

USO DE LA FUNCIÓN DE DESEABILIDAD PARA LA OPTIMIZACIÓN DE UN PROCESO DE PRODUCCIÓN DE POLIESTIRENO

USE OF DESIRABILITY FUNCTION FOR OPTIMIZATION OF POLYSTYRENE PRODUCTION PROCESS

Bruno de Jesus Rahmer^{1,♦}, Hernando Garzón Saénz², José Manuel Solana Garzón³

RESUMEN

En este paper se pretende diseñar un modelo de optimización multirespuesta para un proceso de producción químico no optimizado en una entidad del clúster petroquímico colombiano. Se realiza la estimación y diagnóstico de un diseño experimental tipo central compuesto. Las variables respuestas corresponden al costo global de operación y rendimiento del proceso, mientras que los factores controlables son: Temperatura (°C), Concentración del polímero (%) y Concentración de oxígeno (%). Se determinan las interacciones entre factores y la deseabilidad compuesta, cuyo valor indica que en la quinta ejecución se localiza el óptimo global de la operación.

Palabras claves: Función de deseabilidad, diseño central compuesto, optimización multi-respuesta, diseño experimental, sector petroquímico.

ABSTRACT

This paper aims to design a multi-response optimization model for a non-optimized chemical production process in a Colombian entity located in a petrochemical cluster. The estimation and diagnosis of an experimental composite central type design are carried out. The response variables correspond to the global cost of operation and yield, while the controllable factors are: Temperature (°C), Polymer concentration (%) and Oxygen concentration (%). The interactions between factors and desirability function are determined and indicate that the

¹Facultad de Ingeniería. Fundación Universitaria Tecnológico Comfenalco. Cartagena, Colombia. orcid.org/0000-0003-1925-0432

²Facultad de Ingeniería. Fundación Universitaria Tecnológico Comfenalco. Cartagena, Colombia. hnando2001@gmail.com. orcid.org/0000-0002-5592-7298

³Facultad de Ingeniería. Fundación Universitaria Tecnológico Comfenalco. Cartagena, Colombia. ingjosemsolanag@gmail.com. orcid.org/0000-0001-6423-8964

♦Autor para correspondencia: brunodejesus.2509@gmail.com

global optimum of the operation is located in the fifth execution.

Keywords: Desirability function, composite central design, multi-response optimization, design of experiments.

INTRODUCCIÓN

El aumento creciente de las exigencias impuestas por el entorno mercantil, integrado por agentes racionales que demandan bienes tangibles e intangibles, obliga a las organizaciones a elevar su nivel de productividad y optimizar sus procesos internos. Sólo a través de esta vía es posible satisfacer las expectativas subjetivas de los consumidores finales. En ese sentido, la filosofía del control total de la calidad suministra una plataforma metodológica que circunscribe un conjunto de estrategias, técnicas y mecanismos analíticos direccionados a monitorizar de los outputs de los procesos y así evitar la ocurrencia de no conformidades. La planificación de los flujos de trabajos y operaciones internas involucradas exige un mayúsculo nivel de detalle, pues la calidad intrínseca de los bienes y servicios es representada continuamente por una multiplicidad de rasgos distintivos que se hallan en función de un set de factores controlables y otros de naturaleza no controlable. Por ello, conviene obtener una aproximación exhaustiva al comportamiento del proceso productivo mediante una escrupulosa actividad experimental que posibilite la determinación de una configuración tentativa de valores (Uthman *et al.*, 2018).

Una revisión crítica de la literatura especializada devela que existe una cantidad limitada de estudios investigativos en torno a la optimización de procesos de producción de poliestireno. Así, por ejemplo, estudios como el propuesto por Miranda *et al.* (2013) tiene por objeto la optimización sincrónica de un conjunto de respuestas de tipo biológico siguiendo la metodología de superficie de respuesta. Otros estudios que contemplan un diseño de optimización multirespuesta (Candiotti *et al.*, 2014). En este dominio de análisis, se hallan estudios que tienen por objeto garantizar que procesos fabriles alcancen el máximo rendimiento permisible Alimirzaloo *et al.* (2017). Una mirada de aplicaciones de modelos multirespuesta ha sido propuesta en la literatura especializada para optimizar procesos químicos- como el analizado en el caso presente- en los cuales concurren múltiples variables respuesta (del Ángel Sánchez *et al.*, 2015). A tenor de lo expuesto, se afirma que la formulación de modelos multivariados en el contexto del diseño experimental avanzado constituye un atractivo enfoque de abordaje para controlar y evaluar procesos productivos. Entre sus ventajas se anota el ahorro sustantivo de recursos y esfuerzos, en oposición a los rutinarios procedimientos univariantes (Vanhatalo *et al.*, 2017). Sin embargo, ha de subrayarse que la fijación de una solución compromiso suele ser un verdadero dilema debido a la existencia de soluciones Pareto óptimas, pues en la medida que ocurren mejorías en ciertas metas, otros objetivos son degradados.

En el presente paper se desarrolla una estrategia de optimización de un proceso de producción de poliestireno, mediante el cómputo de la función de deseabilidad. Las variables respuesta son: Densidad y Rendimiento global de la operación. Se traza como objetivo ulterior en esta investigación la maximización de la media geométrica de las funciones de transferencia de utilidad, previa aplicación de un diseño factorial ampliado con grupos axiales, a fin de evaluar el impacto de ciertos predictores sobre las respuestas del proceso (Bukzem *et al.*, 2016).

