(x))$
TX (2002)	MV	Minimizar $\left(\frac{\widehat{y}_\mu - T_\mu}{\omega_\mu}\right)^2 + \left(\frac{\widehat{y}_\sigma - T_\sigma}{\omega_\sigma}\right)^2$

donde: \widehat{y}_l corresponde a la l -ésima respuesta ajustada; T_l , S_l y M_l son respectivamente al valor objetivo fijado, el máximo valor deseado y el mínimo valor deseado para la l -ésima respuesta; r y t corresponden a decisiones subjetivas que determinan la curvatura de D ; ω_l corresponde al peso relativo de la l -ésima respuesta y C corresponde a una matriz de costos.

3. Metodología de análisis propuesta

Partiendo de una situación experimental, donde se identifican dos variables respuestas y_1, y_2 que se supone pueden ser explicadas por un conjunto de variables controlables x_1, \dots, x_k y posterior a la escogencia de un diseño experimental de acuerdo a las características del proceso, los objetivos del investigador y a los recursos con que se cuenta para la obtención de dichos objetivos, se ajustan dos modelos empíricos a los datos observados, uno para cada variable respuesta, mediante la utilización de MSR. Un modelo ajustado de segundo orden para la l -ésima respuesta ($l = 1, 2$) es:

$$\widehat{y}_l = b_{0_l} + \mathbf{x}'_l \mathbf{b}_l + \mathbf{x}'_l \mathbf{B}_l \mathbf{x}_l \quad (1)$$

donde b_{0_l} , b_l y B_l contienen las estimaciones de los coeficientes del intercepto, lineales y de segundo orden respectivamente, B_l es una matriz simétrica cuyos elementos diagonales son los coeficientes puros de segundo orden β_{ii} y cada elemento ij ($i \neq j$) toma el valor $\beta_{ij}/2$.

Dado que en la mayoría de problemas prácticos no existe una solución optimal para las dos respuestas consideradas individualmente a causa de la existencia de

conjuntos de soluciones no dominadas, en este punto, se parte del valor esperado de una función de pérdida cuadrática dado por Graybill (1976):

$$E(\ell) = [E(\hat{y}(x)) - T]' C [E(\hat{y}(x)) - T] + \text{traza} [C \Sigma_{\hat{y}}(x)] \quad (2)$$

donde $\Sigma_{\hat{y}}(x)$ es la matriz de varianzas y covarianzas de las respuestas estimadas en la localización x , T es un vector que contiene los valores ideales para cada respuesta y C es una matriz de costos relativos o preferencias asociadas a cada respuesta. Suponiendo que la respuesta ajustada $\hat{y}(x)$ es un estimador insesgado de $E[\hat{y}(x)]$ y, siguiendo a Vining (1998), se utiliza la siguiente estimación de la función de pérdida:

$$\hat{E}(\ell) = [\hat{y}(x) - T]' C [\hat{y}(x) - T] + \text{traza} [C \Sigma_{\hat{y}}(x)] \quad (3)$$

3.1. Varianzas y covarianzas de predicción

Sea X_l la matriz diseño para la l -ésima respuesta ($l = 1, 2$) y sea x'_{l0} la localización de interés expandida por el modelo para la l -ésima respuesta. La varianza de predicción de la localización x_{l0} , medida en términos de la l -ésima respuesta, es:

$$h_{jl} = \text{Var}(\hat{y}_l(x_{l0})) = \sigma_{ll} x_{l0} (X'_l X_l)^{-1} x_{l0} \quad (4)$$

La covarianza de predicción entre las dos respuestas predichas $\hat{y}_1(x_{10})$ y $\hat{y}_2(x_{20})$ está dada por:

$$h_{12} = \text{Cov}(\hat{y}_1(x_{10}), \hat{y}_2(x_{20})) = \sigma_{12} x_{10} (X'_1 X_1)^{-1} (X'_1 X_2) (X'_2 X_2)^{-1} x_{20} \quad (5)$$

3.2. Posibles escogencias de la matriz C

Una escogencia lógica para C es hacerla una matriz diagonal, con C_{ll} igual a las preferencias relativas de cada respuesta:

$$C = W = \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & \omega_2 \end{bmatrix}$$

en cuyo caso la función de pérdida se expresa como:

$$\begin{aligned} \hat{E}(\ell) &= \omega_1 (\hat{y}_1(x) - \tau_1)^2 + \omega_2 (\hat{y}_2(x) - \tau_2)^2 + \omega_1 h_{11} + \omega_2 h_{22} \\ &= \omega_1 [(\hat{y}_1(x) - \tau_1)^2 + h_{11}] + \omega_2 [(\hat{y}_2(x) - \tau_2)^2 + h_{22}] \end{aligned} \quad (6)$$

Bajo esta escogencia de C , la función de pérdida es fuertemente influenciada por las diferentes escalas para cada respuesta y sus diferentes variabilidades.

