



Departament d'Estadística
i Investigació Operativa

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

PRINCIPIOS DE METODOLOGÍA
DE SUPERFICIE DE RESPUESTA
PARA MODELOS LOGÍSTICOS

TESIS DOCTORAL

VOLUMEN II: APÉNDICES

PRESENTADA POR: ARTURO T. DE ZAN

DIRECTOR: JOSEP GINEBRA, PHD

BARCELONA, ENERO DE 2006

Parte IV
Apéndices

Apéndice A

Complementos de *MSR*

Comentaremos en este primer apéndice solamente algunos aspectos específicos a los que hemos referido en los capítulos anteriores, dentro del contexto del diseño de experimentos y de la Metodología de Superficie de Respuesta, MSR. Lo que aquí presentamos a modo de resumen complementario servirá para fundamentar algunos aspectos que hemos comentado en secciones precedentes. La amplia bibliografía citada en las referencias y a lo largo de todo el trabajo sirve para exponer de forma completa el tema, que excede los alcances de este trabajo.

A.1. El método clásico de *MSR*

En un problema general de estudio de una cierta “expectation function”¹, cuya expresión en general puede denotarse como $f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$, al experimentador le resultará de enorme valor conocer cuál es la forma que realmente tiene esta función, ya que la misma es desconocida². La idea básica es utilizar funciones de aproximación del tipo $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) \simeq f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$ para ir explorando secuencialmente la función desconocida a través de diseños sucesivos, en donde \mathbf{x} representará un vector columna de factores elegido por el experimentador de un grupo de mayor dimensión, $\boldsymbol{\xi}$, y $\boldsymbol{\beta}$ será el vector columna de parámetros del modelo así elegido, también como subconjunto de otro mayor, $\boldsymbol{\theta}$.

Ya que en la generalidad de los casos esta función no se conoce, mediante este enfoque se irán realizando una serie de experimentos, secuencialmente diseñados. El pasaje de un diseño a otro estará por lo general ligado al comportamiento que tengan los valores de los factores \mathbf{x} de tal modo que se observe qué valores de dicho vector van condicionando a obtener valores mayores o menores del valor esperado de la respuesta.

¹Por lo general —aunque esto no resulta excluyente de otras formas derivadas de la función respuesta— se pretende que esta “expectation function” sea expresada como el *valor esperado de la respuesta*, con lo cual, el conocimiento que se gane durante todo este proceso sea más particularmente enfocado en $E(y | \mathbf{x})$ que en la respuesta en sí misma o que en algún otro momento de la respuesta.

²Si, en cambio, $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$ fuera conocida, el estudio subsiguiente resultaría inmediato: se deriva parcialmente la función con respecto a cada una de las componentes de $\boldsymbol{\beta}$, luego se igualan a cero todas las derivadas y se hallan las coordenadas del punto crítico, utilizando además la derivada segunda para averiguar la naturaleza del mismo (máximo, mínimo o punto minimax). *Vid.* p. ej. CHRISTENSEN (2001), p. 345.

La estrategia suele comenzar ajustando modelos de primer orden, los cuales parten de la hipótesis que la zona de experimentación se encuentra relativamente alejada del valor crítico de la función. Entonces, el valor esperado de la respuesta se va aproximando mediante aproximaciones polinómicas de primer orden, que permiten averiguar cuál es la dirección —dentro del plano de los factores— en donde aquella función crece más rápidamente. Esto se va repitiendo secuencialmente, considerando nuevos puntos de \mathbf{x} en la dirección precitada. Al ajustarse el modelo siguiente, se buscará nuevamente otra dirección de máximo crecimiento de la función, que definirá la pauta para establecer nuevos puntos de diseño. De esta forma, se continúa hasta que se detecte falta de ajuste de los modelos de primer orden, lo cual seguramente será indicativo que se esté en presencia de curvaturas en la función teórica que se está explorando. En las etapas siguientes, se utilizarán entonces aproximaciones polinómicas de segundo orden para $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$ para seguir ganando conocimiento acerca de $f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$, lo que redundará en funciones polinómicas que ajusten cada vez mejor a la función verdadera.

