



Departament d'Estadística
i Investigació Operativa

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

PRINCIPIOS DE METODOLOGÍA
DE SUPERFICIE DE RESPUESTA
PARA MODELOS LOGÍSTICOS

TESIS DOCTORAL

VOLUMEN I: DOCUMENTO PRINCIPAL

PRESENTADA POR: ARTURO T. DE ZAN

DIRECTOR: JOSEP GINEBRA, PHD

BARCELONA, ENERO DE 2006

Índice general

I Principios	1
1. Introducción	2
1.1. Estadística y experimentación	2
1.2. Construcción de modelos empíricos	4
1.3. Principios metodológicos	6
1.3.1. Fases secuenciales en la experimentación	7
1.3.2. Los diseños factoriales	9
1.3.3. La <i>MSR</i> y la experimentación secuencial	12
1.4. Alcances de esta tesis	12
1.4.1. Objetivo primario	13
1.4.2. Consideraciones específicas de estudio	13
1.4.3. Algunas de nuestras preguntas de investigación	16
2. Modelos clásicos	18
2.1. Introducción	18
2.2. Modelos normales	19
2.2.1. Caso normal lineal	23
2.3. Modelos no normales: introducción a los <i>MLG</i>	25
2.3.1. Transformación de la respuesta	26
2.3.2. Los <i>MLG</i> como alternativa a transformar	28
2.3.3. Características fundamentales de los <i>MLG</i>	29
2.3.4. Los <i>MLG</i> y el diseño de experimentos	30
3. Diseños estáticos	33
3.1. Introducción	33
3.2. El enfoque estático del problema	34
3.3. El modelo logístico como herramienta	36
3.4. Aspectos sobre el problema general del diseño	37
3.4.1. Generalidades	37
3.4.2. Propiedades deseables para los diseños	38
3.4.3. Aspectos más formales	39
3.4.4. Calidad de los diseños para modelos lineales	40
3.4.5. Sobre la ortogonalidad en general	41
3.4.6. Calidad de los diseños para modelos no lineales	44
3.4.7. Comentarios sobre los diseños óptimos	45

3.4.8. Diseños óptimos para <i>MDB</i>	47
3.4.9. Ejemplo: diseños con un solo factor	48
3.4.10. Modelos no lineales	49
3.4.11. Ejemplo: el diseño factorial 2^2	51
4. Diseños dinámicos	53
4.1. Introducción	53
4.2. Motivación	54
4.3. Breves notas históricas	55
4.3.1. Modelos clásicos de <i>MSR</i>	55
4.3.2. Enfoque estático y <i>MLG</i>	56
4.3.3. Enfoque dinámico, <i>MSR</i> y <i>MLG</i> : una revisión crítica	57
4.3.4. Una perspectiva sobre el estado actual del arte	58
4.4. Ejemplo: diseños con dos factores	60
4.5. El enfoque dinámico de diseños	63
4.5.1. Introducción	63
4.5.2. Funciones de aproximación	64
4.5.3. Secuencia de aproximaciones	64
4.6. Superficies de respuesta para <i>DB</i>	70
4.6.1. Generalidades	70
4.6.2. Algunos ejemplos	70
II Estrategias	75
5. Definición de estrategias	76
5.1. Introducción	76
5.2. Consideraciones de la estrategia propuesta	77
5.2.1. Superficie teórica	77
5.2.2. Presupuesto fijo	77
5.2.3. Respuesta	78
5.2.4. Factores y niveles	78
5.2.5. Modelos	79
5.2.6. Diseños factoriales y <i>MLG</i>	79
5.2.7. Variables de estudio propuestas	80
5.2.8. Niveles para las variables de estudio	80
5.2.9. Objetivo	80
5.2.10. Etapas de estudio	80
5.2.11. Evaluación de estrategias	83
5.3. Desarrollo de las estrategias	84
5.3.1. Desarrollos: primera parte	85
5.3.2. Desarrollos: segunda parte	86

6. Desarrollos: primera parte	87
6.1. Introducción	87
6.2. Estudio de un caso	88
6.2.1. Introducción	88
6.2.2. Generación de datos	88
6.2.3. Selección de un caso	90
6.2.4. Localización del primer centro de experimentación	95
6.3. Primer factorial	101
6.3.1. Introducción	101
6.3.2. Lados del factorial y primer diseño	101
6.3.3. Generación de puntos simulados	104
6.4. Ajuste del primer modelo y primer salto	106
6.4.1. El predictor lineal	107
6.4.2. El modelo logístico	107
6.4.3. Selección de términos del modelo ajustado	108
6.4.4. El modelo elegido	112
6.4.5. El primer salto	113
6.5. Segundo factorial	115
6.6. Ajuste del segundo modelo y segundo salto	116
6.7. Tercer factorial	118
6.8. Ajuste del modelo final	119
6.9. El próximo paso	121
7. Desarrollos: segunda parte	124
7.1. Introducción	124
7.2. Desarrollo de la estrategia	126
7.3. Resumen de resultados	130
7.3.1. Ángulos y saltos	130
7.4. Evaluación de resultados	132
7.4.1. Algunas consideraciones iniciales	132
7.4.2. Evaluación del criterio I: cantidad de información	135
7.4.3. Evaluación del criterio II: proximidad al máximo	139
7.5. Algunas observaciones	141
III Criterios de evaluación	143
8. L y S variables	144
8.1. Introducción	144
8.2. Definición de la matriz LS	145
8.2.1. Sobre la elección de niveles para L y S	145
8.2.2. Gráficos de evaluación	149
8.3. Criterio I: cantidad de información	149
8.3.1. MIF : determinante y su logaritmo	152
8.4. Criterio II: proximidad al máximo	158
8.4.1. Probabilidad $\pi(\hat{\mathbf{x}}_{\text{máx}}, \boldsymbol{\beta})$	158