Los factores relevantes que han sido considerados en el experimento son: Temperatura (°C), Concentración del polímero (%) y Concentración de oxígeno (%), mientras que las variables respuestas son: el Costo de Operación y Rendimiento global. Finalmente, la localización de un óptimo global dará cabida a una eventual reformulación del actual esquema operacional en miras a maximizar su rendimiento y obtener productos con especificaciones reales más próximas a los valores nominales. La hipótesis de partida es que los predictores cuantitativos tienen efectos estadísticamente significativos sobre los outputs del proceso y que es posible dilucidar ciertas condiciones de operabilidad en las cuales se obtiene un resultado óptimo. La metodología aquí propuesta, está enmarcada dentro de los métodos de diseño experimental desde una perspectiva analítica multivariante. La estrategia de experimentación aquí contemplada consiste en el planeamiento y realización de un set de pruebas o experimentos virtuales con el objetivo de generar información susceptible a tratamiento estadístico y proporcionar evidencias fácticas depuradas de cualquier juicio subjetivo. De esta manera, será posible contrastar hipótesis surgidas en este sistema productivo y determinar las causas de variaciones escrutables en múltiples outputs del proceso o variables respuestas, en la medida que se introducen modificaciones las condiciones externas y/o se incorporan variables de entrada.

METODOLOGÍA

En este caso, el esquema experimental planteado consistió en un diseño factorial fraccionado y ampliado, con un grupo de puntos axiales con un total de 145 corridas experimentales. Se parte inicialmente de un modelo representado por la matriz $G(n \times k)$ siendo la cantidad de tratamientos o combinaciones de k factores de un proceso productivo. Las variables explicativas analizadas son: Concentración de oxígeno, Concentración de Polímero y Temperatura. Se trazaron como objetivos del diseño: minimizar el costo asociado a la transformación de los insumos y materias primas en outputs del proceso y maximizar el rendimiento global. Los ensayos son ejecutados aleatoriamente en procura de garantizar la validez estadística de los resultados, con k réplicas en los puntos centrales. Dado que se han incorporado puntos centrales en el modelo no se efectúa un ajuste de superficie de respuesta continua, sino que se consideran los niveles inferiores y superiores de cada factor y el punto central como candidatos para el óptimo.

En la primera fase, que corresponde al proceso de cribado, se seleccionaron aquellas variables con alta significación estadística. Para la estimación del diseño central se codifican los factores. Esto con el objeto de estandarizar las variables mediante la eliminación de las unidades de medida de las variables originales, así como también, facilitar la estimación de los modelos vía mínimos cuadrados ordinarios. El modelo de diseño central compuesto es utilizado porque se requiere de una cantidad considerablemente baja de corridas y permite la utilización de bloques para minimizar las desviaciones por heterogeneidad y factores nuisance. Como nota adicional, las corridas en bloques se realizaron de modo aleatorizado (Yaguas, 2017). El objetivo en esta fase fue determinar una adecuada aproximación funcional entre los factores extraídos en el proceso de cribado y las variables respuesta. El diseño compuesto central utilizado posibilita el ajuste de superficies de respuesta y la identificación de la configuración de los factores que optimiza las variables de salida (Kousha *et al.*, 2015).

En este esquema, los puntos centrales aportan información útil acerca de la existencia de curvaturas en el sistema. La posterior adición de puntos axiales conlleva a una estimación eficiente de los términos cuadráticos.

A modo de generalización el modelo diseño central compuesto emplazado aquí responde a la siguiente taxonomía funcional (Ghaedi *et al.*, 2015):

$$Y = b_0 \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i^2 + \sum_{i < j}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (1)$$

La correlación entre las factores y la variable salida fue expresada en función de los términos de un polinomio de segundo orden Donde Y es la respuesta, x_i las variables, b_0 es el coeficiente constante, β_i, β_{ij} , los coeficientes de interacción, lineales y cuadráticos respectivamente. El diseño de segundo orden aquí consignado permite examinar los efectos cuadráticos, además de los efectos lineales y de interacción. De esta forma, se busca mapear una región de una superficie de respuesta al hipotetizarse que el óptimo de las condiciones operativas pudiera hallarse en el interior de la región experimental. Con la formación de bloques ortogonales, se busca que los términos del modelo y los efectos de bloque sean estimados independientemente y minimiza la varianza en los coeficientes β_i de la regresión corrida⁴ (Izadiyan & Hemmateenejad, 2016; Jimenez Careaga, 2015)

En el procedimiento de ajuste vía mínimos cuadrados ordinarios permite la selección de los coeficientes β tal que la sumatoria de los cuadrados de error es minimizada. El estimador insesgado de los β_i es:

$$\hat{\beta}_i = (X_i' X_i)^{-1} X_i' y_i \quad (2)$$

Cuya matriz de covarianzas viene dada por:

$$\text{cov}(\hat{\beta}_i) = \sigma_i^2 (X_i' X_i)^{-1} \quad (3)$$

Siendo $\sigma_i^2 = \frac{\text{SCE}}{n-p}$ la varianza del error aleatorio asociado a la respuesta i -ésima.

En procura de garantizar la adecuación empírica del modelo construido se procedió a verificar formalmente el supuesto formal sobre los cuales se asienta.

A la posteridad se calculó la deseabilidad individual a partir de la función de transferencia de utilidad. El objetivo fue hallar una combinación de niveles de tratamiento tal que se maximice el rendimiento global de operación y simultáneamente se mantenga el volumen del producto final en su valor nominal. En este problema de optimización multivariante, la respuesta $Y(x)$ es una función $Y: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ del vector de variables independientes $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, donde $x_i \in \mathbb{R}$ ($i=1, 2, \dots, n$) Se introduce pues, la función de deseabilidad individual $d_i(x)$ que escala una respuesta en el intervalo $[0, 1]$, es decir, $d: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ (dos Santos *et al.* 2016). El objetivo cardinal fue minimizar las desviaciones entre los outputs y los valores nominales. Así, se maximiza la respuesta i -ésima cuando $\hat{y}_i(x)$ es igual a un valor target prefijado denotado por T_i .

⁴ La propiedad de rotabilidad garantiza que varianza de los valores estimados sea constante en todos los puntos equidistantes del centro del diseño

Una solución será inaceptable si se verifica que $\hat{Y}_i(x) \leq Y_i^-$ o $\hat{Y}_i(x) \geq Y_i^+$, esto es, que la respuesta se localiza fuera de las cotas inferior $\hat{Y}_i(x)$ y/o superior $\hat{Y}_i(x)$ del proceso productivo. En consecuencia, el grado de conformidad respecto a la respuesta tiende monótonamente a la unidad cuando ésta se aproxima al valor target T_i (Domínguez Domínguez, 2006).

