

CONSIDERACIONES SOBRE LA COMPARACION DE DISEÑOS DE TRATAMIENTOS

Por Jorge A. Escobar G.¹ y Foster B. Cady²

Centro de Estadística y Cálculo, Colegio de Postgraduados, Chapingo, México.

Sinopsis

Se establece la comparación entre siete diseños, de segundo orden en dos variables, de uso frecuente tanto en la industria como en la agricultura, mediante un criterio estadístico independiente de la codificación de la matriz asociada al diseño de tratamientos. La comparación se hace con base en el error medio cuadrático, que incluye los conceptos de sesgo y varianza de la estimación. En la primera parte del presente trabajo se estudia el efecto de la codificación sobre el valor y la varianza de los coeficientes del modelo polinomial y la influencia sobre las pruebas de hipótesis.

Summary

A comparison is established among seven second-order designs in two variables, frequently used in agriculture and industry. The statistical criterion used for the comparison was independent of matrix coding, related to the treatment design. The comparison was based on the mean squared error, which includes the bias and the variance of the estimator. In the first part of the thesis, the effect of coding upon the value and variance of the polynomial coefficients, as well as the influence upon the tests of hypotheses, are studied.

Introducción

En la investigación, el técnico se enfrenta no sólo ante el problema del análisis e interpretación de los datos obtenidos, sino también ante el deseo científico de establecer una hipótesis general que le permita visualizar el problema y discutir sus resultados en términos cuantitativos, mediante relaciones funcionales entre las variables experimentales.

La forma exacta de la relación funcional que rige un fenómeno determinado $\eta = f(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p; x_1, x_2, \dots, x_K)$, es usualmente desconocida, pero para muchos propósitos prácticos una función flexible (por ejemplo, un polinomio), puede aproximarse satisfactoriamente dentro de una región experimental. Los diseños para "exploración de superficie de respuesta" permiten la estimación de los parámetros por el método de mínimos cuadrados.

Objetivos

Muchos diseños de exploración han sido propuestos, señalándose algunas ventajas relativas de cada uno de ellos, pero no parece existir un criterio único definido en cuanto a las características a considerar como índice de la eficiencia relativa de un diseño sobre otro, y en todos los casos la bondad de un diseño dependerá del criterio tomado para la evaluación. El problema sería establecer algunos criterios razonables de comparación y bajo éstos indicar cuáles serían diseños óptimos.

1. *Dirección actual:* Profesor visitante del Centro de Estadística y Cálculo.

2. Profesor visitante. Dirección actual: Department of Statistics, University of Kentucky, Lexington, Kentucky, USA.

El objetivo más inmediato será establecer la comparación de algunos diseños de uso frecuente en la industria y la agricultura, mediante un criterio estadístico independiente de la codificación de la matriz asociada al diseño. Ya que muchos aspectos de la teoría de la estimación de las superficies de respuesta, han sido criticados como dependiendo demasiado de la escala de codificación, se plantea un estudio de éstas y el efecto de ellas sobre el valor y la varianza de los coeficientes del modelo polinomial y la posible influencia sobre las pruebas de hipótesis.

La codificación y sus implicaciones

a. Justificación. Dentro de una región de exploración R cada punto establece un posible tratamiento. Los niveles a los cuales la respuesta va a ser medida están definidos por las coordenadas de los puntos seleccionados (diseño de tratamientos), las cuales forman las hileras de una matriz $(n \times k)$, la cual establece un programa de investigación a ser desarrollado. Asociada con el diseño está la matriz D , un arreglo de las constantes conocidas en la relación de respuesta.