Una segunda opción consiste en tomar $C = K \Sigma_{\hat{y}}^{-1}$, donde K es una matriz que involucra costos asociados al proceso, para el caso, asumimos $K = W$ y la función de pérdida es:

$$\begin{aligned} \hat{E}(\ell) &= \omega_1 h_{22} [(\hat{y}_1 - \tau_1)^2 + h_{11}] + \omega_2 h_{11} [(\hat{y}_2 - \tau_2)^2 + h_{22}] \\ &\quad - h_{12} [(\hat{y}_1 - \tau_1)(\hat{y}_2 - \tau_2) + 2h_{12}] \end{aligned} \quad (7)$$

Esta escogencia también es interesante porque tiene en cuenta fundamentalmente la varianza de predicción de cada respuesta y , por consiguiente, su variabilidad. Sin embargo, la penalidad impuesta a las regiones con alta varianza de predicción influencia en mayor medida la obtención del óptimo que las ponderaciones dadas a cada respuesta. En virtud de esto, se utiliza la primera opción reseñada, pero se soluciona el problema de las diferentes escalas y variabilidades mediante la transformación que se propone en la siguiente subsección.

3.3. Transformación propuesta

Establecer una transformación de las variables respuestas (y_1, y_2) que equilibre las variabilidades relativas (σ_1^2, σ_2^2) y las diferencias en localización es un punto crucial para que las ponderaciones (ω_1, ω_2) , dadas a cada respuesta en un esquema de optimización, sean una medida precisa de su importancia.

Sin embargo, establecer dicha transformación requiere que tanto las pruebas de hipótesis sobre significancia y bondad de ajuste del modelo, como la localización de un óptimo no se vean afectadas por la misma, es decir, los estadísticos F , R^2 y el punto estacionario x_s deben ser invariantes a la transformación.

Bajo estas condiciones, una idea natural para la transformación de cada respuesta y_l ($l = 1, 2$) es la de una función lineal $(y_l - k_{1l})/k_{2l}$, con k_{1l} y k_{2l} constantes, de tal manera que se anulen los efectos de localización y de escala. En el presente artículo se propone utilizar la siguiente estandarización:

$$f(y_l) = y_l^* = \frac{y_l - (\max(y_l) + \min(y_l))/2}{(\max(y_l) - \min(y_l))/2} = \frac{y_l - k_{1l}}{k_{2l}} \quad (8)$$

De esta manera, existe un balance en términos de las diferencias en escala y localización, y de los valores extremos para cada respuesta:

$$f(\max(y_l)) = \frac{(\max(y_l) - \min(y_l))/2}{(\max(y_l) - \min(y_l))/2} = 1$$

$$f(\min(y_l)) = \frac{(\min(y_l) - \max(y_l))/2}{(\max(y_l) - \min(y_l))/2} = -1$$

Bajo esta estandarización, la suma de cuadrados del error para la l -ésima respuesta en el modelo transformado es:

$$SCE_l^* = \sum_{i=1}^n (y_{il}^* - \hat{y}_{il}^*)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_{il} - k_{1l}}{k_{2l}} - \frac{\hat{y}_{il} - k_{1l}}{k_{2l}} \right)^2 = \left(\frac{1}{k_{2l}^2} \right) SCE_l$$

donde $SCE_l = \sum_{i=1}^n (y_{il} - \hat{y}_{il})^2$.

De igual manera, la suma de cuadrados total para la l -ésima respuesta en el

modelo transformado es:

$$\begin{aligned} S_{Y_l Y_l}^* &= \sum_{i=1}^n (y_{il}^*)^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n y_{il}^*)^2}{n} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_{il} - k_{1l}}{k_{2l}} \right)^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n \frac{y_{il} - k_{1l}}{k_{2l}} \right)^2 \\ &= \frac{1}{k_{2l}^2} \left(\sum_{i=1}^n y_{il}^2 - 2k_{1l} \sum_{i=1}^n y_{il} + nk_{1l}^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_{il} \right)^2 + 2k_{1l} \sum_{i=1}^n y_{il} - nk_{1l}^2 \right) \\ &= \frac{1}{k_{2l}^2} \left(\sum_{i=1}^n y_{il}^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_{il} \right)^2 \right) = \frac{1}{k_{2l}^2} S_{Y_l Y_l} \end{aligned}$$

