Poder do teste e determinação do tamanho da amostra:PCA & PBC

Prof. Caio Azevedo

- Relembrando:
  - $\alpha =$ probabilidade do erro do tipo I: P(Rejeitar $H_0|H_0$ é verdadeira).
  - $\beta =$ probabilidade do erro do tipo II: P(Não rejeitar $H_0|H_0$ é falsa).
  - $\psi =$ poder do teste : $= 1 - \beta$=P(Rejeitar $H_0|H_0$ é falsa).
- Em geral, em qualquer experimento, a probabilidade do erro do tipo I é controlada (α).
- A probabilidade do erro do tipo II (consequentemente o poder do teste) não é, em geral, controlada.
- Como determinar tamanhos de amostra (por tratamento/no geral) que garantam um poder mínimo?
- Como calcular o poder do teste, para um dado experimento?

- Sejam $X_1, X_2, ..., X_n \overset{ind}{\sim} N(\mu_i, \sigma_i^2)$.
- Defina $Y = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{X_i}{\sigma_i}\right)^2$. Dizemos então que Y tem distribuição qui-quadrado não central com n graus de liberdade e parâmetro de não-centralidade $\delta = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\mu_i}{\sigma_i}\right)^2$
- Notação $Y \sim \chi^2_{(n,\delta)}$, cuja fdp é dada por

$$f_y(y) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{-\delta/2}(\delta/2)^i}{i!} f_{W_{n+2i}}(y) \mathbb{1}_{(0,\infty)}(y),$$

em que $W_{n+2i} \sim \chi^2_{(n+2i)}$

- Se $\delta = 0$, então $Y \sim \chi^2_{(n)}$.

- Seja V uma outra v.a., independente de Y, $V \sim \chi^2_{(m)}$.
- Defina $F = \frac{Y/n}{V/m}$. Então, F tem distribuição F não central com graus de liberdade, n e m e parâmetro de não centralidade δ.
- Notação $F \sim \chi^2_{(n,m,\delta)}$, cuja fdp é dada por

$$
\begin{aligned}
f_F(f) &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{-\delta/2}(\delta/2)^i}{\beta(m/2, n/2+i)i!} \left(\frac{n}{m}\right)^{n/2+i} \left(\frac{m}{m+nf}\right)^{(n+m)/2+i} \\
&\times \quad f^{n/2-1+i} \mathbb{1}_{(0,\infty)}(f)
\end{aligned}
$$

em que $\beta(a,b) = \int_0^1 x^{a-1}(1-x)^{b-1}dx$

ANOVA PCA com um único fator (balanceado)

- Tem-se um único fator com k níveis (grupos ou tratamentos).
- Em cada grupo tem-se n unidades experimentais.
- Tem-se um total de kn observações.

Modelo (CR) para um único fator

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \xi_{ij}, i = 1, 2, .., k$$

(grupos); $j = 1, ..., n$ (unidades experimentais)

- Erros $\xi_{ij} \overset{i.i.d}{\sim} N(0, \sigma^2)$, μ, α_i não aleatórios.
- $\alpha_1 = 0$.
- Hipótese de interesse (primário)

$$H_0 : \alpha_2 = \alpha_3 = ... = \alpha_k = 0$$

vs H_1 : pelo menos uma desigualdade

- Lembremos que, sob H_0, $V = SQF/\sigma^2 \sim \chi^2_{(k-1)}$.
- Independentemente de H_0 ser verdadeira, $W = SQR/\sigma^2 \sim \chi^2_{(n-k)}$.
- Assim, sob $H_0 = F = \frac{V/(k-1)}{W/(n-k)} \sim F_{(k-1,n-k)}$.
- Lembrando que :

$$\mathcal{E}(SQF) = (k-1)\sigma^2 + n\sum_{i=1}^{k}(\mu_i - \overline{\mu})^2, \overline{\mu} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\mu_i$$

