9.1 INTRODUCCIÓN

Este tipo de diseños experimentales consiste de un plan experimental en donde se estudia el efecto sobre una respuesta de **k** factores, **cada uno con dos niveles**. Generalmente los niveles en cada factor son denotados como bajo y alto, que en forma codificada representamos por **–1** y **+1** respectivamente. El diseño factorial completo requiere que cada nivel de todos los factores ocurra con cada nivel de todos los demás factores, lo que equivale a un total de $\mathbf{2^k}$ tratamientos. Obviamente este tipo de diseño es de efectos fijos. Este tipo de diseño ha sido el de mayor impacto a nivel industrial y en la investigación, por su eficacia y versatilidad. Los factoriales $\mathbf{2^k}$ completos son principalmente útiles cuando el número de factores a estudiar está entre 2 y cinco, es decir $2 \leq k \leq 5$, rango en el cual el número de tratamientos se encuentra entre 2 y 32, cantidad manejable en muchas situaciones experimentales. Si el número de factores es mayor que 5 se recomienda utilizar un factorial fraccionado $\mathbf{2^{k-p}}$, que se estudiará más adelante. En general, los factoriales en dos niveles sean completos o fraccionados, constituyen el conjunto de diseños de mayor impacto en las aplicaciones. Estos permiten atacar todo tipo de problemas y procesos de manera eficiente.

En los cálculos relacionados con el ANOVA y las estimaciones de este tipo de experimentos, suele usarse un sistema de notación conocido en la literatura como **Notación de Yates** con la cual se representa mediante una codificación, el total de las sumas de las observaciones en cada tratamiento. Para comprenderla, se procederá a continuación con el caso de un experimento factorial $\mathbf{2^2}$**.**

9.2 EXPERIMENTOS FACTORIALES 2^2

Suponga que se tiene un experimento de dos factores, en donde se han hecho **n** replicaciones experimentales por tratamientos. Denote por:

(1) Valor total (la suma) en el primer nivel del factor A y primer nivel del segundo factor B (-1,-1);
a Valor total (la suma) en el primer nivel del factor B y segundo nivel del factor A (+1,-1);
b Valor Total (la suma) en el primer nivel del factor A , segundo nivel del factor B (-1,+1);
ab Valor Total (la suma) en el segundo nivel del factor A , segundo nivel del factor B (+1,+1).

Vea la tabla siguiente en la cual se indica el uso de la notación anterior para el cálculo de las medias en cada nivel para cada factor:

		B		Media
		-1	+1	
A	-1	(1)	b	$\overline{Y}_{1\bullet\bullet} = \dfrac{(b+(1))}{2n}$
	+1	a	ab	$\overline{Y}_{2\bullet\bullet} = \dfrac{(a+ab)}{2n}$
Media		$\overline{Y}_{\bullet 1\bullet} = \dfrac{(a+(1))}{2n}$	$\overline{Y}_{\bullet 2\bullet} = \dfrac{(b+ab)}{2n}$	$\overline{Y}_{\bullet\bullet\bullet} = \dfrac{((1)+a+b+ab)}{2^2 n}$

Tabla 9.1

9.2.1. Representación geométrica del factorial 2^2

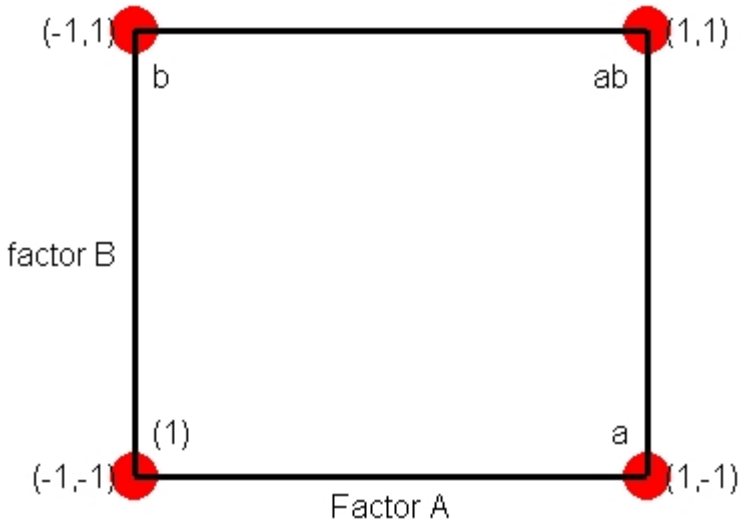


Figura 9.1: Representación del diseño factorial 2^2 (Fuente [1])

NOTA: El modelo ANOVA para el 2^2 con tratamientos replicados sigue siendo de la forma $\boldsymbol{Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + E_{ijk}}$ con los mismos supuestos sobre los errores de cualquier modelo ANOVA de dos factores de efectos fijos y con las restricciones sobre los efectos individuales y de interacción vistas previamente en el curso. *Sin embargo, ahora usaremos un modelo de regresión para el ajuste*.

9.2.2. Estimación de contrastes y efectos

Para el cálculo de las estimaciones de contrastes de totales de tratamientos en general se usa la siguiente tabla de signos los cuales deben considerarse como el signo a colocar a los totales de tratamientos, según el contraste de que se trate; los signos indican para cada factor en cuál de los dos niveles bajo(-) o alto (+) se encuentra en el tratamiento correspondiente:

	Efecto factorial		
Combinación o tratamiento	A	B	AB
(1)	-	-	+
a	+	-	-
b	-	+	-
ab	+	+	+

Tabla 9.2

Note que para la interacción AB los signos en cada combinación de niveles corresponde al producto de los signos de cada factor en la respectiva combinación o tratamiento. Con base en las tablas 9.1 y 9.2, podemos calcular los efectos de cada factor y el efecto de interacción, así:

Efecto principal del factor A: Es la respuesta media en el nivel alto del factor A menos la respuesta media en el nivel bajo del mismo factor, y lo denotaremos por α_A entonces su estimador es:

$$\hat{\alpha}_A = \frac{\boldsymbol{a + ab - b - (1)}}{2\boldsymbol{n}} \quad \textbf{(ec. 1)}$$

El contraste de totales de tratamientos asociado a este efecto, según la tabla 9.2 y usando la notación de Yates es, $\hat{\omega}_A = \boldsymbol{a + ab - b - (1)}$. Geométricamente, el efecto de A equivale a promediar los datos del lado derecho del cuadrado en la figura 9.1 y restarle el promedio de los datos del lado izquierdo.

NOTA: Para el modelo ANOVA tradicional tendríamos que la estimación del efecto fijo del nivel alto de A sería, $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_2 = \hat{\boldsymbol{\alpha}}_A/2$ mientras que la estimación del efecto del nivel bajo de A sería $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_1 = -\hat{\boldsymbol{\alpha}}_A/2$.

Efecto principal del factor B: Es la respuesta media en el nivel alto del factor B menos la respuesta media en el nivel bajo del mismo factor, y lo denotaremos por α_B entonces su estimador es:

$$\hat{\alpha}_B = \frac{\boldsymbol{b + ab - a - (1)}}{2\boldsymbol{n}} \quad \textbf{(ec. 2)}$$

El contraste de totales de tratamientos asociado a $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_B$ según la tabla 9.2 es, $\hat{\omega}_B = \boldsymbol{b + ab - a - (1)}$. Geométricamente corresponde a promediar los datos del lado superior del cuadrado de la figura 9.1 y restarle el promedio de los datos del lado inferior.

NOTA: Para el modelo ANOVA tradicional tendríamos que la estimación del efecto fijo del nivel alto de B sería, $\hat{\boldsymbol{\beta}}_2 = \hat{\boldsymbol{\alpha}}_B/2$ mientras que la estimación del efecto del nivel bajo de B sería $\hat{\boldsymbol{\beta}}_1 = -\hat{\boldsymbol{\alpha}}_B/2$.

Efecto de Interacción de los factores A y B: Está dado por la diferencia entre el efecto de A en el nivel alto de B y el efecto de A en el nivel bajo de B y lo denotaremos por $\boldsymbol{\alpha_{AB}}$, luego su estimador es

$$\hat{\alpha}_{AB} = \frac{\boldsymbol{ab - b}}{2\boldsymbol{n}} - \frac{\boldsymbol{a - (1)}}{2\boldsymbol{n}} = \frac{\boldsymbol{ab + (1) - a - b}}{2\boldsymbol{n}} \quad \textbf{(ec. 3)}$$

O bien, es la diferencia entre el efecto de B en el nivel alto de A y el efecto de B en el nivel bajo de A,

$$\hat{\alpha}_{AB} = \frac{\boldsymbol{ab - a}}{2\boldsymbol{n}} - \frac{\boldsymbol{b - (1)}}{2\boldsymbol{n}} = \frac{\boldsymbol{ab + (1) - a - b}}{2\boldsymbol{n}} \quad \textbf{(ec. 4)}$$

El contraste de los totales de tratamientos asociado a este efecto, según la tabla 9.2 es $\hat{\omega}_{AB} = \boldsymbol{ab} + (1) - \boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}$. Geométricamente, la interacción está dada por la diferencia entre las medias de los datos de las diagonales del cuadrado de la figura 9.1.

NOTA: Para el modelo ANOVA tradicional tendríamos que las estimaciones de los efectos fijos de las interacciones serían $\widehat{(\alpha\beta)}_{11} = \widehat{(\alpha\beta)}_{22} = \hat{\alpha}_{AB}/2$ y $\widehat{(\alpha\beta)}_{12} = \widehat{(\alpha\beta)}_{21} = -\hat{\alpha}_{AB}/2$.

9.2.3. Anova en un factorial 2^2

Para afirmar que cualquiera de los efectos (principales y de interacción) contribuyen a explicar el comportamiento de la variable respuesta se debe hacer el ANOVA. Para el cálculo de las sumas de cuadrados **se puede recurrir a la formulación de contrastes entre los totales de tratamientos**, los cuales son aquellas sumas involucrados en los cálculos de los efectos. La suma de cuadrados debida a un contraste ω de los 2^k totales de tratamientos, está dada por:

$$SS_{\omega} = \frac{\hat{\omega}^2}{n\sum_{i=1}^{2^k} c_i^2} \qquad \textbf{(ec. 5)}$$

donde $\hat{\omega}$ es la estimación del respectivo contraste de totales de tratamientos a partir de los datos observados.

Expresiones para las **sumas de Cuadrados:** Las sumas de cuadrados pueden obtenerse directamente de los contrastes de tratamientos sin calcular los efectos, o usando los efectos. Según [1], dado que los efectos proporcionan información más interpretable que los contrastes de totales, se recomienda calcularlos siempre. Por tanto, los pasos para el ANOVA son los siguientes:

1. Obtener los contrastes de totales de tratamientos asociados a cada efecto en el diseño, es decir calcular $\hat{\omega}_A$, $\hat{\omega}_B$, y $\hat{\omega}_{AB}$
2. Estimar los efectos $\hat{\alpha}_A$, $\hat{\alpha}_B$ y $\hat{\alpha}_{AB}$, dividiendo el respectivo contraste por la constante que los convierte en diferencias de medias. En general para un diseño factorial completo 2^k con n réplicas esta constante es $n2^{(k-1)}$, luego, para el factorial 2^2 dicha constante es $2n$.
3. Calcular las sumas de cuadrados usando la **ec. 5,** teniendo en cuenta que en cada contraste de totales de tratamientos en un 2^2 se cumple que $\sum_{i=1}^{4} c_i^2 = 4$, y así se llega a:

$$\begin{aligned} SSA &= n\hat{\alpha}_A^2 \\ SSB &= n\hat{\alpha}_B^2 \qquad \textbf{(ec. 6)} \\ SS(AB) &= n\hat{\alpha}_{AB}^2 \end{aligned}$$

   Cada una de las sumas de cuadrados anteriores tiene 1 grado de libertad.
4. La suma de cuadrados totales se calcula mediante la expresión:

$$\boldsymbol{SST} = \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{n} \boldsymbol{Y}_{ijk}^2 - \frac{\boldsymbol{Y}_{\bullet\bullet\bullet}^2}{2^2\boldsymbol{n}} \quad \textbf{(ec. 7)}$$

Donde $\boldsymbol{Y}_{\bullet\bullet\bullet}^2 = \left(\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{n} \boldsymbol{Y}_{ijk}\right)^2$ es el cuadrado de la suma de todas las $\mathbf{2^2}\boldsymbol{n} = \mathbf{4}\boldsymbol{n}$ observaciones y sus grados de libertad son $\mathbf{2^2}\boldsymbol{n} - \mathbf{1} = \mathbf{4}\boldsymbol{n} - \mathbf{1}$.

5. El SSE se halla por diferencia: $\boldsymbol{SSE} = \boldsymbol{SST} - \boldsymbol{SSA} - \boldsymbol{SSB} - \boldsymbol{SS}(\boldsymbol{AB})$ y sus grados de libertad corresponden a $\mathbf{4}(\boldsymbol{n} - \mathbf{1})$.

ANOVA				
Fuente	g.l	S.C	CM	F
A	1	SSA	MSA	MSA/MSE
B	1	SSB	MSB	MSB/MSE
AB	1	SS(AB)	MS(AB)	MS(AB)/MSE
Error	4(n-1)	SSE	MSE	
Total	4n-1	SST	MST	

Las hipótesis nulas asociadas, son:

$\mathbf{H_0}$ **: Efecto de AB = 0, es decir,** $\boldsymbol{\alpha_{AB}} = \mathbf{0}$**,**

$\mathbf{H_0}$ **: Efecto de A = 0, es decir** $\boldsymbol{\alpha_A} = \mathbf{0}$

$\mathbf{H_0}$ **: Efecto de B = 0, es decir** $\boldsymbol{\alpha_B} = \mathbf{0}$

Cada una de estas hipótesis nulas es contrastada contra la alternativa de que el efecto en cuestión es distinto de cero y los estadísticos de prueba se distribuyen en cada caso como una variable aleatoria $\boldsymbol{f}_{\mathbf{1},\mathbf{4}(\boldsymbol{n}-\mathbf{1})}$.

Observación: Note en la tabla ANOVA es necesario al menos dos réplicas del experimento en cada tratamiento. Con una réplica se tendrían cero grados de libertad para el error, no se podría entonces calcular el MSE y por tanto no habría ANOVA. Se recomienda correr un factorial 2^2 con al menos tres réplicas para poder calcular el MSE de manera confiable.

9.4 DISEÑO FACTORIAL GENERAL

Este diseño con k factores cada uno en dos niveles genera 2^k tratamientos o puntos de diseño. La matriz de signos para este diseño, considerando una réplica, se puede construir de la siguiente manera:

- En la columna 1 de la matriz correspondiente a los niveles del factor A, se alternan los signos + y –, empezando con signo –, hasta llegar a los 2^k renglones;
- En la segunda columna que corresponde al factor B, se alternan dos signos – con dos signos +;
- En la tercera columna que corresponde al factor C, se alternan cuatro signos – con cuatro signos +;
- Así sucesivamente, hasta la k-ésima columna compuesta de 2^{k-1} signos – seguidos de 2^{k-1} signos +

- Los signos en las columnas correspondientes a los grupos de interacciones resultan de multiplicar las columnas de los factores que aparecen en cada interacción. Por ejemplo, para la columna de los signos que define el contraste del efecto ACD en un factorial 2^5 se multiplican las columnas de los signos de A, C y D.

En la figura 9.2 se presenta diseños factoriales 2^k y los signos de los efectos principales, para $k \leq 5$.

Tratamiento	Notación de Yates	A	B	C	D	E	Tratamiento	Notación de Yates	A	B	C	D	E
1	(1)	−	−	−	−	−	17	*e*	−	−	−	−	+
2	*a*	+	−	−	−	−	18	*ae*	+	−	−	−	+
3	*b*	−	+	−	−	−	19	*be*	−	+	−	−	+
4	*ab*	+	+	−	−	−	20	*abe*	+	+	−	−	+
5	*c*	−	−	+	−	−	21	*ce*	−	−	+	−	+
6	*ac*	+	−	+	−	−	22	*ace*	+	−	+	−	+
7	*bc*	−	+	+	−	−	23	*bce*	−	+	+	−	+
8	*abc*	+	+	+	−	−	24	*abce*	+	+	+	−	+
9	*d*	−	−	−	+	−	25	*de*	−	−	−	+	+
10	*ad*	+	−	−	+	−	26	*ade*	+	−	−	+	+
11	*bd*	−	+	−	+	−	27	*bde*	−	+	−	+	+
12	*abd*	+	+	−	+	−	28	*abde*	+	+	−	+	+
13	*cd*	−	−	+	+	−	29	*cde*	−	−	+	+	+
14	*acd*	+	−	+	+	−	30	*acde*	+	−	+	+	+
15	*bcd*	−	+	+	+	−	31	*bcde*	−	+	+	+	+
16	*abcd*	+	+	+	+	−	32	*abcde*	+	+	+	+	+

Figura 9.2: Familia de diseños factoriales 2^k, $k \leq 5$. (Tomado de [1], tabla 6.10)

9.4.1. Estimación de contrastes, efectos y sumas de cuadrados

Siguiendo a [1], cada uno de los efectos se estima a partir de su contraste, el cual a su vez puede obtenerse construyendo la matriz de signos del diseño. Recordemos que la matriz de signos consiste en determinar los signos que llevan los totales de tratamientos en la notación de Yates para formar el contraste de cada efecto. Una vez construida la matriz de signos, el contraste de totales para calcular cada efecto se obtiene al multiplicar su columna de signos por la columna de totales expresados en la notación de Yates. Con los contrastes se procede a calcular los efectos estimados mediante:

$$\textbf{Efecto } ABC\cdots K = \frac{\textbf{Contraste } ABC\cdots K}{n2^{k-1}} \quad \textbf{(ec. 8)}$$

La suma de cuadrados con un grado de libertad respectiva está dada por:

$$SS\left(ABC\cdots K\right) = \frac{\left[\textbf{Contraste } ABC\cdots K\right]^2}{n2^k} \quad \textbf{(ec. 9)}$$

donde **n** es el número de réplicas de cada tratamiento.

La suma de cuadrados totales se calcula como (aquí es necesario modificar un poco la notación empleada dado el gran número de tratamientos que pudieran estar presentes, según el valor de k):

$$SST = \sum_{i=1}^{n2^k} Y_i^2 - \frac{Y_\bullet^2}{n2^k} \quad \textbf{(ec. 10)}$$

con $n2^k - 1$ grados de libertad, donde Y_i representa cada respuesta observada en el diseño y $Y_\bullet$ es la suma de las observaciones en todo el diseño. La suma de cuadrados del error y sus grados de libertad se hallan por diferencia.

Si se desea incluir en el ANOVA todos los posibles efectos que se puedan estimar con el factorial completo 2^k, será necesario realizar al menos dos réplicas por tratamiento para estimar una suma de cuadrados del error con grados de libertad no nulos. *Sin embargo, de acuerdo a [1], en la mayoría de los casos interesa sólo estudiar a los efectos principales y a las interacciones dobles. Esto hace que cuando el número de factores es $k \geq 4$ no es estrictamente necesario realizar réplicas,* puesto que se puede construir una suma de cuadrados del error aproximada, utilizando las sumas de cuadrados de las interacciones triples y de orden superior que generalmente son pequeñas.

[1] también establece que debe tenerse en cuenta que *al usar un diseño factorial 2^k se supone que la media de la variable respuesta es aproximadamente lineal en el rango de variación de cada uno de los k factores estudiados*. *No es necesario suponer una linealidad perfecta, pero sí que no haya una curvatura muy grande*. De esta forma, dado que cada factor se prueba sólo en dos niveles no es posible estudiar efectos de curvatura (efectos del tipo A^2, B^2, etc.) aunque ésta exista en el proceso; para estudiar tales efectos se necesitan al menos tres niveles en cada factor. *Esto no implica que de entrada sea recomendable un diseño factorial con al menos tres niveles en cada factor, sino que en primera instancia se pueden agregar replicaciones (al menos tres) en el centro del diseño factorial 2^k, y con ellas se puede detectar la presencia de curvatura*. Si se detecta curvatura, las replicaciones al centro no serán suficientes para estudiarla y será necesario aumentar el diseño para investigar mejor dicha curvatura.

9.5 DISEÑO FACTORIAL 2^K NO REPLICADO

De acuerdo a [1], a medida que aumenta el número de factores en un diseño factorial 2^k el número de tratamientos crece considerablemente y por tanto el número de corridas experimentales. Las replicaciones aumentan las corridas experimentales y puede ser altamente costoso en tiempo y recursos realizar la experimentación. Además a veces es suficiente una sola réplica por tratamiento para estudiar los efectos de interés. En la tabla 9.3 se presentan el número de réplicas y de corridas recomendadas para algunos diseños 2^k. Nótese que en ninguno de los diseños listados en esta tabla tiene más de 32 corridas, sin contar las posibles repeticiones al centro. Se puede afirmar que la mayoría de los experimentos 2^k o fracciones de ellos que se utilizan en la práctica requieren a lo más 32 corridas experimentales y con ellas se puede estudiar hasta una cantidad grande de factores (k > 8). *Más aún, un máximo de 16 pruebas son suficientes para la mayoría de los problemas en una primera etapa de experimentación*.

Diseño	Réplicas recomendadas	Número de corridas
2^2	3 ó 4	12, 16
2^3	2	16,
2^4	1 ó 2	16, 32
2^5	Fracción 2^{5-1}	16, 32
2^6	Fracción 2^{6-2} ó 2^{6-1}	16, 32
2^7	Fracción 2^{7-3} ó 2^{7-2}	16, 32

TABLA 9.3: Réplicas recomendadas en la familia de diseños 2^k según [1]

Según [1], una sola réplica del factorial 2^k completo es una estrategia adecuada cuando se tienen cuatro o más factores, considerando que a partir de k = 4 se tiene mucha información con el diseño factorial completo. Esta información extra se refleja en que los efectos de interés primario, como lo son los efectos principales y las interacciones dobles, se estiman con gran precisión, pero además se pueden estimar interacciones de mayor orden las cuales generalmente no son significativas. *Estas interacciones de mayor orden pueden usarse para estimar un error que permita construir un ANOVA aproximado, en el cual el SSE sería la suma de las sumas de cuadrados de los efectos ignorados o mandados al error, y sus grados de libertad son tantos como los efectos que se aglomeren para conformar dicho error.* Los pasos para construir el SSE del ANOVA en un factorial 2^k con una sola réplica son los siguientes:

1. Suponer de antemano que las interacciones de tres o más factores no son significativas y enviarlas directamente al error. *Pero es recomendable que antes de hacer esto, se verifique que las interacciones triples y demás efectos no son significativos, mediante técnicas gráficas tales como los diagramas de Pareto de efectos y el gráfico de Daniel.*
2. Después de decidir cuáles de los efectos principales, de interacciones dobles, triples y de orden superior, pueden enviarse al error, con los efectos excluidos *se obtiene una suma de cuadrados del error con la cual se construye la tabla ANOVA, la cual es una aproximación puesto que existe el riesgo de que la magnitud del error así construido no sea correcta dado que no se basa en replicaciones auténticas.*
3. Una manera de saber si el MSE resultante es apropiado es compararlo con la varianza σ^2 que típicamente se haya observado en la respuesta en su comportamiento previo al experimento.
4. *Se deben mandar al error al menos 8 efectos pequeños para tener mayores probabilidades de que esté bien estimado.*

9.5.1. Decisión sobre cuáles efectos enviar al error

Existen varias técnicas para detectar con bastante seguridad y sin necesidad de una ANOVA, cuáles efectos enviar al error. Saber usar estas técnicas permite construir un MSE con buena aproximación. Si se envía al error un efecto real, es decir con significancia, esto puede inflar el MSE lo que reduciría potencia al ANOVA para detectar efectos significativos. Por otro lado, si el error resulta muy pequeño, se estaría detectando como significativos efectos que no lo son, lo cual llevaría a decisiones incorrectas. Según [1], un

MSE muy alejado del σ^2 histórico de la respuesta, es un síntoma de que posiblemente se está haciendo una mala estimación de éste.

