Planejamento e Análise Estatística de Experimentos fatoriais: análise de dados de experimentos completamente aleatorizados

Prof. Caio Azevedo

Contexto

- Vimos até agora experimentos envolvendo um único fator.
- Em muitas situações, o pesquisador tem interesse em como dois ou mais fatores afetam o comportamento da variável resposta.
- Nem todos os fatores são, necessariamente, de interesse. Contudo, em princípio, todos devem ser controlados de alguma forma.
- Comecemos com dois fatores dentro de uma estrutura balanceada.

Descrição

- Fator A: possui a níveis.
- Fator B: possui b níveis.
- Grupos: há um total de $a \times b$ grupos (tratamentos), que são definidos pelas interseções dos níveis de cada grupo.
- Para cada grupo vamos considerar um total de n observações (balanceado). Cada uma das n observações são alocadas aleatoriamente à cada uma das combinações (fatores). Temos uma PCA (planejamento completamente casualizado).

Descrição (Cont.)

- Note que tem-se um total de $n \times a \times b$ observações.
- Conceito importante: interação entre os fatores.
- Interação: a diferença entre as médias da resposta, entre dois níveis do Fator A, para um dado nível do Fator B, são iguais ao longo dos níveis do Fator B (vice-versa).

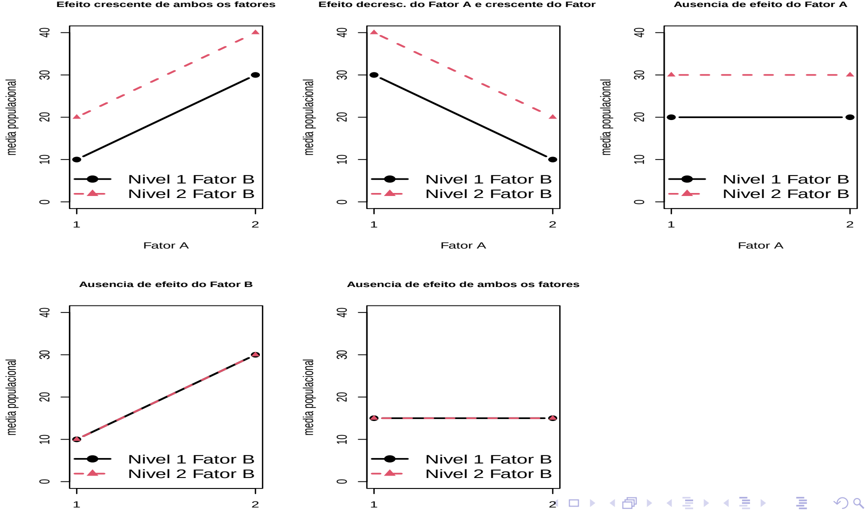
Exemplo 4: Resistência de materiais

- Um engenheiro está desenvolvendo um tipo de bateria para ser usado em um dispositivo eletrônico sujeito à variações extremas de temperatura.
- Fatores de interesse:
  - Tipo de material da placa: 1, 2 e 3.
  - Temperatura: 15°F, 70°F e 125°F. Equivalente à -9,44°C, 21,11°C e 51,67 °C, respectivamente
- Para cada combinação (tipo de material da placa $\times$ temperatura) 4 baterias foram feitas.
- Variável resposta: tempo de vida em horas de cada bateria .