8.4.2.	Transformación logit de $\pi(\hat{\mathbf{x}}_{\text{máx}}, \boldsymbol{\beta})$	160
8.4.3.	Transformación angular de $\pi(\hat{\mathbf{x}}_{\text{máx}}, \boldsymbol{\beta})$	161
8.4.4.	Transformación de Freeman-Tukey de $\pi(\hat{\mathbf{x}}_{\text{máx}}, \boldsymbol{\beta})$	163
8.5.	Algunas observaciones	164
9.	<i>L, S y w variables</i>	167
9.1.	Introducción	167
9.2.	Evaluaciones para <i>w</i> variable	168
9.2.1.	Esquema de estudio	168
9.2.2.	Representaciones gráficas de las evaluaciones	170
9.2.3.	Algunas observaciones	174
9.3.	Descripción del mejor caso observado	175
9.3.1.	Exploración secuencial para $L = L_5$ y $S = S_5$	181
9.3.2.	Observaciones finales	184
9.4.	El penúltimo paso	185
10.	Conclusiones	187
10.1.	Aspectos más relevantes	187
10.1.1.	Resumen general	187
10.1.2.	El problema expresado más formalmente	188
10.1.3.	Sobre la <i>MSR</i> “clásica” y “no clásica”	190
10.1.4.	Sobre las variables de estudio	191
10.1.5.	Sobre las estrategias y los estadísticos	192
10.2.	Sobre la aplicación práctica	192
10.2.1.	¿Qué hemos aprendido?	193
10.2.2.	¿En qué ámbitos pueden aplicarse estas ideas?	194
10.2.3.	¿Qué potenciales beneficios podrían esperarse?	195
10.2.4.	¿Cómo podemos llevar a la práctica estos aspectos?	195
10.2.5.	En la fábrica, el taller o el laboratorio	196
10.3.	Posibles líneas de investigación futura	197
10.3.1.	Extensiones dentro del contexto de <i>MDB</i>	198
10.3.2.	Otras posibles extensiones	204
10.4.	Reflexiones finales	207
IV	Apéndices	226
A.	Complementos de <i>MSR</i>	227
A.1.	El método clásico de <i>MSR</i>	227
A.2.	Los modelos de regresión en <i>MSR</i>	228
A.3.	Sobre los factores	230
A.4.	Sobre la función respuesta	231
A.4.1.	Aproximaciones polinómicas para la respuesta	231
A.4.2.	El modelo estimado: la superficie de respuesta	234
A.4.3.	El punto estacionario	235
A.4.4.	Análisis canónico de la superficie ajustada	235

B. Complementos de <i>MLG</i>	237
B.1. Caracterización de los <i>MLG</i>	237
B.1.1. Presentación	237
B.1.2. Familia exponencial de distribuciones	238
B.1.3. Sobre la estimación de parámetros	241
B.1.4. Caracterización fundamental de los <i>MLG</i>	242
B.2. Un caso particular de los <i>MLG</i> : los <i>MDB</i>	242
B.2.1. Introducción	242
B.2.2. Definición de las variables	243
B.3. Modelos para la probabilidad de éxito	244
B.3.1. Introducción	244
B.3.2. Génesis: el modelo de Bernoulli	244
B.3.3. Extensión al modelo binomial	246
B.3.4. Sobre la componente aleatoria	246
B.3.5. Modelos para $\pi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$: generalidades	247
B.4. Medidas de calidad de ajuste	249
B.4.1. A partir de la razón de verosimilitudes: la devianza	249
B.4.2. A partir del estadístico de Pearson	254
B.4.3. Validación: análisis residual	254
B.4.4. Otras comprobaciones	257
B.4.5. Selección de modelos	258
C. Recursos informáticos	259
C.1. Sobre la elección de R	259
C.2. Serie de programas BETAS	260
C.2.1. Descripción general	260
C.2.2. Resumen de entradas y salidas	260
C.2.3. Detalle de entradas y salidas por módulos	261
C.2.4. Líneas de programa en R	261
C.3. Serie de programas CRJER	272
C.3.1. Descripción general	272
C.3.2. Resumen de entradas y salidas	272
C.3.3. Detalle de entradas y salidas por módulos	274
C.3.4. Líneas de programa en R	275
C.4. Serie de programas MEDCA	326
C.4.1. Descripción general	326
C.4.2. Resumen de entradas y salidas	327
C.4.3. Detalle de entradas y salidas por módulos	328
C.4.4. Líneas de programa en R	328
C.5. Programa GRAPH-UNI	349
C.5.1. Descripción general	349
C.5.2. Resumen de entradas y salidas	350
C.5.3. Detalle de entradas y salidas por módulos	350
C.5.4. Líneas de programa en R	350