En un experimento pueden existir tres tipos de efectos:

- Los que claramente son significativos,
- los que claramente no afectan y
- efectos intermedios sobre los cuales no es claro si son significativos o no.

Esto últimos son los problemáticos para nosotros. *Las técnicas para decidir qué efectos enviar al error no funcionan bien cuando el diseño completo tiene pocos efectos, como el caso de diseños 2^2 y 2^3*, pero estos por lo general se corren con réplicas. Las técnicas que se presentan a continuación son útiles para factoriales con $k \geq 4$ factores.

Gráfico de efectos en papel normal (Daniel´s Plot): Considerando que los efectos estimados son sumas de variables aleatorias, entonces los efectos no significativos deben seguir una distribución normal con media igual a cero y varianza constante. Por tanto, si graficamos los efectos estimados sobre papel de probabilidad normal, aquellos que no son significativos tenderán a formar una línea recta ubicada a la altura del cero, lo que permite comprobar que tales efectos son insignificantes. Por otro parte, los efectos activos o significativos aparecerán alejados de la recta de normalidad, lo que indica que no se deben sólo al azar, sino a la existencia de efectos reales que influyen en la respuesta. Entre más alejado de la recta más importante será el correspondiente efecto.

Cuando se tienen efectos positivos y negativos puede ser mejor utilizar un ***gráfico de probabilidad medio - normal (half normal plot)*** para visualizar mejor cuáles efectos se alinean y cuáles no. *Este gráfico utiliza sólo la parte positiva de la distribución normal aprovechando su simetría y el hecho de que dos efectos de signo contrario y de la misma magnitud son igualmente importantes.*

Diagrama de Pareto de efectos: Este Pareto es una gráfica de barras que representa los efectos sin estandarizar ordenados en forma descendente (de mayor a menor) de acuerdo a su magnitud absoluta. Es una forma fácil de ver cuáles efectos son los más grandes en cuanto a su magnitud y presentan la realidad observada de los efectos de modo descriptivo sin considerar supuestos distribucionales.

Muchas veces con el diagrama de Pareto y el gráfico de probabilidad normal de los efectos se logra detectar claramente cuáles son los efectos significativos. Según [1], se dice que el diagrama de Pareto trabaja limpiamente cuando quedan bien delimitados los diferentes grupos de efectos, de los más a los menos importantes, como se aprecia en la figura 9.3a. En esta figura cada concavidad de la línea superpuesta a las barras indica las oleadas que ocurren, y en este caso básicamente habrían dos posibilidades para construir el error en un factorial 2^k no replicado o aún, en la definición del mejor ANOVA en general, y hacer el análisis de varianza: *Excluir el primer grupo de menor importancia o también el segundo grupo de menor importancia. Pero si las barras del diagrama quedan como escalones de igual tamaño como en la figura*

9.3b, el principio de Pareto no opera limpiamente, y en tal caso es necesario usar criterios que ayuden a dilucidar dónde hacer el corte de exclusión.

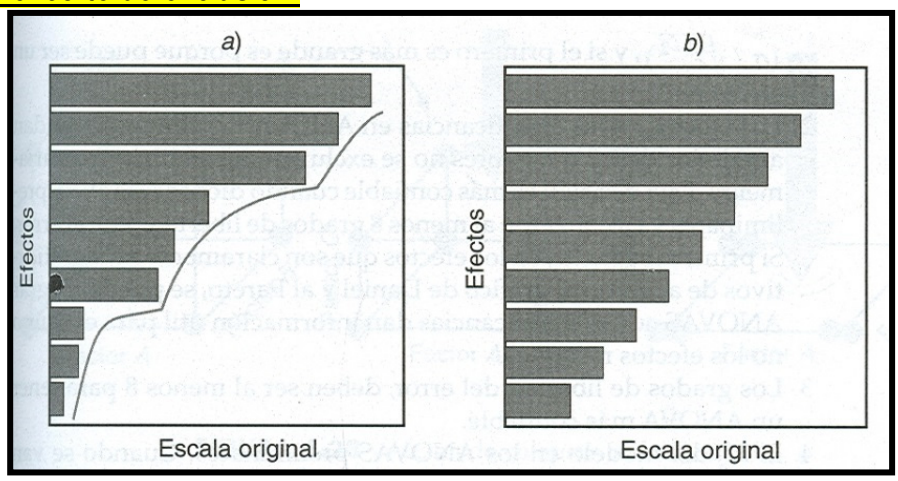


Figura 9.3: Diagramas Pareto que funcionan a) limpiamente y b) No es obvio dónde hacer el corte (Tomado de [1])

Otros criterios útiles, [1]: Cuando hay un grupo de efectos cuya magnitud no es "ni muy grande ni muy pequeña", es difícil decidir si deben mandarse al error o no. En ocasiones ni el gráfico de Daniel ni el diagrama de Pareto aclaran bien la situación de tales efectos. Se requiere utilizar otros criterios adicionales. Se recomienda considerar todos estos criterios y no sólo uno de ellos:

1. **La magnitud del efecto.** Por experiencia en el proceso, la magnitud del efecto puede indicar si éste se debe sólo al azar, en cuyo caso se mandaría al error, o si se debe a un efecto real. *Se puede comparar el efecto observado con el error estándar basado en una varianza histórica:* en el factorial 2^k con una réplica se compara el efecto observado contra dos veces el error estándar del efecto es decir contra $2\sigma/\sqrt{2^{k-2}}$. Si el primero es mayor entonces es un efecto real (significativo).
2. *Los efectos que en ANOVAs preliminares tuvieron un valor P cerca de 0.2 o menores no se excluyen del análisis necesariamente. Esta decisión es más confiable cuando dichos ANOVAS preliminares alcanzaron al menos 8 grados de libertad para el error.* Si primero se excluyen los efectos que no son claramente significativos de acuerdo al gráfico de Daniel y al Pareto, se pueden lograr ANOVAs cuyas significancias dan información útil para excluir o no los efectos restantes.
3. **Los grados de libertad del error** deben ser al menos 8 para tener un ANOVA más confiable.
4. **El R^2_{adj} de los ANOVAS preliminares**. Cuando se eliminan efectos no significativos, este estadístico crece. En el momento en que se elimine un efecto y este estadístico decrece, posiblemente tal efecto no deba excluirse, aunque también debe tenerse en cuenta la magnitud del decrecimiento. *Se requiere que el decrecimiento mencionado sea de cuando menos 3% para que valga la pena incluir otra vez al efecto.*

Colapsación o proyección del diseño: Para [1], cuando en el mejor ANOVA que se pudo determinar se detecta que un factor particular no es significativo, ya que su efecto principal y todas las interacciones en las que interviene no son importantes, entonces en lugar de mandar al error ese factor y sus interacciones, otra posibilidad es **colapsar el diseño,** es decir, eliminar completamente del análisis a tal factor con lo que el diseño original 2^k no replicado se convierte en un diseño factorial completo con un factor menos, $2^{(k-1)}$ (no

confundir con el diseño fracción ½, 2^{k-1}) con dos réplicas en cada punto del diseño resultante. En general si se eliminan **h** factores del diseño factorial, los datos se convierten en un diseño factorial $2^{(k-h)}$ completo con 2^h réplicas en cada punto del diseño. En la figura 9.4 se representa la acción de colapsar un factorial 2^3. ***Sin embargo, hay que ser cautos con esta recomendación de estos autores, puesto que a pesar que el factor no es significativo, hizo parte de los tratamientos aplicados y en cierto modo su presencia durante la experimentación restringió la asignación de las unidades experimentales y de las corridas.*** Vea la figura 9.4: quitar el factor C del experimento que fue desarrollado produce dos seudo-réplicas en cada combinación de A y B, en el modelo reducido considerando sólo a estos dos factores, pero realmente no hubo una asignación completamente al azar replicando cada tratamiento formado con los factores Ay B.

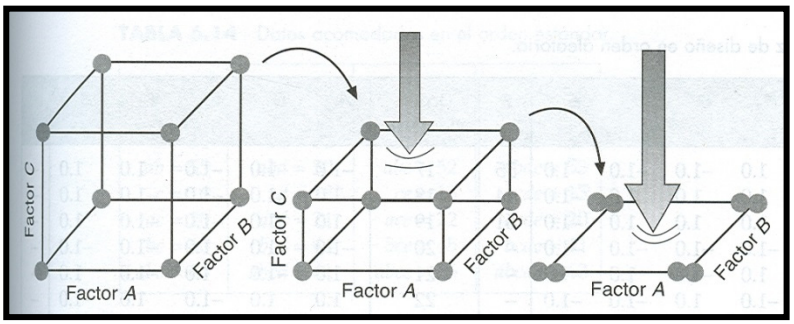


Figura 9.4: Acción de colapsar un factorial 2^3, eliminando el factor C (Tomado de [1])

9.5.2. Análisis del experimento

Pareto estandarizado: Los efectos tanto principales como de interacción pueden graficarse en un diagrama de Pareto para visualizar cuáles de estos tienen mayor impacto sobre la variable respuesta. Para ello los efectos estimados son estandarizados dividiendo cada uno entre su error estándar. Para los diseños factoriales 2^k replicados se tiene que tal error estándar está dado por:

$$\hat{\sigma}_{Efecto} = \sqrt{\frac{MSE}{n2^{k-2}}} \quad \textbf{(ec. 11)}$$

En el diagrama Pareto se grafica la estimación de los efectos estandarizados:

$$\textbf{Efecto estandarizado} = \frac{\textbf{Efecto}}{\sqrt{\frac{MSE}{n2^{k-2}}}} \quad \textbf{(ec. 12)}$$

Este Pareto es una gráfica de barras que representa los efectos estandarizados ordenados en forma descendente (de mayor a menor) de acuerdo con su magnitud absoluta.

Los efectos estandarizados también sirven para probar las hipótesis de significancia del respectivo efecto. Así tales efectos se consideran significativos si:

$$|\textbf{Efecto estandarizado}| > t_{\gamma/2, 2^k(n-1)}$$

Por tanto, una forma sencilla de hacer esta prueba es agregar una línea en el diagrama de Pareto estandarizado a la altura del valor crítico, así, los efectos cuyas barras en el diagrama que superen tal línea serán los efectos significativos.

NOTA: *Recuerde que si no hay réplicas, es decir, si n=1, en las ec. 11 y 12 siguen válidas tomando n=1 pero los grados de libertad del error no corresponden a* $2^k(n-1)$ *sino a la suma de los grados de libertad de los efectos llevados al error.*

NOTA: *En un 2^k no replicado, el diagrama Pareto de efectos estandarizados no se puede calcular antes de haber decidido cuáles efectos deben eliminarse para poder aproximar un MSE!*

Según [1] el mejor ANOVA: A veces en un experimento resultan efectos que son claramente significativos y otros cuyo valor P está cercano del nivel de significancia, por lo que la decisión en estos casos es una decisión con mayores riesgos de error. Con el fin de aclarar cuáles fuentes de variación son significativas y obtener un modelo final en el que sólo se incluyan términos significativos, es usual construir el **mejor ANOVA**, en el que en un primer paso se eliminan del análisis y se mandan al error a los efectos que claramente no son significativos. Después de este paso se revalora a los términos que estaban en una situación dudosa. En una segunda ronda se eliminan los términos que no resulten significativos después de la ronda inicial.
De la anterior forma, se llega a un ANOVA que contiene sólo términos significativos, y este es considerado el mejor ANOVA. También al final de este análisis se obtiene el coeficiente de determinación el cual también debe ser valorado.

Coeficientes de determinación R^2 y R^2_{adj}: El primero de estos dos estadísticos mide la proporción o variabilidad en los datos experimentales que es explicada por el modelo, el segundo es simplemente una medida del ajuste pero no representa tal cual la proporción de variabilidad explicada. *En general para fines de predicción se recomienda un R^2_{adj} de al menos 70%. Cuando hay muchos factores se prefiere el* R^2_{adj}. En caso de que estos estadísticos sean pequeños, esto indicaría que el efecto o variabilidad atribuible a los factores estudiados es pequeña comparada con el resto de la variación observada en el experimento (es decir, que el MSE del modelo es muy grande comparado con cualquiera de las sumas de cuadrados medios asociados a los efectos presentes), lo cual puede deberse a una o varias de las siguientes razones:

- Los factores estudiados por sí solos no tienen la suficiente influencia para explicar las variaciones observadas en la variable respuesta.
- Los niveles de los factores estudiados son demasiado estrechos, por lo que el efecto sobre la variable respuesta al cambiar de un nivel a otro, es demasiado pequeño.
- Otros factores no estudiados en el experimento no se mantuvieron suficientemente fijos, por lo cual las variaciones en estos causaron mucha variación experimental.
- Los errores experimentales y de medición fueron altos.

Se deben analizar cuáles de las anteriores razones influyeron para tener coeficientes de determinación bajos, y no caer en el error de desechar el experimento y creer que no sirvió. Todo experimento genera información que puede servir para plantear nuevas conclusiones y nuevos estudios experimentales.

Análisis de los residuales: La desviación estándar de los residuales en cada tratamiento indica cuál tratamiento tiene menor variabilidad. Una prueba estadística para la hipótesis de igualdad de varianzas en dos tratamientos diferentes $H_0 : \sigma^2_{(i,j)} = \sigma^2_{(l,m)}$ con $(i,j) \neq (l,m)$, se basa en el siguiente estadístico de prueba:

$$Z_0 = \log\left[\frac{S^2_{(i,j)}}{S^2_{(l,m)}}\right] \overset{H_0}{\sim} N(0,1) \quad \textbf{(ec. 13)}$$

se rechaza H_0 si $|Z_0| > Z_{\alpha/2}$.

Verificación de los supuestos: Deben verificarse antes de tomar por válidas las conclusiones de los análisis estadísticos.

Para chequear:	Graficar residuales contra:
Independencia	Orden de las observaciones (según espacio o tiempo)
Varianza igual y outliers	Valores ajustados, y vs. niveles de cada factor de estudio en el experimento
Normalidad	Scores normales, tests de normalidad

Conclusiones e impacto económico: [1] dice que a partir de un buen experimento y del análisis de los resultados se establecen conclusiones acerca de cómo mejorar el proceso en estudio. Con el modelo ANOVA se hace un pronóstico acerca de cómo puede mejorar el proceso. Después de un periodo dado de implementación de las medidas sugeridas por el experimento es necesario valorar desde el punto de vista económico si se lograron los cambios deseados y en la magnitud esperada. Es posible que no se logren resultados en la medida esperada, por lo que es importante tener en cuenta que para lograr mejoras importantes se requiere mantener el énfasis en hacer experimentos secuenciales para abordar los problemas hasta eliminarlos por completo.

BIBLIOGRAFÍA

Lo presentado en esta sección fue tomado del Capítulo 6 de:

[1] Gutiérrez, Pulido H. y de la Vara Salazar, R. (2004). Análisis y diseño de experimentos. McGraw-Hill Interamericana.

9.6 EJEMPLO 2^2 REPLICADO

Se lleva a cabo un experimento para aumentar la capacidad de adhesión de productos de caucho. Se fabrican 8 productos con el nuevo aditivo y otros 8 sin éste. Las capacidades de adhesión se registran a continuación:

TEMPERATURA (ºC)

ADITIVO	50	60
Sin Aditivos	2.3 2.9 (11.5) 3.1 3.2	3.4 3.7 (13.9) 3.6 3.2
Con aditivos	4.3 3.9 (16.3) 3.9 4.2	3.8 3.8 (15.0) 3.9 3.5

(*): Total o suma de las cuatro observaciones del tratamiento

Realice un análisis de Varianza para determinar la significancia de los efectos principales y de la interacción.

Solución:

Para el análisis de estos datos se codifican los niveles de los predictores como -1 (nivel bajo) y 1 (nivel alto) y se considera el modelo de regresión $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + E,\ E \sim IID\ N(0, \sigma^2)$ con X_1 los valores codificados del factor aditivo y X_2 los valores codificados del factor temperatura.

Resultados para el análisis

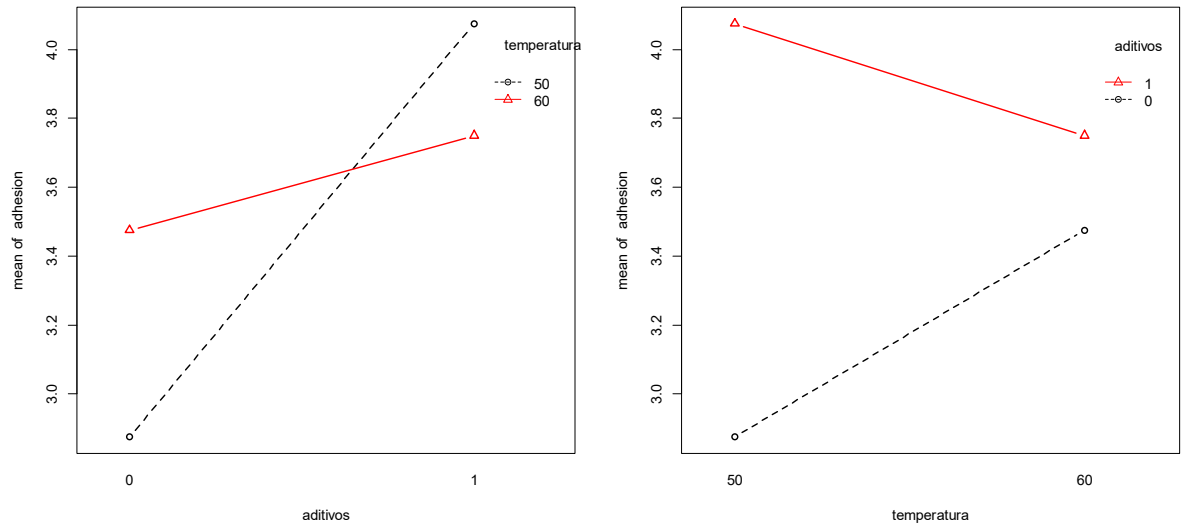


Figura 9.5: Gráficos de interacción AB

De esta gráfica se concluye que los factores interactúan y que para aumentar la adhesión conviene fabricar el producto con el nuevo aditivo y a una temperatura de 50°C pero esta recomendación está limitada al rango de experimentación.

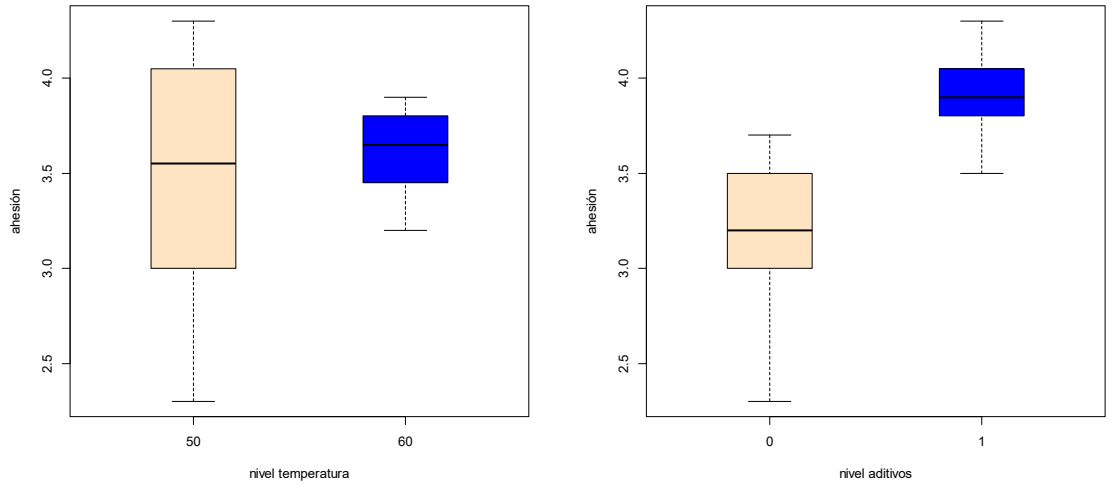


Figura 9.6 : Boxplots para estudiar los efectos individuales de los factores

De la anterior figura se concluye que el efecto principal del factor temperatura queda enmascarado por la interacción que claramente existe de acuerdo a la figura 9.5, mientras que el efecto de aplicar el aditivo no es enmascarado pues la conclusión con los boxplots sobre los efectos de este factor es la misma que fue obtenida con las gráficas de los perfiles de medias de tratamientos: "usar el aditivo da mayor adhesión"

Vea ahora los resultados del ajuste del modelo de regresión con variables predictoras correspondiendo a los valores codificados de los factores en estudio

```
Call:
lm(formula = adhesion ~ aditivoscod * temperaturacod)
Coefficients:
                          Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)                3.54375    0.06663  53.182 1.29e-15 ***
aditivoscod                0.36875    0.06663   5.534 0.000129 ***
temperaturacod             0.06875    0.06663   1.032 0.322534
aditivoscod:temperaturacod -0.23125    0.06663  -3.470 0.004627 **
---
Residual standard error: 0.2665 on 12 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.7847,     Adjusted R-squared: 0.7309
F-statistic: 14.58 on 3 and 12 DF,  p-value: 0.0002638
```

En la anterior salida R, el intercepto es la media muestral de los 16 datos del experimento y es una estimación de la media global $\boldsymbol{\mu}$, en tanto que los coeficientes estimados para las variables **aditivos:** $\boldsymbol{X_1}$, **temperatura:** $\boldsymbol{X_2}$ y **aditivos:temperatura** $\boldsymbol{X_1 * X_2}$, corresponden a un medio (1/2) de los respectivos efectos, es decir, $\boldsymbol{\widehat{\alpha}_A = 2\widehat{\beta}_1 = 0.7375}$, $\boldsymbol{\widehat{\alpha}_B = 2\widehat{\beta}_2 = 0.1375}$ y $\boldsymbol{\widehat{\alpha}_{AB} = 2\widehat{\beta}_{1,2} = -0.4625.}$

NOTA: *Geométricamente, $\hat{\mu}$ representa el valor ajustado de la respuesta, en el centro de la región de experimentación, es decir en el punto $X_1 = X_2 = 0$.*

Con la anterior salida R se pueden hacer predicciones usando las variables codificadas usando la ecuación ajustada:

$$\widehat{Y} = 3.54375 + 0.36875X_1 + 0.06875X_2 - 0.23125X_1 * X_2$$

Del test t para la significancia del coeficiente de regresión (la mitad del efecto) estimado para X_2 (*temperaturacod*) se concluiría erróneamente que la temperatura no tiene efectos pero esto es el fenómeno de enmascaramiento por la forma en la cual se da la interacción entre este factor y el uso del aditivo.

```
Analysis of Variance Table
Response: adhesion
                          Df  Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)
aditivoscod                1 2.17563 2.17563 30.6246 0.000129 ***
temperaturacod             1 0.07563 0.07563  1.0645 0.322534
aditivoscod:temperaturacod 1 0.85563 0.85563 12.0440 0.004627 **
Residuals                 12 0.85250 0.07104
```

NOTA: La ANOVA del modelo de regresión con factores codificados es la misma ANOVA del modelo ANOVA de efectos usando los factores sin codificar sus niveles, como se ilustra en la siguiente salida de R

```
> anova(aov(adhesion~aditivos*temperatura)) #ANOVA del modelo ANOVA de efectos fijos
Analysis of Variance Table
Response: adhesion
                    Df  Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)
aditivos             1 2.17563 2.17563 30.6246 0.000129 ***
temperatura          1 0.07563 0.07563  1.0645 0.322534
aditivos:temperatura 1 0.85563 0.85563 12.0440 0.004627 **
Residuals           12 0.85250 0.07104
```

Gráficos de superficie de respuesta

La ecuación ajustada mediante regresión usando los niveles codificados de los factores representa una superficie de respuesta sobre la región experimental, que modela el comportamiento de la variable respuesta. Estos gráficos son útiles cuando se tienen dos factores cuantitativos. En este ejemplo, sólo por ilustrar, se muestra la superficie de respuesta asociada al modelo estimado con variables codificadas, pero tenga en cuenta que en este ejemplo el factor aditivos realmente es una variable categórica y sus valores no se mueven en un intervalo continuo!