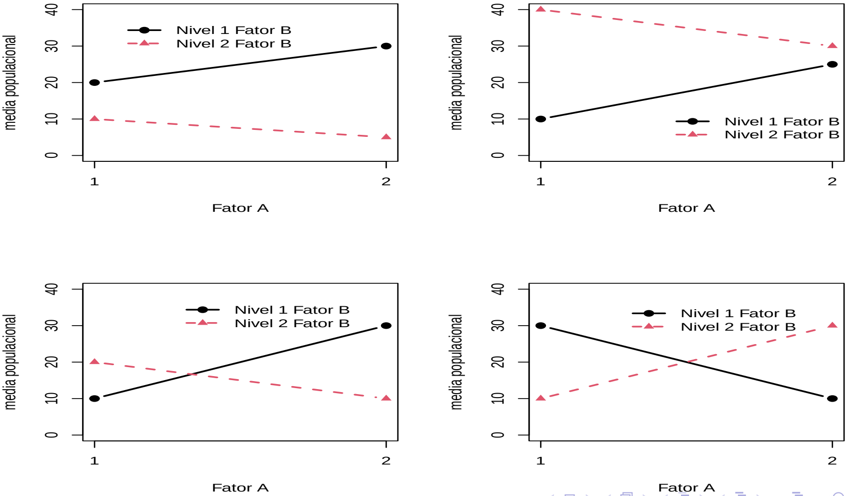
Exemplo 4: continuação

- Experimento balanceado: 4 observações por tratamento.
- Um fator quantitativo (temperatura) e um fator qualitativo (tipo de material da placa).
- Como analisar o experimento?
- Qual seria um modelo apropriado?
- Como estimar os parâmetros e comparar as médias de interesse?
- Como verificar as suposições do modelo?

Perfis médios: ausência de interação



Perfis médios: presença de interação



Voltando ao Exemplo 4

- Vamos considerar, inicialmente, somente os dois primeiros níveis de cada fator.
- Dados:

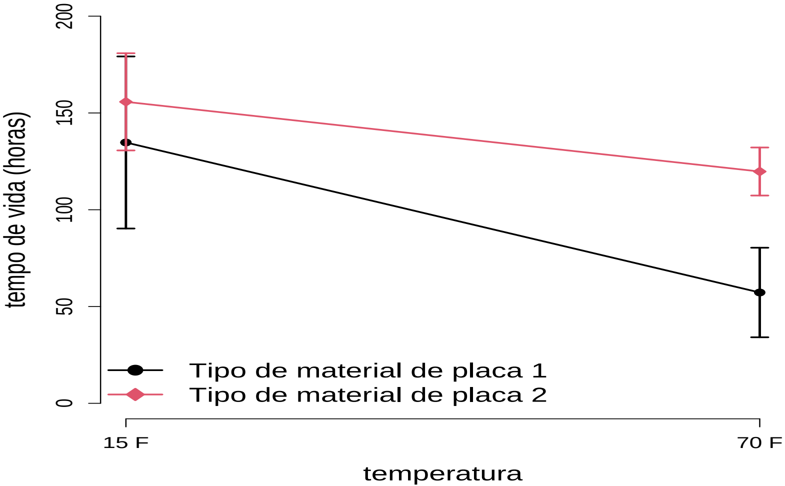
Material	**Temperatura (^oF)**			
	15		**70**	
1	130	155	34	40
	74	180	80	75
2	150	188	136	122
	159	126	106	112

Análise descritiva

Não há sentido em construir box-plots ou histogramas (poucas observações por grupo (combinações entre os níveis dos dois fatores); além disso, como tem-se poucas observações por grupo, não calcularemos as medianas, os coeficientes de assimetria e curtose).

Material	Temp.	Medida descritiva					
		Média	**DP**	**Var.**	**CV%**	**Máximo**	**Mínimo**
1	15 F	134,75	45,35	2056,92	74,00	180,00	33,66
	70 F	57,25	23,60	556,92	34,00	80,00	41,22
2	15 F	155,75	25,63	656,25	126,00	188,00	16,45
	70 F	119,75	12,66	160,25	106,00	136,00	10,57

Gráfico de perfis médios



Modelo (casela de referência) (M1)

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \xi_{ijk},$$

(Fator A), $i = 1, 2$; (Fator B), $j = 1, 2$; (unidades experimentais), $k = 1, 2, 3, 4$

- Erros $\xi_{ijk} \overset{i.i.d}{\sim} N(0, \sigma^2)$, $\mu, \alpha_i, \beta_j, (\alpha\beta)_{ij}$ não aleatório.
- $\mathcal{E}_{\xi_{ijk}}(Y_{ijk}) = \mu_{ij}, \mathcal{V}_{\xi_{ijk}}(Y_{ijk}) = \sigma^2$.
- Restrições : $\alpha_1 = \beta_1 = (\alpha\beta)_{1j} = (\alpha\beta)_{i1} = 0, \forall i, j$.
- $Y_{ijk} \overset{ind.}{\sim} N(\alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij}, \sigma^2)$.