Finalmente, a través del llamado *análisis canónico* de la superficie ajustada, se podrá identificar a qué forma geométrica corresponde la superficie estudiada, luego de lo cual, será necesario verificar el cumplimiento de las hipótesis tenidas en cuenta a la hora de comenzar el estudio.

El siguiente diagrama de flujo que mostramos en la fig. A.1 —modificado de BOX *et al.* (1978)— resume de modo muy claro una forma de proceder ordenada y sistemática para el avance secuencial del conocimiento de sistemas cuyo funcionamiento se desconoce y se desea conocer mediante la experimentación secuencial:

A.2. Los modelos de regresión en *MSR*

En general, para los sistemas en los que intervienen cantidades variables y el objeto de estudio consiste en medir los efectos de un conjunto de factores de variabilidad que afectan presumiblemente el comportamiento de una variable respuesta, es frecuente hacer uso de los Modelos de Regresión³, cuyas aplicaciones cubren un muy amplio espectro de disciplinas.

Los métodos de Superficie de Respuesta constituyen unas técnicas utilizadas antes, durante y después que son considerados los modelos de regresión como formas de ajustar relaciones funcionales a los datos⁴. En una etapa inicial, será muy conveniente realizar un diseño del experimento, en donde se seleccionan los factores intervinientes y los valores que ellos tomarán —o “niveles”— durante la experimentación. Y posteriormente al análisis de regresión, son consideradas ciertas técnicas de optimización, de tal forma que el foco de la *MSR* persigue conseguir el mayor conocimiento del funcionamiento del sistema bajo estudio.

³ Vid. p. ej. CORNELL (1990).

⁴ Sin embargo, aunque los modelos de regresión son útiles para ajustar modelos de superficies de respuesta, ambas cosas no son lo mismo, ya que los primeros son una herramienta que sirve tanto para estudios observacionales como experimentos diseñados, mientras que la *MSR* tiene su principal contexto dentro del segundo grupo de estudios mencionado.

