

OPTIMIZACION DE MULTIPLES RESPUESTAS POR EL METODO DE LA FUNCION DE CONVENIENCIA PARA UN DISEÑO DE MEZCLAS

Margarita Nuñez de Villavicencio Ferrer¹, Instituto de Investigaciones para la Industria Alimenticia,
Ciudad de La Habana, Cuba

RESUMEN

Se describen la función de conveniencia para respuestas múltiples propuesta por Lowe para problemas en los cuales puede asumirse una relación lineal entre las respuestas y sus conveniencias individuales, y las funciones de conveniencia no lineales de Harrington para una y dos colas para problemas con límites de especificaciones en los valores de las respuestas, así como la función de conveniencia global. Mediante el procedimiento descrito utilizando el método de la función de conveniencia fue posible optimizar los resultados experimentales obtenidos a partir de un diseño de mezclas D-óptimo para la formulación de una limonada empleando las funciones de conveniencia de Harrington de dos colas para ambas respuestas y maximizando la función de conveniencia global.

ABSTRACT

In the present paper, the function of desirability for multiple responses proposed by Lowe for problem in which a linear relationship among responses and their individual desirability can be assumed and, Harrington non-linear functions of desirability for one and two sides, and the function of overall desirability, are described. Experimental values obtained from a D-optimal mixtures design for the formulation of a lemonade could be optimized with the procedure described, using Harrington's two-side desirability functions for both responses and maximizing the overall desirability function.

MSC: 62P30

1. INTRODUCCION

En el desarrollo de un producto un problema típico es encontrar un conjunto de condiciones o valores de las variables de entrada, que den como resultado el producto más conveniente en términos de sus características o respuestas en las variables de salida. El procedimiento para resolver este problema generalmente involucra dos pasos: (1) predecir las respuestas de las variables dependientes Y, ajustando las respuestas observadas usando una ecuación basada en los niveles de las variables independientes X y (2) buscar los niveles de las variables independientes X que simultáneamente producen los valores de las variables de respuestas predichas más convenientes. (Winer, 1971)

Cuando las proporciones en que se mezclan los ingredientes de un producto constituyen las variables de entrada o "independientes" lo más adecuado es emplear un Diseño de Mezclas. El empleo de este tipo de diseños adquiere gran importancia en campos como el de la investigación en alimentos, debido a que el desarrollo de cualquier nuevo producto o la modificación de uno ya existente que implique la mezcla de dos o más ingredientes requiere de alguna forma la realización de experimentos de mezcla. (Hare, 1974)

Como resultado de un diseño de mezclas es posible obtener un modelo matemático que permite determinar el efecto de los ingredientes sobre las características del producto y predecir los valores de las variables de respuestas a partir de los niveles de las variables "independientes".

Obtener el mejor producto implica además, encontrar el balance de ingredientes que optimice su calidad global, es decir, determinar los niveles óptimos de los componentes de la mezcla para la calidad global del producto. (Bowless y Montgomery, 1972)

Existen varios métodos de optimización para este tipo de problemas, entre ellos el procedimiento de superficie de respuesta extendido, el método de distancia generalizada, el método de regiones de confianza restringidas (Castillo, 1996), el método de minimización de la suma de cuadrados de las desviaciones y el método de función de conveniencia, que será el que se describirá aquí. (Anderson y Whitcomb, 1993, Box, 1965)

¹E-mail: Agu@iia.edu.cu

2. PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN DE MÚLTIPLES RESPUESTAS

En muchos problemas de optimización experimental, es inusual encontrar sólo una respuesta que necesite ser optimizada, en cambio, frecuentemente deben ser consideradas varias respuestas. (Walter y col. 1999). El objetivo de la optimización es la selección, independientemente de la multiplicidad de soluciones potenciales, de la mejor solución con respecto a algún criterio bien definido. La elección de este criterio, el objetivo, es un paso esencial en un estudio (Beveridge y Schechter, 1970). Una función objetivo es aquella que expresa el objetivo en términos de los factores del sistema y/o respuestas. Las funciones objetivo basadas en estrategias económicas tienden a ser altamente complejas, mientras que las basadas en consideraciones técnicas y de calidad son comúnmente simples. (Walters y col. 1999)