Interpretações dos parâmetros

- Neste caso

$$
\begin{aligned}
\mu_{11} &= \mu \\
\mu_{21} &= \mu + \alpha_2 \\
\mu_{12} &= \mu + \beta_2 \\
\mu_{22} &= \mu + \alpha_2 + \beta_2 + (\alpha\beta)_{22}.
\end{aligned}
$$

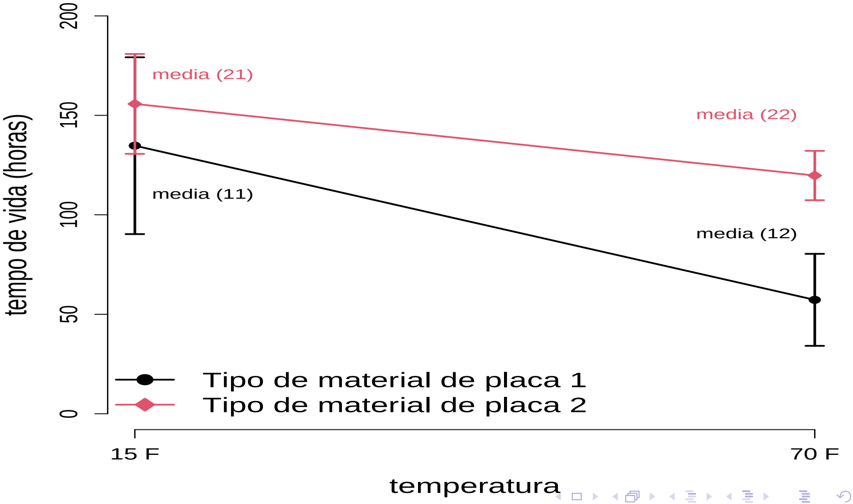
Interpretações dos parâmetros

- Fator A (1: material 1, 2: material 2).
- Fator B (1: $15^o F$, 2: $75^o F$).
- Parâmetros $\boldsymbol{\beta} = (\mu, \alpha_2, \beta_2, (\alpha\beta)_{22})$ (modelo identificado).
- Se $(\alpha\beta)_{22} = 0$.
  - α_2: incremento na vida média de baterias feitas com material 2 em relação àquelas feitas com material 1, submetidas à qualquer uma das duas temperaturas.
  - β_2: incremento na vida média de baterias submetidas à temperatura de $75^o F$ em relação àquelas submetidas a temperatura de $15^o F$, feitas com qualquer um dos dois tipos de material.

Interpretações dos parâmetros (cont.)

- A não nulidade de $(\alpha\beta)_{22}$ faz com que os incrementos anteriores não dependam somente de α_2 e β_2. Neste caso:
  - Dependendo da temperatura, a diferença entre a vida média de baterias feitas com os materiais 1 e 2 não é a mesma.
  - Dependendo do tipo de material, a diferença entre a vida média de baterias submetidas as temperaturas $15^o F$ e $75^o F$ não é a mesma.
- O parâmetro $(\alpha\beta)_{22}$ determina a existência ou não de interação.

Visualização dos significados dos parâmetros



Interpretações dos parâmetros (cont.)

- Não existe interação, neste caso, $\leftrightarrow H_0 : \mu_{21} - \mu_{11} = \mu_{22} - \mu_{12}$ for verdadeira.
- Por outro lado, a hipótese acima equivale à:

$$H_0 : \alpha_2 = \alpha_2 + \beta_2 + (\alpha\beta)_{22} - \beta_2 \leftrightarrow (\alpha\beta)_{22} = 0$$

- Portanto, inexiste interação $\leftrightarrow (\alpha\beta)_{22} = 0$.

Interpretações dos parâmetros (cont.)