- No caso da parametrização CR, tem-se que

  $\mu_i - \overline{\mu} = \alpha_i - \overline{\alpha}, \overline{\alpha} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\alpha_i$

  assim

$$\mathcal{E}(SQF/\sigma^2) = \underbrace{(k-1)}_{\text{graus de liberdade}} + \underbrace{\frac{n}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{k}(\alpha_i - \overline{\alpha})^2}_{\text{parâmetro de não centralidade}} .$$

- Assim, se H_0 não for verdadeira, então $V \sim \chi^2_{(k-1,\delta)}, \delta = n\frac{\sum_{i=1}^{k}(\alpha_i - \overline{\alpha})^2}{\sigma^2}$.
- Portanto, $\mathcal{E}(SQF/\sigma^2) = (k-1) + \delta$.
- Segue-se que, sob H_1, $F \sim F_{(k-1,n-k,\delta)}$
- Regra para obtenção do parâmetro de não-centralidade: em geral,

$$\mathcal{E}(\text{Soma de Quadrados (Fator, Interação, Bloco)}/\sigma^2) =$$

$$\text{graus de liberdade} + \text{parâmetro de não centralidade}$$

- Assim, para um dado valor de δ e para um nível de significância fixado α, temos que o poder do teste é dado por

$$\psi = P(F_1 > f_c | H_0 \text{ é falsa}), F_1 \sim F_{(k-1,n-k,\delta)}$$

em que f_c (valor crítico) é o valor da distribuição $F_{(k-1,n-k)}$, $P(F_0 > f_c | H_0) = \alpha$, $(F_0 \sim F_{(k-1,n-k)})$.

- A função poder (em δ) é dada por:

$$\psi(\delta) = P(F_1 > f_c | H_0 \text{ é falsa}), F_1 \sim F_{(k-1,n-k,\delta)} \tag{1}$$

- Para um determinado conjunto de dados, podemos estimar δ, através de

$$\widehat{\delta} = n\frac{\sum_{i=1}^{k}(\widehat{\alpha}_i - \widehat{\overline{\alpha}})^2}{\widehat{\sigma}^2},$$

em que $\widehat{\alpha}_i, i = 1, 2.., k$ são os estimadores de mínimos quadrados, $\widehat{\overline{\alpha}} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\widehat{\alpha}_i$ e $\widehat{\sigma}^2 = QMR$.

- Logo, o poder estimado é dado por

$$\widehat{\psi} = \psi(\widehat{\delta})$$

ou seja, utiliza-se $\widehat{\delta}$ na equação (1)

Exemplo 2 (retomando)

- Exemplo 2: Uma bioquímica (Tecnologia de Alimentos) está interessada em estudar a extração de pigmentos naturais, com aplicação como corante em alimentos. Numa primeira etapa tem-se a necessidade de escolher o melhor solvente extrator. A escolha do(s) melhor(es) solventes foi realizada através da medida da absorbância de um pigmento natural do fruto de baguaçú. Fator = tipos de solvente; k=5 níveis; n_k=5 repetições.
- Da análise anterior, temos: $\widetilde{\boldsymbol{\alpha}} = (0; 0,06854; 0.02752; -0.34258; -0.08970)$ e $\widetilde{\sigma}^2 = 0,0006358708$.

- Isto implica que $\widetilde{\delta} = 851,222$.
- Neste caso, para um $\alpha = 0,05$, o valor crítico é igual à $2,866$.
- Assim, o poder estimado será igual à

  $\widetilde{\psi} = P(F_1 > 2,866|$ é falsa$) \equiv P(F_1 > 2,866) > 0,9999$

Exemplo 3 (retomando)

- Tem-se o interesse em se saber se a quantidade de fósforo existente (administrada) no solo afeta a produção de milho (de uma certa variedade).
- Fator: quantidade de fósforo, k $= 5$ níves, $n = 4, i = 1, 2, 3, 4$ repetições por tratamento (quantidade de fósforo administrada).
- Procedimento: 20 porções de terras, chamadas de parcelas, (em condições semelhantes) foram consideradas e cada uma delas recebeu uma determinada quantidade de fósforo, de modo aleatório (completamente casualizado).

Exemplo 3 (cont.)

