

Diseño de Experimentos

Autores: Ing. Marisa De Giusti *
Ing. Pablo Bereclartúa**

Resumen:

El tema de diseño experimental ha readquirido en los últimos tiempos una importancia creciente en lo referente a la optimización de procesos y productos siendo un arma fundamental para tales objetivos en lo que se denomina herramientas "fuera de línea". El objetivo es la determinación de las variables que influyen en un dado proceso y cuales son los niveles de las mismas que dan la "mejor" salida, entendiendo esto en los términos particulares de un experimento. Para lograr estos fines en diseño experimental se debe atender a algunos supuestos básicos, por ejemplo el de aleatorización, que serán a continuación descriptos y deben cumplirse rigurosamente.

Introducción:

El objetivo del presente trabajo es presentar en su forma básica el tema de diseño de experimentos.

En un sistema o proceso es posible distinguir las variables (independientes), y los resultados (dependientes). Definiendo a los últimos como la/s respuesta/s a obtener mientras que los primeros son los factores, controlables o no, que inciden en ellas. A estos grupos se los podría diferenciar como *entrada y salida*. De esta manera se define un **experimento** como una evaluación de la salida de un proceso para una conocida situación de entrada, Figura 1.



Figura 1

El conocimiento de las relaciones de los datos de entrada con los de salida permitirá alterar en forma intencional los primeros para cumplir determinadas exigencias en los segundos.

A diferencia de la manera convencional de encontrar estas relaciones que consiste en alterar en forma individual una a una las distintas variables de entrada y evaluar que cambio genera en la salida, el *diseño de experimentos* propone la alteración en forma simultánea y sistemática de todas las variables de interés en la entrada para un mismo experimento. Esta diferencia marca un avance fundamental que está dado en el hecho de que permite que se manifiesten las *interacciones* entre las distintas variables y obtener una evaluación más real de la *variabilidad* (error aleatorio) inherente al proceso.

Se pretende que los procesos sean lo más *robustos* posible, considerando como *robustos* a los procesos en que la variabilidad en los resultados se ve muy poco influenciada por las fuentes de variabilidad externa.

* Investigador Adjunto, Comisión de Investigaciones Científicas de la Pcia. de Buenos Aires.

** Becario de Entrenamiento, Comisión de Investigaciones Científicas de la Pcia. de Buenos Aires.

Consideraciones generales

El diseño de experimentos es un *proceso iterativo* en el se formulan hipótesis iniciales y realizado el experimento las conclusiones permiten reformular las hipótesis realizando un nuevo experimento que se aproxime más que el anterior a la realidad del fenómeno.

Una segunda consideración está expresada por el *Principio de Pareto* que dice que las causas fundamentales en la variabilidad de un proceso son debidas en general a un grupo reducido de factores. En forma genérica y aproximada se podría enunciar como que el 80% de las consecuencias depende del 20% de las causas. Ver Figura 2.

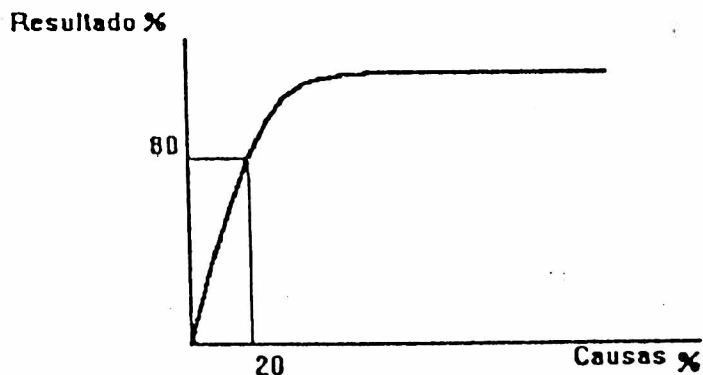


Figura 2

En las etapas iniciales de la experimentación se realizan experimentos muy exhaustivos en cuanto a la cantidad de factores y de pocos niveles, de este modo se puede calcular la significancia, o no, de los mismos para futuras experimentaciones, a este respecto a veces es útil hacer uso de los llamados "Factoriales fraccionarios". Por ejemplo una réplica completa de un experimento de 6 factores con dos niveles cada uno, implicaría 64 ensayos.

En estos caso si es posible suponer razonablemente que algunas interacciones de orden superior son despreciables, la información sobre los efectos principales y las interacciones de menor orden puede obtenerse realizando sólo una fracción del experimento factorial completo.