- Se existe interação, portanto se $(\alpha\beta)_{22} \neq 0$, temos que:
- α_2: incremento na vida média de baterias feitas com material 2 em relação àquelas feitas com material 1 submetidas à temperatura de $15^o F$.
- β_2: incremento na vida média de baterias submetidas à temperatura de $75^o F$ em relação àquelas submetidas à temperatura de $15^o F$, feitas com material do tipo 1.
- $(\alpha\beta)_{22}$: interação entre os fatores.

Hipótese de interesse

- Comparar simultaneamente todas as médias deixa de ter sentido prático.
- Primeira hipótese (ausência de interação): $H_0 : (\alpha\beta_{22}) = 0$ vs $H_1 : (\alpha\beta_{22}) \neq 0$
- Se a hipótese acima (H_0) não for rejeitada, então:
  - Ausência de efeito principal de material: $H_0 : \alpha_2 = 0$ vs $H_1 : \alpha_2 \neq 0$.
  - Ausência de efeito principal de temperatura: $H_0 : \beta_2 = 0$ vs $H_1 : \beta_2 \neq 0$.
- Eventualmente, algum tipo de comparação entre as médias remanescentes.

Hipótese de interesse (cont.)

- Se a hipótese acima de ausência de interação for rejeitada, então não faz sentido estudar os efeitos principais isoladamente
- Portanto, deve-se efetuar algum tipo de comparação entre as médias.

Modelo geral (casela de referência)

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \xi_{ijk},$$

(Fator A), $i = 1, 2, ..., a$

;(Fator B), $j = 1, 2, ..., b$; (unidades experimentais), $k = 1, 2, .., n$.

- Erros $\xi_{ijk} \overset{i.i.d}{\sim} N(0, \sigma^2)$, $\mu, \alpha_i, \beta_j, (\alpha\beta)_{ij}$ não aleatório.
- $\mathcal{E}_{\xi_{ijk}}(Y_{ijk}) = \mu_{ij}, \mathcal{V}_{\xi_{ijk}}(Y_{ijk}) = \sigma^2$.
- Restrições : $\alpha_1 = \beta_1 = (\alpha\beta)_{1j} = (\alpha\beta)_{i1} = 0, \forall i, j$.
- $Y_{ijk} \overset{ind.}{\sim} N(\alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij}, \sigma^2)$.

Somas de quadrados

- Decomposição da soma de quadrados total:

$$
\begin{aligned}
SQT &= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n}(Y_{ijk} - \overline{Y}_{...})^2 = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n}\Big[(\overline{Y}_{i..} - \overline{Y}_{...}) \\
& +(\overline{Y}_{.j.} - \overline{Y}_{...}) + (\overline{Y}_{ij.} - \overline{Y}_{i..} - \overline{Y}_{.j.} + \overline{Y}_{...}) + (Y_{ijk} - \overline{Y}_{ij.})\Big]^2 \\
&= bn\sum_{i=1}^{a}\left(\overline{Y}_{i..} - \overline{Y}_{...}\right)^2 + an\sum_{j=1}^{b}\left(\overline{Y}_{.j.} - \overline{Y}_{...}\right)^2 \\
&+ n\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\left(\overline{Y}_{ij.} - \overline{Y}_{i..} - \overline{Y}_{.j.} + \overline{Y}_{...}\right)^2 + \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n}\left(Y_{ijk} - \overline{Y}_{ij.}\right)^2 .
\end{aligned}
$$

Somas de quadrados

- Em que

$$
\begin{aligned}
\overline{Y}_{i..} &= \frac{1}{n_{i.}}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n_{ij}} Y_{ijk} \,;\, \overline{Y}_{.j.} = \frac{1}{n_{.j}}\sum_{i=1}^{a}\sum_{k=1}^{n_{ij}} Y_{ijk} \\
\overline{Y}_{ij.} &= \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_{ijk} \,;\, \overline{Y}_{...} = \frac{1}{n_{..}}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n_{ij}} Y_{ijk} \\
n_{i.} &= \sum_{j=1}^{b} n = bn; n_{.j} = \sum_{j=1}^{a} n_{ij} = an; n_{..} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b} n_{ij} = abn;
\end{aligned}
$$

