Capítulo 8:

Estimación inadecuada de V(Y) a partir de métricas no-resumen

8 Estimación inadecuada de V(Y) a partir de métricas no-resumen

El objetivo principal de esta tesis es la comparativa entre los dos métodos más utilizados para estudiar el comportamiento de la variabilidad transmitida a *Y* por los factores ruido cuando se asume la siguiente estructura para el modelo de la respuesta *Y*,

$$Y = \mu + \sum_{l=1}^{r} \theta_l Z_l + \sum_{i=1}^{k} \sum_{l=1}^{r} \delta_{il} X_i Z_l + \varepsilon \qquad \varepsilon - iid -> N(0,\sigma)$$
$$i = 1,...k \quad l = 1,.....r \tag{8.1}$$

- El método tradicional utiliza métricas resumen. Para ello parte de un diseño experimental en forma de matriz producto y reproduce la variabilidad transmitida por los factores ruido en las condiciones de los factores de control, estimando a partir de estos valores un modelo para la métrica seleccionada ($\sigma^2(Y)$, $\sigma(Y)$, $log\ (\sigma)$, *S/R*, ..);

- El segundo método utiliza métricas no-resumen. En este caso se selecciona un diseño que permite estimar la relación entre los factores de control, X's, y ruido, Z's, con la respuesta *Y*, y a partir de este modelo se deduce el modelo para la variabilidad.

Ya comentamos en el capítulo 2 que cuando el diseño seleccionado es el representado por una matriz producto, se pueden utilizar los dos métodos para aproximar el modelo para la variabilidad y se pueden comparar los dos modelos así obtenidos, y que cuando las condiciones de ruido no son las mismas en cada condición de los factores de control, el análisis de la variabilidad sólo se puede llevar a cabo a partir de métricas no-resumen.

A raíz de las diferencias encontradas al aplicar los dos métodos en algunos ejemplos que así lo permitían (dos de ellos han sido presentados en el capítulo 3) decidimos estudiar con más profundidad las dos metodologías.

Con este propósito, en los capítulos 4, 5, 6 y 7 hemos estudiado la naturaleza de la superficie teórica $\sigma^2(Y)$ cuando la superficie *Y* puede ser representada por un modelo como en (8.1). En este caso, los modelos para $\sigma^2(Y)$ y $\sigma(Y)$ recogían la sensibilidad que algunos factores de control mostraban a la transmisión de los efectos de los factores ruido en el modelo para *Y*, apareciendo estos factores de control en los modelos de la variabilidad pero de una forma más compleja.

Comprobamos que la expresión para $\sigma^2(Y)$ se podía deducir de forma sencilla por métricas no resumen a partir del modelo para *Y*, resultando un polinomio de segundo orden en los factores de control. En este caso para estimar los coeficientes del modelo (8.1) para la respuesta *Y* bastaba con experimentar a partir de un diseño factorial a 2 niveles en los factores de control y ruido. En el caso de que se deseara obtener un modelo para $\sigma(Y)$ por métricas no resumen, este sólo se podía deducir directamente a partir del modelo de $\sigma^2(Y)$ si esta última expresión admitía una raíz positiva, siendo necesario en el resto de los casos deducir la expresión a partir de datos simulados basándose en el modelo para *Y*.

También pudimos ver que cuando se decide obtener los modelos para la variabilidad a partir de métricas resumen es necesario experimentar con un diseño en forma de matriz producto que tenga un diseño de segundo orden en los factores de control a ser posible de Resolución IV o superior.

Con los dos métodos descomponíamos la variabilidad total observada en *Y* en dos expresiones totalmente independientes,

$$\sigma^2(Y) = \sigma_Z^2(Y) + \sigma_\varepsilon^2(Y)$$

La expresión $\sigma_Z^2(Y)$ representa a la variabilidad de la respuesta *Y* en las condiciones determinadas por los factores de control X's debida a los factores ruido Z's, siendo una función que sólo depende de los factores de control.

La expresión $\sigma_\varepsilon^2(Y)$ está asociada a:

- La variación transmitida por otros factores ruido W's no presentes en el estudio, una parte de esta variación podría estar en el espacio de los X's;

- La variación transmitida por estos mismos factores Z's en otros espacios generados por otros factores de control que pueden o no estar interrelacionados con estos X's;

- La variación transmitida por estos mismos factores Z's en el espacio generado por los factores X's pero con una estructura no contemplada en el modelo.

Si las hipótesis que conciernen a "ε" en el modelo para *Y* expresado en (8.1) se cumplen, $\sigma_\varepsilon^2(Y)$ no sólo es independiente de X's y Z's sino que además es constante en cada condición de los factores de control. Por lo tanto, las condiciones X's que minimizan a $\sigma_Z^2(Y)$ son las mismas que minimizan a $\sigma^2(Y)$ y se llega a una misma expresión para $\sigma_Z^2(Y)$ a partir de métricas resumen o métricas no-resumen.

Si se incumplen parte de las hipótesis para el modelo de la respuesta *Y* y se obtiene una parte $\sigma_\varepsilon^2(Y)$ que no es independiente de $\sigma_Z^2(Y)$, nos podríamos encontrar con oportunidades de reducción de $\sigma^2(Y)$ a partir de $\sigma_\varepsilon^2(Y)$ que pueden pasar desapercibidas en diferente medida por cada método. Esta posible diferencia de sensibilidad a la hora de detectar la posibilidad de reducir esta variabilidad puede dar lugar a que los modelos estimados para $\sigma^2(Y)$ por uno u otro método sean diferentes.

El incumplimiento de parte de las hipótesis impuestas al modelo teórico para *Y* en (8.1) es un hecho que ocurre continuamente en la práctica aunque las repercusiones son en la mayoría de los casos son negligibles. Nosotros queremos mostrar sin embargo 2 situaciones de incumplimiento de las hipótesis, que resultan fácil de encontrar en la práctica experimental, y que afectan al estudio del problema ya que los dos métodos de aproximar $\sigma^2(Y)$ tienen distinta sensibilidad para detectarla.

Supongamos que se asume un modelo para *Y* como en (8.1) pero que:

- A) Una parte de la componente "ε" puede ser explicada por un factor ruido W ajeno a la experimentación; W afecta a la respuesta *Y* de manera diferente dependiendo del nivel en que se encuentren ciertos factores de control X's, es decir, interacciona con ellos;

- B) Una parte de la componente "ε" recoge cierta parte de la relación entre los factores X's y Z's a estudio con la respuesta *Y* que ha pasado inadvertida para el experimentador.

A continuación desarrollamos estas dos situaciones analizando la sensibilidad de los 2 métodos de estimación de la variabilidad ante este problema

8.1 Presencia de factores ruido desconocidos W's afectando a la respuesta Y

Supongamos que existen ciertos factores ruido W's, desconocidos para el experimentador, que no han permanecido fijos mientras se ha llevado a cabo la experimentación y que tienen un efecto sobre la respuesta *Y* dependiendo del nivel en que se encuentren los factores de control, X's. Supongamos que el modelo teórico para la respuesta *Y* se puede expresar a partir de un modelo lineal de primer orden, con a lo sumo algunos términos cruzados de la forma,

$$Y = \mu + \sum_{l=1}^{r} \theta_l Z_l + \sum_{i=1}^{k} \sum_{l=1}^{r} \delta_{il} X_i Z_l + \sum_{m=1}^{s} \lambda_m W_m + \sum_{i=1}^{k} \sum_{m=1}^{s} \phi_{im} X_i W_m + \varepsilon$$

$$i = 1,...k; \quad l = 1,...r; \quad m = 1,...,s; \qquad \mu = \mu(X_1,...,X_k); \qquad \varepsilon - iid -> N(0,\sigma) \tag{8.2}$$

Por no estar fijados durante la experimentación y ser desconocidos denominaremos a los factores W "factores ruido desconocidos".

