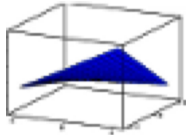


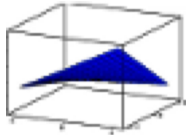
Diseños factoriales fraccionarios

- ♦ etapas iniciales de una investigación: interesa estudiar *muchos factores*
- ♦ Diseños 2^k
 - cuando crece el número factores (k) aumenta rápidamente el número de experimentos (N)
- ♦ *estrategia*: reducir N perdiendo un mínimo de información valiosa



Diseños factoriales fraccionarios

- ♦ **se estudia una parte o una fracción de los tratamientos de los diseños factoriales completos**
- ♦ **basados en la jerarquización de los efectos:**
 - **efectos importantes: efectos principales**
 - **seguidos de las interacciones dobles, triples, cuádruples, etc.**

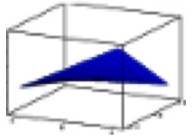


Diseños factoriales fraccionarios

- ♦ Número de efectos potencialmente de mayor interés para diseños factoriales 2^k

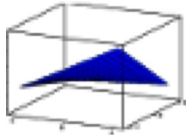
♦ *diseño 2^k total de efectos efectos no ignorables efectos ignorables*

→ 2^2	3	3	0
→ 2^3	7	6	1
→ 2^4	15	10	5
→ 2^5	31	15	16
→ 2^6	63	21	42
→ 2^7	127	28	99



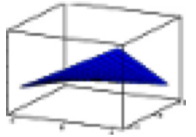
Diseños factoriales fraccionarios

- ♦ $k < 5$: los efectos potencialmente importantes superan en número a los efectos ignorables *a priori*
- si se fraccionan estos diseños se pierde información que puede ser relevante



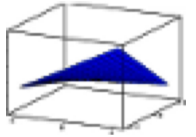
Diseños factoriales fraccionarios

- ♦ $k \geq 5$: el número de efectos ignorables supera al número de efectos potencialmente importantes
- se pueden *fraccionar* sin perder información valiosa



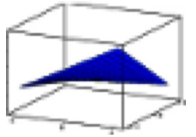
Diseños factoriales fraccionarios

- ♦ al fraccionar un diseño factorial completo:
 - *se pierde información* (se espera no poder estimar efectos que se puedan ignorar, como interacciones de alto orden)
 - se tienen *menos grados de libertad* disponibles para el error



Diseños factoriales fraccionarios

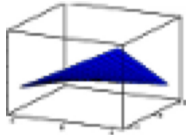
- ♦ al fraccionar un diseño factorial completo:
 - los efectos que se pueden estimar tienen al menos un *alias*
 - ★ *efectos alias*: son dos o más efectos con nombres distintos que comparten el mismo contraste (cuando se estima uno de ellos se estima el otro) por lo que *no se pueden separar*



Diseño factorial fraccionado 2^{k-1}

- La notación 2^{k-1} significa una fracción a la mitad del diseño factorial completo 2^k , $k > 2$ con $\frac{1}{2}2^k = 2^{k-1}$
- Por ejemplo: **diseño factorial 2^3 y contraste ABC**

A	B	C		ABC
-1	-1	-1		-
1	-1	-1		+
-1	1	-1		+
1	1	-1	⇒	-
-1	-1	1		+
1	-1	1		-
-1	1	1		-
1	1	1		+



Diseño factorial fraccionado 2^{k-1}

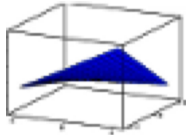
→ Por ejemplo: posibles diseños fraccionados 2^{3-1}

Exp	I	A	B	C	AB	AC	BC	ABC	Y
1	+	+	-	-	-	-	+	+	y1
2	+	-	+	-	-	+	-	+	y2
3	+	-	-	+	+	-	-	+	y3
4	+	+	+	+	+	+	+	+	y4
5	+	-	-	-	+	+	+	-	y5
6	+	+	+	-	+	-	-	-	y6
7	+	+	-	+	-	+	-	-	y7
8	+	-	+	+	-	-	+	-	y8