Curvas de nivel y superficie de respuesta

Una curva de nivel es una figura en dos dimensiones en la cual se pueden establecer los niveles de los factores sobre los cuales la variable respuesta toma el mismo valor. Cada curva de nivel representa puntos o combinaciones de niveles de los factores donde la variable respuesta es constante. La representación de curvas de nivel o gráfico de contornos es mejor que la de la superficie de respuesta porque se pueden ver con más exactitud las coordenadas del punto con el valor promedio deseado para la variable respuesta. Aquí mostramos los resultados con la respuesta estimada de acuerdo al modelo de regresión. Sin embargo

tenga nuevamente cuidado con el factor "aditivos" ya que realmente era una variable dicotómica y no una variable cuantitativa.

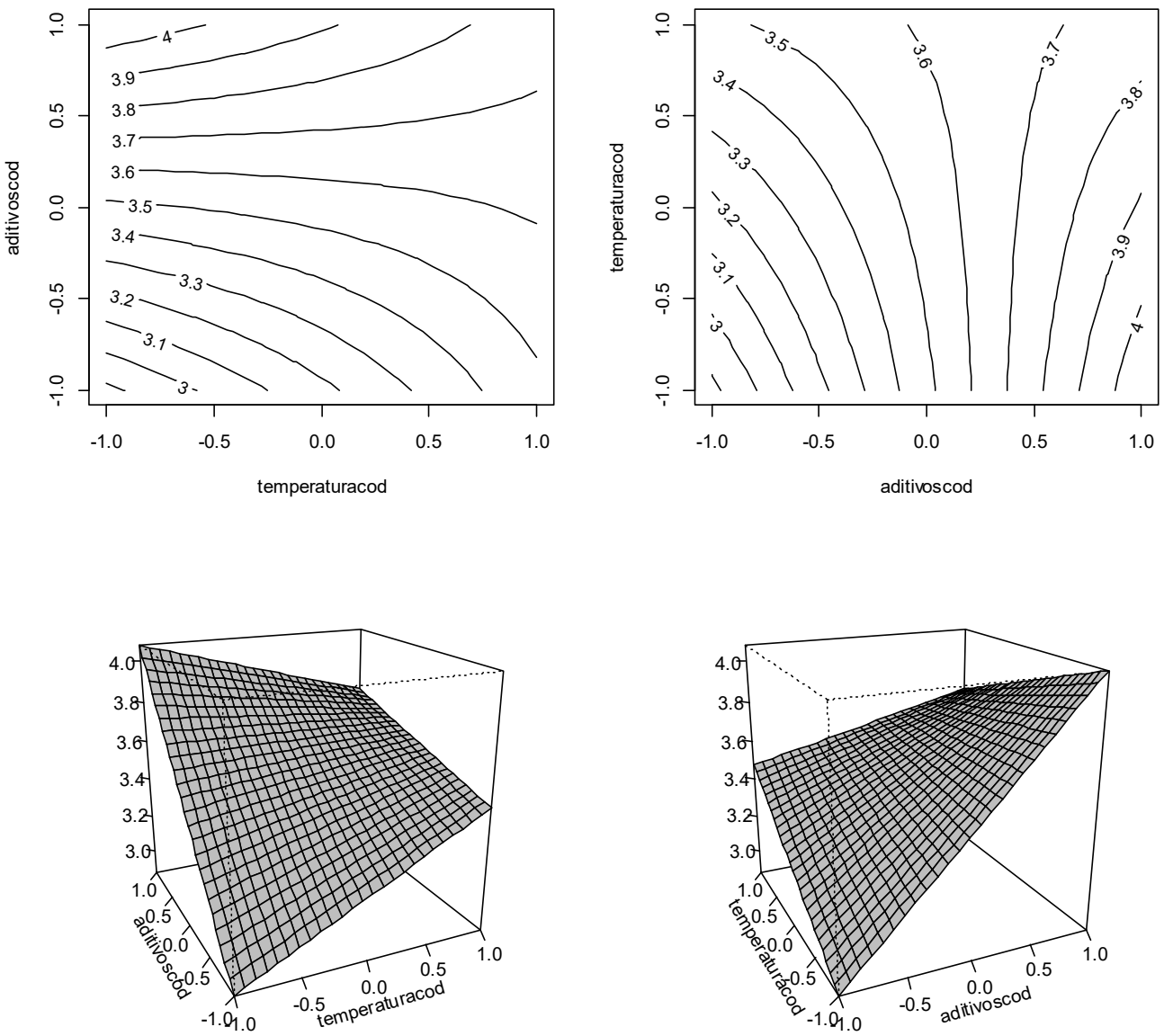


Figura 9.7: Gráficos de contornos o de nivel y superficie de respuesta ajustada

De la figura 9.7 sólo es pertinente evaluar los valores donde el factor aditivos es -1 ó 1 desde que esta variable no es cuantitativa, así que para maximizar la respuesta, se debe tomar el aditivo en su nivel alto mientras que la temperatura debe estar en su nivel bajo, con esto la máxima respuesta dentro del diseño corrido es de alrededor de 4. Exactamente la respuesta máxima en el rango del experimento se obtiene evaluando la ec. ajustada en $X_1 = 1, X_2 = -1$:

$$\boldsymbol{\widehat{Y} = 3.54375 + 0.36875 \times 1 + 0.06875 \times (-1) - 0.23125 \times 1 \times (-1) = 4.075 = \overline{Y}_{21}.}$$

A continuación se muestran los residuos estudentizados del ajuste del modelo de regresión ¿qué se concluye sobre la normalidad y el supuesto de varianza constante para los errores del modelo de regresión?:

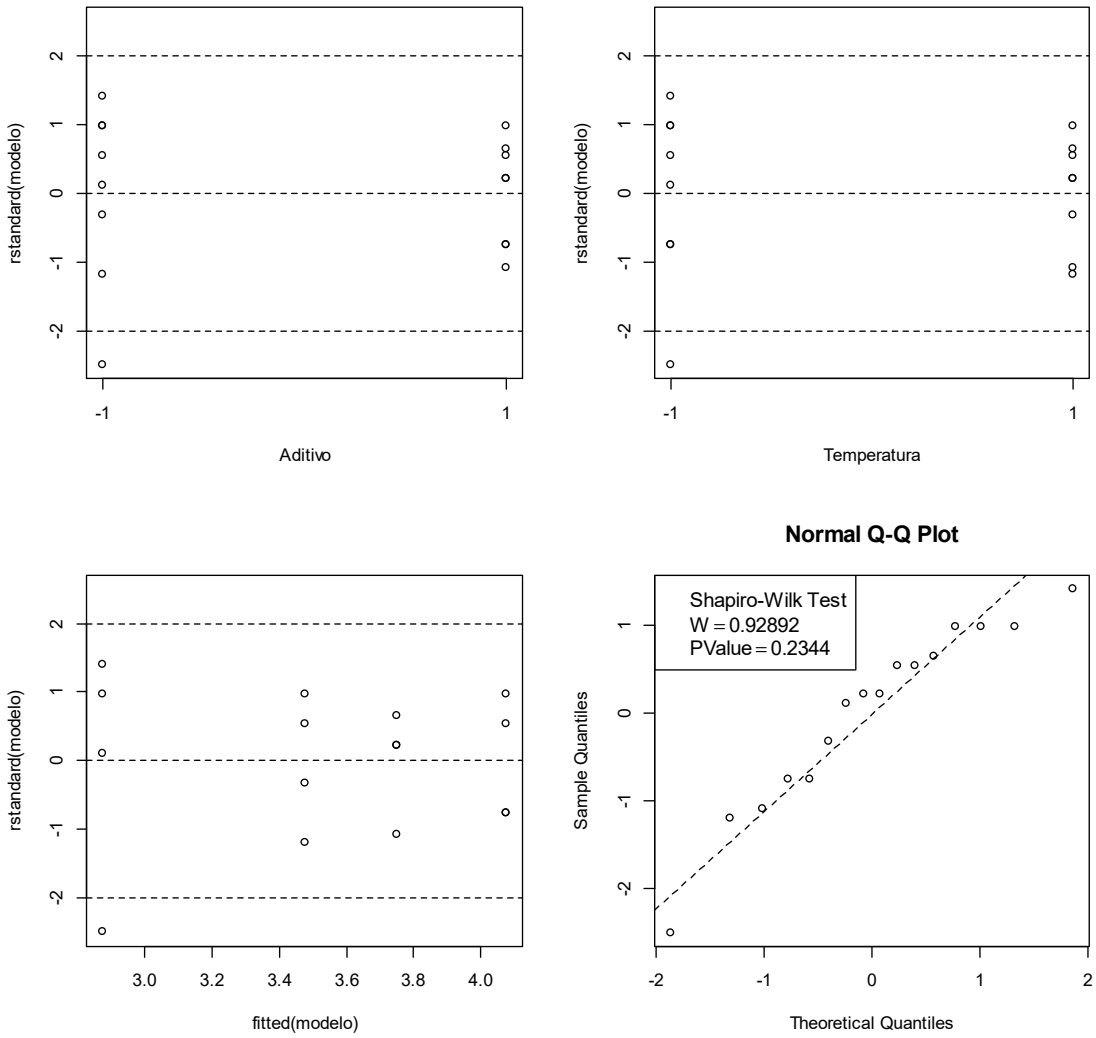


Figura 9.8: Gráficos de residuales estandarizados y de probabilidad normal

Programa R usado:

```
library(daewr)
library(rsm)
#Función usuario para transformar predictores a unidades codificadas de -1 y 1
codificación=function(factor){
fcod=(factor-mean(factor))/((max(factor)-min(factor))/2)
fcod
}

#Lectura de los datos
datos=data.frame(scan(what=list(aditivos=0,temperatura=0,adhesion=0)))
0 50 2.3
0 50 2.9
0 50 3.1
0 50 3.2
0 60 3.4
0 60 3.7
```

```
0 60 3.6
0 60 3.2
1 50 4.3
1 50 3.9
1 50 3.9
1 50 4.2
1 60 3.8
1 60 3.8
1 60 3.9
1 60 3.5

datos


attach(datos)

boxplot(adhesion~aditivos,boxwex=0.4,col=c("bisque","blue"),xlab="nivel aditivos",ylab="ahesión")
boxplot(adhesion~temperatura,boxwex=0.4,col=c("bisque","blue"),xlab="nivel temperatura",ylab="ahesión")
interaction.plot(aditivos,temperatura,adhesion,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=2)
interaction.plot(temperatura,aditivos,adhesion,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=2)

aditivoscod=codificación(factor=aditivos)
temperaturacod=codificación(factor=temperatura)

#regresión rta vs. variables codificadas
modelo=lm(adhesion~aditivoscod*temperaturacod)
summary(modelo)
anova(modelo)

anova(aov(adhesion~aditivos*temperatura)) #ANOVA del modelo ANOVA de efectos fijos (da igual que la del modelo de
                                          #regresión)

layout(rbind(c(1,1,2,2),c(3,3,4,4)))
contour(modelo,~temperaturacod+aditivoscod)#contornos de rta estimada
contour(modelo,~aditivoscod+temperaturacod)#contornos de rta estimada
persp(modelo,~temperaturacod+aditivoscod,col="gray")
persp(modelo,~aditivoscod+temperaturacod,col="gray")

#Validación de supuestos usando residuos estudentizados del modelo de regresión
#como si fuese de efectos fijos
shapiro.test(rstandard(modelo))
#OBTENIENDO GRÁFICOS DE RESIDUOS ESTUDENTIZADOS,
layout(rbind(c(1,1,2,2),c(3,3,4,4)))
stripchart(rstandard(modelo)~aditivoscod,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1,xlab="Aditivo")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
stripchart(rstandard(modelo)~temperaturacod,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1,xlab="Temperatura")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
plot(fitted(modelo),rstandard(modelo),ylim=c(-2.5,2.5))
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
qqnorm(rstandard(modelo))
qqline(rstandard(modelo),lty=2)
legend("topleft",legend=c("Shapiro-Wilk Test",expression(W==0.92892),expression(PValue== 0.2344)),cex=1.1)

detach(datos)
```

9.7 EJEMPLO 2^3 COMPLETO CON RÉPLICAS

En un experimento para estudiar un sistema particular de filtración de carbón, se agrega un coagulante a una solución en un tanque que contiene carbón y lodo, el cual se coloca entonces en un sistema de recirculación a fin de que se pueda lavar el carbón. Se hacen variar tres factores en el proceso experimental:
FACTOR A: porcentaje de sólidos que circulan inicialmente en el sobre flujo; niveles: 20% y 40%.
FACTOR B: Tasa de flujo del polímero; niveles: 5 lb/s y 10 lb/s.
FACTOR C: PH del tanque; niveles: 5 y 5.5.

La cantidad de sólidos en el flujo inferior del sistema de purificación determina qué tan limpio queda el carbón. Se usan dos niveles de cada factor y se realizan dos corridas experimentales para cada una de las 8 combinaciones. Las respuestas, porcentaje de sólidos por peso, en el flujo inferior del sistema de circulación se especifican en la siguiente tabla:

Combinación tratamientos	réplica 1	réplica 2
(1)	4.65	5.81
a	21.42	21.35
b	12.66	12.56
ab	18.27	16.62
c	7.93	7.88
ac	13.18	12.87
bc	6.51	6.26
abc	18.23	17.83

Suponga que todas las interacciones son potencialmente importantes y que interesa determinar en cuál condición se maximiza la purificación, es decir en cuáles niveles de los factores se tiene mayor porcentaje de sólidos por peso en el flujo inferior del sistema de circulación. Realice un análisis completo de los datos. Utilice valores P para su conclusión.

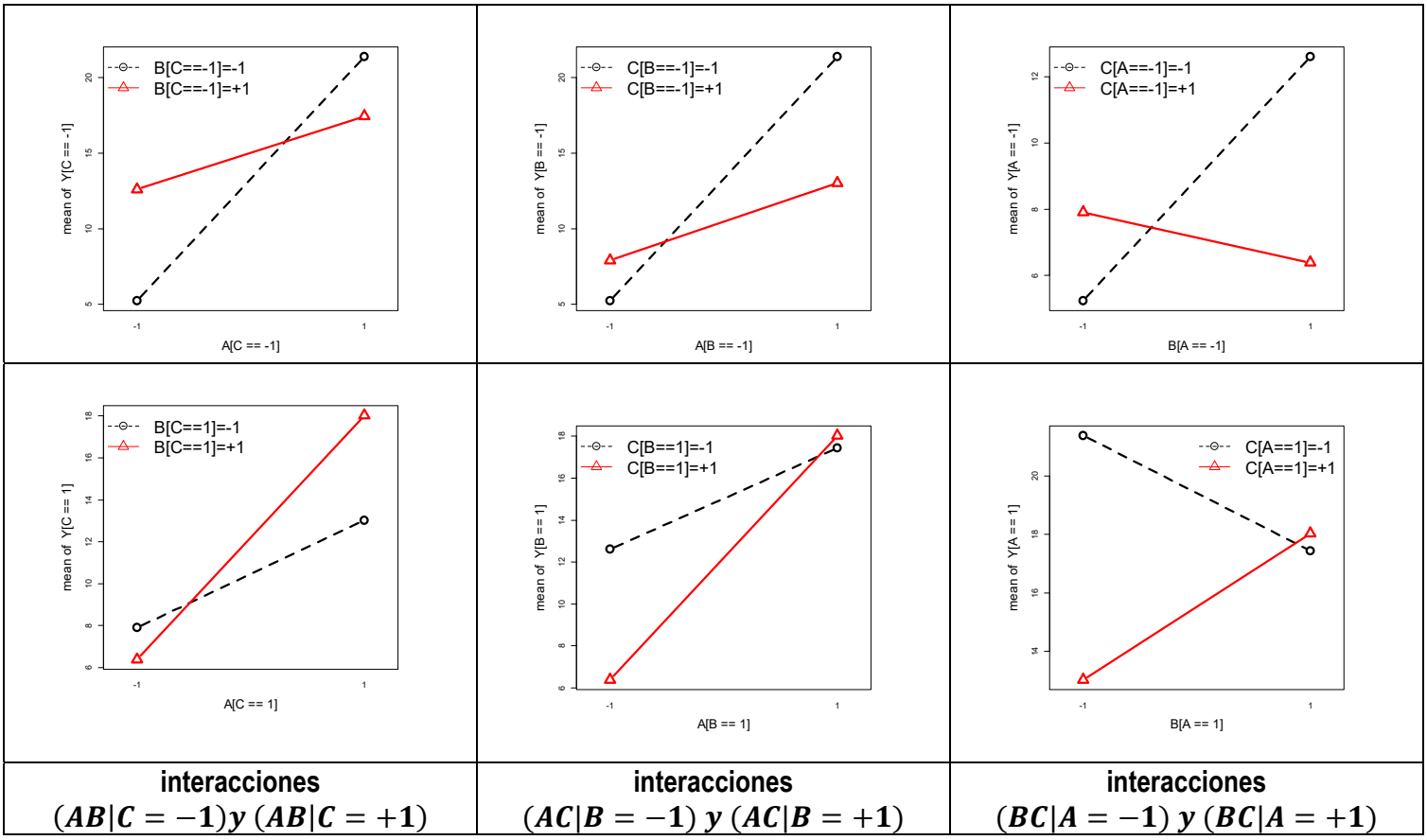
El modelo de regresión con variables codificadas (nivel bajo: -1 y alto: +1): Considerando todas las posibles interacciones, el modelo de regresión es:

$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,3}\, X_1 * X_3 + \beta_{2,3} X_2 * X_3 + \beta_{1,2,3} X_1 * X_2 * X_3 + E,\ E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

donde X_1 corresponde al factor A codificado, X_2 corresponde al factor B codificado y X_3 corresponde al factor C codificado.

Resultados para análisis descriptivos

Con las siguientes figuras se determina la posible presencia de interacciones y cómo pueden estar afectando los factores sobre la variable respuesta. Tenga en cuenta que ante interacciones se debe ser cauto al evaluar efectos marginales de cada factor. Veamos



interacciones $(AB\|C=-1)$ y $(AB\|C=+1)$	interacciones $(AC\|B=-1)$ y $(AC\|B=+1)$	interacciones $(BC\|A=-1)$ y $(BC\|A=+1)$

Figura 9.9: Perfiles de medias para analizar la interacción triple

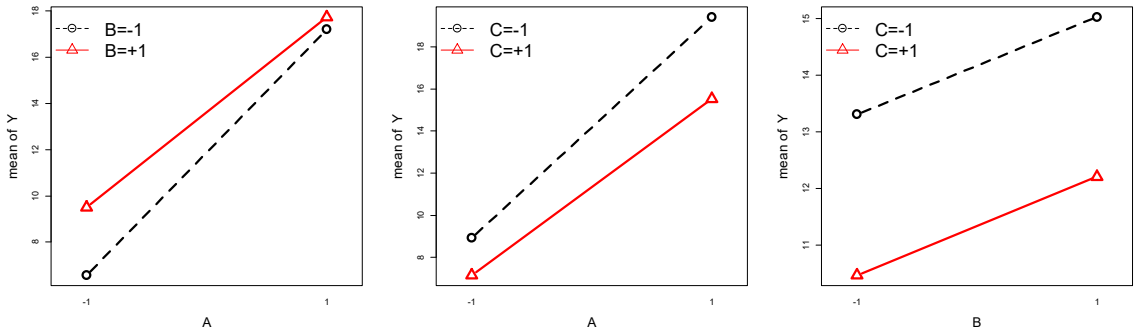


Figura 9.10: Perfiles de medias para evaluar las interacciones AB, AC, BC

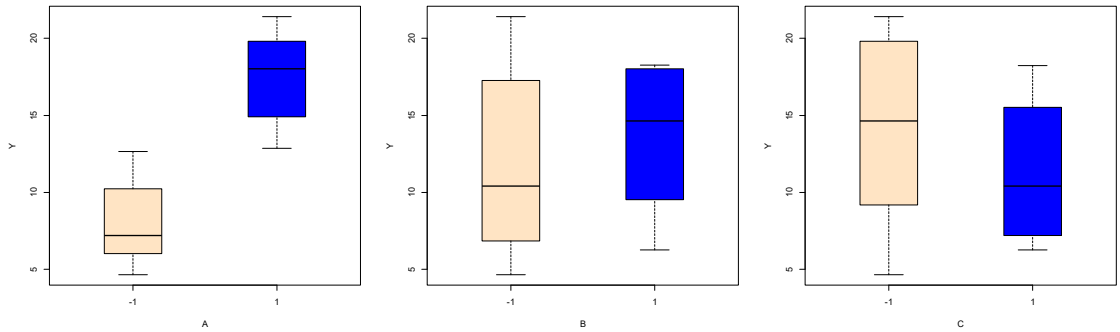


Figura 9.11. Boxplots para evaluar los efectos principales de A, B y C

De la figura 9.9 es claro que hay una interacción ABC significativa, desde que por ejemplo, la forma en que interactúan B y C cambia según el nivel del factor A. También puede concluirse que si el porcentaje de sólidos que circulan inicialmente en el sobre flujo es alto (o sea si A está en nivel alto) entonces la tasa de flujo del polímero (factor B) y el PH del tanque (factor C) deben fijarse en sus respectivos niveles bajos con el fin de alcanzar mayor porcentaje de sólidos por peso retenidos en el flujo inferior del sistema de circulación; pero si el porcentaje de sólidos que circulan inicialmente en el sobre flujo es bajo (o sea si A está en nivel bajo), entonces la tasa de flujo del polímero debe fijarse en su nivel alto y el PH del tanque en su nivel bajo. La condición experimental en la cual se maximiza la respuesta media es A=+1 (40%), B=-1 (5 lb/s) y C=-1 (5)

De la figura 9.10 observe que se concluiría erróneamente en el análisis marginal de la interacción BC, que estos dos factores no interactúan, mientras que con relación a la interacción AC se concluiría que ésta sería leve. Además con esas gráficas también se estaría concluyendo que bien sea que A=1 o A=-1, en ambos casos la respuesta media mayor sería siempre con B=+1 y C=-1. Esto contradice lo que se concluye con la figura 9.9 con relación al factor B, y sólo coincide con relación al factor C (fijarlo en nivel bajo).
También las conclusiones que se extraigan con la figura 9.11 son erróneas, pues de éstas se concluiría que B debería fijarse en su nivel alto sin importar en qué nivel esté A o C. Sólo coinciden las conclusiones con factores A y C comparadas con las que se extraen de la figura 9.9 con relación a estos dos factores.

