

UTILIZACION DEL METODO DE SIMULACION DE MONTECARLO EN EL ESTUDIO DE DISEÑOS PARA DETERMINAR COMBINACIONES OPTIMAS

TERESITA CASTELLANOS¹, J. REYNALDO¹, JOSEFINA DE CALZADILLA¹, WALQUIRIA GUERRA¹ Y J.R. MARTIN²

RESUMEN

Con los datos de un factorial 3^3 , donde se probaron tres niveles de nitrógeno, fósforo y potasio en un diseño de bloques al azar con cuatro replicas, se utilizó el Método de Montecarlo, para simular las variables aleatorias necesarias y conformar 50 diseños compuestos centrales rotacionales. Se escogieron 17 superficies de respuesta cuadrática que presentaban el mejor ajuste para determinar las dosis óptimas económicas de N P K. Los diseños compuestos centrales rotacionales proporcionaron superficies cuadráticas que se ajustaron, de forma adecuada, a los resultados experimentales. El uso del Método de Montecarlo permitió el estudio de estos diseños sin necesidad de montar nuevos experimentos, lo que conlleva a un ahorro de recursos.

INTRODUCCION

Numerosos autores, entre ellos Escobar y Cady (1967), Adler et al. (1975) y Mead y Pike (1975), señalan que en los últimos años se han presentado nuevos aspectos teóricos sobre los experimentos factoriales.

Estos diseños, de gran utilidad para el estudio de las superficies de respuesta de segundo orden, fueron desarrollados por G.E.P. Box y K.B. Wilson y reciben el nombre de diseños compuestos y rotacionales.

Los diseños compuestos y rotacionales han resultado más compactos y manejables que los factoriales completos, ya que permiten una reducción en el número de tratamientos, con respecto a los factoriales completos 3^k .

Un gran número de autores, entre ellos Heady y Dillon (1969), Narain (1969), Martínez (1972), Barov (1973) y Sorensen y Pena (1978), recomiendan, dentro de todas las posibles superficies de respuesta, la cuadrática como expresión matemática de la relación nutriente-rendimiento, por estar de acuerdo con la "ley de los rendimientos decrecientes" y además, por las facilidades disponibles para su ajuste.

Por otra parte, la simulación de variables aleatorias, para aprovechar los datos experimentales disponibles y poder realizar investigaciones preliminares sobre estos diseños, con el fin de determinar la combinación óptima de los niveles de N P K en estudio, representan una ventaja económica importante, ya que no hay que montar nuevos experimentos.

El objetivo de este trabajo, a partir de un factorial completo 3^k en el cultivo de café, es simular, mediante el Método de Montecarlo, las variables aleatorias necesarias para conformar un diseño compuesto central rotacional, para determinar la combinación óptima económica de los niveles de N P K.

¹Facultad de Mecanización Agropecuaria, ISCAH, La Habana.

²Instituto Nacional de Ciencias Agrícolas, La Habana.

MATERIALES Y METODOS

Este trabajo se realizó con los datos de un experimento de campo, en el que se utilizaron posturas de café en un suelo Ferralítico Rojo compactado, provenientes de un experimento factorial 3^3 montado sobre un diseño en bloques al azar con 4 replicas.

Los niveles de N P K empleados en gramos por planta fueron:

$N_1 = 50$	$P_1 = 30$	$K_1 = 40$
$N_2 = 100$	$P_2 = 60$	$K_2 = 80$
$N_3 = 150$	$P_3 = 90$	$K_3 = 120$

La matriz del diseño factorial en forma codificada es:

	N	P	K
1	-1	-1	-1
2	-1	-1	0
3	-1	-1	1
4	-1	0	-1
5	-1	0	0
6	-1	0	1
7	-1	1	-1
8	-1	1	0
9	-1	1	1
10	0	-1	-1
11	0	-1	0
12	0	-1	1
13	0	0	-1
14	0	0	0
15	0	0	1
16	0	1	-1
17	0	1	0
18	0	1	1
19	1	-1	-1
20	1	-1	0
21	1	-1	1
22	1	0	-1
23	1	0	0
24	1	0	1
25	1	1	-1
26	1	1	0
27	1	1	1

Sobre la base de los resultados del factorial, se siguió un proceso de simulación de variables aleatorias por el método de Montecarlo y se obtuvieron los valores de Y (rendimiento) para los puntos centrales, los periféricos y otros cuatro puntos que tampoco aparecían en el diseño factorial, ya que para ajustar el diseño a la realidad, previo a la simulación, se trasladó el punto central del experimento a otra combinación de tratamientos (0, -1, 0) y de esta forma, se conformo el diseño compuesto rotacional cuya matriz es:

	N	P	K
1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1
3	-1	-1	1
4	1	-1	1
5	-1	1	-1
6	1	1	-1
7	-1	1	1
8	1	1	1
9	1,682	0	0
10	-1,682	0	0
11	0	1,682	0
12	0	-1,682	0
13	0	0	1,682
14	0	0	-1,682
15	0	0	0
16	0	0	0
17	0	0	0
18	0	0	0
19	0	0	0
20	0	0	0

Los valores de Y se obtienen al sumar los resultados de la evaluación de la superficie cuadrática de respuesta en el factorial 3^3 con los errores normales aleatorios $e_u = Z_u \sqrt{CM_{error}}$, donde Z_u son los valores tomados de la tabla de números aleatorios normales con media 0 y varianza 1, tales que $e_u \sim N(0, \sigma^2)$.

El CM_{error} se tomo del analisis de varianza del factorial 3^3 y cada punto se genero 50 veces, por lo cual se obtuvieron 50 superficies de respuesta de la forma siguiente:

$$Y = B_0 + B_1 n + B_2 p + B_3 k + B_4 n^2 + B_5 p^2 + B_6 k^2 + B_7 np + B_8 nk + B_9 pk.$$

Del total de superficies generadas se tomaron 17, las cuales se ajustaron para $\alpha = 10\%$, $\alpha = 5\%$ o $\alpha = 1\%$.

Con estas superficies se trabajo para buscar las dosis óptimas economicas de fertilización, las cuales se obtuvieron resolviendo el sistema:

$$2B_4 n + B_7 p + B_8 k = \frac{P_n}{P_y} - B_1$$

$$B_8 n + B_9 p + 2B_6 k = \frac{P_k}{P_y} - B_3$$

$$B_7 n + 2B_5 p + B_9 k = \frac{P_p}{P_y} - B_2$$

siendo P_n , P_p y P_k los precios unitarios de los nutrientes N P K respectivamente y P_y el precio unitario del producto.

RESULTADOS Y DISCUSION

De las 17 superficies con las que se trabajó, se seleccionaron 3, para las cuales la solución del sistema de ecuaciones planteado anteriormente daba una combinación óptima más cercana a la combinación óptima supuesta por el investigador, sobre la base de los resultados del experimento.

Se da a continuación la solución del sistema, el nivel de significación para el ajuste de la superficie y el coeficiente de determinación para cada una de las superficies escogidas.

$$1. Y = 8,4566736 + 1,3032976 n - 0,38431987 p + 0,51567191 k - 0,59092909 n^2 + 1,8479388 p^2 + 0,49750015 k^2 - 0,46987510 np + 0,19962512 nk - 1,1281251 pk \text{ para } \alpha = 5 \%$$

$$\begin{aligned} n &= 141,77 \\ p &= 33,93 \\ k &= 64,42 \end{aligned} \quad R^2 = 0,81$$

$$2. Y = 9,818689 + 0,57342255 n - 0,26700246 p - 0,15416113 k - 0,83311963 n^2 + 0,60218424 p^2 + 0,63085604 k^2 + 0,082375035 np + 0,66312498 nk - 0,46762502 pk \text{ para } \alpha = 5 \%$$

$$\begin{aligned} n &= 117,04 \\ p &= 42,04 \\ k &= 68,33 \end{aligned} \quad R^2 = 0,77$$

$$3. Y = 10,654902 + 0,16994015 n - 0,81645650 p + 0,038855694 k - 0,86411482 n^2 + 1,2368532 p^2 - 0,59436655 k^2 - 0,48750013 np + 0,69324994 nk - 0,97849995 pk \text{ para } \alpha = 1 \%$$

$$\begin{aligned} n &= 110,56 \\ p &= 35,95 \\ k &= 64,89 \end{aligned} \quad R^2 = 0,89$$

En un análisis anterior para un diseño compuesto central, se obtuvo una superficie de respuesta cuadrática para $\alpha = 5 \%$, mediante la cual el óptimo económico obtenido dado en gramos por plantas fue:

$$\begin{aligned} n &= 120 \\ p &= 35,4 \\ k &= 66,4 \end{aligned}$$

Con un coeficiente de determinación $R^2 = 0,937$.