Índice de figuras

3.1. Relación entre el valor esperado de la respuesta —sigmoide— y un factor de variabilidad, mediante el modelo logístico.	49
3.2. Representación genérica de una función exageradamente no lineal en sus parámetros.	50
4.1. Una idea de proceso real que se presupone depende de dos factores x_1 y x_2 , representado mediante una superficie de respuesta $\pi_T(x_1, x_2, \beta^*)$, en la que el subíndice T refiere a que es de carácter “teórica” en un principio, y el superíndice del vector β refiere a su carácter desconocido.	61
4.2. Representación de una respuesta en función de dos factores de variabilidad, que sigue una distribución logística. Sobre alguna parte de la región $ABCD$ habrá que definir los puntos de diseño que permitan conocer $\pi(\mathbf{x}, \beta)$	62
4.3. Proyección de la superficie no lineal a dos niveles sobre el plano de los factores, formando una figura rectangular de vértices $ABCD$	63
4.4. Idea de aproximación de la superficie teórica mediante un modelo ajustado de primer orden.	65
4.5. Esquema de aproximaciones secuenciales mediante modelos de primer orden.	66
4.6. Situación en el plano de los factores de las aproximaciones sucesivas con modelos secuenciales de primer orden.	68
4.7. Idea gráfica de la transición de aproximaciones de un modelo de primer orden a otro de segundo, en las zonas de curvatura de la superficie teórica.	69
4.8. Ejemplo 1: “cascada diagonal simple” de superficie de respuesta en escala logística.	71
4.9. Ejemplo 2: “punto de silla” de superficie de respuesta en escala logística.	71
4.10. Ejemplo 3: “cascada de doble cuadrante rectangular” de superficie de respuesta en escala logística.	72
4.11. Ejemplo 4: “cascada en cruz-diagonal” o “cascada de doble cuadrante agudo” de superficie de respuesta en escala logística.	72
4.12. Ejemplo 5: “semi teja-cruz oblicua” de superficie de respuesta en escala logística.	73
4.13. Ejemplo 6: “mínimo” de superficie de respuesta en escala logística. . .	73
4.14. Ejemplo 7: “cascada en cruz-cruz” o “cascada doble cruz” de superficie de respuesta en escala logística.	74

5.1.	Definición del estadístico $\pi(\hat{x}_{\text{máx}}, \beta)$ como medida de calidad del ajuste.	84
6.1.	Superficie teórica en escala logística correspondiente al modelo teórico $\pi(\mathbf{x}, \beta) = \frac{\exp(2+x_1-2x_2-2x_1^2-2x_2^2+2x_1x_2)}{1+\exp(2+x_1-2x_2-2x_1^2-2x_2^2+2x_1x_2)}$	93
6.2.	Curvas de nivel de la superficie teórica en escala logística correspondiente al modelo teórico $\pi(\mathbf{x}, \beta) = \frac{\exp(2+x_1-2x_2-2x_1^2-2x_2^2+2x_1x_2)}{1+\exp(2+x_1-2x_2-2x_1^2-2x_2^2+2x_1x_2)}$	94
6.3.	Esquema de la elección de una curva de nivel de referencia sobre la cual definir el primer centro de experimentación.	96
6.4.	Localización de la curva de nivel $\pi_{5\% \text{ máx}} = \text{cte.}$ sobre el plano de los factores.	97
6.5.	Situación del primer diseño en el plano de los factores: el centro de experimentación se determina al cortar la curva de nivel correspondiente a $\pi_{5\% \text{ máx}}$ con la recta que pasa por el origen y el máximo.	103
6.6.	Generación aleatoria de puntos en torno al valor esperado de la función teórica, para un valor genérico de los factores. El valor $\pi(\mathbf{x}_0, \beta)$ será justamente el parámetro prob de esta función de R para este caso.	106
6.7.	Primero y segundo diseños y su aproximación hacia el punto máximo.	117
6.8.	Los tres factoriales aproximándose secuencialmente hacia el máximo.	120
6.9.	Esquema y definición del ajuste automático de un modelo para un <i>cuadro de puntos</i> compuesto por 15 puntos de diseño, generados aleatoriamente, y para un valor fijo de la terna de variables de estudio w_0 , L_0 y S_0 .	123
7.1.	Esquema inicial de la extensión de estudio a 15 cuadros de puntos para un valor fijo de la terna de variables de estudio w_0 , L_0 y S_0 .	125
7.2.	Resumen del contexto general de los dos criterios propuestos para evaluación de estrategias de exploración de superficies de respuesta.	134
8.1.	Mediante la notación $T(L, S)$ se representan los estadísticos de comparación $\det(\mathbf{I}_F)$ y $\pi(\hat{\mathbf{x}}_{\text{máx}}, \beta)$, como así también las transformaciones que se definan a partir de ellos. En cada caso, se presentarán las figuras específicas.	150
8.2.	Situación correspondiente a los 25 casos de estudio que se generan al considerar 5 niveles para las variables L y S , manteniendo $w = 5\%$.	151
8.3.	Rejilla de determinantes para todos los casos de L y S , estimando π con pr.obs.	152
8.4.	Rejilla de los logaritmos de los determinantes para todos los casos de L y S , estimando π con pr.obs.	154
8.5.	Rejilla de los determinantes para todos los casos de L y S , estimando π con pi.hat.	155
8.6.	Rejilla de los logaritmos de los determinantes para todos los casos de L y S , estimando π con pi.hat.	157
8.7.	Rejilla de probabilidades calculadas en el máximo del modelo ajustado para todos los casos de L y S .	159
8.8.	Rejilla de probabilidades calculadas en el máximo del modelo ajustado, en escala logit, para todos los casos de L y S .	160