donde $S_{Y_l Y_l} = \sum_{i=1}^n (y_{il})^2 - (\sum_{i=1}^n y_{il})^2 / n$. Así que la suma de cuadrados de la regresión para la l -ésima respuesta en el modelo transformado es:

$$SCR_l^* = S_{Y_l Y_l}^* - SCE_l^* = \frac{1}{k_{2l}^2} S_{Y_l Y_l} - \frac{1}{k_{2l}^2} SCE_l = \frac{1}{k_{2l}^2} SCR_l$$

donde $SCR_l = S_{Y_l Y_l} - SCE_l$. De esta forma:

$$F_l^* = \frac{SCR_l^* / (p_l - 1)}{SCE_l^* / (n - p_l)} = \frac{SCR_l / (p_l - 1)}{SCE_l / (n - p_l)} = F_l$$

y,

$$R_l^{*2} = \frac{SCR_l^*}{S_{Y_l Y_l}^*} = \frac{SCR_l}{S_{Y_l Y_l}} = R_l^2$$

Entonces, no solo para esta, sino para cualquier transformación lineal se preservan los valores de la estadística F y el coeficiente de determinación R^2 .

A partir de la ecuación (1), se obtiene el modelo transformado:

$$\hat{y}_l^* = \frac{\hat{y}_l - k_{1l}}{k_{2l}} = \frac{b_{0l} + \mathbf{x}_l' \mathbf{b}_l + \mathbf{x}_l' \mathbf{B}_l \mathbf{x}_l - k_{1l}}{k_{2l}} = c_{0l} + \mathbf{x}_l' \mathbf{b}_l^* + \mathbf{x}_l' \mathbf{B}_l^* \mathbf{x}_l \quad (9)$$

Así que mediante una transformación lineal y ésta en particular, de las ecuaciones (1) y (9), se obtiene que el cambio en la estimación de los betas para la l -ésima respuesta está dada de la siguiente forma:

$$c_{0l} = \frac{b_{0l} - k_{1l}}{k_{2l}} \quad b_l^* = \frac{b_l}{k_{2l}} \quad y \quad B_l^* = \frac{B_l}{k_{2l}}$$

Entonces,

$$\begin{aligned} B_l v_l &= \lambda_l v_l \\ \frac{B_l}{k_{2l}} v_l &= \frac{\lambda_l}{k_{2l}} v_l \\ B_l^* v_l &= \lambda_l^* v_l \end{aligned}$$

Los vectores propios normalizados de las dos matrices B_l y B_l^* son iguales, más no los valores propios cuya relación es $\lambda_l^* = \frac{\lambda_l}{k_{2l}}$.

La estadística de prueba para la hipótesis nula $H_0 : \beta_{jl} = 0$ ($j = 1, \dots, k$; $l = 1, 2$) no se altera:

$$t_{0l}^* = \frac{\beta_{jl}^*}{\sqrt{\hat{\sigma}_l^2 C_{jj(l)}}} = \frac{\frac{\beta_{jl}}{k_{2l}}}{\sqrt{CME_l^* C_{jj(l)}}} = \frac{\frac{\beta_{jl}}{k_{2l}}}{\sqrt{\frac{(SCE_l)(C_{jj(l)})}{n-p_l} \frac{1}{k_{2l}^2}}} = \frac{\beta_{jl}}{\sqrt{\hat{\sigma}_l^2 C_{jj(l)}}} = t_{0l}$$

y la ubicación del punto estacionario para la l -ésima respuesta permanece invariante:

$$x_{sl}^* = -\frac{1}{2} B_l^{*-1} b_l^* = -\frac{1}{2} \left(\frac{B_l}{k_{2l}} \right)^{-1} \frac{b_l}{k_{2l}} = -\frac{1}{2} B_l^{-1} b_l = x_{sl}$$

3.4. Esquema de optimización dual propuesto

Mediante la transformación propuesta en la sección anterior, la siguiente es la formulación del problema de optimización con una restricción de tipo esférico:

$$\text{mín } \hat{E}(\ell) = \omega_1 [(\hat{y}_1^*(x) - \tau_1^*)^2 + \mathfrak{h}_{11}] + \omega_2 [(\hat{y}_2^*(x) - \tau_2^*)^2 + \mathfrak{h}_{22}] \quad (10)$$

sujeto a $x^T x \leq \rho^2$.

De igual manera, la formulación del problema de optimización con una restricción de tipo cúbico está dada por:

$$\text{mín } \hat{E}(\ell) = \omega_1 [(\hat{y}_1^*(x) - \tau_1^*)^2 + \mathfrak{h}_{11}] + \omega_2 [(\hat{y}_2^*(x) - \tau_2^*)^2 + \mathfrak{h}_{22}] \quad (11)$$

sujeto a $x_l \leq x \leq x_u$.