Considere la mezcla necesaria para hacer una limonada. Esta mezcla tiene tres componentes, agua, azúcar y jugo de limón que se mezclaron en distintas proporciones según un diseño de mezclas D-óptimo, a las mezclas así obtenidas se les midieron dos respuestas, intensidad del dulzor e intensidad de la acidez por un grupo de jueces entrenados utilizando una escala no estructurada de 10 puntos. Con estos resultados se ajustaron modelos matemáticos que permiten predecir los valores de las variables respuestas en función de los componentes de la mezcla. Si se pretendiera comercializar esta limonada, debe tenerse en cuenta que su aceptación está dada por su balance ácido dulce, por lo que podría usarse una función objetivo para indicar formalmente cuánto dulzor y cuánta acidez deben combinarse para ser optimizados. En este caso la función objetivo puede ser simplemente la suma del dulzor y la acidez juzgados por el panel. Si se deseara enfatizar el contenido de alguna de las dos características esta puede ponderarse. También pueden establecerse valores convenientes o metas para una o ambas respuestas y el objetivo pudiera ser minimizar la desviación con respecto a ese valor o establecer una función que relacione, de alguna forma, los valores de las respuestas con valores convenientes y el objetivo sería maximizar esta función.

3. FUNCIONES DE CONVENIENCIA

Lowe (1967) propone un procedimiento simple para formar funciones de conveniencia de respuestas múltiples. Si y_{ji} y y_{jD} son mediciones de los valores más indeseables (I) y más deseables (D) de una respuesta y_j respectivamente y si se asume que la conveniencia se incrementa linealmente de y_{ji} a y_{jD} , entonces la conveniencia de la respuesta se calcula como:

$$d_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{para } y_{ij} < y_{ji} \\ 1 & \text{para } y_{ij} > y_{jD} \\ (y_{ij} - y_{ji})(y_{jD} - y_{ji}) & \text{para } y_{ji} \leq y_{ij} \leq y_{jD} \end{cases}$$

donde y_{ji} es la i -ésima respuesta de y_j y d_{ij} es el valor de conveniencia calculado para esa respuesta. Aquí “<” y “>” pueden interpretarse como “peor que” y “mejor que”. Obsérvese que d_{ij} es adimensional entre cero y uno.

Según lo establecido por el panel que evaluó la limonada, que se pretende formular, se tiene que para la respuesta intensidad del dulzor un valor menor de 6 puntos es indeseable, mientras que el valor más deseable es 8 puntos. Por otra parte para la intensidad de la acidez se tienen valores de 5 y 7 puntos para los valores indeseables y más deseables respectivamente. Para ambas respuestas los valores de la función de conveniencia están dados por d_{i1} y d_{i2} respectivamente y se calculan mediante:

$$d_{i1} = \begin{cases} 0 & \text{si } y_{i1} < 6 \\ 1 & \text{si } y_{i1} > 8 \\ 2y_{i1} - 12 & \text{si } 6 \leq y_{i1} \leq 8 \end{cases} \quad d_{i2} = \begin{cases} 0 & \text{si } y_{i2} < 5 \\ 1 & \text{si } y_{i2} > 7 \\ 2y_{i2} - 10 & \text{si } 5 \leq y_{i2} \leq 7 \end{cases}$$

En la Figura 1 se ilustra este procedimiento, por medio del cual pueden transformarse los valores de las respuestas predichas en valores de conveniencia aplicados al ejemplo de la limonada. El eje vertical es el de la conveniencia que va de 0.0 (no conveniente) a 1.0 (conveniente). En la parte inferior se representan los ejes de las respuestas, haciendo coincidir los valores de más indeseables y deseables con los extremos izquierdo y derecho de la escala respectivamente. En este gráfico puede observarse cómo partiendo de un valor de las variables respuestas es posible obtener el correspondiente valor de conveniencia.

Obsérvese que a los valores de respuestas a la izquierda de la escala se les asignan conveniencias cero, mientras que los valores a la derecha se les asignan conveniencias uno, esto último puede no ser adecuado para el caso de la limonada ya que esta no debe ser extremadamente dulce ni extremadamente ácida.