La expresión anterior se puede agrupar en cuatro términos:

$$Y = \mu(X's) + f(X's, Z's) + g(X's, W's) + \varepsilon$$

El término μ(X's) recoge la parte del modelo que sólo está afectada por factores de control y representa al valor esperado de la respuesta.

El polinomio f(X's, Z's) recoge los términos donde aparecen alguno de los factores Z's e interacciones de estos factores con los factores de control X's. Esta parte estudia el efecto de los factores ruido Z's en la respuesta en el espacio generado por los factores de control X's. El polinomio g(X's, W's) puede ser explicado como el polinomio anterior intercambiando los factores Z's por los W's.

Por último, el término "ε" recoge el efecto en la respuesta de otras componentes ajenas a las del estudio.

Es decir, tenemos un modelo que corresponde a la hipótesis de trabajo donde no aparecen los términos asociados a los factores W's, y un modelo alternativo que contempla la presencia de estos factores y que representa a la relación verdadera. En forma matricial podemos expresar estas dos hipótesis de la siguiente manera:

$$\begin{cases} \boldsymbol{H}_0 : \boldsymbol{Y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{Z\Theta} + \boldsymbol{\varepsilon}_0 \\ \\ \boldsymbol{H}_1 : \boldsymbol{Y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{Z\Theta} + \boldsymbol{W\Phi} + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \end{cases} \tag{8.3}$$

Las expresiones ZΘ y WΦ representan a las partes que, anteriormente en (8.2), hemos denominado f(X's, Z's) y g(X's, W's) respectivamente; Z y W son las matrices del diseño asociadas a los factores X's y Z's, y X's y W's, respectivamente y Θ y Φ son los vectores conteniendo los coeficientes asociados a estos factores.

A continuación deduciremos la expresión a la que se llega para $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas resumen o métricas no-resumen. Podremos comprobar que los modelos obtenidos por cada método son diferentes: pudiendo aparecer efectos diferentes en cada modelo o contener efectos comunes pero diferente magnitud.

8.1.1 Sensibilidad de los 2 métodos de estimación ante la presencia de W's

Si la respuesta *Y* puede ser representada bajo la hipótesis H_1 en (8.3), $\sigma^2(Y)$ tiene la siguiente estructura:

$$\sigma^2(Y) = \sigma^2(Y-\mu) = E(Z\Theta + W\Phi)^2 + E(\varepsilon_1^2) = E\left[(Z\Theta + W\Phi)'(Z\Theta + W\Phi)\right] + \sigma^2_{\varepsilon_1}(Y)$$

$$\sigma^2(Y) = \Theta' E\left[Z'Z\right]\Theta + \Theta' E\left[Z'W\right]\Phi + \Phi' E\left[W'Z\right]\Theta + \Phi' E\left[W'W\right]\Phi + \sigma^2_{\varepsilon_1}(Y) =$$

$$= \sigma^2_Z(Y) + 2Cov(Z\Theta, W\Phi) + \sigma^2_W(Y) + \sigma^2_{\varepsilon_1}(Y) =$$

$$= \begin{cases} \sigma^2_Z(Y) + \sigma^2_W(Y) + \sigma^2_{\varepsilon_1}(Y) & si \quad E(ZW) = 0 \\ \sigma^2_Z(Y) + \sigma^2_W(Y) + \sigma^2_{ZW}(Y) + \sigma^2_{\varepsilon_1}(Y) & si \quad E(ZW) \neq 0 \end{cases} \tag{8.4}$$

<u>**Estimación de $\sigma^2(Y)$ por métricas resumen**</u>

Cuando se trabaja con métricas resumen se estima directamente la variabilidad a partir de un diseño en forma de matriz producto en los factores de control X's y los ruido Z's. Aunque se desconoce el efecto de los factores W's, este efecto se transmite a la respuesta dependiendo de las condiciones de los factores de control y afecta a la variabilidad observada.

La expresión que se tiene para $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas resumen tiene en cuenta las términos $\sigma^2_Z(Y)$ y $\sigma^2_W(Y)$ en la expresión (8.4) pero no los diferencia ya que desconoce la presencia de los factores W's. El polinomio en X's que se obtiene recoge la suma de estas partes. Podríamos expresarlo como:

$$\sigma^2(Y) = \sigma^2_{Z \text{ y } W}(Y) + \sigma^2_{1}(Y)$$

$$\sigma^2_{Z \text{ y } W}(Y) = \sigma^2_Z(Y) + \sigma^2_W(Y) + \sigma^2_{ZW}(Y)$$

Estimación de $\sigma^2(Y)$ por métricas no-resumen

Si se desconoce la presencia de los factores W's, primeramente se ajustaría un modelo para *Y* asumiendo cierta la relación H_0 en (8.3). A partir de este modelo para *Y*, se deduce el modelo para $\sigma^2(Y)$ asumiendo $\sigma^2(Z)=1$. Así se puede descomponer la variabilidad total en 2 partes: la inducida por los factores ruido a estudio Z´s y la restante que denominamos "variabilidad experimental".

$$H_0 : Y = \mu + Z\Theta + \varepsilon_0$$

$$\sigma^2(Y) = \sigma_Z^2(Y) + \sigma_{\varepsilon_0}^2(Y) \qquad (8.5)$$

Cuando *Y* no sigue H_0 sino H_1 en (8.3), la parte $\sigma_{\varepsilon 0}^2(Y)$ del modelo en (8.5) no cumple las hipótesis de independencia respecto a X's. Vamos a suponer que en la práctica el experimentador no se da cuenta de esto (debido al desconocimiento de la presencia de los factores W's, la experimentación reducida, la poca evidencia de estos efectos, …). Por lo tanto cuando se procede a minimizar $\sigma^2(Y)$ en el espacio generado por los factores X's se pasa directamente a minimizar $\sigma_Z^2(Y)$ ya que se asume que $\sigma_{\varepsilon 0}^2(Y)$ es constante en este espacio, sin embargo depende de los factores X's a través de $\sigma_W^2(Y)$ y $\sigma_{ZW}^2(Y)$,

$$\sigma_{\varepsilon_0}^2(Y) = \sigma_W^2(Y) + \sigma_{ZW}^2(Y) + \sigma_{\varepsilon_1}^2(Y)$$

Comparación de las dos aproximaciones

Por lo tanto, al trabajar con métricas no-resumen, a la estimación de la variabilidad sólo le puede afectar los factores que se incluyen en el modelo para la localización, factores Z's, y por lo tanto no le afecta los efectos de los factores W's. (Es obvio que estos factores no se incluyan en el modelo de la localización ya que se desconoce su presencia.)

La aproximación con métricas resumen a $\sigma^2(Y)$ tiene en cuenta el efecto de los factores W's en la respuesta aunque sin saberlo.