ESTRATEGIA CLÁSICA DE EXPERIMENTACIÓN SECUENCIAL

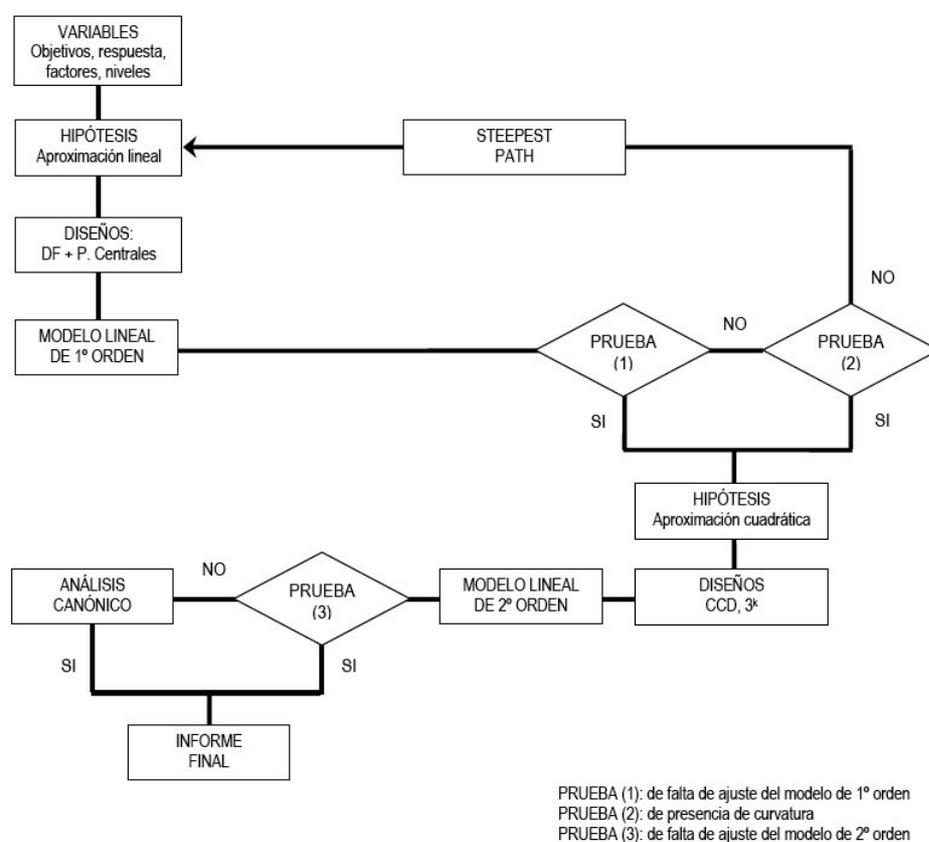


Figura A.1: Esquema simplificado de la estrategia secuencial de experimentación en el contexto de la Metodología de Superficie de Respuesta. [Adaptado de Box *et al.* (1988)].

A.3. Sobre los factores

Los factores de variabilidad —que mencionamos abreviadamente como “factores”— son considerados como aquellos posibles influenciadores de la respuesta. Los mismos, desde el punto de vista del análisis de regresión, podrán ser tanto cuantitativos como cualitativos. Numerosos ejemplos de estos casos pueden encontrarse en un gran número de aplicaciones, tanto en ambientes de experimentación científica, industrial, ciencias sociales, negocios⁵, etc. Utilizamos la notación $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)'$ para referirnos a al vector columna de k elementos que represente a los factores considerados en el estudio de estos problemas, llamados comúnmente *factores naturales*. Diremos también que, como todo modelo de regresión, se considerará un vector de parámetros desconocidos $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)'$ asociado al vector de factores, $\boldsymbol{\xi}$.

Con respecto a los distintos niveles que puedan tomar los factores, hemos supuesto mientras no se haya indicado lo contrario, que serán cantidades fijas en el sentido en que las mismas estarán controladas por el experimentador⁶. Diremos que cada uno de los elementos del vector de factores $\boldsymbol{\xi}$, de k dimensiones, podrá tomar un número controlado de niveles. Así, por ejemplo, representaremos con el símbolo $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$ al vector columna compuesto por los niveles que toma el vector de factores $\boldsymbol{\xi}$, en donde es frecuente asumir que $\dim(\boldsymbol{\xi}) \geq \dim(\mathbf{x})$.

Una forma habitual y práctica de manejar los niveles de los factores, que prescinde de sus unidades de medida es mediante la definición de *variables codificadas*. La forma de expresar un conjunto de k factores en forma de variables codificadas suele hacerse definiendo el vector $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$, en donde la componente x_j representa la variable codificada correspondiente al factor ξ_j . Desde el punto de vista de los diseños factoriales a dos niveles, y suponiendo que en la región experimental definida para el factor ξ_j , éste puede tomar dos valores ξ_{jINF} y ξ_{jSUP} , es frecuente expresar esta codificación mediante la transformación:

$$x_j = \frac{\xi_j - \bar{\xi}_j}{S_j},$$

en donde

$$\bar{\xi}_j = \frac{1}{2}(\xi_{jSUP} + \xi_{jINF})$$

y:

$$S_j = \frac{1}{2}(\xi_{jSUP} - \xi_{jINF})$$

De este modo, las variables así transformadas permiten tomar niveles 0 ó 1, poseyendo entonces la misma métrica —y adimensional— dentro del espacio de factores y facilitando la aplicación de los diseños factoriales. Este aspecto resulta especialmente útil a la hora de la planificación de los diseños y de los cálculos de los efectos.

⁵ Vid. p. ej. VASHI, VIDYUT H.; BIENSTOCK, CAROL C. Y MENTZER, JOHN T. (1995). “The use of Response Surface Methodology to Optimize Logistics Simulation Models”. *Journal of Business Logistics*, vol. 16, N° 2, pp. 197 et seq.

⁶ Vid. p. ej. CORNELL (1990).