Puesto que las variables y los niveles a utilizar varían de un experimento a otro, es conveniente que la matriz diseño y por ende la asociada al diseño, estén dadas en una forma estándar; como a igual distribución de puntos en el espacio, corresponde mediante una transformación adecuada, igual matriz diseño, se utilizan las codificaciones para la unificación que permite hacer los diseños aplicables en general. Algunos de estos tipos de codificación y sus principales características se presentan en el Cuadro 1, para niveles igualmente espaciados. Se denota por Z_{ji} el i -ésimo valor real de la j -ésima variable y por X_{ji} el correspondiente valor codificado.

b. Estimación — Matriz de transformación. La respuesta observada (Y) está determinada no sólo por la relación funcional (η), sino también por factores tales como errores de medida, variabilidad del material experimental, pequeñas variaciones en la conducción y manejo, etcétera, fallas que se involucran en el término de error aleatorio.

Si la relación funcional se aproxima por un polinomio, es posible escribir matricialmente: $Y = \eta + \epsilon = DB + \epsilon$, representando Y el vector $(n \times 1)$ de las respuestas observadas, D la matriz $(n \times p)$ asociada al diseño de tratamientos, ϵ un vector $(n \times 1)$ de errores aleatorios y B un vector $(p \times 1)$ de parámetros, cuyo estimador, dado por el método de mínimos cuadrados es $\hat{B} = (D'D)^{-1}D'Y$, con matriz de varianzas y covarianzas dada por $(D'D)^{-1}\sigma^2$.

La matriz D puede estar expresada en los varios tipos de codificación ya indicados, siendo posible su recodificación, mediante la multiplicación por una matriz de transformación T , así que $D_i T_{ij} = D_j$. La matriz T_{ij} realiza la transformación del diseño codificado mediante un tipo (i) , en el tipo (j) y está definida por: $T_{ij} = (D_i'D_i)^{-1}D_i'D_j$

CUADRO I

Tipos de codificación y características

Tipo (a)	tipo (b)	tipo (c)**	tipo (d)
$X_{ji} = (Z_{ji} - (Z_{j1} - W)) / w$	$X_{ji} = (C/w) (Z_{ji} - \bar{z}_j)$	$X_{ji} = (1/V_j) (Z_{ji} - \bar{Z}_j)$	$X_{ji} = (2Z_{ji} - Q) / R$
Media: $(n + 1) / 2$	0	0	0
varianza: $(n^2 - 1) / 12$	$C^2 (n^2 - 1) / 12$	$1/g$	$(n + 1) / 3 (n - 1)$

Z_{j1} = primer nivel a utilizar en la j-ésima variable.

$w = (Z_{j,i+1} - Z_{ji})$ = diferencia entre dos niveles consecutivos.

C = Constante que vale 1, cuando N es impar y 2 cuando N es par.

N = número de niveles a emplear de una variable.

\bar{Z}_j = valor promedio de los niveles reales en la j-ésima variable.

$V_j^2 = \sum (Z_{ji} - \bar{Z}_j)^2 / (N/g)$

g = constante, usualmente = 1 ó 3

$Q = (Z_{jN} + Z_{j1}) = 2Z_{j1} + (N-1) W$

$R = (Z_{jN} - Z_{j1}) = (N-1) W$

** también aplicable a niveles no igualmente espaciados.

Esta es una matriz triangular superior de orden $(p \times p)$, que consta fundamentalmente de los elementos básicos de transformación (f,e), siendo f un elemento de translación y e un elemento de escala (de contracción ó expansión). (Estos elementos básicos, teniendo en cuenta el sentido en que se realiza la transformación, se presentan en el Cuadro 2). Cuando la codificación no implica translación ($f = 0$), entonces T es una matriz diagonal y en todos los casos $T_{ij} T_{ji} = I$ (matriz idéntica).

c. *Efecto de la transformación sobre el valor y la varianza de los coeficientes.* Veamos cómo afecta la codificación, el valor y la varianza de los coeficientes, mediante los siguientes pasos:

$$B_j = (D_j' D_j)^{-1} D_j' Y = (T_{ij}' D_i' D_i T_{ij})^{-1} T_{ij}' D_i' Y = T_{ji} \hat{B}_i$$

de tal manera que la transformación de los coeficientes es realizada por el inverso de la matriz que realizó el cambio de codificación en la matriz D.