Resultados del ajuste del modelo de regresión y ANOVA

Veamos ahora el ajuste del modelo de regresión con predictoras codificando los niveles de los tres factores en estudio con los valores -1 y +1.

```
Call:
lm.default(formula = Y ~ A * B * C)
Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 12.751875   0.131162  97.222 1.40e-13 ***
A            4.719375   0.131162  35.981 3.90e-10 ***
B            0.865625   0.131162   6.600 0.000169 ***
C           -1.415625   0.131162 -10.793 4.79e-06 ***
A:B         -0.599375   0.131162  -4.570 0.001826 **
A:C         -0.528125   0.131162  -4.027 0.003807 **
B:C          0.005625   0.131162   0.043 0.966844
A:B:C        2.230625   0.131162  17.007 1.45e-07 ***
---
Residual standard error: 0.5246 on 8 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9955,    Adjusted R-squared:  0.9916
F-statistic: 254.4 on 7 and 8 DF,  p-value: 9.297e-09
```

De estos resultados se obtiene como ec. ajustada a

$$\hat{Y} = 12.751875 + 4.719375X_1 + 0.865625X_2 - 1.415625X_3 - 0.599375X_1 * X_2 - 0.528125X_1 * X_3 + 0.005625X_2 * X_3 + 2.230625X_1 * X_2 * X_3$$

Este modelo ajustado alcanzó con apenas 8 grados de libertad en el error, un R^2_{adj}=0.9916 que es bastante alto. Vea ahora el ANOVA

```
Analysis of Variance Table
Response: Y
          Df Sum Sq Mean Sq   F value    Pr(>F)
A          1 356.36  356.36 1294.6482 3.899e-10 ***
B          1  11.99   11.99   43.5554 0.0001694 ***
C          1  32.06   32.06  116.4875 4.788e-06 ***
A:B        1   5.75    5.75   20.8824 0.0018264 **
A:C        1   4.46    4.46   16.2127 0.0038065 **
B:C        1   0.00    0.00    0.0018 0.9668436
A:B:C      1  79.61   79.61  289.2251 1.451e-07 ***
Residuals  8   2.20    0.28
```

De esta ANOVA se concluye que el efecto de la interacción ABC es significativa, es decir $\boldsymbol{\alpha_{ABC} \neq 0}$, mientras que la interacción BC queda enmascarada. Para el resto de efectos se concluye significancia (son estadísticamente distintos de cero los efectos $\boldsymbol{\alpha_A, \alpha_B, \alpha_{AB}, \alpha_{AC}}$).

Para el modelo ANOVA $\boldsymbol{Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \lambda_k + (\alpha\beta)_{ij} + (\alpha\lambda)_{ik} + (\beta\lambda)_{jk} + (\alpha\beta\lambda)_{ijk} + E_{ijk}}$, $\boldsymbol{E_{ijk} \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$ con las restricciones usuales sobre los efectos principales y de interacciones, podemos estimar las medias y los efectos, recordando la relación que estos últimos tienen con los parámetros del modelo de regresión, o bien recurrir a la estimación por contrastes de medias muestrales, según sea el caso. Veamos algunos resultados:

Estimación de las medias $\mu_{i..}$

```
  A   lsmean        SE df  lower.CL  upper.CL
 20  8.03250 0.1854913  8  7.604756  8.460244
 40 17.47125 0.1854913  8 17.043506 17.898994

Results are averaged over the levels of: B, C
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de los α_i (contraste de las medias de A)

```
contrast    estimate        SE df t.ratio p.value
 20 effect -4.719375 0.1311622  8 -35.981  <.0001
 40 effect  4.719375 0.1311622  8  35.981  <.0001

Results are averaged over the levels of: B, C
P value adjustment: fdr method for 2 tests

  contrast   estimate        SE df  lower.CL  upper.CL
 20 effect -4.719375 0.1311622  8 -5.021836 -4.416914
 40 effect  4.719375 0.1311622  8  4.416914  5.021836

Results are averaged over the levels of: B, C
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de las medias $\mu_{\cdot j \cdot}$

```
 B    lsmean        SE df lower.CL upper.CL
 5  11.88625 0.1854913  8 11.45851 12.31399
 10 13.61750 0.1854913  8 13.18976 14.04524

Results are averaged over the levels of: A, C
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de los β_j (contraste de las medias de B)

```
  contrast   estimate        SE df t.ratio p.value
  5 effect  -0.865625 0.1311622  8    -6.6  0.0002
 10 effect  0.865625  0.1311622  8     6.6  0.0002

Results are averaged over the levels of: A, C
P value adjustment: fdr method for 2 tests

  contrast   estimate        SE df   lower.CL   upper.CL
  5 effect  -0.865625 0.1311622  8 -1.1680855 -0.5631645
 10 effect   0.865625 0.1311622  8  0.5631645  1.1680855

Results are averaged over the levels of: A, C
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de las medias $\mu_{\cdot\cdot k}$

```
 C     lsmean        SE df lower.CL upper.CL
 5   14.16750 0.1854913  8 13.73976 14.59524
 5.5 11.33625 0.1854913  8 10.90851 11.76399

Results are averaged over the levels of: A, B
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de los γ_k (contraste de las medias de C)

```
   contrast    estimate        SE df t.ratio p.value
   5 effect    1.415625 0.1311622  8  10.793  <.0001
 5.5 effect   -1.415625 0.1311622  8 -10.793  <.0001

Results are averaged over the levels of: A, B
P value adjustment: fdr method for 2 tests

   contrast    estimate        SE df  lower.CL  upper.CL
   5 effect    1.415625 0.1311622  8  1.113164  1.718086
 5.5 effect   -1.415625 0.1311622  8 -1.718086 -1.113164
Results are averaged over the levels of: A, B
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de las medias $\mu_{ij\cdot\cdot}$

```
 A  B   lsmean        SE df  lower.CL  upper.CL
 20 5   6.5675 0.2623243  8  5.962579  7.172421
 40 5  17.2050 0.2623243  8 16.600079 17.809921
 20 10  9.4975 0.2623243  8  8.892579 10.102421
 40 10 17.7375 0.2623243  8 17.132579 18.342421
Results are averaged over the levels of: C
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de $(\alpha\beta)_{11}, (\alpha\beta)_{12}$ (contrastes de las medias $A * B$)

```
contrast   estimate        SE df t.ratio p.value
 ab11     -0.599375 0.1311622  8   -4.57  0.0018
 ab12      0.599375 0.1311622  8    4.57  0.0018

Results are averaged over the levels of: C

 contrast  estimate        SE df   lower.CL   upper.CL
 ab11     -0.599375 0.1311622  8 -0.9018355 -0.2969145
 ab12      0.599375 0.1311622  8  0.2969145  0.9018355

Results are averaged over the levels of: C
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de las medias $\mu_{i\bullet k}$

```
 A  C    lsmean        SE df  lower.CL  upper.CL
 20 5    8.9200 0.2623243  8  8.315079  9.524921
 40 5   19.4150 0.2623243  8 18.810079 20.019921
 20 5.5  7.1450 0.2623243  8  6.540079  7.749921
 40 5.5 15.5275 0.2623243  8 14.922579 16.132421

Results are averaged over the levels of: B
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de $(\alpha\gamma)_{11}, (\alpha\gamma)_{12}$ (contrastes de las medias $A * C$)

```
Contrast   estimate        SE df t.ratio p.value
 ag11     -0.528125 0.1311622  8  -4.027  0.0038
 ag12      0.528125 0.1311622  8   4.027  0.0038

Results are averaged over the levels of: B

 contrast  estimate        SE df   lower.CL   upper.CL
 ag11     -0.528125 0.1311622  8 -0.8305855 -0.2256645
 ag12      0.528125 0.1311622  8  0.2256645  0.8305855

Results are averaged over the levels of: B
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de $(\beta\gamma)_{11}, (\beta\gamma)_{12}$ (contrastes de las medias $B * C$)

```
contrast   estimate        SE df t.ratio p.value
 bg11      0.005625 0.1311622  8   0.043  0.9668
 bg12     -0.005625 0.1311622  8  -0.043  0.9668

Results are averaged over the levels of: A
 contrast  estimate        SE df   lower.CL  upper.CL
 bg11      0.005625 0.1311622  8 -0.2968355 0.3080855
 bg12     -0.005625 0.1311622  8 -0.3080855 0.2968355

Results are averaged over the levels of: A
Confidence level used: 0.95
```

Estimación de las medias μ_{ijk}

```
 A  B  C   lsmean        SE df  lower.CL  upper.CL
 20 5  5    5.230 0.3709826  8  4.374512  6.085488
 40 5  5   21.385 0.3709826  8 20.529512 22.240488
 20 10 5   12.610 0.3709826  8 11.754512 13.465488
 40 10 5   17.445 0.3709826  8 16.589512 18.300488
 20 5  5.5  7.905 0.3709826  8  7.049512  8.760488
 40 5  5.5 13.025 0.3709826  8 12.169512 13.880488
 20 10 5.5  6.385 0.3709826  8  5.529512  7.240488
 40 10 5.5 18.030 0.3709826  8 17.174512 18.885488

Confidence level used: 0.95
```

Estimación de $(\alpha\beta\gamma)_{111}$, $(\alpha\beta\gamma)_{112}$ (contrastes de las medias $A * B * C$)

```
contrast   estimate        SE df t.ratio p.value
 abg111   -2.230625 0.1311622  8 -17.007  <.0001
 abg112    2.230625 0.1311622  8  17.007  <.0001

 contrast  estimate        SE df  lower.CL  upper.CL
 abg111   -2.230625 0.1311622  8 -2.533086 -1.928164
 abg112    2.230625 0.1311622  8  1.928164  2.533086

Confidence level used: 0.95
```

La significancia de estos efectos también puede estudiarse mediante el gráfico Pareto de efectos y el gráfico "half normal plot" de los efectos, que se muestran en la Figura 9.12.

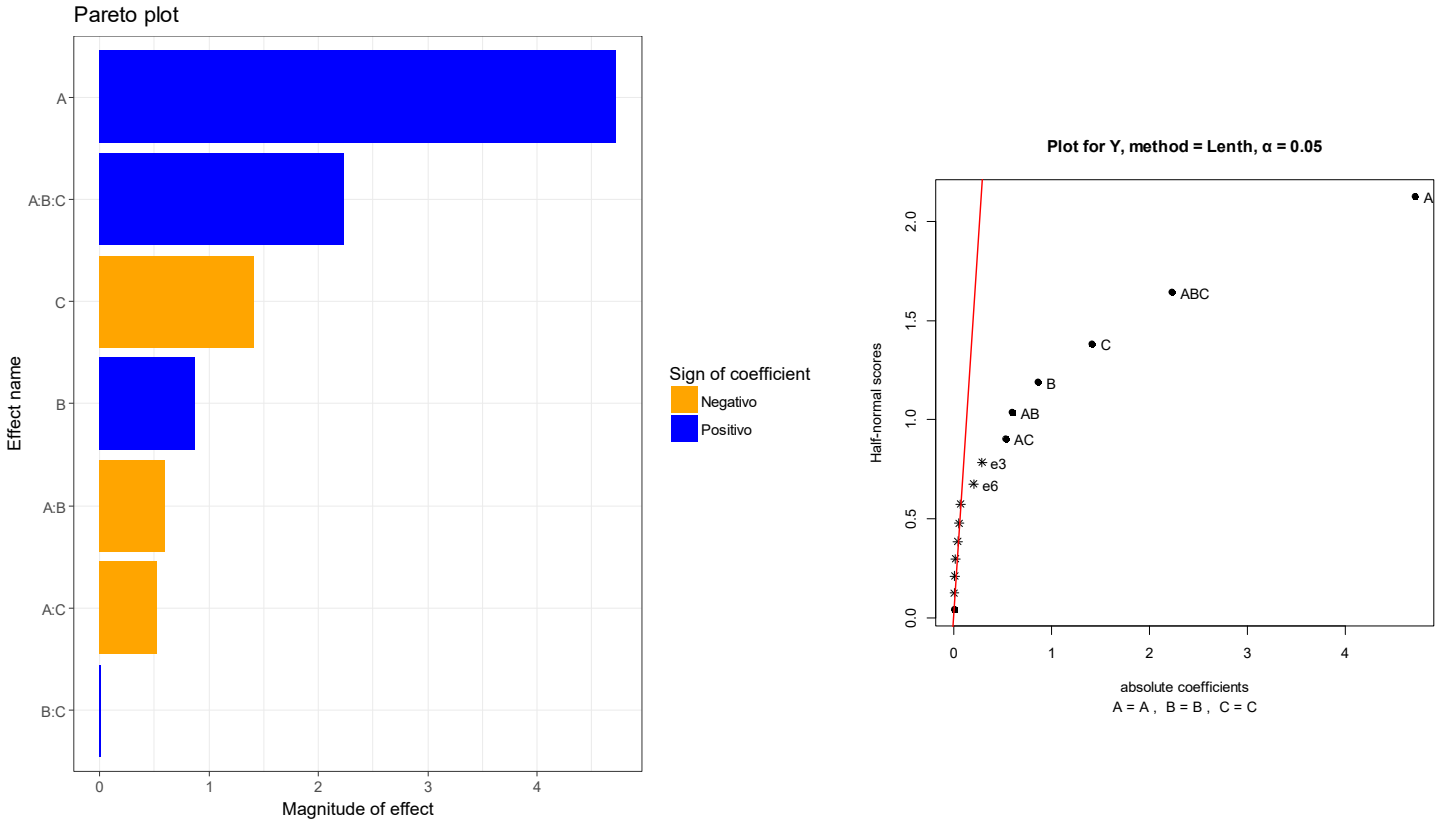


Figura 9.12. Gráfico Pareto de efectos estimados y de probabilidad medio normal

En el gráfico "half normal plot" observe que los efectos A, ABC, C, B, AB, AC aparecen como outliers respecto a la recta de probabilidad, lo cual indica la significancia de estos efectos, mientras que en el gráfico de efectos (efectos sin estandarizar), vemos que los efectos de mayor magnitud son los de A, ABC, C y B en ese orden. *Manteniendo el principio de jerarquía, desde que la triple interacción es significativa, todos los efectos deben permanecer en el modelo sin importar el resultado del test de significancia en cada uno de estos efectos.*

Vea a continuación las curvas de nivel y superficies de respuesta. En este ejemplo todos los factores corresponden a variables cuantitativas, sin embargo, el enunciado no indicó cuáles son los valores en la escala original de los niveles de cada factor de modo que los resultados con las variables codificadas se puedan llevar a valores en escala original en cada factor.
Con las curvas de nivel, se observa que la respuesta con máximo valor cuando A=1 se obtiene con un valor de aprox. 21 cuando B=C=-1, en tanto que cuando A=-1, la respuesta con máximo valor es de aprox. 12 y se obtiene cuando B=1 y C=-1. Esto mismo se concluye analizando las superficies de respuesta, así que la condición que maximiza la respuesta es con A=+1, B=-1 y C=-1.

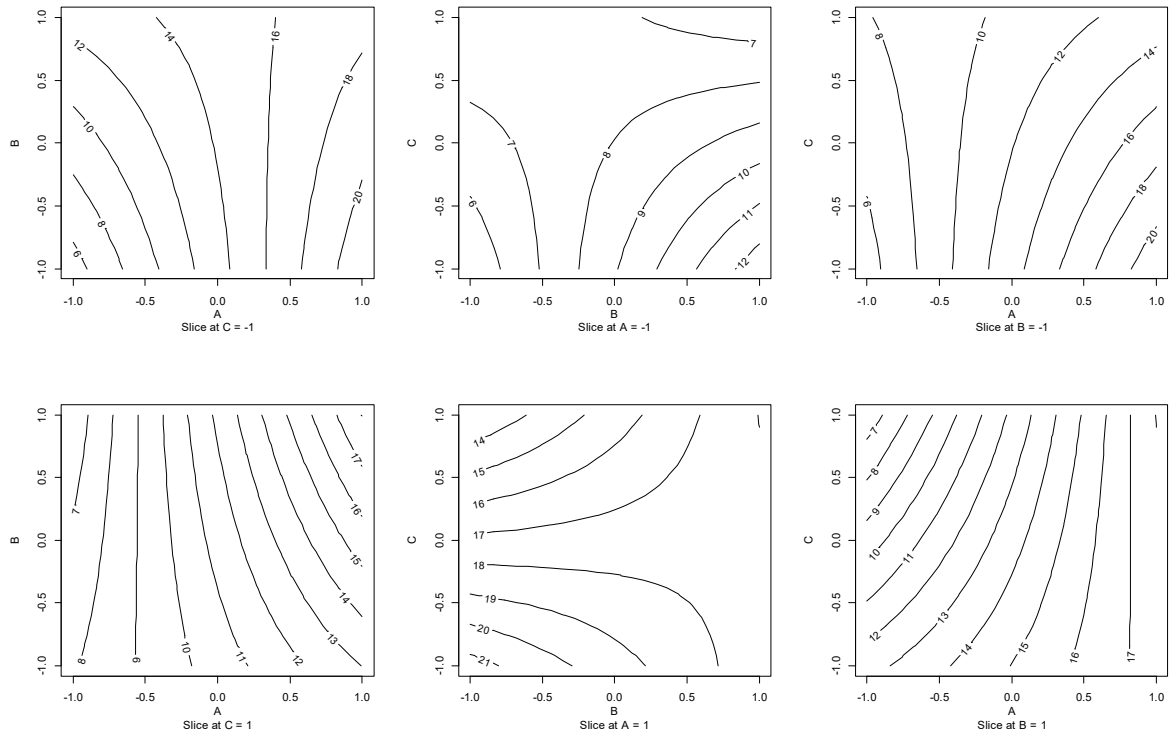


Figura 9.13. Gráfico Curvas de nivel

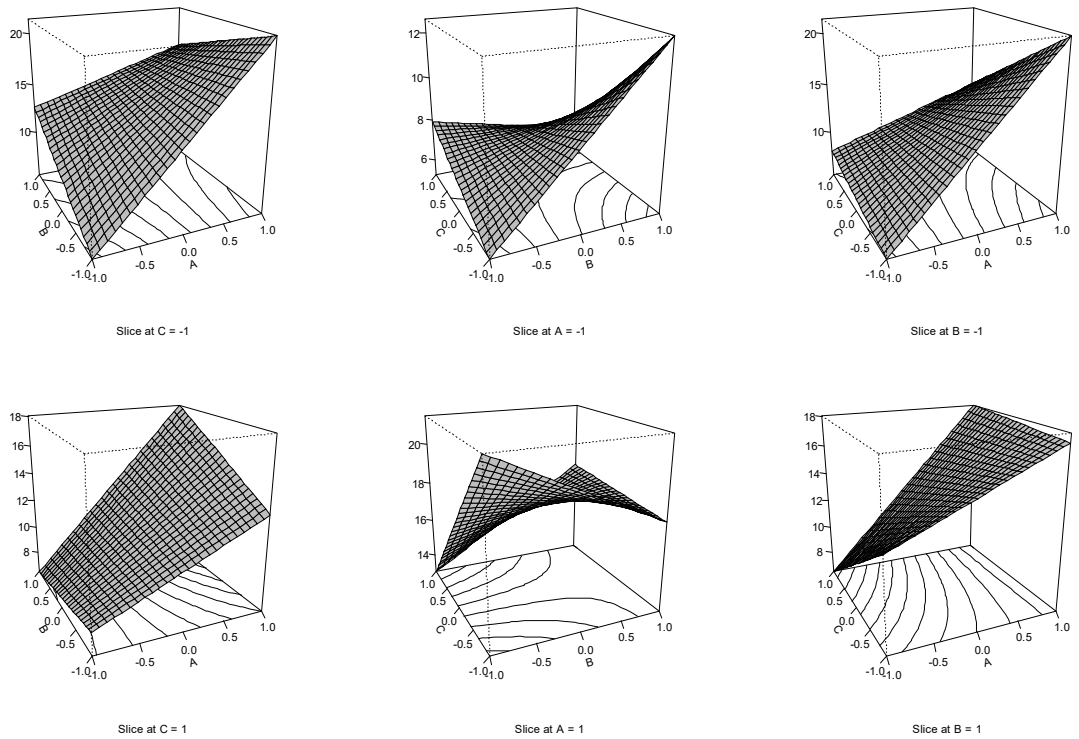


Figura 9.14. Gráfico superficies de respuesta

Análisis de residuales

Para la evaluación de supuestos sobre los errores del modelo, se muestran a continuación los residuales estandarizados y la gráfica de probabilidad normal

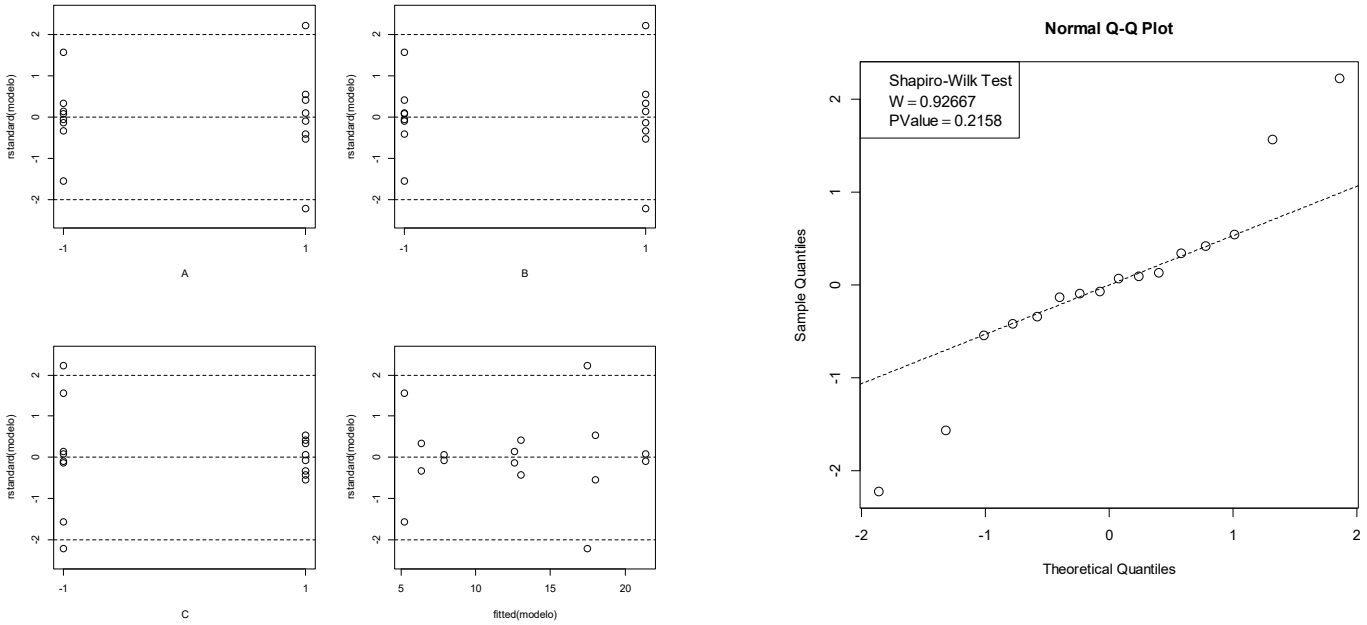


Figura 9.15. Gráficos de residuales estandarizados de probabilidad normal

Como puede verse en las gráficas de residuos estudentizados el supuesto de varianza constante no se cumple según residuos vas niveles del factor C y gráfico de residuos vs. valores ajustados. Esta situación parece ser también causante del patrón no normal que se observa en el gráfico de probabilidad normal aunque el test Shapiro no rechaza la hipótesis de normalidad sobre los errores del modelo. Esto afecta las inferencias con el ANOVA, sin embargo desde el análisis descriptivo se pudo aproximar la forma en que afectan los factores.