A.4. Sobre la función respuesta

Es frecuente encontrar en MSR la consideración de un cierto valor que toma la respuesta en ausencia total de errores de medición. En términos de los modelos a estudiar, esto refiere a que se supone que existe un cierto valor de la “respuesta verdadera”, η , que será función de todas las fuentes de variabilidad que pudieran considerarse. Para señalar la dependencia entre la respuesta verdadera y los factores, es frecuente la notación $\eta = f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$, en la cual la función f resulta desconocida. Al lugar geométrico de los valores esperados de la respuesta se lo suele llamar *superficie de respuesta*⁷.

Ya que perseguir tal modelo que considerara a *todos* los factores resultaría un tanto imposible, será necesario no perder de vista que el vector de factores \mathbf{x} representa una especulación suficientemente razonable de lo que ha considerado la experiencia del experimentador a la hora de definir un cierto conjunto potencial de factores en el problema, que no consideraremos que sea exhaustiva. Es por ello que, en ciertos casos, puede resultar conveniente considerar una cierta cantidad ε , llamada comúnmente “error experimental” o “perturbación aleatoria”, que será una cantidad vectorial representativa de las demás fuentes de variabilidad que afectan a la respuesta y que no han sido tenidas en cuenta al definir \mathbf{x} . De este modo, la respuesta verdadera η diferirá de la respuesta observada en dicha cantidad ε . Así, si se cuenta con un cierto número n de observaciones de la respuesta, denotadas mediante el vector $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)'$, lo precisado puede expresarse mediante la relación $\mathbf{y} = \eta + \varepsilon = f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta}) + \varepsilon$. Esto puede interpretarse del modo más simple como: la respuesta observada resultará como la superposición de dos efectos⁸ desconocidos: una función respuesta verdadera $f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$ y una cantidad aleatoria, ε . Queda claro que, desde el punto de vista dimensional, la respuesta verdadera $\eta = f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$ resulta una magnitud escalar, y que será también posible considerar términos de mayor orden, como interacciones, términos cuadráticos, etc. En lo que venimos llamando “modelo clásico de MSR” se siguen las hipótesis de linealidad y normalidad para $f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$ y ε , respectivamente.

A.4.1. Aproximaciones polinómicas para la respuesta

Haciendo uso del Cálculo Diferencial, es sabido que si la respuesta verdadera resultara “suave”⁹, será posible realizar aproximaciones locales de la misma por medio de desarrollos en Serie de Taylor alrededor de un cierto punto de la representación k -dimensional de $\eta = f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$. La naturaleza de dicha aproximación de la función desconocida f estará asociada en alguna medida con el orden del polinomio a partir del cual se desprecien términos de orden superior¹⁰. De esta manera, se perseguirá obtener experimentalmente funciones del tipo $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$, de modo que la aproximación $f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta}) \simeq g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$ resulte suficiente considerando modelos de primero o segundo or-

⁷ Vid. p. ej. CORNELL (1990).

⁸ Al menos, en el sentido físico.

⁹ Desde el punto de vista experimental, suele considerarse que es resulta infrecuente encontrar aspectos “rugosos” para los modelos de superficies de respuesta. Vid. p. ej. PRAT *et al.* (1997 y 2004).

¹⁰ Una muy clara ilustración sobre estos conceptos puede verse en CHRISTENSEN (2001).

den¹¹.

Resumiendo, diremos que la estrategia experimental secuencial consiste en ir llevando a cabo diferentes experimentos en una cierta secuencia, para los cuales se consideran distintos niveles de los factores de variabilidad, de modo que en cada uno de ellos se realicen observaciones de la respuesta. A partir de estas últimas, se irán construyendo modelos que permitan conocer el aspecto que presenta la función $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$, como aproximación de $f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$. Para el caso del modelo logístico, tendremos que las funciones de aproximación serán, por ejemplo, de la forma $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \text{logit}[\pi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})]$.