8.9.	Rejilla de probabilidades calculadas en el máximo del modelo ajustado, en escala de la transformación angular, para todos los casos de L y S .	162
8.10.	Rejilla de probabilidades calculadas en el máximo del modelo ajustado, en escala de la transformación Freeman-Tukey, para todos los casos de L y S .	163
8.11.	Cuadro de resumen para todos los estadísticos de medida de calidad de ajuste evaluados en todos los niveles de L y S .	165
9.1.	Organización esquemática de la información que se ha definido para encontrar los niveles de las tres variables de estudio — w , L y S — que maximicen los dos criterios propuestos para medir la calidad del ajuste.	169
9.2.	Variación de los logaritmos de los determinantes máximos con los niveles 5 %, 10 %, 15 %, 20 % y 25 % de la variable w .	172
9.3.	Variación de las probabilidades calculadas en el máximo ajustado del modelo teórico con los niveles 5 %, 10 %, 15 %, 20 % y 25 % de la variable w .	174
9.4.	Situación general del primer centro de experimentación para el nivel $\pi_{10\% \text{máx}}$ de la superficie teórica.	176
9.5.	Principales resultados obtenidos al calcular los estadísticos correspondientes al valor $w = 5\%$.	180
A.1.	Esquema simplificado de la estrategia secuencial de experimentación en el contexto de la Metodología de Superficie de Respuesta. [Adaptado de BOX <i>et al.</i> (1988)].	229
C.1.	Características principales de los programas de la serie BETAS.	261
C.2.	Características principales de los programas de la serie CRJER.	274
C.3.	Características principales de los programas de la serie MEDCA.	328
C.4.	Características principales del programa GRAPH-UNI.	350

Prefacio

En la elaboración de este trabajo, en el que hemos puesto mucho entusiasmo e ilusión, hemos observado en todo momento el llamado *Método Falcioni*¹, el que también complementamos con los siguientes pensamientos:

O'Brien held up his left hand, its back towards Winston, with the thumb hidden and the four fingers extended.

—How many fingers am I holding up, Winston?

—Four.

—And if the party says that it is not four but five, then how many?

—Four.

[...]

—You are a slow learner, Winston —said O'Brien gently—.

—How can I help it? —he blubbered—. How can I help seeing what is in front of my eyes? Two and two are four.

—Sometimes, Winston. Sometimes they are five. Sometimes they are three. Sometimes they are all of them at once. You must try harder. It is not easy to become sane.

[*George Orwell, en Nineteen Eighty-Four (1948)*].

It is curious that when you are watching artillery-fire from a safe distance you always want the gunner to hit his mark, even though the mark contains your dinner and some of your comrades.

[*George Orwell, en Homage to Catalonia (1938)*].

—¿Le tiene miedo a la vejez?

—No, a lo que le tengo miedo es a volverme un viejo choto.

[*José Larralde. Folclorista argentino*].

¹[Referido a *Falcioni, Julio César*. Contemporáneo]. El lector curioso puede consultar la siguiente nota del diario argentino “La Nación”, en donde se explica su exigente y particular forma de trabajo. (Vid. <http://www.lanacion.com.ar/721200>, del 14 de julio de 2005). Un breve panorama de la biografía de este experto ex-futbolista puede verse también en: <http://www.terra.com/deportes/articulo/html/fox210850.htm>, que comenta sus principales hitos como arquero (es decir, “*portero*”) y como director técnico en el fútbol argentino y sudamericano.

Resumen

En esta tesis doctoral abordamos algunos principios para estudiar la *Metodología de Superficie de Respuesta* (que abreviaremos en adelante como *MSR*) para datos que siguen distribuciones binarias (Bernoulli y binomial). El punto de partida elegido ha sido el enfoque clásico de la *MSR*, es decir, en el contexto de modelos lineales y normales y, en particular, a partir del trabajo seminal de BOX Y WILSON (1951). A lo largo de algo más de cinco décadas, muchos estudiosos de este tema han aportado numerosas extensiones a este enfoque clásico, teniendo especial aceptación dentro de los ámbitos de la industria, en la mejora de la calidad de productos y procesos industriales, entre otras. Tres excelentes referencias que refuerzan el uso extensivo de estas aplicaciones son: BOX Y DRAPER (1987), KHURI Y CORNELL (1996) y MYERS Y MONTGOMERY (2002), entre otras.

La revisión del estado del arte que hemos llevado a cabo ha sido profundizada desde dos puntos de vista: el primero, revisando los alcances actuales de la *MSR* clásica, y el segundo, haciendo lo mismo con los *Modelos Lineales Generalizados* (que abreviaremos en adelante como *MLG*). A partir de esta revisión, hemos podido detectar algunos aspectos que hasta el momento de la preparación de este trabajo no se encontraban claramente formulados o planteados de manera adecuada y entendible, o bien se hallaban planteados correctamente, pero su abordaje no pasaba de un mero planteamiento de necesidad de mayor profundización.

A la luz de esta situación de partida, nos formulamos una pregunta básica: “¿cómo podría proceder el experimentador² cuando la naturaleza de su proceso no sigue los supuestos clásicos de normalidad y linealidad?”. Enlazando esta cuestión con el estado actual del arte en materia de la *MSR*, una segunda pregunta —más precisa que la primera— fue: “¿Cómo podría ser un proceso secuencial de aprendizaje del funcionamiento de un sistema en los que intervengan respuestas de naturaleza binaria en el que se persiga un objetivo determinado³?”.

Para poder investigar con mayor profundidad esta pregunta, y mediante un sustento metodológico lo suficientemente sólido, nos apoyamos en los *MLG*. Estos modelos —a partir de su primera presentación y formulación en el trabajo de NELDER Y WEDDERBURN (1972)— son la herramienta que elegimos para encontrar una metodología de aplicación sistemática, que nos permita buscar modelos adecuados que puedan ajustar respuestas de naturaleza binaria. De igual modo que con la *MSR*, luego de este primer trabajo de *MLG* varios autores han contribuido a extender las aplicaciones de estos modelos. Entre los más citados, podemos citar a: LINDSEY (1997), MCCULLAGH Y NELDER (1998), DOBSON (2001), GILL (2001) y MYERS *et al.* (2002), etc.