8.1.2 Relación entre los coeficientes del modelo para Y y las estimaciones de la variabilidad obtenidas por los dos métodos

Si el modelo de partida para *Y* tiene la estructura presentada bajo H_1 en (8.3) con Z's y W's independientes, el modelo para $\sigma^2(Y)$ puede ser representado por un polinomio de segundo orden en los factores de control X's, cuyos coeficientes pueden expresarse en función de los coeficientes del modelo para *Y* a través de relaciones que dependen del método utilizado para aproximar $\sigma^2(Y)$.

$$\sigma^2(Y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i X_i + \sum_{i \neq j}^{k} \beta_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} X_i^2 + \sigma_\varepsilon^2(Y)$$

Aproximación a $\sigma^2(Y)$ por métricas resumen

$$\hat{\beta}_0 = \left(\sum_{l=1}^{r} \theta_l^2\right) + \left(\sum_{m=1}^{s} \lambda_m^2\right) \qquad \hat{\beta}_i = \left(2\sum_{l=1}^{r} \theta_l \delta_{il}\right) + \left(2\sum_{m=1}^{s} \lambda_m \phi_{im}\right)$$

$$\hat{\beta}_{ij} = \left(2\sum_{l=1}^{r} \delta_{il}\delta_{jl}\right) + \left(2\sum_{m=1}^{s} \phi_{im}\phi_{jm}\right) \qquad \hat{\beta}_{ii} = \left(\sum_{l=1}^{r} \delta_{il}^2\right) + \left(\sum_{m=1}^{s} \phi_{im}^2\right)$$

Aproximación a $\sigma^2(Y)$ por métricas no - resumen

$$\hat{\beta}_0 = \sum_{l=1}^{r} \theta_l^2 \qquad \hat{\beta}_i = 2\sum_{l=1}^{r} \theta_l \delta_{il} \qquad \hat{\beta}_{ij} = 2\sum_{l=1}^{r} \delta_{il}\delta_{jl} \qquad \hat{\beta}_{ii} = \sum_{l=1}^{r} \delta_{il}^2 \tag{8.6}$$

Si la aproximación se hace por métricas no-resumen se han de estimar primeramente los coeficientes del modelo para *Y*: θ_l, δ_{il} y se deduce la expresión de $\sigma^2(Y)$ a partir de la relación en (8.6). En cambio, cuando la aproximación se realiza por métricas resumen se estiman directamente los coeficientes β's del modelo para $\sigma^2(Y)$ y las expresiones en (8.6) sólo representan la relación teórica existente entre estos coeficientes y los del modelo para *Y*, modelo que se desconoce.

Se observa que sólo cuando la estimación de $\sigma^2(Y)$ se realiza por métricas resumen los coeficientes están afectados por los efectos de los factores W's (aunque el experimentador desconozca este hecho).

Si como es habitual en la práctica se parte de diseños factoriales a 2 niveles en los factores de control para estimar $\sigma^2(Y)$ por cualesquiera de los dos métodos, el modelo estimado por métricas resumen será diferente del anterior, ya que con estos diseños no se pueden estimar los términos cuadráticos puros, y el sesgo en la estimación afectará al valor de la constante en el modelo. En cambio el modelo para *σ^2(Y)* a partir de métricas no-resumen no se modificará ya que este modelo se obtiene a partir de los coeficientes del modelo para *Y* que no posee términos cuadráticos puros.

Diseño de partida en los factores de control : *Factorial a* 2 *niveles*

Aproximación a $\sigma^2(Y)$ por métricas resumen

$$\sigma^2(Y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i X_i + \sum_{i \neq j}^{k} \beta_{ij} X_i X_j + \sigma_\varepsilon^2(Y)$$

$$\hat{\beta}_0 = \left(\left(\sum_{l=1}^{r} \theta_l^2 + \sum_{i=1}^{k} \sum_{l=1}^{r} \delta_{il}^2 \right) + \left(\sum_{m=1}^{s} \lambda_m^2 + \sum_{i=1}^{k} \sum_{m=1}^{s} \phi_{im}^2 \right) \right)$$

$$\hat{\beta}_i = 2 \left(\sum_{l=1}^{r} \theta_l \delta_{il} + \sum_{m=1}^{s} \lambda_m \phi_{im} \right) \qquad \hat{\beta}_{ij} = 2 \left(\sum_{l=1}^{r} \delta_{il} \delta_{jl} + \sum_{m=1}^{s} \phi_{im} \phi_{jm} \right)$$

Aproximación a $\sigma^2(Y)$ por métricas no - resumen

$$\sigma_Z^2(Y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i X_i + \sum_{i \neq j}^{k} \beta_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} X_i^2 + \sigma_{\varepsilon^*}^2(Y) \tag{8.7}$$

$$\hat{\beta}_0 = \sum_{l=1}^{r} \theta_l^2 \qquad \hat{\beta}_i = 2 \sum_{l=1}^{r} \theta_l \delta_{il} \qquad \hat{\beta}_{ij} = 2 \sum_{l=1}^{r} \delta_{il} \delta_{jl} \qquad \hat{\beta}_{ii} = \sum_{l=1}^{r} \delta_{il}^2$$

Las diferencias entre las estimaciones de *σ^2(Y)* obtenidas por los dos métodos se deben a que se están resolviendo problemas diferentes:

- Cuando se obtiene *σ^2(Y)* por métricas no-resumen se obtiene una superficie que representa la transmisión de la variabilidad a *Y* debida a los factores Z's, y no a otros, en el espacio generado por los factores X's;

- Cuando se obtiene *σ^2(Y)* directamente de los datos, se obtiene una superficie que representa la transmisión de la variabilidad a *Y* debida a los factores Z's y a cualquier otro factor que haya variado y afecte esta variación de una manera no constante en el espacio generado por los factores X's.

Por lo tanto:

- Si se trabaja con las métricas no-resumen se puede obtener un modelo completo de segundo orden para $\sigma^2(Y)$ pero este modelo sólo recoge la influencia de los factores ruido conocidos;

- Si se trabaja con métricas resumen, se logra recoger el efecto de otros factores ruido en la variabilidad de la respuesta pero se han de utilizar diseños de segundo orden para aproximar adecuadamente el modelo para la variabilidad.

La presencia de los factores W's puede provocar diferencias importantes entre los modelos a los que se llega por los dos métodos dependiendo de qué factores X's interaccionen con los factores W's y de la magnitud de estas interacciones. Si llamamos X_w a los factores de control que interaccionan con los factores W's, a continuación presentamos algunas de las situaciones más interesantes:

- Si alguno de los factores X_w no interacciona con los factores Z's, este factor sólo puede aparecer en el modelo para $\sigma^2(Y)$ obtenido por métricas resumen;

- Si alguno de los factores X_w interacciona también con los factores Z's, este factor aparece tanto en el modelo obtenido por métricas resumen para $\sigma^2(Y)$ como en el obtenido por métricas no-resumen, sin embargo, la magnitud de los coeficientes asociados a efectos contendiendo este factor no coincide en los dos modelos;

- Si existen varios factores de control X_{w1} y X_{w2} interaccionando con un mismo factor W y estos factores no aparecen juntos interaccionando con alguno de los factores Z's, sólo el modelo para $\sigma^2(Y)$ obtenido por métricas resumen contiene el término asociado a la interacción entre estos dos factores β_{w1w2};

- Si existen varios factores de control X_{w1} y X_{w2} interaccionando con un mismo factor W y estos factores también aparecen juntos interaccionando con alguno de los factores Z's, el término β_{w1w2} aparece en la aproximación a $\sigma^2(Y)$ por los dos métodos pero la magnitud de los coeficientes no coincide.

Todo lo dicho anteriormente es cierto con las excepciones que se pueden derivar por compensaciones entre sumandos que pueden dar lugar a efectos nulos.

Concluimos que ante la presencia de factores ruido desconocidos W's que interaccionan con los factores de control X's, los dos métodos de aproximar $\sigma^2(Y)$ pueden arrojar modelos muy diferentes.