Programa R usado ajustando modelo de regresión

```
library(daewr)
library(rsm)
library(pid)
library(FrF2)
walpole15.2=data.frame(scan(what=list(A=0,B=0,C=0,Y=0)))
-1 -1 -1 4.65
-1 -1 -1 5.81
 1 -1 -1 21.42
 1 -1 -1 21.35
-1  1 -1 12.66
-1  1 -1 12.56
 1  1 -1 18.27
 1  1 -1 16.62
-1 -1  1 7.93
-1 -1  1 7.88
 1 -1  1 13.18
 1 -1  1 12.87
-1  1  1 6.51
-1  1  1 6.26
 1  1  1 18.23
 1  1  1 17.83

attach(walpole15.2)

win.graph()
boxplot(Y~A,boxwex=0.4,col=c("bisque","blue"),xlab="A",ylab="Y")

win.graph()
boxplot(Y~B,boxwex=0.4,col=c("bisque","blue"),xlab="B",ylab="Y")

win.graph()
boxplot(Y~C,boxwex=0.4,col=c("bisque","blue"),xlab="C",ylab="Y")

#GRÁFICOS DE INTERACCIONES DOBLES
win.graph()
interaction.plot(A,B,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("B=-1","B=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(A,C,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("C=-1","C=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(B,C,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("C=-1","C=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

#GRÁFICOS PARA ANALIZAR LA TRIPLE INTERACCIÓN
win.graph()
interaction.plot(B[A==-1],C[A==-1],Y[A==-1],type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("C[A==-1]=-1","C[A==-1]=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(B[A==1],C[A==1],Y[A==1],type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topright",legend=c("C[A==1]=-1","C[A==1]=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(A[C==-1],B[C==-1],Y[C==-1],type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("B[C==-1]=-1","B[C==-1]=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(A[C==1],B[C==1],Y[C==1],type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("B[C==1]=-1","B[C==1]=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(A[B==-1],C[B==-1],Y[B==-1],type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("C[B==-1]=-1","C[B==-1]=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)
```

```
win.graph()
interaction.plot(A[B==1],C[B==1],Y[B==1],type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("C[B==1]=-1","C[B==1]=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

modelo=lm(Y~A*B*C)
summary(modelo)
anova(modelo)

#GRÁFICO PARETO DE EFECTOS Y HALF NORMAL PLOT
paretoPlot(modelo,negative=c("Negativo","orange"),positive=c("Positivo","blue"))
halfnormal(modelo,code=T,alpha=0.05,linelwd=2,linecol=2,err.points=T, pch.set = c(19, 16, 8))

win.graph(width=12,height=8)
layout(rbind(c(1,1,2,2,3,3),c(4,4,5,5,6,6)))
contour(modelo,B~A,at=list(C=-1))#contornos de rta estimada
contour(modelo,C~B,at=list(A=-1))#contornos de rta estimada
contour(modelo,C~A,at=list(B=-1))#contornos de rta estimada
contour(modelo,B~A,at=list(C=1))#contornos de rta estimada
contour(modelo,C~B,at=list(A=1))#contornos de rta estimada
contour(modelo,C~A,at=list(B=1))#contornos de rta estimada

win.graph(width=12,height=8)
layout(rbind(c(1,1,2,2,3,3),c(4,4,5,5,6,6)))
persp(modelo,B~A,at=list(C=-1),col="gray",contours=list(z="bottom"))#superficie de rta estimada
persp(modelo,C~B,at=list(A=-1),col="gray",contours=list(z="bottom"))#superficie de rta estimada
persp(modelo,C~A,at=list(B=-1),col="gray",contours=list(z="bottom"))#superficie de rta estimada
persp(modelo,B~A,at=list(C=1),col="gray",contours=list(z="bottom"))#superficie de rta estimada
persp(modelo,C~B,at=list(A=1),col="gray",contours=list(z="bottom"))#superficie de rta estimada
persp(modelo,C~A,at=list(B=1),col="gray",contours=list(z="bottom"))#superficie de rta estimada

#Validación de supuestos usando residuos estudentizados del modelo de regresión
shapiro.test(rstandard(modelo))
#OBTENIENDO GRÁFICOS DE RESIDUOS ESTUDENTIZADOS,
win.graph()
layout(rbind(c(1,1,2,2),c(3,3,4,4)))
stripchart(rstandard(modelo)~A,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="A")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
stripchart(rstandard(modelo)~B,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="B")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
stripchart(rstandard(modelo)~C,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="C")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
plot(fitted(modelo),rstandard(modelo),ylim=c(-2.5,2.5),cex=1.5)
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
win.graph()
qqnorm(rstandard(modelo),cex=1.5)
qqline(rstandard(modelo),lty=2)
legend("topleft",legend=c("Shapiro-Wilk Test",expression(W==0.92667),expression(PValue==0.2158)),cex=1.1)
```

Programa R usado para el ajuste del modelo ANOVA y estimación de sus efectos

```
library(daewr)
library(lsmeans)
#Para estimar medias y efectos bajo modelo ANOVA
#es necesario definir como objetos factor a A, B y C
#para poder hacer uso de lsmeans y la función contrast
datos2=data.frame(scan(what=list(A="",B="",C="",Y=0)))
20 5 5 4.65
20 5 5 5.81
40 5 5 21.42
40 5 5 21.35
20 10 5 12.66
20 10 5 12.56
40 10 5 18.27
40 10 5 16.62
20 5 5.5 7.93
20 5 5.5 7.88
40 5 5.5 13.18
40 5 5.5 12.87
20 10 5.5 6.51
20 10 5.5 6.26
40 10 5.5 18.23
40 10 5.5 17.83

datos2
attach(datos2)
#Verificando cómo quedan los niveles
levels(A)
levels(B)
levels(C)
B=relevel(B,ref="5") #redefinimos nivel de referencia como el nivel bajo pues
                     #en este factor R asumió por defecto 10 y no 5 como nivel de referencia
```

```
modeloAnova=aov(Y~A*B*C)
anova(modeloAnova)
mediasA=lsmeans(modeloAnova,~A) #estimación de medias de A
alphas=contrast(mediasA,method="eff") #estimación de los efectos de A
summary(alphas);confint(alphas,level=0.95,adjust="none")

mediasB=lsmeans(modeloAnova,~B) #estimación de efectos de B
betas=contrast(mediasB,method="eff")
summary(betas);confint(betas,level=0.95,adjust="none")

mediasC=lsmeans(modeloAnova,~C)  #Estimación de efectos de C
gammas=contrast(mediasC,method="eff")
summary(gammas);confint(gammas,level=0.95,adjust="none")

mediasAB=lsmeans(modeloAnova,~A*B) #Estimación de medias de  tratamientos AB
#estimación de efectos de interacción AB
alphabeta11.12=contrast(mediasAB,method=list(ab11=c(1/4,-1/4,-1/4,1/4),ab12=c(-1/4,1/4,1/4,-1/4)))
summary(alphabeta11.12);confint(alphabeta11.12,level=0.95,adjust="none")

mediasAC=lsmeans(modeloAnova,~A*C) #Estimación de medias de  tratamientos AC
#estimación de efectos de interacción AC
alphagamma11.12=contrast(mediasAC,method=list(ag11=c(1/4,-1/4,-1/4,1/4),ag12=c(-1/4,1/4,1/4,-1/4)))
summary(alphagamma11.12);confint(alphagamma11.12,level=0.95,adjust="none")


mediasBC=lsmeans(modeloAnova,~B*C) #Estimación de medias de  tratamientos BC
#estimación de efectos de interacción BC
betagamma11.12=contrast(mediasBC,method=list(bg11=c(1/4,-1/4,-1/4,1/4),bg12=c(-1/4,1/4,1/4,-1/4)))
summary(betagamma11.12);confint(betagamma11.12,level=0.95,adjust="none")

mediasABC=lsmeans(modeloAnova,~A*B*C) #Estimación de medias de  tratamientos ABC
#estimación de efectos de interacción ABC
alphabetagamma111.112=contrast(mediasABC,method=list(abg111=c(1/8,-1/8,-1/8,1/8,-1/8,1/8,1/8,-1/8),
                              abg112=c(-1/8,1/8,1/8,-1/8,1/8,-1/8,-1/8,1/8)))
summary(alphabetagamma111.112);confint(alphabetagamma111.112,level=0.95,adjust="none")

detach(datos2)
```

9.8 EJEMPLO 2^4 COMPLETO SIN RÉPLICAS

El siguiente problema corresponde al ejercicio 12-19 del texto Montgomery, D.C. Probabilidad y Estadística Aplicada a la Ingeniería, 1996, pág 749.

Se prueba la resistencia al fuego de cierto tipo de telas después de aplicarles tratamientos contra el fuego. Se consideran 4 factores:

A: tipo de tela
B: tipo de tratamiento contra el fuego.
C: Condición de lavado (nivel bajo es sin lavar; el nivel alto es después de una lavada)
D: Método de prueba
Y: Número de pulgadas de tela quemada en una muestra de prueba de tamaño estándar:

Todos los factores se corren en dos niveles. Los datos son (no están en orden de observación):

Código Yates	Y
(1)	42
a	31
b	45
ab	29
c	39
ac	28
bc	46
abc	32
d	40
ad	30
bd	50
abd	25
cd	40
acd	25
bcd	50
abcd	23
Promedio	35.9375

Los resultados corresponden a una sola réplica por tratamiento, luego en este experimento no es posible estimar la varianza del error del modelo que considera todos los posibles efectos,

$$\boldsymbol{MODELO\ 1}:$$

$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,3} X_1 * X_3 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + \beta_{2,3} X_2 * X_3 + \beta_{2,4} X_2 * X_4 + \beta_{3,4} X_3 * X_4 + \beta_{1,2,3} X_1 * X_2 * X_3 + \beta_{1,2,4} X_1 * X_2 * X_4 + \beta_{1,3,4} X_1 * X_3 * X_4 + \beta_{2,3,4} X_2 * X_3 * X_4 + \beta_{1,2,3,4} X_1 * X_2 * X_3 * X_4 + E,}$$

$$\boldsymbol{E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

Sin embargo, podemos hacer uso de la matriz de signos para calcular los efectos individuales y de todas las posibles interacciones como se muestra en la siguiente tabla (los cálculos se pueden realizar fácilmente en EXCEL):

DATOS DE ENTRADA, DISEÑO 2^4, UNA RÉPLICA, Y MATRIZ DE SIGNOS PARA CONTRASTE DE EFECTOS

Yates	Y	A	B	C	D	AB	AC	BC	ABC	AD	BD	ABD	CD	ACD	BCD	ABCD
(1)	42	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1
a	31	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1
b	45	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1
ab	29	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
c	39	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1
ac	28	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
bc	46	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
abc	32	1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
d	40	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	1	-1
ad	30	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
bd	50	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
abd	25	1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
cd	40	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
acd	25	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
bcd	50	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
abcd	23	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Cálculos para los contrastes asociados a los efectos

Yates		A	B	C	D	AB	AC	BC	ABC	AD	BD	ABD	CD	ACD	BCD	ABCD
(1)		-42	-42	-42	-42	42	42	42	-42	42	42	-42	42	-42	-42	42
a		31	-31	-31	-31	-31	-31	31	31	-31	31	31	31	31	-31	-31
b		-45	45	-45	-45	-45	45	-45	45	45	-45	45	45	-45	45	-45
ab		29	29	-29	-29	29	-29	-29	-29	-29	-29	-29	29	29	29	29
c		-39	-39	39	-39	39	-39	-39	39	39	39	-39	-39	39	39	-39
ac		28	-28	28	-28	-28	28	-28	-28	-28	28	28	-28	-28	28	28
bc		-46	46	46	-46	-46	-46	46	-46	46	-46	46	-46	46	-46	46
abc		32	32	32	-32	32	32	32	32	-32	-32	-32	-32	-32	-32	-32
d		-40	-40	-40	40	40	40	40	-40	-40	-40	40	-40	40	40	-40
ad		30	-30	-30	30	-30	-30	30	30	30	-30	-30	-30	-30	30	30
bd		-50	50	-50	50	-50	50	-50	50	-50	50	-50	-50	50	-50	50
abd		25	25	-25	25	25	-25	-25	-25	25	25	25	-25	-25	-25	-25
cd		-40	-40	40	40	40	-40	-40	40	-40	-40	40	40	-40	-40	40
acd		25	-25	25	25	-25	25	-25	-25	25	-25	-25	25	25	-25	-25
bcd		-50	50	50	50	-50	-50	50	-50	-50	50	-50	50	-50	50	-50
abcd		23	23	23	23	23	23	23	23	23	23	23	23	23	23	23
Contrastes		-129	25	-9	-9	-35	-5	13	5	-25	1	-19	-5	-9	-7	1
Efectos estimados		-16,125	3,125	-1,13	-1,13	-4,375	-0,63	1,625	0,625	-3,125	0,125	-2,375	-0,63	-1,13	-0,88	0,125

En la anterior tabla, los contrastes de totales correspondientes a cada columna, fueron obtenidos realizando el producto punto entre la columna "Y" y la respectiva columna de valores con -1 y +1 del efecto que se está evaluando. Recuerde que los efectos son denotados por $\alpha_A, \alpha_B, \dots, \alpha_{ABCD}$ y estos se estiman dividendo el respectivo contraste de totales de tratamientos por $n2^{k-1}$, pero como en este caso $n = 1,\ k = 4$, entonces simplemente la fila de "contrastes" en la tabla anterior se divide por 8 para obtener la estimación de los efectos correspondientes.

Otra manera de estimar los efectos individuales y de interacciones posibles en este diseño es ajustando en R el modelo de regresión usando niveles codificados como -1 y +1, en los factores A, B, C y D, y obtenemos lo siguiente:

```
> modelo1=lm(Y~A*B*C*D)
> summary(modelo1)
Call:
lm.default(formula = Y ~ A * B * C * D)
Residuals:
ALL 16 residuals are 0: no residual degrees of freedom!
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  35.9375         NA      NA       NA
A            -8.0625         NA      NA       NA
B             1.5625         NA      NA       NA
C            -0.5625         NA      NA       NA
D            -0.5625         NA      NA       NA
A:B          -2.1875         NA      NA       NA
A:C          -0.3125         NA      NA       NA
B:C           0.8125         NA      NA       NA
A:D          -1.5625         NA      NA       NA
B:D           0.0625         NA      NA       NA
C:D          -0.3125         NA      NA       NA
A:B:C         0.3125         NA      NA       NA
A:B:D        -1.1875         NA      NA       NA
A:C:D        -0.5625         NA      NA       NA
B:C:D        -0.4375         NA      NA       NA
A:B:C:D       0.0625         NA      NA       NA
Residual standard error: NaN on 0 degrees of freedom
Multiple R-squared:      1,     Adjusted R-squared:    NaN
F-statistic:   NaN on 15 and 0 DF,  p-value: NA
```

En estos resultados no aparecen estadísticos t ni valores P, ni un MSE, desde que no hay grados de libertad para el error. Sin embargo, los coeficientes estimados son reportados. Compare los coeficientes estimados por R con la fila de valores de efectos calculados en la tabla de contrastes previamente presentada, y observe que los efectos que allí se calcularon corresponden a 2 veces el valor del respectivo coeficiente estimado en la regresión, es decir $\hat{\alpha}_A = 2\hat{\beta}_1, \hat{\alpha}_B = 2\hat{\beta}_2, \dots, \hat{\alpha}_{BCD} = 2\hat{\beta}_{2,3,4}, \hat{\alpha}_{ABCD} = 2\hat{\beta}_{1,2,3,4}$.

Debemos construir un MSE aproximado despreciando efectos pequeños en magnitud, y garantizando desde que sea posible, 8 grados de libertad para este MSE aproximado. Para ello, usaremos el gráfico Pareto de efectos en valor absoluto y el gráfico de Daniel pero la versión ***half normal plot.*** En este último caso se usará un nivel de significancia del 10% para evitar eliminar innecesariamente efectos que puedan ser importantes. La Figura 9.16 muestra estas dos gráficas obtenidas en R.

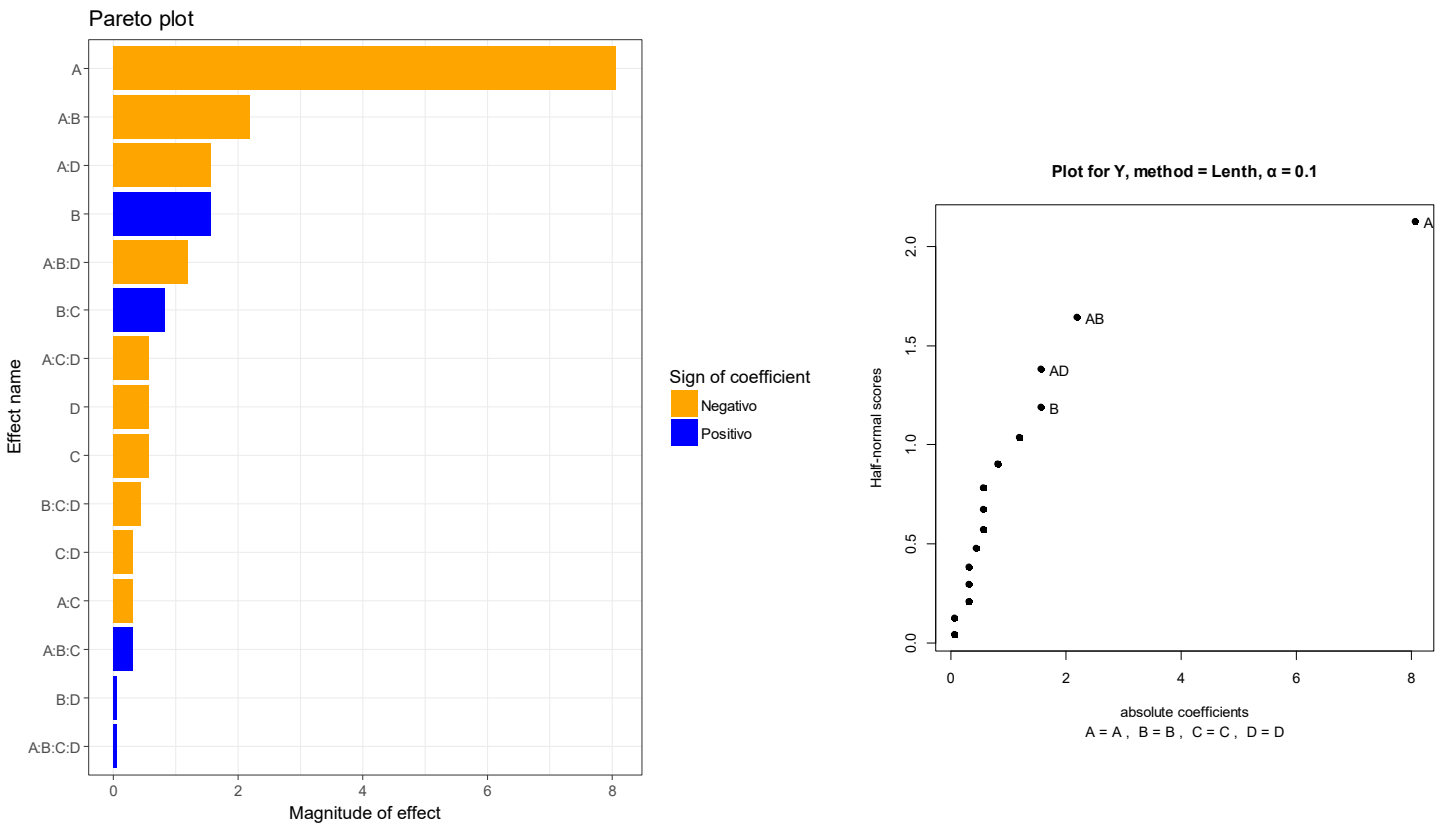


Figura 9.16. Gráfico Pareto de efectos estimados (valor absoluto) y de probabilidad medio normal

En el gráfico Pareto es claro que los efectos de A, y de AB son los mayores en su magnitud, y le siguen B y AD, lo cual es corroborado en el gráfico de Daniel. Esto quiere decir que en el modelo deben dejarse estos efectos pero adicionalmente D, pues si permanece un determinado efecto de interacción en un modelo, entonces todos los efectos individuales y de interacción de menor orden que se pueden formar con los factores que participan en esa interacción, deberán permanecer también en el modelo. Por ejemplo, AD en el modelo obliga a dejar también a los efectos individuales de A y D, y la interacción AB en el modelo obliga a conservar en el modelo a los efectos de A y B. Si hubiese quedado alguna interacción triple, por ejemplo si dejáramos a ABD que es la interacción triple con mayor efecto según gráfico Pareto, entonces en el modelo deberían permanecer los efectos de A, B, D, AB, AD y BD. Aunque posiblemente el modelo final contemple sólo los anteriores efectos, se despreciarán inicialmente sólo los efectos de las interacciones triples y la interacción ABD que son claramente pequeños (con esto se tienen apenas 5 grados de libertad disponibles para el MSE), es decir el modelo ahora es

$$\boldsymbol{MODELO\ 2}:$$

$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,3} X_1 * X_3 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + \beta_{2,3} X_2 * X_3 + \beta_{2,4} X_2 * X_4 + \beta_{3,4} X_3 * X_4 + E, \qquad E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

Antes de ver los resultados de ajuste, podemos primero analizar los gráficos de las interacciones dobles ya que se han despreciados interacciones de alto orden.