La función de deseabilidad para hallar en la fase ulterior reduce el problema multivariado de optimización un problema de optimización de respuesta única, que está expresada como una transformación multiplicativa de las variables primitivas.

La función de transformación de dos colas d_i viene dada como:

$$d_i(x) = \begin{cases} 0, & \hat{y}_i(x) < Y_i^- \text{ o } \hat{y}_i(x) > Y_i^+ \\ \left[\frac{\hat{y}_i(x) - Y_i^-}{T_i - Y_i^-} \right]^1, & Y_i^- < \hat{y}_i(x) \leq T_i \\ \left[\frac{\hat{y}_i(x) - Y_i^+}{T_i - Y_i^+} \right]^1, & T_i < \hat{y}_i(x) \leq Y_i^+ \end{cases} \quad (4)$$

Finalmente, los factores experimentales adquirirán ciertos valores que producen que las características de interés analizadas alcancen un nivel deseable simultáneamente (Şimşek, et al. 2016). Dado que en el caso presente se proporcionan límites bilaterales de especificación la respuesta es aceptable si $Y_i^- < \hat{y}_i(x) \leq Y_i^+$. Se acota igualmente, que por defecto los exponentes α y β se fijan iguales a 1, sugiriendo que existe incremento lineal de la deseabilidad hacia el target.

Luego del cálculo de las deseabilidades individuales se emplea la media geométrica para calcular la deseabilidad general de las deseabilidades individuales tal y como se muestra posteriormente.

$$D_c = \left(\prod_{i=1}^r d_i^{w_i} \right)^{\frac{1}{\sum w_i}} \quad (5)$$

Siendo d_i la deseabilidad individual de la respuesta i -ésima, w_i la ponderación relativa asignada a la respuesta y $\sum w_i$ la sumatoria de los pesos asignados. Ahora bien, bajo este enfoque se descarta la existencia de posibles correlaciones entre las respuestas y por defecto, se supone que las respuestas no son interdependientes. La determinación de la deseabilidad compuesta requiere de la asignación de ponderaciones a la deseabilidad individual de la respuesta a sabiendas que variaciones minúsculas en el peso asignado inducen cambios en la combinación óptima de factores si son sensibles a ella.

La asignación de ponderaciones para cada función de deseabilidad individual se efectuó en procura de determinar, bajo un consistente criterio subjetivo, la preponderancia del alcance de un valor objetivo respecto a los demás. Finalmente, la deseabilidad compuesta se computa a partir de la media geométrica ponderada de las deseabilidades individuales para las respuestas. En adición, se introdujeron en otras herramientas de optimización gráfica tales como los gráficos de optimización, de contorno y de superficie de respuesta. En tales ilustraciones es posible visibilizar, con meridiana claridad, la región donde se hallan las condiciones operativas deseables.

RESULTADOS Y DISCUSIONES

En la Tabla 1 se trazan los resultados del proceso de recopilación de información efectuado de manera aleatorizada. Se reportan algunos estadísticos descriptivos (de tendencia central y de dispersión) relevantes. Cada factor consta de un nivel de operación inferior y superior. Nótese que, ya que la desviación estándar asociada a cada variable es moderada, es esperable un significativo grado de heterogeneidad en los outputs del proceso.

Tabla 1. Factores experimentales y estadísticos descriptivos

VARIABLE	Media	Desviación Estándar	Nivel Inferior	Límite Superior
Temperatura (°C)	183,569	10,156	170°C	200 °C
Concentración del polímero (%)	2,421	7,050	10	15
Concentración de oxígeno (%)	0,267	8,328	2	3
COSTO GLOBAL DE OPERACIÓN (\$)	65,985	9,641		
RENDIMIENTO GLOBAL (%)	91,071			

En la medida que la pendiente incrementa el pronunciamiento de las diferencias entre niveles superiores e inferiores y se colige que el efecto sobre las variables respuestas, a saber, rendimiento y costo, es significativo. Otro elemento de juicio para evaluar el comportamiento de los gráficos de interacción reportados en la Figura 1 consiste en evaluar si las líneas son paralelas o no. Se afirmará que no existe interacción entre un par de factores tratamiento siempre y cuando sus efectos sobre la respuesta sean de tipo aditivo aditivos, lo que equivale a decir que la discrepancia en las respuestas medias teóricas en un par de niveles cualesquiera asociados a un factor *i-ésimo* permanece invariable en la totalidad de niveles del otro factor y recíprocamente.

Nótese que, por ejemplo, para la variable respuesta Costo no se relacionan interacciones entre predictores continuos a excepción de "Temperatura y "Concentración de Polímero". En tal caso, el costo mínimo se obtiene en el nivel más bajo de la primera variable y en el más bajo de la segunda. Otro asunto relevante que conviene mencionar es que el rendimiento global del proceso se maximiza cuando la temperatura se encuentra en el nivel superior y el nivel más alto de concentración de polímero. También se maximiza cuando la concentración de oxígeno adopta valores intermedios. Es preciso aclarar que estos efectos son representativos para los intervalos establecidos para cada una de las variables en la configuración seleccionada para el estudio.