8.1.3 Estrategias a adoptar para detectar la presencia de los factores ruido W's cuando se trabaja con métricas no-resumen

En el caso de que el diseño seleccionado por el experimentador no permita una aproximación por métricas resumen a $\sigma^2(Y)$ existen métodos para detectar la presencia de factores ruido W's afectando a la respuesta como en (8.2), es decir, se trata de detectar la dependencia de la variabilidad de la componente aleatoria en el modelo para Y, $\sigma_\varepsilon^2(Y)$ respecto a los factores de control X''.

Una primera estrategia sería realizar gráficos entre los residuos del modelo

$$e_i = Y - \hat{\mu} + Z\hat{\Theta}$$

y los factores X's (o sus interacciones) con el objetivo de detectar signos de heterocedasticidad.

Pensamos que en la mayoría de las situaciones prácticas el efecto de estos factores W's es pequeño ya que precisamente se intenta mantener constantes las condiciones externas a la experimentación, por lo tanto se está intentando detectar, no estimar, un efecto de pequeña magnitud con una estrategia que puede resultar tediosa (dado el número elevado de gráficos que se puede llegar a necesitar), y requiere una habilidad especial para comparar la variabilidad a lo largo de los valores de X's (podrían realizar tests de comparación de varianzas pero como el número de condiciones experimentales acostumbra a ser reducido el poder de detección de estos test es bajo).

Ante la dificultad de detectar la presencia de factores asociados a la variabilidad presente en "ε" (llamados también factores de dispersión) numerosos autores han desarrollado métodos analíticos orientados a este fin, la mayoría de ellos para diseños factoriales (Box y Meyer (1986), Nair y Pregibon (1988), Wang (1989), Montgomery (1991), Miller y Wu (1993), Bergman y Hynen (1995)). Otros autores como Ferrer y Romero (1995) proponen un método sencillo de uso más general ya que no requiere ni réplicas ni diseños factoriales.

Fuller y Bisgaard (1996) comparan en su artículo diferentes métodos de detección de factores que afectan a "ε", entre ellos los métodos mencionados anteriormente para diseños factoriales, y llegan a la conclusión que ninguno de los métodos probados es uniformemente más potente que el resto aunque el método propuesto por Bergman y Hynen (1995) parece comportarse el mejor. Como una alternativa a este método los autores proponen un método que a costa de una pérdida de potencia es más sencillo de implementar.

Así, basándonos en los resultados de Fuller y Bisgaard (1996) y Ferrer y Romero (1995) proponemos adoptar la siguiente estrategia a la hora de detectar factores ruido desconocidos que provocan dependencia entre $\sigma_\varepsilon^2(Y)$ y los factores de control X's:

Estrategia en 2 pasos:

- **Paso 1:** Estimar por mínimos cuadrados ordinarios la relación existente entre *Y* y los factores X's y Z's a estudio. A continuación, calcular los residuos del modelo.

$$e_i = Y - \hat{\mu} - Z\hat{\Theta}$$

- **Paso 2**: Detección de factores de dispersión

Método de Bergman-Hyden o Método $D_f^{1/2}$ (ver Fuller y Bisgaard, 1996)

Estimación de los efectos a partir de los residuos teniendo en cuenta si el factor está situado en nivel alto (f_+) o nivel bajo (f_-).

Bergman – Hynen	$D_f^{1/2}$
$\log\left(\sum_{i=f+}^{n/2} e_i^2 \Big/ \sum_{i=f-}^{n/2} e_i^2\right)$	$n^{-1}\left(\sum_{i=f+}^{n/2} \lvert e_i\rvert^{1/2} - \sum_{i=f-}^{n/2} \lvert e_i\rvert^{1/2}\right)$

Representar estos efectos en papel probabilístico normal y seleccionar los efectos que se alejen de la reta. Los factores involucrados forman parte de los factores que anteriormente hemos denominado "X_w".

Método basado en Ferrer-Romero (1995)

Calcular una de las dos transformaciones siguientes:

$$W_i = \begin{cases} \ln(e_i^2) + 1.27 & si\ e_i \neq 0 \\ \ln(0.5\, min\lvert e_i\rvert)^2 - 1.27 & si\ e_i = 0 \end{cases}$$

$$U_i = \{e_i^2 \qquad \textit{Para todo } i$$

y realizar una regresión de W_i o U_i sobre los factores candidatos a afectar a la dispersión $\sigma^2(\varepsilon)$, es decir.

$$W_i = \mathbf{X}D_1 + ZD_2 + WD_3 + \varepsilon$$

donde X representa a la matriz asociada a los factores X's, Z la matriz asociada a los factores Z's y sus interacciones con X's, y W representa a la matriz asociada a cualquier factor externo al estudio (de quien se sospeche haya podido influir) y sus interacciones con los factores X's.

Los efectos que surjan significativos una vez aplicados los 2 pasos pueden utilizarse para reducir la componente $\sigma_\varepsilon^2(Y)$ de $\sigma^2(Y)$. Para el estudio global $\sigma^2(Y)$ se necesitaría un modelo que incluyera los efectos de $\sigma_z^2(Y)$ y $\sigma_\varepsilon^2(Y)$ juntos pero esto es difícil de conseguir ya que se ha trabajado en escalas diferentes y no se tiene una estimación de los efectos en la misma métrica.

En la práctica, ante una situación como la que estamos presentando se puede seguir dos vías:

- Estimar $\sigma^2(Y)$ por medio de métricas resumen;
- Estimar un modelo para *Y* del cual se deducirá la contribución de los factores ruido conocidos a la variabilidad de la respuesta, $\sigma_z^2(Y)$,y aplicar la estrategia en dos pasos para detectar otros factores de control que pueden ayudar a reducir la componente $\sigma_\varepsilon^2(Y)$.

Si la experimentación se ha llevado a cabo por métricas resumen se puede optar por las dos vías y comparar los resultados pero si el diseño de partida es diferente sólo se puede llegar a $\sigma^2(Y)$ por el segundo método.

8.2 No selección de efectos asociados a la variabilidad en el modelo para la respuesta Y

Esta segunda situación acontece cuando se desea obtener $\sigma^2(Y)$ por medio de métricas no-resumen. Supongamos que a la hora de obtener el modelo para la respuesta *Y* se seleccionan los efectos a incluir en el modelo por el procedimiento habitual de escoger los que destacan en magnitud respecto el resto (a partir de un gráfico en "papel probabilístico normal" o partir de "t-test" individuales).

Veremos cómo afectan estos efectos al modelo de $\sigma^2(Y)$ para concluir que determinados efectos asociados a la variabilidad en el modelo para la respuesta *Y* que son de poca magnitud han de ser seleccionados si se desea obtener el modelo para $\sigma^2(Y)$ a partir de métrica no-resumen.

El problema lo hemos planteado mostrando en H_0 el modelo seleccionado por el experimentador y un modelo alternativo en H_1 que es el que suponemos cierto y que incluye los efectos anteriormente comentados.

$$\begin{cases} H_0 : Y = \mu + \mathrm{Z}\Theta + \varepsilon_0 \\ \\ H_1 : Y = \mu + \mathrm{Z}\Theta + \mathrm{Z}^*\Theta^* + \varepsilon_1 \end{cases} \tag{8.8}$$

La matriz Z representa a la matriz de diseño de los efectos seleccionados asociados a la variabilidad (contiene algunos efectos principales de los factores ruido Z's, así como ciertas interacciones de estos con los factores de control X's).