Ejemplo de aproximación de primer orden

Al comenzar la experimentación y cuando la región de experimental se encuentra “suficientemente lejos” del óptimo, una primera hipótesis a considerar es que la superficie verdadera $f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$ presenta un aspecto lineal (p. ej.: plano)¹². Para ello, se utilizarán aproximaciones de primer orden para aquella función.

La aproximación en Serie de Taylor de primer orden para $f(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\theta})$, centrada alrededor del punto $\mu(0) = E(y | x)$, que será representativo del centro de los datos, $x = 0$, será de la forma¹³:

$$\mu(x) = \mu(0) + \sum_{j=1}^k \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} [\mu(x)] \right\}_{x_j=0} \cdot x_j,$$

en donde $\frac{\partial}{\partial x_j} [\mu(x)]_{x_j=0}$ es el vector de derivadas parciales evaluado en el punto $\mathbf{0} = (x_1 = 0, \dots, x_k = 0)'$. Como la función $\mu(x)$ es desconocida, también lo serán sus derivadas. A partir de esto, se define el vector $\boldsymbol{\beta}$ de componentes desconocidas, con tantas dimensiones como tenga el vector de factores \mathbf{x} ¹⁴, cada una de las cuales correspondiendo a las derivadas desconocidas:

$$\boldsymbol{\beta} = \left\{ \beta_0 = \mu(0), \beta_1 = \frac{\partial}{\partial x_1} [\mu(x)]_{x_1=0}, \dots, \beta_k = \frac{\partial}{\partial x_k} [\mu(x)]_{x_k=0} \right\}'.$$

Lo anterior se podrá reescribir como:

$$\mu(x) = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j,$$

¹¹El hecho de la dificultad que aparece tanto en el control como en la interpretación de términos de orden mayor a dos —ya sean éstos cúbicos puros o interacciones cuadrático-lineal o lineal triple— hace que los mismos se descarten, resultando los de segundo orden, por lo general razonables para obtener modelos útiles.

¹²Sin embargo, aunque esto no fuera del todo cierto, esta consideración se encuentra en consonancia con el objetivo del experimentador: concentrar el estudio en las inmediaciones del punto crítico de la función verdadera.

¹³CHRISTENSEN (2001), p. 346 *et seq.*

¹⁴Queda claro que este caso aplica en modelos de naturaleza lineal, ya que para los no lineales no siempre es cierto que haya un parámetro asociado a cada factor de variabilidad. Un ejemplo de ello es el llamado *doble modelo exponencial*, que es de la forma $f(x, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1 e^{-\theta_2 x} + \theta_3 e^{-\theta_4 x}$, función que depende de un sólo factor y que tiene 4 parámetros distintos. [Fuente: BATES Y WATTS (1988), p. 73].

y que al tener en cuenta cada observación $i = 1, \dots, n$, conduce a escribir:

$$g(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij},$$

que, expresado matricialmente, será:

$$g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} = \beta_0 + (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k) \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \dots \\ \beta_k \end{bmatrix},$$

o bien:

$$g(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \dots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \dots & x_{k1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & \dots & x_{kn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \dots \\ \beta_k \end{bmatrix},$$

siendo \mathbf{X} la matriz de diseño, de dimensión $n \times (k + 1) = n \times p$.

Las anteriores son las formas con que el valor esperado de la respuesta se aproxima mediante modelos lineales de primer orden, cuyos parámetros $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)'$ requerirán ser estimados, para lo cual, será necesario contar con puntos experimentales. La forma más general del modelo de aproximación de primer orden será cuando se incluyen en el mismo los términos cruzados del tipo $x_i x_j$, $i \neq j$, lo cual implicará agregar un término adicional en el desarrollo en serie de Taylor visto anteriormente. En síntesis, se llegará a un modelo del tipo:

$$g(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} + \sum_{i < j}^k \beta_{ij} x_i x_j$$

La validación de la bondad del modelo suele considerar que la región experimental presenta un aspecto lineal —ya sean planos o hiperplanos—, y que aprovechan métodos para la exploración eficiente de la superficie, como por ejemplo, el método de la máxima (mínima) pendiente de crecimiento. Dentro de los diseños experimentales que emplean estos modelos, encontramos los Diseños Factoriales, tanto los Completos como los Fraccionales.