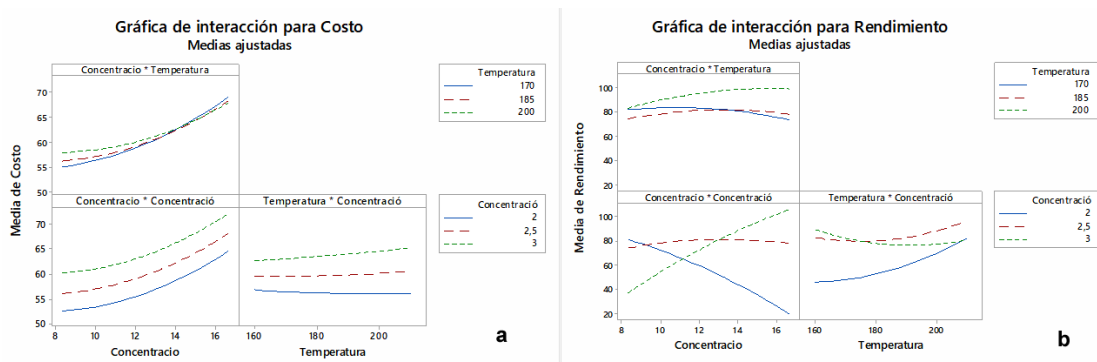


Figura 1. Interacciones medias ajustadas para a) Costo y b) Rendimiento

Para efectos de verificación de la idoneidad del modelo construido se reporta a en la Figura 2 un diagrama de Pareto que recoge los efectos principales y la interacción exhibida en el sistema productivo analizado. Este diagrama exhibe los valores absolutos de los efectos estandarizados (valores t que permiten contrastar formalmente la hipótesis nula que cada efecto i -ésimo no es distinto de cero) en orden decreciente. La línea de referencia se traza a fin de indicar cuáles efectos son estadísticamente significativos asumiendo un riesgo del 5%. Adicionalmente se presentan los gráficos Q-Q normales. Cada valor real se compara con la puntuación típica que en teorías le correspondería a ese mismo punto en una distribución gaussiana estandarizada. Los valores observados son ordenados en orden creciente, en el eje de abscisas; en el de ordenadas están representadas las puntuaciones típicas normales. Nótese que ninguna de las dos variables respuesta transgrede el supuesto teórico de normalidad univariante.

Otro supuesto que debe materializarse, es el supuesto de homogeneidad de varianza que implica que la variabilidad inherente a los residuales debe ser uniforme en todo el espectro de valores pronosticados, es decir, que el tamaño de los residuos es independiente del tamaño de los valores pronosticados. Por ello, el diagrama de dispersión no debe exhibir ninguna pauta de asociación entre los pronósticos y los residuos, ni tampoco tendencias discernibles.

Esta representación gráfica es igualmente útil para detectar relaciones no lineales entre variables. Al observar los residuos para cada variable respuesta es autoevidente que ésta no delata la presencia de algún patrón anómalo entre los residuos, lo cual permite argüir que los datos originales satisfacen a cabalidad el supuesto de homocedasticidad.

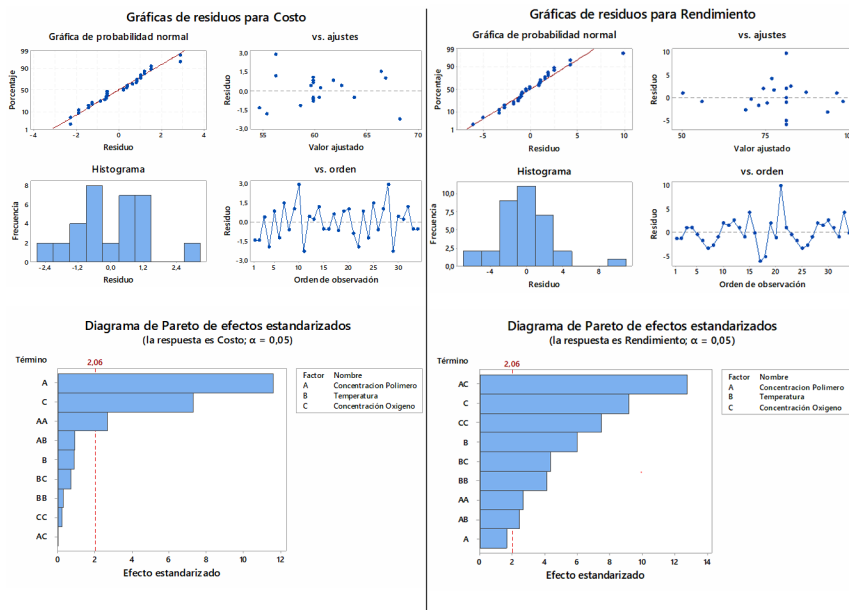


Figura 2. Evaluación de respuestas y diagnóstico de los modelos.

En la Tabla 2 se reportan los resultados combinados del Análisis de la Varianza para Rendimiento y Costo, en el cual se divide la variabilidad total de las variables respuestas para cada uno de los efectos analizados. Este proceso se realiza mediante la evaluación de la significancia estadística de cada tratamiento al comparar su cuadrado medio, que representa la variación entre muestras- versus la estimación del error experimental.

Acótese que se ha utilizado una estrategia de eliminación hacia atrás, que incluye inicialmente la mayor cantidad de coeficientes, y suprime de modo recursivo, aquellos efectos con p-valores inferiores al nivel de confianza prefijado. Se reporta en la Tabla ANOVA: Los grados de libertad para la regresión que muestran la cantidad de información utilizada por los componentes del modelo, de modo que, al incrementar la cantidad de componentes, se proporciona mayor información, con lo cual disminuyen los Grados de Libertad (GL) para el error residual. Los GL asociados al error residual muestran la cantidad de información disponible para estimar la variabilidad de parámetros poblacionales relevantes.

El ANOVA dispone de esta información para efectuar la estimación de los parámetros poblacionales no conocidos y está determinado por el número de observaciones en la muestra. La suma de los cuadrados correspondientes a las sumas ajustadas de los cuadrados. Son medidas de la variación asociadas a los distintos componentes del modelo y se segmentan en: La sumatoria de los cuadrados de regresión, que equivale a la sumatoria de las desviaciones cuadráticas de los valores de respuesta ajustados respecto al valor de respuesta medio, o, en otros términos, la cantidad de variación exhibida por la variable respuesta que es explicada por el modelo. La suma de cuadrados del error, por otro lado, cuantifica la variación total en los datos y es equivalente a la sumatoria de residuos cuadráticos, que, a su vez, da cuenta sobre la variabilidad no explicada por los predictores cuantitativos. El total de la sumatoria los cuadrados que equivale al sumatorio total de la suma de los cuadrados de regresión y la suma de los cuadrados del error. Por último, se presenta el valor F que es el estadístico de prueba utilizado para determinar si el modelo está asociado con la variable respuesta y

puede resolverse mediante un proceso directo. Este test estadístico está fundamentado en el ratio modificado de la sumatoria cuadrática de los residuales de un modelo que restringe al menos uno de los coeficientes de regresión, de acuerdo a la hipótesis de nula y otro modelo de regresión. Un valor F lo suficientemente grande es indicativo de la significancia del parámetro considerado en el modelo. Los términos no significativos se han marcado en negrilla a fin de facilitar al lector la identificación de éstos. El estadístico R-Cuadrado para ambos casos constata que los modelos ajustados son capaces de explicar proporciones significativas de la variabilidad exhibida por las respuestas, lo que refrenda la idoneidad de los mismos. Además de ello se reporta el error estándar asociados a los efectos y el valor promedio de los residuos.