Tabela de análise de variância

- Tabela

FV	SQ	GL	QM	Estatística F	pvalor
Fator A	SQF_A	a-1	$QMF_A = \frac{SQF_A}{(a-1)}$	$F_A = \frac{QMF_A}{QMR}$	$S(f_A\|H_0)$
Fator B	SQF_B	b-1	$QMF_B = \frac{SQF_B}{(b-1)}$	$F_B = \frac{QMF_B}{QMR}$	$S(f_B\|H_0)$
Interação	SQInt	(a-1)(b-1)	$QMInt = \frac{SQInt}{[(a-1)(b-1)]}$	$F_{Int} = \frac{QMInt}{QMR}$	$S(f_{Int}\|H_0)$
Resíduo	SQR	ab(n-1)	$QMR = \frac{SQR}{[ab(n-1)]}$		
Total	SQT	abn-1			

FV: fonte de variação, SQ: soma de quadrados, Gl: graus de liberdade, QM: quadrado médio. $S(x|H_0)$ fds no ponto x sob H_0.

Abordagem Matricial

- Como mencionado anteriormente, todas as somas de quadrados (associadas aos Fatores e à Interação) podem ser obtidas através das diferenças das SQR entre o modelo mais completo (dentro do contexto em questão) e o caso particular dessa modelo, sem o efeito de interesse.
- Considere os seguintes modelos (com as mesmas suposições do M1):

$$
\begin{aligned}
Y_{ijk} &= \mu + \alpha_i + \beta_j + \xi_{ijk}\,(M2) \\
Y_{ijk} &= \mu + \alpha_i + \xi_{ijk}\,(M3) \\
Y_{ijk} &= \mu + \beta_j + \xi_{ijk}.\,(M4)
\end{aligned}
$$

Abordagem Matricial

- Defina SQR_i, a SQR associada ao modelo i e $\boldsymbol{H}_i = \boldsymbol{X}_i \left(\boldsymbol{X}_i'\boldsymbol{X}_i\right)^{-1} \boldsymbol{X}_i'$, em que $\boldsymbol{X}_i$ é a matriz de planejamento associado ao modelo i então:

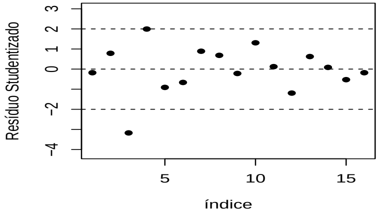
$$
\begin{aligned}
SQInt &= SQR_2 - SQR_1 = \boldsymbol{Y}'\left(\boldsymbol{H}_1 - \boldsymbol{H}_2\right)\boldsymbol{Y} \\
SQF_A &= SQR_4 - SQR_2 = \boldsymbol{Y}'\left(\boldsymbol{H}_2 - \boldsymbol{H}_4\right)\boldsymbol{Y} \\
SQF_B &= SQR_3 - SQR_2 = \boldsymbol{Y}'\left(\boldsymbol{H}_2 - \boldsymbol{H}_3\right)\boldsymbol{Y}
\end{aligned}
$$

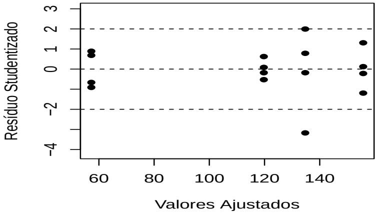
- Outro resultados (que veremos mais à frente) que auxulia na dedução das propriedades da Tabela anova é o Teorema de Cochran.

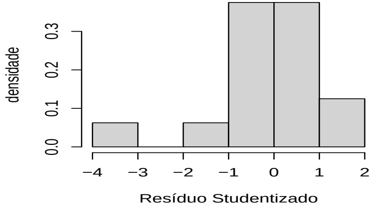
Testes para homocedasticidade

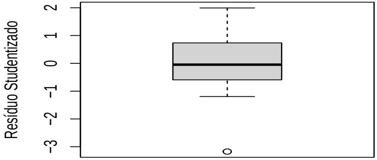
- Teste de Bartlett : 3,96 (0,2663).
- Teste de Levene : 1,51 (0,2633).
- A hipótese de homocedasticidade parece não ser desprezível. (cautela).
- Não faremos o teste de normalidade devido aos tamanhos amostrais bastante pequenos.