Así, para estos dos casos se tiene en común que la función objetivo tiene forma cuadrática; $\hat{y}_1^*(x)$ y $\hat{y}_2^*(x)$ son las respuestas ajustadas para cada variable respuesta estandarizadas a la escala $[-1, 1]$; ω_1 y ω_2 corresponden a las importancias relativas de cada respuesta; \mathfrak{h}_{11} y \mathfrak{h}_{22} son las varianzas de predicción para cada respuesta en el punto x ; τ_1^* y τ_2^* corresponden a valores ideales bajo la misma transformación de cada y_i respectivamente, y deben variar gradualmente, de acuerdo al paso que el investigador considere para cada respuesta, hasta el punto en el que no se obtenga una mejoría en las respuestas consideradas; ρ corresponde a un radio donde se desea restringir la búsqueda del óptimo (restricción esférica), y x_l y x_u corresponden a cotas inferiores y superiores para la búsqueda del óptimo respectivamente (restricción cúbica).

4. Aplicación de la metodología a un caso

En un experimento para la determinación de fenol mediante una reacción oscilante de tipo Belosout-Zhabotinsky se pretende encontrar una combinación óptima

de los factores: *Bromato (BrO4)*, *Americio (AM)* y *Cerio (Ce4+)*, donde las variables respuestas consideradas son *amplitud* y *tiempo de inducción* y se busca simultáneamente la maximización de la amplitud con la minimización del tiempo de inducción. El diseño experimental es un diseño factorial 4^3 , donde el número de observaciones por tratamiento no es el mismo (diseño desbalanceado), y las variables respuesta se definen de la siguiente forma:

- Tiempo de inducción: tiempo que demora la reacción en “arrancar”, se encuentra medido en segundos.
- Amplitud: punto más bajo donde comienza a oscilar el máximo, se encuentra medido en absorbancias.

En la tabla 2 se muestran los niveles factoriales del diseño experimental utilizado (en unidades naturales).

Tabla 2: Niveles factoriales en escala natural

BrO4	0.05008	0.07308	0.15008	0.20001
AM	0.05004	0.07304	0.15	0.20002
Ce4+	0.00549	0.013068	0.030004	0.050037

Las variables respuesta consideradas inicialmente fueron transformadas de la siguiente manera: a la *amplitud (referida como Amp)* se le aplicó una *transformación raíz cuarta* y al *tiempo de inducción (referida como Tind)* se le aplicó la transformación *logaritmo natural*, con el fin de estabilizar varianza de los residuales y conseguir un mejor ajuste de los modelos.

Así, con el fin de obtener un balance en las variabilidades relativas y no sesgar la optimización dual a la optimización de la respuesta con mayor media y varianza en su escala natural, las variables respuesta sujetas a transformaciones de Box y Cox, fueron luego estandarizadas a la escala $[-1, 1]$ mediante las siguientes fórmulas:

$$\ln^*(\text{Tind}) = \frac{\ln(\text{Tind}) - 7.73}{1.37} \quad (\sqrt[4]{\text{Amp}})^* = \frac{\sqrt[4]{\text{Amp}} - 0.781}{0.326}$$

4.1. Efecto de la estandarización en las respuestas

El efecto de la estandarización en las respuestas puede verse mediante el cálculo y contraste de las variabilidades relativas para las respuestas utilizadas (transformadas y no transformadas a la escala $[-1, 1]$), dadas las propiedades mostradas en la sección anterior.

En la tabla 3 se observa que la diferencia entre las varianzas estimadas para las dos variables respuesta consideradas es menor en la nueva escala. Dicho cambio representa el balance de las variabilidades relativas de las dos respuestas consideradas. A continuación se realiza el análisis para cada variable respuesta.

Tabla 3: Variabilidades relativas para las respuestas consideradas en la escala natural y en la escala [-1,1]

	varianza escala natural	varianza escala [-1,1]
$\ln(\text{Tind})$	0.5232	0.2753
$\sqrt[4]{\text{Amp}}$	0.0291	0.2751

4.2. Análisis para la variable amplitud

Las siguientes fórmulas fueron empleadas para relacionar las unidades naturales del diseño con unidades estandarizadas a la escala [-1, 1]:

$$x_1 = \frac{\text{BrO4} - 0.1250}{-0.0749} \quad x_2 = \frac{\text{AM} - 0.1250}{-0.0749} \quad x_3 = \frac{\text{Ce4+} - 0.0277}{-0.0222}$$