De acuerdo a la nomenclatura utilizada para rotular las variables, las ecuaciones polinomiales estimadas responden a la Ecuación 1. Para este caso en concreto, no se descartarán efectos principales y términos de interacción aun considerándose no significativos en el análisis de la varianza, pues la relevancia práctica de la totalidad de los parámetros es considerablemente alta. De este modo, se “fuerza” a los modelos que sigan la estructura estándar o canónica de un modelo jerárquico. En la fase posterior se busca optimizar conjuntamente las variables respuestas aquí modelizadas.

En la Tabla 3 se reporta la evaluación de la función de deseabilidad en la totalidad de corridas del diseño central compuesto. Los dos objetivos trazados consisten en la maximización de las variables respuestas. Ambas metas poseen igual factor de impacto y nivel de prioridad. Obsérvese que el quinto punto de diseño es en el que la deseabilidad se hace máxima. En esta ejecución el rendimiento adopta un valor aproximado a 97% y el costo global de operación se halla próximo a las 54 unidades monetarias, por tanto, existe un nivel de distanciamiento ínfimo de ambas respuestas respecto al target. Adicionalmente se ha reportado el error estándar del ajuste, un estimado de la precisión en la respuesta media para la configuración de valores que obtienen los predictores cuantitativos. A partir de esta medida se calcula el intervalo de confianza para la respuesta media, esto es, un espectro de valores probables para cada respuesta media a partir de una configuración pre-especificada de las variables explicativas.

Es perceptible que ambas variables respuestas exhiben un alto nivel de heterogeneidad. Nótese que cuando el error estándar de ajuste para la variable costo es 7,55 y para la variable rendimiento 5,59, el costo medio del proceso puede variar entre 47,42 y 77,93 y el rendimiento medio entre 74,18 y 99,26. De particular interés es el intervalo de predicción, que corresponde a un espectro acotado de valores en los cuales es probable se halle el valor de una respuesta futura individual dada cierta configuración de variables. Dado que el intervalo calculado ambas variables respuestas es amplio puede afirmarse que no es posible predecir con relativa certeza su conducta futura. Se colige que el proceso productivo no es uniforme y requiere de un control exhaustivo.

Tabla 2. Resultados del ANOVA para variables respuestas

Regresión de superficie de respuesta: Rendimiento					
R-Cuadrado - 97,43%					
Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	9	4319,70	479,97	40,65	0,000
Lineal	3	1416,46	472,15	39,99	0,000
Concentración Polimero	1	31,90	31,90	2,70	0,113
Temperatura	1	422,36	422,36	35,77	0,000
Concentración Oxígeno	1	989,81	989,81	83,83	0,000
Cuadrado	3	1159,87	386,62	32,75	0,000
Concentración Polimero*Concentración Polimero	1	85,03	85,03	7,20	0,013
Temperatura*Temperatura	1	199,16	199,16	16,87	0,000
Concentración Oxígeno*Concentración Oxígeno	1	656,28	656,28	55,59	0,000
Interacción de 2 factores	3	2053,35	684,45	57,97	0,000
Concentración Polimero*Temperatura	1	69,64	69,64	5,90	0,023
Concentración Polimero*Concentración Oxígeno	1	1911,35	1911,35	161,89	0,000
Temperatura*Concentración Oxígeno	1	226,13	226,13	19,15	0,000
Error	24	283,36	11,81		
Falta de ajuste	5	117,36	23,47	2,69	0,053
Error puro	19	166,00	8,74		
Total	33	4603,06			

Regresión de superficie de respuesta: Costo
R-Cuadrado - 98,21%

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	9	505,389	56,154	22,93	0,000
Lineal	3	486,288	162,096	66,20	0,000
Concentración Polimero	1	330,530	330,530	134,99	0,000
Temperatura	1	1,905	1,905	0,78	0,387
Concentración Oxígeno	1	130,358	130,358	53,24	0,000
Cuadrado	3	18,315	6,105	2,49	0,084
Concentración Polimero*Concentración Polimero	1	17,526	17,526	7,16	0,013
Temperatura*Temperatura	1	0,213	0,213	0,09	0,771
Concentración Oxígeno*Concentración Oxígeno	1	0,110	0,110	0,04	0,834
Interacción de 2 factores	3	2,949	0,983	0,40	0,753
Concentración Polimero*Temperatura	1	1,945	1,945	0,79	0,382

Concentracion Polimero*Concentración Oxígeno	1	0,003	0,003	0,00	0,972
Temperatura*Concentración Oxígeno	1	1,227	1,227	0,50	0,486
Error	24	58,766	2,449		
Falta de ajuste	5	54,769	10,954	52,07	0,000
Error puro	19	3,997	0,210		
Total	33	564,156			

Tabla 3. Cómputo de la Deseabilidad compuesta y localización del óptimo

Respuesta	Meta	Inferior	Objetivo	Superior	Ponderación	Importancia
Costo	Máximo	53,2	67,9		1	1
Rendimiento	Máximo	51,0	97,0		1	1

Concentracion Polimero	Temperatura	Concentración Oxígeno	Costo Ajuste	Rendimiento Ajuste	Deseabilidad compuesta
8,3	206,465	1,66	53,1812	97,2597	1

Predicción de respuesta múltiple

Variable	Valor de configuración
Concentracion Polimero	8,3
Temperatura	206,465
Concentración Oxígeno	1,66

Respuesta	Ajuste	EE de ajuste	IC de 95%	IP de 95%
Costo	53,1812	7,55	(47,42; 77,93)	(46,50; 78,84)
Rendimiento	97,2597	5,59	(74,18; 99,26)	(77,17; 99,26)
*Óptimo hallado en la ejecución 5.				