Por otra parte:

$$V(\hat{B}_j) = (D'_j D_j)^{-1} \sigma^2 = (T'_{ij} D'_i D_i T_{ij})^{-1} \sigma^2 = T_{ji} V(\hat{B}_i) T'_{ji}.$$

Las ideas anteriores son generales para cualquier número de variables y cualquiera que sea el orden del polinomio. Para ilustración, pero sin perder generalidad, considérese un polinomio de segundo orden en una variable:

$Y_i = B_0 x_0 + B_1 x + B_2 x^2 + e_i$, en el cual los niveles originales se codificaron mediante el tipo (a), deseándose una recodificación a un tipo (j), siendo ésta una codificación que implica un desplazamiento de los ejes de coordenadas al centro del diseño (tipos (b), (c), (d)), de tal manera que: $T_{aj} = (D'_a D_a)^{-1} D'_a D_j$ cuyos elementos básicos de transformación los denotaremos por f' y e' , pudiéndose comprobar que en general T_{aj} tiene la siguiente estructura:

$$T_{aj} = \begin{bmatrix} 1 & f' & f'^2 \\ 0 & e' & 2e'f' \\ 0 & 0 & e'^2 \end{bmatrix}$$

matriz en la cual puede observarse que en el tercer vector columna surge del desarrollo del binomio $(f' + e')^2$. El inverso de T_{aj} realiza la transformación de los coeficientes, así que: $B_j = T_{ja} B_a$. (Los elementos básicos de T_{ja} los denotaremos por f y e).

$$\begin{bmatrix} b_0^* \\ b_1^* \\ b_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & f & f^2 \\ 0 & e & 2ef \\ 0 & 0 & e^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 + fb_1 + f^2 b_2 \\ e(b_1 + 2fb_2) \\ e^2 b_2 \end{bmatrix} \dots (1)$$

siendo $b_p^* = \sum a_p b_p$ con $p = 0, 1, 2$

en donde las "a" son funciones de los elementos de escala y/o translación.

Ahora: $V(\hat{B}_j) = T_{ja} V(\hat{B}_a) T'_{ja}$, pudiéndose comprobar que la matriz $V(\hat{B}_j)$, que en adelante denotaremos por K_j , tiene la siguiente estructura, después de simplificaciones, ya que algunas combinaciones lineales de los elementos c_{ij} de

CUADRO 2

Elementos básicos de transformación

T	Transformación de a			Elementos básicos	
				f	e
T_{oa}^{**}	0	a	(a)	$(w - a) / w$	$1/w$
T_{ob}	0	a	(b)	$-(C/w) (a + \bar{R}w)$	C/w
T_{oc}	0	a	(c)	$-(1/Sw) (a + \bar{R}w)$	$1/Sw$
T_{od}	0	a	(d)	$-(1/\bar{R}w) (a + \bar{R}w)$	$1/\bar{R}w$
T_{ao}	(a)	a	0	$(a - w)$	w
T_{bo}	(b)	a	0	$(a + \bar{R}w)$	w/C
T_{co}	(c)	a	0	$(a + \bar{R}w)$	Sw
T_{do}	(d)	a	0	$(a + \bar{R}w)$	$\bar{R}w$
T_{ab}	(a)	a	(b)	$-\bar{C}\bar{x}$	C
T_{ac}	(a)	a	(c)	$-\bar{x}/S$	$1/S$
T_{ad}	(a)	a	(d)	$-\bar{x}/\bar{R}$	$1/\bar{R}$
T_{ba}	(b)	a	(a)	\bar{x}	$1/C$
T_{bc}	(b)	a	(c)	0	$1/CS$
T_{bd}	(b)	a	(d)	0	$1/\bar{C}\bar{R}$
T_{ca}	(c)	a	(a)	\bar{x}	S
T_{cb}	(c)	a	(b)	0	CS
T_{cd}	(c)	a	(d)	0	S/\bar{R}
T_{da}	(d)	a	(a)	\bar{x}	\bar{R}
T_{db}	(d)	a	(b)	0	$\bar{C}\bar{R}$
T_{dc}	(d)	a	(c)	0	\bar{R}/S

** el sub-índice 0 hace referencia a los niveles originales

Simbología del Cuadro 2:

$w = (Z_{j,i+1} - Z_{ji})$ = diferencia entre dos niveles consecutivos.