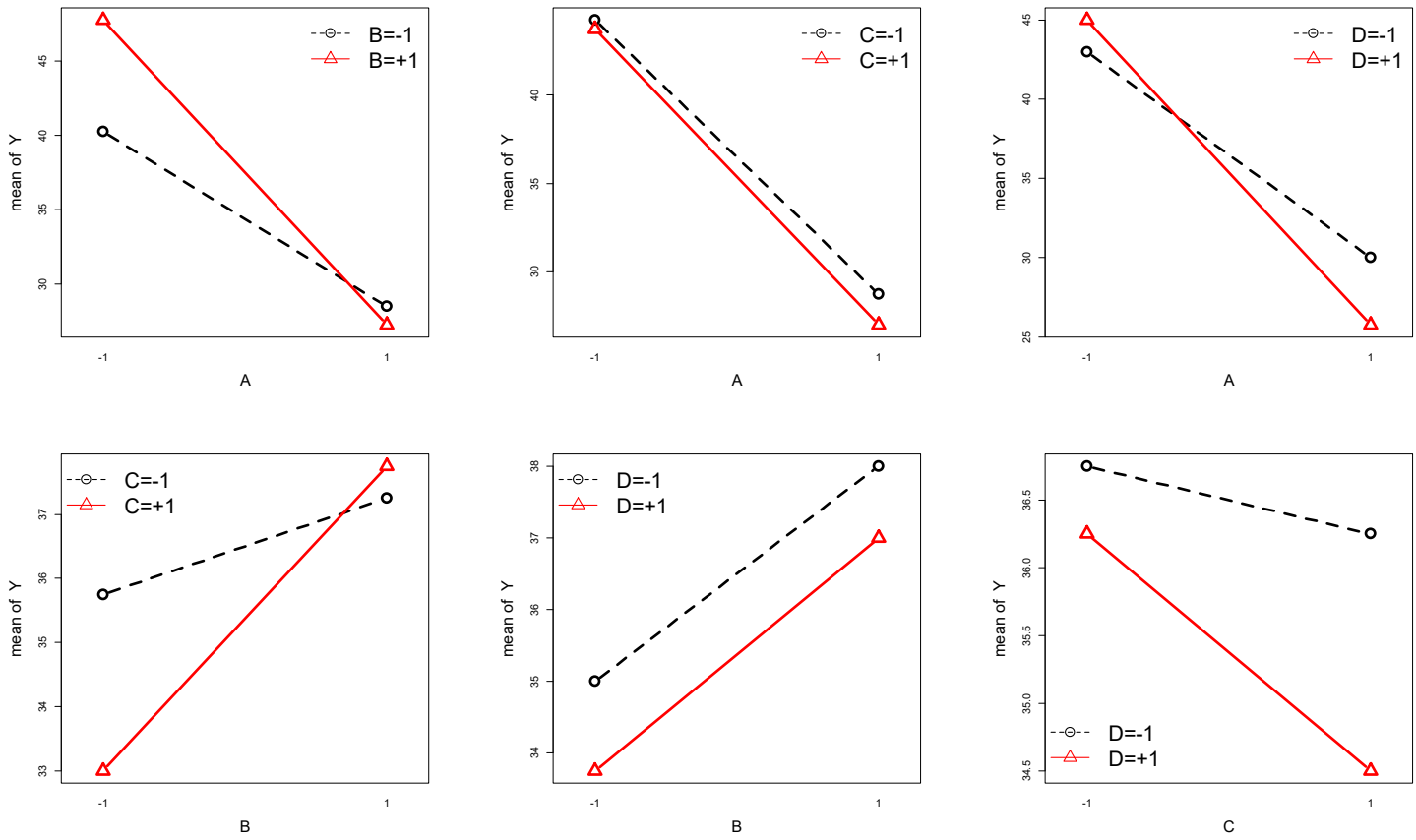


Figura 9.17. Gráficos de interacciones dobles

De la figura 9.17, la interacción BD no parece significativa y tal vez la interacción AC tampoco lo sea. Ahora bien, ajustando el modelo 2 obtenemos la siguiente tabla de coeficientes estimados y la ANOVA:

```
> modelo2=lm(Y~A*B+A*C+A*D+B*C+B*D+C*D)
> summary(modelo2)
Call: lm.default(formula = Y ~ A * B + A * C + A * D + B * C + B * D + C * D)
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  35.9375     0.6355  56.547 3.27e-08 ***
A            -8.0625     0.6355 -12.686 5.41e-05 ***
B             1.5625     0.6355   2.459   0.0573 .
C            -0.5625     0.6355  -0.885   0.4166
D            -0.5625     0.6355  -0.885   0.4166
A:B          -2.1875     0.6355  -3.442   0.0184 *
A:C          -0.3125     0.6355  -0.492   0.6437
A:D          -1.5625     0.6355  -2.459   0.0573 .
B:C           0.8125     0.6355   1.278   0.2572
B:D           0.0625     0.6355   0.098   0.9255
C:D          -0.3125     0.6355  -0.492   0.6437
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 2.542 on 5 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9742,    Adjusted R-squared:  0.9225
F-statistic: 18.86 on 10 and 5 DF,  p-value: 0.002336
```

```
> anova(modelo2)
Analysis of Variance Table

Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq  F value   Pr(>F)
A          1 1040.06 1040.06 160.9381 5.41e-05 ***
B          1   39.06   39.06   6.0445  0.05733 .
C          1    5.06    5.06   0.7834  0.41664
D          1    5.06    5.06   0.7834  0.41664
A:B        1   76.56   76.56  11.8472  0.01840 *
A:C        1    1.56    1.56   0.2418  0.64375
A:D        1   39.06   39.06   6.0445  0.05733 .
B:C        1   10.56   10.56   1.6344  0.25722
B:D        1    0.06    0.06   0.0097  0.92548
C:D        1    1.56    1.56   0.2418  0.64375
Residuals  5   32.31    6.46
---
```

Vemos que los efectos de las interacciones AC, BC, BD y CD no son estadísticamente significativos mientras que AB y AD no deberían despreciarse. Este modelo alcanza un R^2=0.9742 y un R^2_{adj}=0.9225 bastante bueno con sólo 5 grados de libertad en el error. A continuación reducimos el modelo eliminando sólo las interacciones AC y BD que en las figuras 9.16 y 9.17 aparecen como no significativas, y veremos qué pasa con las que aún permanecen en el modelo. En este caso tenemos como modelo a,

$$\boldsymbol{MODELO\ 3}:$$

$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + \beta_{2,3} X_2 * X_3 + \beta_{3,4} X_3 * X_4 + E, \qquad E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

Los resultados R del ajuste de este modelo y su ANOVA son como sigue,

```
> modelo3=lm(Y~A*B+A*D+B*C+C*D)
> summary(modelo3)
Call:
lm.default(formula = Y ~ A * B + A * D + B * C + C * D)
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  35.9375     0.5505  65.286 5.20e-11 ***
A            -8.0625     0.5505 -14.647 1.65e-06 ***
B             1.5625     0.5505   2.839  0.02510 *
D            -0.5625     0.5505  -1.022  0.34086
C            -0.5625     0.5505  -1.022  0.34086
A:B          -2.1875     0.5505  -3.974  0.00537 **
A:D          -1.5625     0.5505  -2.839  0.02510 *
B:C           0.8125     0.5505   1.476  0.18345
D:C          -0.3125     0.5505  -0.568  0.58798
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 2.202 on 7 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9729,    Adjusted R-squared:  0.9419
F-statistic: 31.38 on 8 and 7 DF,  p-value: 8.273e-05
```

```
> anova(modelo3)
Analysis of Variance Table
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq  F value    Pr(>F)
A          1 1040.06 1040.06 214.5249 1.653e-06 ***
B          1   39.06   39.06   8.0571  0.025098 *
D          1    5.06    5.06   1.0442  0.340858
C          1    5.06    5.06   1.0442  0.340858
A:B        1   76.56   76.56  15.7919  0.005365 **
A:D        1   39.06   39.06   8.0571  0.025098 *
B:C        1   10.56   10.56   2.1786  0.183449
D:C        1    1.56    1.56   0.3223  0.587976
Residuals  7   33.94    4.85
---
```

Observe que el modelo 3 ha mejorado un poco la calidad del ajuste comparado con el modelo 2, pues se ha incrementado el R^2_{adj} a un valor de 0.9414 y se cuentan con 7 grados de libertad en el MSE. En este modelo 3 continúan como no significativos los efectos de interacción BC y DC. Si no hay ninguna justificación práctica o técnica para dejarlos, entonces se eliminan del modelo y dado que para el factor C no quedan efectos de interacción significativos e individualmente tampoco resulta significativo su efecto marginal, es decir, como no se rechazan las hipótesis: H_0: $\beta_{2,3} = 0$ (que equivale a $\alpha_{BC} = 0$), $\beta_{3,4} = 0$ (que equivale a $\alpha_{CD} = 0$), y $\beta_3 = 0$ (que equivale a $\alpha_C = 0$), ¿podemos eliminar también a C? junto con las interacciones BC y DC. En este caso tenemos como modelo a,

$$\boldsymbol{MODELO\ 4}:$$
$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + E, \qquad E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

A continuación ajustamos el modelo 4, en donde sólo permanecen los efectos de A, B, D, AB y AD (los que se vieron deberían quedar según análisis preliminar de los efectos con gráfico Pareto y de Daniel) y el resto de efectos se llevan al error, dejando un total de 10 grados de libertad para el error. Hacemos el ajuste mediante R:

```
> modelo4=lm(Y~A*B+A*D)
> summary(modelo4)
Call:
lm.default(formula = Y ~ A * B + A * D)
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  35.9375     0.5653  63.576 2.26e-14 ***
A            -8.0625     0.5653 -14.263 5.67e-08 ***
B             1.5625     0.5653   2.764  0.01999 *
D            -0.5625     0.5653  -0.995  0.34316
A:B          -2.1875     0.5653  -3.870  0.00311 **
A:D          -1.5625     0.5653  -2.764  0.01999 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 2.261 on 10 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9591,    Adjusted R-squared:  0.9387
F-statistic: 46.94 on 5 and 10 DF,  p-value: 1.27e-06
```

```
> anova(modelo4)
Analysis of Variance Table
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq  F value    Pr(>F)
A          1 1040.06 1040.06 203.4352 5.668e-08 ***
B          1   39.06   39.06   7.6406   0.01999 *
D          1    5.06    5.06   0.9902   0.34316
A:B        1   76.56   76.56  14.9756   0.00311 **
A:D        1   39.06   39.06   7.6406   0.01999 *
Residuals 10   51.12    5.11
---
```

Si bien este modelo reduce un poco el R^2_{adj} comparado con el modelo 3, la disminución es muy pequeña y la ganancia en grados de libertad del error es mejor.

Este modelo final es denominado ***el modelo predictivo*** y su ecuación ajustada es

$$\widehat{Y} = 35.9375 - 8.0625X_1 + 1.5625X_2 - 0.5625X_4 - 2.1875X_1 * X_2 - 1.5625X_1 * X_4$$

NOTA: Como todos los factores son realmente cualitativos, no se hace análisis de superficies ni contornos de respuesta. Sólo se analizan los gráficos de perfiles.

La respuesta óptima sería minimizando su valor desde ésta representa pulgadas quemadas en la tela (a mayor tela quemada menor resistencia al fuego), entonces A en nivel alto (el tipo de tela que corresponda a ese nivel probado), B en su nivel -1 (tipo de tratamiento contra el fuego), pues a pesar que en el gráfico de interacción AB se observa que cuando A=+1 no hay diferencias que parezcan significativas entre las medias de tratamientos variando B de -1 a +1, los otros gráficos de interacciones (aunque excluidas del modelo) están mostrando que B debería estar en su nivel bajo. Con respecto a C en su nivel más económico dado que no resultó significativo (aunque las gráficas en figura 9.17 indican C=+1) y D (el método de prueba) en su nivel alto.
Para la validación de supuestos trabajamos sobre el modelo 4 usando residuales estandarizados.

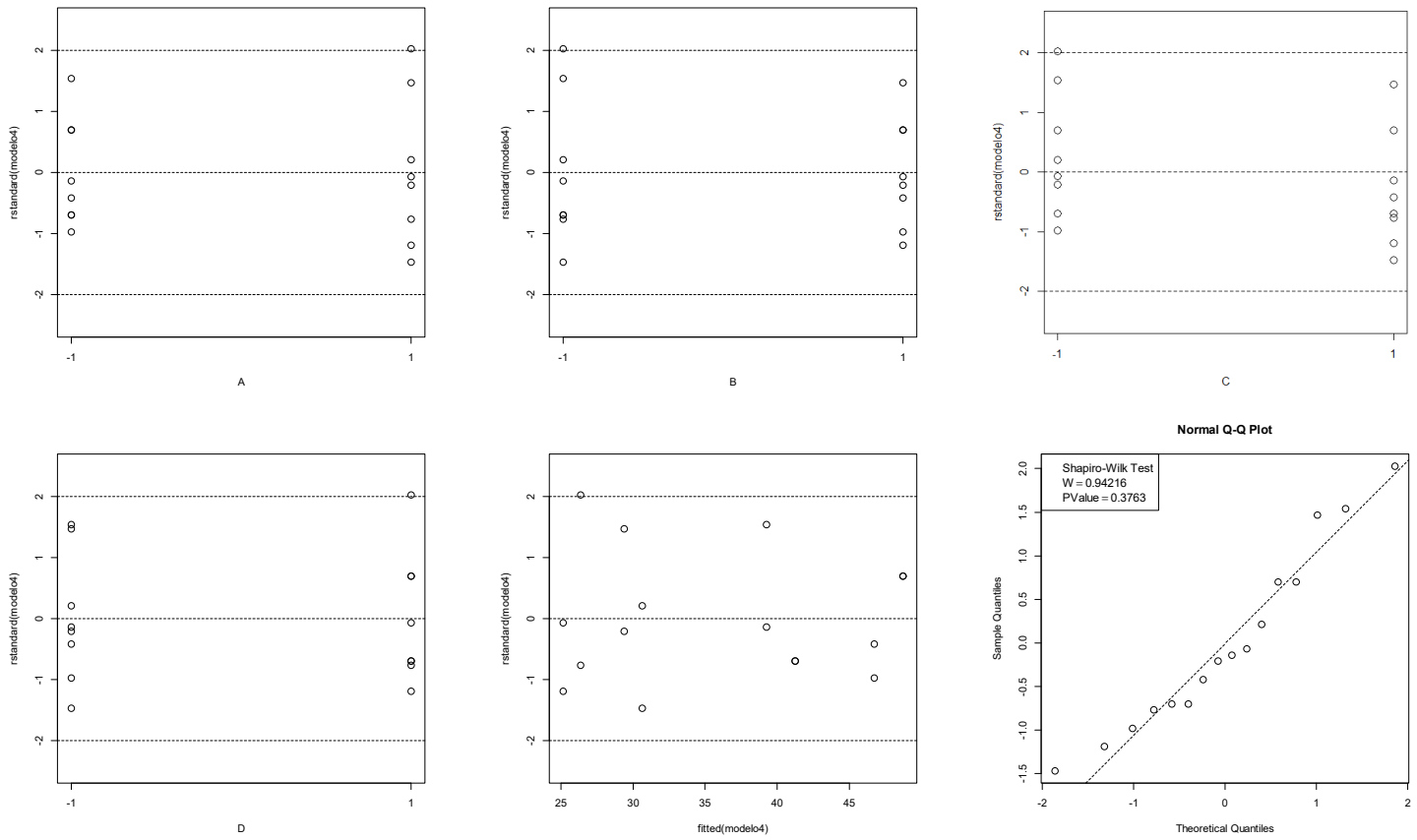


Figura 9.18. Residuales estandarizados en el modelo predictivo (modelo 4)

Note que: En los gráficos se observa a nivel del factor A algo de varianza no constante pero no es un patrón que indique violación severa del supuesto de varianza constante en los errores del modelo predictivo. Lo que si amerita más atención es el supuesto de normalidad pues hacia el centro de la nube de puntos del gráfico de probabilidad normal se observa un desajuste pues allí quedan las observaciones por debajo de la recta de probabilidad normal aunque tampoco es muy claro una curvatura significativa, así que se asume este supuesto como aproximadamente válido.

Programa R usado en este ejemplo.

```
library(rsm)
library(pid)
library(daewr)
library(FrF2)
#EJERCICIO 12.19, MONTGOMERY, Probabilidad y Estadística Aplicada a la Ingeniería, 1996, pág 749
#A:      tipo de tela
#B:      tipo de tratamiento contra el fuego.
#C:      Condición de lavado (nivel bajo es sin lavar; el nivel alto es después de una lavada)
#D:      Método de prueba
#Y:      Número de pulgadas de tela quemada en una muestra de prueba de tamaño estándar:
#Todos los factores se corren en dos niveles.

MONTGOMERY12.19=data.frame(scan(what=list(Y=0,A=0,B=0,C=0,D=0)))
42 -1 -1 -1 -1
31 1 -1 -1 -1
45 -1 1 -1 -1
29 1 1 -1 -1
39 -1 -1 1 -1
28 1 -1 1 -1
46 -1 1 1 -1
32 1 1 1 -1
```

```
40 -1 -1 -1 1
30 1 -1 -1 1
50 -1 1 -1 1
25 1 1 -1 1
40 -1 -1 1 1
25 1 -1 1 1
50 -1 1 1 1
23 1 1 1 1

MONTGOMERY12.19
attach(MONTGOMERY12.19)

#MODELO DE REGRESIÓN SATURADO (SIN GRADOS DE LIBERTAD EN EL MSE)
modelo1=lm(Y~A*B*C*D)
summary(modelo1)

#PARETO DE MAGNITUDES DE EFECTOS
paretoPlot(modelo1,negative=c("Negativo","orange"),positive=c("Positivo","blue"))

#GRÁFICO DE DANIEL CON 0.1 DE SIGNIFICANCIA
win.graph()
halfnormal(modelo1,code=T,alpha=0.1,linelwd=2,linecol=2,pch.set = c(19, 16, 8))

#INTERACCIONES DOBLES
win.graph()
interaction.plot(A,B,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topright",legend=c("B=-1","B=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(A,C,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topright",legend=c("C=-1","C=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(A,D,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topright",legend=c("D=-1","D=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(B,C,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("C=-1","C=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(B,D,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("topleft",legend=c("D=-1","D=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

win.graph()
interaction.plot(C,D,Y,type="b",pch=c(1,2),col=c("black","red"),lwd=4,cex=2,cex.lab=1.5,legend=F)
legend("bottomleft",legend=c("D=-1","D=+1"),col=1:2,pch=1:2,lwd=2,lty=c(2,1),bty="n",cex=2)

modelo2=lm(Y~A*B+A*C+A*D+B*C+B*D+C*D)
summary(modelo2)
anova(modelo2)

modelo3=lm(Y~A*B+A*D+B*C+C*D)
summary(modelo3)
anova(modelo3)

modelo4=lm(Y~A*B+A*D)
summary(modelo4)
anova(modelo4)

#VALIDACIÓN DE SUPUESTOS USANDO RESIDUOS ESTUDENTIZADOS DEL MODELO4
shapiro.test(rstandard(modelo4))
#OBTENIENDO GRÁFICOS DE RESIDUOS ESTUDENTIZADOS,
win.graph()
stripchart(rstandard(modelo4)~A,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="A")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
win.graph()
stripchart(rstandard(modelo4)~B,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="B")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
win.graph()
stripchart(rstandard(modelo4)~C,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="C")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
win.graph()
stripchart(rstandard(modelo4)~D,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="D")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
win.graph()
plot(fitted(modelo4),rstandard(modelo4),ylim=c(-2.5,2.5),cex=1.5)
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
win.graph()
qqnorm(rstandard(modelo4),cex=1.5)
qqline(rstandard(modelo4),lty=2)
legend("topleft",legend=c("Shapiro-Wilk Test",expression(W==0.94216),expression(PValue==0.3763)),cex=1.1)

detach(MONTGOMERY12.19)
```

9.9 FACTORIALES 2^K EN BLOQUES

Algunas ocasiones no es posible correr todos los tratamientos de un diseño factorial 2^k bajo las mismas condiciones experimentales, es decir, es necesario considerar algún factor de bloqueo. Por ejemplo:

- No es posible correr el experimento completo en el mismo día y se considera que el día puede afectar los resultados del estudio.
- Si incluso el proceso estudiado es sensible a los cambios de turno dentro del mismo día, los turnos debieran considerarse como factor de bloque.
- Cuando un lote de material no alcanza para todas las corridas experimentales y se sospecha que las diferencias entre lotes pueden afectar los resultados, entonces es necesario bloquear por lote.
- Cuando no es posible contar durante todo el experimento con el mismo operador, o el mismo equipo, etc. y si se sospecha que éstos pueden influir en el desempeño del proceso, hay que considerarlos como factores de bloqueo.

Sólo se deben bloquear aquellas fuentes de variación que puedan impactar de modo importante a la respuesta de interés.

La repartición del arreglo factorial en bloques se hace bajo el principio de jerarquía: "son más importantes los efectos principales, luego las interacciones dobles, después las interacciones triples, etc.", por tanto al repartir los tratamientos en bloques se debe buscar afectar lo menos posible el estudio de los efectos principales y de interacciones dobles, prefiriendo perjudicar el estudio de los efectos de interacciones de orden superior. La afectación es mayor si se tienen pocos factores (4 o menos) y sin réplicas, así mismo la afectación es mayor a mayor cantidad de bloques.

Recuerde que: Se asume que no hay interacción de los factores de interés con el factor de bloqueo.

9.9.1. Cuando los bloques son las réplicas

En ese caso en cada bloque se observa cada tratamiento del experimento factorial. En el ANOVA además de las sumas de cuadrados de los efectos principales y de interacción (doble) aparece la suma de cuadrados del factor de bloqueo.

9.9.2. Experimentos factoriales en bloques incompletos

En este caso el diseño factorial 2^k es repartido 2^p bloques, con $p < k$. En tal caso, se sacrifican efectos del factorial, como se mencionó en el principio de jerarquía. Ejemplo. Suponga que se desea correr un factorial 2^3 y que los ocho tratamientos se deben correr en dos días, y sólo cuatro corridas en cada día. Si estamos dispues
tos a sacrificar la triple interacción ABC, un arreglo razonable en este experimento sería:

Bloque 1	Bloque 2
(1)	a
ab	b
ac	c
bc	abc

Considere **h** la contribución al resultado debida a la diferencia entre bloques, en este caso tenemos:

Bloque 1	Bloque 2
(1)	a+h
ab	b+h
ac	c+h
bc	abc+h

Si tratamos de estimar el contraste ABC (usando la matriz de signos del diseño 2^3), tendríamos:

$$\textbf{Contraste}(ABC) = (a+h)+(b+h)+(c+h)+(abc+h)-(1)-ab-ac-bc$$

$$\textbf{Contraste}(ABC) = abc+a+b+c-(1)-ab-ac-bc+4h$$

es decir el efecto de la triple interacción va a quedar confundido con el efecto de bloque. Por el contrario, los efectos principales y de las interacciones dobles pueden ser estimados, por ejemplo:

$$\textbf{Contraste}(A) = (a+h)+ab+ac+(abc+h)-(b+h)-(c+h)-bc-(1)$$

$$\textbf{Contraste}(A) = abc+a+ab+ac-b-c-bc-(1)$$

Para usar dos bloques en un factorial 2^k se utiliza una interacción de orden superior como **el contraste de definición.** Los signos del contraste de tal interacción se usan para dividir los tratamientos entre los dos bloques. Aquellos tratamientos que definen los signos – en el contraste de definición serán para el bloque 1 y los tratamientos que definen los signos + en el contraste de definición serán para el bloque 2. de ahí que en el ejemplo previo resulten los dos bloques dados. Las sumas de los efectos de interacciones superiores se consideran igual al efecto de bloque, por tanto el efecto observado se atribuye al bloque porque es más probable que el bloque sea el que influye, ya que en la mayoría de los casos las interacciones de tres o más factores no son significativas.