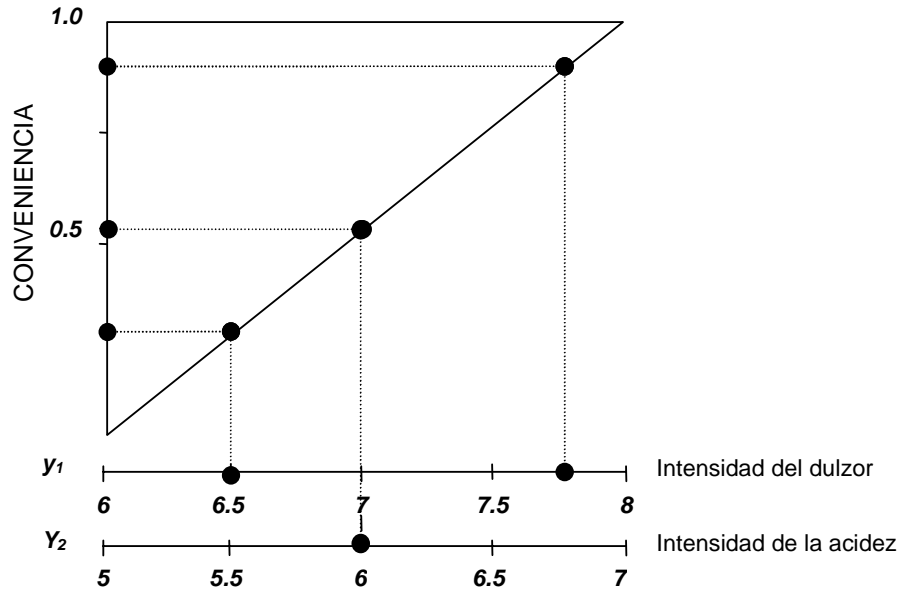


Figura 1. Conveniencia como una función lineal de primer orden de las respuestas.

Una alternativa es la función de conveniencia propuesta por Harrington (1965), que no asume una relación lineal de primer orden entre respuestas y conveniencias y en el caso de dos colas está dada por:

$$d_{ij} = e^{-\left[-(|y'_{ij}|)^n \right]}$$

donde n es un número positivo no necesariamente entero ($0 < n < \infty$), $|y'_{ij}|$ es el valor absoluto de y'_{ij} y éste es una transformación de las respuestas y_{ij} , tal que:

$$y'_{ij} = \begin{cases} -1 & \text{si } y_{ij} = y_{j-} \\ 1 & \text{si } y_{ij} = y_{j+} \\ \frac{2y_{ij} - (y_{j+} + y_{j-})}{(y_{j+} - y_{j-})} & \text{si } y_{ij} \neq y_{j-} \text{ ó } y_{ij} \neq y_{j+} \end{cases},$$

y_{j-} es el límite inferior y y_{j+} el límite superior de las especificaciones para las respuestas, y'_{ij} para los valores definidos, mide la distancia de y_{ij} al punto medio entre las especificaciones superiores e inferiores.

Aplicando esta función al ejemplo de la limonada, tomando como límites de especificaciones para ambas respuestas los valores antes mencionados se tienen, para $n = 2$, las siguientes funciones de conveniencia para ambas respuestas:

$$d_{i1} = \begin{cases} e^{-1} & \text{si } y_{ij} = 6 \\ e^{-1} & \text{si } y_{ij} = 8 \\ e^{-(|y_{ij}-7|)^2} & \text{si } y_{ij} \neq 6 \text{ ó } y_{ij} \neq 8 \end{cases} \quad d_{i1} = \begin{cases} e^{-1} & \text{si } y_{ij} = 5 \\ e^{-1} & \text{si } y_{ij} = 7 \\ e^{-(|y_{ij}-6|)^2} & \text{si } y_{ij} \neq 5 \text{ ó } y_{ij} \neq 7 \end{cases}$$

En la Figura 2 se muestra la función de conveniencia d_1 obtenida para la intensidad del dulzor, análogamente puede construirse la función de conveniencia para la intensidad de la acidez. Esta función es más adecuada al caso del ejemplo pues como puede observarse, los valores de conveniencia disminuyen en

ambos extremos de la escala, es decir, tan inconveniente es una limonada poco dulce o ácida como una muy dulce o muy ácida.