Análise de resíduos

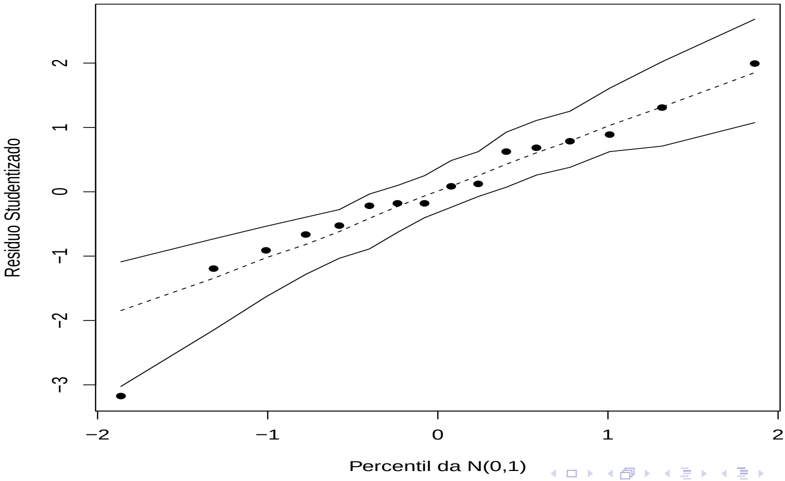








QQ plot com envelope



Comentários

- As suposições do modelo parecem não estarem sendo satisfeitas pelo conjunto de dados.
- Ausência de homocedasticiade e normalidade.
- Uma alternativa: modelos de regressão com distribuição positiva e assimétrica para a variável resposta, que permita variâncias diferentes entre os grupos e com diferentes coeficientes de variação.

Comentários

- Distribuições positivas: família gama (sob parametrização apropriada), família normal inversa, família Weibull, família lognormal, família Birnbaum-Saunders, normal assimétrica (apesar de ter suporte na reta)
- Atenção: o modelo de regressão normal linear não é adequado para analisar os dados em questão.
- Contudo, seguiremos com ele por questões pedagógicas.

Tabela ANOVA

FV	SQ	GL	QM	Estatística F	pvalor
Material	6972,30	1	6972,30	8,13	0,0146
Temperatura	12882,20	1	12882,20	15,02	0,0022
Interação	1722,30	1	1722,30	2,01	0,1819
Resíduo	10291,00	12	857,60		
Total	31867,75	15			

Ausência de interação e de efeito principal de Material (devido ao gráfico de perfis e ao resultado a seguir).

Estimativas dos parâmetros do modelo

Parâmetro	Estimativa	EP	IC(95%)	Estat. t	pvalor
μ	134,75	14,64	[106,05;163,45]	9,20	$<$ 0,0001
α_2	21,00	20,71	[-19,58;61,58]	1,01	0,3305
β_2	-77,50	20,71	[-118,09;-36,91]	-3,74	0,0028
$(\alpha\beta)_{22}$	41,50	29,28	[-15,90;98,90]	1,42	0,1819

Apesar da inexistência de interação ser confirmada, há uma discordância (entre este resultado e o anterior) em termos da inexistência do efeito de tipo de material. Provavelmente, pelo comprometimento no ajuste do modelo e pelo gráfico de perfis médios.