$a = Z_{j1}$ = primer nivel real a utilizar.

$C = 1$ si N es impar; 2 si N es par.

$\bar{R} = (N - 1) / 2$

$\bar{N} = (N + 1) / 2$

$S^2 = g(N^2 - 1) / 12$; con $g = 1$ ó 3 .

N = número de niveles experimentales.

la matriz $V(\hat{B}_a)$, son cero.

$$K = \begin{bmatrix} c_{00} + fc_{01} + f^2c_{22} & 0 & e^2(c_{02} + fc_{12} + f^2c_{22}) \\ 0 & e^2(c_{11} + 2fc_{12}) & 0 \\ e^2(c_{02} + fc_{12} + f^2c_{22}) & 0 & e^4c_{22} \end{bmatrix} \dots (2)$$

Efecto sobre las pruebas de hipótesis

a. *Prueba de los coeficientes.* Si se desea hacer una comparación de la prueba de hipótesis de los coeficientes individuales, entre los dos tipos de codificación, se tendría:

$$H_{01} : B_1^* = 0 \quad \text{y} \quad H_{02} : B_2^* = 0$$

$$t_{01}^{(j)} = b_1^* / \sqrt{\hat{\sigma}^2 k_{11}} \quad \text{y} \quad t_{02}^{(j)} = b_2^* / \sqrt{\hat{\sigma}^2 k_{22}} \quad **$$

y con base en las relaciones establecidas en (1) y (2), se tiene:

$$t_{01}^{(j)} = e(b_1 + 2f b_2) / \sqrt{\hat{\sigma}^2 e^2 (c_{11} + 2fc_{12})}$$

$$= (b_1 + 2f b_2) / \sqrt{\hat{\sigma}^2 (c_{11} + 2f c_{12})} \neq t_{01}^{(a)} = b_1 / \sqrt{\hat{\sigma}^2 c_{11}}$$

$$t_{02}^{(j)} = e^2 b_2 / \sqrt{\hat{\sigma}^2 e^4 c_{22}} = b_2 / \sqrt{\hat{\sigma}^2 c_{22}} = t_{02}^{(a)}$$

** El índice superior (j) indica que se trata de valores de "t" calculados con base en la codificación j-ésima. ((b), (c), (d)).

Pudiéndose ver que las pruebas son equivalentes para el efecto cuadrático, pero no para el lineal, salvo el caso en que $f = 0$, es decir, que la transformación no implique translación.

En general se puede establecer que cuando los coeficientes ("a") de la combinación lineal, son función exclusiva del elemento de escala, las pruebas de hipótesis son equivalentes, lo cual implicaría que la matriz de transformación fuese diagonal.

Las pruebas serán completamente equivalentes dentro de los tipos (b), (c), (d), pero diferirán con respecto a los valores originales, excepto para el último coeficiente de un polinomio de grado p en una variable. Para que las pruebas de los valores originales sean equivalentes con respecto a las pruebas de los coeficientes con base a la codificación tipo (a), se requiere que el primer nivel real a utilizar sea igual a la diferencia entre dos niveles consecutivos, ya que en este caso $f = (a - w) = 0$.

b. Prueba del modelo propuesto. Aunque las pruebas de hipótesis de algunos coeficientes individuales pueden verse afectadas, en algunas ocasiones, por la codificación, la prueba del modelo ajustado no está afectada por las transformaciones, como se demuestra a continuación:

$$\begin{aligned} \text{S. C. Desviaciones} &= \text{S. C. Total} - \text{S. C. Modelo} \\ &= Y'Y - B'_i D'_i Y \end{aligned}$$

y puesto que:

$$B_i = T_{ij} B_j \quad \text{y} \quad D_i = D_j T_{ji} \quad \text{entonces,}$$

$$\text{S. C. Desviaciones} = Y'Y - B'_j T'_{ij} T_{ji} D'_j Y = Y'Y - B'_j D'_j Y$$