²En la práctica industrial, por ejemplo, el perfil de esta función suele ser cubierto por las áreas de Ingeniería de Procesos o por Ingeniería de Calidad, aunque no de forma excluyente. La denominación específica dependerá de la utilizada por cada empresa.

³Por ejemplo: maximizar o minimizar el valor esperado de la respuesta, que este valor esperado alcance un valor objetivo o que la variabilidad del mismo sea mínima dentro de una región de experimentación del sistema.

Con este panorama un poco más claro —y siguiendo el proceso iterativo de generación de conocimiento— volvimos a “afinar” nuestra pregunta de investigación: “¿De qué manera podrían enlazarse la MSR utilizando los MLG como soporte metodológico?”. La falta de antecedentes precisos y “suficientemente completos” sobre el enlace MSR-MLG y algunas experiencias tanto académicas como prácticas nos han sugerido que esta forma puede resultar útil en principio.

Consideramos como estrategia particular aquella en la que se encontraría el experimentador cuando dispone de un número fijo de observaciones a realizar de las variables de un sistema, que traducimos con el nombre de “estrategia de presupuesto fijo”. Así, el objetivo será poder cuantificar de alguna forma la ganancia de información que alcanzamos a conocer del proceso luego de haber utilizado todo el presupuesto disponible. En todos los casos nuestro plan es el de utilizar familias de estrategias de diseños factoriales a dos niveles, secuencialmente encadenados.

Nuestro estudio comienza definiendo una familia de estrategias de exploración de un proceso representado por una superficie de respuesta teórica binaria, en la que hemos identificado tres variables: un valor llamado w , acotado entre 0 y 1, el cual es utilizado para definir el primer centro de experimentación. Luego, se considera una segunda variable, que será el valor que tenga el rango de variación de los factores, L , y finalmente, cuando se ensayen nuevas alternativas de puntos de diseño, habrá un valor S , que llamaremos “salto”, que representará la longitud que separa un centro de diseño del siguiente. De esta manera, diremos que una estrategia de diseño queda caracterizada por los valores L , S y w .

Partiendo así de una superficie de respuesta que sea la que mejor se considera que se aproxima a un proceso real, el objetivo será el de encontrar a través de simulaciones los niveles de w , L y S que alcancen los mejores valores posibles bajo dos criterios de selección de diseños: a) una basada en el determinante de la Matriz de Información de Fisher, y b) el otro, basado en el valor de la superficie teórica evaluado en las mejores condiciones que se obtengan del modelo ajustado.

En la **Parte I: Principios** de este trabajo ampliamos el estado del arte del tema y describimos brevemente tanto el mapa de acción como las herramientas que utilizaremos para conseguir los objetivos que proponemos. De lo que se ha desarrollado hasta el momento desde el enfoque del Diseño de Experimentos, repasamos brevemente aquellas consideraciones útiles a nuestros propósitos, como así también las posibles extensiones que pueden cubrirse con los MLG, que los modelos lineales y normales no alcanzan a abarcar.

En la **Parte II: Desarrollos**, mediante algunos criterios de filtrado de las distintas superficies posibles a considerar, tomamos un caso concreto de estudio y lo desarrollamos siguiendo la estrategia secuencial de exploración de la superficie, ajustando modelos mediante el criterio jerárquico de selección de términos.

Hacia el final de esta Parte II, definimos también la estrategia que seguiremos para llevar a cabo la exploración secuencial de dicha superficie a partir de una terna de variables fijas L , S y w . Teniendo definidos los dos grupos de estadís-

ticos de evaluación, lo que sigue es reducir su variabilidad considerando réplicas de los diseños. En todos los casos, hemos desarrollado líneas de programa en el lenguaje **R** para sistematizar y hacer eficientes los cálculos.

En la **Parte III: Evaluaciones**, la progresión de la evaluación diremos que sigue la lógica siguiente: a) extendemos de 1 a 15 los casos de estudio para L , S y w fijos, con lo cual reducimos la variabilidad de los estadísticos que definimos para valorar las estrategias de diseño; b) para cada uno de los 15 conjuntos de puntos construimos una matriz de evaluación de casos, conformada por 25 situaciones distintas, cada una de las cuales resultante de definir 5 niveles de evaluación para una de las variables, L , y otros 5 niveles para S ; y c) para cada uno de los 25 casos correspondientes a cada uno de los 15 conjuntos de puntos, definimos 5 niveles para w , la última variable que consideramos para estudio. Mediante la definición de algunos gráficos —tanto de la evolución de la estrategia secuencial como de los valores que van tomando los estadísticos de medida de calidad de ajuste— vamos haciendo algunas evaluaciones objetivas acerca de las repercusiones se van observando en los modelos ajustados respectivos.

En el penúltimo capítulo, proponemos una valoración general de la estrategia, que pretende buscar qué niveles de las tres variables consideradas (L , S y w) son los mejores para nuestro modelo para la superficie de respuesta. En el último capítulo, las conclusiones, discutimos los resultados obtenidos, como así también aspectos a considerar para la mejora de la estrategia propuesta y algunas posibles líneas futuras de investigación que pueden seguirse a partir de este trabajo.