La matriz Z^* representa a la matriz de diseño de los efectos asociados a la variabilidad que no han sido seleccionados pero que deberían de haberlo sido. A diferencia del problema tratado en el apartado anterior, Z^* contiene efectos asociados a X's y Z's y no aparecen factores W's.

Equivalentemente, los vectores Θ y Θ^* recogen los valores de los coeficientes asociados a estos efectos en el modelo para *Y*.

$$\begin{gathered} \textit{Ejemplo} : \text{2 factor ruido y 2 factores de control} \\ \mathrm{Z} = \begin{bmatrix} Z_1 & Z_1X_1 \\ & \\ & \end{bmatrix}; \quad \Theta = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \delta_{11} \end{bmatrix}; \quad \mathrm{Z}^* = \begin{bmatrix} Z_1X_2 & Z_2X_1 \\ & \\ & \end{bmatrix}; \quad \Theta^* = \begin{bmatrix} \delta_{21} \\ \delta_{12} \end{bmatrix} \\ H_0 : Y = \mathrm{Z}\Theta + \varepsilon = \theta_1 Z_1 + \delta_{11} Z_1 X_1 + \varepsilon_0 \\ H_1 : Y = \mathrm{Z}\Theta + \mathrm{Z}^*\Theta^* + \varepsilon = \theta_1 Z_1 + \delta_{11} Z_1 X_1 + \delta_{21} Z_1 X_2 + \delta_{12} Z_2 X_1 + \varepsilon_1 \end{gathered} \tag{8.9}$$

Siendo el modelo teórico para *Y* el que representa H_1, a continuación deduciremos la formas que adoptan los modelos que aproximan $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas resumen o métricas no-resumen. Cuando se utilice métricas no-resumen se seleccionará para *Y* el modelo bajo H_0 que es el que ha seleccionado el experimentador.

8.2.1 Sensibilidad de los 2 métodos de estimación ante presencia de efectos de pequeña magnitud asociados a factores ruido

Si suponemos que el modelo para Y es el representado bajo H_1 en (8.8) la función teórica $\sigma^2(Y)$ adopta la siguiente expresión:

$$\sigma^2(Y) = E(Z\Theta + Z^*\Theta^*)^2 + E(\varepsilon^2) = E\left[(Z\Theta + Z^*\Theta^*)'(Z\Theta + Z^*\Theta^*)\right] + \sigma^2_{\varepsilon_1}(Y)$$

$$= \Theta' E[Z'Z]\Theta + \Theta' E\left[Z'Z^*\right]\Theta^* + \Theta^{*}{}' E\left[Z^*{}'Z^*\right]\Theta + \Theta^{*}{}' E[Z'Z]\Theta^* + \sigma^2_{\varepsilon_1}(Y) \qquad (8.10)$$

$$= \sigma^2_Z(Y) + 2Cov(Z\Theta, Z^*\Theta^*) + \sigma^2_{Z^*}(Y) + \sigma^2_{\varepsilon_1}(Y)$$

Las expresiones $\sigma_Z{}^2(Y)$, $\sigma_{Z^*}{}^2(Y)$ y $Cov(Z\theta, Z^*\theta^*)$ corresponden a polinomios en los factores X's que dependen de los efectos seleccionados en Z y Z^*. El término $Cov(Z\theta, Z^*\theta^*)$ no tiene porqué anularse ya que Z y Z^* están representando a matrices asociadas a efectos conteniendo en algunos casos los mismos factores ruido.

<u>Estimación de $\sigma^2(Y)$ por métricas resumen</u>

Cuando se trabaja con métricas resumen se aproxima directamente el modelo teórico para la variabilidad a partir de un diseño en forma de matriz producto y no se hace uso del modelo para la localización.

La expresión que aproxima $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas resumen tiene una única parte asociada a los factores ruido Z's. Esta parte, $\sigma^2_{ruidoZ}(Y)$ es un polinomio en X's que podemos relacionarlo con los polinomios teóricos en la expresión (8.10) aunque esto no se pueda hacer en la práctica ya que se modela la variabilidad directamente.

$$\sigma^2(Y) = \sigma^2_{ruido}(Y) + \sigma^2_{\varepsilon 1}(Y)$$

$$\sigma^2_{ruidoZ}(Y) = \sigma^2_Z(Y) + \sigma^2{}_{Z*}(Y) + 2Cov(Z\Theta, Z^*\Theta^*)$$

<u>Estimación de $\sigma^2(Y)$ por métricas no-resumen</u>

Cuando el experimentador asume que la relación entre la respuesta Y y los factores X's y Z's es la expresada bajo H_0 en (8.8), la estimación de $\sigma^2(Y)$ por métrica no-resumen se realiza asumiendo que "ε_0" y la parte restante son independientes. De esta forma se interpreta $\sigma_Z{}^2(Y)$ como la variabilidad transmitida por los factores Z's a Y desconociendo la existencia de una contribución añadida por la parte Z^*.

$$H_0 : Y = \mu + Z\Theta + \varepsilon_0$$
$$\sigma^2(Y) = \sigma_Z^2(Y) + \sigma_{\varepsilon_0}^2(Y) \tag{8.11}$$

La parte $\sigma_Z^2(Y)$ representa a un polinomio en X's afectado por los términos seleccionados en la matriz de diseño Z. Por lo tanto se minimiza $\sigma^2(Y)$ respecto las condiciones X's minimizando $\sigma_Z^2(Y)$ ya que se supone que $\sigma_{\varepsilon 0}^2(Y)$ cuando en realidad adopta la siguiente forma,

$$\sigma_{\varepsilon_0}^2(Y) = 2Cov(Z\Theta, Z^*\Theta^*) + \sigma_{Z^*}^2(Y) + \sigma_{\varepsilon_1}^2(Y) \tag{8.12}$$

Comparación de las dos aproximaciones

La diferencia entre las dos aproximaciones corresponde con un polinomio en aquellos factores de control X's que aparecen en los efectos incluidos en la matriz Z^*.

$$Y = \underbrace{\theta_1 Z_1 + \delta_{11} Z_1 X_1}_{Z_1\Theta_1} + \underbrace{\delta_{21} Z_1 X_2 + \delta_{12} Z_2 X_1}_{Z_2\Theta_2} + \varepsilon$$

Aproximación por métricas resumen

$$\sigma^2(Y) = \theta_1^2 + 2\theta_1\delta_{11}X_1 + 2\delta_{11}\delta_{21}X_1X_2 + 2\theta_1\delta_{21}X_2 + (\delta_{11}^2 + \delta_{12}^2)X_1^2 + \delta_{21}^2X_2^2 + \sigma_\varepsilon^{\ 2}(Y)$$

Aproximación por métricas no - resumen

$$\sigma^2(Y) = \theta_1^2 + 2\theta_1\delta_{11}X_1 + \delta_{11}^2X_1^2 + \sigma_{\varepsilon 0}^2(Y)$$

$$\sigma_{Z_1}^2(Y) = \theta_1^2 + 2\theta_1\delta_{11}X_1 + \delta_{11}^2X_1^2 \qquad \sigma_{Z_2}^2(Y) = \delta_{12}^2X_1^2 + \delta_{21}^2X_2^2$$

$$Cov(Z_1\Theta_1, Z_2\Theta_2) = \theta_1\delta_{21}X_2 + \delta_{11}\delta_{21}X_1X_2 \tag{8.13}$$

Por lo tanto, la aproximación por métrica no-resumen no recoge parte de la variabilidad transmitida por los propios factores ruido a estudio (y no por otros factores W's como ocurría en el apartado anterior).

$$2Cov(Z\Theta, Z^*\Theta^*) + \sigma_{Z^*}^2(Y)$$

Podemos observar las diferencias existentes entre las dos aproximaciones a $\sigma^2(Y)$:

- Surgen factores distintos afectando a $\sigma^2(Y)$: por ejemplo el factor X_2 sólo aparece en la aproximación por métricas resumen;

- Surgen efectos nuevos afectando a $\sigma^2(Y)$: la aproximación por métricas resumen cuenta con los efectos β_2, β_{12} y β_{22} que no aparecen en la otra aproximación;

- Hay efectos comunes a los dos métodos pero de diferente magnitud: por ejemplo el efecto asociado a X_1^2, $\beta^2{}_1$.