En general, para usar un experimento 2^k en 2^p bloques (p < k), se seleccionan p contrastes de definición, de modo que su **producto módulo 2** [1] sea una interacción del más alto orden posible. Los signos de los contrastes de definición definen los tratamientos que componen a cada bloque. Por ejemplo, suponga que se desea ejecutar un 2^4 en 2^2=4 bloques, es decir, se requieren p=2 contrastes de definición. Suponga que se decide usar como contrastes de definición a AB y CD, entonces los cuatro bloques en los cuales se dividirán los 16 tratamientos pueden definirse así:

Bloque 1: Los tratamientos para los cuales en la matriz de signos AB=+1 y CD=+1
Bloque 2: Los tratamientos para los cuales en la matriz de signos AB=-1 y CD=+1
Bloque 3: Los tratamientos para los cuales en la matriz de signos AB=+1 y CD=-1
Bloque 4: Los tratamientos para los cuales en la matriz de signos AB=-1 y CD=-1

Vea a continuación la matriz de signos del 2^4 y las columnas de signos que corresponden a los contrastes asociados a AB y CD. Las filas resaltadas en amarillo indican los tratamientos para el bloque 1, las filas

[1] La multiplicación módulo 2 de dos efectos significa que las letras repetidas o comunes en los efectos se eliminan y prevalecen en el resultado las no repetidas, por ejemplo (AB)(AC)=BC, (ACDE)(BC)=ABDE

resaltadas en verde indican los tratamientos para el bloque 2, las filas resaltadas en azul indican los tratamientos en el bloque 3 y las filas restantes son los tratamientos para el bloque 4.

Yates	A	B	C	D	AB	CD
(1)	-1	-1	-1	-1	1	1
a	1	-1	-1	-1	-1	1
b	-1	1	-1	-1	-1	1
ab	1	1	-1	-1	1	1
c	-1	-1	1	-1	1	-1
ac	1	-1	1	-1	-1	-1
bc	-1	1	1	-1	-1	-1
abc	1	1	1	-1	1	-1
d	-1	-1	-1	1	1	-1
ad	1	-1	-1	1	-1	-1
bd	-1	1	-1	1	-1	-1
abd	1	1	-1	1	1	-1
cd	-1	-1	1	1	1	1
acd	1	-1	1	1	-1	1
bcd	-1	1	1	1	-1	1
abcd	1	1	1	1	1	1

Entonces los bloques quedan de la siguiente manera

Bloque 1	Bloque 2	Bloque 3	Bloque 4
(1)	a	c	ac
ab	b	abc	bc
cd	acd	d	ad
abcd	bcd	abd	bd

Como hay (2^p – 1) grados de libertad para los bloques, tenemos (2^p – 1– p) efectos adicionales confundidos con los bloques. Los efectos asociados a los contrastes de definición así como sus posibles productos módulo 2 estarán confundidos con los bloques, es decir, no se podrán estudiar. Los efectos que adicionalmente se confunden con los bloques corresponden a **las denominadas interacciones generalizadas**. En el ejemplo del 2^4 en 2^2=4 bloques, tomando para los contrastes de definición a AB y CD, se tiene como interacción generalizada a (AB)(CD)=ABCD, efecto que también se confundirá con los bloques, es decir, en el modelo quedan confundidos con los bloques los efectos AB, CD y ABCD, y estos efectos de interacción no podrán ser estimados. Siguiendo la idea de un diseño en bloques, donde cada tratamiento es observado sólo una vez, tendríamos que definir un término de error sacrificando efectos de interacciones que no tengan que ver con los confundidos en los bloques, por ejemplo, En el ANOVA

preliminar para este experimento, las fuentes de variación y sus grados de libertad quedan como se muestra aquí abajo. Note que los efectos AB, CD y ABCD quedan confundidos con los bloques, en tanto que las interacciones ABC, ABD, ACD y BCD se llevan al término de error para tener una estimación aproximada del SSE, dado que sólo hay una réplica por tratamiento.

Fuente	g.l
A	1
B	1
C	1
D	1
AC	1
AD	1
BC	1
BD	1
Bloques (AB+CD+ABCD)	3
Error (ABC+ABD+ACD+BCD)	4
Total	15

El anterior ejemplo donde se eligen dos efectos de interacciones dobles para definir los bloques no es siempre una buena elección a menos que se tenga información a priori de que esas interacciones no son importantes en términos prácticos. En la figura 9.19 se proveen algunos contrastes de definición apropiados para construir 2^p bloques en un factorial completo 2^k, para algunos valores de k. Algunos softwares estadísticos pueden generar los bloques deseados para cualquier factorial completo o fraccionado.

Número de factores (k)	Número de bloques (2^b)	Tamaño de bloque (2^{k-b})	Efectos generadores	Efectos confundidos con bloques
3	2	4	*ABC*	*ABC*
4	2	8	*ABCD*	*ABCD*
4	4	4	*ABC, ACD*	*ABC, ACD, BD*
5	2	16	*ABCDE*	*ABCDE*
5	4	8	*ABC, CDE*	*ABC, CDE, ABDE*
5	8	4	*ABE, BCE, CDE*	*ABE, BCE, CDE, AC ABCD, BD, ADE*
6	2	32	*ABCDEF*	*ABCDEF*
6	4	16	*ABCF, CDEF*	*ABCF, CDEF, ABDE*
6	8	8	*ABEF, ABCD, ACE*	*ABEF, ABCD, ACE, CDEF, BCF, BDE, ADF*

Figura 9.19: Efectos adecuados para generar bloques incompletos en factorial 2^k (Tomado de [1])

Suponga que el experimento del ejercicio 12-19 del texto Montgomery, D.C. Probabilidad y Estadística Aplicada a la Ingeniería, 1996, pág 749, hubiese sido realizado como un 2^4 en dos bloques (o sea p=1) usando como contraste de definición el correspondiente a ABCD, de modo que en cada bloque se corrieron 8 tratamientos sin replicación.

En primer lugar veamos de cuáles tratamientos se conforman los dos bloques. Definimos los dos bloques con base en los signos para el contraste en ABCD, así
Bloque 1: Los tratamientos para los cuales ABCD=+1
Bloque 2: Los tratamientos para los cuales ABCD=-1

Yates	A	B	C	D	ABCD
(1)	-1	-1	-1	-1	**1**
a	1	-1	-1	-1	**-1**
b	-1	1	-1	-1	**-1**
ab	1	1	-1	-1	**1**
c	-1	-1	1	-1	**-1**
ac	1	-1	1	-1	**1**
bc	-1	1	1	-1	**1**
abc	1	1	1	-1	**-1**
d	-1	-1	-1	1	**-1**
ad	1	-1	-1	1	**1**
bd	-1	1	-1	1	**1**
abd	1	1	-1	1	**-1**
cd	-1	-1	1	1	**1**
acd	1	-1	1	1	**-1**
bcd	-1	1	1	1	**-1**
abcd	1	1	1	1	**1**

En la anterior tabla se han resaltado los tratamientos que cumplen la condición para entrar al bloque 1; el resto serán para el bloque 2, luego

Bloque 1	Bloque 2
(1)	a
ab	b
ac	c
bc	abc
ad	d
bd	abd
cd	acd
abcd	bcd

Así que debemos crear un factor de bloqueo con niveles 1 y 2, e indicar en cada observación por tratamiento a cuál bloque corresponde, y ajustar el modelo de regresión,

$$\boldsymbol{MODELO\ 1}:$$

$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,3} X_1 * X_3 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + \beta_{2,3} X_2 * X_3 + \beta_{2,4} X_2 * X_4 + \beta_{3,4} X_3 * X_4 + \beta_{1,2,3} X_1 * X_2 * X_3 + \beta_{1,2,4} X_1 * X_2 * X_4 + \beta_{1,3,4} X_1 * X_3 * X_4 + \beta_{2,3,4} X_2 * X_3 * X_4 + \delta I_2 + E, \qquad E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

Note que en este modelo se ha eliminado el término $\boldsymbol{\beta_{1,2,3,4} X_1 * X_2 * X_3 * X_4}$ mientras que se ha ingresado a $\boldsymbol{\delta I_2}$ donde $\boldsymbol{I_2}$ corresponde a una variable indicadora que toma el valor de 1 si la observación proviene de un tratamiento en el bloque 2 y 0 cuando la observación proviene de un tratamiento observado en el bloque 1. De esta forma la tabla de datos sería

Código Yates	Bloque	Y
(1)	1	42
a	2	31
b	2	45
ab	1	29
c	2	39
ac	1	28
bc	1	46
abc	2	32
d	2	40
ad	1	30
bd	1	50
abd	2	25
cd	1	40
acd	2	25
bcd	2	50
abcd	1	23
	Promedio	35.9375

En el modelo 1 de nuevo no se tienen grados de libertad para el MSE del modelo. La estimación del modelo saturado da la siguiente estimación en los coeficientes de regresión:

```
> modelo1=lm(Y~A*B*C+A*B*D+A*C*D+B*C*D+bloques)
> summary(modelo1)
Call: lm.default(formula = Y ~ A * B * C + A * B * D + A * C * D + B * C * D + bloques)
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  36.0000         NA      NA       NA
A            -8.0625         NA      NA       NA
B             1.5625         NA      NA       NA
C            -0.5625         NA      NA       NA
D            -0.5625         NA      NA       NA
bloques2     -0.1250         NA      NA       NA
A:B          -2.1875         NA      NA       NA
A:C          -0.3125         NA      NA       NA
B:C           0.8125         NA      NA       NA
A:D          -1.5625         NA      NA       NA
B:D           0.0625         NA      NA       NA
C:D          -0.3125         NA      NA       NA
A:B:C         0.3125         NA      NA       NA
A:B:D        -1.1875         NA      NA       NA
A:C:D        -0.5625         NA      NA       NA
B:C:D        -0.4375         NA      NA       NA
Residual standard error: NaN on 0 degrees of freedom
Multiple R-squared:      1,     Adjusted R-squared:    NaN
F-statistic:   NaN on 15 and 0 DF,  p-value: NA
```

A continuación se analizan el gráfico Pareto de efectos absolutos y el half normal plot pero considerando en ambos casos únicamente los coeficientes estimados que no tengan que ver con el intercepto ni con los bloques

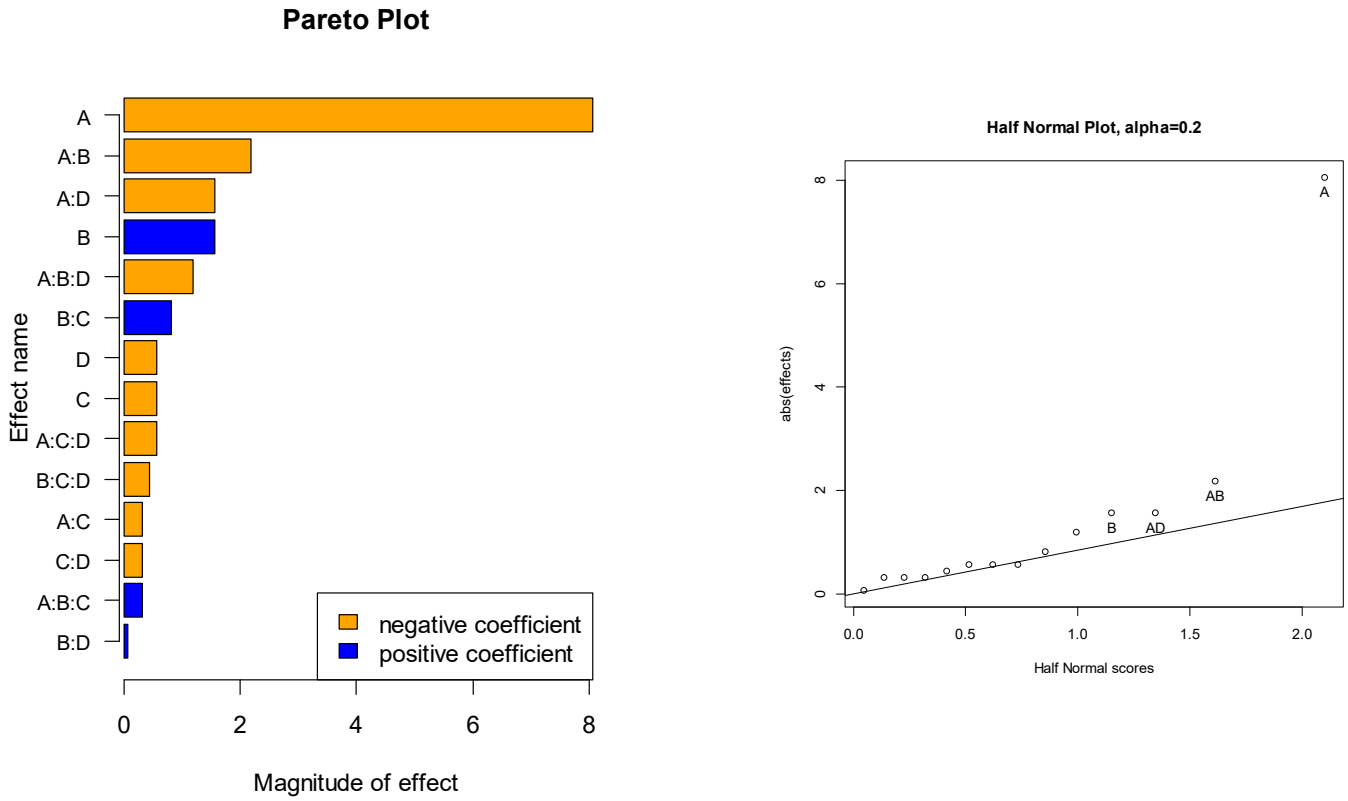


Figura 9.20. Gráfico Pareto de efectos estimados (valor absoluto) y de probabilidad medio normal

Del gráfico Pareto de efectos y del "half normal plot" con una significancia de 0.20 presentados en la Figura 9.20, se tienen como efectos importantes a A, AB, AD y B, pero dado que D participa en la interacción AD, entonces también debe mantenerse su efecto principal en el modelo, así que en el modelo 2 se tendrán en cuenta A, B, D, AB, AD y los bloques:

$$\boldsymbol{MODELO\ 2}:$$
$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + \delta I_2 + E,}$$
$$\boldsymbol{E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

Los resultados del ajuste de este modelo son los siguientes

```
> modelo2=lm(Y~A*B+A*D+bloques)
> summary(modelo2)
Call: lm.default(formula = Y ~ A * B + A * D + bloques)
Coefficients:
(Intercept)  36.0000     0.8421  42.748 1.05e-11 ***
A            -8.0625     0.5955 -13.539 2.74e-07 ***
B             1.5625     0.5955   2.624  0.02763 *
D            -0.5625     0.5955  -0.945  0.36952
bloques2     -0.1250     1.1910  -0.105  0.91871
A:B          -2.1875     0.5955  -3.673  0.00513 **
A:D          -1.5625     0.5955  -2.624  0.02763 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.382 on 9 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9592,    Adjusted R-squared:  0.932
F-statistic: 35.25 on 6 and 9 DF,  p-value: 9.368e-06
```

```
> anova(modelo2)
Analysis of Variance Table
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq  F value    Pr(>F)
A          1 1040.06 1040.06 183.3158 2.737e-07 ***
B          1   39.06   39.06   6.8849  0.027633 *
D          1    5.06    5.06   0.8923  0.369525
bloques    1    0.06    0.06   0.0110  0.918712
A:B        1   76.56   76.56  13.4945  0.005127 **
A:D        1   39.06   39.06   6.8849  0.027633 *
Residuals  9   51.06    5.67
---
```

El ajuste del modelo predictivo (el modelo 2) corresponde a

$$\boldsymbol{\widehat{Y} = 36.000 - 8.0625 X_1 + 1.5625 X_2 - 0.5625 X_4 - 2.1875 X_1 * X_2 - 1.5625 X_1 * X_4 - 0.125 I_2}$$

Note que si se realiza el seudo test F sobre los efectos de los bloques o el test t para el parámetro δ tendríamos que concluir que el diseño en bloques no fue eficiente y que restó innecesariamente grados de libertad al error!

A continuación se presentan los residuos estudentizados y el gráfico de probabilidad normal de este modelo ¿qué se concluye sobre el supuesto de varianza constante y normalidad para los errores?

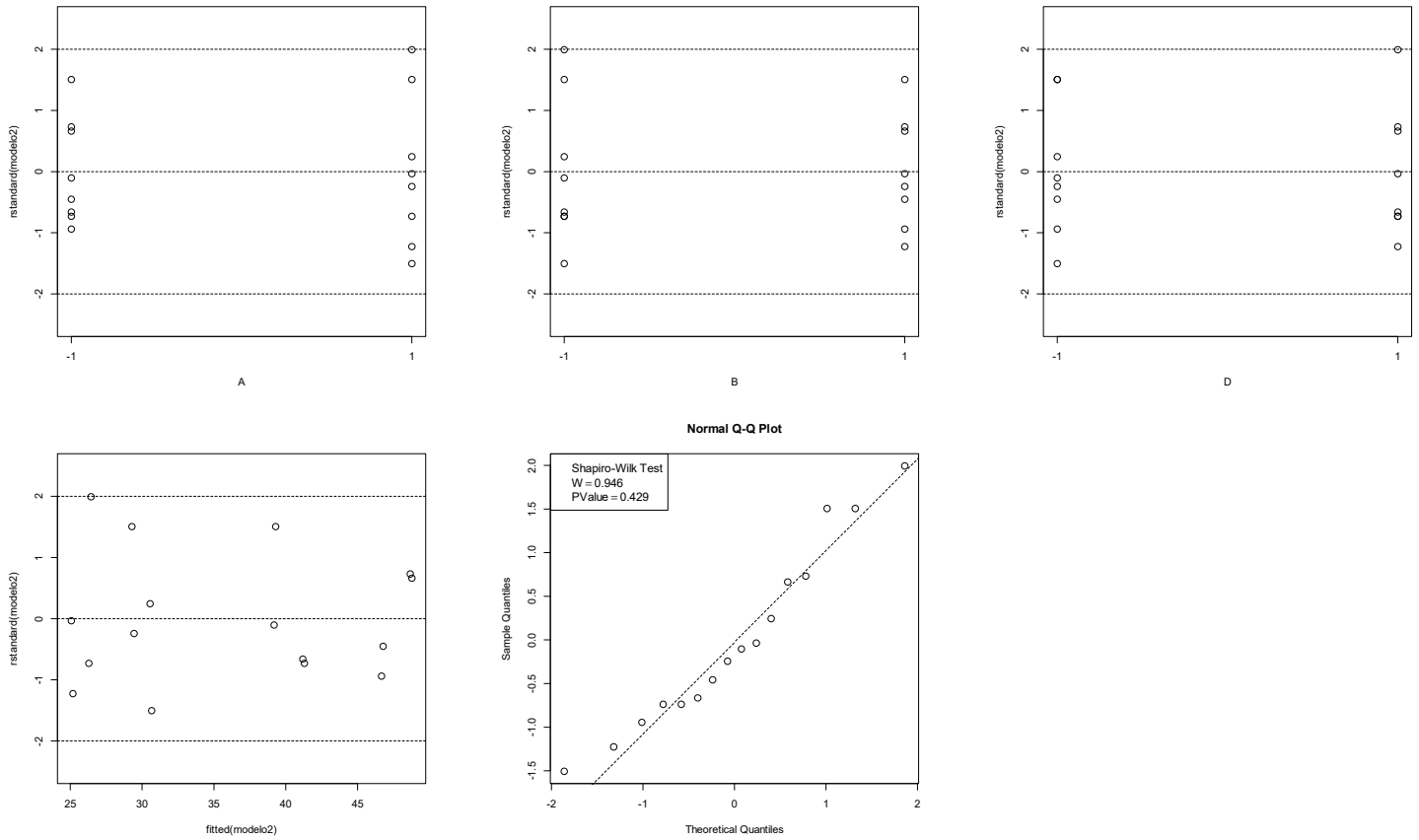


Figura 9.21. Gráficos de residuos estudentizados y de probabilidad normal

Programa R usado

```
library(rsm);library(pid);library(daewr);library(FrF2)

#EJERCICIO 12.19, MONTGOMERY, Probabilidad y Estadística Aplicada a la Ingeniería, 1996, pág 749
#A:     tipo de tela
#B:     tipo de tratamiento contra el fuego.
#C:     Condición de lavado (nivel bajo es sin lavar; el nivel alto es después de una lavada)
#D:     Método de prueba
#Y:     Número de pulgadas de tela quemada en una muestra de prueba de tamaño estándar:
#Todos los factores se corren en dos niveles.
MONTGOMERY12.19=data.frame(scan(what=list(Y=0,A=0,B=0,C=0,D=0)))
42 -1 -1 -1 -1
31 1 -1 -1 -1
45 -1 1 -1 -1
29 1 1 -1 -1
39 -1 -1 1 -1
28 1 -1 1 -1
46 -1 1 1 -1
32 1 1 1 -1
40 -1 -1 -1 1
30 1 -1 -1 1
50 -1 1 -1 1
25 1 1 -1 1
40 -1 -1 1 1
25 1 -1 1 1
50 -1 1 1 1
23 1 1 1 1
```

```
MONTGOMERY12.19

attach(MONTGOMERY12.19)

contrasteABCD=A*B*C*D #Contraste para la definición de los dos bloques
bloques=factor(ifelse(contrasteABCD==1,1,2))
bloques

modelo1=lm(Y~A*B*C+A*B*D+A*C*D+B*C*D+bloques)
summary(modelo1)

efectos=coef(modelo1)[-c(1,6)] #eliminando del vector de estimaciones a los bloques y al intercepto
efectos                        #compruebe previamente dentro de coef(modelo1) la posición que ocupan
                               #los estimadores eliminados

efectosabs=abs(efectos)[order(abs(efectos),decreasing=F)] #efectos absolutos ordenados de menor a mayor
color=ifelse(efectos[order(abs(efectos),decreasing=F)]<0,"orange","blue") #colores para identificar efectos
negativos y positivos

win.graph(height=6,width=4.5)
barplot(efectosabs,horiz=T,axis.lty=1,cex.names=0.8,col=color,las=1,space=0.2,xlab="Magnitude of
effect",main="Pareto Plot",ylab="Effect name") #pareto sólo de efectos que no son bloques
legend("bottomright",legend=c("negative coefficient","positive coefficient"),fill=c("orange","blue"))

win.graph()
halfnorm(efectos,names(efectos),alpha=0.2) # half normal plot sólo para efectos de factores
                                           # de tratamientos
title(main="Half Normal Plot, alpha=0.2")

modelo2=lm(Y~A*B+A*D+bloques)
summary(modelo2)
anova(modelo2)

#Validación de supuestos usando residuos estudentizados del modelo2 de regresión
shapiro.test(rstandard(modelo2))
#OBTENIENDO GRÁFICOS DE RESIDUOS ESTUDENTIZADOS,
win.graph()
stripchart(rstandard(modelo2)~A,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="A")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)

win.graph()
stripchart(rstandard(modelo2)~B,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="B")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)

win.graph()
stripchart(rstandard(modelo2)~D,vertical=TRUE,ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="D")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)

win.graph()
plot(fitted(modelo2),rstandard(modelo2),ylim=c(-2.5,2.5),cex=1.5)
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)

win.graph()
qqnorm(rstandard(modelo2),cex=1.5)
qqline(rstandard(modelo2),lty=2)
legend("topleft",legend=c("Shapiro-Wilk Test",expression(W==0.946),expression(PValue==0.429)),cex=1.1)

detach(MONTGOMERY12.19)
```

9.10 FACTORIALES 2^K CON PUNTO AL CENTRO

En los diseños 2^k se asume que los efectos de los factores cuantitativos son lineales y aun cuando la linealidad no es perfecta, los diseños 2^k suelen desempeñarse bien. Sin embargo, es posible probar el supuesto de linealidad cuando en un diseño factorial 2^k los k factores son cuantitativos y admiten un nivel intermedio. En este caso, es recomendable formar un tratamiento adicional mediante la combinación del nivel intermedio de todos los factores, que codificaremos con cero (0). A tal tratamiento se le conoce como **punto central**. Es deseable correr tal tratamiento con réplicas por las siguientes razones:

1. Para obtener grados de libertad adicionales para el error sin perjudicar la estimación de los efectos de interés, en especial cuando por razones económicas se corre un experimento sin réplicas suficientes.
2. Cuando los factores son cuantitativos, las repeticiones al centro permiten detectar la presencia de curvatura en al menos uno de los factores estudiados. Esta curvatura son los efectos cuadráticos A^2, B^2, etc. Una vez se detecta curvatura el experimento se aumenta[2] con más puntos experimentales para poder estudiarla en detalle. *No es conveniente utilizar de entrada un experimento que estudie la curvatura, ya que de no existir ésta se estaría desperdiciando recursos.*

Para detectar la presencia de curvatura, después de llegar al **mejor ANOVA**, el error de éste se puede partir en tres componentes:

1. **Componente de error puro, $SSE_{(puro)}$:** El cual se obtiene de las replicaciones en el centro y en los puntos factoriales (aquello donde hay replicaciones).
2. **Componente de curvatura o $SS_{\text{cuadrático puro}}$**
3. **Componente de carencia de ajuste:** Es igual al SSE del ANOVA menos la suma del $SSE_{(puro)}$ y $SS_{\text{cuadrático puro.}}$

En particular, considere un diseño factorial 2^k con 1 réplica en cada punto factorial y n_c réplicas en el punto central del diseño. Sean n_f el número de puntos factoriales en el diseño, $\bar{Y}_f$ el promedio de las observaciones en los n_f puntos factoriales y $\bar{Y}_c$ el promedio de las n_c réplicas en el punto central. Si la diferencia $\bar{Y}_f - \bar{Y}_c$ es pequeña, entonces los puntos en el centro del diseño yacen sobre o muy cerca al plano que pasa a través de los puntos factoriales y no hay curvatura. De lo contrario si tal diferencia es grande, entonces hay presencia de curvatura cuadrática. Una **suma de cuadrados para curvatura cuadrática pura** de un solo grado de libertad, está dada por

$$SS_{\text{cuadrático puro}} = \frac{n_f n_c \left(\bar{Y}_f - \bar{Y}_c\right)^2}{n_f + n_c} \quad \textbf{(ec. 14)}$$

Esta cantidad puede ser comparada al MSE_{puro} en el ANOVA para probar curvatura cuadrática.