A partir de un modelo de segundo orden completo, se utilizó el método de selección *stepwise* de variables regresoras y se descartaron los términos BrO4^2 , y AM^2 , con un nivel de significancia $\alpha = 0.1$. En la tabla 4 se muestra el análisis de varianza, según el cual, el modelo y todos los términos individuales involucrados son significativos al 5%; además, a un nivel de significancia del 5%, se concluye que el modelo de segundo orden utilizado se ajusta adecuadamente a los datos experimentales. (valor- $p = 0.1422$)

Tabla 4: Análisis de varianza para el modelo de segundo orden ajustado. Variable respuesta: $(\sqrt[4]{\text{Amp}})^*$

Fuente	SC (III)	gl	CM	F	Prob > F
Modelo	26.0547	7	3.7221	529.2797	< 0.0001
A-BrO4	0.4731	1	0.4731	67.2712	< 0.0001
B-AM	0.3338	1	0.3338	47.4668	< 0.0001
C-Ce4+	19.5361	1	19.5361	2778.0164	< 0.0001
C^2	1.7501	1	1.7501	248.8616	< 0.0001
AB	0.1023	1	0.1023	14.5477	0.0003
AC	0.4170	1	0.4170	59.2997	< 0.0001
BC	0.0965	1	0.0965	13.7216	0.0004
Residual	0.6329	90	0.0070		
Falta de ajuste	0.4425	56	0.0079	1.4111	0.1422
Error Puro	0.1904	34	0.0056		
Total	26.6876	97			

De igual forma, a través de las magnitudes de los estadísticos F , se puede observar que el factor Ce4+, tanto en su forma lineal, como en su forma cuadrática, presenta el impacto más significativo en la amplitud de la reacción.

La tabla 5 incluye algunas medidas relevantes en la evaluación del ajuste del modelo; por ejemplo, R_{aj}^2 indica que el modelo de segundo orden utilizado explica

el 97.44 % de la variabilidad observada (ajustando por el número de términos en el modelo); de manera similar, R_{PRED}^2 sugiere que el modelo explica cerca del 97.15 % de la variabilidad en nuevos datos. Luego, los valores R_{aj}^2 y R_{PRED}^2 no difieren en una gran cuantía y el modelo puede considerarse satisfactorio, tanto para fines de descripción como para predicción de nuevos valores.

Tabla 5: Medidas relacionadas con el ajuste del modelo. Variable respuesta: $(\sqrt[4]{\text{Amp}})^*$

Desv. Est.	0.08385	R^2	0.97628
Media	-0.06901	R_{aj}^2	0.97443
C.V.	-121.50996	R_{Pred}^2	0.97155

Fijando el valor del factor $Ce4+$ en 0.05, la figura 1 presenta la superficie ajustada para el modelo de segundo orden:

$$\begin{aligned}
 (\sqrt[4]{\text{Amp}})^* = & -0.8529 - 1.6211(BrO4) - 1.2651(AM) + 59.5002(Ce4+) \\
 & - 644.8629(Ce4+)^2 + 8.6210(BrO4)(AM) + 60.2722(BrO4)(Ce4+) \\
 & - 30.6483(AM)(Ce4+) \quad (12)
 \end{aligned}$$

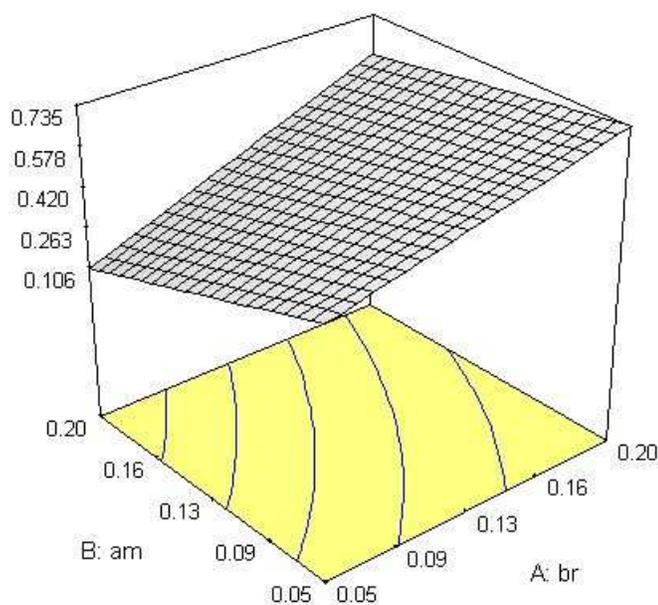


Figura 1: Superficie de respuesta ajustada ($Ce4+=0.05$). Variable respuesta: $(\sqrt[4]{\text{Amp}})^*$.

El análisis gráfico sugiere que el óptimo buscado está cerca de una combinación de niveles donde $BrO4$ se encuentra en nivel alto y AM en nivel bajo.