Una última consideración esta dada en el requisito de *aleatoriedad*, esto referido a la asignación del material experimental a los ensayos. Esta hipótesis permite asumir que los errores tienen una distribución NID(0, σ^2). En general esta condición se verifica. La etapa de aleatorización debe cumplirse tanto en la asignación del material experimental en cada tratamiento cuanto dentro de los posibles bloques a realizar.

Para clarificar lo antes dicho suponga tener que determinar la combinación de cuatro variables que dan un máximo en una recuperación de cromo mediante enzimas biológicas. Cada una de las variables (aquí denominadas A,B,C,D) puede tomar dos niveles (llamados 0 y 1). Este diseño se denomina Factorial 2^4 . En este caso el orden de realización de los ensayos debe aleatorizarse, esquemáticamente, los 16 ensayos posibles son:

0000	1000	0100	1100	0010	1010	0110	1110
0001	1001	0101	1101	0011	1011	0111	1111

Para realizar la aleatorización debe "tirarse" al azar un número entre 0...15, así por ejemplo si el primer número que sale es el 3, entonces el ensayo con los valores A = 0, B = 1, C = 0 y D = 0 será el primero en realizarse y así se continúa hasta completar el orden de los 16 ensayos. Se entiende que la asignación 0 y 1 a los niveles de las variables es sólo para comprensión, por ejemplo, la variable A puede ser la temperatura y el nivel 0 = 40° y el nivel 1 = 60°. La variable B puede ser una enzima y el nivel 0 = 2% y el nivel 1 = 3%.

Para enfatizar lo dicho del material experimental en cuanto a la consideración de existencia de bloques, suponga por ejemplo estar midiendo la dureza en probetas de acero, la misma podría medirse a través de la profundidad de inserción de cuatro puntas diferentes en el material experimental. Como las probetas pueden ser diferentes entre sí porque provienen de partidas diferentes de acero, cada una debe partirse en cuatro y en cada cuarto probar una punta, en este caso cada probeta es un bloque y a cada cuarto se aplica un tratamiento diferente. El orden en que las cuatro puntas deben ser probadas en cada bloque se determina aleatoriamente.

Entrada

Como se puede ver en la Figura 1, a los valores de entrada en principio se los puede diferenciar entre factores *controlables* y factores *no controlables*. Es importante aclarar que para los casos reales no siempre esta diferencia esta dada por la incompatibilidad de controlar a determinados factores, sino que en las condiciones de estudio del problema no existe control sobre los mismos. En algún caso el resultado de un diseño de experimentos podría indicar la necesidad de el comienzo del control sobre alguna de esas variables.

En la determinación de las variables de entrada, cuando se pueden elegir, tiene mucha importancia la experiencia, dada por el conocimiento del proceso físico que permitirá ahorrar tanto en el reconocimiento de cuales son los factores de importancia, cuanto en la determinación de sus niveles.

Salida

Un primer problema está dado en elegir la variable que se usará como representativa para juzgar el resultado final del experimento que representa al proceso en estudio. En segundo término también hay que considerar de que manera se medirá o se evaluará esa variable, ya que la forma de evaluarla puede ser también un factor de error a considerar dentro del diseño del experimento.

Los dos grandes criterios generales para definir la variable a considerar como resultado son: en primer lugar el elegir un valor que sea representativo del fin que se busca con el experimento, y como segundo criterio el elegir una relación señal/ruido. Este último permite evaluar la calidad del proceso para distintas condiciones del ruido, y se basa en la alteración sistemática de los factores de ruido, aunque en la "realidad" estas condiciones no podrán ser controladas.

Si en el experimento se demuestra que para distintas condiciones del ruido la performance es adecuada, entonces probablemente también lo sea en la "realidad". Se trata pues de diseñar lo que comunmente se denomina procesos "robustos" en el sentido de resistentes al ruido.

A la respuesta que se obtiene de un experimento se la identifica como una *señal*, diferenciando en la misma un *valor* a obtener y un *ruido* asociado, ver Figura 3.

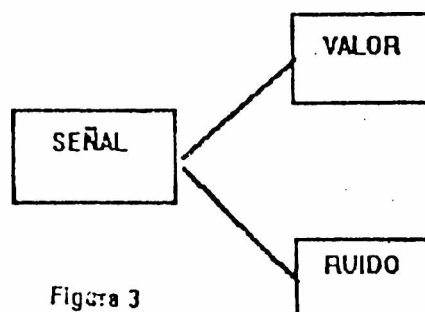


Figura 3

Las dos condiciones que se pueden exigir en forma genérica, sobre la respuesta de un experimento son:

-a-al valor, que tenga una determinada media, que sea máximo, o que sea mínimo, ver Figura 4.