En la Figura 3 se reportan las gráficas de contorno que permiten estudiar la relación potencial entre predictores continuos y las variables de salida del modelo construido. Es evidente que la naturaleza curvilínea de las ilustraciones obedece a la incorporación de términos cuadráticos estadísticamente significativos. La interpretación de los gráficos de contorno es sumamente intuitiva: Así, por ejemplo, podrá afirmarse que para la variable rendimiento se obtendrá un valor superior a 90 siempre y cuando la concentración del polímero ronde los 16 puntos porcentuales y la concentración de oxígeno sea próxima a 3.2%, su nivel más alto. Cuando interactúan los factores “Concentración de oxígeno” y “Temperatura” hay un rango de valores mucho más amplio para ubicar las condiciones operativas deseables bordeadas en azul, para las cuales el rendimiento oscila entre 80% y 100%. Para el caso de la variable costo puede trazarse una disquisición teórica idéntica, con la salvedad que en este caso no se desea maximizar el valor de la misma, sino minimizarla. Nótese que también existe una variedad de condiciones de operabilidad que satisfacen esta restricción: Cuando el factor Oxígeno y Concentración de Polímero se hallan en sus niveles más bajos. Además, se percibe que en cualquier nivel de temperatura se obtiene un costo que oscila entre las 55 y 60 unidades monetarias.

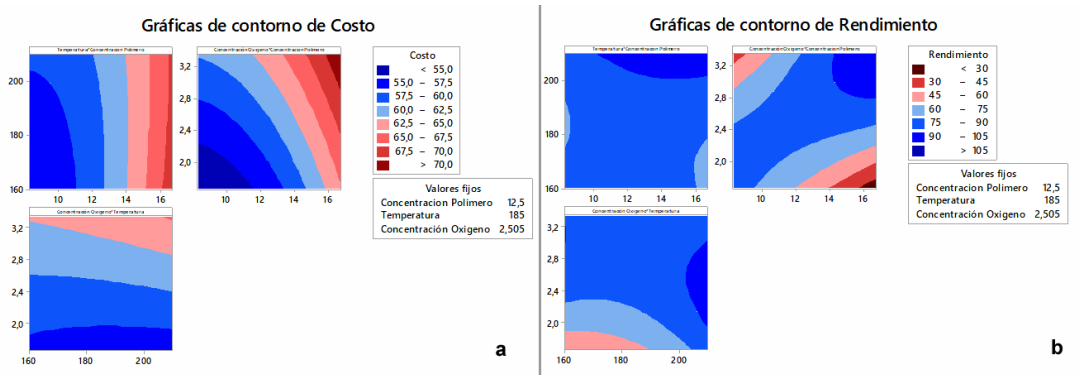


Figura 3. Contornos de a) Costo y b) Rendimiento

La gráfica de optimización reportada en la Figura 4, muestra el efecto de la totalidad de predictores en las variables de salidas. Tales efectos se localizan en las columnas o en función de deseabilidad global. Las líneas rojas dispuestas verticalmente representan la combinación de los predictores continuos, mientras que las cantidades numéricas representadas en la parte superior del gráfico exhiben la configuración de cada nivel de cada factor considerado. Las salidas para el nivel actual de cada factor están representadas por las líneas azules horizontales y las cantidades numéricas.

La parte inferior de la Figura 3 contiene los gráficos de superficie, que son una representación tridimensional construida mediante interpolación. En ésta, se percibe la evolución de los valores de la deseabilidad global ante distintas combinaciones de las variables predictoras, siendo los picos y valles aquellas configuraciones experimentales que producen máximos o mínimos locales, respectivamente (Sheikh, *et al.*, 2019). Aunque es difusamente perceptible la localización de las condiciones operativas deseables en la superficie de respuesta estimada, lo concreto es que las respuestas Costo y Rendimiento de la operación alcanzan sus valores óptimos cuando la Concentración de Polímero es igual a 8,3, Temperatura es 206,465 y Concentración Oxígeno 1,66. Tales resultados, se hallan próximos a los valores nominales del proceso productivo, lo que refrenda el nivel de idoneidad de los resultados obtenidos y su similitud respecto a los obtenidos en la investigación de Garzón *et al.* (2017).