4.3. Análisis para la variable tiempo de inducción

Fue necesario aplicar la transformación *logaritmo natural* tanto a la variable respuesta, como a los factores que la explican, para conseguir un ajuste adecuado del modelo. De esta manera, el logaritmo natural del tiempo de inducción estandarizado a la escala $[-1, 1]$ es explicado por los factores $\ln(\text{BrO4})$, $\ln(\text{AM})$, $\ln(\text{Ce4+})$. Para relacionar los factores en sus unidades naturales con unidades estandarizadas a la escala $[-1, 1]$, se utilizaron las siguientes fórmulas:

$$x_1 = \frac{\ln(\text{BrO4}) + 2.302}{0.692} \quad x_2 = \frac{\ln(\text{AM}) + 2.302}{0.693} \quad x_3 = \frac{\ln(\text{Ce4+}) + 4.100}{1.105}$$

Se ajustó un modelo de segundo orden completo y los resultados del análisis de varianza se muestran en la tabla 6, el modelo y todos los términos individuales involucrados son significativos al 5%. El valor- p de falta de ajuste, igual a 0.2585, indica que el modelo de segundo orden se ajusta adecuadamente a los datos.

Tabla 6: Análisis de varianza para el modelo de segundo orden ajustado. Variable respuesta: $\ln^*(\text{Tind})$.

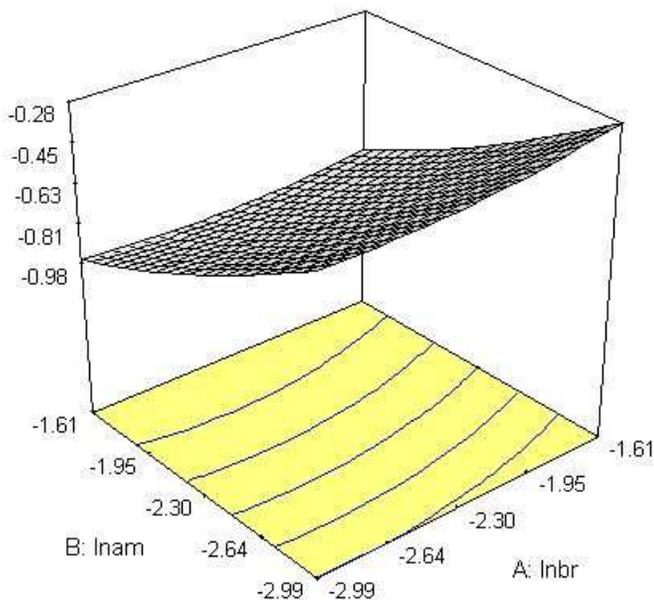
Fuente	SC (III)	gl	CM	F	Prob > F
Modelo	26.6128	9	2.9570	2793.0130	< 0.0001
A- $\ln(\text{BrO4})$	0.2755	1	0.2755	260.1858	< 0.0001
B- $\ln(\text{AM})$	3.7215	1	3.7215	3515.1054	< 0.0001
C- $\ln(\text{CE})$	17.3531	1	17.3531	16390.7961	< 0.0001
A ²	0.0163	1	0.0163	15.4053	0.0002
B ²	0.0229	1	0.0229	21.6746	< 0.0001
C ²	0.1460	1	0.1460	137.8962	< 0.0001
AB	0.0144	1	0.0144	13.6454	0.0004
AC	0.0350	1	0.0350	33.1060	< 0.0001
BC	0.0474	1	0.0474	44.7901	< 0.0001
Residual	0.0932	88	0.0011		
Falta de ajuste	0.0617	54	0.0011	1.2348	0.2585
Error Puro	0.0315	34	0.0009		
Total	26.7060	97			

De igual manera, a través de las magnitudes de los estadísticos F se puede observar que el factor $\ln(\text{Ce4+})$ en su forma lineal presenta el impacto más significativo en el tiempo de inducción de la reacción, seguido por el factor $\ln(\text{AM})$.

La tabla 7, muestra algunas medidas relevantes en la evaluación del ajuste del modelo; por ejemplo, el valor R_{aj}^2 indica que el modelo de segundo orden utilizado explica 99.61% de la variabilidad observada (ajustando por el número de términos en el modelo); de manera similar, el R_{Pred}^2 sugiere que el modelo explica aproximadamente el 99.56% de la variabilidad en nuevos datos. Como existe concordancia entre estos dos valores, el modelo puede considerarse satisfactorio, no sólo para fines de descripción sino para predicción de nuevos valores.

Tabla 7: Medidas relacionadas con el ajuste del modelo. Variable respuesta: $\ln^*(Tind)$.