-b-al ruido, que esté acotado, es decir reducir la variabilidad de los resultados, o dicho de otro modo limitar los máximos y mínimos para los valores de los resultados, ver Figura 5.

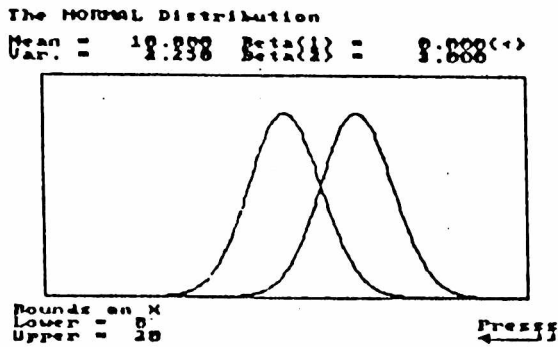


Figura 4

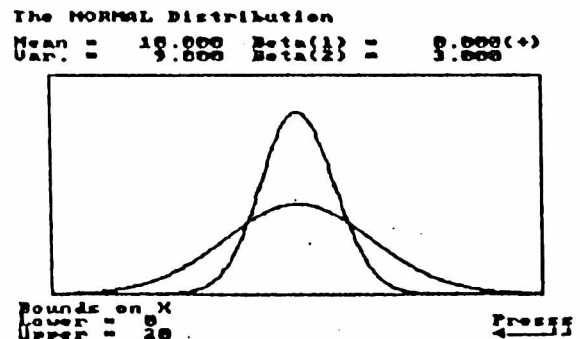


Figura 5

Niveles de análisis de los modelos

Dentro del llamado *ruido* o error se encuentran un conjunto de causas que se denominan *asignables* y son las responsables de una parte importante de este error; y una fracción debida a causas *aleatorias*. Dado que inicialmente se desconoce cuáles son unas y otras, en primera instancia se diferencian dos tipos de análisis:

1-Análisis de causas externas

Se puede considerar como causa de variación no los niveles de las variables propias de cada fenómeno (presión, temperatura, etc) sino los condicionamientos reales que existen debido a los procesos de fabricación (partidas de un mismo material, distintas máquinas productoras de un mismo producto, capacidad máxima de producción en una sola comida, etc). En estos análisis las variables *internas* o propias de cada fenómeno se supone que permanecen inalterables.

En forma general se puede expresar un modelo simplificado como el siguiente:

$$y = \mu + \tau + \beta + \epsilon$$

donde:

- y : es el valor que se obtiene en una comida del experimento.
- μ : es la media general de la población de valores del experimento.
- τ : influencia de los tratamientos en análisis.
- β : influencia de los bloques adoptados.
- ϵ : error propiamente dicho, o aleatorio.

El valor y que se obtendría en una comida del experimento estará compuesto por una media general de la población y un error. Según este modelo el error tiene tres causas diferenciables: los tratamientos, los bloques, y el error aleatorio propiamente dicho.

Se considera como *tratamiento a una diferencia en la forma de realizar un proceso, pero con el fin de obtener un mismo resultado*. Un ejemplo de ésta definición se podría dar en un proceso químico en el que se pretendiese acelerar una reacción química y fuese posible utilizar dos enzimas diferentes como catalizadores, cada una de estas enzimas se podría considerar como un tratamiento diferente dentro del diseño.

Los **bloques** son agrupamientos de los resultados de distintas corridas del experimento que se realizan cuando se conoce con anterioridad al diseño, que hay causas que pueden generar variabilidad en la respuesta del experimento y que son comunes a distintos grupos de corridas. Un ejemplo de división en bloques sería el caso de una industria metalúrgica en la que la respuesta que se quiere evaluar es sobre un metal que se recibe en partidas, en ese caso estas últimas podrían ser consideradas como bloques.

2-Análisis de causas internas

Por un conocimiento previo se supone que un número finito de variables son quienes tienen principal importancia en el resultado del fenómeno. Concretamente el posicionamiento de esas variables en distintos niveles alteraría de una manera definida los resultados del experimento. A los análisis de este tipo se los denomina **Análisis Factoriales**.