Por lo tanto, podemos encontrarnos con dos modelos muy diferentes para $\sigma^2(Y)$ dependiendo de la influencia de los efectos en Z* omitidos en el modelo para la respuesta *Y*. Algunas situaciones son:

- Aproximaciones a $\sigma^2(Y)$ contendiendo distintos factores X's;

- Aproximaciones a $\sigma^2(Y)$ con distintos efectos del mismo factor;

- Aproximaciones a $\sigma^2(Y)$ con diferente magnitud del mismo efecto.

A continuación mostramos cómo influyen los efectos no seleccionados en el modelo para la respuesta *Y* en la aproximación por métricas no-resumen a $\sigma^2(Y)$ y las consecuencias prácticas de este hecho.

8.2.2 Contribución de los efectos de poca magnitud en el modelo para Y al modelo de la variabilidad

Uno de los aspectos más interesantes que hemos descubierto en la investigación que estamos presentando es que los métodos habituales de determinación de modelos para $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas no-resumen, cuando la respuesta *Y* admite una expresión como la que hemos mostrado anteriormente, no son adecuados en situaciones que ocurren con mucha frecuencia.

Para verlo basta con relacionar los coeficientes del modelo de la respuesta *Y* con los del modelo para $\sigma^2(Y)$ y reproducir el entorno de trabajo en la práctica experimental.

Es decir, suponemos un modelo para *Y* como el que sigue con una única fuente de variación debida a los factores ruido Z´s,

$$Y = \mu + \sum_{l=1}^{r} \theta_l Z_l + \sum_{i=1}^{k}\sum_{l=1}^{r} \delta_{il} X_i Z_l + \varepsilon$$

con "ε" independiente del resto de la expresión.

Si ahora deducimos el modelo para $\sigma^2(Y)$ asumiendo $\sigma^2(Z)=1$ para todos los factores ruido Z's, nos encontramos con un polinomio de segundo orden en los factores de control cuyos coeficientes pueden expresarse a partir de los coeficientes del modelo para *Y*,

$$\boxed{\begin{array}{l} \sigma^2(Y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i X_i + \sum_{i \neq j}^{k} \beta_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} X_i^2 + \sigma_\varepsilon^2(Y) \\[2ex] \beta_0 = \sum_{l=1}^{r} \theta_l^2 \qquad \beta_i = 2\sum_{l=1}^{r} \theta_l \delta_{il} \qquad \beta_{ij} = 2\sum_{l=1}^{r} \delta_{il}\delta_{jl} \qquad \beta_{ii} = \sum_{l=1}^{r} \delta_{il}^2 \end{array}}$$

Por lo tanto el grado de significación de un efecto en el modelo para $\sigma^2(Y)$ depende de una combinación lineal de productos de efectos en el modelo para *Y* pudiéndose dar situaciones con implicaciones prácticas relevantes. Dos de estas situaciones son:

- Podemos tener un único efecto δ_{il} de magnitud importante asociado a la interacción del factor X_i con el factor ruido Z_l y ser el efecto principal β_i en el modelo para $\sigma^2(Y)$ nulo debido a que $\theta_l = 0$;

- Podemos tener todos los efectos δ_{il} asociados a las interacciones del factor X_i con cada factor ruido Z_l de pequeña magnitud y encontrarnos con un efecto β_i de gran magnitud en el modelo para $\sigma^2(Y)$ debido al peso de los términos θ_l en cada sumando y al peso global del sumatorio.

Como en la práctica el método más utilizado para seleccionar los efectos significativos en el modelo para *Y* es a partir del gráfico de los efectos en "papel probabilístico normal" o a partir de los test individuales de significación en un modelo de regresión, a la hora de construir el modelo para $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas no-resumen no se cuenta con muchos de los dobles productos "$\delta_{il}\ \theta_l$" o "$\delta_{il}\ \delta_{jl}$" por no haberse seleccionado uno de los efectos que lo integran. Esto puede ocasionar que el modelo resultante recoja sólo de forma parcial la contribución de los factores ruido a la variabilidad.

Por lo tanto nos podemos encontrar habitualmente con modelos para $\sigma^2(Y)$ mal estimados con métricas no-resumen.

8.2.3 Estrategias a adoptar para estimar adecuadamente la variabilidad con métricas no-resumen

Cuando la experimentación se ha llevado a cabo dirigida a estimar el modelo para Y y no se ha utilizado una matriz producto, sólo queda estimar $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas no-resumen. Proponemos dos estrategias:

<u>Estrategia 1: Estimar el modelo completo para *Y*</u>

Estimar todos los coeficientes del modelo para $\sigma^2(Y)$ basándose en todos los coeficientes, significativos o no, del modelo de Y según la relación que se adjunta en el Anexo 1

A continuación llevar estos valores, excepto el de la constante, a un gráfico en "papel probabilístico normal" y seleccionar como significativos aquellos que se alejan de la recta. (Esto se puede hacer porque todos los coeficientes se calculan a partir del mismo número de sumandos de dobles productos de coeficientes de Y, los cuales tienen el mismo error estándar).

El modelo resultante para $\sigma^2(Y)$ estará formado por los términos significativos seleccionados de esta manera y no a partir de los coeficientes significativos en el modelo para Y.

Esta estrategia tiene un problema, que el modelo para Y está sobreparametrizado y se acaban seleccionando coeficientes que teóricamente son nulos pero que no presentan tal valor en la práctica.

Para evitar este hecho proponemos una segunda opción

<u>Estrategia 2: Seleccionar la parte del modelo para *Y* asociada a la variabilidad en 3 pasos</u>

Esta estrategia está orientada a seleccionar los efectos asociados a la variabilidad en el modelo para Y siendo "más permisivo" a la hora de seleccionarlos, es decir, recogiendo los efectos pequeños que pueden pasar desapercibidos.

Para ello, lo primero que recomendamos hacer es eliminar del modelo para Y aquellos efectos que sólo afectan a la localización de la superficie ya que en general son de mayor magnitud que los efectos asociados a la variabilidad y pueden afectar a la selección de términos para el modelo de la dispersión. Es decir, trabajaremos con Y^* aunque seguiremos llamándole por comodidad Y:

$$\text{Paso} \quad 1: \qquad Y^* = Y - \mu(X's)$$

A continuación, se estiman todos los efectos asociados a la variabilidad en el modelo para *Y** (incluidos los términos de orden superior si es posible) que permita el diseño. Los efectos se llevan a un gráfico en "papel probabilístico normal" y se seleccionan los efectos claramente significativos. Así, si Z es la matriz asociada a los efectos asociados a los factores ruido que han sido seleccionados a partir del gráfico, se construye el modelo

$$\text{Paso 2}: \qquad Y^* = \mathrm{Z}\Theta + \varepsilon_0$$

En aquellos casos donde en el paso anterior algún efecto domine de forma clara sobre el resto, o el número de efectos no seleccionados sea muy elevado se puede volver a modelar los residuos del anterior modelo en función de los efectos restantes con el fin de detectar algún efecto más a incluir en el grupo de seleccionados. Si Z^* incluye estos nuevos efectos tendríamos el modelo:

$$\text{Paso 3}: \qquad \varepsilon_0 = \mathrm{Z}^*\Theta^* + \varepsilon_1$$

De esta forma tendremos finalmente el modelo candidato a utilizar en la aproximación a $\sigma^2(Y)$ por métricas no-resumen.

$$Y = \mu + \mathrm{Z}\Theta + \mathrm{Z}^*\Theta^* + \varepsilon_1$$

8.3 Utilización de otras métricas alternativas para estudiar la dispersión con métricas resumen

En los apartados 1 y 2 de este capítulo ha quedado claro que la estimación que se obtiene de $\sigma^2(Y)$ a partir de métricas no-resumen es muy sensible a la elección del modelo, opinión que ya habíamos leído en otros autores (Shoemaker, Tsui y Wu (1991)) pero que no lo habíamos visto mostrado con la claridad que creemos hemos expuesto en dos situaciones muy concretas.