Por lo tanto la suma de cuadrados debida al modelo propuesto, con $(p-1)$ grados de libertad (no incluye b_0) y la Suma de Cuadrados de desviaciones, son invariantes. Esta última puede descomponerse en:

S. C. Desv. = S. C. Falta de Ajuste + S. C. Error Experimental
cuando existen repeticiones del diseño y el número de puntos que incluye el diseño es mayor que el número de parámetros a estimar, y puesto que la estimación del error experimental es independiente de la codificación de la matriz D , se concluye que la S. C. Falta de Ajuste es también invariante.

Selección de un diseño de tratamientos

a. Un criterio de selección. El ajuste de una superficie de respuesta requiere de una serie de conocimientos básicos; el investigador deberá tener alguna experiencia previa que le permita no sólo definir la región de exploración con base en las variables que intervienen, sino también conocer algo del modelo que puede utilizar para caracterizar el fenómeno en estudio y tener una idea aproximada sobre el punto de respuesta óptima.

Una vez que se han definido el modelo y el espacio factor de interés, surge el problema de cuáles tratamientos serán utilizados para el ajuste de la función de respuesta, para que los estimadores de la ecuación puedan calcularse adecuadamente.

Aunque en la elección de un diseño intervienen variados factores, desde el punto de vista teórico la selección puede considerarse como un problema de la "teoría de la decisión" considerando una función de pérdida: $L(\underline{a}, \theta)$. Esta función no negativa, reflejará la pérdida al tomar una acción \underline{a} cuando el parámetro es θ . La pérdida es cero cuando \underline{a} es la mejor acción para θ . No conociéndose la mejor acción, puesto que θ es desconocido, se aplica una estrategia d , la cual produce la acción \underline{a} . Como criterio de selección podría seguirse aquél de tomar una estrategia, la cual de alguna manera minimice el riesgo, para cada valor de θ (7).

Sea $(\hat{\theta} - \theta)^2 = (\hat{y}(x) - \eta(x))^2$ la Función de Pérdida y por lo tanto el Riesgo será:

$E(\hat{y}(x) - \eta(x))^2 = \text{Error Medio Cuadrático} = \text{Varianza de } \hat{y} + (\text{sesgo de } \hat{y})^2$
 expresión que en notación matricial será:

$$\text{E.M.C.} = D_1^{-1} (D_1' D_1)^{-1} D_1' \sigma^2 + B_2' (D_2' D_2 - D_2' D_1 A) B_2$$

siendo $A = (D_1' D_1)^{-1} D_1' D_2'$, en la cual D_1 es la matriz de los efectos considerados en el modelo de ajuste y D_2 incluiría los términos no tenidos en cuenta en el procedimiento de estimación, pero que existen en un modelo hipotéticamente verdadero, tomado como alternativo al modelo ajustado.

En la expresión matricial que define el E.M.C. puede observarse claramente que su magnitud no sólo depende de si el modelo ajustado es correcto (si así fuere $B_2 = 0$) sino también del diseño usado (D_1) para estimar los parámetros del modelo propuesto.

Para un punto arbitrario $x_i = (x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, \dots, x_{ki})$ el E.M.C. será:

$$\text{E.M.C.} = X_{1i}^{-1} (D_1' D_1)^{-1} X_{1i}' \sigma^2 + B_2' (X_{2i}' X_{2i} - X_{2i}' X_{1i} A) B_2$$

siendo X_{1i} la correspondiente i-ésima hilera en la matriz D_1 y X_{2i} el resto de la hilera en D_2 ; B_2 representa los coeficientes del modelo hipotéticamente verdadero, no tenidos en cuenta en el procedimiento de estimación.