[2] Los detalles de cómo aumentar el experimento se estudiará en la metodología de optimización de procesos con superficies de respuesta, específicamente en el diseño central compuesto.

Si los puntos factoriales no son replicados, uno puede usar los puntos del centro para construir una estimación del error con $\boldsymbol{n_c} - 1$ grados de libertad, en ese caso, para probar la significancia de la suma de cuadrados en (ec. 14) calcularíamos,

$$\boldsymbol{F_{cuad}} = \frac{\boldsymbol{SS}_{\textbf{cuadrático puro}}}{\boldsymbol{MSE}_{\textbf{puro}}} \sim \boldsymbol{f}_{1,\boldsymbol{n_c}-1},$$

$$\boldsymbol{MSE}_{\textbf{puro}} = \frac{\sum_{\textbf{puntos del centro}} \left(\boldsymbol{Y_i} - \overline{\boldsymbol{Y}}_{\boldsymbol{c}}\right)^2}{\boldsymbol{n_c} - 1}$$

El test de hipótesis asociado es $H_0: \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} = 0$ vs. $H_1: \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} \neq 0$, donde β_{jj} representan los coeficientes de regresión para los términos cuadráticos en el modelo de regresión. Sin embargo, cuando sólo se cuenta con una réplica por tratamiento, no es posible incluir los k efectos cuadráticos (uno por factor), sino uno sólo de ellos (no importa en qué factor) y su estimador en la regresión corresponderá a la diferencia $\overline{Y}_f - \overline{Y}_c$, mientras que el estadístico T_0 para probar su significancia nos permite también probar la carencia de ajuste o sea la significancia de curvatura cuadrática. Veamos con un ejemplo.

En el ejemplo 6.7 del libro de Montgomery, D. C. (2013). Design and Analysis of Experiments. 8th ed. Se plantea el siguiente experimento: Un producto químico es producido en un recipiente a presión. Se realiza un experimento factorial en la planta piloto para estudiar los factores que se cree influencian la tasa de filtración de este producto. Se consideran los siguientes 4 factores:
A: Temperatura
B: Presión
C: Concentración de formaldehido
D: Tasa de agitación.

Cada factor es fijado en dos niveles (bajo y alto) y los 16 tratamientos son observados una sola vez (una réplica por tratamiento). Posteriormente, se adicionan cuatro puntos centrales a este experimento, es decir, se replica cuatro veces el tratamiento con los cuatro factores fijos en un nivel intermedio. El total de observaciones para el experimento se presenta a continuación (los niveles alto y bajo son codificados como -1 y +1, mientras que el nivel central es codificado como 0):

Código Yates	Y	A	B	C	D
(1)	45	-1	-1	-1	-1
a	71	1	-1	-1	-1
b	48	-1	1	-1	-1
ab	65	1	1	-1	-1
c	68	-1	-1	1	-1
ac	60	1	-1	1	-1
bc	80	-1	1	1	-1
abc	65	1	1	1	-1
d	43	-1	-1	-1	1
ad	100	1	-1	-1	1
bd	45	-1	1	-1	1
abd	104	1	1	-1	1
cd	75	-1	-1	1	1
acd	86	1	-1	1	1
bcd	70	-1	1	1	1
abcd	96	1	1	1	1
Promedio puntos factoriales con $n_f = 16$	$\bar{Y}_f = 70.0625$				
	Y	A	B	C	D
Puntos centrales	73	0	0	0	0
	75	0	0	0	0
	66	0	0	0	0
	69	0	0	0	0
Promedio puntos centrales, con $n_c = 4$	$\bar{Y}_c = 70.750$				
Promedio de las 20 observaciones	$\bar{Y} = 70.200$				

De acuerdo a estos resultados, se tiene que

$$SS_{cuad.puro} = \frac{n_f n_c \left(\bar{Y}_f - \bar{Y}_c\right)^2}{n_f + n_c} = \frac{16 \times 4 \times (70.0625 - 70.75000)^2}{16 + 4} = \frac{64 \times (-0.6875)^2}{20} = 1.5125$$

$$MSE_{\text{puro}} = \frac{\sum_{\text{puntos del centro}} \left(Y_i - \bar{Y}_c\right)^2}{n_c - 1} = 16.25$$ (esta es la varianza muestral para los puntos al centro)

Entonces el estadístico de prueba es $F_{\text{cuad.puro}} = \frac{SS_{\text{cuad.puro}}}{MSE_{\text{puro}}} \sim f_{1,n_c-1} = f_{1,3}$, $F_{\text{cuad.puro}} = 0.0931$

$$VP = P\left(f_{1,3} > F_{\text{cuad.puro}}\right) = 0.780243$$

Luego, no hay evidencia de curvatura de segundo orden. En R se puede realizar este test corriendo los siguientes dos modelos:

$$\boldsymbol{MODELO\ 1}:$$

$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,3} X_1 * X_3 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + \beta_{2,3} X_2 * X_3 + \beta_{2,4} X_2 * X_4 + \beta_{3,4} X_3 * X_4 + \beta_{1,2,3} X_1 * X_2 * X_3 + \beta_{1,2,4} X_1 * X_2 * X_4 + \beta_{1,3,4} X_1 * X_3 * X_4 + \beta_{2,3,4} X_2 * X_3 * X_4 + \beta_{1,2,3,4} X_1 * X_2 * X_3 * X_4 + E,}$$

$$\boldsymbol{E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

$$\boldsymbol{MODELO\ 2}:$$

$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,2} X_1 * X_2 + \beta_{1,3} X_1 * X_3 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + \beta_{2,3} X_2 * X_3 + \beta_{2,4} X_2 * X_4 + \beta_{3,4} X_3 * X_4 + \beta_{1,2,3} X_1 * X_2 * X_3 + \beta_{1,2,4} X_1 * X_2 * X_4 + \beta_{1,3,4} X_1 * X_3 * X_4 + \beta_{2,3,4} X_2 * X_3 * X_4 + \beta_{1,2,3,4} X_1 * X_2 * X_3 * X_4 + \beta_{1,1} X_1^2 + E, \qquad E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

Note que el modelo 2 se diferencia del modelo 1 en el término cuadrático para la variable $\boldsymbol{X_1}$.

Probar la significancia de curvatura cuadrática es simplemente probar la significancia del parámetro $\boldsymbol{\beta_{1,1}}$,

```
> summary(modelo1)
Call: lm.default(formula = Y ~ A * B * C * D)
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  70.2000     0.7926  88.565 9.74e-08 ***
A            10.8125     0.8862  12.201 0.000259 ***
B             1.5625     0.8862   1.763 0.152656
C             4.9375     0.8862   5.572 0.005085 **
D             7.3125     0.8862   8.252 0.001177 **
A:B           0.0625     0.8862   0.071 0.947160
A:C          -9.0625     0.8862 -10.226 0.000515 ***
B:C           1.1875     0.8862   1.340 0.251305
A:D           8.3125     0.8862   9.380 0.000720 ***
B:D          -0.1875     0.8862  -0.212 0.842780
C:D          -0.5625     0.8862  -0.635 0.560094
A:B:C         0.9375     0.8862   1.058 0.349762
A:B:D         2.0625     0.8862   2.327 0.080485 .
A:C:D        -0.8125     0.8862  -0.917 0.411105
B:C:D        -1.3125     0.8862  -1.481 0.212713
A:B:C:D       0.6875     0.8862   0.776 0.481190
---
Residual standard error: 3.545 on 4 degrees of freedom
Multiple R-squared:   0.9913,      Adjusted R-squared:
0.9587
F-statistic: 30.41 on 15 and 4 DF,  p-value: 0.00232

> anova(modelo1)
Analysis of Variance Table
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq  F value    Pr(>F)
A          1 1870.56 1870.56 148.8635 0.0002590 ***
B          1   39.06   39.06   3.1087 0.1526555
C          1  390.06  390.06  31.0420 0.0050851 **
D          1  855.56  855.56  68.0875 0.0011766 **
A:B        1    0.06    0.06   0.0050 0.9471604
A:C        1 1314.06 1314.06 104.5760 0.0005153 ***
B:C        1   22.56   22.56   1.7956 0.2513048
A:D        1 1105.56 1105.56  87.9831 0.0007197 ***
B:D        1    0.56    0.56   0.0448 0.8427797
C:D        1    5.06    5.06   0.4029 0.5600937
A:B:C      1   14.06   14.06   1.1191 0.3497621
A:B:D      1   68.06   68.06   5.4166 0.0804854 .
A:C:D      1   10.56   10.56   0.8406 0.4111053
B:C:D      1   27.56   27.56   2.1935 0.2127126
A:B:C:D    1    7.56    7.56   0.6018 0.4811900
Residuals  4   50.26   12.57
```

```
> summary(modelo2) Call:
Call: lm.default(formula = Y ~ A * B * C * D + I(A^2))
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  70.7500     2.0156  35.102 5.08e-05 ***
A            10.8125     1.0078  10.729  0.00173 **
B             1.5625     1.0078   1.550  0.21882
C             4.9375     1.0078   4.899  0.01627 *
D             7.3125     1.0078   7.256  0.00540 **
I(A^2)       -0.6875     2.2535  -0.305  0.78024
A:B           0.0625     1.0078   0.062  0.95445
A:C          -9.0625     1.0078  -8.993  0.00290 **
B:C           1.1875     1.0078   1.178  0.32362
A:D           8.3125     1.0078   8.248  0.00373 **
B:D          -0.1875     1.0078  -0.186  0.86427
C:D          -0.5625     1.0078  -0.558  0.61569
A:B:C         0.9375     1.0078   0.930  0.42086
A:B:D         2.0625     1.0078   2.047  0.13320
A:C:D        -0.8125     1.0078  -0.806  0.47910
B:C:D        -1.3125     1.0078  -1.302  0.28376
A:B:C:D       0.6875     1.0078   0.682  0.54407
---
Residual standard error: 4.031 on 3 degrees of freedom
Multiple R-squared:   0.9916,      Adjusted R-squared:
0.9466
F-statistic: 22.05 on 16 and 3 DF,  p-value: 0.01331

> anova(modelo2)
Analysis of Variance Table
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq  F value   Pr(>F)
A          1 1870.56 1870.56 115.1115 0.001731 **
B          1   39.06   39.06   2.4038 0.218821
C          1  390.06  390.06  24.0038 0.016273 *
D          1  855.56  855.56  52.6500 0.005401 **
I(A^2)     1    1.51    1.51   0.0931 0.780243
A:B        1    0.06    0.06   0.0038 0.954450
A:C        1 1314.06 1314.06  80.8654 0.002903 **
B:C        1   22.56   22.56   1.3885 0.323620
A:D        1 1105.56 1105.56  68.0346 0.003731 **
B:D        1    0.56    0.56   0.0346 0.864273
C:D        1    5.06    5.06   0.3115 0.615686
A:B:C      1   14.06   14.06   0.8654 0.420856
A:B:D      1   68.06   68.06   4.1885 0.133202
A:C:D      1   10.56   10.56   0.6500 0.479099
B:C:D      1   27.56   27.56   1.6962 0.283757
A:B:C:D    1    7.56    7.56   0.4654 0.544069
Residuals  3   48.75   16.25
```

Observe con cuidado en los resultados anteriores los resaltados y compare con los cálculos manuales que previamente se presentaron en el test de curvatura cuadrática. Note también que la estimación del intercepto en el modelo 1 es igual a 70.200 que corresponde al promedio muestral de todas las observaciones incluyendo los 4 puntos centrales, mientras que la estimación del intercepto en el modelo 2 es igual a 70.750 que corresponde al promedio de los cuatro puntos centrales!, la estimación del parámetro $\boldsymbol{\beta_{1,1}}$ en el modelo 2, igual a -0.6875, no es más que la diferencia $\overline{\boldsymbol{Y}}_{\boldsymbol{f}} - \overline{\boldsymbol{Y}}_{\boldsymbol{c}}$ y la suma de cuadrados asociados a este término cuadrático en el ANOVA del modelo 2, es el $\boldsymbol{SS_{cuad.puro}}$

Si comparamos el SSE=50.26 del modelo 1 con el SSE=48.75 del modelo 2, el cual a su vez es el SSE_{puro}, la diferencia entre estas sumas de cuadrados de error corresponde a la suma de cuadrados de la curvatura:

```
> anova(modelo1,modelo2)
Analysis of Variance Table
Model 1: Y ~ A * B * C * D
Model 2: Y ~ A * B * C * D + I(A^2)
  Res.Df    RSS Df Sum of Sq      F Pr(>F)
1      4 50.263
2      3 48.750  1    1.5125 0.0931 0.7802
```

De lo anterior se tiene que en el modelo 1, su SSE descompone de la siguiente manera:

Fuente	Sum. Cuad	gl	Cuadrados Medios	F	Valor P
Efecto cuadrático	1.513	1	1.513	$\frac{MS_{\text{cuadratico}}}{MSE_{\text{puro}}} = 0.0931$	$P(f_{1,3} > 0.0931) = 0.7802$
Error puro	48.750	3	16.250		
SSE	**50.263**	**4**			

Sin importar si el modelo se reduce eliminando efectos no significativos, el $SSE_{\text{puro}} = 48.75$ y $MSE_{puro} = 16.25$, es decir, se calcula con las réplicas del punto central puesto que es el único tratamiento replicado. Por ejemplo, dejando sólo en el modelo los efectos principales de A, C y D y las interacciones AC y AD, tenemos:

$$\boldsymbol{MODELO\ 1\ reducido}:$$
$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,3} X_1 * X_3 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + E, \qquad E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

$$\boldsymbol{MODELO\ 2\ reducido}:$$
$$\boldsymbol{Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{1,3} X_1 * X_3 + \beta_{1,4} X_1 * X_4 + \beta_{1,1} X_1^2 + E,}$$
$$\boldsymbol{E \sim IID\ N(0, \sigma^2)}$$

Las estimaciones de estos modelos son como sigue

```
> summary(modelo1b)
Call: lm.default(formula = Y ~ A + C + D + A:C + A:D)
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  70.2000     0.9362  74.988  < 2e-16 ***
A            10.8125     1.0467  10.331 6.23e-08 ***
C             4.9375     1.0467   4.717  0.00033 ***
D             7.3125     1.0467   6.987 6.38e-06 ***
A:C          -9.0625     1.0467  -8.659 5.39e-07 ***
A:D           8.3125     1.0467   7.942 1.49e-06 ***
---
Residual standard error: 4.187 on 14 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9576,    Adjusted R-squared:
0.9424 F-statistic: 63.17 on 5 and 14 DF,  p-value:
4.176e-09
```

```
> summary(modelo2b)
Call: lm.default(formula = Y ~ A + C + D + A:C + A:D +
I(A^2))
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  70.7500     2.1656  32.670 7.27e-14 ***
A            10.8125     1.0828   9.986 1.83e-07 ***
C             4.9375     1.0828   4.560 0.000535 ***
D             7.3125     1.0828   6.753 1.36e-05 ***
I(A^2)       -0.6875     2.4212  -0.284 0.780924
A:C          -9.0625     1.0828  -8.369 1.36e-06 ***
A:D           8.3125     1.0828   7.677 3.50e-06 ***
---
Residual standard error: 4.331 on 13 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9578,    Adjusted R-squared:
0.9383 F-statistic:  49.2 on 6 and 13 DF,  p-value:
3.424e-08
```

Las ANOVAs de estos dos modelos se muestran a continuación

```
> anova(modelo1b)
Analysis of Variance Table
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
A          1 1870.56 1870.56 106.721 6.235e-08 ***
C          1  390.06  390.06  22.254 0.0003301 ***
D          1  855.56  855.56  48.812 6.382e-06 ***
A:C        1 1314.06 1314.06  74.971 5.389e-07 ***
A:D        1 1105.56 1105.56  63.075 1.490e-06 ***
Residuals 14  245.39   17.53
```

```
> anova(modelo2b)
Analysis of Variance Table
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
A          1 1870.56 1870.56 99.7122 1.830e-07 ***
C          1  390.06  390.06 20.7927 0.0005354 ***
D          1  855.56  855.56 45.6066 1.356e-05 ***
I(A^2)     1    1.51    1.51  0.0806 0.7809238
A:C        1 1314.06 1314.06 70.0474 1.359e-06 ***
A:D        1 1105.56 1105.56 58.9331 3.502e-06 ***
Residuals 13  243.88   18.76
```

De lo anterior, se concluye que el SSE del modelo 1b descompone de la siguiente manera:

Fuente	Sum. Cuad	gl	Cuadrados Medios	F	Valor P
Carencia de ajuste	195.120	10	19.512	$\frac{MSE_{\text{carencia}}}{MSE_{\text{puro}}} = 1.2001$	$P(f_{10,3} > 1.200) = 0.4942$
Efecto cuadrático	1.513	1	1.513	$\frac{MS_{\text{cuadratico}}}{MSE_{\text{puro}}} = 0.0931$	$P(f_{1,3} > 0.0931) = 0.7802$
Error puro	48.750	3	16.250		
SSE	**245.38**	**14**			

Mientras que el SSE del modelo 2b descompone en

Fuente	Sum. Cuad	gl	Cuadrados Medios	F	Valor P
Carencia de ajuste	195.12	10	19.512	$\frac{MSE_{\text{carencia}}}{MSE_{\text{puro}}} = 1.2001$	$P(f_{10,3} > 1.200) = 0.4942$
Error puro	48.75	3	16.250		
SSE	**243.87**	**13**			

De donde la diferencia entre los SSE del modelo 1 y del modelo 2 es justamente el $SS_{cuadrático}$:

```
> anova(modelo1b,modelo2b)
Analysis of Variance Table
Model 1: Y ~ A + C + D + A:C + A:D
Model 2: Y ~ A + C + D + A:C + A:D + I(A^2)
  Res.Df    RSS Df Sum of Sq      F Pr(>F)
1     14 245.39
2     13 243.88  1    1.5125 0.0806 0.7809
```

Nota: En este último caso no se usa ni el valor F ni valor P del test ANOVA que compara los modelos reducidos, pues es necesario construir el estadístico $F_{cuad.puro}$ dividiendo el $SS_{cuadrático}$ por el MSE_{puro}, como inicialmente se explicó. La suma de cuadrados $SS_{carencia\ de\ ajuste}$ corresponde a la suma de los cuadrados de todos los efectos que fueron eliminados del modelo 1.

Programa R usado

```
library(rsm);library(pid);library(daewr);library(FrF2)
#Montgomery, D. C. (2013). Design and Analysis of Experiments. 8 ed, ejemplo 6.7 con datos del ejemplo 6.2
ejemplo6.7Montgomery=data.frame(scan(what=list(Y=0,A=0,B=0,C=0,D=0)))
45 -1 -1 -1 -1
71 1 -1 -1 -1
48 -1 1 -1 -1
65 1 1 -1 -1
68 -1 -1 1 -1
60 1 -1 1 -1
80 -1 1 1 -1
65 1 1 1 -1
43 -1 -1 -1 1
100 1 -1 -1 1
45 -1 1 -1 1
104 1 1 -1 1
75 -1 -1 1 1
86 1 -1 1 1
70 -1 1 1 1
96 1 1 1 1
73 0 0 0 0
75 0 0 0 0
66 0 0 0 0
69 0 0 0 0

ejemplo6.7Montgomery
attach(ejemplo6.7Montgomery)

modelo1=lm(Y~A*B*C*D) #modelo de regresión con todos los efectos ppales y de interacciones
summary(modelo1);anova(modelo1)

#agregamos a modelo 1 un término cuadrático (en cualquiera de los factores)
modelo2=lm(Y~A*B*C*D+I(A^2))
summary(modelo2) #el coeficiente estimado para término cuadrático en A no es más que la diferencia entre el
                 #promedio de los puntos factoriales y el promedio de las réplicas al centro
anova(modelo2)

#Test de curvatura cuadrática
#también basta probar la significancia del parámetro asociado a término cuadrático en factor A en el modelo 2!
anova(modelo1,modelo2)

#Modelo 1 reducido sólo con efectos significativos
modelo1b=lm(Y~A+C+D+A:C+A:D)
summary(modelo1b);anova(modelo1b)

#Modelo 2 reducido con un efecto cuadrático
modelo2b=lm(Y~A+C+D+A:C+A:D+I(A^2))
summary(modelo2b);anova(modelo2b)

#Comparación modelos 1b y 2b
anova(modelo1b,modelo2b)
detach(ejemplo6.7Montgomery)
```