Desv. Est.	0.03253	R^2	0.99651
Media	-0.14517	R_{aj}^2	0.99615
C.V.	-22.41226	R_{Pred}^2	0.99560

Figura 2: Superficie de respuesta ajustada ($Ce4+=0.05$). Variable respuesta: $\ln^*(Tind)$.

Fijando el valor de $Ce4+$ en 0.05, la figura 2 presenta la superficie de respuesta ajustada para el modelo de segundo orden:

$$\begin{aligned}
 y_2 = & -1.9935 + 0.2185 \ln(BrO4) - 0.2757 \ln(AM) - 0.1325 \ln(Ce4+) \\
 & + 0.0820(\ln(BrO4))^2 + 0.0871(\ln(AM))^2 + 0.0747(\ln(Ce4+))^2 \\
 & - 0.0399 \ln(BrO4) \ln(AM) - 0.0405 \ln(BrO4) \ln(Ce4+) \\
 & - 0.0477 \ln(AM) \ln(Ce4+)
 \end{aligned} \tag{13}$$

donde $y_2 = \ln^*(Tind)$. Se observa que conforme aumenta el valor del factor $\ln(AM)$ y disminuye el valor del factor $\ln(BrO4)$, la respuesta decrece, de tal forma que el óptimo arrojado en la optimización restringida de esta respuesta es contrario al que se puede establecer en la optimización restringida de la variable $(\sqrt[4]{\text{Amp}})^*$. Además, el factor $\ln(AM)$ tiene un efecto mayor que el factor $\ln(BrO4)$

en el tiempo de inducción de la reacción.

En conclusión, para la variable respuesta \ln^* (Tind), los valores mínimos están determinados principalmente por la escogencia de valores altos del factor $\ln(AM)$, con lo cual, al considerar las dos respuestas simultáneamente, se presentan soluciones contradictorias y por tal razón debe adoptarse una solución compromiso que tenga en cuenta los valores de cada respuesta, la calidad de las predicciones, y las preferencias por la optimización de una respuesta en detrimento de la otra.

4.4. Optimización dual y análisis de sensibilidad.

En la tabla 8, se muestran los resultados de la optimización simultánea de las dos respuestas consideradas, tanto para la metodología propuesta, como para las metodologías de Tang & Xu (2002), Vining (1998) y Derringer & Such (1980).

Se observa que las ponderaciones asumidas para el *esquema de optimización propuesto* no influyen en gran medida en el óptimo encontrado, la única solución distinta se obtuvo al considerar que la variable $\sqrt[4]{Amp}$ tiene 9 veces la importancia de la variable $\ln(Tind)$, en cuyo caso el factor B decrece en magnitud (de 0.2 a 0.1503).

Tabla 8: Comparación de las soluciones obtenidas para el problema de optimización dual

Metodología	w_1	w_2	BrO ₄	AM	Ce ₄	$\ln(Tind)$	$\sqrt[4]{Amp}$
Propuesta	0.1	0.9	0.2000	0.1503	0.0500	6.6065	0.9852
Propuesta	0.2	0.8	0.2000	0.2000	0.0500	6.4593	0.9679
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
Propuesta	0.5	0.5	0.2000	0.2000	0.0500	6.4593	0.9679
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
Propuesta	0.9	0.1	0.2000	0.2000	0.0500	6.4593	0.9679
V	0.5	0.5	0.1947	0.0500	0.0453	7.4006	1.0046
TX	0.5	0.5	0.1361	0.2000	0.0500	6.4017	0.9030
DS (r=t=1)	0.5	0.5	0.2	0.08761	0.05	6.9381	1.0072

En la metodología propuesta, las condiciones de operación que optimizan la respuesta están dadas por los niveles altos de cada uno de los factores. En la metodología KV la combinación óptima está determinada por la escogencia de valores altos de BrO_4 , valores bajos de AM y valores altos de Ce_4 ; para TX la combinación óptima estaría dada por niveles intermedios de BrO_4 y niveles altos de AM y Ce_4 ; y para DS el óptimo estaría dado por la combinación BrO_4 y Ce_4 altos y AM entre niveles intermedios y bajos.

Tomando como referencia la variable respuesta \ln^* (Tind), se puede realizar una ordenación de las soluciones obtenidas por las distintas metodologías de la siguiente forma: el menor tiempo de inducción está dado por la solución de TX, seguido por la *metodología propuesta*, DS y por último V, que presentan una

solución que puede considerarse como no competitiva para esta respuesta.

Realizando la comparación de acuerdo a la variable respuesta $\sqrt[4]{Amp}$, las soluciones pueden ordenarse de la siguiente manera: la mayor amplitud de reacción la presenta DS, seguido por V, la *metodología propuesta* y finalmente TX, con una solución que no es competitiva para esta respuesta.