Puesto que interesa más el error medio cuadrático que en promedio presenta un diseño dado, sobre toda una región de exploración, Box y Draper (1959) proponen:

$$(N/\sigma^2) \int_{\mathbf{R}} E(\hat{y}(x) - \eta(x))^2 dx / \int_{\mathbf{R}} dx$$

como una medida del promedio de error medio cuadrado, normalizado y estandarizado por el número de observaciones incluídas en el diseño y por el error experimental.

Situándose en el caso de codificaciones que implican desplazamiento de los ejes de coordenadas al centro del espacio factor, y considerando el caso de que el modelo ajustado sea un polinomio de segundo orden en dos variables, pudiendo el modelo hipotéticamente verdadero incluir términos cúbicos de la forma: $x_1^2 x_2$ y/o

x_1, x_2 , los cuales eventualmente resultan significativos en experimentos con fertilizantes.

Así, el criterio de selección consistiría en seleccionar como óptimo, aquel diseño que minimice:

$$(N/\sigma^2) \iint \left\{ V(\hat{y}(x_1, x_2)) + S^2(x_1, x_2) \right\} dx_1 dx_2 / \iint dx_1 dx_2 \quad **$$

siendo: $\iint dx_1 dx_2 = 2^2 t^2$, el área de la región de exploración.

$$V(\hat{y}(x_1, x_2)) = V \left\{ b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{12} x_1 x_2 \right\} =$$

$$X_1 (D_1' D_1)^{-1} X_1' \sigma^2 = \text{Varianza de la estimación}$$

$$S^2(x_1, x_2) = (\text{sesgo de la estimación})^2.$$

$$(B_{112} \ B_{122}) \begin{bmatrix} x_1^2 x_2 \\ x_1 x_2^2 \end{bmatrix} \left[(x_1^2 x_2 \ x_1 x_2^2) - (1 \ x_1 \ x_2 \ x_1^2 \ x_2^2 \ x_1 x_2) A \right] \begin{bmatrix} B_{112} \\ B_{122} \end{bmatrix}$$

b. Diseños comparables. Si se desea establecer una evaluación correcta, es importante definir de antemano qué se va a entender por "diseños comparables", ya que existen al menos dos criterios diferentes: 1) Con base en la dispersión, propuesta por Box y Wilson (1951), considerando que dos diseños son de tamaño comparable, cuando el grado de dispersión, para cada uno de los k factores, sea el mismo en los dos diseños, entendiéndose por dispersión:

$$S^2 = \sum_{j=1}^k (x_{ji} - \bar{x}_j)^2 / N \quad \begin{matrix} i = 1, 2, 3, \dots, N \\ j = 1, 2, 3, \dots, k \end{matrix}$$

De acuerdo con Folks (1958), el concepto de dispersión como criterio para los diseños comparables, parece ser motivado por el caso unidimensional, en que la precisión de la estimación de una regresión lineal, es proporcional al recíproco de la dispersión, en el sentido anteriormente establecido. 2) Deseando comparar todos aquellos diseños que tengan sus puntos en la región de inmediato interés, Le Roy Folks (1958) considera el rango de las variables experimentales antes que su dispersión. Así, una vez definida por el investigador la región R de exploración, dos ó más diseños son elegibles para comparación, si ellos están contenidos en R . Este criterio fue el considerado en el presente trabajo.

c. Diseños en comparación. Para la comparación se incluyeron los siguientes diseños:

No.	N o m b r e	No. de Tratamiento
1	Factorial 5 x 5	25
2	Cuadrado Triple	Factoriales Parciales
3	Cuadrado Doble	
4	Diamante Doble	
5	Factorial 3 x 3	
6	Compuesto de Box	9
7	Compuesto Rotacional	9

** todas las integrales consideradas tienen por límite de integración: $-t$ a t .

Para los diseños considerados, y bajo la consideración establecida para el modelo hipotéticamente verdadero, la matriz "alias" $A = (D_1' D_1)^{-1} D_1' D_2$, toma la siguiente estructura:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & a_{21} \\ a_{12} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad \text{con } a_{12} = a_{21} = a = \frac{\sum x_{1i}^2 x_{2i}^2}{\sum x_{1i}^2} = \frac{\sum x_{1i}^2 x_{2i}^2}{\sum x_{2i}^2}$$