- Da análise anterior, temos: $\widetilde{\boldsymbol{\alpha}} = (0; 4,9925; 3,6075; 3,6525; 4,7025)$ e $\widetilde{\sigma}^2 = 1,556012$;
- Logo $\widetilde{\delta} = 40,871$.
- Assim, temos os seguintes resultados, conforme o valor de α escolhido.

α	f_c	$\widetilde{\psi}$
0,10	2,36	0,9992
0,05	3,06	0,9965
0,01	4,89	0,9624

Exemplo 3 (cont.)

- Suponha que o pesquisador queira realizar um outro experimento semelhante à este em questão.
- Ele quer, para $\alpha = 0,05$, um poder de pelo menos 0,90.
- Qual deve ser o tamanho para cada tratamento (consequentemente o tamanho total) para obter este poder?

n	nk	f_c	δ	$\widetilde{\psi}$
2	10	5,19	20,43	0,6289
3	15	3,47	30,65	0,9536
4	20	3,06	40,87	0,9965

Como proceder (PCA)

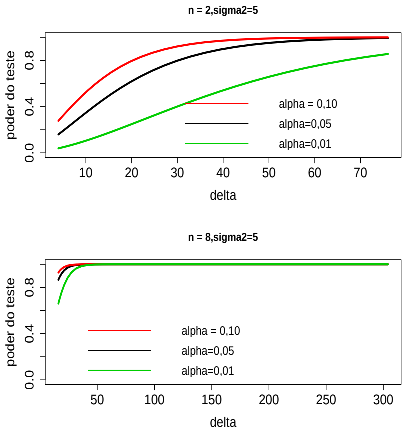
- Perguntar ao pesquisador e/ou usar informações de experimentos anteriores sobre o nível de significância (α).
- Perguntar ao pesquisador e/ou usar informações de experimentos anteriores sobre a variabilidade (σ^2).
- Perguntar ao pesquisador e/ou usar informações de experimentos anteriores sobre a magnitude das diferenças entre as médias.

Exemplo artificial

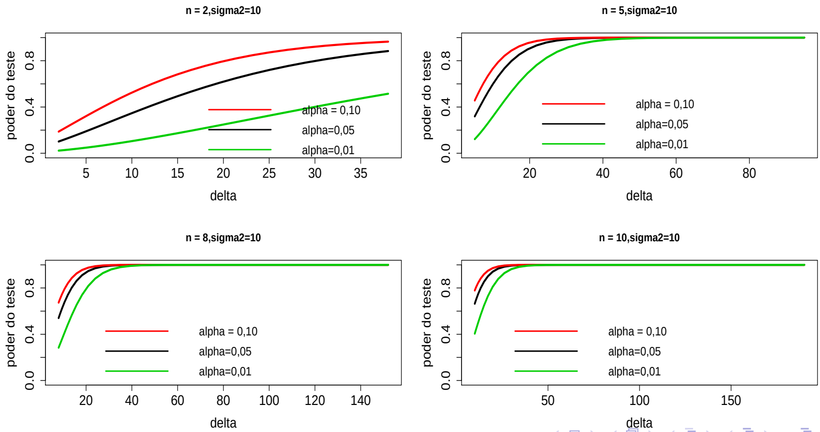
- Três grupos, experimento balanceado, $\alpha = 0,05$, $\sigma^2 = 5$.

$\sum_{i=1}^{3} \alpha_i^2$	n	kn	$\widetilde{\psi}$	$\sum_{i=1}^{3} \alpha_i^2$	n	kn	$\widetilde{\psi}$
0,5	2	6	0,0521	50	2	6	0,2746
	3	9	0,0547		3	9	0,5794
	4	12	0,0574		4	12	0,7886
	5	15	0,0599		5	15	0,9032
	10	30	0,0732		10	30	0,9991
2	2	6	0,0586	200	2	6	0,7437
	3	9	0,0694		3	9	0,9919
	4	12	0,0803		4	12	0,9998
	5	15	0,0915		5	15	0,9999
	10	30	0,15022		10	30	$>$0,9999