Fracción 1:
 $I = +ABC$

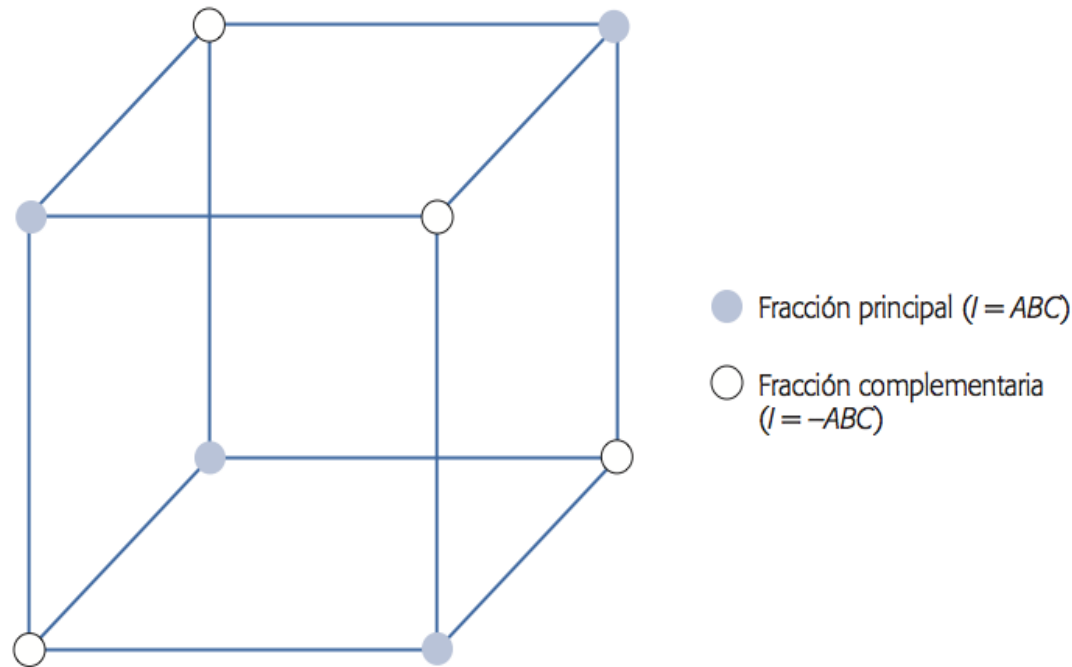
Fracción 2:
 $I = -ABC$

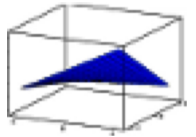
“La generación de la fracción se hace con base en los signos del contraste ABC”.



Diseño factorial fraccionado 2^{k-1}

→ Por ejemplo: **representación de los diseños fraccionados 2^{3-1}**



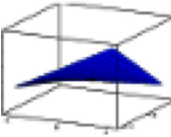


Diseños factoriales fraccionarios

- ♦ ***I***: efecto generador (neutro multiplicativo) llamado **identidad**
- ♦ cualquier columna multiplicada por sí misma da ***I***

$$A^2 = \text{identidad } I$$

- ♦ la *relación de definición* define la *estructura alias*



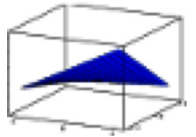
Diseños factoriales fraccionarios

- ♦ k variables (factores) a 2 niveles
- ♦ p generadores independientes
- ♦ r número de parámetros (coeficientes b) a estimar

$$\text{matriz: } 2^{k-p} = \mathbf{N} = r$$

$(2^r - 1)$ generadores $\Rightarrow \Omega$ coeficientes alias (l)

- ♦ calcular los valores de los coeficientes alias $\Rightarrow$
★ *vector de coeficientes alias*



Diseños factoriales fraccionarios

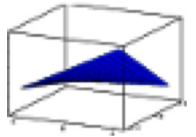
para el diseño 2^{3-1} :

- ♦ el efecto menos importante *a priori* es la interacción ABC => sacrificable

ABC: generador del diseño

- ♦ *relación de definición* para el diseño:

$$I = ABC$$



Diseños factoriales fraccionarios

- ◆ multiplicando cualquier columna por la *relación de definición* se obtiene el *alias* para esa columna

$$\rightarrow \mathbf{A} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{ABC} = \mathbf{A}^2\mathbf{BC}$$