Finalmente, en la **Parte IV: Apéndices** ampliamos algunos puntos específicos acerca de 3 grupos de aspectos: a) *Complementos de MSR*, en donde repasamos los pilares básicos sobre los que se encuentra apoyada esta metodología para el modelo lineal y normal como así también algunos bosquejos de extensiones para casos no normales; b) *Complementos de MLG*, en donde presentamos el modelo logístico como caso particular de esta familia de modelos y algunos recursos de los que disponemos para ajustar modelos y validarlos; y c) *Recursos informáticos*, en donde mostramos las líneas de los principales programas en **R** que hemos desarrollado en todos los cálculos y construcción de gráficos de los que nos hemos valido para complementar el desarrollo de esta tesis. En este último apéndice, presentamos también algunas salidas seleccionadas de **R** que complementan la información que hemos obtenido a partir de las salidas gráficas, como por ejemplo, puntos considerados en cada diseño, valores de los coeficientes de los modelos ajustados, naturaleza de los modelos ajustados, etc.

Con un listado de las principales referencias bibliográficas y artículos que hemos revisado y otras estrechamente relacionadas con éstos, nos proponemos dejar un pequeño aporte actualizado que resulte útil para potenciales nuevas líneas de investigación, ya sea relacionadas con la *MSR*, los *MLG* o bien con el enlace de ambos enfoques. En particular, en MYERS *et al.* (2004), puede encontrarse un listado muy actualizado y autorizado sobre las últimas novedades relacionadas con la *MSR* a la fecha de realización de esta tesis, como así también varias menciones a referencias relacionadas con el enlace con los *MLG*.

Summary

In this PhD thesis we approached some principles that relate to the study the *Response Surface Methodology* (abbreviated as *RSM*) for binary responses, modellable through Bernoulli or binomial distributions. Our starting point is the classic approach of the *RSM*, in the context of linear normal models and, particularly, from the seminal work on the subject, by the article of BOX AND WILSON (1951). Throughout more than five decades, many researchers of this subject have contributed generously with numerous extensions to this classic approach, having special acceptance within industrial applications, the quality improvement of products and industrial processes in general, among others. Three excellent references that reinforce the extensive use of these applications are: BOX AND DRAPER (1987), KHURI AND CORNELL (1996) and MYERS AND MONTGOMERY (2002).

The revision of the state-of-the-art that we have carried out has been done from two great points of view: first, we have reviewed the actual scope of the classical *RSM*, and second, we have also reviewed the Generalized Linear Models (abbreviated as *GLM*). From this revision, we have detected some aspects that —until the moment of the preparation of this work— were not well formulated or were not properly handled in the literature.

Having in mind this initial screening, we formulate a basic question: "*How could experimenters⁴ deal with this problem when the nature of the process does not follow the classical assumptions of normality and linearity ?*". Connecting this question with the present state-of- the-art in *RSM*, the second question that we address —more accurate than the first one — is: "*How could one design a sequential strategy to learn about the operation of a system with binary response, when certain objectives are persecuted?*"⁵.

In order to explore this question deeper by means of a methodological support, we leaned towards the *GLM* approach. These models —presented and formulated primarily in the work of NELDER AND WEDDERBURN (1972)— are the tool that we have chosen in order to find a systematic applied methodology, that aims for suitable models that can be fitted to binary response. Several authors have contributed to extend the applications of these models beyond the work of Nelder and Wedderburn. Among the most referenced works, we can mention: LINDSEY (1997), MCCULLAGH AND NELDER (1998), DOBSON (2001), GILL (2001) and MYERS *et al.* (2002).

Following the iterative process of knowledge generation, we sharpened our research to: "*How could RSM and GLM be linked using the latter as a methodological support?*". The lack of precise and complete antecedents on connecting *RSM* and *GLM*, and our experience both in academy as well as in practice, have suggested us to follow this form.

⁴As well as Process Engineers, Quality Engineers, from the traditional organizational scheme.

⁵For example: to maximize or to minimize the expected value of the response, or when this expected values reaches an target or when the variability of the same one is minimum within a region of experimentation of the system.

We consider as a particular strategy, the one in which the experimenter has a fixed number of observations to be made, in what we labeled as "strategy of fixed budget". Thus, the objective will be to quantify the information gain once we have used all the budget available. In both cases, our plan is to carry out 2-level factorial and sequential designs.

Our approach starts with a definition of a family of design strategies for exploration of a process that is being represented by a certain response surface. These strategies are characterized through three variables: w , bounded between 0 and 1, used to define the first experimentation center point. Once that is determined, a second variable is considered: L , or the range of variation of the factors. Finally, when several experimental conditions were considered, the variable S , identifies the jump length that connects one center point of experimentation with the following one. Having defined the scope this way, we can say that a design strategy may be characterized by means of a three-variable picture: L , S and w .

Once the experimenter defined what kind of response surface is the best one to approach the real process, the goal will be to find the levels of L , S and w that maximizes the value of two alternative criteria: the first one is based on the determinant of the Fisher's Information Matrix, and it captures the amount of information gathered by the design, and the second one is the value taken by the theoretical surface on the maximum of the fitted surface.

In **Part I: On principles** of this work, we present the state-of-the-art of the subject. Throughout it, we also briefly describe the road map of action as well as the tools that we will use in order to achieve our objectives. The current state of the art of the Experimental Design is briefly reviewed, taking into account the ones that connect with our research. We also point out the possible extensions of Experimental Design that can be described within the framework of *GLM*.

In **Part II: On developments**, by just consider possible surfaces, we take into account a particular case study and we develop it, following the sequential strategy of exploration of the surface, fitting models by means of the hierarchical criterium of selection of terms.