La función de conveniencia de Harrington, cuando se usan límites de especificaciones de un solo lado (una cola) toma una forma especial de la curva de crecimiento de Gompertz.

$$d_{ij} = e^{-e^{-y'_{ij}}}$$

donde $y'_{ij} = 0$ en el límite de especificación. La transformación de y_{ij} en y'_{ij} se realiza escogiendo dos pares ordenados de (y_{ij}, d_{ij}) y calculando $y'_j = -\ln[-\ln(d_{ij})]$, de los pares ordenados resultantes puede obtenerse la línea recta $y'_{ij} = b_0 + b_1 y_{ij}$.

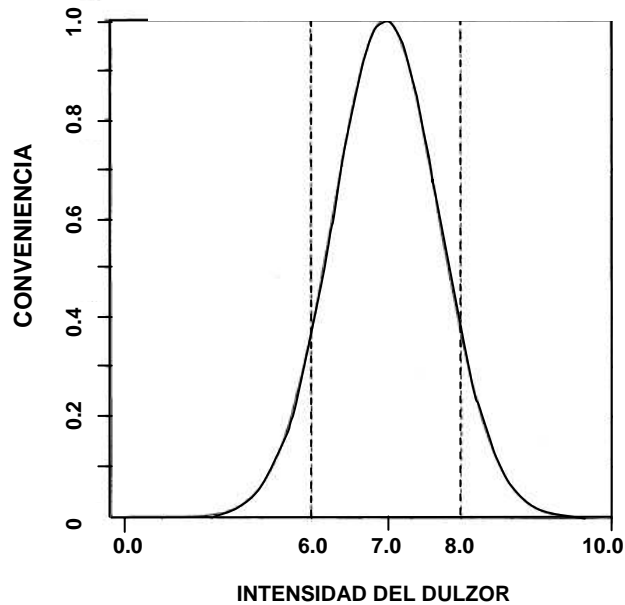


Figura 2. Función de conveniencia de dos colas de Harrington para la intensidad del dulzor de una limonada ($n = 2$).

Es posible encontrar otras formas alternativas para las funciones de conveniencia, algunas de las más útiles son las llamadas de “forma libre”, las cuales suelen ser desarrolladas en discusiones entre los interesados y para las pueden obtenerse niveles de especificaciones más significativos. Derringer y Suich (1980) dan varios ejemplos.

4. FUNCION DE CONVENIENCIA GLOBAL

Hay varias formas en las cuales se pueden combinar las conveniencias individuales, una de ellas podría ser la media aritmética. Sin embargo, en la realidad existe una premisa básica: si una característica es tan pobre que no es conveniente el uso del producto, tal producto no debe ser aceptado, sin tener en cuenta el resto de las características, es decir, no es posible vender una limonada muy poco dulce aunque su acidez sea la correcta. La reacción del consumidor a un producto está basada en gran medida en las características menos deseables de tal producto debido a que son un foco de problemas potenciales. (Harrington, 1965)

El modelo matemático análogo a esta reacción psicológica es la media geométrica de los valores de conveniencia individuales. (Harrington, 1965; Derringer y Suich, 1980)

$$D = \left(\prod_{i=1}^n d_i \right)^{\frac{1}{n}}$$

es evidente que si algún valor de d_i es cero, el valor de D asociado será cero.

La Figura 3 muestra como varía D como función de d_1 y d_2 , nótese que si algún valor de d_i es cero, D será cero, sin tener en cuenta el otro valor.

Walters (1999) muestra varios ejemplos de distintos tipos de funciones de conveniencia global, la forma de la función D depende del tipo de función de conveniencia individual que se asuma.

El procedimiento descrito proporciona una vía para transformar los valores predichos para múltiples variables dependientes en un valor simple de conveniencia global. El problema de la optimización simultánea de varias variables respuestas será entonces el de seleccionar las proporciones de los componentes de la mezcla (variables predictoras) que maximicen la conveniencia global.