Un modelo simplificado sobre dos variables tiene la siguiente forma:

$$y = \mu + \text{coef1 } x_1 + \text{coef2 } x_2 + \text{coef12 } x_1x_2 + \epsilon$$

donde,

μ : media

x_1, x_2 : variables

x_1x_2 : interacción de ambas variables

$\text{coef1}, \text{coef2}, \text{coef12}$: coeficientes

ϵ : error aleatorio

El valor que se obtiene en una corrida está compuesto por una media, las variables, sus interacciones y el error aleatorio.

La media en estos modelos se puede considerar como el valor que tendría la salida si las variables estuvieran en sus niveles medios, es decir, si no tuvieran influencia.

Cuando las variables no son significativas individualmente mientras que si lo son sus interacciones, o inversamente sí lo son individualmente pero no sus interacciones, los modelos se llaman *incompletos*, existiendo por ejemplo: factoriales incompletos y factoriales fraccionarios, como casos particulares que no son tratados en este artículo. //

Finalmente para cualquiera de los dos análisis se considera el **error aleatorio** que es debido a causas que o bien se sabe que no será posible controlar, o bien se desconocen.

Análisis de la salida

Una vez que se han procesado los datos obtenidos de las distintas corridas, es posible realizar un análisis sobre los mismos y concluir para qué condiciones las diferencias que generan las distintas causas que se han puesto en evidencia en el modelo (tratamientos, bloques) provocan diferencias **estadísticamente significativas**.

Se denomina *diferencia estadísticamente significativa* a aquella que es debida a una causa asignable, es decir, que para un cambio de condiciones en una de estas causas la diferencia que se puede obtener en la respuesta de un experimento no es debida exclusivamente a el error aleatorio sino que se ve influenciada por el cambio en esta variable o causa.

Métodos de análisis

Existen distintos caminos para poder arribar al análisis antes enunciado de los resultados. Pudiendo agruparse en: •Métodos basados en el análisis de la variabilidad(varianza), •Métodos basados en el análisis mediante Mínimos Cuadrados y • Métodos de Regresión.

Métodos basados en el análisis de la variabilidad ANOVA(ANAlisis Of VAriance)

Conceptualmente este análisis consiste en asumir que los distintos factores en estudio generan una variabilidad sobre los resultados aun cuando analizados individualmente permaneciesen constantes, y que la variabilidad total del fenómeno resulta de la adición de estas variabilidades consideradas individualmente.

$$SS_T = SS_b + SS_t + SS_e$$

Esta es una hipótesis muy importante que esta basada en el principio de aleatoriedad del fenómeno visto en la presentación del tema. Este principio de aleatoriedad permite que se pueda afirmar que los errores tienen una distribución $N(0, \sigma^2)$, con varianza constante. En general estas hipótesis se verifican en los casos comunes.

Sabiendo que la distribución de probabilidades que representa el cociente entre varianzas es la distribución Chi-cuadrado, se puede realizar un análisis probabilístico que permita relacionar la variabilidad de cada factor con la variabilidad del error. De esta manera asumiendo una probabilidad que se fija como criterio de decisión se podría definir con esa certeza cuando la variabilidad causada por el factor en estudio es mayor que la del error global. No deben quedar dudas que esta decisión es sólo en términos probabilísticos (estadísticamente significativa).

De esta manera se puede proceder con los distintos factores e identificar cuales son los probablemente culpables de la variabilidad general. Esto permitiría actuar sobre esos factores y mejorar el proceso.

Métodos basados en el análisis mediante Mínimos Cuadrados

Una vez elegido el modelo con el que se quiere representar el fenómeno, se puede definir en forma genérica al residuo como:

$$e = Y_{exp} - Y_{mod}$$

Con los residuos se puede plantear un sistema de ecuaciones mediante Mínimos Cuadrados, identificando como variables la media μ , y el efecto de tratamientos τ , por ejemplo. La resolución de este sistema permitirá obtener estimadores para ambas variables. A diferencia del método anterior para poder resolver este sistema es necesario imponer alguna condición externa al sistema, de lo contrario se trata de un sistema indefinido de ecuaciones.

Los resultados que se obtengan de este análisis dependerán de cuáles son las condiciones que se imponen. Esto haría pensar entonces que este método no sería válido ya que podría conducir a distintos resultados en función de la condición que se imponga al sistema. Si bien esto es cierto para los estimadores individualmente, no lo es cuando se trata de la diferencia entre estimadores. Por ejemplo, $y_1 - y_2$.

Si cada observación puede ser descripta por el modelo:

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \epsilon_{ij} \quad [1]$$