Ejemplo de aproximación de segundo orden

Cuando los modelos de primer orden comienzan a ser inadecuados —esto es, cuando comienzan a evidenciar curvaturas y se alejan de zonas lineales— es necesario considerar modelos que contemplen términos de segundo orden. Siguiendo el mismo razonamiento que el hecho para los modelos de primer orden, se agregarán términos al desarrollo en Serie de Taylor alrededor del punto $\mathbf{0}$, que contendrán derivadas segundas de $\mu(x)$. Se demuestra fácilmente¹⁵ que el modelo de segundo orden al que se llega será del tipo:

$$g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \sum_{i < j}^k \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^k \beta_{jj} x_j^2$$

¹⁵ Vid. CHRISTENSEN (2001), p. 347.

El aspecto matricial que toma esta función, al considerar todos los puntos de diseño $i = 1, \dots, n$, se podrá escribir de la siguiente forma¹⁶:

$$g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x},$$

en donde:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_j \\ \dots \\ x_k \end{bmatrix}; \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \dots \\ \beta_j \\ \dots \\ \beta_k \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \frac{1}{2}\beta_{12} & \dots & \frac{1}{2}\beta_{1j} & \dots & \frac{1}{2}\beta_{1k} \\ & \beta_{22} & \dots & \frac{1}{2}\beta_{2j} & \dots & \frac{1}{2}\beta_{2k} \\ & & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & \beta_{jj} & \dots & \frac{1}{2}\beta_{jk} \\ & & & & \dots & \dots \\ \text{sim.} & & & & & \beta_{kk} \end{bmatrix}$$

La consideración de estos modelos pretenderá continuar explorando la superficie para intentar conocer localmente el aspecto de la misma en las proximidades del llamado *punto estacionario* (en caso que exista), y de esta forma, averiguar su naturaleza (máximo, mínimo o punto de silla). Mediante diseños de segundo orden, como los Diseños Centrales Compuestos —entre otros— será posible continuar aproximándose al óptimo de forma experimental, y mediante métodos de exploración de la superficie, como el Análisis Canónico, será posible conocer la naturaleza del punto estacionario de forma sistemática y eficiente.

A.4.2. El modelo estimado: la superficie de respuesta

El vector de coeficientes desconocidos $\boldsymbol{\beta}$ se estima mediante métodos exactos cuando el modelo es de naturaleza lineal y normal¹⁷, considerando un conjunto de n observaciones de la respuesta, y teniendo en cuenta la restricción según la cual este tamaño debe ser igual o superior al número de parámetros considerados¹⁸, es decir, $n \geq k$. Una vez estimados sus valores y decididos cuáles de ellos resultan estadísticamente significativos para explicar la respuesta, se reemplazan sus estimaciones, $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = (\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \dots, \widehat{\beta}_k)'$ en el modelo verdadero, para llegar al modelo ajustado, que será de la forma $\widehat{y} = g(\mathbf{x}, \widehat{\boldsymbol{\beta}})$, en donde \widehat{y} representa el vector de respuestas estimado. Queda también claro que si k_0 de los k factores resultan significativos, se obtendrá una superficie de respuesta que será $k_0 + 1$ dimensional.

Una vez conseguido el modelo que parezca más adecuado y razonable para la situación en estudio, bajo ciertas condiciones¹⁹ será posible obtener regiones de confianza para nuevos valores de la respuesta. Asimismo, suele resultar muy útil el estudio de las curvas de nivel, es decir, de representaciones de $g(\mathbf{x}, \widehat{\boldsymbol{\beta}}) = \text{cte.}$, que permitirá mejorar el conocimiento del comportamiento de la respuesta.

¹⁶ Vid. p. ej.: BOX Y DRAPER (1987), p. 333.

¹⁷ Por ejemplo, mediante Mínimos Cuadrados o Máxima Verosimilitud, que son los que emplean la mayor parte de los paquetes informáticos. Cuando el modelo es de naturaleza no lineal, las estimaciones utilizan los mismos métodos, aunque serán de naturaleza asintótica y no exacta.