Towards the end of this Part II, we also present the strategy that we follow to carry out the sequential exploration of this surface, based on the three variables defined above: L , S and w . Having the two comparison statistics well defined, the goal is to reduce their variability by means of replication of the design points. In all cases, we have developed program code lines in **R** language in order to systematize and to make the calculations efficient.

In **Part III: On the evaluations**, we examine the evolution of the strategy by: a) extending from 1 to 15 the cases of study; b) for each one of the 15 data frames of points, building an evaluation matrix of cases, consisting on 25 different situations, each one of which resulting from combining 5 levels for L , and 5 levels for S ; and c) for each one of the 25 cases corresponding to each one of the 15 sets of points, we defined our last variable of study, w . By means of some evaluation graphs —*e.g.* the ones that present the evolution of the sequential strategy, or the ones that present the values of the statistics

used for comparisons— we carried out some objective evaluations about the repercussions that are observed in the respective fit models. In the penultimate chapter, we propose a general valuation of the strategy, that tries to find the levels of the three variables (L , S and w), that lead to maximum values of both optimality criteria considered. In the last chapter, we discuss the results obtained, as well as some aspects to consider for the improvement of the strategy proposed. Some possible future lines of investigation are also considered.

Finally, in **Part IV: On appendices** we extended on some specific points about: *a) Complements of RSM*, where we review the fundamentals on which is supported this methodology for the linear and normal model; *b) Complements of GLM*, where we present the logistic model as a particular case of the exponential family of distributions, as well as some other resources that we can take advantage of, and *c) Computer resources*, where we present the programs in **R** that we have developed for the calculation and construction of graphs of this thesis. In this last appendix, we also added some useful outputs that complete the study, like some sets of points of different strategies, some fitted models of design points and some nature of the fitted models.

By presenting a list of the main bibliographical references reviewed, we try to bring an updated contribution that maybe useful for new lines of research, related with *RSM*, with *GLM* or with the link *RSM-GLM*. The article of MYERS *et al.* (2004) contains a very complete and authorized list of the most recent publications related with *RSM*, until the date of elaboration of this thesis.

Agradecimientos

Quiero dedicar este trabajo a Don Nicolás R. Guido (“El Gó”), *in memoriam*, mi muy querido abuelo, un ejemplo viviente de lucha y cariño, que me mostró las cosas buenas que deben cultivar las personas y que deben compartir con los demás. Él fue un auténtico caballero, fue mi mejor amigo y fue quien me enseñó cosas inolvidables que han sido muy importantes para mi vida. Tuve la dicha de disfrutar de su enorme capacidad de amar y de su infinita⁶ paciencia como abuelo. Esta es la primera oportunidad que tengo en la vida para agradecersele y es por eso que quiero dejarlo por escrito y en el primer lugar de todos.

En esta tesis y en todo el esfuerzo que pusimos para sacarla adelante, quiero también que otras personas formen parte de ella, porque son todos ellos y sus afectos los que me acompañaron y me dieron fuerzas para poder comenzarla, rumiarla y finalmente terminarla.

A mi vieja y a mi abuelita (la *catalanísima*), quienes con su sabiduría y enorme capacidad de generar amor me han dado apoyo de forma verdaderamente incondicional, y que me han despertado la curiosidad por el pensamiento, la reflexión y la mejora continua de los sentimientos que llevo conmigo desde que era así de chiquito.

A mi viejo, quien me ha despertado la curiosidad por las cosas que dan vueltas dentro y fuera de este planeta, y a prestar atención en cómo funcionan, en cómo desarmarlas y en cómo tratar de volver a armarlas —algunas veces— con éxito.

A Paola, mi esposa, que en todo momento me bancó para seguir trabajando en todo este gran esfuerzo, a quien le robé tanto tiempo de noviazgo y matrimonio. Le agradezco por soportarme los grandes dolores de cabeza, por las horas y horas frente a la computadora⁷, o bien por quedarme mentalmente nulo al finalizar el día sin entender las cosas que yo mismo creía que estaba haciendo. Con sus incondicionales compañía, cariño y paciencia, ella fue quien mejor me ayudó en el día a día a llevar esta tesis a buen parto y a buen puerto.

A Josep, el genuino “Gran Visir” y “Gran Timonel”, que me soportó como director de tesis, que me enseñó a aprender y a quien admiro con gratitud enorme. Pero más que todo, un gran compañero de ruta y extraordinario guía. Este gran Ingeniero (que es al mismo tiempo una extraña mezcla de bayesiano y frecuentista) ha destinado con mucha paciencia su tiempo para acompañarme en este arduo trabajo. Cuando estaba buscando tanto el tema como el director de la tesis —allá hacia mediados de 2001— al final de una de sus clases lo invité a charlar y comencé diciéndole que no le había entendido absolutamente nada

⁶ Infinita, pero *bien* infinita de verdad.

⁷ También “computador” u “ordenador”. No parece que se haya logrado un consenso definitivo sobre el género (o sexo) de este artefacto dentro de los países hispanoparlantes.

de que había explicado, pero al mismo tiempo le propuse que me dirigiera la tesis porque me parecía muy interesante su forma de ver aquellos temas. Para mi sorpresa, dijo que mi comentario lo desilusionaba, pero tuvo una actitud de confianza y de generosidad grandísimas, que no encontré en nadie más en todos los que había consultado antes. Me dijo textualmente y sin inquisiciones ni histerias: “sí, con mucho gusto dirigiré tu tesis” (sic). Este gesto de generosidad es algo que no voy a olvidar nunca y que trataré de devolverle a todos los estudiantes y colegas curiosos a quienes pueda ayudar. Me gustaría que todos los profesores tuvieran una disposición de espíritu tan generosa como la que tiene Josep y que puedan imitarlo también en este aspecto particular.