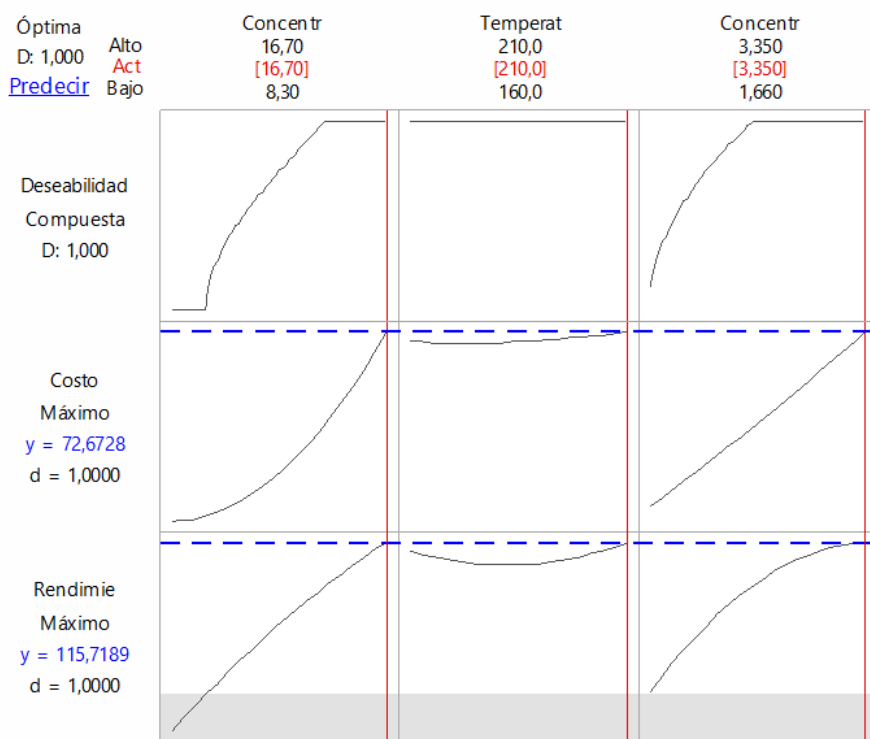


Figura 4. Resultado de optimización y de superficies

Los hallazgos experimentales en el proceso productivo mencionado anteriormente son difícilmente comparables con otros estudios reportados en la literatura especializada dada la escasez de investigaciones en esta área y la naturaleza singular de este proceso fabril en el espacio geográfico colombiano. Empero, es posible contrastar los resultados obtenidos con otros en los cuales se aplica la metodología aquí propuesta. Así, por ejemplo, Şimşek *et al.* (2018) también presentan un estudio basado en el cómputo de la función de deseabilidad global para evaluar un proceso de producción de mortero de cemento. Aunque las variables de salidas en este estudio son distintas a las del caso presente se colige que la solución hallada a través del procedimiento de optimización multivariante encuentra una solución compromiso con un nivel de distanciamiento leve respecto al valor nominal. En la propuesta de Derakhshanfard, *et al.* (2016) que tiene por objeto la optimización de un proceso de poliestireno expandido, la temperatura de calentamiento en la etapa de polimerización es de 120°C, que es relativamente baja si se compara con el output aquí obtenido. Owolabi, *et al.* (2018) también obtienen una temperatura de conversión de estireno óptima de 120°C durante 50 minutos de calentamiento. En este caso, existe una patente relación de proporcionalidad directa entre la temperatura y la velocidad de reacción. Las discrepancias entre los resultados hallados en el presente caso y los ya mencionados se debe a que tales estudios no contemplan el efecto conjunto de los predictores considerados. Por otro lado, Imran, *et al.* (2019) -quien utiliza un modelo de diseño experimental de Taguchi- determina que los factores experimentales seleccionados no interaccionan entre sí, en agudo contraste con el caso presente donde son perceptibles comovimientos entre los tratamientos.

Es preciso mencionar que la vertebración de una estrategia experimental multivariante para optimizar las características de interés, suele ser altamente ventajosa dado que permite cuantificar, sincrónicamente, la influencia marginal y conjunta de los predictores seleccionados

en el proceso de cribado sobre distintas salidas de un proceso. La naturaleza conceptual de los modelos de diseño experimental multivariante permite que sean escogidos ciertos parámetros como targets, factores de impacto y ponderaciones, bajo la presuposición de que se dispone de un conocimiento exhaustivo acerca del intervalo de valores donde se obtienen resultados satisfactorios, lo que está en concordancia con las investigaciones de Alimirzaloo, *et al.* (2017) y Şimşek, *et al.*(2018).

CONCLUSIONES

En la fase preliminar de este caso de estudio se ejecuta un experimento de superficie de respuesta para un proceso de producción de poliestireno en una entidad del clúster petroquímico colombiano. En el esquema experimental propuesto se evalúa la significatividad estadística de todas las potenciales combinaciones de los niveles de los factores sobre las respuestas, el costo y el rendimiento del proceso. De este modo, se estiman dos modelos polinomiales para caracterizar analíticamente estas características de interés. Posteriormente se procedió a computar una única medida cuantitativa resumen denominada deseabilidad compuesta para efectos de optimización de las salidas. Los resultados reportados indican que las condiciones óptimas de operación pueden ser alcanzadas a través de la estimación y diagnóstico del modelo central compuesto y la posterior estimación de la superficie respuesta. De hecho, las herramientas de optimización gráfica y analítica diseñadas bajo el esquema experimental aquí desarrollado confirman que es posible localizar un nivel de deseabilidad satisfactorio en una región de operación que satisface las restricciones naturales del proceso productivo

La relevancia de la investigación estriba en su capacidad para aplicar una estrategia experimental económica que permite obtener condiciones operativas deseables y hacer insensible a procesos de producción simples como el de poliestireno, frente a variaciones controladas de los factores experimentales considerados. Desde una perspectiva estrictamente metodológica, este artículo suministra una base invaluable para direccionar investigaciones semejantes en el contexto de los clústeres petroquímicos colombianos.

Al margen del abanico de oportunidades que surgen de la aplicación de técnicas multivariantes para optimización, en otros ámbitos, se registran como posibles limitaciones las posibilidades de generalización analítica del estudio desarrollado, y es que bajo un juicio racional, aunque no deberían colocarse en tela de juicio algunas propiedades empíricas como la fiabilidad y representatividad del marco analítico propuesto, debe anotarse que la intención de extrapolarlo a otros contextos fabriles implicaría inexorablemente la incorporación de las particularidades inherentes a estos escenarios y por consiguiente, la reformulación de algunos conceptos de partida del ejercicio investigativo.

Durante el proceso investigativo se detectaron lagunas teórico-epistémicas que ameritan ser abordadas. Son necesarios, por ejemplo, el diseño de casos de estudio en los cuales se evalúe la robustez de otros modelos de función de deseabilidad respecto al enfoque tradicional de modelado, así como también la aplicación de metodologías avanzadas para optimizar

REFERENCIAS

ALIMIRZALOO, V., AHMADI, S., y ABDOLLAHZADE GAVGANI, M. (2017). Optimization of Strain Distribution in the Roll Forming Process Using the Desirability Function y Finite Element Methods. *Journal of Advanced Materials y Processing* [en línea]. 5(2), 38-53. Disponible en: <https://www.sid.ir/en/journal/ViewPaper.aspx?id=543193>

BUKZEM, A. L., SIGNINI, R., DOS SANTOS, D. M., LIAO, L. M., y ASCHERI, D. P. (2016). : Optimization of carboxymethyl chitosan synthesis using response surface methodology y desirability function. *International Journal of Biological Macromolecules* [en línea]. 15, 615-624. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2016.01.017>