En la tabla 9, se muestran las varianzas de predicción para las variables respuestas en su escala natural; la varianza de predicción de la solución obtenida para la variable $\ln(Tind)$ mediante la *metodología propuesta* es bastante menor que las varianzas de predicción de todas las demás formulaciones, en cambio, la varianza de predicción de la respuesta $\sqrt[4]{Amp}$ es similar para todas las formulaciones, siendo inferior para V.

Tabla 9: Comparación de varianzas de predicción

Metodología	w_1	w_2	h_{11}	h_{22}
Propuesta	0.1	0.9	3.5646	0.000980
Propuesta	0.2	0.8	3.1392	0.000994
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
Propuesta	0.5	0.5	3.1392	0.000994
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
Propuesta	0.9	0.1	3.1392	0.000994
V	0.5	0.5	6.8523	0.000962
TX	0.5	0.5	4.0470	0.001001
DS	0.5	0.5	4.6870	0.000967

En conclusión, la solución obtenida por la *metodología propuesta* y la solución obtenida por Derringer & Such (1980) son las mejores desde el punto de vista de valores asumidos por las respuestas ajustadas y de calidad de las predicciones, medida en términos de la varianza de predicción. Pueden realizarse experimentos confirmatorios para determinar cual de estas dos soluciones es más aconsejable para las finalidades del investigador.

5. Conclusiones

La metodología propuesta para la optimización de respuestas duales, presenta ventajas respecto a las otras metodologías reseñadas (Tang & Xu (2002), Vining (1998), Derringer & Such (1980)), porque considera simultáneamente:

- i) Las *variabilidades relativas* de cada respuesta (efectos de escala).
- ii) Los *costos* asociados a cada respuesta, o, en su defecto, estructuras de *preferencias* del investigador en el proceso de optimización dual.
- iii) Efectos de *localización* para cada respuesta.

iv) La *calidad de las predicciones*, medida en términos de los errores estándar de predicción.

v) Los valores ajustados para cada respuesta dentro de una *región de interés*.

Dentro del esquema de optimización propuesto, el análisis de sensibilidad de las ponderaciones dadas a cada respuesta permite obtener una medida de la *adaptabilidad* de las soluciones, en términos de la capacidad de responder a cambios en la estructura de preferencias de las respuestas consideradas. Además, al tomar múltiples puntos de inicio, puede verse como una alternativa *robusta* a la presencia de numerosos óptimos locales.

Agradecimientos Este trabajo se enmarca dentro del proyecto de investigación *Modelos estadísticos en el análisis de datos longitudinales y medidas repetidas*, con apoyo económico de la DIB de la Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.

Recibido: 1 de Febrero de 2005

Aceptado: 8 de Abril de 2005

Referencias

- Censor, Y. (1977), 'Pareto optimality in multiobjective problems', *Applied Mathematics and Optimization* **4**, 41–59.
- Del Castillo, E. & Montgomery, D. C. (1993), 'A nonlinear programming solution to the dual response problem', *Journal of Quality Technology* **25**, 199–204.
- Derringer, G. & Such, R. (1980), 'Simultaneous optimization of several responses variables', *Journal of Quality Technology* **12**, 214–219.
- Graybill, F. A. (1976), *Theory and Application of the Linear Model*, Duxbury Press, Boston.
- Harrington, J. E. C. (1965), 'The desirability function', *Industrial Quality Control* **21**, 494–498.
- Khuri, A. I. & Conlon, M. (1981), 'Simultaneous optimization of multiple responses represented by polynomial regression functions', *Technometrics* **23**, 363–375.
- Lin, D. K. J. & Tu, W. (1995), 'Dual response surface optimization', *Journal of Quality Technology* **27**, 34–39.
- Myers, R. H. & Carter, W. H. (1973), 'Response surface techniques for dual response systems', *Technometrics* **15**, 301–317.
- Smith, R., Mesa, O., Dyer, I., Jaramillo, P., Poveda, G. & Valencia, D. (2000), *Decisiones con multiples objetivos e incertidumbre*, Technical report, Universidad Nacional de Colombia, Medellín.

- Taguchi, G. (1986), *Introduction to Quality Engineering: Designing Quality into Products and Processes*, Kraus International Publications. White Plains, New York.
- Tang, L. C. & Xu, K. (2002), 'A unified approach for dual response surface optimization', *Journal of Quality Technology* **34**, 437–447.
- Vining, G. (1998), 'A compromise approach to multiresponse optimization', *Journal of Quality Technology* **30**, 309–313.