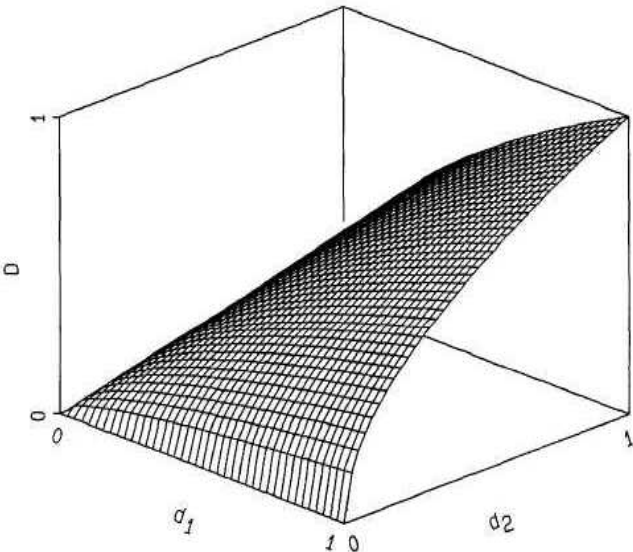


Figura 3. Conveniencia global como función de d_1 y d_2 .

5. OPTIMIZACION DE RESPUESTAS MULTILES

Para buscar los valores de los componentes que producen resultados con la mayor conveniencia global se plantean dos métodos. El primero emplea un procedimiento de optimización general de la función de conveniencia global (el método símplex) para encontrar los valores óptimos de los componentes dentro del rango experimental específico. El segundo busca en cada combinación específica de valores de los componentes la combinación que produzca la conveniencia global óptima, en este caso la respuesta puede no ser única. (Chitra, 1990)

Para la optimización de la conveniencia global tomado como función la media geométrica y como funciones de conveniencias de las respuestas individuales la función de Harrington de dos colas, empleando el segundo método, en la formulación de la limonada, es necesario, por razones tecnológicas, agregar restricciones adicionales con respecto a los componentes de la mezcla sería conveniente que se empleara: la menor cantidad de agua posible por encima de 60%, la menor cantidad de jugo de limón entre 10 y 20 % y el azúcar mínimo necesario entre 10 y 30 %.

Al imponer estas restricciones se obtuvieron las siguientes soluciones “óptimas”:

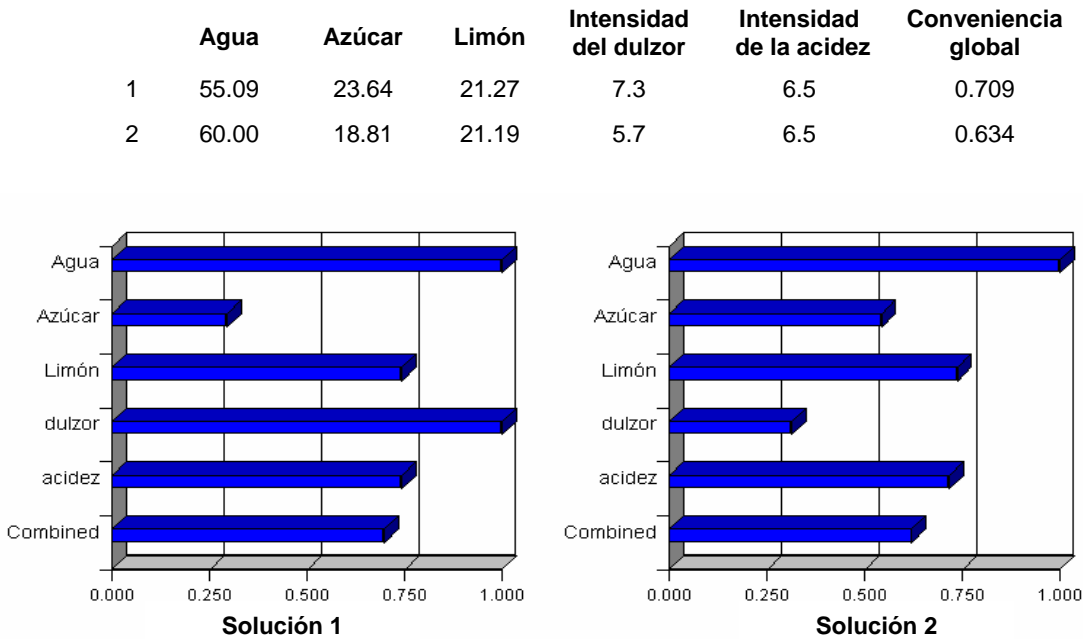


Figura 4. Histograma de la función de conveniencia para las soluciones.