CANDIOTI, L., De ZAN, M., CÁMARA, M., y GOICOECHEA, H. (2014). Experimental design y multiple response optimization. *Using the desirability function in analytical methods development*. [en línea] *Talanta*, 124, 123–138. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2014.01.034>

DEL ÁNGEL SÁNCHEZ, M. T., GARCÍA-ALAMILLA, P., LAGUNES-GÁLVEZ, L. M., GARCÍA-ALAMILLA, R., y CABRERA CULEBRO, E. G. (2015). Aplicación de metodología de superficie de respuesta para la degradación de naranja de metilo con TiO₂ sol-gel sulfatado. *Revista internacional de contaminación ambiental* [en línea]. 31(1), 99-106. Disponible en: <https://www.revistascca.unam.mx/rica/index.php/rica/article/view/32474>

DERAKHSHANFARD, F., VAZIRI, A., FAZELI, N., y HEYDARINASAB, A. (2016). Optimization of Synthesis of Expandable Polystyrene by Multi-Stage Initiator Dosing. *Iranian Journal of Chemistry y Chemical Engineering* [en línea]. 13(1). Disponible en: http://www.ijche.com/article_15377.html

DOMÍNGUEZ DOMÍNGUEZ, J. (2006). Optimización simultánea para la mejora continua y reducción de costos en procesos. *Ingeniería y Ciencia* [en línea]. 2(4), 145-162. Disponible en: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=2273739>

DOS SANTOS, L., DOS SANTOS, Q., MORENO, I., NOVAES, C., DOS SANTOS, M., y BEZERRA, M. (2016). Multivariate Optimization of a Simultaneous Cloud Point Extraction Procedure of Cd, Cu y Ni from Sediments Samples y Determination by ICP OES. *Journal of the Brazilian Chemical Society* [en línea]. 27(4), 745-752. Disponible en: <https://doi.org/10.5935/0103-5053.20150325>

GARZÓN SAÉNZ, H., SOLANA GARZÓN, J., y RAHMER, B. Análisis comparativo de modelos de planeación agregada de las ventas y operaciones: Estudio de caso para la empresa Cartagenera de Icopores S.A. En *Proceedings VI Congreso Iberoamericano de Investigación de Operaciones y Ciencias Administrativas: Avances en Investigación de Operaciones y Ciencias Administrativas* [en línea]. pp. 145-151. Barranquilla: Colombia, 2017. Disponible en: <http://hdl.handle.net/11441/50406>

GHAEDI, M., MAZAHARI, H., KHODADOUST, S., HAJATI, S., y PURKAIT, M. (2015). Application of central composite design for simultaneous removal of methylene blue y Pb²⁺ ions by walnut wood activated carbon. *Spectrochimica Acta Part A* [en línea]. 135, 479-490. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2014.06.138>

IZADIYAN, P., y HEMMATEENEJAD, B. (2016). Multi-response optimization of factors affecting ultrasonic assisted extraction from Iranian basil using central composite design. *Food Chemistry* [en línea]. 190, 864–870. Disponible en: <https://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.06.036>

JIMÉNEZ CAREAGA, M. (2015). Superficies de Respuesta mediante un Diseño Central Compuesto. *Revista Varianza* (11), 31-36. Disponible en: http://www.revistasbolivianas.org.bo/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S9876-67892015000100007&lng=es&nrm=iso

KOUSHA, M., TAVAKOLI, S., DANESHVAR, E., VAZIRZADEH, A., y BHATNAGAR, A. (2015). Central composite design optimization of Acid Blue 25 dye biosorption using shrimp shell biomass. *Journal of Molecular Liquids* [en línea]. 207, 266–273. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2015.03.046>

MIRANDA, I., Arévalo, J., y HIDALGO-DÍAZ, L. (2013). Metodología de superficie respuesta para evaluar estabilidad en almacén de un agente de control biológico. *Revista Protección Vegetal* [en línea]. 28(3), 224-228. Disponible en: http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1010-27522013000300011

SHEIKH, I., KHAN, Z. A., SIDDIQUEE, A. N., BADRUDDIN, I., ALGAHTANI, A., JAVAID, S., y GUPTA, R. (2019). Optimising Parameters for Expanded Polystyrene Based Pod Production Using Taguchi Method. *Mathematics* [en línea]. 7(9), 847. Disponible en: <https://www.mdpi.com/2227-7390/7/9/847>

ŞİMŞEK, B., İÇ, Y., y ŞİMŞEK, E. (2016). A RSM-Based Multi-Response Optimization Application for Determining Optimal Mix Proportions of Standard Ready-Mixed Concrete. *Arabian Journal for Science y Engineering* [en línea]. 41(4), 1435-1450. Disponible en: <https://link.springer.com/article/10.1007/s13369-015-1987-0>

ŞİMŞEK, B., UYGUNOĞLU, T., KORUCU, H., y MUHTAR KOCAKERIM, M. (2018). Analysis of the effects of dioctyl terephthalate obtained from polyethylene terephthalate wastes on concrete mortar: A response surface methodology based desirability function approach application. *Journal of Cleaner Production* [en línea]. 170, 437-445. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2017.09.176>

UTHMAN OWOLABI, R., AWWALU USMAN, M., y KEHINDE, A. (2018). Modelling y optimization of process variables for the solution polymerization of styrene using response surface methodology. *Journal of King Saud University - Engineering Sciences* [en línea]. 30(1), 22-30. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jksues.2015.12.005>

VANHATALO, E., KULAHCI, M., y BERGQUISTA, B. (2017). On the structure of dynamic principal component analysis used in statistical process monitoring. *Chemometrics y Intelligent Laboratory Systems* [en línea]. 167, 1-11. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2017.05.016>

YAGUAS, A. J. (2017). Metodología de superficie respuesta para la optimización de una producción agrícola. *Revista Ingeniería Industrial* [en línea]. 16(1), 205-222. Disponible en: <https://doi.org/10.22320/S07179103/2017.13>