¹⁸ Vid. p. ej. MONTGOMERY *et al.* (2001) o MYERS (1990), entre otros.

¹⁹ Vid. p. ej. BOX Y DRAPER (1987) o MYERS Y MONTGOMERY (2002).

A.4.3. El punto estacionario

Cuando ya se ha dado el modelo por “bueno”, interesa conocer las coordenadas del llamado *punto estacionario*, que será un cierto vector $\mathbf{x}_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0k})'$ formado por aquellos niveles de los factores para los cuales la primera derivada parcial del modelo ajustado con respecto a los factores sea nula en todas las direcciones de dicho espacio. En este sentido, y para el caso particular de puntos de mínimo o de máximo, el punto estacionario definirá las condiciones óptimas del sistema, en su caso. Para el caso de tratarse de un punto de silla, frecuentemente es un indicador de la presencia de dos regiones distintas que contienen puntos máximos, lo cual implica que se está en presencia de dos mecanismos bien definidos y diferentes de comportamiento del sistema²⁰.

La interpretación del modelo ajustado puede realizarse básicamente de dos formas. (a) Cuando los factores que intervienen en el modelo son 3 o menos, puede hacerse un *método gráfico* para determinar la forma de la superficie y la localización del punto estacionario. En este tipo de análisis, interesa representar las curvas de nivel de la superficie, a partir de las cuales se determinan los gradientes de máximo crecimiento de la superficie de respuesta. Cuando el número de factores es alto, el análisis gráfico resulta complicado, con lo cual es necesario otro criterio. (b) Surge así un *método analítico* de estudio de la superficie de respuesta, que es utilizado luego por el llamado análisis canónico de la superficie de respuesta, el cual permite analizar la forma de la superficie ajustada en la vecindad del punto estacionario. Mediante este segundo enfoque, se determinan aquellos niveles de los factores tales que $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} [g(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\beta}})]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} = \mathbf{0}$, en donde \mathbf{x}_0 representa el punto estacionario.

Nota bene: en el caso en que el punto estacionario sea hallado dentro de la región experimental, será conveniente describir su naturaleza (máximo, mínimo o punto de silla), al mismo tiempo de analizar la forma de la superficie de respuesta en la vecindad del mismo. Si, en cambio, el punto estacionario no estuviese dentro de la región de experimental, será entonces necesario continuar experimentando con vistas a recabar mayor información. Un método utilizado en este sentido es el llamado *método de análisis de tejas*²¹, cuyos detalles no profundizaremos en este trabajo.

A.4.4. Análisis canónico de la superficie ajustada

Las superficies cuadráticas por lo general resultan difíciles de conocer en cuanto a su forma geométrica, con lo cual suelen hacerse unas transformaciones de manera que la forma transformada tenga una interpretación más fácil y conveniente. Cuando el punto estacionario se encuentra dentro de la región experimental, estas formas resultantes suelen clasificarse según su *forma canónica*, la cual comprende dos transformaciones fundamentales: las llamadas formas canónicas “A” y “B”. Ver por ejemplo BOX Y DRAPER (1987), p. 332.

De acuerdo con lo que venimos desarrollando, el contexto de este punto no pertenece tanto al ámbito del *diseño* como sí al de *análisis* de experimentos diseñados, capítulo que supera los alcances de esta tesis y que no ahondaremos.

²⁰ Vid. p. ej.: KHURI Y CORNELL (1996), pp. 165 *et seq.*

²¹ Llamado originariamente “ridge analysis”. Vid. p. ej.: KHURI Y CORNELL (1996), entre otros.

Los puntos comentados en este primer apéndice complementan lo que hemos citado en los capítulos de la tesis referidos a *MSR*, aunque de forma claramente no exhaustiva. Las referencias que citamos a lo largo de toda la tesis referidas a *MSR* conforman con creces el estado del arte de este tema a la fecha en que fue elaborado.