- ◆ dado que el cuadrado de cualquier columna es **I**:

$$\rightarrow \mathbf{A} = \mathbf{BC}$$

- ◆ los alias para B y C

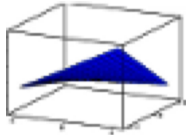
$$\rightarrow \mathbf{B} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{ABC} = \mathbf{AB}^2\mathbf{C}$$

$$\rightarrow \mathbf{C} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{ABC} = \mathbf{ABC}^2$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{AC}$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{AB}$$

“Estructura Alias”



Diseños factoriales fraccionarios

→ 4 experimentos $\Rightarrow$ 4 coeficientes l

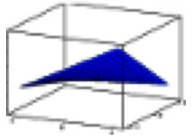
→ coeficientes *alias*:

$$\blacklozenge l_0 = b_I + b_{ABC}$$

$$\blacklozenge l_1 = b_A + b_{BC}$$

$$\blacklozenge l_2 = b_B + b_{AC}$$

$$\blacklozenge l_3 = b_C + b_{AB}$$



Diseños factoriales fraccionarios

→ matriz: 2^{3-1}

→ vector de coeficientes alias $\Rightarrow \mathbf{L}$

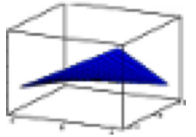
$$\rightarrow \mathbf{y} = \mathbf{X} \mathbf{L} \Rightarrow \mathbf{L} = \frac{\mathbf{X}^T}{N} \mathbf{y}$$

$$l_0 = \frac{1}{4} (y_1 + y_2 + y_3 + y_4)$$

$$l_1 = \frac{1}{4} (y_1 - y_2 - y_3 - y_4)$$

$$l_2 = \frac{1}{4} (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4)$$

$$l_3 = \frac{1}{4} (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4)$$



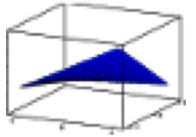
Diseños factoriales fraccionarios

Resolución del diseño (R)

- indica qué tan bien pueden estudiarse los efectos potencialmente importantes mediante el diseño
- estrategia: elegir diseños fraccionados en los cuales los efectos potencialmente importantes sean alias de efectos que sea razonable suponer que son poco importantes.
- igual al número de elementos del menor generador.

Por ejemplo, para un diseño de 5 factores y de resolución III:

$$2^5_{\text{III}}$$



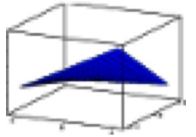
Diseños factoriales fraccionarios

resolución II: algunos efectos principales se calculan como *alias*
 $(b_i + b_j)$

resolución III: los efectos principales no son alias entre ellos

→ efectos principales como alias con las interacciones de 1º orden y estas con otras interacciones de 1º orden.

→ $(b_i + b_{jk})$



Diseños factoriales fraccionarios

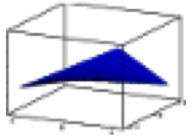
resolución IV: ningún efecto principal es alias de otro, ni de interacción 1º orden

→ efectos principales como alias con interacciones de 2º orden

$$(b_i + b_{jkl})$$

→ algunas interacciones de primer orden como alias

$$(b_{ij} + b_{kl})$$



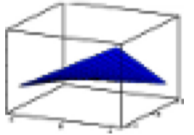
Diseños factoriales fraccionarios

resolución V: ningún efecto principal o interacción de 1º orden es alias de otro

→ efectos principales como alias con interacciones de 3º orden
 $(b_i + b_{jklm})$

→ interacciones de 1º orden como alias con las interacciones de 2º orden
 $(b_{ij} + b_{klm})$

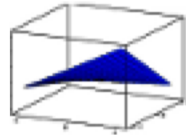
a > resolución > información



Diseños factoriales fraccionarios

Diseños *Plackett y Burman* (2º guerra mundial)

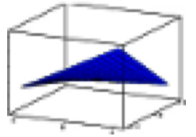
- ♦ diseños con resolución III:
factores $k=N-1$
experimentos $N=2^{k-p}$
- ♦ el número de puntos del diseño N , no es necesariamente potencia de 2, pero si es múltiplo de 4



Diseños factoriales fraccionarios

Matrices de Hadamard

- ♦ matrices cuadradas $X_N : (N \times N)$
- ♦ la inversa de la matriz es la matriz transpuesta/número de experimentos
 - $X^T X = N \times I_N$
 - $(X^T X)^{-1} = 1/N \times I_N \Rightarrow X^{-1} = \frac{X^T}{N}$