Por otra parte, la estimación de $\sigma^2(Y)$ por métricas resumen partiendo de modelos lineales es sensible a la función "f" subyacente que relaciona la respuesta de interés y los factores a estudio:

$$Y = f(X's, Z's) + \varepsilon$$

En prácticamente toda la tesis se han considerado modelos lineales de segundo orden incompletos para "f" y en estos casos $\sigma^2(Y)$ podía ser expresada también como un modelo lineal en los factores X's aunque utilizando términos de mayor orden. Sin embargo resulta razonable pensar que la función "f" no siempre admita una buena aproximación por modelos de este tipo (por ejemplo si $E(Y)$ y $\sigma^2(Y)$ no son independientes) por lo que el estudio con métricas resumen puede quedar afectado.

En la práctica, de cara a evitar relaciones "f" complejas, los experimentadores tienden a seleccionar la característica de interés Y intentando que tenga sentido la aproximación lineal con los factores de control (Wu y Wu (1997)) y en un segundo término con los factores ruido (Z's) ya que se sabe mucho menos de ellos. Lo que resulta más complicado, y de hecho no se hace, es seleccionar la respuesta Y con la finalidad de que el modelo para $\sigma^2(Y)$ sea lineal en los factores de control y no necesite términos de grado superior. Queremos decir con esto que es más probable necesitar modelos complejos para $\sigma^2(Y)$ que para $E(Y)$.

Si se desea hacer un esfuerzo serio en estimar $\sigma^2(Y)$ apoyamos la tesis de Taguchi (1986) que es mejor partir de métricas resumen a partir de diseños apropiados (matrices producto con factores de control a más de 2 niveles). En tal caso se pueden considerar diferentes métricas resumen dependiendo de la hipótesis subyacente de relación entre $E(Y)$ y $\sigma^2(Y)$.

Las métricas resumen más utilizadas son σ^2, σ, $log(\sigma)$ y S/R. Así, una métrica será adecuada cuando:

- Diferencie claramente aquellos factores que afectan sólo a $E(Y)$ de aquellos que afectan a $\sigma^2(Y)$;

- Estime adecuadamente la relación existente identificando lo mejor posible las condiciones robustas.

Berubé y Wu (1998) realizan un estudio comparativo del comportamiento de *S/R* y *log(s^2)* ante determinadas estructuras de la relación entre *Y* con los factores de control X's y Z's diferenciando entre los factores X's que sólo afectan a la media de *Y* (factores "X_a") y los factores que pueden afectar tanto a la media como a la dispersión transmitida por los factores Z's (factores "X_d"). (En su estudio hay ocasiones en que introducen los factores "d" en la componente asociada al error experimental; la situación que hemos planteado en el apartado 1 pertenecería a este grupo).

Las estructura seleccionadas son:

- Modelo Aditivo: $Y = \mu(a,d)+[(\phi 1(d)Z_1+\ldots\ldots \phi k(d)Z_K)+ \theta(d)\varepsilon]$ (8.14)

- Modelo Aditivo con estructura log-lineal: $Y = \mu(a,d) + e^{\phi(d)}z + \varepsilon$ (8.15)

- Varianza proporcional a media: $Y = \mu(a,d) + \mu^{\gamma}\phi(d)\ z + \varepsilon$ (8.16)

  $Y = \mu(a,d) + e^{\gamma\mu(a,d) + \phi(d)} z + \varepsilon$ (8.17)

- Multiplicativo en los factores ruido: $Y = \mu(a,d) + e^{\phi(d)\, z}\ \varepsilon$ (8.18)

Berubé y Wu (1998) concluyen el estudio diciendo que:

- La clasificación correcta de los factores "X_a" y "X_d" utilizando *S/R*, log(s) u otros depende de la estructura de relación *Y*= f(*E(Y)*,*V(Y)*) y *S/R* es más sensible a esta estructura y a la magnitud de los coeficientes por lo que no se recomienda su uso generalizado;

- *S/R* identifica bien los factores "X_a" y "X_d" y las condiciones óptimas cuando $\sigma(Y)$ es linealmente proporcional a "μ", situaciones (8.16) y (8.17); cuanto más nos alejamos de esta situación más incorrecta surge la identificación de los factores y las condiciones óptimas, siendo extremadamente sensible a los valores de los coeficientes de los factores de control y de los factores ruido. En la práctica, se desconoce tanto la estructura subyacente como los coeficientes por lo tanto no se aconseja el uso generalizado de *S/R*;

- *Log(s)* también puede dar lugar a análisis incorrectos dependiendo de cómo es la estructura del modelo subyacente, aunque esta métrica es menos dependiente que

S/R de la relación "f". Funciona bien para modelos con estructura log-lineal como el expuesto en (8.15) y modelos multiplicativo sencillos como el expuesto en (8.18);

- Concluyen, que a partir de una recopilación llevada a cabo de casos publicados en la literatura estadística, en la mayoría de los casos en que se asume una relación de media-varianza, esta relación no se ha detectado en los datos y los datos se pasaron a analizar en la escala original con dos modelos por separado para la localización y la dispersión;

Por lo tanto, si en la práctica se desconoce la estructura subyacente "f" y se realizan pocas pruebas experimentales será difícil detectar a partir de los datos estructuras complejas de relación por lo que seguramente trabajaremos con la escala original y a la hora de estudiar la variabilidad estudiaremos la posibilidad de trabajar con "s" o "log(s)".

8.4 Conclusiones

Las dos razones principales que llevan a un investigador a aproximar la superficie $\sigma^2(Y)$ por métricas no-resumen son:

- Dar prioridad a la aproximación de la relación entre la respuesta *Y* con los factores a estudio quedando en un segundo término el obtener un modelo que aproxime $\sigma^2(Y)$;

- El supuesto ahorro económico que se logra con los diseños alternativos a la matriz producto que se utilizan en este método (Jones (1990), Wu y Zhu (1999) y Bisgaard (2000) entre otros).

Hemos podido comprobar que aunque el modelo para *Y* aporta información valiosa de cara a un entendimiento de las relaciones entre los factores X's y Z's con la respuesta, la aproximación que se obtiene de $\sigma^2(Y)$ a partir de este modelo es muy sensible al modelo estimado para *Y*. Si se llega a esta aproximación de la manera que se hace habitualmente en la práctica, es fácil que no se recoja la variabilidad debida a otras fuentes de variación ajenas a los factores Z's o se recoja de forma parcial la variabilidad provocada por los propios factores Z's.