A todos los profesores, funcionarios y compañeros de batalla de la Politécnica de Cataluña (es decir, de la Politécnica de Catalunya), que me mostraron de forma amable y esmerada muchos aspectos de esta interesante rama de la ciencia. Con muchos de ellos he podido compartir momentos muy agradables y también de muy buen humor, algo que en la vida siempre es necesario vivir y transmitir.

A Fede Sabrià, un verdadero *o-sensei*⁸, que me aguantó en el IESE los tres años que estuve trabajando e intentando hacer mis primeras herramientas en investigación. No dejó en ningún momento de apoyarme generosamente para terminar esta tesis. Un auténtico campeón, en todo sentido. A María Dolores Rodríguez-Llauder, también del IESE, con quien trabajé esos mismos tres años, que fue artífice de mis primeras publicaciones y que me escuchó y aconsejó con tanta paciencia y generosidad. Y a mis compañeros y amigos de la orwelliana “Room 101” del IESE —queridos colegas... que nos decían que no investigábamos sino que tan sólo *colaborábamos*— quienes escuchaban el diario penar de mi estado mental y los constantes reniegos sobre mi tesis, que parecía que involucionaba con el tiempo en lugar de evolucionar, tanto la tesis misma como mi cerebro. Entre ellos, una especial mención a los más cercanos: Paddy, David, Pablo, Alex, Marcos y Luis, con quienes filosofábamos sobre el doctorado, la investigación y el fútbol, pasión que nos congregó en dos campeonatos (es decir, en dos “ligas”). Las buenas de Manu, Cristina, Barbara, Isabel, Helena, Lidia, también contribuyeron con enorme alegría a crear un clima humano extraordinario, difícil de olvidar.

A Roberto Antonio Zarama, una persona que ama profundamente el conocimiento, que también no dejó de alentarme en seguir la tesis con constancia. Él fue quien confió en mí para que me sumara al excelente equipo de profesores del Departamento de Ingeniería Industrial de la Universidad de los Andes, en Bogotá. Al tano Carlo Tognato, otro intelectual brillante, que también me orientó —y que también me desorientó, simultáneamente— en la teoría del funcionamiento de las instituciones, sus paranoias, sus conspiraciones y otras virtudes. Soy testigo tanto de su genuina mayéutica como de su *mayoneséutica*, facetas que conviven en él con corrosivo e irónico sentido del humor. Y al

⁸En japonés: “gran maestro”.

flaco Gonzalo Mejía, que me explicó el verdadero significado de la sigla *PhD*: “*Permanent Head Damage*”, y con quien compartimos interminables charlas sobre la necesidad de reivindicación de los sistemas subóptimos⁹, los problemas técnica y económicamente inviables y otros objetos inútiles, también tan necesarios para que el cerebro descansa de vez en cuando. Y a Patricia, a Piero, a Francesco y a Edoardo (que son todos *Sordos*), que con mucho cariño y amabilidad me bancaron en su casa durante los meses de autotransferencia cultural entre el viejo continente y el otro, el olvidado.

A un grupo de personas extraordinarias del Cono Sur, que siempre me acompañaron y aconsejaron con buen criterio y en todo momento, encabezadas por Chasman y Chirolita —un dúo formidable— que siempre estuvieron a disposición cada vez que los necesité para hablar. Siguen el enorme talento y la alegría eterna de Carlitos Balá, que siempre me contagió su buena onda. También a Martín Karadagian y a “El Ancho”, Rubén Peucelle, dos *titanes* que me enseñaron a luchar. A Juan Salvo, que nos mostró a muchos las mil y una vueltas que puede tener la vida. A Enrique “Quique” Hrabina y a Blas Armando Giunta, que me mostraron que la ignorancia nunca debe pasar de largo: hay que bajarla como sea, *caiga quien caiga*. Y a mis profesores de Estadística I y II de la UCA, los Ingenieros Roberto M. García y Virgilio L. Foglia, que con sus clases, sus charlas, sus chistes y sus *berretines*¹⁰ me despertaron la curiosidad por estas interesantes historias aleatorias, y que desembocaron en mí escribiendo esta tesis años más tarde. Y a Raquel Duek, una persona extraordinaria y una profesional sin igual, que me ayudó a volver a ponerme de pie tantas veces, a entender un poco cómo funcionaban las personas y también a entender un poco más el complejo funcionamiento de mi propia persona. (El orden en que menciono a todas estas personas no obedece a ninguna preferencia en particular¹¹, sino que expresa igual gratitud hacia todos ellos).

Y a los Muntadas y a los Reynal —mi “patria chica” en España— que me aguantaron en tantos episodios de desconcierto, angustia y depresiones, y que me rescataban siempre con su incondicional apoyo y amistad. En particular, a Yuni, a Majo y a Pachi, que además de todo me abrieron con auténtica amistad las puertas de su hogar en Parets del Vallès, para que pudiera terminar esta tesis en un clima familiar muy cálido y amable.

A todos ellos, a todas sus circunstancias y a su enorme generosidad, mi agradecimiento más sincero y profundo.

ATDZ

⁹Varianza máxima, sesgo máximo, ruta más larga, mayor costo, menor productividad, mínimo rendimiento, etc.

¹⁰*Berretín* (voz lunfarda): sust. Afición desmedida hacia determinadas cosas, rayana ya en manía. En cierto sentido, también se puede decir *yeite*. [CASULLO (1986)].

¹¹El orden de mención fue obsesiva y meticulosamente aleatorizado.