Diseños factoriales fraccionarios

Matrices de Hadamard

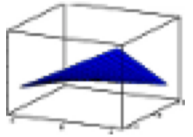
- ♦ número de experimentos: $N = \text{múltiplo de } 4, N \neq 2^q (q > 3)$

$N = 12, 20, 24, 28, 36, \dots, 404$

$N = 12$ + + - + + + - - - + - (11 signos)

$N = 20$ + + - - + + - + - + - + - - - - + + - (19 signos)

$N = 24$ + + + + + - + - + + - - + + - - + - + - - - -



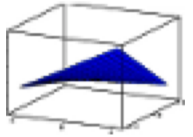
Diseños factoriales fraccionarios

Matrices de Hadamard:

Diseño para $N-1 = 11$ factores en $N=12$ corridas

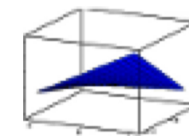
1	+	+	+	-	+	+	+	-	-	-	+	-
2	+	-	+	+	-	+	+	+	-	-	-	+
3	+	+	-	+	+	-	+	+	+	-	-	-
⋮												
12	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

columna de +



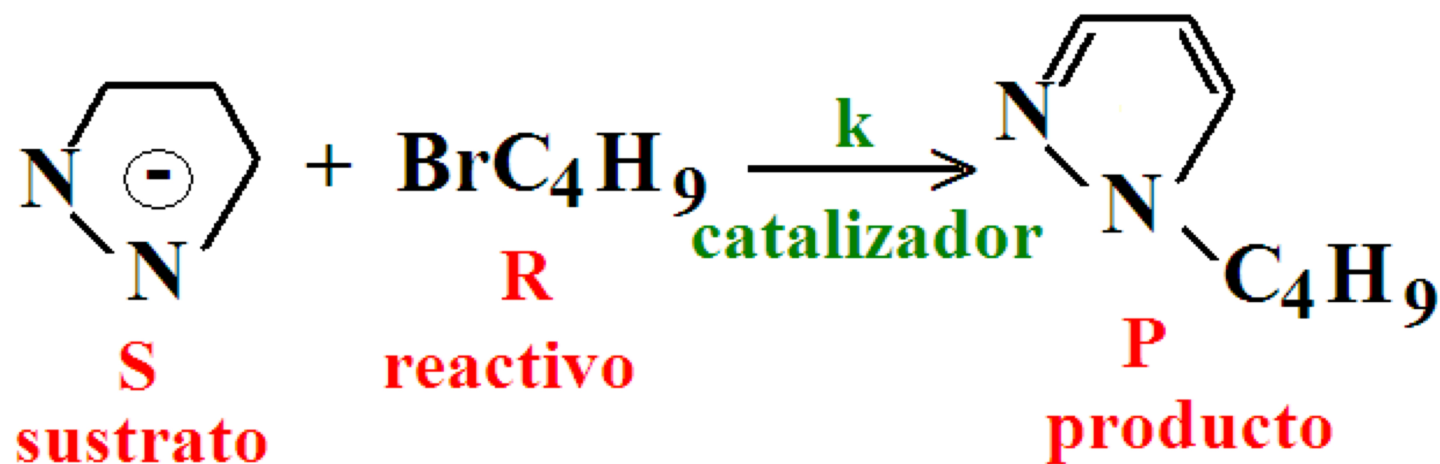
Diseños factoriales fraccionarios

- efecto de **(N-1) factores** con **N experimentos**, **p parámetros** a determinar **$N \geq p$**
- **factores, U_j** : variables naturales cuyos valores se pueden controlar (cualitativos o cuantitativos) → ***variables codificadas*** (reducidas y centradas)
- **efecto, b_j** : cambio en la respuesta ocasionado por un cambio en el nivel del factor
- **nivel**: categoría de un factor



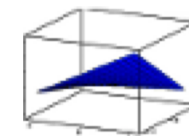
Un ejemplo: *experimento explotatorio*

- Estudiar el efecto de 10 factores sobre la reacción:

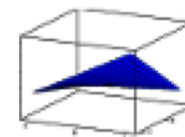


♦ Factores:

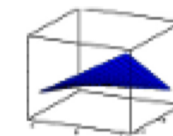
Quimiometría



U_1 : porcentaje de NaOH	40%	50%
U_2 : temperatura	80°C	110°C
U_3 : catalizador	TBAB	cetil-TMAB
U_4 : agitación	sin	con
U_5 : tiempo	90 min	3430 min
U_6 : volumen de solvente orgánico	100 ml	200 ml
U_7 : volumen de agua	30 ml	60 ml
U_8 : relación S/NaOH	1	2
U_9 : relación k/S	0,25	4
U_{10} : relación R/S	1	5
	-1	+1



- ◆ Diseño
- ◆ $X_{ij} \rightarrow U_{ij}$
- ◆ ¿Se pueden hacer todos los experimentos?
- ◆ Hacer los experimentos al azar
- ◆ Obtener y_i (**respuesta**): % de rendimiento
- ◆ Calcular b_j (**efecto sobre la variable i**)
- ◆ Control



Exp	X ₀	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	X ₇	X ₈	X ₉	X ₁₀	X ₁₁	y(%)
1	+	+	+	-	+	+	+	-	-	-	+	-	42
2	+	-	+	+	-	+	+	+	-	-	-	+	3
3	+	+	-	+	+	-	+	+	+	-	-	-	57
4	+	-	+	-	+	+	-	+	+	+	-	-	38
5	+	-	-	+	-	+	+	-	+	+	+	-	37
6	+	-	-	-	+	-	+	+	-	+	+	+	74
7	+	+	-	-	-	+	-	+	+	-	+	+	54
8	+	+	+	-	-	-	+	-	+	+	-	+	56
9	+	+	+	+	-	-	-	+	-	+	+	-	64
10	+	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+	+	65
11	+	+	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+	59
12	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	15

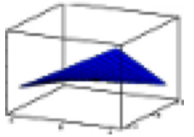
matriz experimental

matriz del modelo (Hadamard 12x12): X

error

vector de respuestas

promedio de las medidas



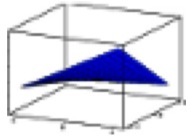
→ efecto de (N-1) factores

→ notación vectorial: $\mathbf{B} =$

$$\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_j \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{bmatrix}$$

→ p : número de coeficientes (efectos) incluyendo b_0

$$\star p = N$$



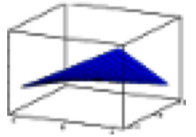
→ modelo: $\mathbf{y} = \mathbf{X} \mathbf{B}$

→ $\mathbf{B} = \mathbf{X}^{-1} \mathbf{y}$

→ $\mathbf{X}^{-1} = \frac{\mathbf{X}^T}{N}$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{N} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

* $\mathbf{y} = 47 + 8,3 x_1 - 2,3 x_2 + 0,5 x_3 + 8,8 x_4 - 8,2 x_5 - 2,2 x_6 + 1,3 x_7 +$
 $4,2 x_8 + 7,7 x_9 + 9,0 x_{10} + 4,8 x_{11}$



$$\star y = 47 + 8,3 x_1 - 2,3 x_2 + 0,5 x_3 + 8,8 x_4 - 8,2 x_5 - 2,2 x_6 + 1,3 x_7 + 4,2 x_8 + 7,7 x_9 + 9,0 x_{10} + 4,8 x_{11}$$

→ $b_0 = 47 \rightarrow$ promedio

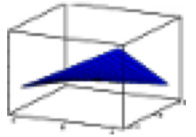
→ b_{11} (factor *dummy*) $\approx$ error = 4,8

→ b_2 (T), b_3 (catalizador), b_6 (V_{sol}), b_7 (V_{agua}), b_8 (S/OH⁻) < 4,8



despreciables

→ < T, catalizador más barato, menores V



$$\star y = 47 + 8,3 x_1 - 2,3 x_2 + 0,5 x_3 + 8,8 x_4 - 8,2 x_5 - 2,2 x_6 + 1,3 x_7 + 4,2 x_8 + 7,7 x_9 + 9,0 x_{10} + 4,8 x_{11}$$

- b_{10} = relación R/S (5) es el factor más importante
- b_1 = % NaOH (50%)
- b_4 = agitación (con)
- b_5 = tiempo (90 min)
- b_9 = relación k/S (4)