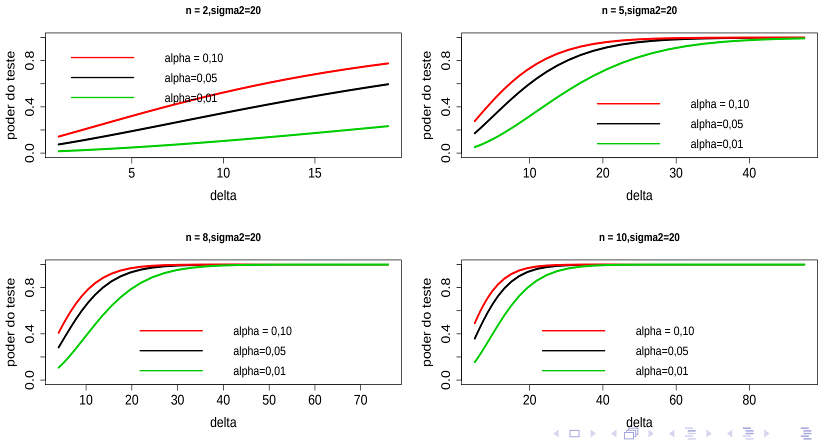
Curvas de poder



Curvas de poder



Curvas de poder



Comentários sobre o poder do teste

- Podemos notar que, quanto maior o valor do parâmetro de não centralidade (δ), maior o poder do teste.
- Quanto maior for a diferença entre as médias e menor for a variância, maior será o valor de δ, consequentemente, maior será o poder do teste.
- Além disso, quanto maior for o valor da probabilidade do erro do tipo I (α), maior será o poder do teste;

PCA desbalanceado com dois fatores

- Fator A: possui a níveis, i=1,..,a.
- Fator B: possui b níveis, j=1,...,b.
- Grupos: há um total de $a \times b$ grupos (tratamentos), que são definidos pelas interseções dos níveis de cada grupo.
- Para cada grupos vamos considerar um total de n observações. Cada uma das nab observações são alocadas aleatoriamente à cada uma das combinações (fatores). Temos uma PCA (planejamento completamente casualizado).
- Neste caso número total de observações nab.

Esperanças das Somas de Quadrados

$$\mathcal{E}(SQF_A) = (a-1)\sigma^2 + bn\sum_{i=1}^{a}(\overline{\mu}_{i.} - \overline{\mu}_{..})^2$$

$$\mathcal{E}(SQF_B) = (b-1)\sigma^2 + an\sum_{j=1}^{b}(\overline{\mu}_{.j} - \overline{\mu}_{..})^2$$

$$\mathcal{E}(SQFInt) = (a-1)(b-1)\sigma^2 + n\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}[(\mu_{ij} + \overline{\mu}_{..}) - (\overline{\mu}_{i.} + \overline{\mu}_{.j})]^2$$

$\mu_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij}; \overline{\mu}_{i.} = \frac{1}{b}\sum_{j=1}^{b}\mu_{ij};$
$\overline{\mu}_{.j} = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{a}\mu_{ij}; \overline{\mu}_{..} = \frac{1}{ab}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\mu_{ij}$

Esperanças das Somas de Quadrados (cont.)

$$\mathcal{E}(SQF_A/\sigma^2) = \underbrace{(a-1)}_{gl} + \underbrace{nb\frac{\sum_{i=1}^{a}(\overline{\mu}_{i.} - \overline{\mu}_{..})^2}{\sigma^2}}_{pnc}$$

$$\mathcal{E}(SQF_B/\sigma^2) = \underbrace{(b-1)}_{gl} + \underbrace{na\frac{\sum_{j=1}^{b}(\overline{\mu}_{.j} - \overline{\mu}_{..})^2}{\sigma^2}}_{pnc}$$

$$\mathcal{E}(SQFInt/\sigma^2) = \underbrace{(a-1)(b-1)}_{gl} + \underbrace{n\frac{\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}[(\mu_{ij} + \overline{\mu}_{..}) - (\overline{\mu}_{i.} + \overline{\mu}_{.j})]^2}{\sigma^2}}_{pnc}$$