Se puede decir que los resultados más cercanos a la combinación óptima son los aportados por las superficies 2 y 3. Si se comparan los valores del coeficiente de determinación R^2 de estos dos resultados con los del

diseño compuesto central, se ve que este difiere considerablemente del resultado en 2 y en menor medida del resultado en 3, aunque es de señalar que la bondad del ajuste, en este último caso, es mejor que en el compuesto central, lo cual se explica por la cantidad de puntos, 15 en el compuesto central y 20 en el compuesto central rotacional, lo que hace que se requiera un menor valor de R^2 para una mayor significación, precisamente por la influencia del número de puntos.

Los resultados están también en correspondencia con el número de veces que se generaron los puntos del diseño, que pudieron haber dado un mayor número de combinaciones de los niveles cercanos al punto central.

Esto se debe a que el método de simulación de variables aleatorias de Montecarlo es tal, que su error solo disminuye en un 10 % por cada 100 repeticiones que se realicen y en este caso, por razones de tiempo solamente, se efectuaron 50 repeticiones, debido a lo cual se plantea la necesidad de confeccionar un sistema computarizado que permita generar cada punto un número suficientemente grande de veces para disminuir el error introducido por la simulación.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

1. El método de Montecarlo, para la simulación de variables aleatorias, permitió conformar diseños compuestos rotacionales a partir del factorial 3^k .
2. Los diseños compuestos centrales rotacionales proporcionaron superficies cuadráticas, que se ajustaron de forma adecuada a los resultados experimentales sin necesidad de montar un nuevo experimento, lo que conlleva a un ahorro de recursos. Además de 27 tratamientos que tiene el factorial 3^3 , se utilizaron 20 tratamientos.
3. Es recomendable explorar otras variantes en estos diseños, como es la replicación fraccionada y el uso de bloques incompletos.
4. Es necesario elaborar un sistema computarizado que permita la generación de cada punto un número suficientemente grande de veces y que, a la vez, ofrezca las superficies de respuesta y la solución del sistema de ecuaciones que corresponde a cada una. De este modo se lograría disminuir la influencia del error por la aplicación del Método de Montecarlo.

REFERENCIAS

- ADLER, YU; P.E.V. NARKOVA AND YU V. GRAVOVSKY. The Design of Experiments to Find Optimal conditions. Moscow, Mir Publishers, 1965.
- BAROV, V. UND S. SCHMUNTZSCH. Vereinfachte Methode zur Linearen und Quadratischer Regressionrechnung. Arch. Acker. Pflanzenbau Bodenkd. Ed. 17, 1973.
- DIXON-MASSEY. Introducción al Análisis Estadístico, 1965.
- ESCOBAR, J.A. Y P.B. CADY. Consideraciones sobre la comparación de diseños de tratamientos. *Agrociencias*, 1 (2): 64-75, 1967.
- HEADY, E.Q. AND J.L. DILLON. Agricultural Production Functions. Ames, Iowa State University Press, 1969.
- MARTÍNEZ, G.A. Diseños y análisis de experimentos con caña de azúcar. México, Escuela Nacional de Agricultura, 1972.
- MEAD, R. AND D.J. PIKE. A Review of Response Surface. Methodology from a Biometrics Viewpoint. *Biometrics*, 31 (4): 803-851, 1975.

- NARAIN, R.D. Métodos de Cálculo de las necesidades racionales de abono. New York, Naciones Unidas, 1969.
- SOBOL, I.M. Lecciones populares de Matemática. Método de Montecarlo. Editorial MIR, 1983.
- SØRENSEN, R.C. AND E.J. PENA. Nitrogen Fertilization of Soybeans. Agronomy Journal, 70 (2): 213-216, 1978.

ABSTRACT

THE USE OF MONTECARLO SIMULATION METHOD TO STUDY SEVERAL DESIGNS FOR DETERMINING OPTIMAL COMBINATIONS

Montecarlo method is used in this study in order to simulate the essential random variables for making up 50 rotational, central compound designs. It was based on data from a 3^3 factorial where three levels of NPK were tested, in a randomized block design with four replicates. The best fit was recorded by seventeen surfaces from a quadratic response, which were selected for determining optimum economical doses of NPK. Those designs provide some quadratic surfaces, which suited adequately to all experimental results. The use of Montecarlo method was appropriate to study such designs and resources were saved, as other experiments were unnecessary.

Manuscrito recibido el 6/1/87.