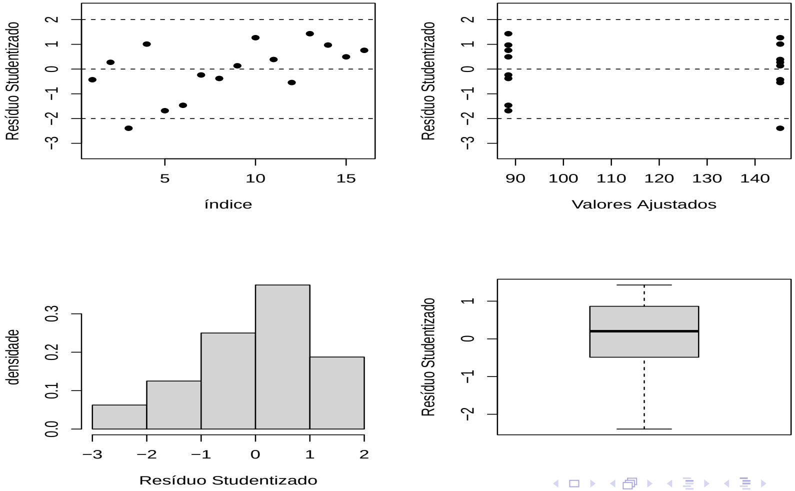
Modelo reduzido (casela de referência)

$$Y_{ijk} = \mu + \beta_j + \xi_{ijk},$$

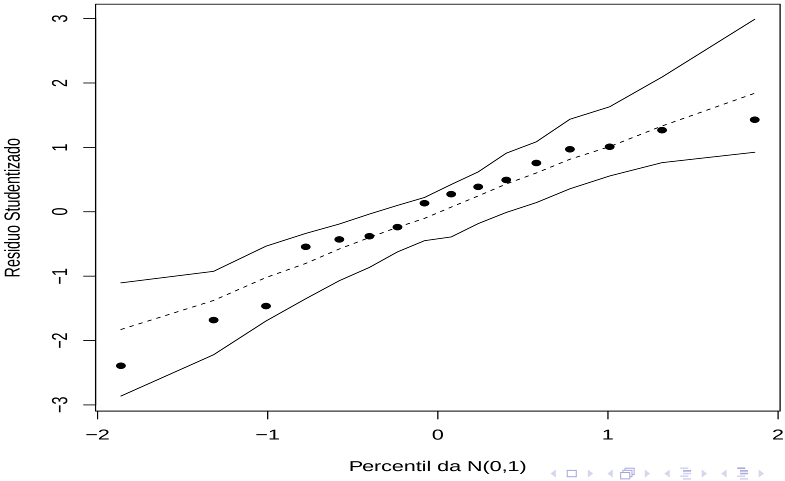
(Fator B), $j = 1, 2$; (unidades experimentais), $k = 1, 2, ..., 8$

- Erros $\xi_{ijk} \overset{i.i.d}{\sim} N(0, \sigma^2)$, $\mu, \alpha_i, \beta_j, (\alpha\beta)_{ij}$ não aleatório.
- $\mathcal{E}_{\xi_{ijk}}(Y_{ijk}) = \mu_{ij}, \mathcal{V}_{\xi_{ijk}}(Y_{ijk}) = \sigma^2$.
- Restrições : $\beta_1 = 0, \forall i, j$.
- $Y_{ijk} \overset{ind.}{\sim} N(\mu + \beta_j, \sigma^2)$.

Análise de resíduos (modelo reduzido)



QQ plot com envelope (modelo reduzido)



Comentários

- Atenção: o modelo de regressão normal linear não é adequado para analisar os dados em questão.
- Contudo, seguiremos com ele por questões pedagógicas.

Tabela ANOVA

FV	SQ	GL	QM	Estatística F	pvalor
Temperatura	12882,25	1	12882,25	9,50	0,0081
Resíduo	18896,50	14	1356,70		
Total	31867,75	15			

Estimativas dos parâmetros do modelo

Parâmetro	Estimativa	EP	IC(95%)	Estat. t	pvalor
μ	145,25	13,02	[119,73;170,77]	11,16	$<$ 0,0001
β_2	-56,75	18,41	[-92,84;-20,66]	-3,08	0,0081

Estimativas finais das médias

Tratamento	Estimativa	EP	IC(95%)
Temperat. de $15^o F$ e Material 1/2	145,25	13,02	[119,73;170,77]
Temperat. de $75^o F$ e Material 1/2	88,50	13,01	[62,98;114,01]

Conclusão: as placas tem a mesma resistência (média), independentemente do material usado mas, apresentam menor resistência sob temperaturas mais elevadas.