Denotando por:

$$\begin{aligned} Q_1 &= k_{00} \\ Q_2 &= k_{11} + 2k_{03} = k_{22} + 2k_{04} \\ Q_3 &= k_{33} = k_{44} \\ Q_4 &= k_{55} + 2k_{34} \end{aligned}$$

siendo k_{ij} los elementos de la matriz de varianza y covarianza, y realizada la integración, considerando una región general $R = (-t \leq (x_{1i}, x_{2i}) \leq t)$, se obtuvo la siguiente expresión, base de la comparación:

$$\text{Min. } (N/\sigma^2) \left\{ (Q_1 + 2Q_2 t^2/3 + (18Q_3 + 5Q_4) (t^4/45)) + (B_{112}^2 + B_{122}^2) ((3t^6 - 10at^4 + 15a^2 t^2) / 45) \right\}$$

Asumiendo: $(B_{112}^2 + B_{122}^2) / \sigma^2 = k$ (constante), y considerando una región $R^* = (-1 \leq (x_{1i}, x_{2i}) \leq 1)$, siendo la arbitrariedad de esta región justificable a causa de la propiedad de invarianza que posee el criterio de comparación, los resultados se presentan en el Cuadro 3.

CUADRO 3

Resumen comparativo de los componentes del error medio cuadrático

No.	DISEÑO	N	$\hat{V}(\hat{y}(x))$	(sesgo) ²	$N \hat{V}(\hat{y}(x))$	N (sesgo) ²
1	Factorial 5 x 5	25	0.164	0.03888	4.100	0.972
2	Cuadrado Triple	17	0.243	0.05135	4.131	0.873
3	Cuadrado Doble	13	0.301	0.05463	3.913	0.710
4	Diamante Doble	13	0.289	0.05613	3.757	0.730
5	Factorial 3 x 3	9	0.450	0.06666	4.050	0.600
6	Compuesto de Box	9	1.000	0.05046	9.000	0.454
7	Compuesto Rotacional	9	0.689	0.03194	6.201	0.287

Resultado de la comparación

Se observa que hay antagonismo entre los componentes del error medio cuadrático, puesto que los diseños que minimizan el componente de (sesgo)², como son el compuesto de Box y compuesto rotacional, son los que producen la mayor varianza. El factorial 3 x 3 ocupa el tercer lugar tanto para sesgo como para varianza. El diamante doble y el cuadrado doble serían muy eficientes para minimizar la varianza promedio sobre toda la región de interés.

De acuerdo con Cady y Laird (1966) "parece razonable escoger un diseño que reduzca al mínimo el error debido a sesgo y controlar el tamaño del error debido a varianza por medio de repeticiones". Si se considera una región circular, el único diseño que minimiza el sesgo sería el compuesto rotacional, pero dentro de una región rectangular es posible obtener una reducción adicional, partiendo de una estructura base de los puntos de estrella (sobre los ejes a la distancia $\pm t$) y el centroide, y buscando la óptima alocaión de un factorial 2 x 2, para que el componente de sesgo sea mínimo, lo cual se logra cuando $a = t^2/3$. Si denotamos por $\pm x$, las coordenadas del factorial, se tendría para este diseño que denotaremos "compuesto modificado".

x_{1i}	x_{2i}	
-t	0	}
t	0	
0	-t	
0	t	
0	0	... Centroide
-x	-x	}
-x	x	
x	-x	
x	x	

$$a = t^2/3 = \frac{\sum x_{1i}^2 x_{2i}^2}{\sum x_{1i}^2} = 4x^4 / (2t^2 + 4x^2), \text{ lo cual implica que:}$$

$$x = \pm 0.7795 t.$$

un diseño con tales características, bajo las condiciones establecidas para las comparaciones anteriores, arrojaría los siguientes resultados:

$V(\hat{y}(x)) = 0.617$; $(\text{sesgo})^2 = 0.02963$; $N V(\hat{y}(x)) = 5.553$; $N(\text{sesgo})^2 = 0.266$
 Si comparamos el "compuesto modificado" (9 observaciones), contra el diamante doble, (13 observaciones), que presenta la mínima varianza, este último sería 48% más eficiente, por lo cual tres repeticiones del diseño "compuesto modificado", producirían igual varianza de $\hat{y}(x)$, sobre toda la región de exploración, que dos repeticiones del mejor diseño en cuanto a varianza, teniendo el experimento aproximadamente el mismo número de parcelas (27 vs 26) y la ventaja adicional de minimizar el sesgo correspondiente a los términos $x_1^2 x_2$ y $x_1 x_2^2$.

Conclusiones

1. Los cambios en la codificación de la matriz asociada al diseño de tratamientos son producidos por una matriz de transformación, la cual consta fundamentalmente de dos elementos básicos, por cada una de las variables incluidas en el modelo. Uno realiza la translación de los ejes de coordenadas y el otro es un elemento de escala (de contracción o expansión).

Las pruebas de hipótesis para los coeficientes individuales se ven alteradas cuando la transformación implica translación, pero la prueba del modelo propuesto es independiente de la escala de codificación utilizada, lo cual sugiere que la reducción de ciertos efectos, debe hacerse con base en el criterio F, dado por:

$$\frac{(\text{S.C. Modelo Completo} - \text{S. C. Modelo Reducido})}{(p - r)} \bigg/ (\text{C.M. Error Experimental})$$

- 2.—Tomando como criterio de comparación la minimización del promedio de Error Medio Cuadrático, estandarizado y normalizado en cuanto a número de observaciones y al error experimental, y asumiendo que el modelo hipotéticamente verdadero pueda incluir términos cúbicos de la forma: $x_1^2 x_2$ y $x_1 x_2^2$, siendo el modelo ajustado un polinomio de segundo orden en dos variables, el mejor diseño en cuanto a varianza resultó el Diamante Doble y el mejor diseño en cuanto a sesgo resultó el Compuesto Rotacional de Box. Considerando una región rectangular $R = (-t \leq (x_{1i}, x_{2i}) \leq t)$, es posible minimizar el componente de "error de sesgo" y controlar el "error de varianza" por medio de repeticiones, con el diseño "Compuesto Modificado".

Literatura citada

- BOX, G. E. P. y WILSON, K. B. (1951). *On the experimental attainment of optimum conditions*. Journal of the Royal Statistical Society. Series B, 13:1-45
- DRAPER, N. R. (1959). *A basic for the selection of a response surface design*. J. Amer. Statist. Assoc., 54: 622-654.
- CADY, F. B. y LAIRD, R. J. (1966). *Diseños para superficies de respuesta — Factoriales Parciales — Seminario* (no publicado). Centro de Estadística y Cálculo (13 de octubre de 1966). Colegio de Postgraduados, ENA, Chapingo, México.
- COCHRAN, W. G. y COX, G. M. (1965). *Diseños Experimentales*. Capítulo 8A: 372-408. Editorial Trillas, S. A. México.
- FOLKS, J. L. (1958). *Comparison of designs for exploration of response relationships*. Unpublished Ph. D. Thesis. Ames, Iowa, Library. Iowa State University of Science and Technology.
- HILL, W. J. y HUNTER, W. G. (1966). *A review of response surface methodology: A literature survey*. Technometrics. Vol. 8, No. 4:571-590.
- MOOD, A. M. y GRAYBILL, F. A. (1963). *Introduction to the theory of statistics*. McGraw Hill Book Company, Inc. International Student Edition. Second Edition.
- VAN DER VAART, H. R. (1960). *On certain types of bias in current methods of response surface estimation*. Bull. Int. Stat. Instit., 37, III: 191-203.