La Figura 4 muestra los histogramas de la función de conveniencia para cada componente, las respuestas y la función de conveniencia global de cada solución. En ellos se observa en qué medida cada solución satisface las condiciones impuestas, la longitud de las barras representan el valor alcanzado por la función de conveniencia para cada componente, cada respuesta y la conveniencia global o combinada.

Las soluciones encontradas alcanzan valores de 0.709 y 0.634 de la función de conveniencia global los cuales pudieran ser satisfactorios aunque no se satisfagan exactamente las restricciones impuestas, por otra parte, el valor de intensidad del dulzor obtenido para la primera solución (7.3) está muy cercano al centro del rango especificado, el de la segunda está fuera del rango especificado, con ambas soluciones se obtiene el mismo valor de intensidad de la acidez (6.5), que está dentro del rango especificado. La primera solución empleará una proporción de agua algo inferior al límite impuesto, el jugo de limón y el azúcar están dentro de los rangos, la segunda solución empleará proporciones de los componentes dentro de los rangos especificados. Con esta información es posible determinar cuál de las dos soluciones se tomarán para estudios posteriores de aceptación.

6. CONCLUSIONES

El método de la función de conveniencia permite resolver problemas de la optimización experimental con múltiples respuestas.

Las funciones de conveniencia formadas por el procedimiento propuesto por Lowe son adecuadas para el caso en que puede asumirse que la conveniencia se incrementa linealmente desde el valor menos conveniente al más conveniente y asumen valores de conveniencia cero y uno para respuestas por debajo y por encima del valor menos conveniente y el valor más conveniente respectivamente.

La función de conveniencia de Harrington de dos colas es adecuada cuando se establecen límites de especificaciones superiores e inferiores de las variables respuestas, la conveniencia es máxima entre esos límites y disminuye hacia los extremos de la escala de las respuestas.

La función de conveniencia de Harrington de una cola se utiliza cuando se establece un límite superior o inferior de las variables respuestas, por encima o por debajo del cual la conveniencia crece.

Utilizando el método de la función de conveniencia fue posible optimizar los resultados experimentales obtenidos a partir de un diseño de mezclas D-óptimo para la formulación de una limonada empleando las funciones de conveniencia de Harrington de dos colas para ambas respuestas y maximizando la función de conveniencia global.

REFERENCIAS

- ANDERSON, M.J and P.J. WHITCOMB (1993): Optimizing formulation performance with desirability functions, **Quebec Metallurgical Conference**.
- BEVERIDGE, G.S.G. and R.S. SCHECHTER (1970): **Optimization: Theory and Practice**, Mc Graw Hill, New York.
- BOWLES, M.L. and MONTGOMERY, D.C. (1997): "How to formulate the ultimate Margarita: a tutorial on experiments with mixtures", **Qual. Eng.** 10, 2, 239-253.
- BOX, M.J. (1965): "A new method of constrained optimization and a comparison with other methods", **Computer J.**, 8, 42.
- CHITRA, S.P. (1990): "Multi-response optimization for designed experiments", **Proc. Statistical Computing Section. Am Stat Ass.** Anaheim, California, Agosto 6-9.
- DERRINGER, G.C. and SUICH, R. (1980). "Simultaneous optimization of several response variables", **J. Qual Technol.** 12, 214-219.
- HARE, L.B. (1974): "Mixture designs applied to food formulation", **Food Technol.**, 28, 50,52-54,56,62.
- HARRINGTON, E.C. (1965): "The desirability function", **Ind. Qual Control** 21, 494-498.

- LOWE, C.W. (1967): "A report on simplex evolutionary operations for multiple responses". **Trans. Inst. Chem. Eng.**, 45 T3-T7.
- WALTERS, F.H.; S.L. MORGAN; L.R. PARKER, Jr. and S.N. DEMING (1999): "Sequential Simplex Optimization", **Electronic** reprint, Multisimplex AB, Karlskrona, Sweden.
- WINER, B. J. (1971): **Statistical principles in experimental design** (2nd ed.). New York: McGraw Hill.