Por lo tanto, si el modelo para la respuesta *Y* va a ser utilizado para deducir el modelo para $\sigma^2(Y)$, se ha de tener un cuidado especial a la hora de seleccionar la parte asociada a los factores ruido. Por ello proponemos la siguiente estrategia de cara a evitar las dos situaciones anteriores que han sido comentadas de una forma más extensa a lo largo de este capítulo.

Estrategia

Paso 1: Eliminación de los efectos que sólo afectan a la localización

$$\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{e}_0$$

Paso 2: Regresión de e_0 en función de los factores ruido Z's y sus interacciones con los factores de control X's. Seleccionar los efectos a incluir en el modelo en dos pasos según lo comentado en el apartado 8.2.3.

$$e_0 = \mathrm{Z}\Theta + \mathrm{Z}^*\Theta^* + e_1$$

Paso 3: Tomar alguna de las transformaciones e_1^* de e_1 propuestas en el apartado (8.1.3) y hacer una regresión de e_1^* sobre los factores de control X's, los factores ruido a estudio Z's y otros factores W's que se cree hayan podido afectar a la respuesta, para detectar otras oportunidades de reducción de variabilidad:

$$e_1^* = XD_1 + ZD_2 + WD_3 + e_2$$

Para la selección de las condiciones óptimas hay que estudiar e_0 y e_1^* conjuntamente teniendo en cuenta además que están en distinta escala.

En otras situaciones, el objetivo de reducción de la variabilidad en la respuesta es prioritario y por ello es muy importante tener un buen modelo para $\sigma^2(Y)$ en las condiciones de los factores de control, independientemente de las causas u orígenes de esta variabilidad, por lo que parece lógico hacer todo lo posible por modelar directamente $\sigma^2(Y)$ sin pasar por un modelo para *Y,* y darle más importancia a la selección del diseño siguiendo este objetivo.

Los diseños apropiados para lograr este objetivo están basados en una matriz producto y deberían contar con al menos tres niveles en los factores de control, ya que es muy posible que la superficie $\sigma^2(Y)$ u otra similar no se pueda aproximar por polinomios de primer orden en la región experimental. (Además, este mismo diseño se podrá utilizar para estimar el modelo que relaciona *Y* en función de los factores X's y Z's y así profundizar más sobre la relación).

En estos casos se puede pensar en la utilización de diferentes métricas de las denominadas "métricas resumen" para el estudio de la variabilidad ($\sigma^2(Y)$, $log(\sigma^2)$, *S/R*, …) a partir de modelos polinómicos. Aunque hay estudios que demuestran que unas métricas se comportan mejor que otras antes estructuras teóricas determinadas para *Y*, (Berubé y Wu (1998)), en la práctica ni se conocen estas estructuras, ni las pocas condiciones experimentales permiten detectarlas, por lo que se recomienda trabajar con métricas más sencillas como "$\sigma(Y)$" (o *log((Y)* por razones de distribución muestral).

Si se experimenta con un diseño en forma de matriz producto, se recomienda obtener las dos aproximaciones a $\sigma^2(Y)$ por métricas resumen y métricas no-resumen y comprobar en caso de diferencias si ello es debido a una de las dos situaciones descritas en este capítulo (pudiendo existir otras causas).

En general el número total de condiciones experimentales necesarias para llevar a cabo la aproximación a $\sigma^2(Y)$ por uno u otro método es muy diferente (en general las aproximaciones por métricas no-resumen requieren menos condiciones experimentales) y es una de la causa que determina la elección del método.

Sin embargo en la mayoría de la situaciones prácticas no tiene sentido comparar los diseños en cuanto al número total de condiciones experimentales ya que:

- Las condiciones experimentales no son homogéneas en cuanto a coste;
- El orden de experimentación de las condiciones de una matriz producto no tiene porqué ser totalmente aleatorio.

Este es un campo que ha sido parcialmente investigado por algunos autores (Jones (1990), Wu y Hamada (2000) y Bisgaard (2000)) pero creemos que tiene mas posibilidades.

Por último, una vez estudiado el tema de la obtención de aproximaciones a $\sigma^2(Y)$ veremos cómo seleccionar las condiciones robustas cuando el problema se analiza de una manera u otra. Esto es lo que haremos en el capítulo 10 antes de plasmar las conclusiones generales.

Anexo 1: *Relación entre* Y *y* σ²(Y) *para un modelo general*

Si tomamos como modelo de partida para *Y* el modelo general que se presenta a continuación donde los coeficientes pueden ser estimados con un diseño factorial a 2 niveles apropiado,

$$Y = \mu + \sum_{l=1}^{r} \theta_l Z_l + \sum_{l \neq l^*}^{r} \theta_{ll^*} Z_l Z_{l^*} + \sum_{i=1}^{k} \sum_{l=1}^{r} \delta_{il} X_i Z_l + \sum_{i \neq j}^{k} \sum_{l=1}^{r} \delta_{ijl} X_i X_j Z_l + ... + \varepsilon = \tag{8.19}$$

Para la obtención de $\sigma^2(Y)$ suponemos que los factores Z's son independientes y con $\sigma^2(Z_i)=1$ para todos. El modelo que se obtiene para $\sigma^2(Y)$ es más complejo en los factores de control X's tal y como era de esperar:

<u>Expresión general</u>

$$\sigma^2(Y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i X_i + \sum_{i \neq j}^{k} \beta_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{h \neq i \neq j}^{k} \beta_{hij} X_h X_i X_j + ... + \sigma^2(\varepsilon)$$

$$\beta_0 = \sum_{l=1}^{r} \left(\theta_l^2 + \sum_{\substack{l^*=1 \\ l^* \neq l}}^{r} \theta_{ll^*}^2 + ... + \right)$$

$$\beta_i = 2\sum_{l=1}^{r} \left(\theta_l \delta_{il} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{k} \delta_{jl} \delta_{ijl} + \sum_{\substack{l^*=1 \\ l^* \neq l}}^{r} \theta_{ll^*} \delta_{ill^*} + \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq i,j}}^{k} \delta_{hjl} \delta_{hijl} + \sum_{\substack{l^{**}=1 \\ l^{**} \neq l, l^*}}^{r} \theta_{ll^*l^{**}} \delta_{ill^*l^{**}} + ... \right)$$

$$\beta_{ij} = 2\sum_{l=1}^{r} \left(\theta_l \delta_{ijl} + \delta_{il} \delta_{jl} + \sum_{\substack{l^*=1 \\ l^* \neq l}}^{r} \theta_{ll^*} \delta_{ijll^*} + \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq i,j}}^{k} \delta_{hil} \delta_{hjl} + \sum_{\substack{l^*=1 \\ l^* \neq l}}^{r} \delta_{ill^*} \delta_{jll^*} + \sum_{\substack{g=1 \\ g \neq h,i,j}}^{k} \delta_{ghil} \delta_{ghjl} + ... \right)$$

$$\beta_{ii} = \sum_{l=1}^{r} \left((\delta_{il})^2 + (\delta_{ill})^2 + ... \right)$$

$$\beta_{hij} = 2\sum_{l=1}^{r} \left(\delta_{il} \delta_{hjl} + \delta_{jl} \delta_{hil} + \delta_{hl} \delta_{ijl} + \theta_l \delta_{hijl} + \sum_{\substack{g=1 \\ g \neq h,i,j}}^{k} \delta_{gil} \delta_{ghjl} + \sum_{\substack{l^*=1 \\ l^* \neq l}}^{r} \theta_{ll^*} \delta_{hijll^*} + ... \right)$$

...