Estimação dos parâmetros de não centralidade

Para estimar os parâmetros de não centralidade, basta substituir os parâmetros, pelos seus respectivos estimadores:

$\widehat{\mu}_{ij} = \widehat{\mu} + \widehat{\alpha}_i + \widehat{\beta}_j + \widehat{(\alpha\beta)}_{ij}; \widehat{\overline{\mu}}_{i.} = \frac{1}{b}\sum_{j=1}^{b}\widehat{\mu}_{ij};$

$\widehat{\overline{\mu}}_{.j} = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{a}\widehat{\mu}_{ij}; \widehat{\overline{\mu}}_{..} = \frac{1}{ab}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\widehat{\mu}_{ij}$

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^{o}F, 70^{o}F e 125^{o}F. Equivalente à -9,44^{o}C, 21,11^{o}C e 51,67 ^{o}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 . Vamos considerar apenas os dois primeiros níveis de cada fator.

Exemplo 4: Resistência de materiais

- Neste caso, temos que $\widetilde{\boldsymbol{\beta}} = (134,75; 21,00; -77,50; 41,50)$ e $\widetilde{\sigma}^2 = 857,58$.
- Assim, tem-se que $\delta_A = 8,130$, $\delta_B = 15,022$ e $\delta_{Int} = 2,008$; parâmetros de não centralidade associados aos testes de existência de efeito do Fator A, Fator B e interação, respectivamente.
- Assim, temos os seguintes poderes estimados $\widetilde{\psi}_A = 0,7447$, $\widetilde{\psi}_B = 0,9442$ e $\widetilde{\psi}_{Int} = 0,2568$.

PBC: Modelo (casela de referência)

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \tau_j + \xi_{ij},$$

$(\text{Fator}), i = 1, 2, 3, ...k; (\text{Bloco}), j = 1, 2, 3, ..., b$

- Erros $\xi_{ij} \overset{i.i.d}{\sim} N(0, \sigma^2)$, μ, α_i, τ_j, não aleatórios.
- Restrições : $\alpha_1 = \tau_1 = 0$.

Esperanças das Somas de Quadrados

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(SQF) &= (k-1)\sigma^2 + b\sum_{i=1}^{k}(\overline{\mu}_{i.} - \overline{\mu}_{..})^2 \\ \mathcal{E}(SQB) &= (b-1)\sigma^2 + k\sum_{j=1}^{b}(\overline{\mu}_{.j} - \overline{\mu}_{..})^2\end{aligned}$$

$\overline{\mu}_{i.} = \frac{1}{b}\sum_{j=1}^{b}\mu_{ij}; \overline{\mu}_{.j} = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{a}\mu_{ij};\ \overline{\mu}_{..} = \frac{1}{ab}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\mu_{ij}$

Esperanças das Somas de Quadrados (cont.)

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(SQF/\sigma^2) &= (k-1) + \frac{b\sum_{i=1}^{k}(\overline{\mu}_{i.} - \overline{\mu}_{..})^2}{\sigma^2} \\
\mathcal{E}(SQB/\sigma^2) &= (b-1) + \frac{k\sum_{j=1}^{b}(\overline{\mu}_{.j} - \overline{\mu}_{..})^2}{\sigma^2}
\end{aligned}$$

Estimação dos parâmetros de não centralidade

Para estimar os parâmetros de não centralidade, basta substituir os parâmetros, pelos seus respectivos estimadores:

$\widehat{\mu}_{ij} = \widehat{\mu} + \widehat{\alpha}_i + \widehat{\tau}_j ; \widehat{\overline{\mu}}_{i.} = \frac{1}{b}\sum_{j=1}^{b}\widehat{\mu}_{ij} ; \widehat{\overline{\mu}}_{.j} = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{a}\widehat{\mu}_{ij} ;$

$\widehat{\overline{\mu}}_{..} = \frac{1}{ab}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\widehat{\mu}_{ij}$

Exercício: Fazer os desenvolvimentos acima para os modelos com três fatores e interações e com dois fatores (em bloco) e interação entre os fatores principais.